

А. И. ГОЛОДНОВА¹

М. В. ЕРПАЛОВ¹

А. И. ГОЛОДНОВ²

¹Институт высокотемпературной
электрохимии

Уральского отделения РАН,
г. Екатеринбург

²Уральский федеральный университет,
г. Екатеринбург

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МАТЕРИАЛЬНОГО БАЛАНСА ТВЕРДООКСИДНОГО ЭЛЕКТРОЛИЗЕРА

Решение вопросов эффективного использования твердооксидных электролизеров является перспективным для развития как энергетики, так и промышленности в целом, поэтому исследования в области повышения эффективности и надежности электролизеров проводятся учеными по всему миру. В данной статье рассматривается математическая модель материального баланса для твердооксидного электролизера, позволяющая оптимизировать параметры работы действующего и вновь проектируемого оборудования. В частности, особое внимание направлено на изучение влияния параметров работы электрохимических установок планарной конструкции при электролизе на состав продуктов реакций. На основе расчетных данных для твердооксидного электролизера планарной конструкции определена взаимосвязь между составами реагентов на входе и продуктами на выходе при помощи методов математического моделирования в сравнении с экспериментальными данными.

Ключевые слова: математическое моделирование, электрохимические устройства, твердооксидный электролизер, химические реакции, материальный баланс, сила тока, напряжение.

Введение. Постоянно возрастающее потребление органического топлива приводит к образованию большого количества выбросов диоксида углерода. При этом образование парниковых газов, представляющих собою экологический аспект проблем дальнейшего развития энергетики, повышает актуальность использования альтернативных источников энергии, в том числе твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). При этом обратимость ТОТЭ позволяет решать вопросы не только получения и использования водорода в качестве топлива, но и утилизировать диоксид углерода. В качестве примера Chung T. D. рассматривает использование электрохимических устройств, для утилизации CO_2 , с получением синтетического топлива [1]. В настоящее время Институту высокотемпературной электрохимии Уральского отделения РАН разработан процесс, основанный на высокотемпературном совместном электролизе пара и CO_2 с использованием твердооксидных электролизеров (ТОЭ) для производства синтез-газа [2].

Следует отметить, что высокотемпературный электролиз является перспективной технологией. Согласно Энергетической стратегии Российской Федерации на период до 2035 г., развитие водородной энергетики должно обеспечить рост объемов производства водородного топлива и его потребления. В то же время в стратегии социально-эконо-

мического развития Российской Федерации с низким уровнем выбросов парниковых газов до 2050 г. отражена необходимость разработки современных технологий, снижающих образование парниковых газов, а также технологий улавливания и утилизации CO_2 . Одной из основных мер, способствующих решению этих задач, является разработка отечественных технологий производства чистого водорода методом высокотемпературного электролиза воды, а также электрохимической конверсии CO_2 с получением синтетического углеводородного топлива (синтез-газ, метан, метanol или диметиловый эфир) [3]. Наряду с синтетическим топливом синтез-газ является сырьем для производства широкого спектра химикатов, что открывает новые возможности для различных отраслей промышленности [4].

Совместный электролиз H_2O и CO_2 является новой областью исследований и работы по развитию энергоэффективности, повышению коэффициента конверсии, стабильности и долговечности. Работы электрохимических устройств являются актуальными [5].

Для решения вопросов оптимизации режимов работы электрохимических устройств необходимо отметить, что они имеют сложную конструкцию и изготавливаются из достаточно дорогостоящих материалов [6]. Поэтому для получения представлений

о технологических особенностях работы ТОЭ используют различные методы исследования, в том числе математическое описание электрохимических реакций, характеристики потоков входящих и выходящих газов и положений электрических контактов [7]. Методы численного моделирования могут позволить оптимизировать режимы работы устройств. При этом для получения адекватных результатов исследований и оптимизации модель должна содержать математическое описание физических законов, которые находятся в основе работы реального устройства. Хотя объекты в реальном мире всегда сложнее модели, при упрощении описания необходимо акцентировать внимание на характеристики устройства, которые позволяют управлять его работой [8].

