



Estudo teórico aplicado da Eletrólise para geração de Hidrogênio

Lívia Helena Ornelas da Silva, UNEB, negocios.lh05@gmail.com
Elisiane Dantas da Conceição, UNEB, elisianedantas@gmail.com
Marcos Batista Figueredo, UNEB, mbfigueredo@uneb.br

RESUMO

Grandes esforços têm sido feitos para se desenvolver novas fontes de energia que possam substituir as fontes de energia convencionais que dependem de recursos fósseis. Dentre as diferentes fontes alternativas de energia, a Célula a Combustível de Membrana de Troca de Prótons (PEMFC) é considerada uma das alternativas mais promissoras de geradores de energia limpa. Um dos possíveis usos é a geração de energia residencial. Este estudo tem como objetivo caracterizar e apresentar uma modelagem para a produção de hidrogênio por eletrólise e expõe os principais fatores técnicos, que influenciam a implantação de uma central de produção de hidrogênio. No transcurso metodológico apresentamos inicialmente o estado da arte e em seguida um modelo para avaliar o potencial de geração de energia a partir de baixa temperatura e baixo consumo de água. Os resultados preliminares apresentam uma eficiência do sistema de 30% para ser alcançada a meta de 6W.

PALAVRAS-CHAVE: Hidrogênio. Água. Eletrólise. Energia. Tecnologia, PEM

INTRODUÇÃO

A crescente demanda energética mundial associada à maior consciência a respeito dos problemas ambientais vem trazendo grande interesse no desenvolvimento de rotas alternativas de energia, com avanços nos estudos de energia, o Hidrogênio H_2 começa a protagonizar uma transição global para uma economia de energia renovável e é, atualmente, considerado uma fonte de energia estratégica do ponto de vista climático, social e econômico (NOUSSAN et al., 2021; LIU et al., 2020).

Esse papel crescente do hidrogênio vem se refletindo nos modelos globais de energia, que estão integrando cada vez mais o uso de hidrogênio em todos os setores como um meio de alcançar a descarbonização, com os cenários de descarbonização mais agressivos geralmente vendo maior uso de hidrogênio (DILLMAN; HEINONEN, 2022; KAR; HARICHANDAN; ROY, 2022)

A produção de hidrogênio a partir da eletrólise da água é uma boa opção para aproveitar ao máximo o excedente de energia renovável. Entre as várias tecnologias para a produção de hidrogênio, a eletrólise da água usando eletricidade de fontes de energia renovável se mostra muito promissora (WEST et al., 2022; CHUNG et al., 2022; GALITSKAYA; ZHDANEEV, 2022).

Este estudo aplicou uma breve revisão bibliométrica sobre o tema para revisar as características de pesquisas e tendências de estudo de produção e armazenamento do hidrogênio com foco principalmente na separação da água por eletrólise integrada à cadeia de valor do hidrogênio verde. Com segmento a revisão irá se aprofundar em três principais tipos de eletrólise: alcalino, membrana de prótons e óxido sólido, avaliando suas características, vantagens e desvantagens.

Existem várias tecnologias disponíveis para a produção de hidrogênio, incluindo reforma, decomposição e hidrólise de combustíveis fósseis. Aproximadamente quatro bilhões de toneladas



de hidrogênio são necessárias anualmente, com 95% da produção de hidrogênio derivada de combustível fóssil, (GHAZVINI et al., 2019) que também produz CO₂.

Espera-se que a eletrólise da água, alimentada por fontes de energia renováveis, permita o aumento da produção de hidrogênio e emissões zero de CO₂ são produzidas nos processos de eletrólise da água (KUMAR; HIMABINDU, 2019). Assim, o armazenamento de energia solar e eólica excedente como hidrogênio é uma grande promessa. O hidrogênio gerado pela eletrólise da água possui alta pureza (99,9%) e também pode ser utilizado como reagente para diversos processos industriais (CHI; YU, 2018).

A *power-to-gas* ou PtG, consiste em produzir hidrogênio via eletrólise, por exemplo, a partir de uma energia limpa, renovável e barata como a energia solar ou a eólica. O PtG pode ser considerada uma opção para converter energia da eletricidade em energia de ligação química, armazenada em um gás combustível. (QADR DAN et al., 2015; LI; MULDER, 2021).

Usando energia elétrica, um eletrolisador divide a água em seus dois componentes: oxigênio de um lado e hidrogênio como gás combustível do outro. O hidrogênio pode ser usado diretamente ou alimentado em um processo de metanação a jusante. A escolha do caminho do processo depende dos requisitos do sistema de energia incorporado, como tolerância ao hidrogênio de redes de gás, buffer de gás, mobilidade ou aplicações de calor. (MEHRJERDI, 2019)

Com base nas conclusões desse estudo, futuros desenvolvimentos em aplicações de hidrogênio renovável exigirão a consideração de novos tipos de eletrólises e outros conjuntos de materiais e até mesmo o uso de inteligência artificial para ajudar a projetar, planejar e controlar a operação dessas aplicações.

O CENÁRIO DO USO DO HIDROGÊNIO PARA USO RESIDENCIAL

No Brasil, cujos recursos naturais renováveis são abundantes e cuja matriz energética possui elevada participação de fontes renováveis, o desenvolvimento de tecnologias para a economia e Hidrogênio (H₂) contribuirá para uma utilização mais eficiente dessas fontes energéticas o que possibilita uma grande participação no mercado mundial de equipamentos e serviços relacionados às energias renováveis e ao hidrogênio. (SANTOS et al., 2017).

É altamente estratégico do ponto de vista econômico, tecnológico e ambiental essa corrida na implantação da economia de hidrogênio. A utilização das tecnologias de H₂ é considerada como uma alternativa à utilização dos atuais combustíveis fósseis nos transportes, já que se trata de uma opção que apresenta baixíssimos impactos ambientais locais, apesar de não ser encontrado de forma livre na natureza, o hidrogênio pode ser produzido por algum processo, uma vez que o mesmo se encontra normalmente ligado a outro elemento ou composto químico.

