

DESARROLLO Y VALIDACIÓN EXPERIMENTAL DEL MODELO DINÁMICO DE UN ELECTROLIZADOR PEM DE 1 KW PARA SU INTEGRACIÓN CON GENERACIÓN RENOVABLE

Manuel Mora Nieto ^a, Carlos Bordons Alba ^b

Dpto. Ingeniería de Sistemas y Automática. Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Universidad de Sevilla. ENGREEN, Laboratorio de Ingeniería para la Sostenibilidad Energética y Medioambiental. Camino de los Descubrimientos s/n. 41092 Sevilla. ^a mmnieto@us.es, ^b bordons@us.es

Resumen

En este artículo se construye un modelo dinámico de un electrolizador tipo PEM (Proton Exchange Membrane o Polymer Electrolyte Membrane). El modelo incluye el dominio electroquímico para conocer la evolución de la tensión en función de la intensidad (o potencia) de entrada al mismo, temperatura de funcionamiento y presiones de hidrógeno y oxígeno, y el dominio térmico para conocer la evolución de la temperatura en función de la intensidad (o potencia) de entrada, tensión y temperatura ambiente. El modelo se basa en ecuaciones ampliamente empleadas por la comunidad científica y en el ajuste de parámetros en función de los datos reales de un electrolizador PEM de 1 kW. La implementación de las ecuaciones, simulación del modelo y validación del mismo se lleva a cabo con el software MATLAB/Simulink. Para la toma de datos se recurre a datos experimentales obtenidos en el laboratorio. Este modelo puede ser usado para el diseño de sistemas de gestión de energía en instalaciones de producción de hidrógeno renovable.

Palabras clave: electrolizador PEM, modelo dinámico, electroquímica, temperatura, producción de hidrógeno.

1 INTRODUCCIÓN

El cambio climático puede tener consecuencias catastróficas si no se llevan a cabo acciones urgentes. La COP26 (2021) y el Pacto Verde Europeo (2019) suponen reducir las emisiones para limitar el incremento de la temperatura de la Tierra a 1.5 °C y alcanzar la neutralidad climática en 2050 [9]. Paralelamente, el hidrógeno se está convirtiendo en una gran oportunidad para el almacenamiento de energía, algo crucial debido al comportamiento estocástico de las fuentes renovables, como la eólica o solar. Otros usos del hidrógeno, cada vez más extensos, son [24]: materia prima en refinerías, producción de acero o industrias químicas; mezclado

en infraestructuras gasistas; combustible en pilas de hidrógeno para movilidad sostenible; suministro eléctrico; calefacción en edificios.

Los electrolizadores son dispositivos que usan corriente continua y agua para producir hidrógeno. Si la electricidad procede de renovables, el proceso será verde (hasta ahora, la mayoría de hidrógeno se produce con recursos fósiles). Actualmente, los más usados son los alcalinos y los poliméricos (PEM) [5,18]. La principal diferencia es el electrolito por el que viajan los portadores de carga desde el ánodo al cátodo del electrolizador, siendo líquido (hidróxido de potasio, KOH) en los alcalinos y sólido (membrana polimérica) en los PEM. Los alcalinos trabajan típicamente en puntos de operación constantes [5] mientras que la electrólisis PEM, menos madura, está creciendo debido a sus respuestas más rápidas y mayores densidades de corriente. Por ello, este trabajo se centra en electrólisis PEM. El principal problema de los PEM es su elevado precio ya que, a diferencia de los alcalinos, se fabrican con materiales nobles.

Se están desarrollando muchos proyectos para demostrar la factibilidad del hidrógeno verde. El Gobierno de España con la Hoja de Ruta del Hidrógeno confía en su producción y almacenamiento para recuperarse de la crisis del COVID-19 [24]. Actualmente se desarrollan plantas basadas en electrolizadores PEM (algunos alcalinos) en la escala del megavatio, con objetivo gigavatio para 2030 [18].

Debido a los interesantes desarrollos tecnológicos, ventajas y usos de pilas y electrolizadores, la investigación se está centrando en mejorar estas tecnologías. En concreto, existen inconvenientes que no han permitido al hidrógeno verde estar completamente desarrollado [17]. En este sentido, es necesario hacer esta tecnología más rentable/eficiente económica y energéticamente. El proceso electricidad-hidrógeno tiene una eficiencia de aproximadamente 56-60 % [18,24].

Los electrolizadores PEM se han usado mucho para operar a corrientes constantes, siendo las baterías o supercondensadores los que absorben las variaciones

de potencia por la intermitencia en generación renovable y demanda [3,33]. Aunque incluir estos dispositivos para variaciones bruscas es aconsejable, el modo de corriente variable en electrolizadores PEM conectados a renovables mejora al fijo en términos de energía producida y vida útil de los equipos [29].

