

Modelagem do Sobrepotencial de Ativação em Eletrolisadores PEM: Sensibilidade Paramétrica à Contaminação Iônica

Guilherme de França Machado^{a,*}, Ana Livia Fernandes Fonseca^a, José Oniram de Aquino Limaverde Filho^b,
Helena Bispo^c, Marcílio Máximo da Silva^d, Hiuquem Monteiro Lopes^c

^a Universidade de Brasília, Instituto de Química, Brasília-DF, Brasil

^b Universidade de Brasília, Departamento de Engenharia Elétrica, Brasília-DF, Brasil

^c Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências de Tecnologia, Campina Grande-PB, Brasil

^d Instituto Federal da Paraíba, Diretoria de Desenvolvimento de Ensino, Campina Grande-PB, Brasil

* machado.franca@aluno.unb.br

RESUMO

Este estudo propõe a incorporação explícita do sobrepotencial de ativação catódico, frequentemente negligenciado em abordagens convencionais, na modelagem de eletrolisadores de água por Membrana de Troca de Prótons (PEM). Por meio de uma análise de sensibilidade à fração da área superficial das nanopartículas catalíticas efetivamente em contato com a membrana, foram explorados os efeitos na produtividade de gás hidrogênio em caso de contaminação por íons. Os resultados evidenciam um comportamento não linear, caracterizado por uma região inicial de baixa sensibilidade à contaminação, seguida por um regime de degradação acelerada, no qual a perda de área ativa resulta em aumento acentuado do sobrepotencial e redução significativa da produção de hidrogênio. Tais evidências destacam a importância de representar explicitamente os efeitos de contaminação na modelagem fenomenológica de eletrolisadores PEM.

Palavras-chave: Hidrogênio verde; Eletrolisador PEM; Contaminação iônica; Análise de sensibilidade

1 Motivação

A eletrólise da água por Membrana de Troca de Prótons (PEM) destaca-se como uma das tecnologias mais promissoras para a produção de hidrogênio verde. Isso se deve à possibilidade de operação em elevadas densidades de corrente, permitindo a geração de grandes volumes de gás em sistemas compactos e adequados à escala industrial. Entretanto, sua aplicação comercial em larga escala ainda é limitada pelos altos custos dos materiais empregados e pelos desafios relacionados à durabilidade e degradação dos componentes. Nesse contexto, a modelagem matemática e a simulação computacional assumem papel fundamental ao permitir a previsão do comportamento do sistema e otimizar sua operação sem a necessidade de extensivos testes experimentais.

A tensão operacional de um eletrolisador PEM é classicamente descrita como a soma da tensão reversível de circuito aberto e das irreversibilidades inerentes ao processo, representadas pelos sobrepotenciais ôhmico, de difusão e de ativação (Newman e Balsara, 2021). Dentre esses termos, o sobrepotencial de ativação corresponde à energia adicional necessária para superar as barreiras cinéticas e viabilizar as reações eletroquímicas nos eletrodos, sendo composto, de forma geral, pela soma das contribuições do ânodo e do cátodo.

Na eletrólise da água, a contribuição de cada eletrodo para essa perda energética é assimétrica: a Reação de Evolução de Oxigênio (OER), no ânodo, tipicamente baseado em irídio, é intrinsecamente lenta e requer elevado sobrepotencial, enquanto a Reação de Evolução de Hidrogênio (HER), no cátodo, usualmente à base de platina, apresenta cinética significativamente mais rápida (Espinosa-López et al., 2018). Em razão dessa assimetria cinética, muitos modelos matemáticos simplificam o sistema ao assumir que o sobrepotencial de ativação catódico é negligenciável frente ao sobrepotencial de ativação anódico.