A utilização do hidrogênio como vetor energético produzido a partir da energia produzida a partir de fontes renováveis, transformando eletricidade em energia transportável e armazenável, vem sendo avaliada como uma das formas mais eficientes e ambientalmente interessante. (BURTON et al., 2021)

Destacamos que a importância da adoção de H₂ apresenta as seguintes vantagens: Diversificação da matriz energética brasileira com crescente participação dos combustíveis renováveis; Redução de impactos ambientais, principalmente aqueles oriundos da poluição atmosférica em grandes centros urbanos; Redução da dependência externa de combustíveis fósseis; Desenvolvimento de base tecnológica para auferir confiabilidade aos consumidores (KUMAR; HIMABINDU, 2019).

Destaca-se que no cenário brasileiro, por ser altamente favorecido por fontes renováveis, a produção de hidrogênio deverá ser, prioritariamente, realizada por: Reforma de etanol; Gaseificação de biomassa; Eletrólise da água utilizando fontes renováveis de geração de eletricidade.



A ELETRÓLISE

Os sistemas de eletrólise baseados em *polymer electrolyte membrane* - PEM apresentam uma série de vantagens em comparação com os eletrolisadores água-alcalinos tradicionais, entre as quais a limpeza ecológica, características massa-volume consideravelmente menores e custos de energia e, o que é muito importante, um alto grau de pureza dos gases, uma oportunidade de obtenção de gases comprimidos diretamente na instalação, o aumento do nível de segurança.

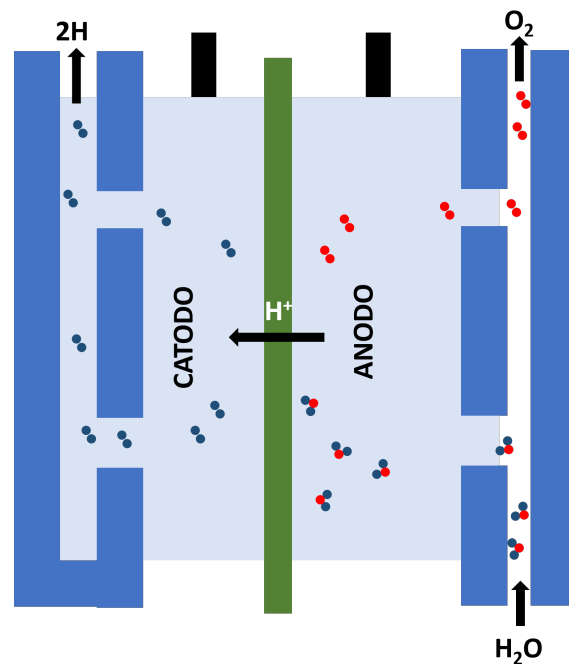


Figura 1: processo de eletrólise realizado pelo PEM

Na figura 1, pode se observar que a água reage no ânodo para formar oxigênio e íons de hidrogênio carregados positivamente (prótons). Os elétrons fluem através de um circuito externo e os íons de hidrogênio se movem seletivamente através do PEM para o cátodo. No cátodo, os íons de hidrogênio se combinam com os elétrons do circuito externo para formar o gás hidrogênio. Reação do ânodo: $2 \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$, Reação do cátodo: $4 \text{H}^+ + 4\text{e}^- \rightarrow 2 \text{H}_2$
Reação total: $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow \text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2$ (URSUA; GANDIA; SANCHIS, 2011)

Existem três tecnologias principais de eletrólise, dependendo do tipo de eletrólito utilizado:

1. Eletrólise alcalina com eletrólito líquido (AEL)
2. Eletrólise de membrana de troca de prótons (PEMEL)
3. Eletrólise de óxido sólido (SOEL)

As características comparativas das tecnologias de eletrólise são apresentadas na Tabela 1.

Vemos que as tecnologias de baixa temperatura, AEL e PEMEL, fornecem altos níveis de eficiência energética, a tecnologia SOEL de alta temperatura ainda está em fase de desenvolvimento (HAGIWARA et al., 2017).

A eletrólise da água alcalina usa lixívia concentrada como eletrólito e requer um separador impermeável ao gás para evitar que os gases do produto se misturem (YANG et al., 2022; BARCOBURGOS et al., 2020).



Tabela 1: Análise comparativa dos processos de eletrolise baseando em (SHANER et al., 2016; SOLOVEY et al., 2022; KEDDAR et al., 2021)

Parâmetro	AEL	PEMEL	SOEL
Eficiência, kWh/KgH ₂	50-70	50-83	> 90
Taxa de Voltagem,	1.4-3	1.4-2.5	1.0-1.5
Densidade da Corrente Nominal, A/cm ²	0.2-0.8	1-2	0.3-1
Temperatura de Operação, °C	70-90	40-60	700-850
Vida útil, h	60.000	50.000-80.000	<20.000
tempo de inicialização, min	500-1.100	700-1800	<2000

Os eletrodos consistem em metais não nobres como o níquel com revestimento eletrocatalítico. A PEMEL usa uma membrana de polímero umidificado como eletrólito e metais nobres como platina e óxido de irídio como eletrocatalisadores. Ambas as tecnologias são operadas em temperaturas de 40 a 90 °C e permitem pressões de operação de até 30 bar. A eficiência nominal de ambas as tecnologias é de cerca de 70% (SHANER et al., 2016; SOLOVEY et al., 2022; KEDDAR et al., 2021).

O SOEL também é conhecido como eletrólise de alta temperatura (HTEL) ou vapor, pois a água gasosa é convertida em hidrogênio e oxigênio em temperaturas entre 700 e 900 °C. Teoricamente, eficiências de pilha próximas a 100% são possíveis devido aos efeitos termodinâmicos positivos no consumo de energia em temperaturas mais altas. No entanto, o aumento da demanda térmica requer uma fonte de calor residual adequada da indústria química, metalúrgica ou de geração de energia térmica para operação econômica.