El punto de operación de un electrolizador implica: corriente de entrada, presión y temperatura. Especialmente interesante es la última, ya que la eficiencia del electrolizador PEM mejora conforme sube la temperatura [13,16,22,32], pero temperaturas altas aceleran la degradación de la membrana por razones térmicas y químicas [6,20,25,26]. Por tanto, hay que llegar a un compromiso que necesita control y supervisión de temperatura para funcionar de manera óptima [11,19,20,25,26]. Además, en la conexión con renovables, la importancia del control es aún mayor, ya que se operará a temperaturas cercanas al límite y los cambios inesperados en la corriente de entrada pueden provocar que ese límite se sobrepase.

Este trabajo busca obtener un modelo que capture el comportamiento estático y dinámico de electrolizadores PEM, como paso previo al control óptimo de variables importantes como la temperatura. El resto del artículo se organiza como sigue. En la Sección 2 se repasan las contribuciones más importantes sobre modelado de electrolizadores PEM. Las ecuaciones del modelo empleadas se describen en la Sección 3, siendo el modelo validado experimentalmente en la Sección 4. Las conclusiones y trabajo futuro se recogen en la Sección 5.

2 ESTADO DEL ARTE EN MODELADO

La electrólisis es el proceso que tiene lugar dentro del electrolizador. El hidrógeno y el oxígeno se obtienen a partir del agua aplicando una tensión continua entre los electrodos del ánodo y cátodo. El hidrógeno se obtiene en el cátodo y el oxígeno en el ánodo, con pequeñas cantidades de agua, que se suelen reintroducir en el proceso por el ánodo. En la Figura 1 se muestra un esquema del proceso.

El electrolizador PEM se compone de subsistemas: ánodo, cátodo, membrana y voltaje. Además, se incluye en lo que se conoce como el *Balance of Plant*, *BoP*, formado por el resto de elementos auxiliares [4,23,32]: bombas, depósitos y planta de tratamiento de agua; depósito de almacenamiento de hidrógeno; fuente de alimentación, sensores y unidad de control, sistema de refrigeración; válvulas y tuberías.

Para reducir costes de producción del hidrógeno verde e incrementar la eficiencia del sistema de electrólisis, muchos investigadores han profundizado en el modelo

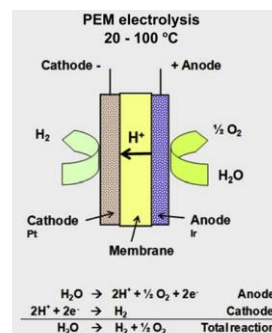


Figura 1: Esquema del proceso de electrólisis PEM (imagen de [5]).

y análisis de electrolizadores PEM. Por esta razón, se han publicado algunas revisiones sobre el tema: [5] en la que se explica en detalle la electrólisis PEM y se muestra un modelo de voltaje de la celda, [26] en la que se pretende tanto describir y clasificar los diferentes modelos (de más de 80 trabajos) como analizarlos para orientar la investigación futura en electrolizadores PEM y alcalinos, y [10] en la que se introduce la electrólisis PEM desde los fundamentos y se da un amplio repaso a las publicaciones de los últimos años sobre el modelado de dicho proceso.

Con respecto al modelado, en [14] se desarrolló el primer modelo de electrolizador PEM orientado al control en MATLAB/Simulink y, años más tarde, [32] lo utilizó para modelar todo el BoP. Más recientemente, en [12] pretenden comprender mejor el fenómeno multifísico de la producción de hidrógeno en la electrólisis del agua, tanto PEM como alcalina. Dividen el modelo en diferentes módulos: fluido-dinámico (flujos de masa), termodinámico (presiones parciales), electro-químico (conexión entrada energía eléctrica con salida flujo de hidrógeno) y térmico (temperatura). Para ello, desarrollan un modelo basado en flujos de energía que incluye estimaciones de potencia de los sistemas auxiliares, lo validan experimentalmente y lo escalan para la simulación de una infraestructura de producción de hidrógeno.

En cualquier caso, el modelado se ha tratado de manera amplia por la comunidad científica. En la mayoría de los casos, el modelo necesita identificación de parámetros para ajustar las curvas. [15] destaca la importancia de modelar los electrolizadores alcalinos (aplicable a PEM) con un enfoque analítico y multifísico, en lugar de con relaciones empíricas, que deben depender tanto de los parámetros fijos del electrolizador como de sus puntos de operación variables (temperatura, presión, etc.). Además, como se muestra en [5,10], aunque se hacen consideraciones dinámicas y térmicas, las principales ecuaciones dadas son las que gobiernan el voltaje. Sin embargo, hay modelos de electrólisis PEM que también incluyen balances de masas y consideraciones de flujo [1,12,14,19,21,22,25,26,32], modelización de

membranas [1,2,14,21,22,25,26,32], submódulos térmicos [8,12,13,19,20,23,25,26,30] y elementos auxiliares [12,14,21,23,25,30,32].

