

# **MODELO DE ESPACIO–ESTADO DE UNA CELDA ALCALINA ELECTROLÍTICA PRODUCTORA DE HIDRÓGENO**

## *STATE–SPACE MODEL OF AN ALKALINE ELECTROLYTIC CELL HYDROGEN PRODUCER*

***Víctor Manuel Sámano Ortega***

Tecnológico Nacional de México en Celaya  
*M1703097@itcelaya.edu.mx*

***Nicolás Guerrero Chávez***

Tecnológico Nacional de México en Celaya  
*M1703098@itcelaya.edu.mx*

***José Martín Medina Flores***

Tecnológico Nacional de México en Celaya  
*martin.medina@itcelaya.edu.mx*

***José Alberto Zavala Bustos***

Tecnológico Nacional de México en Celaya  
*jose.zavala@itcelaya.edu.mx*

***Arnoldo Maeda Sánchez***

Tecnológico Nacional de México en Celaya  
*arnoldo.maeda@itcelaya.edu.mx*

### **Resumen**

En base a un estudio de los modelos existentes, se desarrolló en el presente artículo una propuesta de modelo de espacio – estado para una celda alcalina productora de hidrógeno. Para la constitución del modelo se consideró una celda bipolar de domo, tomando como variables de estado la presión y temperatura del sistema y como entrada la corriente de alimentación; consiguiendo con esto un modelo SISO no lineal, susceptible de ser analizado con la teoría de control moderno. El modelo se simuló con la herramienta Simulink de Matlab mostrando correspondencia con las respuestas del sistema presentadas en la bibliografía.

**Palabra(s) Clave:** Electrolizador alcalino, Hidrogeno, Modelo de espacio-estado.

## **Abstract**

*Based on existing models' study, a State-Space model proposal for a hydrogen-producing alkaline cell was developed in this paper. For the model constitution a bipolar dome cell was considered, taking system pressure and temperature as state variables and the power current as input, getting whit this a nonlinear SISO model susceptible to be analyzed whit modern control theory. The model was simulated whit Simulink, Matlab's tool, showing correspondence whit system responses presented on the bibliography.*

**Keywords:** *Alkaline electrolyzer, Hydrogen, State – Space model.*

## **1. Introducción**

El uso de hidrogeno como alternativa a los combustibles fósiles es clave en la constitución de un sistema energético limpio, por lo que el estudio de tecnologías para la producción de este gas es de interés en muchos países (da Silva, Simonato, Messeder y da Silva, 2016), incluyendo México (López, Méendez y Collins, 2016), una de las formas de producción que se evalúa es la electrólisis; en consecuencia, los electrolizadores alcalinos han sido estudiados para este fin ampliamente en los últimos años (Ursúa, Gandía y Sanchis, 2012; Zeng y Zhang, 2010; Schalenbach, Zeradianin, Kasian, Cherevko y Mayrhofer, 2018). La operación de estos dispositivos se basa esencialmente en hacer pasar una corriente eléctrica a través del agua con lo que gracias al fenómeno de electrólisis ésta se separa en hidrogeno ( $H_2$ ) y oxigeno ( $O_2$ ), este mecanismo, sin embargo, implica la interacción de distintos fenómenos físicos: eléctricos, térmicos, electroquímicos y de transporte de masa.

Lo anterior conlleva que un sistema de este tipo debe tratarse como una serie de subsistemas interconectados; se han implementado modelos para describir estas interacciones algunos de las cuales incluyen: modelos semiempíricos (Dale, Mann y Salehfar, 2008), modelos con parte estable y parte dinámica acopladas (Espinoza et al., 2018; Lebbal y Lecceuche, 2009) y modelos térmicos dinámicos (Diéguez et al., 2008; García, Espinoza y Urbina, 2012; Huiyong, Mikyoung y Kwang, 2013) que se han resuelto utilizando grafos de unión (Olivier, Bourasseau

y Bouamama, 2016; Zhou y Francois, 2009), diagramas de bloques (Gorgun, 2006; Awasthi, Scott y Basu, 2011; Espinoza et al., 2018) o mediante la resolución secuencial de ecuaciones diferenciales parciales (Huiyong et al., 2013). Los modelos así provistos describen adecuadamente el comportamiento del electrolizador y la influencia de parámetros importantes en su operación; por otro lado, el controlar un sistema así de complejo requiere de implementar más de un lazo de control manteniendo algunas de las variables implicadas invariantes en el tiempo (Zhou y Francois, 2009), reduciendo así la dinámica del sistema.

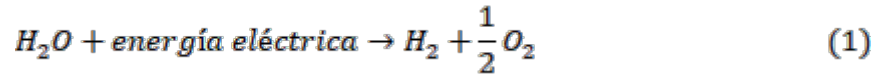
Con el fin de proporcionar un modelo para sistemas de este tipo, sobre el que se pueda realizar un análisis utilizando la teoría de control moderno, un modelo de espacio – estado se propuso en el presente; dicho modelo se basó en las consideraciones y relaciones presentadas en modelos existentes; se plantearon como variables de estado la temperatura y presión del sistema, ya que estas son las que mayormente influyen en su respuesta. Como entrada se consideró a la corriente de alimentación logrando con esto reestructurar el sistema en un modelo espacio – estado SISO, cuya salida es el hidrógeno producido, con parte derecha no lineal; el sistema representado de esta manera se vuelve susceptible de ser estudiado, con la teoría de control moderno, con la intención de implementar algún control sobre él.

El sistema modelado fue una celda para la electrolisis de agua alcalina, este dispositivo representa una tecnología bien establecida en la actualidad, es efectiva y comercial (Rashid, Al Mesfer, Naseem y Danish, 2015); en cuanto a su constitución, se consideró para el modelo una celda bipolar con domo, cuyo electrolito es una solución acuosa de potasa (KOH). El modelo así obtenido se simuló haciendo uso de la herramienta Simulink de Matlab; los resultados proporcionados por la simulación mostraron correspondencia en la respuesta del sistema en comparación con los modelos estudiados en la literatura.

