

## **SIMULAÇÃO DE ELETROLISADORES E A TEMPERATURA COMO PARÂMETRO BASILAR À REDUÇÃO DE CONSUMO DE ENERGIA**

*Karen Moura Fernandes<sup>1\*</sup> (IC), Mateus Gomes Macário<sup>2</sup>, Paulo Henrique Pereira Silva<sup>3</sup> (PO)*

<sup>1</sup>. Universidade de Fortaleza – Programa de Iniciação Científica PIBITI

<sup>2</sup>. Universidade de Fortaleza – Iniciação Científica Voluntária

<sup>3</sup>. Universidade de Fortaleza – Professor Orientador

**Palavras-chave:** eletrolisadores; hidrogênio verde; simulação computacional; temperatura; eficiência energética.

### **Resumo**

A crescente demanda por fontes de energia sustentáveis impulsionou o desenvolvimento do hidrogênio verde, cuja produção ocorre via eletrólise da água, utilizando energia renovável e resultando em emissões zero carbono. Este artigo aborda a simulação computacional de eletrolisadores, equipamento que possibilita a eletrólise, utilizando o Google Colab e React.js, explorando a modelagem matemática e os parâmetros que influenciam a performance desses dispositivos.

### **Introdução**

O hidrogênio é uma fonte promissora de energia, tanto pela sua abundância quanto pela alta eficiência da eletricidade convertida do seu desenvolvimento (Saliba-Silva et al., 2010, p. 66). A química necessária à produção de hidrogênio por eletrólise da água é amplamente conhecida e bem simples: o procedimento acontece em uma cuba eletrolítica onde eletricidade passa por dois eletrodos na água, que produz oxigênio, no ânodo, e hidrogênio, no cátodo (Saliba-Silva et al., 2010, p. 68). O eletrolisador é o equipamento que possibilita este processo químico e, após a decomposição das moléculas de H<sub>2</sub>O, o H<sub>2</sub> é armazenado. Em escala industrial, os dois tipos de eletrolisadores mais comumente usados (Epcm Holdings, 2023) são os eletrolisadores alcalino e membrana de troca de prótons (PEM). Além destes, consideramos também o de óxido sólido (SOEC) em todas as abordagens deste artigo. O eletrolisador alcalino funciona a partir de uma solução aquosa alcalina de hidróxido de potássio (KOH), na faixa de concentração de 25 a 30%. Esta solução, por conta da alta condutividade, atua como condutor iônico, já que demanda menos eletricidade em função de sua baixa resistência ôhmica, além de operarem entre 70 e 80°C e apresentarem rendimento de 70 a 80% (Moreira et al., 2017, p. 298). El-Shafie (2023) explica que a tecnologia do eletrolisador de membrana de troca de prótons (PEM) é amplamente adotada nos processos industriais devido à sua capacidade de produzir hidrogênio de alta pureza de forma eficiente, ao mesmo tempo em que minimiza os desafios relacionados ao manuseio e à manutenção. Em contrapartida, os altos custos dos materiais envolvidos neste processo impossibilitam a produção em massa destes eletrolisadores, que empregam um material plástico sólido especializado como eletrólito. O eletrolisador de óxido sólido é uma célula de combustível que opera a pressões e temperaturas consideravelmente mais altas comparado aos eletrolisadores alcalinos e PEM, podendo alcançar até 1000°C, causando, assim, a degradação do eletrólito, redução de sua vida útil e tempos de inicialização prolongados. Em compensação, oferece alta eficiência de conversão, baixo custo e baixas emissões associadas a separação do hidrogênio, que requer menos eletricidade (El-Shafie, 2023). Neste método, o uso

de vapor, ao invés de água líquida, permite uma eficiência energética maior, uma vez que a alta temperatura acelera a cinética da reação, reduzindo as perdas de energia devido à polarização dos eletrodos, o que aumenta a eficiência geral do sistema.