В данной статье описываются результаты исследования, целью которого явилась разработка и оценка достоверности математической модели материального баланса твердооксидного электролизера планарной конструкции для производства синтез-газа из смеси паров воды и диоксида углерода. Возможность управлять процентным составом газа на выходе в зависимости от входных рабочих параметров позволяет определить необходимое соотношение $H_2 + H_2O$ к CO_2 на входе в катодное пространство, чтобы получить требуемое соотношение H_2 к $CO + CO_2$ с учетом склонности веществ к разложению и приложенному сопротивлению.

Исследование работы данного типа электрохимических устройств обусловлено тем, что данная конструкция позволяет перерабатывать CO_2 (дымовые газы) в синтез-газ, что позволит снизить количество выбросов, но именно оптимизация работы способствует получению сырья высокого качества для дальнейшего производства синтетического топлива (в том числе различных спиртов).

Задачи исследования:

1. Проанализировать зависимость между соотношениями реагентов на входе и соотношением веществ в продуктах, полученных при совместном электролизе H_2O к CO_2 в твердооксидном электролизере планарной конструкции, работающем на постоянном токе.
2. Сравнить данные, полученные при расчетах, с результатами, полученными при работе лабораторной установки с твердооксидным электролизером планарной конструкции.

В связи с данными задачами следует отметить, что математическая модель материального баланса составлялась с учетом допущений:

1. Модель составляется под конкретную конструкцию электролизера, и внесение конструктивных изменений в установку не рассматривается.
2. КПД устройства с данной конструкцией может быть охарактеризовано количеством вещества, подаваемого на электролиз.
3. Энергетическая характеристика элемента моделируется одним линейным уравнением, связывающим напряжение с постоянным током.
4. Параметры, характеризующие материалы, из которых изготовлен электролизер (твёрдый электролит, электроды и т.д.), учитываются в модели через значение общего сопротивления и считаются постоянными.
5. При работе устройства выполняется закон сохранения масс: «масса веществ, вступивших в химическую реакцию, равна массе образовавшихся веществ».

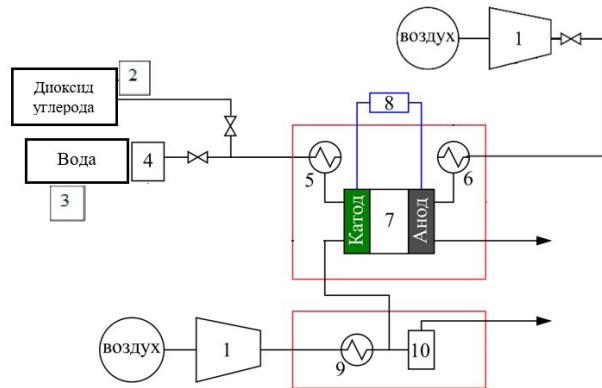


Рис. 1. Лабораторный стенд: 1 — воздушные компрессоры; 2 — регулятор расхода углекислого газа; 3 — регулятор расхода воды; 4 — парогенератор; 5 — теплообменник для подогрева топлива; 6 — теплообменник для подогрева воздуха; 7 — ТОЭ; 8 — регулируемый источник постоянного тока; 9 — теплообменник для подогрева воздуха; 10 — катализатор дожигания топлива

Физические особенности электрохимической установки. Схема лабораторной установки приведена на рис. 1. Она состоит из электролизера планарной конструкции системы подачи и отвода газов, парогенератора и дожигателя.

Конструкция электрохимической установки обеспечивала возможность проведения исследований работы электролизера при использовании газовой смеси, состоящей из водорода, углекислого газа и водяных паров. Данные газы подавались из баллонов, установленных попарно и расположенных вне испытательной комнаты.

Управление составом смеси реагентов осуществлялось с помощью регуляторов массового расхода для газов, входящих в ее состав. Для подачи воздуха в анодное пространство использовался компрессор.

На выходе из установки был предусмотрен реактор-дожигатель для сжигания образующегося синтез-газа, использующий дополнительный воздух, подаваемый с отдельного компрессора.

Для работы электролизера использовался регулируемый источник постоянного тока. Подаваемое на электролизер напряжение могло варьироваться в зависимости от условий проведения экспериментов. С помощью счетчиков электрической энергии, установленных в лабораторной установке, было определено удельное энергопотребление на единицу массы получаемого синтез-газа.