En cuanto a las consideraciones de flujo, algunos autores [2,8,13,30] simplifican la producción de gases con la Ley de Faraday. La cantidad de hidrógeno producida (cátodo) es la de la ecuación (1) y la de oxígeno (ánodo), la mitad. Esto se adopta también en el modelo del presente trabajo.

$$\dot{n}_{H_2} = \frac{n I_{el}}{2F} \eta_F \quad (1)$$

Donde \dot{n}_{H_2} es el flujo de hidrógeno (mol/s), n número de celdas en serie del electrolizador, I_{el} corriente del electrolizador (A), F constante de Faraday (s·A/mol), y η_F eficiencia de Faraday (cerca al 100 %).

3 MODELO TEÓRICO

El modelo empleado en este trabajo pretende capturar con detalle el comportamiento de electrolizadores PEM, manteniendo a su vez la sencillez para usarse en técnicas de control. Por un lado, se describen las ecuaciones electroquímicas, lo que permite obtener la característica estática o curva de polarización. Por otra parte, la dinámica considerada se recoge en el apartado térmico del modelo. El modelo está basado en ecuaciones con sentido físico, ampliamente utilizadas en otros trabajos, y puede ser empleado en otros electrolizadores PEM ajustando los parámetros.

Se han considerado las siguientes hipótesis generales:

- Homogeneidad de temperatura en todo el stack [1,5-8,12,13,15,16,19,26,29].
- Las celdas del stack se encuentran conectadas en serie y todas tienen el mismo comportamiento eléctrico y térmico [7,8,12,13,15,22,26,29].
- Oxígeno e hidrógeno se comportan como gases ideales. Además, las fases gaseosa y líquida se encuentran separadas [1,2,8,12,14-16,25,27-29,32].
- La dinámica electroquímica (más rápida) se puede despreciar en comparación con la térmica [4,7,8,20,23,26,29,30].
- Las caídas y efectos de presión se desprecian para electrolizadores que no son de alta presión (como el de este trabajo), por lo que no aparecen los fenómenos de permeabilidad cruzada ni corrosión [6,8,12,13].

3.1 Modelo electroquímico

El objetivo de esta parte es obtener la evolución de la tensión del stack en función de la intensidad (o

potencia) de entrada y de la temperatura de funcionamiento, así como de las presiones de hidrógeno y oxígeno. Este dominio electroquímico se basa en ecuaciones algebraicas. La tensión total del stack, en voltios, viene dada por la ecuación (2) [1,5,12,16,22,32].

$$V_{el} = (E + V_{act} + V_{ohm} + V_{diff}) \cdot n \quad (2)$$

Donde E es la tensión de circuito abierto, V_{act} el sobrepotencial de activación, V_{ohm} el sobrepotencial óhmico y V_{diff} el sobrepotencial de difusión o de transferencia de masa.

Las hipótesis específicas para este apartado son:

- El sobrevoltaje de difusión se puede despreciar por trabajar a densidades de corriente inferiores a 3 A/cm² (limitaciones de transporte de masa despreciables) [2,5,6,8,13,14,19,22,26,32].
- Los parámetros del modelo electroquímico no dependen de la presión [8].
- Los coeficientes de transferencia de carga se consideran constantes [1,2,5,6,8,12,13,16,19,22,25,26,32].
- El sobrevoltaje óhmico considera sólo la resistencia de la membrana, despreciando la resistencia eléctrica [2,8,12-14,20,25].
- La membrana está completamente saturada con agua líquida, lo que implica que su conductividad sólo dependa de la temperatura y que el valor del contenido de agua sea medio-alto, valor que se considera fijo y constante [1,2,6,8,12,13,16,20,22,30].

3.1.1 Tensión de circuito abierto

La tensión de circuito abierto viene dada por la ecuación de *Nernst* (3) [16].

$$E = E_0 + \frac{RT_{el}}{2F} \ln \left(\frac{a_{H_2(g)} a_{O_2(g)}^{\frac{1}{2}}}{a_{H_2O(l)}} \right) \quad (3)$$

Siendo R la constante universal de los gases en J/(mol·K), T_{el} la temperatura del electrolizador en K (procedente del modelo térmico), y a_i la actividad de la sustancia i . El voltaje reversible en estado estándar (1 atm, 298.15 K), E_0 , viene dado por la ecuación (4) [5,16,25,30].

$$E_0 = 1.299 - 0.9 \cdot 10^{-3} (T_{el} - 298) \quad (4)$$

Por su parte, las actividades se calculan como sigue [16]. Para hidrógeno y oxígeno (gases), $a = p(\text{bar})/p_0$, siendo $p_0 = 1 \text{ bar}$ la presión estándar. Para el agua, se aproxima a 1 por ser líquida [16,27].

