

УДК 51-74
DOI

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННЫХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМАХ: ТВЕРДОЕ ТЕЛО – ЩЕЛОЧНОЙ ЭЛЕКТРОЛИТ

¹Кашапов Н.Ф. ORCID ID 0000-0002-1185-4605,
^{2,3}Чебакова В.Ю. ORCID ID 0000-0002-0785-3861,
^{2,3}Кашапов Л.Н. ORCID ID 0000-0001-7893-440X,
²Хафизова А.Д. ORCID ID 0009-0006-0835-5262, ²Гильман Д.М.

¹Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»,
Казань, Российская Федерация;

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Казанский федеральный университет», Казань, Российская Федерация, e-mail: vchebakova@mail.ru;

³Институт прикладных исследований государственного научного бюджетного учреждения
«Академия наук Республики Татарстан», Казань, Российская Федерация

Для успешного построения модели процесса электролиза ключевое значение имеет анализ реакций на электродах. На протекание данных реакций существенное влияние оказывает водородный показатель среды. В условиях щелочного электролита перенос электрического заряда осуществляется преимущественно ионами гидроксида и гидратированными протонами. Целью исследования является формирование алгоритмического аппарата, предназначенного для оценивания констант скоростей электродных процессов с последующей имплементацией в математическую модель. Данная модель описывает картину пространственных распределений внутренних характеристик неоднородной системы в пределах межэлектродного промежутка. Численному анализу подверглись электрохимические процессы в среде щелочного электролита. В ходе работы была сконструирована и решена адекватная математическая модель рассматриваемого явления. Данная модель состоит из двух ключевых компонентов: системы начально-краевых задач, определяющих эволюцию концентраций заряженных частиц, и уравнения Пуассона, задающего распределение электрического потенциала. Построение дискретных аналогов проводилось на базе явных разностных схем, выведенных интегро-интерполяционным методом. Центральное место в исследовании заняли разработка и обоснование граничных условий для уравнений переноса, физически соответствующих стадийному механизму электродных реакций. Результаты численного моделирования демонстрируют удовлетворительное согласование с экспериментальными данными, где расхождение не превышает 11%. Установленная линейная зависимость между количеством выделившегося газа и временем электролиза является типичной для гетерогенных процессов. Полученные пространственные распределения параметров адекватно описывают физику явления, фиксируя, в частности, резкое изменение характеристик в приэлектродных областях.

Ключевые слова: электролитные системы, моделирование, электролиз

MATHEMATICAL MODELING OF HETEROGENEOUS PROCESSES IN SOLID BODY – ALKALINE ELECTROLYTE SYSTEMS

¹Kashapov N.F. ORCID ID 0000-0002-1185-4605,
^{2,3}Chebakova V.Yu. ORCID ID 0000-0002-0785-3861,
^{2,3}Kashapov L.N. ORCID ID 0000-0001-7893-440X,
²Khafizova A.D. ORCID ID 0009-0006-0835-5262, ²Gilman D.M.

¹Federal Research Center “Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences”,
Kazan, Russian Federation;

²Kazan Federal University, Kazan, Russian Federation, e-mail: vchebakova@mail.ru

³Institute of Applied Research of the State Scientific Budgetary Institution
“Academy of Sciences of the Republic of Tatarstan”, Kazan, Russian Federation