При работе установки использован электрохимический датчик кислорода, позволяющий на основе константы диссоциации воды оценить содержание водяных паров в отходящих газах. Определение влажности продуктов окисления топлива, что позволяло контролировать наличие восстановительной атмосферы в катодном пространстве ТОЭ. Используемый датчик представляет собой гальванический элемент с твердым электролитом из керамики YSZ, благодаря чему по величине генерируемой ЭДС он позволяет определять концентрацию исключительно кислорода.

Аналитический контроль выходящих газов в процессе испытаний ТОЭ осуществлялся с помощью хроматографа. Идентификацию вещества

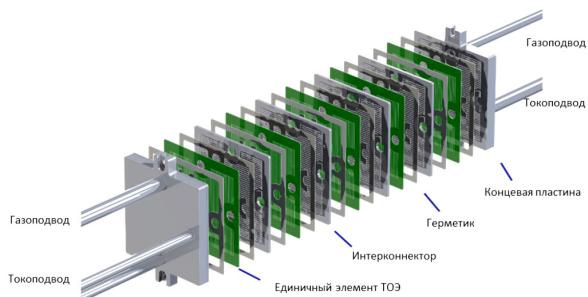


Рис. 2. Модель твердооксидного электролизера планарной конструкции

осуществляли по его времени удерживания. Количественный анализ проводили на основе предустановленной зависимости площади пика вещества на хроматограмме от его объемной концентрации. По найденным значениям площадей пиков вычисляли среднее арифметическое и по градуировочной характеристике находили объемную концентрацию определяемого вещества.

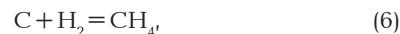
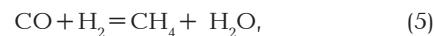
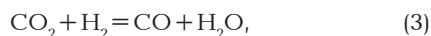
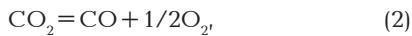
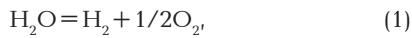
Электролизер планарной конструкции, установленный в данной установке, включал 30 единичных ячеек, каждая из которых состояла из двух электродов, разделенных слоем электролита. Со стороны катода, имеющего отрицательный заряд, подают газовую смесь, подлежащую электролизу. На границе раздела фаз происходят электрохимические реакции, в результате которых углекислый газ и пары воды переходят соответственно в монооксид углерода и водород. Отделившиеся атомы кислорода принимают электроны от катода и преобразуются в ионы кислорода, которые, в свою очередь, могут проходить через слой электролита в сторону положительно заряженного электрода, называемого анодом. Модель электролизера представлена на рис 2.

В электролизере невозможно провести полное разложение водяного пара и углекислого газа, поэтому из катодного канала выходит четырехкомпонентная смесь, содержащая H_2O , CO_2 , CO и H_2 . Соотношение водород- и углеродсодержащих компонентов на выходе в том числе определяется их соотношением на входе ТОЭ.

Теоретические основы проведения исследования. Материальный баланс определяет связь процентной концентрации реагентов и полученных продуктов при заданных расходах на входе или выходе из устройства при определенной токовой нагрузке. При этом реагенты проходят через устройство по каналам, которые образуются между парами пластин катод-интерконнектор и анод-интерконнектор.

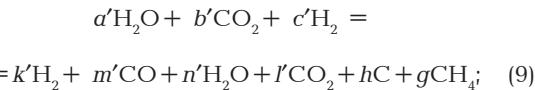
Технологический процесс получения синтез-газа можно описать потоками реагентов и продуктов реакций. Для этого составлен материальный баланс электрохимического устройства, который является выражением закона сохранения массы вещества [9–10].

В общем виде работу можно описать химическими реакциями:



Данный перечень можно условно разделить на реакции, которые описывают процесс электролиза реакции образования целевого продукта (1–2) и побочные реакции, которые связаны с предотвращением образования углерода на поверхности каналов, влекущего за собой увеличение местного сопротивления и потери скорости движения потока газа по каналам.

