

Simulação numérica eletroquímica do desempenho do eletrolisador PEM: um estudo comparativo de membranas Nafion.

Roberto Didier Oliveira Filho^{a*}, Jornandes Dias Da Silva^b, Rogério Pontes de Araujo^{a,b}

^aEscola Politécnica - UPE, Laboratório de Tecnologia Ambiental e Energética; Rua Benfica – 455, Madalena, Recife - PE, Brasil, Cep: 50750-470.

*autor correspondente: roberto.oliveirafa@upe.br; rdof@poli.br.

RESUMO

A produção de hidrogênio verde via eletrólise é fundamental para a transição energética sustentável. Este trabalho apresenta uma modelagem matemática eletroquímica e termodinâmica do desempenho de um eletrolisador PEM, com foco no estudo comparativo das membranas Nafion 212 (50 μm), 115 (127 μm) e 117 (183 μm). Utilizando simulação numérica, o modelo avalia a tensão da célula sob condições críticas de pressão (cátodo a 31 bar e ânodo a 1 bar) e temperaturas de 60 °C a 80 °C. Os resultados demonstram que a membrana Nafion 212 (50 μm), apresenta a maior eficiência energética e exérgica, além de menor resistência ôhmica. Em contrapartida, membranas mais espessas resultam em maior consumo energético e geração de calor. Conclui-se que a modelagem quantifica o compromisso entre eficiência e durabilidade estrutural, fornecendo a base matemática necessária para testes em eletrolisador PEM para gestão de sistemas de energia.

Palavras-chave: Hidrogênio verde; Eletrolisador PEM; Membrana Nafion; Simulação numérica; Eficiência energética.

1. Introdução

A crescente demanda por soluções energéticas sustentáveis tem impulsionado o desenvolvimento de alternativas que reduzam as emissões de gases de efeito estufa e promovam a transição para uma economia de baixo carbono. Nesse contexto, o hidrogênio verde tem se destacado como um vetor energético promissor, produzido por meio da eletrólise da água utilizando fontes de energia renováveis (Iqbal et al., 2024). Com um alto poder calorífico superior (141,88 MJ/kg) comparado aos combustíveis fósseis convencionais, possui um imenso potencial para a descarbonização de setores industriais difíceis de abater. No cenário brasileiro, que possui uma matriz elétrica majoritariamente renovável, o país apresenta uma vantagem competitiva global para a produção em larga escala (EPE, 2021).

Dentre as tecnologias disponíveis, os eletrolisadores de Membrana de Troca de Prótons (PEM – Proton Exchange Membrane) ganharam destaque comercial devido à sua alta eficiência, design compacto e capacidade de operar sob densidades de corrente elevadas (Kumar e Himabindu, 2019).

Contudo, o alto custo dos testes em escala industrial representa um gargalo tecnológico (Bazarah et al., 2022). Para superar essa barreira, a modelagem computacional emerge como uma ferramenta essencial (Benmehel et al., 2024). O propósito deste trabalho é desenvolver um modelo fenomenológico eletroquímico e termodinâmico para simular o desempenho de um eletrolisador PEM. O foco é uma análise de sensibilidade da espessura do eletrólito polimérico, avaliando membranas comerciais da série Nafion (212, 115 e 117) em diferentes regimes térmicos, fornecendo bases matemáticas para a futura implementação de Gêmeos Digitais (Digital Twins) na gestão de sistemas de energia (Folgado et al., 2023; Monopoli et al., 2024).

2. Formulação do problema

A caracterização termodinâmica e eletroquímica do eletrolisador PEM baseia-se na análise da tensão requerida para o processo de eletrólise. A modelagem adotada decompõe a tensão total consumida pela célula na soma da tensão termodinâmica reversível de Nernst e de três perdas irreversíveis (sobrepotenciais). A formulação descreve as resistências cinéticas, de transporte de massa e a resistência iônica através do eletrólito polimérico, permitindo prever o comportamento global da célula sob diferentes condições operacionais de temperatura e espessura física do polímero (Saidi et al., 2025). O princípio de funcionamento do sistema e a disposição estrutural de seus componentes eletroquímicos, que embasam o equacionamento deste problema, estão ilustrados no

Realização:



diagrama esquemático da Figura 1 e o equipamento que forneceu os dados de entrada para simulação está representado na Figura 2.