For the successful construction of the electrolysis process model, the analysis of reactions on the electrodes is of key importance. The hydrogen index of the medium has a significant impact on the course of these reactions. In the conditions of an alkaline electrolyte, the transfer of electric charge is carried out mainly by hydroxide ions and hydrated protons. The aim of the study is to develop an algorithmic apparatus designed to estimate the rate constants of electrode processes with subsequent implementation in a mathematical model. This model describes the spatial distribution of internal characteristics of a heterogeneous system within the electrode gap. Electrochemical processes in an alkaline electrolyte medium were subjected to numerical analysis. During the work, an adequate mathematical model of the phenomenon under consideration was constructed and solved. This model consists of two key components: a system of initial-boundary value problems that determine the evolution of charged particle concentrations, and a Poisson equation that defines the distribution of the electric potential. The construction of discrete analogs was based on explicit difference schemes derived using the integral-interpolation method. The development and justification of boundary conditions for the transport equations, which physically correspond to the stage mechanism of electrode reactions, played a central role in the study. The results of numerical simulations demonstrate satisfactory agreement with experimental data, with a discrepancy of no more than 11%. The established linear relationship between the amount of gas released and the electrolysis time is typical for heterogeneous processes. The obtained spatial distributions of the parameters adequately describe the physics of the phenomenon, in particular, by recording a sharp change in the characteristics in the near-electrode regions.

Keywords: electrolyte systems, modeling, electrolysis

Введение

Электролитные системы все активнее внедряются в современные технологические процессы. Они являются ключевым компонентом в таких направлениях, как создание проточных редокс-батарей, разработка плазменно-электролитных методов обработки материалов и производство металлических порошков для последующего использования в аддитивных технологиях [1–3].

Моделирование электролиза невозможно без анализа реакций на электродных поверхностях. Тип и механизм этих электрохимических процессов напрямую зависят от кислотности среды (рН). При этом итоговые реакции, фигурирующие в моделях, представляют собой обобщение многостадийных превращений.

Важно понимать, что общая запись суммарной реакции электролиза объединяет два пространственно разделенных процесса: анодное окисление и катодное восстановление, протекающие на разных электродах. К примеру, механизм адсорбции водорода на инертных металлах различен для сред с разной кислотностью. В кислых растворах этот процесс описывается реакцией $H_3O^+ \rightarrow H + H_2O$, тогда как в щелочных средах он протекает согласно $H_2O + 2e \rightarrow O + 2H^+$.

Для формулировки граничных условий в электрохимических задачах широко применяется закон Фарадея:

$$m = (Q / F) * (M / z).$$

В данном уравнении m представляет массу вещества, осажденного на электроде, параметр M/z соответствует эквивалентной массе продукта реакции, Q – суммарный электрический заряд, F – постоянную Фарадея. Следует отметить, что в реальных экспериментах наблюдаемое количество полученного вещества, как правило, отличается от теоретического значения, предсказанного законом Фарадея [4]. Причиной данного несоответствия является идеализированная природа закона Фарадея, предполагающая протекание лишь одной электрохимической реакции. На практике же выход меди может быть снижен до 98–99 % из-за параллельности процессов восстановления одно- и двухвалентных ионов меди [5]. Таким образом, характеристика, равная соотношению практического выхода к теоретическому, получила название «выход по току» [6].

Для описания зависимости скорости электродной реакции от потенциала используется уравнение Батлера – Фольмера. Данное уравнение непосредственно связывает величину тока, протекающего через электрод,

с его перенапряжением и фундаментальными кинетическими константами стадий окисления и восстановления.

$$i = FZ_nSK_l \left(\exp\left(\frac{\alpha F\eta_l}{RT}\right) - \exp\left(\frac{(1-\alpha)F\eta_l}{RT}\right) \right).$$

где i – плотность тока, η_l – перенапряжение электродной реакции на электроде l , S – площадь электродов, Z_n – величина валентности, α – экспериментальный параметр, характеризующий перенос частиц между электродами.

Уравнение анодно-катодной волны также используется при описании граничных условий:

$$\varphi = E_0 - \frac{RT}{Z_n F} \ln\left(\frac{i - i_{d,анод}}{i_{d,кат} - i}\right) \sqrt{\frac{Do}{Dв}},$$

где Do , $Dв$ – коэффициенты диффузии окисленной и восстановленной форм, $i_{d,g} = Z_n F D_g S \nabla \cdot C_g$ – диффузионный ток, φ – потенциал электродов, R – универсальная газовая постоянная, T – температура электролита.