Для сложных процессов проводят суммирование уравнений отдельных стадий реакции, что всегда приводит к химическому уравнению полной реакции. Тогда в общем виде материальный баланс будет содержать уравнения суммарных реакций электролиза (8) и побочных превращений (9), протекающих в катодном канале, также от уравнений закона сохранения массы/стехиометрических коэффициентов (10), закона Фарадея (11) [9–10]:



$$\frac{v_a}{a} = \frac{v_i}{i}; \quad (10)$$

$$v = \frac{I\tau}{zF}; \quad (11)$$

$$U = IR; \quad (12)$$

где I — сила постоянного тока, А; τ — время пропускания тока, с; z — валентное число ионов вещества; F — постоянная Фарадея, Кл/моль; v — количество выделившегося вещества, моль; a , b , c , g , h , k , m , n , l , a' , b' , c' , g' , h' , k' , m' , n' , l' — стехиометрические коэффициенты; v_a , v_i — количество вещества для компонентов a , i , моль; U — напряжение ячейки электролизера, В; R — общее сопротивление материалов ячейки, Ом [10–11].

Для математического описания работы установки определены характеризующие работу ТОЭ параметры:

1. Соотношение исходных компонентов для получения синтез-газа заданного состава;

2. Расход реагентов, определяющий количество вещества, которое должно прореагировать в устройстве;

3. Количество электричества, затраченное на совместный электролиз H_2O и CO_2 [10–11].

Аналитическая модель материального баланса твердооксидного электролизера приведена в табл. 1.

В табл. 1 в квадратных скобках ([x]) указано процентное содержание элемента x , а обозначение M_x используется как обозначение молярных масс для x элементов.

Согласно составленной модели, материальный баланс состоит из двух потоков (целевая и побочная реакции), что обусловлено химическим процессом совместного электролиза CO_2 , H_2O .

Таблица 1

Аналитическая модель материального баланса

Реагент	Количество вещества	Продукт	Количество вещества
Целевая реакция			
Катод			
Вход		Выход	
H ₂ O	$(v_{\text{pea}} \cdot [\text{H}_2\text{O}]) - \left(\frac{v_{\text{поб}} \cdot [\text{H}_2] \cdot a'}{c'} \right)$	H ₂	$\left((v_{\text{pea}} \cdot [\text{H}_2\text{O}]) - \left(\frac{v_{\text{поб}} \cdot [\text{H}_2] \cdot a'}{c'} \right) \right) \cdot k$
CO ₂	$(v_{\text{pea}} \cdot [\text{CO}_2]) - \left(\frac{v_{\text{поб}} \cdot [\text{H}_2] \cdot b'}{c'} \right)$	CO	$\left((v_{\text{pea}} \cdot [\text{H}_2\text{O}]) - \left(\frac{v_{\text{поб}} \cdot [\text{H}_2] \cdot a'}{c'} \right) \right) \cdot m$
		H ₂ O	$\left((v_{\text{pea}} \cdot [\text{H}_2\text{O}]) - \left(\frac{v_{\text{поб}} \cdot [\text{H}_2] \cdot a'}{c'} \right) \right) \cdot n$
		CO ₂	$\left((v_{\text{pea}} \cdot [\text{H}_2\text{O}]) - \left(\frac{v_{\text{поб}} \cdot [\text{H}_2] \cdot a'}{c'} \right) \right) \cdot l$
Анон			
Вход		Выход	
O ₂	$\frac{v'_{\text{возд}} \cdot \tau \cdot [\text{O}_2] \cdot M_{\text{O}_2}}{V_m}$	O ₂	$\frac{v'_{\text{возд}} \cdot \tau \cdot [\text{H}_2\text{O}] \cdot f \cdot M_{\text{O}_2}}{V_m \cdot a} + \left((v_{\text{pea}} \cdot [\text{H}_2\text{O}]) - \left(\frac{v_{\text{поб}} \cdot [\text{H}_2] \cdot a'}{c'} \right) \right) \cdot f$
N ₂	$\frac{v'_{\text{возд}} \cdot \tau \cdot [\text{N}_2] \cdot M_{\text{N}_2}}{V_m}$	N ₂	$\frac{v'_{\text{возд}} \cdot \tau \cdot [\text{N}_2] \cdot M_{\text{N}_2}}{V_m}$
Побочная реакция			
Вход		Выход	
H ₂ O	$\frac{v_{\text{поб}} [\text{H}_2] \cdot a'}{c'}$	H ₂	$\frac{v_{\text{поб}} [\text{H}_2] \cdot k'}{c'}$
CO ₂	$\frac{v_{\text{поб}} [\text{H}_2] \cdot b'}{c'}$	CO	$\frac{v_{\text{поб}} [\text{H}_2] \cdot m'}{c'}$
H ₂	$v_{\text{поб}} [\text{H}_2]$	H ₂ O	$\frac{v_{\text{поб}} [\text{H}_2] \cdot n'}{c'}$
		CO ₂	$\frac{v_{\text{поб}} [\text{H}_2] \cdot l'}{c'}$
		CH ₄	$\frac{v_{\text{поб}} [\text{H}_2] \cdot g'}{c'}$
		C	$\frac{v_{\text{поб}} [\text{H}_2] \cdot h'}{c'}$