3.1.2 Sobrepotencial de activación

Esta sobretensión, requerida para que la reacción comience, viene dada por la suma de ánodo y cátodo. Ambas contribuciones se calculan haciendo uso de la ecuación de *Butler-Volmer* (5) [5,16,22,25,32].

$$V_{act,i} = \frac{RT_{el}}{\alpha_i F} \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2i_{0,i}} \right), \quad i = a, c \quad (5)$$

Aparecen parámetros importantes para la caracterización estática del electrolizador: coeficiente de transferencia de carga de ánodo y cátodo, α_i , y densidad de corriente de intercambio anódico y catódico, $i_{0,i}$ (en A/cm²). La literatura considera típicamente valores constantes para los primeros, en torno a 2 (ánodo) y a 0.5 (cátodo) [1,5,16,22,25,32]. Aun así, pueden incluirse en el ajuste y estimación de parámetros, como se suele hacer más a menudo con las densidades de corriente de intercambio, pues afectan en gran medida a la curva de polarización y son difíciles de medir [5,16,13,22]. Los valores típicos van de 10⁻¹² a 10⁻⁶ A/cm² (ánodo) y de 10⁻⁵ a 10⁻¹ A/cm² (cátodo). Estos también se pueden obtener del fabricante [30]. La variable i se refiere a densidad de corriente del electrolizador, definida como la corriente entre el área de la celda, $i = I_{el}/A_{el}$ (A/cm²).

3.1.3 Sobrepotencial óhmico

Se debe a resistencias de diferente tipo, destacando la de membrana (iónica) y la eléctrica. Para su cálculo, se usa la Ley de Ohm, como se indica en la ecuación (6) [1,2,5,8,10,12-14,16,22,25,26,30,32].

$$V_{ohm} = i R_{ohm} = i (R_{elec} + R_{mem}) \quad (6)$$

Despreciando la resistencia eléctrica, la resistencia óhmica, R_{ohm} (Ω·cm²), se calcula según la ecuación (7). Para su obtención, es necesario calcular previamente el valor de la conductividad de la membrana, σ_m (Ω⁻¹cm⁻¹), según la ecuación (8) [28].

$$R_{ohm} = \frac{100 t_m}{\sigma_m} \quad (7)$$

$$\sigma_m = (0.005139 \lambda_m - 0.00326) e^{12.68 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_{el}} \right)} \quad (8)$$

Donde t_m es el espesor de la membrana en metros (fabricante) y λ_m el contenido de agua de la membrana (mol H₂O/mol SO₃⁻). Como se comentó, el valor de λ_m es fijo, constante y con valor medio-alto en el rango típico (7-14 según [8]), y suele ajustarse.

3.2 Modelo térmico

Es en este caso donde se considera la dinámica del sistema, al ser esta más lenta que en el caso electroquímico y, por tanto, dominante. El modelo

térmico está formado por una ecuación diferencial de primer orden obtenida del balance de potencias simplificado en el electrolizador. La idea es obtener el valor de la temperatura y replicar su comportamiento dinámico a lo largo del tiempo, en función de la tensión e intensidad y de la temperatura ambiente.

De nuevo, se adoptan una serie de hipótesis:

- Se emplea un modelo dinámico agrupado de capacitancia térmica [7,8,12,13,15,19,20,23,25,26,29,30].
- La temperatura ambiente se considera constante [11,12,19,20,30].
- La energía de salida de hidrógeno, oxígeno y agua se desprecia [7,12,13,23,29,30].
- Se deprecia el efecto Joule que produce la corriente a su paso [12,20].
- El sistema de refrigeración elimina todo el calor sobrante cuando se alcanza la temperatura nominal [12,26,30].

Con estas consideraciones, el modelo térmico se basa en la propuesta de [29], que después han empleado diferentes autores [7,8,12,13,15,19,20,23,25,26,30] con ciertas modificaciones. La ecuación (9) resulta de aplicar un balance de energía al electrolizador.

$$C_t \frac{dT_{ez}}{dt} = \dot{Q}_{gen} - \dot{Q}_{loss} - \dot{Q}_{cool} \quad (9)$$

Siendo C_t la capacidad térmica del stack (J/K), \dot{Q}_{gen} el calor generado en el sistema debido a las irreversibilidades o sobrevoltajes del proceso (W), \dot{Q}_{loss} el calor que se pierde por interacción con el ambiente por convección y radiación (W), y \dot{Q}_{cool} el calor que se disipa con el sistema de refrigeración (W).