Figura 1. Representação da eletrólise realizado pelo Eletrolisador PEM.

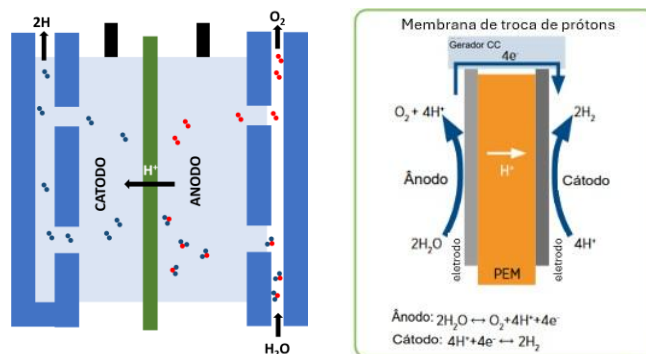


Figura 2. Eletrolisador PEM do SENAI Park Pernambuco.



3. Metodologia

A abordagem metodológica baseia-se na simulação numérica quantitativa do comportamento do eletrolisador PEM, implementada através da linguagem Python (Saidi et al., 2025). A modelagem adotada decompõe as equações abaixo e demais parâmetros termodinâmicos, resolvendo-as de forma iterativa. A tensão total da célula (V_{cell}) é o somatório do potencial de circuito aberto (V_{oc}) e dos sobrepotenciais de ativação (V_{act}), ôhmico (V_{ohm}) e de difusão (V_{diff}), expressos conforme a Equação (1). (Benmehel et al., 2024; Saidi et al., 2025):

$$V_{cell} = V_{oc} + V_{act} + V_{ohm} + V_{diff} \quad (1)$$

A tensão de circuito aberto ou potencial reversível (V_{oc}), dependente da temperatura de operação (T) em Kelvin e das pressões parciais no cátodo e ânodo, estabelece a diferença de potencial termodinâmica mínima, dada pela Equação (2) baseada na equação de Nernst (Saidi et al., 2025):

$$V_{oc} = 1,229 - 8,50 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 298,15) + \frac{R \cdot T}{n \cdot F} \cdot \ln(P_{H_2} \cdot P_{O_2})^{1/2} \quad (2)$$

O sobrepotencial de ativação (V_{act}) reflete a energia dissipada na cinética de transferência de carga nos eletrodos (ânodo e cátodo), utilizando a aproximação de Butler-Volmer na Equação (3, 4 e 5), abaixo, em função da densidade de corrente (J), da densidade de corrente de troca (J_0) e do coeficiente de transferência de carga (α) (Saidi et al., 2025):

$$V_{act} = V_{act,an} + V_{act,cat} \quad (3)$$

$$v_{act,an} = \frac{RT_{an}}{F} \cdot \sin h^{-1} \left[\frac{J}{2J_{0,an}} \right] \quad (4)$$

$$v_{act,cat} = \frac{RT_{cat}}{F} \cdot \sin h^{-1} \left[\frac{J}{2J_{0,cat}} \right] \quad (5)$$

O sobrepotencial ôhmico da membrana (V_{ohm}^{mem}) contabiliza a resistência iônica ao transporte de prótons e é expresso pelo produto da resistência da membrana (R_{mem}) pela densidade de corrente (J), de acordo com a Equação (6) (Saidi et al., 2025).