Parâmetros de desempenho como eficiência, densidade de corrente e consumo energético são considerados mais relevantes à esta pesquisa. A densidade de corrente representa a quantidade de energia fluindo no eletrodo e no eletrolisador de acordo com o potencial elétrico aplicado e é diretamente proporcional à taxa de geração de hidrogênio, uma vez que quanto maior densidade de corrente, mais elétrons participando da reação eletroquímica; uma maior densidade de corrente resulta em uma maior queda de tensão, reduzindo a eficiência da tensão do eletrólise; se a densidade de corrente diminui, a taxa de produção de hidrogênio também reduz. Consumo energético é o parâmetro mais amplamente utilizado para comparar tecnologias de eletrólise e, em aplicações industriais convencionais, é relativamente alto, entre 4,5-5kWh/m<sup>3</sup> (El-Shafie, 2023) ou 55,6kWh/kg, aproximadamente, dependendo do tipo de eletrolisador usado. Este alto consumo se apresenta como um desafio considerável que deve ser enfrentado para minimizar os custos de produção do hidrogênio (El-Shafie, 2023). A eficiência energética de um eletrolisador é definida pelo hidrogênio produzido pela energia consumida, sendo determinante à produção economicamente viável de hidrogênio verde e é crucial que seja analisado o ciclo completo do processo de eletrólise da água para avaliar a eficiência e o consumo energético da operação. Estudos (Azuan et al., 2019; Aulakh, Boulama e Pharoah, 2021) apontam que a temperatura é um fator central nesses parâmetros, pois aumentar a temperatura pode melhorar a eficiência do sistema e reduzir o consumo de energia (Bi et al., 2025), e é ainda mais crucial quando falamos da relação entre a temperatura e o custo de produção de hidrogênio: a eletricidade é um fator central no custo da produção através da eletrólise e, em sistemas de altas temperaturas, esse custo diminui. Inclusive, entre 47-78% do total desse custo é com eletricidade (Aulakh; Boulama; Pharoah, 2021). Nem tudo são flores, porém: em teoria, tudo isso se aplica, mas, na prática, temperaturas mais altas nem sempre são viáveis se consideradas a limitação dos equipamentos, que podem ter sua vida útil comprometida (Bi et al., 2025). A modelagem matemática é fundamental à análise do efeito da temperatura na curva I-U, potenciais de sobretensão e eficiência energética (Azuan et al., 2019); e é uma abordagem utilizada para explicar ou compreender situações reais, e a modelagem de eletrolisadores desempenha um papel fundamental na compreensão e otimização do processo de eletrólise, permitindo a previsão do desempenho e a identificação de limitações operacionais. Para descrever matematicamente esse processo, são utilizadas diversas equações fundamentais, que englobam desde as reações químicas envolvidas até a transferência de massa e calor dentro do sistema.

## Metodologia

Foram realizados extensos estudos bibliográficos para definir os modelos matemáticos, e as técnicas computacionais, que melhor auxiliariam na simulação de eletrolisadores. A base teórica do simulador fundamenta-se nas equações clássicas da eletroquímica, adaptadas para os tipos de eletrolisadores que são relevantes a esse estudo. A tensão total do eletrolisador,  $V_{cell}$ , é descrita pela equação de Nernst modificada (1), considerando as sobretensões características do processo, sendo  $V_{rev}$  a tensão reversível teórica,  $\eta_{act}$  a sobretensão de ativação,  $\eta_{ohm}$  a sobretensão ôhmica, e  $\eta_{conc}$  a sobretensão de concentração; a tensão reversível (2),  $V_{rev}$ , é calculada considerando a dependência da temperatura através da equação de Nernst, onde  $T$  é a temperatura absoluta,  $R$  é a constante dos gases,  $F$  é a constante de Faraday e  $P$  é a pressão de cada molécula. A sobretensão de ativação, que representa a energia necessária para iniciar as reações eletroquímicas nos eletrodos, é modelada pela equação de Tafel (3), onde  $\alpha$  é o coeficiente de transferência de carga,  $i$  a densidade de corrente operacional, e  $i_0$  a densidade de corrente de troca.