El calor producido se obtiene con la ecuación (10).

$$\dot{Q}_{gen} = I_{el} (V_{cell} - V_{tn}) n \quad (10)$$

Obteniendo el voltaje de la celda, V_{cell} , como V_{el}/n (V_{el} procedente del modelo electroquímico), y el voltaje termoneutro, V_{tn} , como se indica en las ecuaciones (11)-(14) [30]. La intensidad se considera una perturbación rápida y medible.

$$V_{tn} = V_{HHV} + \frac{\Phi Y}{2F} = 1.4756 + 2.252 \cdot 10^{-4} t_{el} + 1.52 \cdot 10^{-8} t_{el}^2 + \frac{\Phi Y}{2F} \quad (11)$$

$$\Phi = 1.5 \frac{P_{w,sat}}{P_{el} - P_{w,sat}} \quad (12)$$

$$P_{w,sat} = e^{\left(\frac{13.669 - 8096.23}{T_{el}} \right)} \quad (13)$$

$$Y = 42960 + 40.762 t - 0.06682 t^2 \quad (14)$$

Con V_{HHV} conocido como *higher-high-value voltaje*, t_{el} temperatura del electrolizador en °C (T_{el} en Kelvin), P_{el} presión del electrolizador (bar), $P_{w,sat}$ presión parcial del vapor de agua (bar), Φ coeficiente adimensional, e Y coeficiente con unidades J/mol.

La ecuación de las pérdidas al ambiente es la (15).

$$\dot{Q}_{loss} = \frac{1}{R_t} (T_{el} - T_{amb}) \quad (15)$$

Siendo T_{amb} la temperatura ambiente en Kelvin, considerada perturbación lenta y medible, y R_t la resistencia térmica que modela el intercambio de calor por radiación y convección (K/W). La resistencia se calcula como τ_t/C_t , siendo τ_t (s) la constante de tiempo del sistema. Tanco C_t como τ_t suelen obtenerse de manera experimental [7,8,13,20,23]; en el primer caso, aislando térmicamente el electrolizador y apagando la refrigeración, y en el segundo, dejando enfriar el sistema libremente y observando la constante de tiempo de dicho enfriamiento.

Finalmente, si se alcanza la temperatura nominal, la refrigeración elimina el calor $\dot{Q}_{cool} = \dot{Q}_{gen} - \dot{Q}_{loss}$.

4 VALIDACIÓN EXPERIMENTAL

El electrolizador disponible es el Hamilton-STD SPE-HG 1 kW, cuyo aspecto es el de la Figura 2. Las características técnicas se resumen en la Tabla 1.



Figura 2: Electrolizador 1 kW en el laboratorio.

Tabla 1: Características técnicas del electrolizador.

Característica	Valor
Potencia máxima	1 kW
Caudal H ₂	0.23 Nm ³ /h @ 1 kW
Presión parcial H ₂ /O ₂	6.9 bar / 1.3 bar
Voltaje/Corriente operación	9-11 Vdc / 5-80 A
Número de celdas en serie	6
Temperatura nominal	60 °C
Área stack	212.35 cm ²

Densidad de corriente de intercambio ánodo/cátodo	1.0631 · 10 ⁻⁶ / 1 · 10 ⁻³ A/cm ²
Espesor membrana	178 μm (Nafion 117)

4.1 Datos de partida

La validación del modelo se lleva a cabo con datos de trabajos previos en el laboratorio [30-31]. Se cuenta con datos de dos experimentos con el electrolizador de la microrred experimental *Hylab*, de la Universidad de Sevilla. El PLC propio del equipo se comunica con el PLC central de la planta mediante *OPC (Ole for Process Control)* y es el sistema *SCADA (Supervisory Control and Data Acquisition)* el que recoge los datos.

En el primer experimento, para validación estática, se aumenta gradualmente la corriente de entrada en cambios de 5 A desde 5 A hasta 70 A con una fuente programable externa (*Powerbox 6 kW*), dejando tiempo suficiente para que el sistema alcance el régimen permanente en tensión e intensidad. También se procede en modo inverso. El conjunto de datos Intensidad-Tensión-Temperatura se muestrea cada segundo. Con diferentes condiciones de temperatura externa y estado inicial del electrolizador se repiten los experimentos y se obtienen familias de puntos agrupadas por temperaturas.

Por su parte, el segundo experimento, para validación dinámica, es más breve, con duración de 50 minutos. Partiendo del reposo y con una temperatura ambiente de 22 °C, se aplica una rampa de potencia con la fuente programable de 0 a 600 W en 5 minutos, se mantiene constante durante 40 minutos y finalmente se aplica la rampa inversa, llegando a 0 W en 5 minutos. Se mide la temperatura del electrolizador cada 5 minutos, suficiente para los tiempos característicos de la dinámica térmica (en torno a 1 hora).