Além disso, o ambiente corrosivo exige maior desenvolvimento do material (KIEMEL et al., 2021; HUANG; XING; TU, 2022). Como consequência, SOEL fornece apenas capacidades de pilha pequenas abaixo de 10 kW, em comparação com 6 MW para AEL e 2 MW para PEMEL [20]. Assim, os custos de investimento e a vida útil determinam se AEL ou PEMEL é o projeto de sistema mais favorável para uma aplicação

ELETRÓLISE ALCALINA COM ELETRÓLITO LÍQUIDO (AEL)

A eletrólise da água alcalina é usada para dividir a água nos gases hidrogênio e oxigênio usando energia elétrica. As reações químicas são dadas nas Equações 1,2 e 3. No cátodo, as moléculas de água são reduzidas por elétrons a hidrogênio e íons hidróxido carregados negativamente. No ânodo, os íons hidróxido são oxidados a oxigênio e água enquanto liberam elétrons. No geral, uma molécula de água reage com hidrogênio e oxigênio na proporção de 2:1.

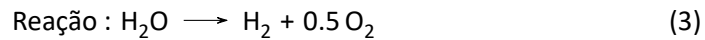
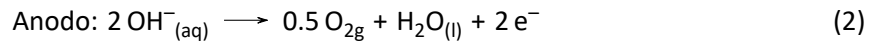
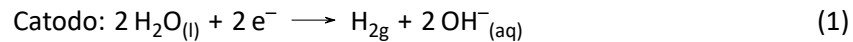


XVII ENCONTRO NACIONAL DE ENGENHARIA E DESENVOLVIMENTO SOCIAL

Popular e Solidária: a engenharia necessária para reconstruir o Brasil

21 a 25 de novembro de 2022

Rio de Janeiro - RJ, Brasil



A tensão da célula necessária para esta reação eletroquímica pode ser determinada pela termodinâmica. A entalpia de reação livre $\Delta_R G$ em pode ser calculada com a entalpia de reação $\Delta_R H$, a temperatura T e a entropia de reação $\Delta_R S$. conforme equação 4

$$\Delta_R G = \Delta_R H - T \cdot \Delta_R S \quad (4)$$

A voltagem reversível da célula U_{rev} em 5 é determinada pela razão da entalpia de reação livre $\Delta_R G$ para o produto do número de elétrons trocados $z = 2$ e a constante de Faraday $F(96.485 \text{Cmol}^{-1})$.

$$U_{rev} = -\frac{\Delta_R G}{z \cdot F} \quad (5)$$

em uma temperatura de 25°C e uma pressão ambiente de 1 bar (condições padrão), a entalpia de reação livre para a reação de separação da água é $\Delta_R G = 237 \text{kJmol}^{-1}$, o que leva a uma voltagem reversível da célula de $U_{rev} = -1,23 \text{V}$. Como a entalpia de reação livre é positiva em condições padrão, a separação da água é uma reação não espontânea (URSUA; GANDIA; SANCHIS, 2011). Devido a irreversibilidades, a tensão real da célula precisa ser maior do que a tensão reversível da célula para a reação de separação da água. A tensão termoneutra U_{th} na Equação 6 depende da entalpia de reação $\Delta_R H$, que é composta pela entalpia de reação livre $\Delta_R G$ e perdas térmicas irreversíveis $T \cdot \Delta_R S$.

$$U_{th} = -\frac{\Delta_R H}{z \cdot F} \quad (6)$$

Em condições padrão, a entalpia de reação para eletrólise da água é $\Delta_R H = 286 \text{kJmol}^{-1}$. Portanto, a tensão termoneutra é $U_{th} = -1.48 \text{V}$.

Para determinar as limitações mais relevantes e propor abordagens de solução adequadas, as tecnologias devem ser totalmente compreendidas (BARCO-BURGOS et al., 2020) o que ainda está em fase de estudo. Considerando que o processo de eletrólise da água alcalina pode ser definido pelas características de corrente-tensão e a impureza do gás resultante, painéis fotovoltaicos e turbinas eólicas devem ser operados no ponto de potência máxima (CHI; YU, 2018). Portanto, os parâmetros de influência devem ser conhecidos.

Para eletrólise de água alcalina, muitos dados experimentais e teóricos estão disponíveis para calcular e analisar a tensão da célula em condições de operação. Como o projeto real do sistema e o arranjo das células diferem para cada eletrolisador, certos parâmetros devem ser determinados experimentalmente para usar os modelos propostos para outro sistema.

A maioria dos modelos se baseia em princípios físicos e assim, a modelagem adequada para diferentes sistemas é possível. A conversão de energia por turbinas eólicas ou sistemas solares pode ser descrita pelas propriedades do sistema e correlações adequadas para o coeficiente de desempenho. Como esta variável é influenciada por muitos parâmetros, incluindo o projeto das pás dos aerogeradores, a correlação deve ser usada apenas para aerogeradores muito semelhantes, ou os parâmetros devem ser determinados experimentalmente ou por simulação.

ELETRÓLISE DE MEMBRANA DE TROCA DE PRÓTONS (PEMEL)

PEMELs são geralmente usados para produção de hidrogênio em pequena escala. De qualquer forma, Os PEMELs podem ser conectados em série para formar um eletrolisador *multi-stack*



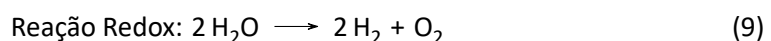
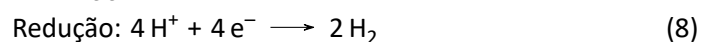
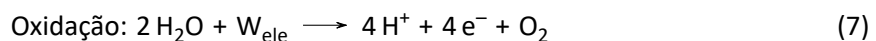
XVII ENCONTRO NACIONAL DE ENGENHARIA E DESENVOLVIMENTO SOCIAL
Popular e Solidária: a engenharia necessária para reconstruir o Brasil
21 a 25 de novembro de 2022
Rio de Janeiro - RJ, Brasil

para sistemas de grande escala. Além disso, os PEMELs oferecem algumas vantagens em relação aos AELs, como altas densidades de corrente, alta eficiência de tensão da célula e resposta rápida do sistema ao operar dinamicamente (YODWONG et al., 2020), desde PEMEL tem transporte de íons mais rápido devido à membrana sólida e fina.