$$V_{cell} = V_{rev} + \eta_{act} + \eta_{ohm} + \eta_{conc} \quad (1)$$

$$V_{rev} = 1,229 - 0,0009 \times (T - 298,15) + \frac{RT}{2F} \ln \left( \frac{P_{H_2} \times P_{O_2}^{0,5}}{P_{H_2O}} \right) \quad (2)$$

$$\eta_{act} = \frac{RT}{\alpha F} \ln \left( \frac{i}{i_0} \right) \quad (3)$$

A sobretensão ôhmica, relacionada à resistência elétrica dos componentes do eletrolisador, é expressa pela lei de Ohm (4). A constante de velocidade,  $k$ , é dada pela equação de Arrhenius (5), fórmula que descreve a dependência de  $k$  de uma reação química pela temperatura absoluta,  $T$ , sendo  $A$  o fator de frequência e  $E_a$  a energia de ativação. A eficiência energética do sistema,  $\eta_{energetica}$ , sendo definida pela equação (6), com a produção de hidrogênio sendo calculada através da lei de Faraday (7), com  $n_{H_2}$  sendo o fluxo molar do hidrogênio,  $\eta_F$  a eficiência faradaica,  $I$  a corrente total, e  $F$  a constante de Faraday.

$$\eta_{ohm} = i \times R_{total} \quad (4)$$

$$k = Ae^{\frac{E_a}{RT}} \quad (5)$$

$$\eta_{energetica} = \frac{V_{rev}}{V_{cell}} \times \eta_F \quad (6)$$

$$\dot{n}_{H_2} = \frac{\eta_F \times I}{2F} \quad (7)$$

Essa modelagem matemática foi implementada em uma aplicação *web* interativa, desenvolvida utilizando tecnologias modernas de desenvolvimento *frontend*; a arquitetura da aplicação baseia-se em React.js, para a *interface* de usuário, com bibliotecas especializadas para cálculos científicos e visualização de dados. A aplicação foi estruturada em módulos funcionais distintos: Módulo de Simulação Estática (1) para análise de condições operacionais fixas, Módulo de Simulação Dinâmica (2) para análises temporais e Módulo de Análise Térmica (3) focado no efeito da temperatura.

The screenshot shows the 'Simulação Estática' (Static Simulation) section of the web application. It includes input fields for various parameters: Temperature (25°C - 80°C), Current Density (1.5 A/cm²), Voltage (2 V), KOH Concentration (30%), and KOH Molarity (6 mol/kg). Below the inputs is a 'Calcular Resultados' (Calculate Results) button.

Figura 1: *Interface* da simulação estática

The screenshot shows the 'Simulação Dinâmica' (Dynamic Simulation) section. It includes configuration options for duration (0 to 1.0 minutes), time step (1 second), and base conditions (Alkaline electrolyte, 80°C, 2 A/cm², 30 bar). At the bottom, there are buttons for 'Iniciar Simulação' (Start Simulation), 'Pausar' (Pause), and 'Parar' (Stop), along with a progress bar and timer.

Figura 2: *Interface* da simulação dinâmica

The screenshot shows the 'Efeito da Temperatura na Produção de Hidrogênio' (Effect of Temperature on Hydrogen Production) section. It includes a configuration panel for parameters like pressure (30 bar), current density (2 A/cm²), voltage (1.8 V), and temperature (40°C). Below it is an 'Analizar Efeito da Temperatura' (Analyze Effect of Temperature) button and an 'Exportar Dados' (Export Data) button.

Figura 3: *Interface* do efeito da temperatura

Além disso, foi desenvolvida uma metodologia sistemática de análise de sensibilidade, visando identificar os parâmetros mais influentes no desempenho dos eletrolisadores, com os dados na tabela 1. Em relação a validação dos modelos implementados, essa foi realizada através de comparação sistemática com dados experimentais reportados na literatura científica especializada. Foram utilizados como referência trabalhos de Bi et al. (2025), sobre os efeitos da temperatura em eletrolisadores alcalinos, e dados de desempenho de eletrolisadores comerciais. Critérios estatísticos foram estabelecidos para aceitação dos modelos, incluindo coeficientes de correlação superiores a 0,95 e erros médios absolutos inferiores a 5% para parâmetros principais.

Parâmetro	Alcalino	PEM	SOEC
Temperatura operacional (°C)	25–80	25–80	até 1000
Densidade de corrente (A/cm <sup>2</sup> )	0,1–2,0	0,1–2,0	–
Pressão operacional (bar)	1–30	1–30	–
Concentração do eletrólito (% KOH)	10–50	–	–
Área ativa dos eletrodos (cm <sup>2</sup> )	1–10000	1–10000	1–10000

Tabela 1: Parâmetros operacionais típicos de diferentes tecnologias de eletrólise da água.