## **2. Métodos**

El principio de operación de una celda alcalina para la producción de hidrógeno se basa esencialmente en el fenómeno de electrolisis del agua; una corriente se

hace pasar a través del agua descomponiéndola en  $H_2$  y  $O_2$ , como se expresa en la ecuación 1.



Este fenómeno se lleva a cabo en una celda alcalina que se constituye como un par de electrodos, ánodo y cátodo, sumergidos en un electrolito y separados entre sí, a los cuales se les aplica un diferencial de potencial  $U_{csl}$  de modo que una corriente,  $i$ , atraviesa el electrolito descomponiendo el agua en  $H_2$  y  $O_2$ , estos gases se expanden en un espacio vacío, domo, se presurizan y salen de la celda en proporción estequiométrica, como se ilustra en la figura 1.

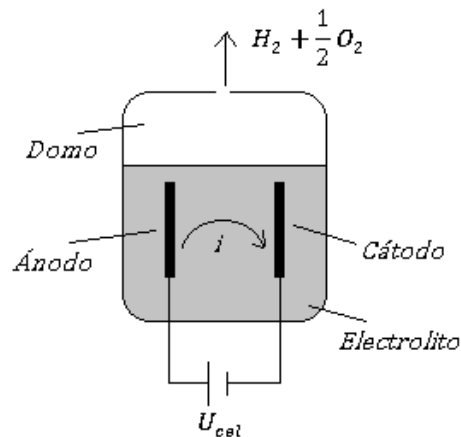


Figura 1 Esquema del funcionamiento de un electrolizador alcalino.

Con la finalidad de producir hidrógeno a mayor escala un electrolizador integra una serie de celdas conectadas eléctrica e hidráulicamente entre sí, una topología común para este fin es la arquitectura denominada bipolar (figura 2). En la que electrodos denominados neutros se disponen entre el ánodo y el cátodo de una celda, esto da como resultado un arreglo de celdas en serie, conformadas entre cada dos electrodos consecutivos.

El modelo desarrollado en el presente se basó en un electrolizador de este tipo considerando además un volumen de domo constante y una solución de KOH como electrolito.

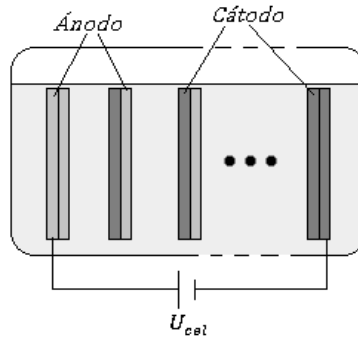


Figura 2 Electrolizador alcalino bipolar.

Los modelos sobre los que se construyó esta propuesta se basan en la curva de polarización de los electrolizadores, esta describe en su totalidad el fenómeno electroquímico presentado en cada una de las celdas y se construye sobre el voltaje de polarización del electrolizador. El voltaje aplicado a una celda se conforma del voltaje reversible  $U_{rev}$  y una serie de sobre voltajes debidos a distintos efectos  $\sum_j \lambda_j$  como se muestra en la ecuación 2.

$$U_{cel} = U_{rev} + \sum_j \lambda_j \quad (2)$$

El voltaje reversible representa la energía necesaria para que se lleve a cabo la reacción de la ecuación 1, este valor se relaciona directamente con la energía libre de Gibbs y la ley de Faraday, y puede modelarse según la ley de Nernst como se muestra en la ecuación 3.

$$U_{rev} = U_{rev}^0 + \frac{RT}{2F} \ln \left( \frac{P_{H_2} \sqrt{P_{O_2}}}{P_{H_2O}} \right) \quad (3)$$

En donde  $U_{rev}^0$  representa el efecto de la temperatura sobre el voltaje a presión estándar, este valor depende directamente de la temperatura del sistema y se puede expresar en relación a esta según Awasthi (2018) y Ruuskanen (2017) (ecuación 4).

$$U_{rev}^0 = 1.229 - 0.9 \times 10^{-3} (T - 298) \quad (4)$$

Con  $T$  la temperatura absoluta del sistema. El segundo término representa el efecto de la presión en el sistema sobre el voltaje reversible, aquí  $F$  representa la constante de Farady,  $R$  la constante de los gases ideales y  $P_i$  indica la presión parcial de los gases en el sistema; la presión parcial del vapor de agua puede expresarse como una función de la temperatura de acuerdo a la ecuación de Antoine (Ruuskanen et al., 2017) o bien como una regresión empírica (Hammoudi, Henao, Agbossou, Dubé y Doumbia, 2012; Espinoza et al., 2018), para el modelo en cuestión su valor se representa de acuerdo a la ecuación 5.

$$\log_{10}P_{H_2O} = 5.1962 - \frac{1730.63}{233.426 + T} \quad (5)$$

Por otro lado, puesto que todos los gases se presurizan en el mismo espacio se obtiene la ecuación 6.

$$\log_{10}P_{H_2O} = 5.1962 - \frac{1730.63}{233.426 + T} \quad (6)$$

En donde  $P$  es la presión del sistema. De la ecuación 6, se puede escribir la ecuación 7.

$$P - P_{H_2O} = P_{H_2} + P_{O_2} \quad (7)$$

Si se considera ahora la ley de Dalton, en base a los coeficientes de la ecuación 1 las presiones para el hidrogeno y el oxígeno se pueden escribir como se muestra en ecuaciones 8 y 9.

$$P_{H_2} = \frac{n_{H_2}}{n_{H_2} + n_{O_2}} (P - P_{H_2O}) \quad (8)$$

$$P_{O_2} = \frac{n_{O_2}}{n_{H_2} + n_{O_2}} (P - P_{H_2O}) \quad (9)$$

En donde  $n_i$  es el coeficiente estequiométrico del compuesto  $i$  en la ecuación 1. Con estas consideraciones, el segundo término del voltaje reversible puede expresarse como se presenta en la ecuación 10.

$$\frac{RT}{2F} \ln \left( \frac{2\sqrt{3} (P - P_{H_2O})^{3/2}}{9 P_{H_2O}} \right) \quad (10)$$

De manera que  $U_{rev}$  es una función de la presión y temperatura del sistema, por lo que puede expresarse entonces como  $U_{rev}(T, P)$ .