O PEMEL converte a energia elétrica diretamente em energia química. A água é oxidada eletro quimicamente dentro da camada de catalisador do ânodo combinado com eletricidade no lado do ânodo (Wele, incluindo energia de Gibbs e perdas de energia); então a água é quebrada em gás oxigênio, prótons e elétrons, e esta reação chamada reação de oxidação é dada por 7. Os prótons são transportados através da membrana condutora de prótons para o lado do cátodo, enquanto os elétrons se movem pelo circuito externo e também atingem o lado do cátodo. Os prótons e os elétrons reagem eletro quimicamente dentro da camada de catalisador catódico e produzem gases de hidrogênio. Essa reação, chamada de reação de redução, e a reação global, chamada de reação redox, são dadas por 8 e 9, respectivamente. Deve-se notar que a reação redox requer energia para ser realizada, enquanto a redução 8 é quase espontânea; justifica a necessidade de fornecimento do PEMEL e a diferente dinâmica esperada pelas duas reações.

No PEMEL, os principais componentes são placas bipolares com canais de fluxo, coletores de corrente e montagem de eletrodo de membrana (MEA) (MÜLLER et al., 2019; SEBBAHI et al., 2022). As placas bipolares são obrigatórias e têm funções cruciais na operação do PEMEL, como conduzir elétrons, conectar células individuais para realizar uma pilha, organizar um caminho de fluxo para compartilhamento de água pura sobre os coletores de corrente, isolar hidrogênio e oxigênio, suportar a membrana e os eletrodos, e trazendo condução térmica para lidar com a temperatura PEMEL (MAAMOURI et al., 2021).

Para atender a essas funções, as placas bipolares devem apresentar propriedades específicas, como alta condução térmica e elétrica, baixa permeabilidade a gases e alta resistência mecânica e à corrosão. Geralmente, as placas bipolares à base de material de Titânio (Ti) são empregadas, pois o Ti possui alta resistência mecânica e à corrosão.



A eletrólise de membrana de troca de prótons (PEMEL) é uma das tecnologias de eletrolisador mais populares no contexto da descarbonização do sistema de energia. Uma das principais vantagens é o comportamento de resposta altamente dinâmico e rápido. Além disso, a PEMEL oferece altas densidades de corrente e alta eficiência de pilha. Além disso, o hidrogênio pode ser produzido em níveis de pressão mais altos para uso posterior, como o processo de reabastecimento. No lado negativo, a PEMEL precisa de catalisadores de metais raros e caros, como platina e irídio. Ainda há potencial em relação ao tempo de vida e ao tamanho da planta. Os números-chave são eficiências de até 65% com base no valor calorífico mais baixo e densidades de corrente de até 3Acm^{-2} para produtos comerciais. As temperaturas de operação variam entre 50-80°C.

ELETRÓLISE DE ÓXIDO SÓLIDO (SOEL)

A eletrólise através da tecnologia de células de combustível é uma técnica eficiente que utiliza a conversão eletroquímica para produzir hidrogênio e oxigênio (KIM et al., 2018).

Os processos eletrolíticos de água de baixa temperatura ($< 100^\circ\text{C}$) baseados em membrana eletrolítica de polímero e eletrólise de água alcalina requerem uma grande quantidade de eletricidade e catalisadores de metais nobres, levando a baixa eficiência e alto custo. A célula de



XVII ENCONTRO NACIONAL DE ENGENHARIA E DESENVOLVIMENTO SOCIAL
Popular e Solidária: a engenharia necessária para reconstruir o Brasil
21 a 25 de novembro de 2022
Rio de Janeiro - RJ, Brasil

eletrólise de óxido sólido de temperatura (SOEC) é mais eficiente devido à divisão de água favorecida termodinâmica e cineticamente (ISENBERG, 1981).

Em temperaturas acima de 100°C, a água muda do estado líquido para o gasoso, o que reduz a demanda elétrica necessária para o processo eletrolítico, é compensado pela energia térmica (SONG et al., 2019).

Assim, a operação de SOECs em alta temperatura tem as vantagens de (a) reduzir o custo do sistema, pois os SOECs não requerem o uso de um catalisador de metal nobre caro como a platina (Pt), (b) exigir menos energia elétrica como entrada devido ao fornecimento de energia térmica e (c) operando em altas densidades de corrente (corrente dividida pela área), produzindo uma grande quantidade de hidrogênio altamente puro (LI et al., 2013).

Além disso, a energia térmica necessária para uma operação SOEC pode ser fornecida a partir de fontes externas, como calor residual industrial. O funcionamento das SOECs pode ser considerado como a operação reversa do sistema de célula a combustível de óxido sólido (SOFC).

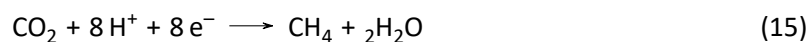
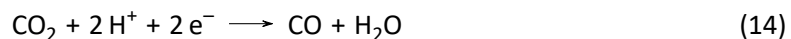
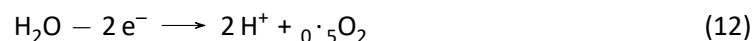
Uma SOFC converte energia química (combustível) em energia elétrica com alta eficiência e poluição mínima. Uma SOFC de célula única consiste em três componentes em estado sólido, a saber, ânodo, cátodo e eletrólito.

Em uma SOFC, o combustível é alimentado ao ânodo (oxidação) enquanto o oxigênio é alimentado através do cátodo (redução). O oxigênio que entra no cátodo é reduzido a íons de oxigênio, que migram através do eletrólito condutor de óxido-íon denso em direção ao ânodo e são consumidos durante a oxidação do combustível para gerar eletricidade.

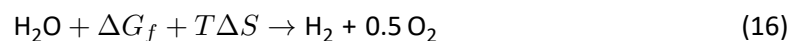
Uma célula única SOEC típica para eletrólise de CO₂ possui estrutura lamelar com eletrólito denso ensanduichado por ânodo e cátodo porosos (GHZVINI et al., 2019). O eletrólito diferente governa diferentes reações de eletrodo no cátodo e ânodo.