## Resultados e Discussão

Os resultados, obtidos através da implementação da metodologia híbrida, demonstram a eficácia da abordagem desenvolvida para simulação de eletrolisadores, evidenciando o comportamento destes sistemas sob diferentes condições operacionais. A análise abrangente dos dados gerados pelo simulador permitiu identificar padrões de desempenho e otimizações operacionais. A validação dos modelos implementados foi realizada através de comparação sistemática com dados experimentais reportados por Bi et al. (2025) para eletrolisadores alcalinos operando em diferentes temperaturas. Os resultados demonstram excelente concordância entre os valores simulados e experimentais, com coeficientes de correlação superiores a 0,97 para todos os parâmetros analisados. Em relação aos eletrolisadores PEM, a validação foi conduzida utilizando dados de desempenho de sistemas comerciais, demonstrando desvios médios de 2,8% para eficiência energética e 4,1% para consumo específico de energia. Estes resultados confirmam a aplicabilidade dos modelos desenvolvidos para diferentes tecnologias de eletrólise.

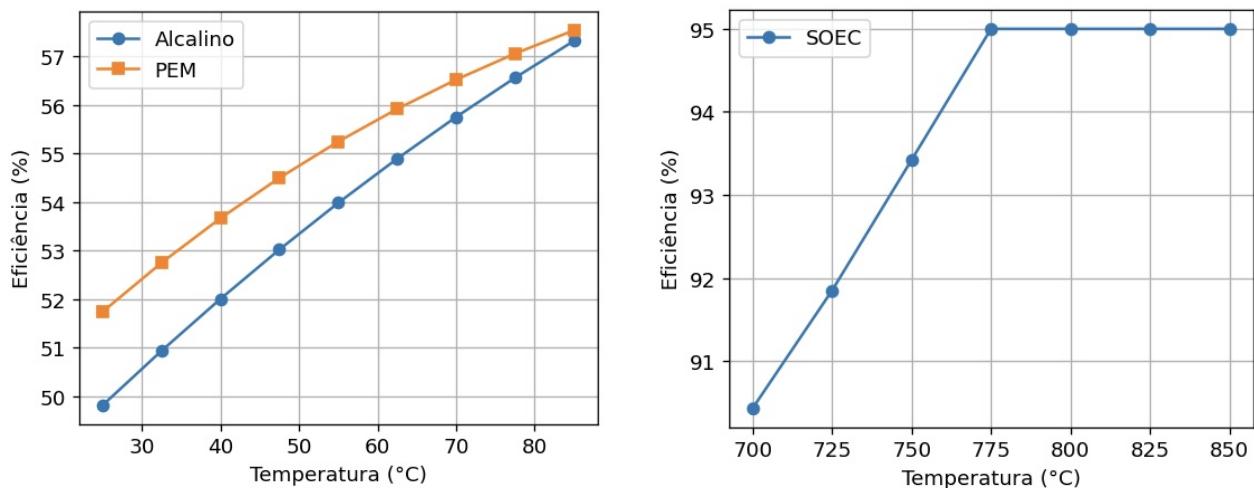


Figura 4: Eficiência energética dos eletrolisadores em relação a temperatura

Este artigo conta com uma investigação sistemática do efeito da temperatura sobre o desempenho dos eletrolisadores, que revelou comportamentos distintos para cada tecnologia analisada. Para eletrolisadores alcalinos, observou-se uma relação não-linear entre temperatura e eficiência energética, onde apresentaram aumento de eficiência de 68,2%, a 25°C, para 82,4%, a 75°C, seu ponto ótimo, representando um ganho de 20,8%, e, acima desta temperatura, observou-se estabilização da eficiência, seguida de ligeiro declínio devido ao aumento das perdas por evaporação e degradação acelerada dos componentes. Os eletrolisadores PEM demonstraram comportamento similar, porém com temperatura ótima ligeiramente inferior, em 70°C, alcançando eficiência máxima de 79,6%; a menor temperatura ótima para sistemas PEM relaciona-se às limitações térmicas da membrana

polimérica, que pode sofrer degradação acelerada em temperaturas elevadas. Ainda, para eletrolisadores SOEC, operando em faixa de temperatura significativamente superior, entre 700-1000°C, observou-se comportamento distinto, com eficiência crescente até aproximadamente 850°C, atingindo valores superiores a 95%. A alta eficiência dos sistemas SOEC justifica-se pela utilização de vapor superaquecido e pela cinética reacional favorecida pelas altas temperaturas.