4.2 Validación

Primero se valida la curva de polarización; esto es, la evolución de la tensión del stack en función de la corriente de entrada (modelo estático electroquímico). Para completar el modelo, se escogen los coeficientes de transferencia de carga según la literatura, con un ligero ajuste en el caso del cátodo en torno al valor típico de 0.5, y el contenido de agua de la membrana se ajusta de manera heurística (valores en Tabla 2).

Se proporcionan intensidades en el rango admisible (5-80 A) y se deja al electrolizador que alcance el régimen permanente, registrando los valores de tensión alcanzados. Se lleva a cabo para diferentes temperaturas, considerando que una pareja de puntos *V-I* se produce a la temperatura que marca el régimen permanente. Con esto, se observa en la Figura 3 la curva de polarización experimental junto a la obtenida con el modelo, ambas a 26 °C. Las métricas de la Tabla

3 muestran un buen ajuste, que mejora al modelo de [30] para el mismo electrolizador. De esta forma, se puede dar el modelo electroquímico por válido.

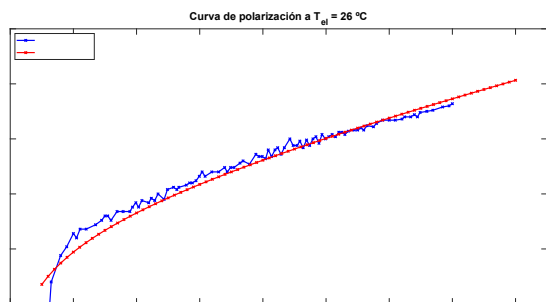


Figura 3: Validación experimental del modelo electroquímico con la curva de polarización a 26 °C.

Otro aspecto que hay que tener en cuenta para saber que el modelo es correcto es la evolución de la curva de polarización a diferentes temperaturas. La tensión del stack disminuye a medida que aumenta la temperatura de funcionamiento, por lo que aumenta la eficiencia (a mayor tensión, más irreversibilidades en el proceso y, por tanto, menor eficiencia) [13,16,22,32]. Se observa en la Figura 4 la curva de polarización obtenida con el modelo a temperaturas de 26 °C, 50 °C y 70 °C. Para obtener la curva a 70 °C no se activa el sistema de refrigeración.

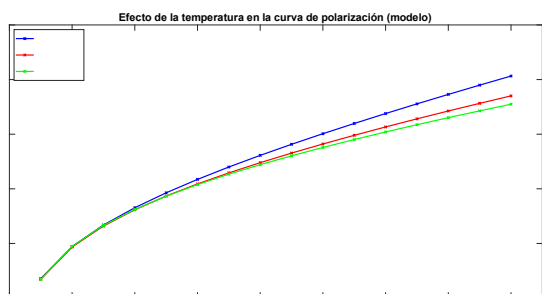


Figura 4: Curva de polarización a diferentes temperaturas obtenidas con el modelo.

En cuanto al modelo térmico, se obtiene la evolución de la temperatura del electrolizador conociendo el perfil de potencia de entrada al mismo y la temperatura ambiente [31]. De nuevo, hay parámetros que es necesario ajustar. En concreto, la capacidad térmica del stack C_t y la resistencia térmica R_t (o en su defecto, la constante de tiempo τ_t). Al igual que antes, se estiman por métodos heurísticos. Como referencia, se estudian diferentes modelos térmicos que incluyen estos parámetros para electrolizadores PEM [8,12,13,19,20,23] y se concluye que para uno de 1 kW la capacidad debe ser cercana a 9000 J/K y la resistencia en torno a 0.1 K/W. Tras el ajuste, estos parámetros quedan como se recoge en la Tabla 2.

Tabla 2: Parámetros del modelo.

Parám. electroquímico		Parám. térmico	
α_a / α_c	2 / 0.6	C_t	9540 J/K
λ_m	9 mol H ₂ O/mol SO ₃ ⁻	R_t	0.11 K/W

Con esto, se puede ver en la Figura 5 cómo la dinámica de la temperatura se replica. La estimación del valor de la temperatura se puede considerar correcta según las métricas estadísticas (Tabla 3). En concreto, el error absoluto medio de 0.40 °C y su máximo, 0.84 °C, valores pequeños del *RMSE* y *MAPE* y coeficiente de determinación de 0.98 lo convierten en aceptable, además de mejorar el modelo de [30]. Finalmente, se observa que la dinámica del modelo lleva cierto retraso respecto a la real, pero es algo aceptable [29].

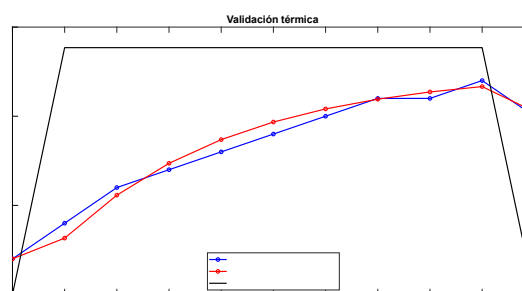


Figura 5: Validación del modelo térmico del stack.