Para eletrólitos condutores de íons de oxigênio, as moléculas de CO₂ recebem elétrons para produzir CO e íons de oxigênio no cátodo (equação 10). Os íons de oxigênio produzidos são transportados através do eletrólito para o ânodo e perdem elétrons para gerar moléculas de oxigênio (Equação 11). Enquanto para o eletrólito condutor de prótons, a eletrólise do CO₂ é completada com a ajuda da eletrólise do H₂O. Primeiro, as moléculas de H₂O perdem elétrons para gerar moléculas de oxigênio e prótons no ânodo (Equação 12).

Os prótons gerados são transportados através do eletrólito até o cátodo, onde recebem elétrons e reagem com as moléculas de CO₂ para produzir CO ou outros produtos químicos valiosos (Equações 14-15).



A eletrólise envolve uma reação de divisão de água com um estímulo externo, como tensão elétrica entre os dois eletrodos (equação 16).



A tensão elétrica mínima necessária para a eletrólise é determinada pela energia livre de Gibbs (ΔG_f), que é função da pressão e da temperatura. A entalpia térmica (ΔH_f) é a energia total necessária para a separação da água, que é a soma da tensão elétrica mínima e energia térmica, conforme expresso na equação 17.



$$\Delta H_f = \Delta G_f + T \Delta S_f \quad (17)$$

A eletrólise é um processo endotérmico que varia em função da temperatura e pressão de operação. Assim, a variação da entalpia depende da formação da entalpia molar (ΔH_f) e o número de elétrons (n) envolvidos por reação para o processo pode ser expresso como

$$E_{tn} = \frac{1}{nF} \Delta H_f \quad (18)$$

onde n é igual a 2 para separação de água e F é a constante de Faraday. E_{tn} varia com as condições locais, como direção do fluxo e situação do eletrolisador. Da mesma forma, a tensão mínima para divisão de água dependendo da energia livre de Gibbs em condições padrão é:

$$E_{rev} = \frac{1}{nF} \Delta G_f^\circ \quad (19)$$

A eletrólise a vapor de alta temperatura usando SOECs é uma tecnologia promissora ambientalmente benigna para a produção de hidrogênio (LAGUNA-BERCERO, 2012). A redução da temperatura de operação e o desenvolvimento de SOECs eletroquimicamente eficientes e quimicamente estáveis com o mínimo de estresse/descasamento térmico nas condições de operação são as questões-chave na comercialização de SOECs (KAZEMPOOR; BRAUN, 2015). Estudos recentes (GIGLIO et al., 2018; MENDOZA et al., 2020; CHEN et al., 2021) destacam a necessidade de um maior desenvolvimento na melhoria da condutividade protônica de eletrólitos, pois oferecem as vantagens de altos níveis de produção de hidrogênio puro, oxidação mínima de níquel, alta eficiência de corrente e temperatura de operação relativamente mais baixa do que a de oxigênio-íon convencional. realização de SOECs.

A melhoria da estabilidade química de eletrólitos à base de cerato ou da condutividade de prótons de eletrólitos à base de zirconato pode melhorar a eficiência do SOEC. Testar e entender a estrutura e as modificações eletroquímicas em condições in situ podem fornecer uma visão sobre a redução da degradação do material, melhorando assim a durabilidade (SONG et al., 2019).

CONVERSÕES DAS FONTES DE ENERGIAS EM HIDROGÊNIO

O gás natural é uma fonte de energia rica em hidrogênio, com a relação de um átomo de carbono para quatro átomos de hidrogênio, é um dos combustíveis fósseis mais utilizados no mundo, dentre os principais combustíveis fósseis, como o petróleo e o carvão, o gás natural é o menos poluente.

Atualmente, aproximadamente a metade da produção de hidrogênio no mundo provém do gás natural, e a maior parte da produção em escala industrial é pelo processo de reforma a vapor, ou como um subproduto do refino de petróleo e produção de compostos químicos.

De acordo com (OGDEN et al., 2018), o hidrogênio pode ser produzido a partir de uma variedade de recursos primários, por meio de processamento termoquímico de hidrocarbonetos, como gás natural, carvão ou biomassa, ou por eletrólise da água usando qualquer fonte de eletricidade, incluindo renováveis, como eólica ou solar, ou energia nuclear.

Acrescentando que, grande parte do hidrogênio provem de combustíveis fósseis, principalmente do gás natural, que emitem grandes quantidades de Gases de Efeito Estufa (GEE) durante a sua produção. A principal estratégia adotada para solucionar esse problema da emissão de GEE foi a "power-to-gas", que consiste em produzir hidrogênio a partir de processos, como a eletrólise da água ou a pirólise do metano, a partir de uma energia barata e renovável.

O hidrogênio "verde" poderia ser produzido por meio de vias de baixo carbono, como a eletrólise alimentada por eletricidade renovável reduzida. A mistura de hidrogênio verde na rede de



gás natural foi sugerida como um primeiro passo em uma transição para o hidrogênio renovável em grande escala.

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE ELETRÓLISE DA ÁGUA

Nos últimos anos, um número crescente de modelos matemáticos que descrevem o processo de eletrólise da água tem sido desenvolvido. Alguns destes modelos foram incorporados em programas de simulação, que podem ser utilizados para a otimização, dimensionamento etc de sistemas de energia de hidrogênio.

De fato a contribuição deste tipo de recurso computacional para os estudos de energia renovável tornou-se obrigatória devido à escassez de combustível fóssil, inflação de preços e poluição ambiental (ABE et al., 2019).

As membranas eletrolíticas (PEM) possuem propriedades suficientes para atingir o alto desempenho e resiliência exigidos para FCs. As FCs podem ser categorizadas em vários tipos principais, conforme apresentado em Song et al. (2020), Entre elas, a célula a combustível de membrana de troca de prótons (PEMFC) tem baixa pressão de operação, baixa temperatura de operação, baixa umidade relativa, alta eficiência, fonte verde, sem contaminação e menos resíduos que outros tipos.

O modelo estático de Amphlett tem sido usado para prever o desempenho da célula a combustível de membrana de troca de prótons (DHARMALINGAM et al., 2022; AMAMOU et al., 2020).