Essa premissa, no entanto, deixa de ser válida quando se consideram os efeitos da degradação por impurezas. Na prática, a contaminação da água pode ocorrer por duas vias principais: exógena, associada à entrada de íons residuais da alimentação, como Na^+ e Ca^{2+} , em decorrência da saturação ou falha dos sistemas de purificação; e endógena, relacionada à lixiviação de tubulações e componentes do sistema, liberando cátions como Fe^{3+} , Cu^{2+} e Ni^{2+} . Sob a ação do campo elétrico interno, esses cátions migram através da membrana e tendem a se acumular na camada catalítica catódica (Dizon & Weber, 2025). Nesse ambiente, ocorre a substituição de prótons (H^+)

associados aos grupos sulfônicos ($-SO_3^-$) do ionômero, além do bloqueio parcial da interface entre o ionômero e as nanopartículas de platina. Como consequência, o transporte de prótons até os sítios reativos é significativamente restringido, comprometendo a cinética da HER e elevando o sobrepotencial necessário para sustentar uma mesma densidade de corrente.

Estudos experimentais, como os de Grigoriev et al., 2014 e Sun et al., 2014, evidenciam o acúmulo progressivo de contaminantes iônicos, especialmente cálcio, na membrana e nas camadas catalíticas após longos períodos de operação. Em complemento, ao investigar os efeitos do Fe^{3+} em concentrações da ordem de 1 ppm, Li et al., 2019 demonstraram que o envenenamento da célula pode ocorrer de forma rápida e severa. Em ensaios com duração aproximada de 800 horas, observou-se a migração contínua do ferro através da membrana, com posterior acúmulo no cátodo, comprometendo significativamente a cinética da reação catódica e a integridade da membrana. Esse conjunto de efeitos se traduz em aumento do sobrepotencial de ativação catódico, indicando que a hipótese de desprezar a contribuição da HER deixa de ser válida na presença de contaminação iônica. Ainda assim, esse efeito permanece pouco explorado em modelos convencionais.

Diante desse cenário, o presente trabalho propõe a modelagem dos efeitos de contaminantes iônicos na operação de eletrolisadores PEM, com ênfase na contribuição cinética catódica. Partindo de um modelo generalista da tensão operacional da célula, o estudo introduz um refinamento no termo de sobrepotencial de ativação catódico, ao incorporar explicitamente os efeitos da perda de área eletroquimicamente ativa induzida por contaminantes. Para isso, uma análise de sensibilidade da fração de área eletroquimicamente ativa do cátodo é conduzida no software AVEVA Process Simulation (APS) de modo a quantificar como a perda de sítios reativos impacta o desempenho e a eficiência global do sistema.

2 Metodologia

A capacidade de produção de hidrogênio em eletrolisadores PEM é governada pela Lei de Faraday, que relaciona a vazão molar de hidrogênio produzido ($\dot{n}_{H_2}$) com a corrente elétrica total no sistema (I_{stack}), como observado na Equação (1).

$$\dot{n}_{H_2} = \eta_F \cdot \frac{n_{cell} \cdot I_{stack}}{2 \cdot F} \quad (1)$$

onde n_{cell} é o número de células no stack, η_F é a eficiência de Faraday, I_{stack} é a corrente elétrica de operação e F é a constante de Faraday. A eficiência de Faraday, que representa a fração da carga elétrica efetivamente convertida em hidrogênio, pode ser modelada como função da densidade de corrente, conforme proposto em Tijani e Rahim, 2016.

Observa-se que a taxa de produção de hidrogênio depende diretamente da corrente elétrica no eletrolisador (I_{stack}). Em aplicações práticas, essa corrente pode ser expressa como a razão entre a potência elétrica disponível e a tensão total do eletrolisador (V_{stack}).

Sob a hipótese de condições moderadas de corrente (García-Valverde et al., 2012), a tensão total do eletrolisador decorre da soma da tensão reversível e das perdas irreversíveis associadas aos fenômenos eletroquímicos do sistema:

$$V_{stack} = n_{cell} \cdot (V_{rev} + \eta_{ohm} + \eta_{act,A} + \eta_{act,C}) \quad (2)$$

em que n_{cell} é o número de células do eletrolisador, V_{rev} é o potencial reversível, e η_{ohm} , $\eta_{act,A}$, $\eta_{act,C}$ correspondem, respectivamente, aos sobrepotenciais ôhmico, de ativação anódico e de ativação catódico.