Los voltajes de activación por su parte se deben a la energía de activación de la reacción de la ecuación 1,  $U_{a,c}$  y  $U_{a,a}$ , y a las pérdidas por conducción del sistema  $U_{\Omega}$ , ver ecuación 11.

$$\sum_j \lambda_j = U_{a,c} + U_{a,a} + U_{\Omega} \quad (11)$$

La energía de activación está dada para el ánodo y el cátodo,  $U_{a,c}$  y  $U_{a,a}$  respectivamente, se define mediante la ecuación de Butler-Volmer y depende del coeficiente de transferencia de carga,  $\alpha_i$ , en cada electrodo y de la densidad de intercambio de corriente de cada electrodo,  $J_{0,i}$ , este valor impacta de manera significativa en el sobrevoltaje de activación y depende del material seleccionado para los electrodos, este parámetro adopta valores de entre  $10^{-13}$  y  $10^{-6} A/cm^2$ , típicamente (Awasthi et al., 2011). Por su parte el coeficiente de transferencia de carga depende de la dinámica de la reacción, muchas tienden a desarrollarse simétricamente, por lo que, sin más información, este valor se asume igual para ambos electrodos y toma valores de entre 0.018 y 0.42 (Awasthi et al., 2011). Además de estos dos parámetros, el sobrevoltaje de activación depende de la temperatura del sistema y la corriente que circula a través de él, la relación con estas variables se presenta en las ecuaciones 12 y 13.

$$U_{a,a} = \frac{RT}{\alpha_a F} \sinh^{-1} \left( \frac{J}{2J_{0,a}} \right) \quad (12)$$

$$U_{a,c} = \frac{RT}{\alpha_c F} \sinh^{-1} \left( \frac{J}{2J_{0,c}} \right) \quad (13)$$

En donde  $J = i/A_w$ , con  $A_w$  el área de contacto del electrodo con el electrolito. El sobrevoltaje debido a las pérdidas por conducción depende, por otro lado, de la resistencia eléctrica equivalente del sistema,  $R_{eq}$ , y la corriente que pasa a través del sistema, como se expresa en la ecuación 14.

$$U_{\Omega} = R_{eq} i \quad (14)$$

Los elementos que aportan resistencia al sistema son: los conductores mediante los cuales el sistema se conecta a su fuente de alimentación, que aportan una resistencia  $\hat{R}$ ; los electrodos, que aportan una resistencia  $R_p$ ; y finalmente, el electrolito, que aporta una resistencia  $R_e$ . De manera que la resistencia total del sistema se puede expresar como se presenta en la ecuación 15.

$$R_{eq} = \hat{R} + R_p + R_e \quad (15)$$

Típicamente los electrodos son placas, con  $n_c$  celdas en serie, de acuerdo a la arquitectura presentada en la figura 2, la resistencia que los electrodos aportan (Serway y Jewett, 2009) se muestra en la ecuación 16.

$$R_p = (n_c + 1) \frac{s}{k_p A_w} \quad (16)$$

Con  $s$  el espesor de las placas y  $k_p$  su conductividad eléctrica específica. Debido a que el electrolito es alcalino y por características en su contenido de metales que promueven las densidades de intercambio de corriente, aceros inoxidable suelen ser utilizados para fabricar los electrodos (Olivares, Campos, Uribe, Borja y Castellanos, 2007), para este modelo se planteó el uso de un acero AISI316, la conductividad eléctrica específica depende de la temperatura a la que se encuentre el sistema, y por ende el acero, en particular para este acero (Ho y Chu, 1977) se tiene la ecuación 17.

$$\frac{1}{k_p} = (0.0766 * T + 75.544) * 10^{-8} \quad (17)$$



De manera similar, para el electrolito se puede calcular la resistencia que este aporta según la ecuación 18.

$$R_e = n_c \frac{l}{k_e A_w} \quad (18)$$

En donde  $l$  es la separación entre los electrodos y  $k_e$  es la conductividad eléctrica específica del electrolito, como en el caso del acero ésta última depende de la temperatura del sistema y se define (Allebrod, Mollerup, Chatzichristodoulou y Mogensen, 2011), con una concentración de KOH del 35% p/p, como se ilustra en la ecuación 19.

$$k_e = -2.15 \times 10^{-7} T^3 + 6.44 \times 10^{-5} T^2 + 0.007675 T + 0.329863 \quad (19)$$

Con lo que finalmente puede verse que el voltaje de polarización de la celda depende de la temperatura del sistema, la presión del sistema y de la corriente de alimentación, de modo que puede expresarse como  $U_{cel}(T, P, i)$ .

Como se mencionó anteriormente, el voltaje reversible aporta la energía necesaria para que la reacción de la ecuación 1 se lleve a cabo, sin embargo, llevada a cabo bajo este diferencial de potencial es reversible, esto significa que el oxígeno e hidrógeno obtenidos pueden reconstituirse en agua nuevamente, para garantizar que esto no ocurra, un voltaje mayor al reversible debe aplicarse, este voltaje se conoce como termoneutro,  $U_{tn}$ , y aporta calor a la reacción con lo que la condición de reversibilidad se elimina, este voltaje definido como se presenta en la ecuación 20.

$$U_{tn} = U_{tn}^0 + f_{HHV}(T, P) + \frac{\varphi}{2F} Y \quad (20)$$

En donde  $U_{tn}^0$  se denomina HHV (High Heating Voltage) y representa la evolución del voltaje termoneutro con la temperatura a presión estándar y puede calcularse según la ecuación 21.

$$U_{tn}^0 = 1.4756 + 2.252 \times 10^{-4} T + 1.52 \times 10^{-8} T^2 \quad (21)$$

El término  $f_{HHV}(T, P)$ , influye el valor del HHV a presiones altas, más adelante se hace evidente la operación del electrolizador a bajas presiones por lo que este término se despreció en el modelo aquí presentado.