$$V_{ohm}^{mem} = R_{mem} \cdot J \quad (6)$$

Assumindo um teor de água uniforme, a resistência é diretamente proporcional à espessura da membrana (δ_{mem}) e inversamente proporcional à sua condutividade (σ_{mem}), conforme a Equação (7) (Benmehel et al., 2024; Saidi et al., 2025):

$$R_{mem} = \frac{\delta_{mem}}{\sigma_{mem}} \quad (7)$$

A condutividade específica da membrana Nafion (σ_{mem}) é modelada empiricamente pela Equação (8), em função de seu grau de umidificação (λ) e da temperatura referenciada a 303 K (Saidi et al., 2025):

$$\sigma_{mem}(\lambda_{(x)}) = (0,005139\lambda_{(x)} - 0,00326) \cdot \exp \left(1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right) \quad (8)$$

Para a solução numérica do modelo, a simulação realizou uma varredura progressiva da densidade de corrente (J) no intervalo de 0,1 a 2,0 A/cm² (Bornemann et al., 2025). Para isolar os efeitos térmicos e dimensionais na resistência celular, o conteúdo de água na membrana foi fixado como constante ($\lambda=22$). Visando reproduzir cenários industriais críticos de gas crossover, as condições de contorno de pressão foram estabelecidas assimetricamente em 31 bar no cátodo (lado do H₂) e 1 bar no ânodo (lado do O₂). A rotina computacional resolveu o modelo independentemente para três espessuras de membranas da série Nafion: 212 (50 µm), 115 (127 µm) e 117 (183 µm), extraindo os resultados de tensão e sobrepotenciais ao longo de três estágios de temperatura (60 °C, 70 °C e 80 °C) (Saidi et al., 2025).

4. Resultados e Discussão

Neste capítulo, apresentam-se e discutem-se os resultados numéricos obtidos por meio da modelagem eletroquímica e termodinâmica desenvolvida para simular o desempenho do eletrolisador PEM. O foco central reside no estudo comparativo das membranas comerciais da série Nafion 212 (50 µm), 115 (127 µm) e 117 (183 µm), avaliando como a variação da espessura física do polímero e as condições operacionais térmicas influenciam a eficiência global do sistema.

A análise decompõe a voltagem total da célula para identificar o impacto das irreversibilidades (sobrepotenciais de ativação, ôhmico e de difusão) em diferentes regimes de densidade de corrente, permitindo prever o comportamento termodinâmico do equipamento sob estresse. Para estruturar esta avaliação de forma lógica, a seção inicia-se com a definição das constantes e parâmetros de controle que alimentam o algoritmo computacional. Em seguida, realiza-se o ajuste e a discussão das curvas de polarização e de eficiência extraídas na saída do modelo. Através desta abordagem, busca-se quantificar o compromisso (trade-off) existente entre a otimização energética promovida por eletrólitos mais finos e a robustez operacional contra o crossover de gases exigida por membranas mais espessas.

2.1. Parâmetros do modelo matemático

Para isolar os efeitos térmicos e dimensionais, a simulação realizou uma varredura da densidade de corrente de 0,1 a 2,0 A/cm² sob condições críticas de pressão. O estudo avaliou três espessuras de membrana em três faixas térmicas diferentes. As condições operacionais, constantes físicas e parâmetros eletroquímicos modelados para a alimentação do algoritmo computacional estão sumarizados na Tabela 1 (Saidi et al., 2025).

Tabela 1. Parâmetros da Simulação Numérica.