Поляризационные кривые наиболее информативны для многокомпонентных растворов, в которых несколько электроактивных веществ выделяются поэтапно. Моделирование таких систем основано на решении системы кинетических уравнений, где константы скоростей обычно задаются через закон Аррениуса. Тем не менее данный подход не всегда универсален, так как отдельные стадии электролиза могут иметь различный порядок и не подчиняться аррениусовской зависимости [7]. Моделирование требует корректного выбора математического аппарата. Со стороны кинетики закон Аррениуса применим лишь тогда, когда лимитирующая стадия не является гетерогенной диссоциацией. Со стороны электростатики для определения конфигурации электрического поля применяют либо уравнение Пуассона, либо его приближение в виде условия локальной электронейтральности [8; 9]. На стенках часто ставят нормальную компоненту равной нулю (уравнение неразрывности) [10; 11]. Потенциал и перенапряжение, используемые для описания граничных условий, характеризуют именно электрохимические реакции, а не материал электрода [9; 12]. Современное понимание процессов описано в [13; 14]. При построении модели граничные условия для уравнения Пуассона на поверхности электрода часто формулируются на основе эмпирических данных. Ключевым инструментом для получения та-

ких данных и изучения механизмов реакций служит анализ поляризационных кривых, графически отображающих зависимость тока от электродного потенциала.

Таким образом, прямое использование рассмотренных законов при постановке граничных условий для математической модели сопряжено с рядом фундаментальных трудностей. Одни из них оперируют интегральными параметрами, объединяющими вклад обоих электродов, другие содержат эмпирические подгоночные коэффициенты, а третьи применимы исключительно для лимитирующей стадии, что не отражает всей сложности многостадийного процесса. Как следствие, их использование в модели неизбежно ведет к одному из двух сценариев: либо к появлению дополнительных подгоночных параметров, требующих экспериментального определения для каждой конкретной системы, либо к ограничению области применимости модели лишь теми техническими условиями, которые были всесторонне изучены эмпирическим путем.

Цель исследования – разработка алгоритмического обеспечения для расчета констант скоростей электродных реакций с последующей имплементацией в математическую модель.

Материалы и методы исследования

Объектом численного исследования выступает щелочной раствор КОН. Данный электролит взят как одно из недорогих возможных решений для получения водорода на этапе перехода к «зеленой энергетике» [15]. Использование недорогих щелочных электролитов в будущем позволит снизить общие затраты на производство водорода, делая технологию более масштабируемой и привлекательной для широкого внедрения.

Моделирование электролиза в гетерогенной системе между плоско-параллельными инертными электродами при допущении о потенциальности электрического

поля реализовано в виде системы уравнений, содержащей:

1. Основу модели составляют начально-краевые задачи для уравнений переноса (диффузии-конвекции), определяющих пространственно-временное распределение концентраций ионных компонентов. Конкретный набор уравнений зависит от состава электролита. При моделировании электролиза КОН система включает уравнения переноса для гидроксид-ионов, катионов водорода и катионов калия.

2. Краевая задача для потенциала электрического поля.

Для математического представления модели примем, что катод расположен при $x = 0$, анод при $x = b$, и введем следующие обозначения:

C_{OH^-} , C_{H^+} , C_{K^+} , C_{H_2O} – концентрации гидроксильной группы, катионов водорода и калия, воды;

D_{xOH^-} , D_{xH^+} , D_{xK^+} – коэффициенты диффузии гидроксильной группы, катионов водорода и калия;

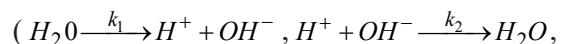
U_{xH^+} , U_{xK^+} – значения подвижности гидроксильной группы, катионов водорода и калия;

\mathfrak{R} – константа скорости процесса диссоциации воды,

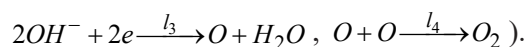
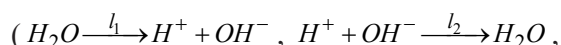
χ – электрическая восприимчивость электролита,