Tabla 3: Comparativa de métricas estadísticas del modelo (EQ: electroquímico, T: térmico) con [30].

Modelo	MAE	RMSE	MAPE	R ²
EQ [30]	0.40	0.44	3.95 %	0.80
EQ Sección 3	0.06	0.14	0.67 %	0.89
T [30]	1.08	1.23	3.68 %	0.94
T Sección 3	0.40	0.47	1.44 %	0.98

5 CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un modelo para electrolizadores PEM, basado en fenómenos físicos y adaptable a cualquier electrolizador ajustando sus parámetros. El modelo comprende una parte electroquímica (estática) para conocer la evolución de la tensión del stack y una parte térmica (dinámica) para la evolución de la temperatura, estando ambos módulos conectados. Los resultados incluyen la validación del modelo con datos reales de un electrolizador PEM de 1 kW.

Como continuación de este trabajo se espera realizar un control óptimo de la temperatura al conectar el electrolizador directamente a generación renovable, haciendo uso del modelo aquí descrito. Se buscará así mejorar la eficiencia energética para aprovechar al máximo la producción renovable considerando su

carácter variable y otras perturbaciones. Uno de los aspectos de mejora del modelo es el ajuste óptimo de los parámetros con las técnicas disponibles para ello, mejorando las métricas estadísticas, en especial del modelo electroquímico, como en [13,15,25,29].

Agradecimientos

Proyecto PID2019-104149RB-I00 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033.

English summary

DEVELOPMENT AND EXPERIMENTAL VALIDATION OF THE DYNAMICAL MODEL OF A 1 kW PEM ELECTROLYZER FOR INTEGRATION WITH RENEWABLE GENERATION

Abstract

In this paper a PEM (Proton Exchange Membrane or Polymer Electrolyte Membrane) electrolyzer dynamic model is built. The model includes the electrochemical domain to know the voltage evolution as a function of the input current (or power), operating temperature and hydrogen and oxygen pressures, and the thermal domain to know the temperature evolution as a function of the input current (or power), voltage and ambient temperature. The model is based on equations widely used by the scientific community and on the adjustment of parameters based on real data from a 1 kW PEM electrolyzer. The implementation of equations, simulation and validation of the model is carried out with MATLAB/Simulink software. Experimental data obtained in the laboratory are used for data acquisition. This model can be used for the design of energy management systems in renewable hydrogen production facilities.

Keywords: PEM electrolyzer, dynamic model, electrochemistry, temperature, hydrogen production.

Referencias

- [1] Abdin, Z., Webb, C. J., & Gray, E. M. (2015). Modelling and simulation of a proton exchange membrane (PEM) electrolyser cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(39), 13243-13257.
- [2] Awasthi, A., Scott, K., & Basu, S. (2011). Dynamic modeling and simulation of a proton exchange membrane electrolyzer for hydrogen

production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(22), 14779-14786.

[3] Bordons, C., García-Torres, F., & Ridao, M. A. (2020). *Model Predictive Control of Microgrids*. Springer International Publishing.

[4] Caparrós, J. J., Segura, F., Andújar, J. M., Vivas, F. J., & Calderón, A. J. (2020). An Optimized Balance of Plant for a Medium-Size PEM Electrolyzer: Design, Control and Physical Implementation. *Electronics*, 9(5).

[5] Carmo, M., Fritz, D. L., Mergel, J., & Stolten, D. (2013). A comprehensive review on PEM water electrolysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(12), 4901-4934.

[6] Chandesaris, M., Médeau, V., Guillet, N., Chelghoum, S., Thoby, D., & Fouda-Onana, F. (2015). Membrane degradation in PEM water electrolyzer: Numerical modeling and experimental evidence of the influence of temperature and current density. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(3), 1353-1366.

[7] Diéguez, P. M., Ursúa, A., Sanchis, P., Sopena, C., Guelbenzu, E., & Gandía, L. M. (2008). Thermal performance of a commercial alkaline water electrolyzer: Experimental study and mathematical modeling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(24), 7338-7354.

[8] Espinosa-López, M., Darras, C., Poggi, P., Glises, R., Baucour, P., Rakotondrainibe, A., . . . Serre-Combre, P. (2018). Modelling and experimental validation of a 46 kW PEM high pressure water electrolyzer. *Renewable Energy*, 119, 160-173.

[9] European Commission. (n.d.). *A European Green Deal*. Recuperado de [link1](#).

[10] Falcão, D. S., & Pinto, A. M. F. R. (2020). A review on PEM electrolyzer modelling: Guidelines for beginners. *Journal of Cleaner Production*, 261, 121184.