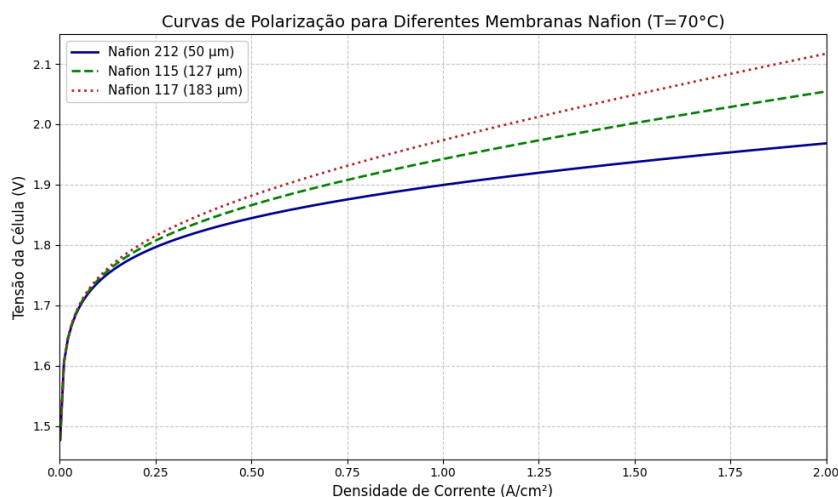
Parâmetro	Unidade	Valor adotado
Densidade de corrente (J)	A/cm ²	0,1 a 2,0
Temperatura de operação (T)	°C	60, 70 e 80
Pressão no cátodo / ânodo (P _{H₂} /P _{O₂})	bar	31 / 1
Espessuras (Nafion 212, 115, 117)	µm	50, 127 e 183
Conteúdo de água no anodo (λ)	-	22
Constante universal dos gases (R)	J/(mol·K)	8,314
Constante de Faraday (F)	C/mol	96.485
Número de elétrons transferidos (n)	-	2
Coeficiente de transferência de carga (α)	-	0,5
Densidade de corrente de troca anódica (J _{0,an})	A/m ²	10 ⁻³
Densidade de corrente de troca catódica (J _{0,cat})	A/m ²	0,1
Área ativa da membrana (A)	cm ²	160

2.2. Ajuste das Curvas na Saída

Os ajustes das curvas geradas na saída do modelo validam a forte correlação entre as propriedades físicas da membrana e as respostas termodinâmicas do equipamento. Inicialmente, a condutividade iônica da membrana Nafion revelou-se matematicamente independente de sua espessura, aumentando linearmente com o ganho de temperatura (atingindo aproximadamente 0,199 S/cm a 80 °C). Consequentemente, a resistência ôhmica da célula diminui em regimes térmicos mais elevados, mas cresce proporcionalmente à espessura do eletrólito polimérico, impactando as perdas do sistema (Saidi et al., 2025).

A avaliação do desempenho global evidenciou que membranas mais espessas demandam os maiores níveis de tensão para qualquer densidade de corrente. A Figura 3, abaixo, ilustra as curvas de polarização para a temperatura fixa de 70 °C, comparando as três espessuras modeladas.

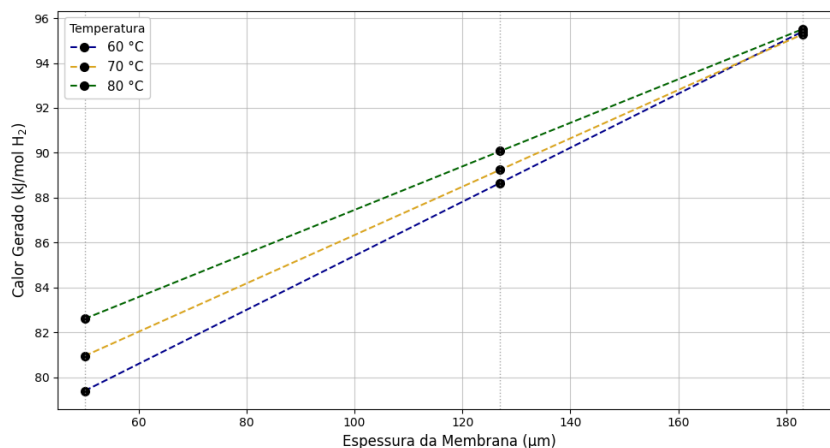
Figura 3. Comportamento eletroquímico.