ε_0 – диэлектрическая постоянная,

k_1, k_2, k_3, k_4 – константы скоростей катодных процессов



l_1, l_2, l_3, l_4 – анодных в щелочном электролите



Таким образом, компоненты математической модели:

1) Уравнение баланса аниона OH^- с граничными условиями:

$$\frac{\partial C_{OH^-}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_{xOH^-} \frac{\partial C_{OH^-}}{\partial x} + U_{xOH^-} C_{OH^-} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) = \mathfrak{R} C_{H_2O}, \quad (1)$$

$$\left. \frac{\partial C_{OH^-}}{\partial t} \right|_{x=0} = k_1 C_{H_2O} - k_2 C_{H^+} C_{OH^-}, \quad (2)$$

$$\left. \frac{\partial C_{OH^-}}{\partial t} \right|_{x=b} = l_1 C_{H_2O} - l_2 C_{H^+} C_{OH^-} - l_3 C_{OH^-}^2. \quad (3)$$

2) Уравнение баланса катиона H^+ с граничными условиями:

$$\frac{\partial C_{H^+}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_{xH^+} \frac{\partial}{\partial x} C_{H^+} - U_{xH^+} C_{H^+} \frac{\partial}{\partial x} \varphi \right) = \Re C_{H_2O}, \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial C_{H^+}}{\partial t} \right|_{x=0} = k_1 C_{H_2O} - k_2 C_{H^+} C_{OH^-} - k_3 C_{H^+}, \quad (5)$$

$$\left. \frac{\partial C_{H^+}}{\partial t} \right|_{x=b} = l_1 C_{H_2O} - l_2 C_{H^+} C_{OH^-}. \quad (6)$$

3) Уравнение баланса катиона K^+ с граничными условиями:

$$\frac{\partial C_{K^+}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_{xK^+} \frac{\partial}{\partial x} C_{K^+} - U_{xK^+} C_{K^+} \frac{\partial}{\partial x} \varphi \right) = 0, \quad (7)$$

$$G_{xK^+} \Big|_{x=0+0} = U_{xK^+} C_{K^+} \frac{\partial}{\partial x} \varphi, \quad (8)$$

$$C_{K^+} \Big|_{x=b} = 0. \quad (9)$$

4) Уравнение Пуассона для потенциала электрического поля

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left((1 + \chi) \varepsilon_0 \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) = F (C_{K^+} + C_{H^+} - C_{OH^-}), \quad (10)$$

$$E \Big|_{x=0} = E_{0, \text{катода}} + \left| \frac{RT}{F} \right| \ln(C_{H^+} / C_H), \quad (11)$$

$$E \Big|_{x=b} = E_{0, \text{анода}} + \left| \frac{RT}{F} \right| \ln(1 / C_{OH^-}). \quad (12)$$

При вычислении перенапряжения учитываются только концентрации частиц, реагирующих на рассматриваемом электроде (аноде или катоде). Для определения концентрации частиц, принимающих участие в окислительно-восстановительных реакциях на электродах, и количества вещества, сформировавшегося на электроде, также решаются системы, состоящие из задач Коши, описывающих стадийные электрохимические реакции:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial t} = -k_1 C_{H_2O} + k_2 C_{H^+} C_{OH^-} \\ \frac{\partial C_{OH^-}}{\partial t} = k_1 C_{H_2O} - k_2 C_{H^+} C_{OH^-} \\ \frac{\partial C_{H^+}}{\partial t} = k_1 C_{H_2O} - k_2 C_{H^+} C_{OH^-} - k_3 C_{H^+} \\ \frac{\partial C_H}{\partial t} = k_3 C_{H^+} - k_4 C_H^2 \\ \frac{\partial C_{H_2}}{\partial t} = k_4 C_H^2 \end{array} \right. \quad (13)$$

И выход кислорода (анод):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial t} = -I_1 C_{H_2O} + I_2 C_{H^+} C_{OH^-} + I_3 C_{OH^-}^2 \\ \frac{\partial C_{OH^-}}{\partial t} = I_1 C_{H_2O} - I_2 C_{H^+} C_{OH^-} - I_3 C_{OH^-}^2 \\ \frac{\partial C_O}{\partial t} = I_3 C_{OH^-}^2 - I_4 C_O^2 \\ \frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} = I_4 C_O^2 \\ \frac{\partial C_{H^+}}{\partial t} = I_1 C_{H_2O} - I_2 C_{H^+} C_{OH^-} \end{array} \right. \quad (14)$$

Указанная модель предназначена для описания пространственной неоднородности внутренних параметров гетерогенных систем в области между электродами.

