

Masterarbeit

Thema: Automatisiertes Fitten von Butler-Volmer kinetischen Parametern für die Simulation von elektrochemischen Festoxidzellen (SOCs)

Automatic fitting of Butler-Volmer kinetic parameters for the modelling of electrochemical solid oxide cells (SOCs)

Motivation

Elektrochemische Erzeugung von Energieträgern und chemischen Ausgangsprodukten wie Wasserstoff und Ammoniak, sowie deren Rückwandlung in elektrische Energie sind Schlüsselherausforderungen auf dem Weg zur Dekarbonisierung der chemischen Industrie, dem Mobilitäts- sowie Energiesektors. Festoxidbrennstoff- und Elektrolysezellen haben hierbei gegenüber herkömmlichen Zellentechnologien thermodynamische und kinetische Vorteile, welche zu höheren Effizienzen führen, sind toleranter gegenüber Katalysatorvergiftung und können reversibel betrieben werden (Strom \rightarrow H₂ und H₂ \rightarrow Strom). Um die Gesamtleistung und den Wirkungsgrad von Zellsystemen zu verbessern, werden mehrere Zellen in Reihe geschaltet, um einen sogenannten „Stack“ zu bilden. Bevor solch ein teures Gerät tatsächlich gebaut wird, werden einzelne Zellen in der Form von Knopfzellen mittels elektrochemischer Charakterisierungsmethoden umfassend untersucht (Impedanzspektroskopie, Polarisationsmessungen, Gasanalytik, Elektronenmikroskopie) und anhand der gewonnenen Daten Simulation auf dem Stack-Level durchgeführt. Somit kann die Performance des Stacks im Einzelnen und bei der Einbindung in Anlagen eingeschätzt werden. Für die Simulation der Kinetik wird dabei häufig ein Butler-Volmer Ansatz (1) verwendet dessen kinetische Parameter durch Auswertung der Knopfzell-Messungen gewonnen werden können.

$$i_r = A_r * \exp\left(-\frac{E_{A,r}}{RT}\right) * \prod_j p_j^{n_j} * \left[\exp\left(\frac{\beta_{a,r} F \eta_{act}}{RT}\right) - \exp\left(-\frac{\beta_{c,r} F \eta_{act}}{RT}\right) \right] \quad (1)$$

Aufgabenbeschreibung

In dieser Arbeit soll ein Script entwickelt werden, wodurch die Butler-Volmer Parameter automatisch durch den Vergleich von experimentellen und simulierten Daten ermittelt und optimiert werden können. Hierfür sollen die bereitgestellten Ergebnisse von elektrochemischer Impedanzspektroskopie (Nyquist- und Bode-Plot) und Polarisationsmessungen (i-V-Kurven) verwendet werden. Die Simulationen werden mit der DETCHEM™-SOC software durchgeführt.

Methodik

Das Script soll auf mathematischen Optimierungsalgorithmen basieren, um die best möglichen Butler-Volmer kinetischen Parameter zu finden. Hierbei können verschiedene Optimierungsmethoden

wie Monte-Carlo Minimierung, genetische Algorithmen oder Bayesianische Optimierung in Betracht gezogen werden. Für den Vergleich zwischen experimentellen und simulierten Spektren müssen geeignete Fehlermaße definiert werden und die verschiedenen Arten an Spektren entsprechend gewichtet werden. Desweiteren müssen die Anfangsparameter des Algorithmus angepasst werden. Um sicherzustellen, dass das entwickelte Modell nicht überangepasst ist und seine Anwendbarkeit auf neue Daten gewährleistet ist, werden aus den gegebenen Datensätzen einige Betriebsbedingungen zur Validierung vorenthalten.

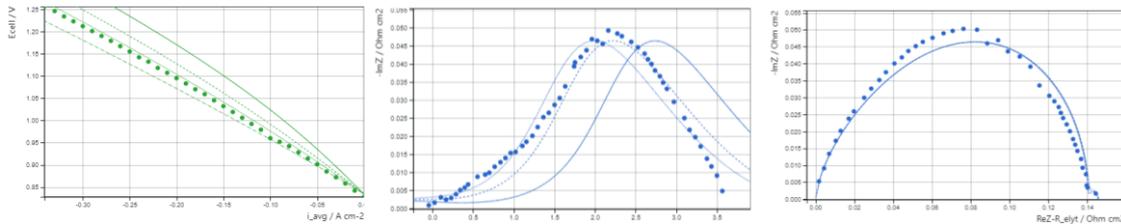


Abbildung 1: Experimentelle (gepunktet) und simulierte (Linien) i-V Kurven, Bode-Plots und Nyquist-Plots.

Die Auswahl der Programmiersprache steht dem Masteranden offen, wobei Python aufgrund seiner einfach nutzbaren Bibliotheken und der weit verbreiteten Anwendung in wissenschaftlichen Bereichen empfohlen wird.

Die Arbeit beinhaltet folgende Arbeitspakete:

- Einarbeitung in die Thematik, Literaturrecherche
- Entwicklung des Optimierungs Algorithmus'
 - Logische Konzeption und Unterteilung des Alorithmus in verschiedene Module
 - Definieren der Schnittstellen (Inputs, Outputs)
 - Test von verschiedenen Optimierungs-Algorithmen
- Analyse und Interpretation der Ergebnisse
- Schriftliche Ausarbeitung und Präsentation der Ergebnisse

Erforderliche Vorkenntnisse:

- Grundlagen im Programmieren

Beginn: ab März

Betreuer: M. Sc. (Chem.) Jakob Jägerfeld

jakob.jaegerfeld@kit.edu

Co-Betreuer: M. Sc. (Ing.) Oscar Fürst

oscar.furst@kit.edu

Co-Betreuer: M. Sc. (Chem.) Felix Ehrlich

felix.ehrlich@kit.edu

Erstprüfer: Prof. Dr. Olaf Deutschmann

deutschmann@kit.edu