Результаты расчетов. Рабочие характеристики электролизера зависят от состава реагентов, подаваемых в установку. В данном случае этим параметром управляли через установку определенных соотношений между количеством водяного пара, монооксида углерода и водорода (данный показатель был принят как коэффициент K_1). Для катализического синтеза метанола необходим синтез-газ, в составе которого будет сохраняться определенное

соотношение между количеством водорода и углеродсодержащих компонентов (данний показатель был принят как коэффициент K_2).

$$K_1 = \frac{v_{\text{H}_2\text{O}} + v_{\text{H}_2}}{v_{\text{CO}_2}}, \quad (13)$$

где v_{CO_2} — количество вещества CO₂, подаваемого в электролизер, моль; $v_{\text{H}_2\text{O}}$ — количество вещества

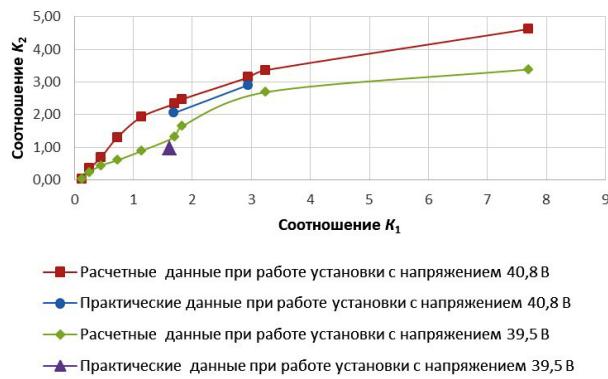


Рис. 3. Зависимость соотношений компонентов газа в реагентах и в продуктах при различных напряжениях



Рис. 4. Составы синтез-газа при соотношении компонентов в реагентах при $K = 1,7$

H_2O , подаваемого в электролизер, моль; v_{H_2} — количество вещества H_2 , подаваемого в электролизер, моль.

$$K_2 = \frac{v'_{H_2}}{v'_{CO_2} + v'_{CO}}, \quad (14)$$

где v'_{CO_2} — количество вещества CO_2 на выходе из электролизера, моль; v'_{CO} — количество вещества CO на выходе из электролизера, моль; v'_{H_2} — количество вещества H_2 на выходе из электролизера, моль.

Получение синтез-газа на электролизере обеспечивается соотношением водородсодержащих компонентов к CO_2 на входе в электролизер. Математическую модель, представленную в табл. 1, использовали для определения зависимости коэффициента K_2 от K_1 при использовании лабораторного стенда.

Расчеты выполняли для следующих рабочих параметров:

1. На катод подавалась смесь H_2O , CO_2 , H_2 с суммарным расходом реагентов 11 л/мин. Коэффициент K_1 изменялся в диапазоне от 0,1 до 7,7;

2. Напряжение электролиза составляло 40,8 В и 39,5 В;

3. Температура газов при электролизе составляла 800 °C;

4. На выходе состав синтез-газа соответствовал требованию, что значение коэффициента K_2 должно быть в диапазоне от 2 до 2,4.

Результаты расчетов представлены на рис. 3.

Из рис. 3 следует, что необходимый состав синтез-газа ($K_2 = 2 - 2,4$) обеспечивается при $K_1 = 1,7$ (состав реагентов на входе в электролизер $H_2O = 58,6\%$, $CO_2 = 34,5\%$, $H_2 = 6,9\%$).

В результате расчета сравнивали эксперимент с аналогичными практическими данными. На вход в электролизер подавали смесь газов $H_2O = 58,6\%$, $CO_2 = 34,5\%$, $H_2 = 6,9\%$. Состав синтез-газа на выходе определяли с помощью отбора проб для хроматографии. Результаты экспериментов представлены на рис. 4 в сравнении с результатами математического моделирования согласно данным табл. 1.