Вычислительный алгоритм реализует поэтапное решение начально-краевых задач. Для их дискретизации на равномерной пространственной сетке интегро-интерполяционным методом строятся явные разностные схемы. Все коэффициенты системы рассчитываются на нижнем временном слое. Переход между временными слоями организован следующим образом: при заданном общем шаге по времени для каждой задачи проверяется условие Куранта. Если рассчитанный из этого условия локальный шаг оказывается меньше общего, то переход к следующему основному слою осуществляется через серию промежуточных шагов, соответствующих критерию устойчивости. Решение уравнения Пуассона выполняется на заключительном этапе с использованием рассчитанных концентраций частиц на новом временном слое.

В качестве начальных условий принимается равномерное распределение концентраций по всему объему электролита. Цепочки стадийных электрохимических реакций содержат в себе как гетерогенные реакции, то есть реакции нулевого порядка, проходящие на электроде, так реакции между их продуктами. Учитывая, что кинетические константы являются заранее неопределёнными параметрами и зависят от конкретных условий системы, на первом этапе проводится их оценка. Данная процедура основана на решении обратной нульмерной задачи, подробно описанной в литературе [16; 17].

Результаты исследования и их обсуждение

Разработанный численный алгоритм обеспечивает прогнозирование выхода водорода, определение констант скоростей электродных процессов по экспериментальным данным о выходе продукта, а также расчет пространственно-временных распределений концентраций реагентов в приэлектродных областях. Поставленная модель не связывает напрямую оба электрода изначально при ее построении, что дает возможность перехода к технологиям, разрабатываемым на основе фундаментальных основ процесса электролиза, но затрудненным для экспериментального исследования, например разряды с жидкими электродами, где нет возможности промерить напряжение на границе раздела электролит – рабочий газ [1; 3]. Верифицировался алгоритм по данным с электролизера конфигурацией: 50 мм – внутренний диаметр, 60 см² – рабочая площадь электродов, 300 мм – высота уровня электролита, электролит – это 30% раствор KOH [7]. Значения коэффициентов диффузии, подвижности ионов, диэлектрическая проницаемость взяты согласно значениям приведенным в [18, с. 23, 31, 39, 49], константа диссоциация воды [19]. Температуру, поддерживаемую постоянной с помощью регулирующего потенциометра, берем согласно данным, приведенным в [7]. В целом расчеты показали хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных, расхождения не превышают 11%. На рис. 1 представлено сравнение экспериментальных и расчетных данных при 0,5 А и 60°C при катодном выделении водорода.

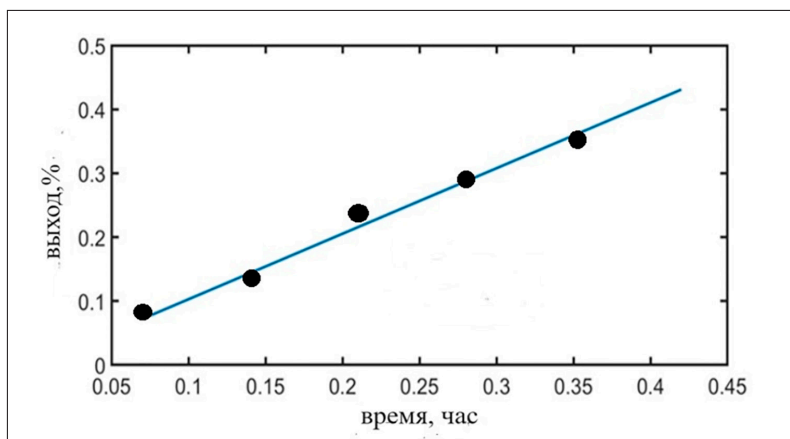


Рис. 1. Выход водорода (0,5 А и 60 °С). Точки – результаты эксперимента работы [7], прямая представляет расчетные данные данного исследования