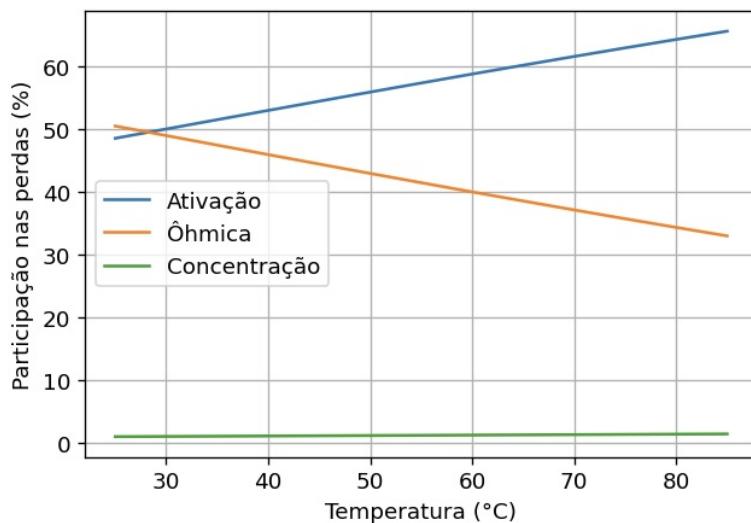


Figura 5: Distribuição percentual das sobretensões em função da temperatura

No que se refere as sobretensões, a decomposição em seus componentes fundamentais, de ativação, ôhmica e concentração, forneceu compreensões indispensáveis sobre os mecanismos limitantes do desempenho. Em baixas temperaturas, a sobretensão de ativação domina o comportamento do sistema, representando aproximadamente 45% das perdas totais e, com o seu aumento, observa-se redução significativa dessa componente, que diminui para 28% a 75°C; essa redução relaciona-se diretamente ao aumento da cinética das reações eletroquímicas com a temperatura, conforme previsto pela equação de Arrhenius. Foi feito, também, a análise de otimização multiobjetivo identificou condições operacionais que maximizam eficiência energética enquanto minimizam custos operacionais. Para eletrolisadores alcalinos, as condições ótimas identificadas incluem temperatura operacional de 72-76°C, densidade de corrente de 1,2-1,4A/cm<sup>2</sup>, concentração de KOH de 28-32%, e pressão operacional de 15-20 bar. Estas condições resultam em eficiência energética de 81,2% e consumo específico de 4,2kWh/Nm<sup>3</sup>, representando melhorias de 19,3% e 27,6%, respectivamente, em relação a condições operacionais convencionais. A análise econômica preliminar indica que a operação em condições otimizadas pode reduzir o custo de produção de hidrogênio em 22-28%, considerando apenas os custos energéticos.

### Conclusão

Os resultados obtidos demonstram a eficácia da abordagem metodológica adotada neste estudo, com análise abrangente do desempenho de eletrolisadores alcalinos, PEM e SOEC, fornecendo entendimento sobre otimização operacional e efeitos climáticos regionais. A validação sistemática dos modelos matemáticos implementados estabelece a credibilidade científica da ferramenta desenvolvida e confirma a precisão dos modelos teóricos adotados e sua adequação para aplicações científicas e industriais. A investigação detalhada do efeito da temperatura sobre o desempenho dos eletrolisadores revelou comportamentos não-lineares complexos, com identificação de temperaturas ótimas específicas para cada tecnologia, demonstrando o potencial significativo de otimização térmica para redução de custos operacionais. Já a análise de simulação dinâmica revelou características temporais importantes para aplicações práticas, informações que são cruciais para integração com fontes renováveis intermitentes e desenvolvimento de estratégias de controle otimizadas. Além disso, a otimização multiobjetivo conduziu à identificação de condições operacionais que maximizam eficiência energética enquanto minimizam custos operacionais, resultando em melhorias de desempenho de eficiência e em consumo específico de energia, com potencial de redução de custos de produção de hidrogênio de 15-20%. Do ponto de vista metodológico, a abordagem híbrida desenvolvida representa avanço significativo na democratização de ferramentas de simulação cien-