Conceitos-chave no modelo estático de Amphlett são tensão de Nernst, perda de polarização de ativação, perda de polarização ôhmica e perda de polarização de concentração. O modelo estático de Amphlett tem uma abordagem mecanicista e empírica para descrever o desempenho da célula a combustível de membrana de troca de prótons. O potencial padrão ideal de uma célula a combustível H_2/O_2 é 1,229 V com produto de água líquida. O potencial real da célula é diminuído do seu potencial de referência devido a perdas irreversíveis (HAGHIGHI et al., 2018).

Um PEMFC é um conversor de energia eletroquímica. A energia química é diretamente convertida em energia elétrica e calor. O hidrogênio e o oxigênio reagem separadamente para formar água.

A tensão da célula V_{PEMFC} é dada como a soma da tensão de Nernst E_{Nernst} devido a vários mecanismos de perda irreversível, sobretensão de ativação U_{act} , sobretensão de concentração ou difusão U_{conc} e sobretensão resistiva ou ôhmica U_{ohm} . Conforme, discutido em Frensch et al. (2018, p-532)

$$V_{PEMFC} = E_{Nernst} - U_{act} - U_{ohm} - U_{conc} \quad (20)$$

onde:

$$E_{Nernst} = 1.229 - (8.5 \times 10^{-4}) \times (T - 298.15) + (4.308 \times 10^{-5}) \times (T) \times [\ln(P_{H_2}) + 0.5 \ln(P_{O_2})] \quad (21)$$

$$E_{act} = \beta_1 + \beta_2 \times T_{PEMFC} + \beta_3 \times T_{PEMFC} \times \ln(j \times 5 \times 10^{-3}) + \beta_4 \times T_{PEMFC} \times \ln C_{O_2}^* \quad (22)$$

$$E_{ohm} = \frac{I_{PEMFC}}{S_{cell}} \times \left(\frac{181.6 \times \left[1 + 0.03 \times \left(\frac{I_{PEMFC}}{S_{cell}} \right) + 0.06 \times \left(\frac{T_{PEMFC}}{303} \right)^2 \times \left(\frac{I_{PEMFC}}{S_{cell}} \right)^{2.5} \right]}{\left[\lambda - 0.634 - 3 \times \left(\frac{I_{PEMFC}}{S_{cell}} \right) \right] \times e^{4.18 \times \left(\frac{T_{PEMFC} - 303}{I_{PEMFC}} \right)}} \times I_{PEMFC} + S_{cell} + R_c \right) \quad (23)$$



Onde $C_{O_2}^*$ é a concentração de oxigênio na área do cátodo (mol/cm^3), β_i são constantes, S_{cell} : Área ativa da célula (m^2), R_c a resistência de contato equivalente da condução dos eletrodos (ω), T_{PEMFC} : temperatura absoluta de operação da pilha (K).

$$U_{conc} = -B \times \ln \left(1 - \frac{j}{j_{max}} \right) \quad (24)$$

O modelo dinâmico do PEMFC que é construído em python com base nas seguintes equações:

$$E = E_0 + \frac{RT}{2F} \ln \left(P_{H_2} P_{O_2}^{0.5} \right) \quad (25)$$

onde a ordem técnica é a tensão padrão sem carga da célula, R é a constante universal de gás, T é a temperatura absoluta da pilha, F é a constante de Faraday, as pressões parciais de hidrogênio, o vapor do oxigênio e da água são P_{H_2} e P_{O_2} respectivamente, B e C são constantes para simular as perdas de ativação no sistema e a resistência interna das células R_{int} . já na equação 27 se tem:

$$\frac{d}{dt}(P_{H_2}) = \frac{R \times T}{V_{an}} \left(q_{H_2}^{in} - K_{H_2} P_{H_2} - 2K_R I_{fc} \right) \quad (26)$$

$$\frac{d}{dt}(P_{O_2}) = \frac{R \times T}{V_{ca}} \left(q_{O_2}^{in} - K_{O_2} P_{O_2} - K_R I_{fc} \right) \quad (27)$$

com $K_r = \frac{N_0}{4F}$

RESULTADOS INICIAIS

O python 3.6 foi escolhido como software de simulação. Analisando aspectos de potência, Potência-térmica e Eficiência em um programa de inicialização contendo os parâmetros do sistema fotovoltaico (conforme (FRENSCH et al., 2018) dados fotovoltaicos, filtros, bateria e máquina CC), um programa com a fonte fotovoltaica e a bomba e uma biblioteca python contendo os Elementos básicos de PEMC.

São organizadas duas sessões de simulação de quatro horas cada. A primeira sessão é focada no desenvolvimento da simulação do sistema, utilizando a biblioteca. A segunda sessão é focada na parte de eficiência. Nesse sistema, é observado que tanto a Potência quanto a Eficiência tendem a decair, isso deve-se ao fato do sistema estar aumentando a Temperatura, devido a transformação de energia elétrica em energia química.

A Figura 2 apresenta a curva simulado do sistema para atingir uma potência igual ou acima de 6W. Para esta potência teve um resultado ideal de potência térmica de 10W e uma eficiência de acima de 30%. O resultado desta simulação mostra que é necessário otimizar o sistema de forma tal a atingir um eficiência acima de 50% para a faixa desejada de potência.