Como observado, a membrana Nafion 117 (183 µm) gerou a curva de saída de tensão mais elevada devido ao seu caminho mais longo para o transporte de prótons, acarretando as maiores perdas ôhmicas. Em contrapartida, a curva da Nafion 212 (50 µm) atestou sua superioridade em eficiência de tensão. No tocante ao balanço energético, o modelo confirmou as implicações operacionais do trade-off no design eletrolítico. Como a energia elétrica não convertida em reações químicas devido aos sobrepotenciais é dissipada na forma de calor, as simulações comprovaram que membranas mais espessas atuam como potentes geradores de calor residual. A Figura 4, as seguir, demonstra a relação direta entre a espessura da membrana e o calor gerado sob diferentes temperaturas operacionais em uma densidade de corrente fixa de 1,0 A/cm².

Figura 4. Gestão térmica.

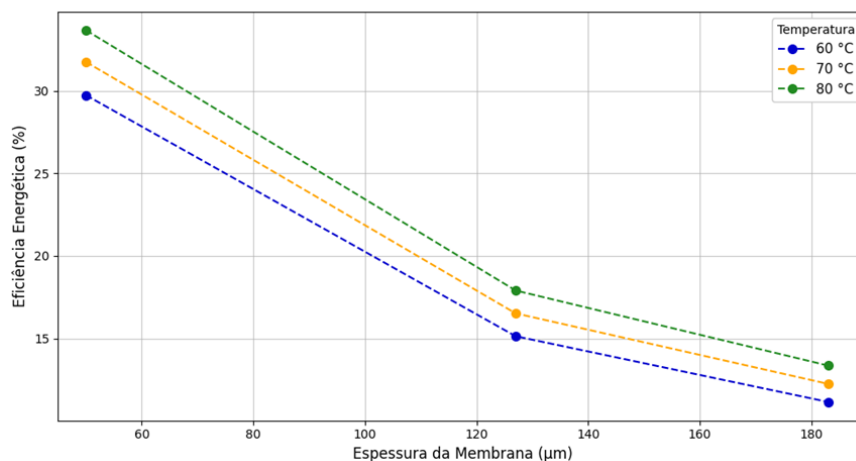
Calor Gerado vs. Espessura da Membrana
($i = 1.0 \text{ A/cm}^2$)



Fica evidente que a Nafion 117 pode dissipar mais de 2.000 kJ/mol de H_2 em baixas temperaturas e altas cargas, o que exigiria um dimensionamento complexo e dispendioso do sistema de resfriamento do Balanço de Planta (BoP) para manter a operação segura (Bornemann et al., 2025). Por outro lado, a elevação da temperatura para 80 °C mitigou parcialmente essa geração de calor em todos os cenários. Consequentemente, as perdas ôhmicas e a dissipação térmica impactam diretamente a viabilidade termodinâmica global do sistema. A Figura 5 detalha a queda da eficiência energética em função do aumento da espessura da membrana.

Figura 5. Termodinâmica e Trade-off.

Eficiência Energética vs. Espessura da Membrana (Nafion)
($i = 1.0 \text{ A/cm}^2$)



A membrana Nafion 212 apresentou taxas superiores de eficiência, aproximando-se de 35% de eficiência energética (e cerca de 30% de eficiência exergética) quando operada no seu limite térmico de 80 °C. Em contraste, as eficiências da Nafion 117 foram significativamente menores e altamente penalizadas por sua resistência ôhmica intrínseca. Contudo, os ajustes demonstraram que o aumento das temperaturas operacionais ajustou a inclinação das curvas, minorando as perdas de ativação e mitigando parcialmente o déficit resistivo para todas as três membranas estudadas, consolidando-se como um parâmetro de controle essencial para a operação otimizada de eletrolisadores (Bornemann et al., 2025; Saidi et al., 2025).