tífica, tornando análises complexas acessíveis através de interface web intuitiva sem comprometer o rigor científico. As contribuições científicas e tecnológicas desse estudo estendem-se além do desenvolvimento da ferramenta de simulação, incluindo a geração de dados quantitativos originais sobre desempenho de eletrolisadores em condições tropicais e validação abrangente de modelos matemáticos.

## Agradecimentos

Os autores expressam sinceros agradecimentos ao Prof. Dr. Paulo Henrique Pereira Silva pela orientação acadêmica, supervisão científica e valiosas contribuições para o desenvolvimento desta pesquisa; agradecemos também ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro ao projeto.

## Referências

SALIBA-SILVA, Adonis Marcelo; CARVALHO, Fátima M. S.; BERGAMASCHI, Vanderlei Sérgio; OLIVEIRA SILVA, Marco Antonio; LINARDI, Marcelo. Non-carbogenic production of hydrogen by water electrolysis in Brazilian perspective. **Revista Brasileira de Pesquisa e Desenvolvimento**, São Paulo, v. 12, n. 2, p. 66-78, ago. 2010.

**Green hydrogen technology: evaluation criteria for electrolyser selection.** EPCM Holdings, 2023. Disponível em: <https://epcmholdings.com/green-hydrogen-technology-evaluation-criteria-for-electrolyser-selection/>. Acesso em: 03 mar. 2025.

MOREIRA, José Roberto Simões *et al.* **Energias renováveis, geração distribuída e eficiência energética.** 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2017.

EL-SHAFIE, Mostafa. Hydrogen production by water electrolysis technologies: A review. **Results in Engineering**, v. 20, p. 101426, 2023. Disponível em: [https://www.researchgate.net/publication/374043994\\_Hydrogen\\_production\\_by\\_water\\_electrolysis\\_technologies\\_A\\_review](https://www.researchgate.net/publication/374043994_Hydrogen_production_by_water_electrolysis_technologies_A_review).

BI, Xiaobing; WANG, Gan; CUI, Daan; QU, Xinyi; SHI, Shuaishuai; YU, Dong; CHENG, Mojie; JI, Yulong. Simulation study on the effect of temperature on hydrogen production performance of alkaline electrolytic water. **Fuel**, v. 380, p. 133209, 2025. DOI: [10.1016/j.fuel.2024.133209](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.133209).

AZUAN, Mohamad; YAHAYA, Nor Zaihar; MELINDA, Amelia; UMAR, Muhammad Wasif. Effect of temperature on performance of advanced alkaline electrolyzer. **Science International (Lahore)**, v. 31, n. 5, p. 757–762, set.–out. 2019. Disponível em: [www.sci-int.com/pdf/637054513794717651.pdf](http://www.sci-int.com/pdf/637054513794717651.pdf).

AULAKH, Deepinder Jot Singh; BOULAMA, Kiari Goni; PHAROAH, Jon G. On the reduction of electric energy consumption in electrolysis: A thermodynamic study. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 33, p. 17084–17096, 2021. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2021.02.161](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.02.161).

ZENG, Kai; ZHANG, Dongke. Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 36, n. 3, p. 307–326, 2010. DOI: [doi.org/10.1016/j.pecs.2009.11.002](https://doi.org/10.1016/j.pecs.2009.11.002).

CARMO, Marcelo; FRITZ, David L.; MERGEL, Jürgen; STOLTEN, Detlef. A comprehensive review on PEM water electrolysis. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 38, p. 4901–4934, 2013. DOI: [doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.01.151](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.01.151).

LAGUNA-BERCERO, M. A. Recent advances in high temperature electrolysis using solid oxide fuel cells: a review. **Journal of Power Sources**, v. 203, p. 4–16, 2012. DOI: [10.1016/j.jpowsour.2011.12.019](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.12.019).