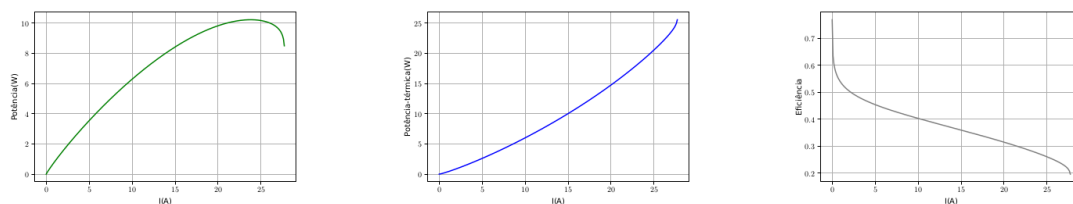


Figura 2: Resultados obtidos com a simulação a partir das equações 26 e 27



CONSIDERAÇÕES FINAIS

Há vários caminhos de produção, distribuição e consumo de hidrogênio que apresentam compensações complexas entre custo, emissões, escalabilidade e requisitos de pureza e pressão, mas fornecem uma infinidade de opções que podem ser exploradas dependendo das circunstâncias locais (por exemplo, energia renovável ou locais adequados para a extração de CO₂). Apresentam-se fortes razões para acreditar que o hidrogênio e as células de combustível podem experimentar uma trajetória de custo e desempenho semelhante às energias renováveis já existentes. Além disso, o hidrogênio apresenta caminhos que mostram que a produção de combustível e energia não precisam prejudicar o meio ambiente, e ainda é um importante suporte para a diminuição dos gases maléficos que são produzidos em alta escala.

A eletrólise em rede é vista como a opção mais sustentável, seguida pelos ciclos de separação termoquímica de água solar e eletrólise eólica.

Neste trabalho, apresentamos um estudo para revisar as características de pesquisas e tendências de estudo de produção e armazenamento do hidrogênio com foco principalmente na separação da água por eletrólise integrada à cadeia de valor do hidrogênio verde tanto um estudo é apresentado um estudo do sistema híbrido Células a Combustível/Banco de Baterias que abastece um veículo elétrico como um modelo inicial de estudo deste sistema.

No modelo as diferentes partes do sistema proposto foram simuladas separadamente e, em seguida, foi avaliado teoricamente seus resultados. O modelo de simulação do sistema híbrido foi desenvolvido em python. Os resultados obtidos mostram a viabilidade da produção do sistema híbrido para uma residência.

Referências

- ABE, J. O. et al. Hydrogen energy, economy and storage: review and recommendation. *International journal of hydrogen energy*, Elsevier, v. 44, n. 29, p. 15072–15086, 2019.
- AMAMOU, A. et al. Efficient model selection for real-time adaptive cold start strategy of a fuel cell system on vehicular applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, Elsevier, v. 45, n. 38, p. 19664–19675, 2020.
- BARCO-BURGOS, J. et al. Thermal characterization of an alkaline electrolysis cell for hydrogen production at atmospheric pressure. *Fuel*, v. 276, p. 117910, 2020. ISSN 0016-2361. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236120309066>>.
- BURTON, N. et al. Increasing the efficiency of hydrogen production from solar powered water electrolysis. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Elsevier, v. 135, p. 110255, 2021.
- CHEN, C. et al. A novel solar hydrogen production system integrating high temperature electrolysis with ammonia based thermochemical energy storage. *Energy Conversion and Management*, v. 237, p. 114143, 2021. ISSN 0196-8904. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890421003198>>.
- CHI, J.; YU, H. Water electrolysis based on renewable energy for hydrogen production. *Chinese Journal of Catalysis*, v. 39, n. 3, p. 390–394, 2018. ISSN 1872-2067. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1872206717629498>>.
- CHUNG, K.-H. et al. Development of a hybrid reaction module linked to liquid-phase plasma and electrolysis for hydrogen production with wastewater decomposition. *Chemical Engineering Journal*, v. 445, p. 136725, 2022. ISSN 1385-8947. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1385894722022203>>.



XVII ENCONTRO NACIONAL DE ENGENHARIA E DESENVOLVIMENTO SOCIAL

Popular e Solidária: a engenharia necessária para reconstruir o Brasil

21 a 25 de novembro de 2022

Rio de Janeiro - RJ, Brasil

DHARMALINGAM, B. et al. Zero emission hydrogen fuelled fuel cell vehicle and advanced strategy on internal combustion engine: A review. *Diesel Engines and Biodiesel Engines Technologies*, BoD–Books on Demand, p. 157, 2022.

DILLMAN, K.; HEINONEN, J. A ‘just’ hydrogen economy: A normative energy justice assessment of the hydrogen economy. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 167, p. 112648, 2022. ISSN 1364-0321. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S136403212200541X>>.

FRENSCH, S. H. et al. Model-supported characterization of a pem water electrolysis cell for the effect of compression. *Electrochimica Acta*, v. 263, p. 228–236, 2018. ISSN 0013-4686. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468618300586>>.

GALITSKAYA, E.; ZHDANEEV, O. Development of electrolysis technologies for hydrogen production: A case study of green steel manufacturing in the russian federation. *Environmental Technology & Innovation*, v. 27, p. 102517, 2022. ISSN 2352-1864. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352186422001262>>.

GHAZVINI, M. et al. Geothermal energy use in hydrogen production: A review. *International Journal of Energy Research*, Wiley Online Library, v. 43, n. 14, p. 7823–7851, 2019.

GIGLIO, E. et al. Power-to-gas through high temperature electrolysis and carbon dioxide methanation: Reactor design and process modeling. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 57, n. 11, p. 4007–4018, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b00477>>.

HAGHIGHI, S. et al. OPEM : Open source PEM cell simulation tool. *Journal of Open Source Software*, The Open Journal, v. 3, n. 27, p. 676, jul 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.21105/joss.00676>>.

HAGIWARA, H. et al. Overall water splitting on dye-modified inorganic semiconductor photocatalysts. *Journal of the Japan Petroleum Institute*, v. 60, n. 1, p. 10–18, 2017.

HUANG, Z.; XING, L.; TU, Z. Load changing characteristics of the hydrogen-air and hydrogen-oxygen proton exchange membrane fuel cells. *International Journal of Energy Research*, v. 46, n. 2, p. 1909–1921, 2022. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/er.7306>>.

ISENBERG, A. Energy conversion via solid oxide electrolyte electrochemical cells at high temperatures. *Solid State Ionics*, v. 3-4, p. 431–437, 1981. ISSN 0167-2738. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167273881901272>>.

KAR, S. K.; HARICHANDAN, S.; ROY, B. Bibliometric analysis of the research on hydrogen economy: An analysis of current findings and roadmap ahead. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 47, n. 20, p. 10803–10824, 2022. ISSN 0360-3199. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319922002774>>.