El tercer término del voltaje termoneuro representa la influencia que la presión del sistema tiene sobre él (ecuación 22).

$$\varphi = 1.5 \frac{P_{H_2O}}{P - P_{H_2O}} \quad (22)$$

El valor de  $P_{H_2O}$  puede obtenerse como en la ecuación 5. Por otra parte,  $Y$  representa el cambio en la entalpia del agua al pasar de fase líquida en estado estándar a fase gaseosa a temperatura  $T$  y presión  $P_{H_2O}$ , este valor depende de la temperatura del sistema y se expresa según la ecuación 23.

$$Y = 42960 + 40.762T - 0.06682T^2 \quad (23)$$

De manera que el voltaje termoneuro depende la temperatura y presión del sistema y puede expresarse como  $U_{tn}(T, P)$ .

La estructura general del modelo de espacio – estado, para un sistema SISO se muestra en la ecuación 24.

$$\begin{aligned} \dot{x} &= F(x, u) \\ y &= H(x, u) \end{aligned} \quad (24)$$

En donde  $y$  es la salida del sistema,  $u$  es la entrada y  $x$  es el vector de variables de estado definido como se muestra en la ecuación 25.

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n \quad (25)$$

Las ecuaciones hasta ahora planteadas sobre el sistema son funciones de la temperatura, la presión y la corriente, si se define a la corriente como la entrada del sistema y si se define, además la ecuación 26 como:

$$x = \begin{bmatrix} T \\ P \end{bmatrix} \quad (26)$$

De acuerdo con la ecuación 24 es necesario plantear ecuaciones,  $F_T(T, P, i)$  y  $F_P(T, P, i)$ , que definan la tasa de cambio de la temperatura y presión, respectivamente, en función de la temperatura, la presión y la corriente del sistema. Para obtener la primera ecuación requerida, considérese el modelo de capacitancias térmicas presentado la ecuación 27.

$$C_T \frac{dT}{dt} = \dot{Q}_{gen} - \dot{Q}_{per} \quad (27)$$

En donde  $C_T$  es la capacitancia térmica concentrada del sistema,  $\dot{Q}_{gen}$  es el calor generado en el sistema y  $\dot{Q}_{per}$  es el calor que sale del sistema. La capacitancia térmica concentrada, es un parámetro invariante en el tiempo y puede calcularse utilizando la ecuación 28.

$$C_T = \sum_j \rho_j V_j \hat{c}_j \quad (28)$$

En donde  $\rho_j$ ,  $V_j$  y  $\hat{c}_j$  son la densidad, el volumen y el calor específico, respectivamente, de cada componente que conforma el sistema.

Por su parte, el calor que se genera en el sistema depende de su eficiencia térmica,  $\eta_T$ , que puede ser calculada utilizando la ecuación 29.

$$\eta_T = \frac{U_{tn}}{U_{cel}} \quad (29)$$

Definido este valor, el calor generado puede ser calculado mediante ecuación 30.

$$\dot{Q}_{gen} = U_{cel}(1 - \eta_T)i = (U_{cel} - U_{tn})i \quad (30)$$

En cuanto al calor que sale del sistema, este considera las pérdidas con los alrededores,  $\dot{Q}_{air}$ , y el calor sensible del agua que entra al sistema,  $\dot{Q}_{sen}$ , lo cual es necesario para mantener constante el volumen del domo, como se planteó en principio. Con esto, el calor perdido se expresa con la ecuación 31.

$$\dot{Q}_{per} = \dot{Q}_{air} + \dot{Q}_{sen} \quad (31)$$

El calor que se pierde con los alrededores está dado por la ecuación 32.

$$\dot{Q}_{air} = A_c h(T - T_a) \quad (32)$$

En donde  $A_c$  es el área de contacto del electrolizador con los alrededores,  $h$  es el coeficiente de transferencia de calor por convección – radiación, del sistema con los alrededores y  $T_a$  es la temperatura ambiente. Por otro lado, el calor sensible del agua que entra al sistema está dado por la ecuación 33.

$$\dot{Q}_{sen} = \dot{m}_{H_2O} \hat{c}_{H_2O} (T - T_a) \quad (33)$$

En donde  $\hat{c}_{H_2O}$  es el calor específico del agua y  $\dot{m}_{H_2O}$  es el flujo másico del agua que entra al sistema, este último valor depende de la medida en que el agua reacciona en el electrolizador y se puede calcular mediante la ecuación 34.

$$\dot{m}_{H_2O} = M_{H_2O} \dot{n}_{H_2O} \quad (34)$$

En donde  $M_{H_2O}$  es el peso molecular del agua y  $\dot{n}_{H_2O}$  representa la cantidad de moles de agua por unidad de tiempo que reaccionan en el electrolizador, este valor se puede calcular, gracias a la ley de Faraday, mediante la ecuación 35.

$$\dot{n}_{H_2O} = \frac{\eta_F i}{2F} \quad (35)$$

Aquí  $\eta_F$  es la eficiencia de Faraday de una celda y representa la medida en que la energía aplicada a la celda se transforma en energía utilizada por la reacción, después de considerar la reversibilidad de la misma, este valor se calcula con la ecuación 36.

$$\eta_F = \frac{U_{rev}}{U_{cel}} \quad (36)$$

De manera que  $C_T \frac{dT}{dt}$  es una función de la temperatura y presión del sistema así como de la corriente de alimentación, por lo que se satisface la ecuación 37.

$$\frac{dT}{dt} = F_T(T, P, i) \quad (37)$$

Para expresar ahora la derivada de la presión en función de las variables de estado y la entrada del sistema, se consideró la ecuación de estado de los gases ideales aplicada al domo, de manera que si la cantidad de materia dentro del domo, con volumen constante  $V_d$ , cambia respecto al tiempo también cambia la presión en su interior, esto se deduce empleando la ecuación 38.

$$\dot{P}V_d = \dot{n}RT \quad (38)$$

O bien representado por la ecuación 39.

$$\frac{dP}{dt} = \frac{RT}{V_d} (\dot{n}_s|_{HHO} - \dot{n}_e|_{HHO}) \quad (39)$$

