

CFD Know-how seit 1990.
Mit uns können Sie rechnen.

Infobrief 1/2024

Aktuelles über CFD Schuck

CFD SCHUCK
Ingenieurgesellschaft mbH

Liebe Leserin, lieber Leser,

wir gratulieren unserem Masteranden zu seiner hervorragend abgeschlossenen Masterarbeit!

Mit der geschickten Kombination aus CFD und KI hat er sich mit einem Thema beschäftigt, das derzeit in aller Munde ist. Wie das funktioniert und welche Chancen sich hier bieten, stellt unser fachlicher Ausflug heute vor.

In unserem KI-Portfolio haben wir darüber hinaus noch 2 relativ neue Angebote für Sie. Zum einen unsere KI-Workshops. Diese sind gedacht zum zielgerichteten Ausloten Ihrer Möglichkeiten, KI sinnvoll und zielgerichtet in der Entwicklung einzusetzen. Zum anderen bieten wir an, Sie bei der Einführung von KI in Ihrer Entwicklung zu unterstützen, beispielsweise mit zügig umsetzbaren Pilotprojekten.

Sollten Sie einen weiteren Interessenten kennen oder keine Zusendung wünschen, so geben Sie uns bitte kurz Rückmeldung per E-Mail an service@cfd-schuck.de.

Ich wünsche Ihnen gute Unterhaltung bei der Lektüre.



Ihr

Andreas Schuck

Fachlicher Ausflug: Leistungsvorhersage von PEM Elektrolyse

Wasserstoff gewinnt in Bezug auf Energiespeicherung und Mobilität zunehmend an Bedeutung. Dabei stellt Elektrolyse eine wichtige und in Verbindung mit erneuerbaren Energien potenziell klimaneutrale Methode der Wasserstoffherzeugung dar. Aus diesem Grund ist die Auslegung effizienter Elektrolyseanlagen auch in der Industrie relevant.

Simulationen von Elektrolysevorgängen mithilfe von CFD sind allerdings aufwändig und können die Entwicklung von Elektrolyseanlagen verlangsamen.

Dies ist die Motivation zur Entwicklung eines KI-basierten, klickschnellen Vorauslegungstool, welches basierend auf einigen geometrischen Größen die Vorhersage der Beziehung zwischen Spannung und erzielter Stromdichte ermöglicht.

Versuchsplanung

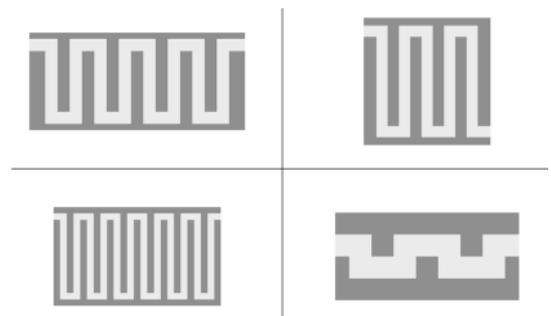
Um Zusammenhänge zwischen Eingangs- und Ausgangsgrößen zu analysieren ist unabhängig von der Methode ein Datensatz aus Parameterkombinationen nötig. Um die Effizienz des Vorgehens zu steigern ist die Anwendung einer statistischen Versuchsplanung hilfreich.

Dies ist ein Verfahren, welches die zu analysierenden Kombinationen aus Eingangsparametern so bestimmt, dass diese möglichst viele Rückschlüsse auf die Beziehung zwischen Ein- und Ausgangsgrößen ermöglicht.

Zu diesem Zweck wurden in *Ansys Workbench* 500 Designpunkte erzeugt, welche nach dem *Optimal Space Filling Design* in den untersuchten Eingangsparameterintervallen verteilt sind.

Datenerzeugung

Der nächste wichtige Schritt ist die Verarbeitung der geometrischen Eingangsparameter in passende Rechenmodelle.



Konkret wurde die Form der Strömungskanäle in den Elektrolysezellen über einen Satz aus drei geometrischen Parametern untersucht.