O potencial reversível de circuito aberto (V_{rev}) representa a energia termodinâmica mínima requerida para a quebra da molécula de água. Para refletir a sua dependência com a temperatura de operação, adotou-se a correlação empírica proposta por Agbli et al., 2011, como apresentado na Equação (3):

$$V_{rev} = 1,5184 - 1,5421 \times 10^{-3} \cdot T + 9,523 \times 10^{-5} \cdot T \cdot \ln(T) + 9,84 \times 10^{-8} \cdot T^2 \quad (3)$$

onde a temperatura T é expressa em Kelvin.

As perdas por resistência ao transporte iônico compõem o sobrepotencial ôhmico (η_{ohm}), sendo predominantemente governadas pela resistência da membrana à condução de prótons. Esse termo pode ser expresso como se segue:

$$\eta_{ohm} = \frac{t_m}{\sigma} \cdot i \quad (4)$$

onde t_m é a espessura da membrana, σ é a condutividade protônica do eletrólito polimérico e i é a densidade de corrente geométrica.

A condutividade protônica da membrana polimérica (Nafion[®]) depende fortemente da temperatura e do grau de hidratação do material. Neste trabalho, adota-se a correlação pseudo-empírica proposta por Bispo, 2023, que descreve σ como função da temperatura e do número de moléculas de água por grupo sulfônico, representado pelo grau de hidratação da membrana (λ), conforme a Equação (5).

$$\sigma = \left(8,569 \times 10^{-4} \cdot e^{13,397 \times 10^{-3} T}\right) \cdot \ln(\lambda) - \left(9,168 \times 10^{-4} \cdot e^{13,523 \times 10^{-3} T}\right) \quad (5)$$

Para descrever as perdas cinéticas associadas à transferência de carga nos eletrodos, emprega-se a equação de Butler–Volmer, assumindo-se uma etapa determinante da velocidade (do inglês, *rate-determining step*) com barreira de ativação simétrica. Nesse contexto, adotam-se coeficientes de transferência de carga iguais para os ramos anódico e catódico, isto é, $\beta_A = \beta_C = 0,5$. Fisicamente, essa hipótese implica que o potencial aplicado contribui de forma equivalente para a redução das barreiras energéticas nos sentidos direto e inverso da reação. Sob essa hipótese, a equação de Butler–Volmer pode ser invertida, resultando na expressão apresentada na Equação (6), que permite calcular explicitamente o sobrepotencial de ativação em cada eletrodo.

$$\eta_{act,k} = \frac{R \cdot T}{v_k \cdot \beta_k \cdot F} \cdot \operatorname{arcsinh}\left(\frac{i}{2 \cdot i_{0,k}}\right) \quad (6)$$

onde o índice $k \in \{A, C\}$ identifica, respectivamente, os eletrodos ânodo (A) e cátodo (C). Além disso, R é a constante universal dos gases, T a temperatura de operação, F a constante de Faraday, i a densidade de corrente geométrica, v_k o número de elétrons transferidos na etapa determinante e $i_{0,k}$ a densidade de corrente de troca no eletrodo k .

Neste trabalho, a densidade de corrente de troca $i_{0,k}$ não é tratada apenas como um parâmetro empírico ajustável. Em vez disso, adota-se o particionamento proposto por Thampan et al., 2001, no qual $i_{0,k}$ é decomposta em contribuições associadas às propriedades intrínsecas do material catalítico e à morfologia do eletrodo, conforme apresentado na Equação (7).

$$i_{0,k} = \gamma_{M,k} \cdot i_{0,k}^* \quad (7)$$

onde $i_{0,k}^*$ representa a densidade de corrente de troca intrínseca do material catalítico, enquanto $\gamma_{M,k}$ corresponde ao fator de rugosidade, associado à razão entre a área eletroquimicamente ativa e a área geométrica do eletrodo.