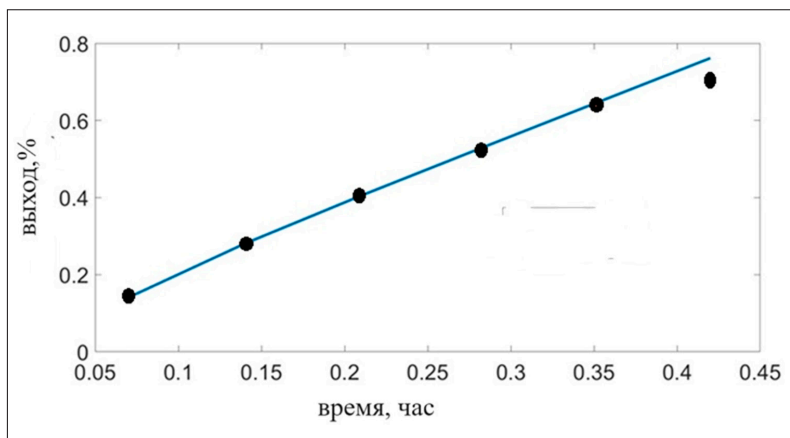


Рис. 2. Выход кислорода (1 А и 80 °С). Точки – результаты эксперимента работы [7], прямая представляет расчетные данные данного исследования

На рис. 2 отображено анодное выделение кислорода при 1 А и 80 °С. Для сравнения взяты эксперименты работы [7].

Проведенные расчеты показали, что в приближении постоянной поверхности электрода (при выделении газообразных продуктов) погрешность определения выхода газа несущественно отличается от результатов нульмерной модели, однако вычислительные затраты при этом возросли. Однако обоснованность необходимости решения пространственной задачи возникает при расчете задачи с изменением активной поверхности электрода вследствие образования на нем поверхностных покрытий [20]. Разработанные алгоритмы легли в основу программного обеспечения [21].

Заключение

Предложен алгоритм численного решения одномерной задачи, учитывающий ки-

нетику процессов на межфазной границе электрод – электролит. Многостадийность электрохимических реакций выделения веществ моделируется с помощью систем кинетических уравнений. Для решения задач химической кинетики применяются методы Рунге – Кутты, эффективные для прямых расчетов при известных константах скоростей. В случае неизвестных кинетических параметров требуется решение обратных оптимизационных задач. В данной работе представлен алгоритм для одномерного случая, состоящий из двух независимых блоков. Первый блок решает нульмерную задачу идентификации констант скоростей электрохимических процессов.

Решение кинетических задач позволяет количественно оценить вклад отдельных приэлектродных процессов и выполнить предварительный прогноз газовой выработки. Второй блок алгоритма реализует реше-

ние поставленной математической модели нахождения пространственных характеристик. Сравнение расчетных и экспериментальных данных показало хорошее количественное совпадение по объему выделенного газа на обоих электродах. Анализ пространственных распределений продемонстрировал качественное соответствие, выражающееся в воспроизведении характерных градиентов концентраций.