Из диаграммы (рис. 4) следует, что расхождение между экспериментальным и расчетным составами продуктов реакций на выходе из электролизера составляет менее 6 %, наибольшие расхождения имеют показатели процентного содержания H_2O и H_2 . Это можно объяснить тем, что содержание H_2O в ходе эксперимента определялось расчетным способом ввиду невозможности его измерения на хроматографе.

Выводы и заключение. В рамках работы лабораторного стенда электрохимической установки для получения синтез-газа при совместном электролизе воды и углекислого газа были получены экспериментальные данные по получению синтез-газа с различным соотношением газов, входящих в его состав, в зависимости от изменения исходного состава подаваемых реагентов и рабочего напряжения установки.

Для описания работы твердооксидного электролизера планарной конструкции построена математическая модель материального баланса, позволяющая оценивать влияние соотношения реагентов и напряжения электролиза на состав получаемого синтез-газа на выходе из установки.

В основу данной модели были заложены технологические параметры работы реального лабораторного стенда; рассмотрены химические реакции, протекающие в единичном элементе электролизера; данные уравнения реакций электролиза и сопутствующих реакций были решены относительно состава подаваемой газовой смеси на входе в установку.

Проведена проверка адекватности модели путем сравнения расчетных и экспериментальных данных. Анализ результатов показал расхождение данных менее 6 %, что говорит об адекватности составленной модели и о возможности ее использования для планирования экспериментов работы электрохимической установки для получения продуктов электролиза заданного состава.

Полученные результаты показывают, что при изменении в реагентах соотношения количества вещества в диапазоне от 0,1 до 7,7 для коэффициента K_1 приводит к нелинейному изменению целевого соотношения для значений K_2 в диапазоне от 0,2 до 4,7. Следовательно, для дальнейшего производства различных химических веществ нужно подбирать свой состав реагентов для производства синтез-газа.

Список источников

- Chung T. D., Chyou Y. P., Yu D. D. Study of the Flow Field in Channels and Internal Manifolds on the Interconnect of a Planar Solid Oxide Fuel Cell // International Conference on Fuel Cell Science, Engineering and Technology. 2005. Vol. 37645. P. 273 – 280. DOI: 10.1115/FUELCELL2005-74149.
- Демин А. К. Разработка твердооксидных электрохимических устройств в ИВТЭ УрО РАН // Физическая химия и электрохимия расплавленных и твердых электролитов: материалы XVI Российской конф. (с междунар. участием): в 2-х т. 2013. Т. 2. С. 78 – 79. EDN: XFZHT.

3. Распоряжение Правительства РФ от 9 июня 2020 г. № 1523-р «Об Энергетической стратегии РФ на период до 2035 г.». Доступ из информационно-правовой системы «Гарант».
4. Бреслер Л. Х., Хайруллина Д. М., Ошанина С. Д. Утилизация и улавливание CO₂ // Арктика: современные подходы к производственной и экологической безопасности в нефтегазовом секторе: материалы Междунар. науч.-практ. конф.: в 2 т. / Отв. ред. Ю. В. Сивков. 2023. Т. 2. С. 36–40. EDN: NTVIIH.
5. Sugihara S., Iwai H. Experimental investigation of temperature distribution of planar solid oxide fuel cell: effects of gas flow, power generation, and direct internal reforming // International Journal of Hydrogen Energy. 2020. Vol. 45, № 46. P. 25227–25239. DOI:10.1016/j.ijhydene.2020.06.033.
6. Zhu Q. Developments on CO₂-utilization technologies // Clean Energy. 2019. Vol. 3, № 2. P. 85–100. DOI:10.1093/ce/zkz008.
7. Fussler C. Solution for a circular carbon economy // The CO₂ Forum Briefing Paper; The CO₂ Forum. Lyon, France. 2015.
8. Qu Z., Aravind P. V., Dekker N., Janssen A. Modeling of flow field in planar solid oxide fuel cell // ECOS 2008 – Proceedings of the 21th International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental impact of energy systems, June 2008, Poland. AGH University of Science & Technology/SUT, 2008. P. 1849–1856. ISBN 978-839-223-81-40.
9. Кравченко К. В. Особенности современных систем имитационного моделирования // Инновационные технологии: теория, инструменты, практика. 2014. Т. 1. С. 211–214. EDN: TEUGMN.
10. Перфильев М. В., Демин А. К., Кузин Б. Л., Липицкий А. С. Высокотемпературный электролиз газов / отв. ред. С. В. Карпачев. Москва: Наука, 1988. 230 с. ISBN 5-02-001399-4.
11. Патров Б. В., Сладков И. Б. Физическая химия. Санкт-Петербург: Изд-во Политех. ун-та, 2003. 188 с.