A densidade de corrente de troca intrínseca, $i_{0,k}^*$, é modelada como função da temperatura por meio de uma relação do tipo Arrhenius, a partir de um valor de referência ($i_{0,k,ref}^*$):

$$i_{0,k}^* = i_{0,ref,k}^* \cdot \exp\left[-\frac{E_k}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right] \quad (8)$$

onde E_k é a energia de ativação associada à transferência de carga no eletrodo k , R é a constante universal dos gases, T é a temperatura de operação e T_{ref} é a temperatura de referência, adotada como 298,15 K.

Por sua vez, o fator de rugosidade é estimado a partir de propriedades físicas do eletrodo. Admitindo nanopartículas metálicas aproximadamente esféricas, esse parâmetro é calculado pela Equação (9):

$$\gamma_{M,k} = \left(\frac{6 \cdot m_{M,k} \cdot \phi_{M,k}}{\rho_{M,k} \cdot d_{M,k}}\right) \cdot \phi_{I,k} \quad (9)$$

onde $m_{M,k}$ é a carga mássica de catalisador, $\rho_{M,k}$ é a massa específica do metal, $d_{M,k}$ é o diâmetro médio das nanopartículas, $\phi_{M,k}$ é a fração da superfície metálica acessível à reação (descontando a região de contato com o suporte) e $\phi_{I,k}$ é a fração da superfície ativa efetivamente em contato com o ionômero, tipicamente assumida como 0,75.

A contaminação por cátions é representada, no presente modelo, apenas por meio da variável $\phi_{I,C}$, sob a premissa de que espécies lixiviadas deslocam prótons dos sítios sulfônicos do ionômero e reduzem a interface eletroquimicamente ativa do cátodo. Os demais parâmetros cinéticos, físicos e geométricos adotados são apresentados na Tabela 1, com base em valores reportados na literatura e adaptados de Bessarabov et al., 2016. Com base nessa modelagem, na seção de Resultados, conduz-se uma análise de sensibilidade por meio da variação de $\phi_{I,C}$, permitindo avaliar o impacto da contaminação sobre o desempenho do eletrolisador.

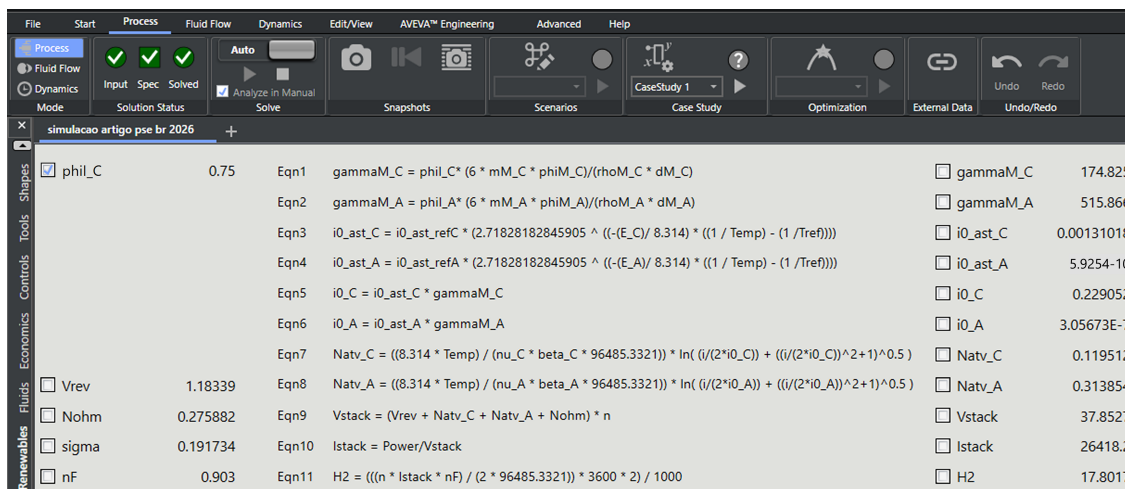
Tabela 1: Parâmetros para cálculo do sobrepotencial de ativação.