En donde  $\dot{n}_e|_{HHO}$  se refiere al flujo de la mezcla hidrógeno – oxígeno (HHO) que entra al domo gracias a la evolución de la reacción de la ecuación 1 y  $\dot{n}_s|_{HHO}$  hace referencia al HHO que sale del domo debido al hecho de que la presión en el domo aumenta superando a la presión de los alrededores del sistema. El flujo de HHO que entra al domo puede calcularse con la ecuación 40.

$$\dot{n}_e|_{HHO} = \dot{n}_{H_2} + \dot{n}_{O_2} \quad (40)$$

En donde el flujo de cada uno de los componentes de la mezcla está dado por la ley de Faraday según las ecuaciones 41 y 42.

$$\dot{n}_{H_2} = \frac{\eta_F}{2F} i \quad (41)$$

$$\dot{n}_{O_2} = \frac{\eta_F}{4F} i \quad (42)$$

En cuanto al gas que sale de la mezcla si éste fluye fuera del domo con un régimen subsónico menor a  $0.3Ma$  (con  $Ma$  es el número de Mach), se puede considerar incompresible (Çengel y Cimbala, 2006) y por lo tanto, es posible

aplicar la ecuación de Bernoulli entre dos puntos dentro y a la salida del domo; si el gas sale del domo por una abertura de área  $A_d$ , y si se considera que dentro del domo el flujo es a través de un área  $A_i$  (ecuación 43).

$$\frac{P}{\rho_{HHO}} + \frac{1}{2} \left( \frac{\dot{V}_{HHO}}{A_i} \right)^2 = \frac{P_\alpha}{\rho_{HHO}} + \frac{1}{2} \left( \frac{\dot{V}_{HHO}}{A_d} \right)^2 \quad (43)$$

Dentro del domo los gases se generan y comprimen, por lo que pueden considerarse sin velocidad, con esta consideración, el flujo de gas que sale del domo,  $\dot{V}_{HHO}$ , puede escribirse como se muestra en la ecuación 44.

$$\dot{V}_{HHO} = A_d \sqrt{\frac{2(P - P_\alpha)}{\rho_{HHO}}} \quad (44)$$

Y si además se considera que dentro del domo se cumple lo propuesto en las ecuaciones 45 y 46.

$$\dot{V}_{HHO} = \frac{RT}{P} \dot{n}_s|_{HHO} \quad (45)$$

$$\rho_{HHO} = \frac{PM_{HHO}}{RT} \quad (46)$$

Con  $M_{HHO}$  el peso molecular del HHO. El flujo molar de HHO que sale del sistema se puede escribir como se presenta en la ecuación 47.

$$\dot{n}_s|_{HHO} = A_d \sqrt{\frac{2P(P - P_\alpha)}{RTM_{HHO}}} \quad (47)$$

Con todo esto se satisface, finalmente la ecuación 48.

$$\frac{dP}{dt} = F_p(T, P, i) \quad (48)$$

Además, dos terceras partes del HHO que sale del sistema son  $H_2$  por lo que si se considera este flujo como la salida del sistema se obtiene la ecuación 49.

$$\dot{n}_s|_{H_2} = \frac{2}{3} \dot{n}_s|_{HHO} \quad (49)$$

Satisfaciendo la necesidad según la ecuación 24 de que la salida sea una función de las variables de estado y la entrada (ecuación 50).

$$\dot{n}_s|_{H_2} = H_{H_2}(T, P) \quad (50)$$

Con esto queda completamente determinado el modelo de espacio – estado del electrolizador como se presenta en las ecuaciones 51 y 52.

$$\begin{bmatrix} \dot{T} \\ \dot{P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_T(T, P, i) \\ F_P(T, P, i) \end{bmatrix} \quad (51)$$

$$[\dot{n}_s|_{H_2}] = H_{H_2}(T, P) \quad (52)$$

Adicionalmente, con la finalidad de generar curvas de polarización del electrolizador, que fuesen el punto de comparación entre el modelo aquí propuesto y los resultados expuestos en la bibliografía revisada, el voltaje de polarización se tomó en cuenta como una salida más del sistema, puesto que este valor como ya se demostró satisface lo que se presenta en la ecuación 53.

$$U_{cel} = H_{U_{cel}}(T, P, i) \quad (53)$$

Para resolver el modelo se utilizó la herramienta Simulink de Matlab, la figura 3 muestra el diagrama de bloques implementado.

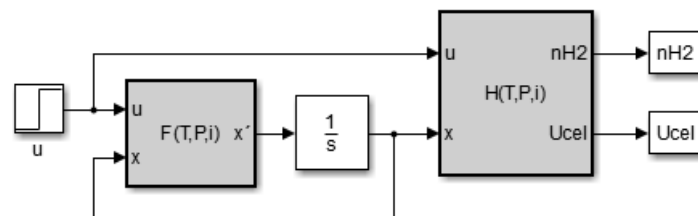


Figura 3 Diagrama de bloques del sistema implementado en Simulink.

La construcción para calcular el calor y el flujo de los gases producidos por la electrólisis, dentro del bloque  $F(T, P, i)$  se muestra a detalle en la figura 4.

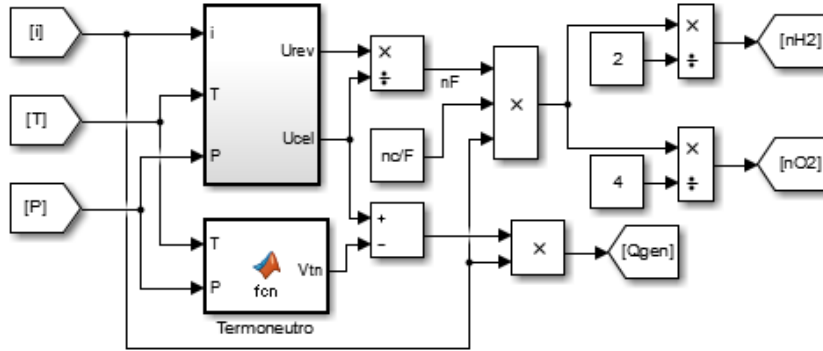


Figura 4 Diagrama de bloques para obtener el calor y el flujo.

La forma de obtener los voltajes reversibles y de polarización del electrolizador se muestra en la figura 5.