KAZEMPOOR, P.; BRAUN, R. Hydrogen and synthetic fuel production using high temperature solid oxide electrolysis cells (soecs). *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 40, n. 9, p. 3599–3612, 2015. ISSN 0360-3199. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319914035605>>.



XVII ENCONTRO NACIONAL DE ENGENHARIA E DESENVOLVIMENTO SOCIAL

Popular e Solidária: a engenharia necessária para reconstruir o Brasil

21 a 25 de novembro de 2022

Rio de Janeiro - RJ, Brasil

KEDDAR, M. et al. Comparative analysis of thyristor-based and transistor-based rectifiers for pem water electrolysis. In: IEEE. *2021 12th International Renewable Energy Congress (IREC)*. [S.l.], 2021. p. 1–5.

KIEMEL, S. et al. Critical materials for water electrolyzers at the example of the energy transition in germany. *International Journal of Energy Research*, v. 45, n. 7, p. 9914–9935, 2021. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/er.6487>>.

KIM, J. et al. Hybrid-solid oxide electrolysis cell: A new strategy for efficient hydrogen production. *Nano Energy*, v. 44, p. 121–126, 2018. ISSN 2211-2855. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211285517307656>>.

KUMAR, S. S.; HIMABINDU, V. Hydrogen production by pem water electrolysis—a review. *Materials Science for Energy Technologies*, Elsevier, v. 2, n. 3, p. 442–454, 2019.

LAGUNA-BERCERO, M. Recent advances in high temperature electrolysis using solid oxide fuel cells: A review. *Journal of Power Sources*, v. 203, p. 4–16, 2012. ISSN 0378-7753. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775311024384>>.

LI, W. et al. Performance and methane production characteristics of h₂o–co₂ co-electrolysis in solid oxide electrolysis cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 38, n. 25, p. 11104–11109, 2013. ISSN 0360-3199. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319913000608>>.

LI, X.; MULDER, M. Value of power-to-gas as a flexibility option in integrated electricity and hydrogen markets. *Applied Energy*, v. 304, p. 117863, 2021. ISSN 0306-2619. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261921011855>>.

LIU, W. et al. Trends and future challenges in hydrogen production and storage research. *Environmental Science and Pollution Research*, Springer, v. 27, n. 25, p. 31092–31104, 2020.

MAAMOURI, R. et al. Proton exchange membrane water electrolysis: Modeling for hydrogen flow rate control. *International Journal of Hydrogen Energy*, Elsevier, v. 46, n. 11, p. 7676–7700, 2021.

MEHRJERDI, H. Optimal correlation of non-renewable and renewable generating systems for producing hydrogen and methane by power to gas process. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 44, n. 18, p. 9210–9219, 2019. ISSN 0360-3199. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319919307335>>.

MENDOZA, R. M. et al. Experimental and analytical study of an anode-supported solid oxide electrolysis cell. *Chemical Engineering & Technology*, v. 43, n. 12, p. 2350–2358, 2020. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ceat.202000204>>.

MÜLLER, M. et al. Water management in membrane electrolysis and options for advanced plants. *International journal of hydrogen energy*, Elsevier, v. 44, n. 21, p. 10147–10155, 2019.

NOUSSAN, M. et al. The role of green and blue hydrogen in the energy transition—a technological and geopolitical perspective. *Sustainability*, v. 13, n. 1, 2021. ISSN 2071-1050. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2071-1050/13/1/298>>.

OGDEN, J. et al. Natural gas as a bridge to hydrogen transportation fuel: Insights from the literature. *Energy Policy*, Elsevier, v. 115, p. 317–329, 2018.



XVII ENCONTRO NACIONAL DE ENGENHARIA E DESENVOLVIMENTO SOCIAL

Popular e Solidária: a engenharia necessária para reconstruir o Brasil

21 a 25 de novembro de 2022

Rio de Janeiro - RJ, Brasil

- QADRAN, M. et al. Role of power-to-gas in an integrated gas and electricity system in great britain. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 40, n. 17, p. 5763–5775, 2015. ISSN 0360-3199. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319915005418>>.
- SANTOS, K. G. dos et al. Hydrogen production in the electrolysis of water in brazil, a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Elsevier, v. 68, p. 563–571, 2017.
- SEBBAHI, S. et al. Assessment of the three most developed water electrolysis technologies: Alkaline water electrolysis, proton exchange membrane and solid-oxide electrolysis. *Materials Today: Proceedings*, Elsevier, 2022.
- SHANER, M. R. et al. A comparative technoeconomic analysis of renewable hydrogen production using solar energy. *Energy & Environmental Science*, Royal Society of Chemistry, v. 9, n. 7, p. 2354–2371, 2016.
- SOLOVEY, V. et al. Development of high pressure membraneless alkaline electrolyzer. *International Journal of Hydrogen Energy*, Elsevier, v. 47, n. 11, p. 6975–6985, 2022.
- SONG, Y. et al. Review on current research of materials, fabrication and application for bipolar plate in proton exchange membrane fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, Elsevier, v. 45, n. 54, p. 29832–29847, 2020.
- SONG, Y. et al. High-temperature co₂ electrolysis in solid oxide electrolysis cells: Developments, challenges, and prospects. *Advanced Materials*, v. 31, n. 50, p. 1902033, 2019. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adma.201902033>>.
- URSUA, A.; GANDIA, L. M.; SANCHIS, P. Hydrogen production from water electrolysis: current status and future trends. *Proceedings of the IEEE*, IEEE, v. 100, n. 2, p. 410–426, 2011.
- WEST, M. et al. Critical review and analysis of hydrogen safety data collection tools. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 47, n. 40, p. 17845–17858, 2022. ISSN 0360-3199. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319922013945>>.
- YANG, Y. et al. The scheduling of alkaline water electrolysis for hydrogen production using hybrid energy sources. *Energy Conversion and Management*, v. 257, p. 115408, 2022. ISSN 0196-8904. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890422002047>>.
- YODWONG, B. et al. Faraday's efficiency modeling of a proton exchange membrane electrolyzer based on experimental data. *Energies*, MDPI, v. 13, n. 18, p. 4792, 2020.