Parâmetro	Valor	Unidade	Referência
$m_{M,A}$	$1,0 \times 10^{-3}$	g cm^{-2}	Van Der Merwe et al., 2014
$m_{M,C}$	$0,3 \times 10^{-3}$	g cm^{-2}	Rasten et al., 2003
$\rho_{M,A}$	22,56	g cm^{-3}	Bessarabov et al., 2016
$\rho_{M,C}$	21,45	g cm^{-3}	Bessarabov et al., 2016
$d_{M,A}$	$2,9 \times 10^{-7}$	cm	Siracusano et al., 2010
$d_{M,C}$	$2,7 \times 10^{-7}$	cm	Rosenthal et al., 2012
ϕ_M	0,75	—	Thampan et al., 2001
$i_{0,\text{ref},A}^*$	$5,0 \times 10^{-12}$	A cm^{-2}	Damjanovic et al., 1966
$i_{0,\text{ref},C}^*$	$7,0 \times 10^{-3}$	A cm^{-2}	Thampan et al., 2001
v_A	3	—	Damjanovic et al., 1966
v_C	1	—	Thampan et al., 2001
E_A	76000	J mol^{-1}	Thampan et al., 2001
E_C	4300	J mol^{-1}	Thampan et al., 2001

3 Resultados

A implementação das equações do modelo e o cálculo das variáveis de processo foram realizados no AVEVA Process Simulation (APS), conforme ilustrado na Figura 1.

Figura 1: Ambiente de cálculo no APS



File	Start	Process	Fluid Flow	Dynamics	Edit/View	AVEVA™ Engineering	Advanced	Help
Process	Fluid Flow	Dynamics	Input	Spec	Solved	Analyze in Manual	Solve	Snapshots
Mode	Solution Status	Solve	Scenarios	Case Study	Optimization	External Data	Undo/Redo	
simulacao artigo pse br 2026								
phil_C	0.75	Eqn1	$\gamma_{M,C} = \phi_{M,C} * (6 * m_{M,C} * \phi_{M,C}) / (\rho_{M,C} * d_{M,C})$				☐ $\gamma_{M,C}$	174.825
		Eqn2	$\gamma_{M,A} = \phi_{M,A} * (6 * m_{M,A} * \phi_{M,A}) / (\rho_{M,A} * d_{M,A})$				☐ $\gamma_{M,A}$	515.866
		Eqn3	$i_{0,\text{ast},C} = i_{0,\text{ref},C} * (2.71828182845905 \wedge ((-(E_C) / 8.314) * ((1 / \text{Temp}) - (1 / \text{Tref}))))$				☐ $i_{0,\text{ast},C}$	0.00131018
		Eqn4	$i_{0,\text{ast},A} = i_{0,\text{ref},A} * (2.71828182845905 \wedge ((-(E_A) / 8.314) * ((1 / \text{Temp}) - (1 / \text{Tref}))))$				☐ $i_{0,\text{ast},A}$	5.9254-10
		Eqn5	$i_{0,C} = i_{0,\text{ast},C} * \gamma_{M,C}$				☐ $i_{0,C}$	0.229052
		Eqn6	$i_{0,A} = i_{0,\text{ast},A} * \gamma_{M,A}$				☐ $i_{0,A}$	3.05673E-7
		Eqn7	$\text{Natv}_C = ((8.314 * \text{Temp}) / (\text{nu}_C * \beta_{M,C} * 96485.3321)) * \ln((i / (2 * i_{0,C})) + ((i / (2 * i_{0,C}))^2 + 1)^{0.5})$				☐ Natv_C	0.119512
		Eqn8	$\text{Natv}_A = ((8.314 * \text{Temp}) / (\text{nu}_A * \beta_{M,A} * 96485.3321)) * \ln((i / (2 * i_{0,A})) + ((i / (2 * i_{0,A}))^2 + 1)^{0.5})$				☐ Natv_A	0.313854
		Eqn9	$V_{\text{stack}} = (V_{\text{rev}} + \text{Natv}_C + \text{Natv}_A + \text{Nohm}) * n$				☐ V_{stack}	37.8527
		Eqn10	$I_{\text{stack}} = \text{Power} / V_{\text{stack}}$				☐ I_{stack}	26418.2
		Eqn11	$H_2 = (((n * I_{\text{stack}} * nF) / (2 * 96485.3321)) * 3600 * 2) / 1000$				☐ H_2	17.8017