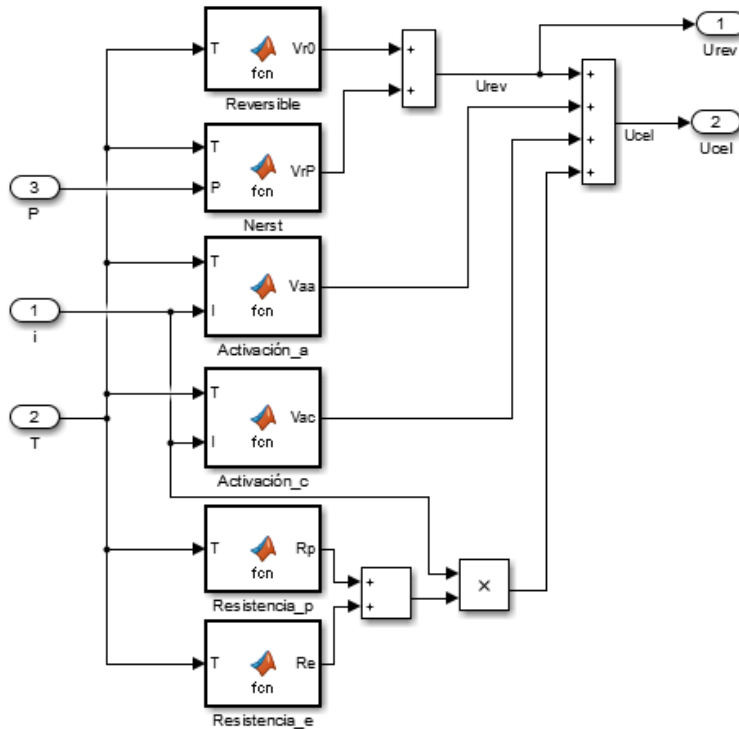


Figura 5 Diagrama para obtener los voltajes reversible y de polarización.

Para obtener la derivada de la temperatura se implementó el diagrama mostrado en la figura 6.

Para obtener la derivada de la presión se implementó el diagrama mostrado en la figura 7.



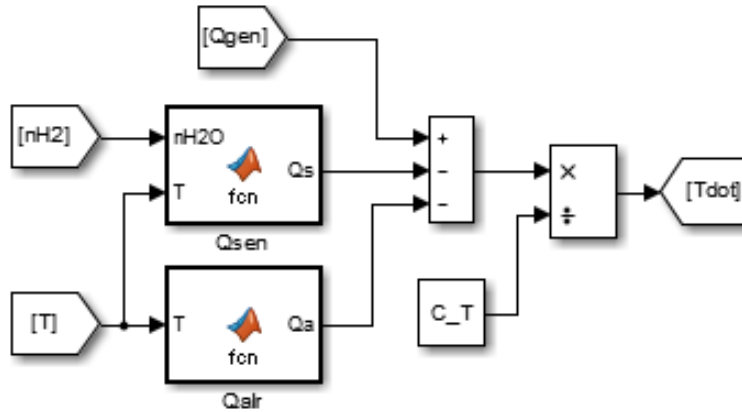


Figura 6 Diagrama de bloques implementado para obtener la derivada de la temperatura.

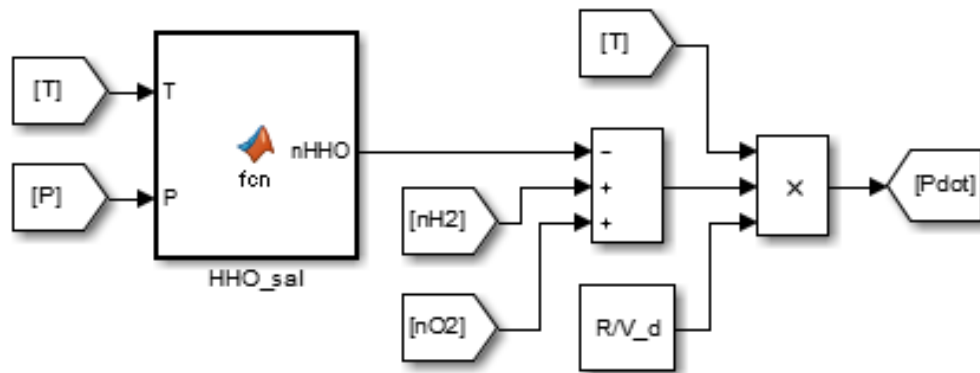


Figura 7 Diagrama de bloques implementado para obtener la derivada de la presión.

En cuanto al bloque  $H(T, P, i)$ , el voltaje de polarización se calcula de manera similar a como se hace en el bloque  $F(T, P, i)$ , lo mismo que el  $H_2$  que sale del domo el cual se calcula de manera similar al HHO que sale del sistema, como se vio en la ecuación 49.

### 3. Resultados

En la figura 8 se muestra una comparativa entre la curva de polarización obtenida mediante el modelo de espacio estado desarrollado en este artículo y los resultados presentados en la bibliografía.

En la figura 9 se muestra la evolución en el tiempo de la temperatura del sistema, provocada por una entrada escalón de 30A, así como una comparación con modelos térmicos dinámicos obtenidos de la bibliografía.