ГОЛОДНОВА Анастасия Игоревна, младший научный сотрудник лаборатории электрохимических

устройств и топливных элементов Института высокотемпературной электрохимии Уральского отделения РАН (ИВТЭ УрО РАН), г. Екатеринбург.

SPIN-код: 3510-7011

AuthorID (РИНЦ): 767921

ORCID: 0000-0003-2598-2269

Адрес для переписки: a.golodnova@ihte.ru

ЕРПАЛОВ Михаил Викторович, заведующий лабораторией электрохимических устройств и топливных элементов ИВТЭ УрО РАН, г. Екатеринбург.

SPIN-код: 6696-3245

AuthorID (РИНЦ): 788519

ORCID: 0000-0003-3113-598X

AuthorID (SCOPUS): 55747315200

ResearcherID: N-7453-2016

Адрес для переписки: m.erpalov@ihte.ru

ГОЛОДНОВ Антон Игоревич, доцент кафедры литьевого производства и упрочняющих технологий Уральского федерального университета, г. Екатеринбург.

AuthorID (РИНЦ): 767918

ORCID: 0000-0003-2958-310X

AuthorID (SCOPUS): 57211929114

ResearcherID: R-3266-2016

Адрес для переписки: a.i.golodnov@urfu.ru

Для цитирования

Голоднова А. И., Ерпалов М. В., Голоднов А. И. Математическая модель материального баланса твердооксидного электролизера // Омский научный вестник. 2025. № 1 (193). С. 68–75. DOI: 10.25206/1813-8225-2025-193-68-75. EDN: DNZJSS.

Статья поступила в редакцию 27.08.2024.

© А. И. Голоднова, М. В. Ерпалов,

А. И. Голоднов

¹Institute of High-Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

²Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

THE USE OF MATHEMATICAL MODEL TO EVALUATE THE MATERIAL BALANCE OF A SOLID OXIDE ELECTROLYSER

The effective use of solid oxide electrolyzers is a promising solution for the energy sector and industry in general. Therefore, scientists all over the world are conducting research on improving the electrolyzers' efficiency and reliability. In this paper, a mathematical model of the material balance for a solid oxide electrolyser is considered, which allows optimizing the operating parameters of existing equipment and newly designed equipment. In particular, special attention is focused on studying the effect of the operating parameters of electrochemical plants of planar design during electrolysis on the composition of reaction products. The relation between the compositions of reagents at the inlet and products at the outlet is determined on the basis of calculated data for a planar solid oxide electrolyser using mathematical modeling in comparison with experimental data.

Keywords: mathematical modeling, electrochemical devices, solid oxide electrolyser, chemical reactions, material balance, current strength, voltage.