Para avaliar o impacto dessa modelagem no cátodo, as simulações foram conduzidas em regime permanente para um eletrolisador alimentado com potência elétrica de 1 MW. O sistema é composto por um arranjo de 20 células com membrana polimérica Nafion® 117, espessura de 0,03306 cm e grau de hidratação fixado em $\lambda = 22$, com cátodos de nanopartículas de platina suportada em carbono e ânodos de óxido de irídio (IrO_2). A operação foi estabelecida sob uma temperatura constante de 80 °C e densidade de corrente geométrica fixa de 1,6 A/cm².

Sob essas condições, o modelo foi submetido a uma análise de sensibilidade por meio da ferramenta *Case Study* do APS, na qual $\phi_{I,C}$ foi progressivamente degradado de 0,75 a 10^{-4} . O objetivo foi emular, de forma teórica, a oclusão dos sítios reativos e avaliar a resposta do sobrepotencial de ativação catódico ($\eta_{\text{act},C}$) e da produção de hidrogênio ao envenenamento interfacial.

Em condições nominais saudáveis ($\phi_{I,C} = 0,75$), o sobrepotencial de ativação catódico foi estimado em 0,12 V, enquanto o sobrepotencial anódico foi de 0,31 V, indicando que a contribuição do cátodo não é desprezível frente às perdas totais de ativação. Para fins comparativos, ao simular a mesma condição de operação com o modelo

semi-empírico padrão do APS, fundamentado em Espinosa-López et al., 2018, que concentra as perdas cinéticas no ânodo, obteve-se um sobrepotencial de ativação total de 0,38 V. Essa diferença sugere que a abordagem agregada pode subestimar a contribuição catódica para o sobrepotencial total, tendência que se acentua com a introdução de efeitos de contaminação no sistema.

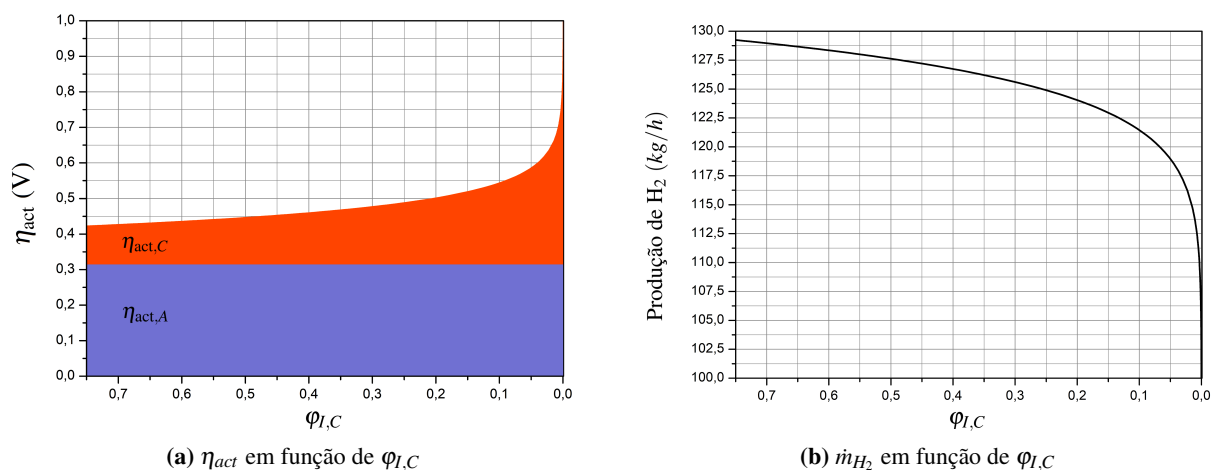
A Figura 2 apresenta, de forma conjunta, o comportamento do sobrepotencial de ativação catódico e da vazão de hidrogênio em função da variável $\phi_{I,C}$. Observa-se que, para níveis moderados de degradação, com redução de $\phi_{I,C}$ de 0,75 para aproximadamente 0,40, o aumento de $\eta_{act,C}$ é gradual. No entanto, à medida que a interface ativa é progressivamente reduzida pela substituição de prótons por cátions contaminantes ($\phi_{I,C} < 0,10$), a densidade de corrente de troca do cátodo diminui significativamente. Como consequência, o modelo proposto captura o crescimento acentuado do sobrepotencial requerido pela célula nesse regime. Esse comportamento é consistente com a falha aguda reportada por Li et al., 2019 sob condições de contaminação severa, associada ao bloqueio cinético da reação.