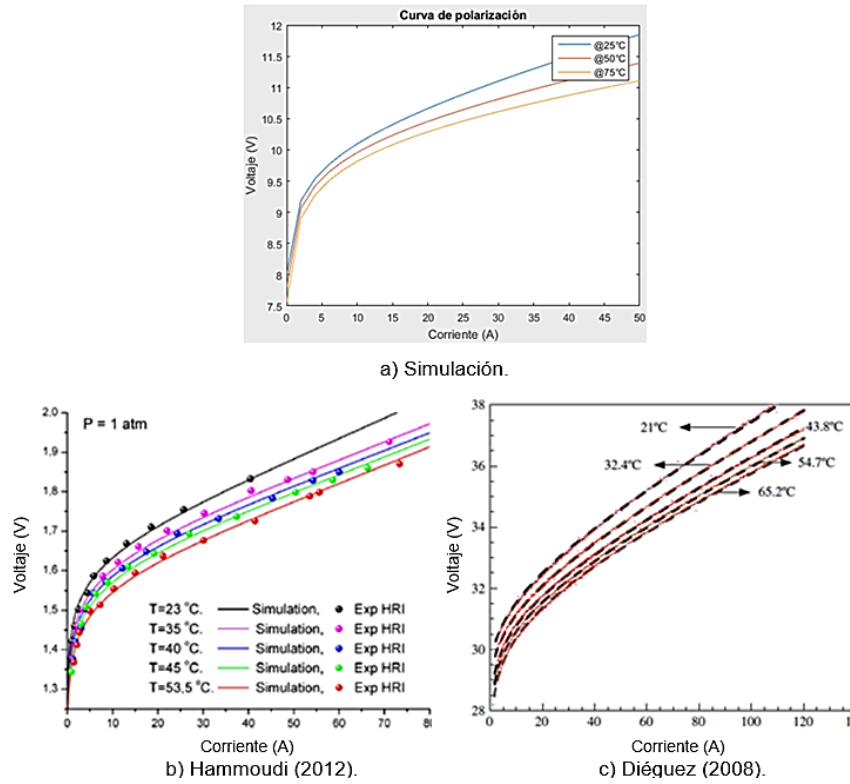


Figura 8 Curva de polarización del electrolizador a diferentes temperaturas.

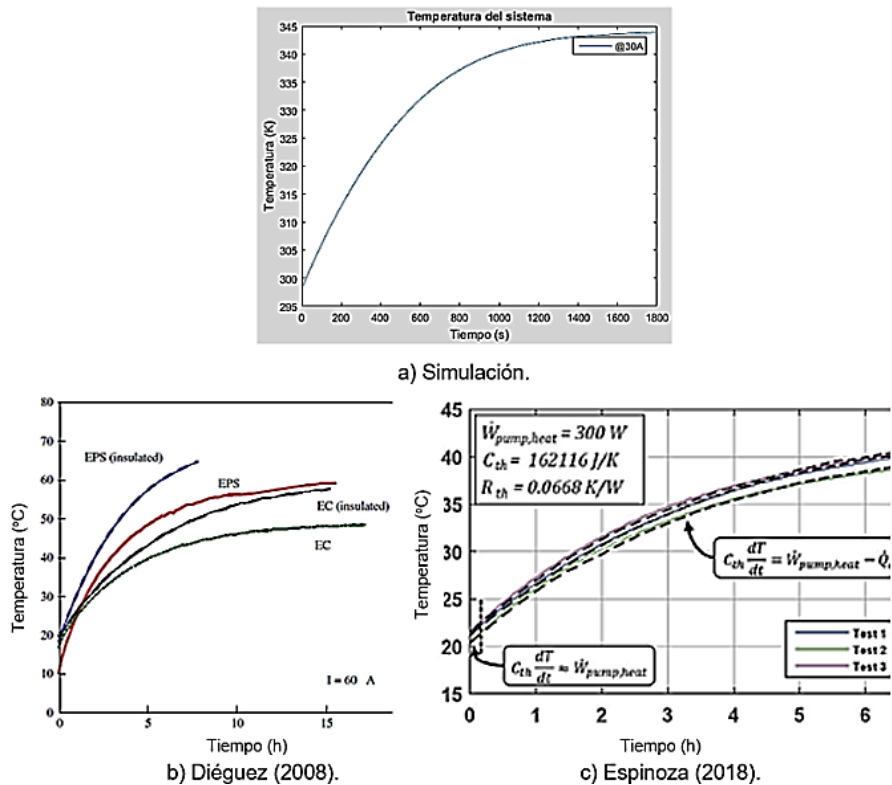


Figura 9 Evolución de la temperatura del sistema en el tiempo.

En la figura 10 se muestra la evolución de la presión del sistema debida a una entrada escalón de 30A. La figura 11 por su parte, muestra la evolución en el tiempo del H<sub>2</sub> que sale del sistema ante una entrada escalón de 30A.

Finalmente, la figura 12 muestra la evolución en el tiempo de los voltajes de polarización, reversible y termoneutro del sistema.

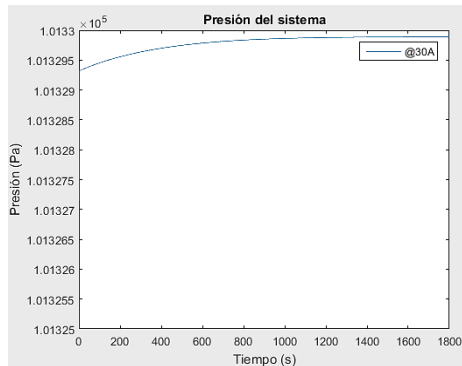


Figura 10 Evolución de la presión del sistema en el tiempo.

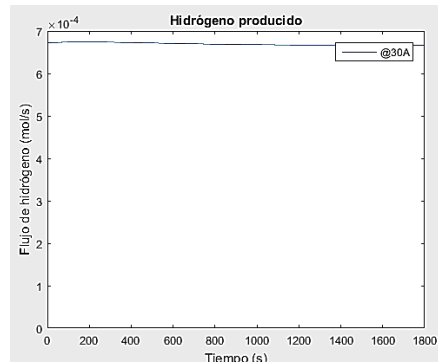


Figura 11 Evolución en el tiempo del H<sub>2</sub> que sale del sistema.

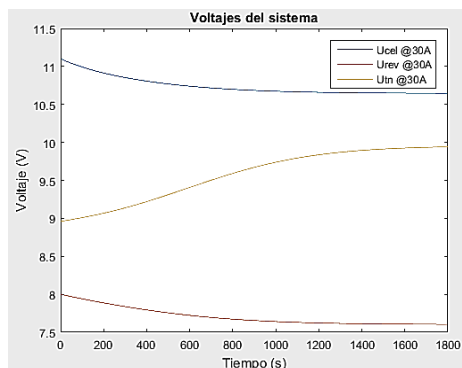


Figura 12 Evolución en el tiempo de los voltajes del sistema.