[11] Flamm, B., Peter, C., Büchi, F. N., & Lygeros, J. (2021). Electrolyzer modeling and real-time control for optimized production of hydrogen gas. *Applied Energy*, 281, 116031.

[12] Fragiaco, P., & Genovese, M. (2019). Modeling and energy demand analysis of a scalable green hydrogen production system. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(57), 30237-30255.

[13] García-Valverde, R., Espinosa, N., & Urbina, A. (2011). Simple PEM water electrolyser model and

- experimental validation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(2), 1927-1938.
- [14] Görgün, H. (2006). Dynamic modelling of a proton exchange membrane (PEM) electrolyzer. *International Journal of Hydrogen Energy*, 31(1), 29-38.
- [15] Hammoudi, M., Henaou, C., Agbossou, K., Dubé, Y., & Doumbia, M. L. (2012). New multi-physics approach for modelling and design of alkaline electrolyzers. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(19), 13895-13913.
- [16] Han, B., Steen, S. M., Mo, J., & Zhang, F. (2015). Electrochemical performance modeling of a proton exchange membrane electrolyzer cell for hydrogen energy. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(22), 7006-7016.
- [17] Iberdrola. (s.f.). *Qué es el Hidrógeno Verde y su importancia*. Recuperado en 2022, de [link2](#).
- [18] International Energy Agency (IEA). (2019). *The Future of Hydrogen. Seizing today's opportunities*.
- [19] Keller, R., Rauls, E., Hehemann, M., Müller, M., & Carmo, M. (2022). An adaptive model-based feedforward temperature control of a 100 kW PEM electrolyzer. *Control Engineering Practice*, 120, 104992.
- [20] Lebbal, M. E., & Lecœuche, S. (2009). Identification and monitoring of a PEM electrolyser based on dynamical modelling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(14), 5992-5999.
- [21] Lee, B., Park, K., & Kim, H. (2013). Dynamic Simulation of PEM Water Electrolysis and Comparison with Experiments. *International Journal of Electrochemical Science*, 8, 235-248.
- [22] Marangio, F., Santarelli, M., & Cali, M. (2009). Theoretical model and experimental analysis of a high pressure PEM water electrolyser for hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(3), 1143-1158.
- [23] Miland, H. (2005). *Operational Experience and Control Strategies for a Stand-Alone Power System based on Renewable Energy and Hydrogen* (Tesis doctoral). Norwegian University of Science and Technology (NTNU), Trondheim (Norway).
- [24] Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico (MITERD). (2020). *Hoja de ruta del hidrógeno: Una apuesta por el hidrógeno renovable*. Vicepresidencia Cuarta del Gobierno de España.
- [25] Ogumerem, G. S., & Pistikopoulos, E. N. (2020). Parametric optimization and control for a smart Proton Exchange Membrane Water Electrolysis (PEMWE) system. *Journal of Process Control*, 91, 37-49.
- [26] Olivier, P., Bourasseau, C., & Bouamama, P. B. (2017). Low-temperature electrolysis system modelling: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 78, 280-300.
- [27] Schlenbach, M., Carmo, M., Fritz, D. L., Mergel, J., & Stolten, D. (2013). Pressurized PEM water electrolysis: Efficiency and gas crossover. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(35), 14921-14933.
- [28] Springer, T. E., Zawodzinski, T. A., & Gottesfeld, S. (1991). Polymer Electrolyte Fuel Cell Model. *Journal of The Electrochemical Society*, 138(8), 2334-2342.
- [29] Ulleberg, Ø. (1999). *Stand-alone power systems for the future: Optimal design, operation and control of solar-hydrogen energy systems* (Tesis doctoral). Norwegian University of Science and Technology (NTNU), Trondheim (Norway).
- [30] Valverde, L. (2013). *Gestión de Energía en Sistemas con Fuentes Renovables y Almacenamiento de Energía Basado en Hidrógeno Mediante Control Predictivo* (Tesis doctoral). Universidad de Sevilla, Sevilla (España).
- [31] Valverde, L., Rosa, F., Bordons, C., & Guerra, J. (2016). Energy Management Strategies in hydrogen Smart-Grids: A laboratory experience. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(31), 13715-13725.
- [32] Yigit, T., & Selamet, O. F. (2016). Mathematical modeling and dynamic Simulink simulation of high-pressure PEM electrolyzer system. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(32), 13901-13914.
- [33] Ziogou, C., Ipsakis, D., Stergiopoulos, F., Papadopoulou, S., Bezergianni, S., & Voutetakis, S. (2012). Infrastructure, automation and model-based operation strategy in a stand-alone hydrolytic solar-hydrogen production unit. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(21), 16591-16603.



© 2022 by the authors.
Submitted for possible
open access publication
under the terms and conditions of the Creative
Commons Attribution CC-BY-NC-SA 4.0 license
(<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/deed.es>).