Em termos de desempenho global, observa-se que, na condição saudável, o sistema atinge uma produção de 17,80 mol/s (aproximadamente 129,20 kg/h). Contudo, sob a restrição de potência constante, o aumento da tensão de célula implica redução da corrente elétrica de operação (I_{stack}). Pela Lei de Faraday, essa limitação se traduz em uma queda progressiva na vazão de hidrogênio à medida que a oclusão dos sítios ativos se intensifica.

Esse comportamento indica que o eletrolisador pode operar sob degradação progressiva sem perda significativa de desempenho até que um limiar crítico de envenenamento da interface seja atingido. Ressalta-se, contudo, que tal observação decorre da análise isolada da variável $\phi_{I,C}$. Em condições reais, a contaminação iônica constitui um fenômeno multifatorial, capaz de afetar simultaneamente outros parâmetros do sistema, como a condutividade protônica da membrana e as resistências ôhmicas.

Sob a perspectiva da engenharia de sistemas, a reduzida sensibilidade do modelo no intervalo de 0,75 a 0,40 apresenta-se como uma característica favorável para o monitoramento do processo. Esse regime inicial de relativa estabilidade possibilita, em etapas subsequentes, a vinculação da variável $\phi_{I,C}$ a grandezas mensuráveis, como a concentração acumulada de íons contaminantes na alimentação ou o tempo de operação. Dessa forma, preserva-se a robustez do modelo em condições normais de operação, ao mesmo tempo em que se antecipa a transição para o regime de colapso cinético associado à degradação severa.

Figura 2: (a) Sobrepotencial de ativação e (b) vazão mássica de hidrogênio em função de $\phi_{I,C}$.



4 Conclusão

O presente estudo apresentou uma abordagem de modelagem para o sobrepotencial de ativação em eletrolisadores PEM, incorporando explicitamente os efeitos da contaminação iônica na cinética catódica. Diferentemente de modelos convencionais que negligenciam a contribuição da HER, a metodologia proposta considera a redução da interface eletroquimicamente ativa, permitindo capturar a degradação progressiva do desempenho do cátodo.

A análise de sensibilidade conduzida mostrou a existência de dois regimes distintos de operação: um regime inicial de baixa sensibilidade à contaminação, seguido por um regime de degradação acelerada, no qual a redução da densidade de corrente de troca resulta em aumento acentuado do sobrepotencial e consequente queda na produção de hidrogênio.

Como perspectiva, propõe-se a extensão do modelo para incluir descrições mais abrangentes dos mecanismos de contaminação, permitindo correlacionar a composição da água de alimentação com a degradação do desempenho eletroquímico. Adicionalmente, a validação experimental dessas abordagens pode contribuir para sua aplicação em análises de vida útil e no desenvolvimento de estratégias de monitoramento e controle.