## **4. Discusión**

La solución del modelo arrojó como resultado similitudes notables con el comportamiento del sistema presentado en la bibliografía revisada; en la figura 8 se puede apreciar una correspondencia entre la forma característica de la curva de polarización y el efecto que la temperatura tiene sobre ella; en la figura 9 una evolución lenta de la temperatura y la trayectoria que esta sigue se asemeja a lo presentado en la bibliografía; por otro lado en la figura 12 se puede apreciar como la evolución progresiva de la temperatura afecta a los voltajes del sistema, la forma en que los afecta se corresponde con lo expresado en las referencias revisadas. La evolución de la presión se presentó rápida al inicio y después con una variación poco significativa, aproximadamente 0.5 Pa, de manera que puede considerarse casi estática, así el modelo se aproxima más a las consideraciones tomadas respecto de ésta variable en la bibliografía, pero sin dejar de integrar su dinámica en el comportamiento del sistema.

Tomando en cuenta lo anterior y sin un antecedente que incluya a la vez el comportamiento dinámico de la presión y temperatura del sistema se concluye que, el modelo desarrollado en el presente describe correctamente el comportamiento de un electrolizador y además aporta, a diferencia de los modelos existentes hasta ahora, una estructura sobre la que se puede llevar a cabo un análisis, aplicando la teoría de control moderno, lo cual podría facilitar la implementación de algún control sobre el sistema.

## **5. Bibliografía y Referencias**

- [1] da Silva, T. Simonato, T. Messeder, D. da Silva, A. (2016). Hydrogen: Trends, production and characterization of the main process worldwide. *International Journal of Hydrogen Energy*, XXX, 1-16.
- [2] Hammoudi, M. Henao, C. Agbossou, K. Dubé, Y. Doumbia, M. (2012). New multi – physics approach modelling and design of alkaline electrolyzers. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37, 13895 – 13913.
- [3] Gorgun, H. (2006). Dynamic modelling of a proton exchange membrane (PEM) electrolyzer. *International Journal of Hydrogen Energy*, 31, 29 – 38.

- [4] Schalenbach, M. Zeradjanin, A. Kasian, O. Cherevko, S. Mayrhofer, K. A Perspective on Low-Temperature Water Electrolysis Challenges in Alkaline and Acidic Technology (2018). *International Journal Electrochemical Science*, 13, 1173-1226.
- [5] López, A. Meléndez, M. Collins, V. (2016). Hydrogen production research in Mexico: A review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41, 23363–23379.
- [6] Ursúa, A. Gandía, L. Sanchis, P. (2012). Hydrogen Production from Water Electrolysis: Current Status and Future Trends. *Proceedings of the IEEE*, vol. 100, no. 2, 410-426.
- [7] Zeng, k. Zhang, D. (2010). Recent progress in alkaline water electrolysis for hydrogen production and applications. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36, 307-326.
- [8] Olivier, P. Bourasseau, C. Bouamama, B. (2016). Modelling, simulation and analysis of a PEM electrolysis system. *IFAC–PapersOnLine*, 49-12, 1014-1019.
- [9] Diéguez, P. Ursúa, A. Sanchis, P. Sopena, C. Guelbenzu, E. Gandía L. (2008). Thermal performance of a commercial alkaline water electrolyzer: Experimental study and mathematical modeling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33, 7338 – 7354.
- [10] Zhou, T. Francois, B. (2009). Modeling and control design of hydrogen production process for an active hydrogen/wind hybrid power system. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34, 21 – 30.
- [11] Lebbal, M. Lecceuche, S. (2009). Identification and monitoring of a PEM electrolyser based on dynamical modelling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34, 5992 – 5999.
- [12] Serway, R. Jewett, J. (2009). *Física para ciencias e ingeniería con Física Moderna Volumen2*. México, D. F.: McGraw – Hill.
- [13] 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, 14779 – 14786.

- [14] Dale, N. Mann, M. Salehfar, H. (2008). Semiempirical model based on the thermodynamic principles for determining 6 kW proton exchange membrane electrolyzer stack characteristics. *Journal of Power Sources*, 185, 1348–1353.
- [15] García, R. Espinoza, N. Urbina, A. (2012). Simple PEM water electrolyser model and experimental validation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37, 1927 – 1938.
- [16] Huiyong, K. Mikyoung P. Kwang, S. (2013). One – dimensional dynamic modeling of a high – pressure water electrolysis system for hydrogen production. *International journal of Hydrogen Energy*, 38, 2596 – 2609.
- [17] Ruuskanen, V. Koponen, J. Kimmo, H. Antti, K. Markku, N. Jero, A. (2017). PEM water electrolyzer model for a power – hardware – in – loop simulator. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42, 10775–10784.
- [18] Espinoza, M. Darras, C. Poggi, P. Glises, R. Baucour, P. Rakotondrainibe, A. Besse, S. Serre, P. (2018). Modelling and experimental validation of a 46 kW high pressure water electrolyzer. *Renewable Energy*, 119, 160 – 173.
- [19] Rashid, M., Al Mesfer, K., Naseem, H., & Danish, M. (2015). Hydrogen Production by Water Electrolysis: A Review of Alkaline Water Electrolysis, PEM Water Electrolysis and High Temperature Water Electrolysis. *International Journal of Engineering and Advanced Technology*, 4, 80-93.
- [20] Olivares, J. M., Campos, M. L., Uribe, J., Borja, E., & Castellanos, R. H. Studies on the hydrogen evolution reaction on different stainless steels. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32, pp.3170-3173 (2007).
- [21] Ho, C. Chu, T. (1977). Electrical resistivity and thermal conductivity of nine selected AISI stainless steels. Center for information and numerical data analysis and synthesis, report 45.
- [22] Allebrod, F., Mollerup, P. L., Chatzichristodoulou, C., & Mogensen, M. B. (2011). Electrical conductivity measurements of aqueous and immobilized potassium hydroxide. In *Proceedings* (pp. 181ELE).
- [23] Çengel, Y. Cimbala, J. (2006). *Mecánica de fluidos fundamentos y aplicaciones*. México, DF: McGraw-Hill.