Nach einer Vernetzung mit einem strukturierten Gitter erfolgt eine Simulation in *Ansys Fluent*. Die Kombination aus klassischer Strömungsmechanik, Wärmeleitung, Mehrphasenströmungen und Elektrochemie stellt eine Herausforderung dar, welche besonders für die automatisierte Berechnung von vielen Parameterkombinationen einen zentralen Arbeitsschritt darstellt.

Der wichtigste Ausgangsparameter an dieser Stelle ist die mittlere Stromdichte durch die PEM (Proton Exchange Membrane). Sie quantifiziert den elektrischen Strom, welcher durch die Membran fließt und ist direkt proportional zum Ausmaß der Elektrolyse-reaktion, also der Zersetzung von Wasser in Wasser- und Sauerstoff.

Datenverarbeitung

Der Zusammenhang zwischen Eingangs- und Ausgangsparametern kann mithilfe verschiedener Methoden modelliert werden. Zum einen sind klassische Regressionsmethoden, wie die Anwendung von mehrdimensionalen Polynomen denkbar, allerdings stellt die Fragestellung auch eine gute Anwendung für KI in Form von künstlichen neuronalen Netzen dar.

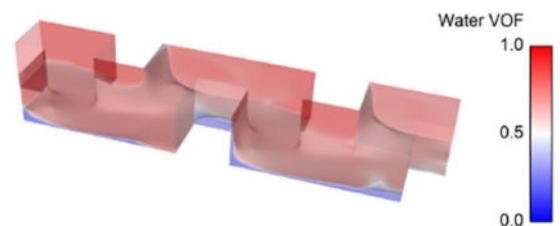
Zu diesem Zweck wurde eine Vielzahl an verschiedenen strukturierten künstlichen neuronalen Netzen trainiert und mit den in *Ansys Workbench* vorhandenen Regressionsverfahren verglichen.

Ergebnisse

Durch das Tuning verschiedener Hyperparameter wie Layeranzahl und –breite, sowie der ausgewählten Aktivierungsfunktion und die Bewertung der Vorhersagequalität anhand eines unabhängigen Satzes an

Validierungsdaten konnten schlussendlich gute Vorhersagequalitäten erzielt werden. Sowohl mittlere als auch RMS Fehler von unter 10 % waren durch die Anwendung von KI in den inneren Bereichen des Datensatzes erreichbar. Im Vergleich zu den anderen untersuchten Regressionsverfahren ist jedoch gerade die Vorhersagequalität im äußeren Bereich deutlich verbessert.

Neben der Anwendung von KI zur Leistungsvorhersage sind allerdings auch die Ergebnisse der Vielzahl an CFD-Rechnungen nicht zu vernachlässigen. So konnten viele wichtige physikalische Phänomene in den Strömungskanälen und deren Beziehung zu den untersuchten Eingangsparametern festgestellt werden.



Gerade in Bezug auf die Verteilung der Gasphasen und der Einfluss auf die erzielbare Stromdichte waren die Ergebnisse verschiedener Geometrien sehr aufschlussreich.

Fazit

Abschließend ist festzuhalten, dass die Kombination zweier solch zukunftsweisender Technologien wie Elektrolyse und KI ein hochinteressantes Thema für eine Masterarbeit geboten haben.

Sowohl KI als auch CFD bieten wichtige Möglichkeiten um die Leistungsfähigkeit von Elektrolyseanlagen, aber auch anderen Technologien besser zu verstehen und zu steigern. Somit bin ich dankbar für die erfolgreiche Zusammenarbeit mit CFD Schuck und freue mich auf eine gemeinsame Zukunft.

CFD-Know-how seit 1990.
Mit uns können Sie rechnen.

Standort Heidenheim
Bahnhofplatz 3
89518 Heidenheim
Tel. +49 (0)7321 34 93-3
Fax +49 (0) 7321 34 93-59

Standort München
Ingolstädter Str.22
80807 München
Tel.+49 (89) 35 82 80-6
Fax +49 (89) 35 82 80-89