Agradecimentos: Os autores agradecem à AVEVA pela disponibilização de licenças de seus softwares, fundamentais para a realização deste estudo acadêmico.

Referências

- Agbli, K., Péra, M., Hissel, D., Rallières, O., Turpin, C., & Doumbia, I. (2011). Multiphysics simulation of a PEM electrolyser: Energetic Macroscopic Representation approach. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(2), 1382–1398.
- Bessarabov, D., Wang, H., Li, H., & Zhao, N. (Ed.). (2016). *PEM electrolysis for hydrogen production: principles and applications*. CRC Press.
- Bispo, A. S. (2023). *Avaliação e Comparação de Modelos Matemáticos para Produção de H₂ Verde via Eletrolise PEM* [Dissertação de Mestrado]. Centro Universitário SENAI CIMATEC.
- Damjanovic, A., Dey, A., & Bockris, J. O. (1966). Electrode Kinetics of Oxygen Evolution and Dissolution on Rh, Ir, and Pt-Rh Alloy Electrodes. *Journal of The Electrochemical Society*, 113(7), 739.
- Dizon, A. R., & Weber, A. Z. (2025). Mechanistic and Mitigation-Strategy Insights into NaCl and CaCl₂ Contamination of Proton-Exchange-Membrane Water Electrolysis Using Continuum Modeling. *Journal of The Electrochemical Society*, 172(2), 024510.
- Espinosa-López, M., Darras, C., Poggi, P., Glises, R., Baucour, P., Rakotondrainibe, A., Besse, S., & Serre-Combe, P. (2018). Modelling and experimental validation of a 46 kW PEM high pressure water electrolyzer. *Renewable Energy*, 119, 160–173.
- García-Valverde, R., Espinosa, N., & Urbina, A. (2012). Simple PEM water electrolyser model and experimental validation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(2), 1927–1938.
- Grigoriev, S., Dzhus, K., Bessarabov, D., & Millet, P. (2014). Failure of PEM water electrolysis cells: Case study involving anode dissolution and membrane thinning. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(35), 20440–20446.
- Li, N., Araya, S. S., & Kær, S. K. (2019). Long-term contamination effect of iron ions on cell performance degradation of proton exchange membrane water electrolyser. *Journal of Power Sources*, 434, 226755.
- Newman, J., & Balsara, N. P. (2021). *Electrochemical systems* (Fourth edition). Wiley.
- Rasten, E., Hagen, G., & Tunold, R. (2003). Electrocatalysis in water electrolysis with solid polymer electrolyte. *Electrochimica Acta*, 48(25-26), 3945–3952.
- Rosenthal, N. S., Vilekar, S. A., & Datta, R. (2012). A comprehensive yet comprehensible analytical model for the direct methanol fuel cell. *Journal of Power Sources*, 206, 129–143.
- Siracusano, S., Baglio, V., Di Blasi, A., Briguglio, N., Stassi, A., Ornelas, R., Trifoni, E., Antonucci, V., & Aricò, A. (2010). Electrochemical characterization of single cell and short stack PEM electrolyzers based on a nanosized IrO₂ anode electrocatalyst. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(11), 5558–5568.
- Sun, S., Shao, Z., Yu, H., Li, G., & Yi, B. (2014). Investigations on degradation of the long-term proton exchange membrane water electrolysis stack. *Journal of Power Sources*, 267, 515–520.
- Thampan, T., Malhotra, S., Zhang, J., & Datta, R. (2001). PEM fuel cell as a membrane reactor. *Catalysis Today*, 67(1-3), 15–32.
- Tijani, A. S., & Rahim, A. A. (2016). Numerical Modeling the Effect of Operating Variables on Faraday Efficiency in PEM Electrolyzer. *Procedia Technology*, 26, 419–427.
- Van Der Merwe, J., Uren, K., Van Schoor, G., & Bessarabov, D. (2014). Characterisation tools development for PEM electrolyzers. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(26), 14212–14221.