5. Conclusões

O modelo matemático eletroquímico e termodinâmico desenvolvido descreveu com acurácia a relação das irreversibilidades em um eletrolisador PEM. Os resultados atestam quantitativamente que a espessura da membrana dita o nível de perda por resistência celular, configurando um clássico trade-off de projeto: para a otimização das eficiências energética e exergetica, devem ser adotadas membranas delgadas (como a Nafion 212) operando no limite térmico superior (80 °C), o que minimiza o sobrepotencial ôhmico. Em contrapartida, caso a operação exija extrema prevenção contra o crossover de gases, a adoção de membranas mais espessas (Nafion 117) demandará sistemas auxiliares complexos de resfriamento do Balanço de Planta (BoP) para lidar com a alta dissipação térmica resultante (que pode superar 2.000 kJ/mol de H₂).

A principal limitação inerente a este estudo reside na adoção de um modelo de estado estacionário unidimensional, que não contabiliza fatores de degradação físico-química da membrana (thinning) ao longo do tempo, nem os efeitos transientes de alimentação decorrentes da flutuação de fontes renováveis. Como perspectiva futura e recomendação para a comunidade de Engenharia de Sistemas em Processos, sugere-se a extrapolação desta modelagem mediante a incorporação de equações de degradação temporal e algoritmos de controle dinâmico. Essa evolução fornecerá a base arquitetural para o desenvolvimento de Gêmeos Digitais (Digital Twins) acoplados à Internet Industrial das Coisas (IIoT), permitindo o diagnóstico de falhas, a otimização preditiva e o gerenciamento térmico em tempo real de usinas de hidrogênio verde.

Agradecimentos: Os autores deste trabalho gostariam de agradecer ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pelo apoio financeiro concedido (Processo 48354/2024) e a Diretoria Industrial do SENAI PE pelas informações sobre o Eletrolisador PEM localizado no SENAI Park, que é um equipamento de inovação e tecnologia instalado no Complexo Industrial Portuário de Suape, em Ipojuca.

Referências

- A. Bazarah, E. H. Majlan, T. Husaini, A. M. Zainoodin, I. Alshami, J. Goh e M. S. Masdar: Factors influencing the performance and durability of polymer electrolyte membrane water electrolyzer: A review, *Int. J. Hydrogen Energy* (47), 35976-35989, 2022.
- A. Benmehel, S. Chabab, A. L. D. N. Rocha, M. Chepy e T. Kousksou: PEM water electrolyzer modeling: Issues and reflections, *Energy Convers. Manage.*: X (24), 100738, 2024.
- L. Bornemann, J. Lange e M. Kaltschmitt: Optimizing temperature and pressure in PEM electrolyzers: A model-based approach to enhanced efficiency in integrated energy systems, *Energy Convers. Manage.* (325), 119338, 2025.
- EPE - Empresa de Pesquisa Energética: Bases for the Consolidation of the Brazilian Hydrogen Strategy. No EPE-DEA-NT-003/2021 rev01, 2021.
- F. J. Folgado, I. González e A. J. Calderón: Data acquisition and monitoring system framed in Industrial Internet of Things for PEM hydrogen generators, *Internet of Things* (22), 100795, 2023.
- S. Iqbal, K. Aftab, F. t. Jannat, M. A. Baig e U. Kalsoom: A bibliographic analysis of optimization of hydrogen production via electrochemical method using machine learning, *Fuel* (372), 132126, 2024.
- S. S. Kumar e V. Himabindu: Hydrogen production by PEM water electrolysis—A review, *Mater. Sci. Energy Technol.* (2), 442-454, 2019.
- D. Monopoli, C. Semeraro, M. A. Abdelkareem, A. H. Alami, A. G. Olabi e M. Dassisi: How to build a Digital Twin for operating PEM-Electrolyser system – A reference approach, *Annu. Rev. Control* (57), 100943, 2024.
- S. Saidi, T. Brahim, O. Rejeb e A. Jemni: Electrochemical and thermodynamic modeling of PEM electrolyzer performance: A comparative study with and without diffusion overpotential, *Int. J. Hydrogen Energy* (128), 697-712, 2025.