References

- Chung T. D., Chyou Y. P., Yu D. D. Study of the Flow Field in Channels and Internal Manifolds on the Interconnect of a Planar Solid Oxide Fuel Cell // International Conference on Fuel Cell Science, Engineering and Technology. 2005. Vol. 37645. P. 273 – 280. DOI: 10.1115/FUELCELL2005-74149. (In Engl.).
- Demin A. K. Razrabotka tverdoocksidnykh elektrokhimicheskikh ustroystv v IVTE UrO RAN [Development of solid oxide electrochemical devices at the Institute of High-Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences]. Fizicheskaya khimiya i elektrokhimiya rasplavlennykh i tverdykh elektrolitov. V 2 t. *Physical Chemistry and Electrochemistry of Molten and Solid Electrolytes*. In 2 vols. Yekaterinburg, 2013. Vol. 2. P. 78 – 79. EDN: XFZHFT. (In Russ.).
- Rasporyazheniye Pravitel'stva RF ot 9 iyunya 2020 g. № 1523-r «Ob Energeticheskoy strategii RF na period do 2035 g.» [Decree of the Government of the Russian Federation No. 1523-r dated 2020.06.09 «On approval of the Energy Strategy of the Russian Federation for the period up to 2035». Available at «Garant». (In Russ.).
- Bresler L. Kh., Khayrullina D. M., Oshanina S. D. Utilizatsiya i ulavlivaniye CO₂ [CO₂ utilization and capture]. Arktika: sovremennyye podkhody k proizvodstvennoy i ekologicheskoy bezopasnosti v neftegazovom sektore. V 2 t. *The Arctic: Modern Approaches to Industrial and Environmental Safety in the Oil and Gas Sector*. In 2 vols. / Resp. ed. Yu. V. Sivkov. 2023. Vol. 2. P. 36 – 40. EDN: NTVIIH. (In Russ.).
- Sugihara S., Iwai H. Experimental investigation of temperature distribution of planar solid oxide fuel cell: effects of gas flow, power generation, and direct internal reforming. International Journal of Hydrogen Energy. 2020. Vol. 45. no. 46. P. 25227 – 25239. DOI:10.1016/j.ijhydene.2020.06.033. (In Engl.).
- Zhu Q. Developments on CO₂-utilization technologies. Clean Energy. 2019. Vol. 3, no. 2. P. 85 – 100. DOI:10.1093/ce/zkz008. (In Engl.).
- Fussler C. Solution for a circular carbon economy // The CO₂ Forum Briefing Paper; The CO₂ Forum. Lyon, France. 2015. (In Engl.).
- Qu Z., Aravind P. V., Dekker N., Janssen A. Modeling of flow field in planar solid oxide fuel cell // ECOS 2008 – Proceedings of the 21th International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental impact of energy systems, June 2008, Poland. AGH University of Science & Technology/SUT, 2008. P. 1849 – 1856. ISBN 978-839-223-81-40. (In Engl.).
- Kravchenko K. V. Osobennosti sovremennoykh sistem imitatsionnogo modelirovaniya [Features of modern simulation systems]. Innovatsionnye tekhnologii: teoriya, instrumenty, praktika. *Innovative technologies: theory, tools, practice*. 2014. Vol. 1. P. 211 – 214. (In Russ.).
- Perfil'yev M. V., Demin A. K., Kuzin B. L., Lipilin A. S. Vysokotemperaturnyy elektroliz gazov [High-temperature electrolysis of gases]. Moscow, 1988. 230 p. ISBN 5-02-001399-4. (In Russ.).
- Patrov B. V., Sladkov I. B. Fizicheskaya khimiya [Physical Chemistry]. Saint Petersburg, 2003. 188 p. (In Russ.).

GOLODNOVA Anastasia Igorevna, Junior Researcher, Laboratory of Electrochemical Devices and Fuel Cells, Institute of High-Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (IHTERAS), Yekaterinburg.

SPIN-code: 3510-7011

AuthorID (RSCI): 767921

ORCID: 0000-0003-2598-2269

Correspondence address: a.golodnova@ihte.ru

ERPALOV Mikhail Viktorovich, Head of the Laboratory of Electrochemical Devices and Fuel Cells, IHTE UB RAS, Yekaterinburg.

SPIN-code: 6696-3245

AuthorID (RSCI): 788519

ORCID: 0000-0003-3113-598X

AuthorID (SCOPUS): 55747315200

ResearcherID: N-7453-2016

Correspondence address: m.erpalov@ihte.ru

GOLODNOV Anton Igorevich, Associate Professor of the Foundry Production and Hardening Technologies Department, Ural Federal University, Yekaterinburg.

AuthorID (RSCI): 767918

ORCID: 0000-0003-2958-310X

AuthorID (SCOPUS): 57211929114

ResearcherID: R-3266-2016

Correspondence address: a.i.golodnov@urfu.ru

For citations

Golodnova A. I., Erpalov M. V., Golodnov A. I. The use of mathematical model to evaluate the material balance of a solid oxide electrolyser. *Omsk Scientific Bulletin*. 2025. No. 1 (193). P. 68 – 75. DOI: 10.25206/1813-8225-2025-193-68-75. EDN: DNZJSS.

Received August 27, 2024.

© A. I. Golodnova, M. V. Erpalov, A. I. Golodnov