Список литературы

1. Кашапов Р.Н., Кашапов Н.Ф., Кашапов Л.Н., Ключев С.В., Чебакова В.Ю. Исследование плазменно-электролитного процесса получения наночастиц оксида титана // Строительные материалы и изделия. 2022. Т. 5. № 5. С. 70–79. DOI: 10.58224/2618-7183-2022-5-5-70-79.
2. Каюмов Р.Р., Купутдинова А.И., Гайсин А.Ф. Электролитно-плазменное получение металлических порошков для аддитивного производства // Металловедение и термическая обработка металлов. 2024. № 1 (823). С. 36–42. DOI: 10.30906/mitom.2024.1.36-42.
3. Агафонов А.В., Сироткин Н.А., Титов В.А., Хлюстова А.В. Подводная низкотемпературная плазма как инструмент синтеза неорганических наноматериалов // Журнал неорганической химии. 2022. Т. 67. № 3. С. 271–280. DOI: 10.31857/S0044457X22030023.
4. Урюпина О.А. Исследование точности аппроксимации тока электролиза кулонометрического гигрометра // Вестник Ангарской государственной технической академии. 2013. № 7. С. 074–077. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=21060079> (дата обращения: 29.10.2025). EDN: RSWHQJ.
5. Савельева Е.А., Дикун М.П. Эффективность очистки медьсодержащих растворов импульсным электролизом // Вестник Тамбовского государственного технического университета. 2017. Т. 23. № 4. С. 672–679. DOI: 10.17277/vestnik.2017.04.pp.672-679.
6. Перельгин Ю.П. Зависимость катодного выхода по току металла при электролизе расплавов от режимов электролиза // Альманах современной науки и образования. 2013. № 6 (73). С. 125–127. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=19071055> (дата обращения: 29.10.2025). EDN: QBQFDF.
7. Бабаев Р.К., Алиев С.А. Исследование кинетических закономерностей процесса получения водорода электролизом воды // Проблемы науки. 2018. № 4 (28). С. 31–33. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=32840621> (дата обращения: 29.10.2025). EDN: YWULFG.
8. Аринова А.Б. Математическое моделирование электродиффузионного транспорта ионов хлоридного комплекса родия в катодной камере мембранного электролизера // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2019. № 3 (133). С. 37–43. DOI: 10.26730/1999-4125-2019-3-37-43.
9. Варенцов В.К., Кошев А.Н. Моделирование процесса газозообразования водорода в проточных трехмерных электродах при извлечении металлов из растворов электролитов // Региональная архитектура и строительство. 2017. № 3 (32). С. 128–135. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?url?id=30488651> (дата обращения: 29.10.2025). EDN: ZRETOF.
10. Кошев А.Н. Некоторые особенности математического моделирования процессов извлечения металлов из растворов электролитов на проточные трехмерные электроды // Региональная архитектура и строительство. 2015. № 2 (23). С. 104–115. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=23820330> (дата обращения: 29.10.2025). EDN: UBGTTJ.
11. Козырев Е.Н., Алехин В.И. Построение математических моделей однофазовых полупроводниковых пленок при помощи сингулярно возмущенного электролиза // Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал). 2011. № 10. С. 384–386. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=17230056> (дата обращения: 29.10.2025). EDN: ONBEMP.
12. Tijani A.S., Kamarudin N.A.B., Mazlan F.A.B. Investigation of the effect of charge transfer coefficient (CTC) on the operating voltage of polymer electrolyte membrane (PEM) electrolyzer // International journal of hydrogen energy. 2018. Vol. 43. P. 9119–9132. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2018.03.111.
13. Болотнов А.М. Математические модели и алгоритмы расчетов электрических полей в электрохимических системах. СПб.: Лань, 2023. 172 с. ISBN 978-5-507-47924-5.
14. Рудой В.М., Трофимов А.А., Никитин В.С., Останина Т.Н., Даринцева А.Б. Моделирование электрохимических процессов и явлений. Уральский федеральный университет. Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2018. 98 с. ISBN 978-5-7996-2321-0.
15. Martín D., Ocampo-Martínez C., Sánchez-Peña R. Advances in alkaline water electrolyzers: A review // Journal of Energy Storage. 2019. Vol. 23. Is. 2352–152X. P. 392–403. DOI: 10.1016/j.est.2019.03.001.
16. Кашапов Р.Н., Кашапов Л.Н., Кашапов Н.Ф., Чебакова В.Ю. Кинетика двухфазных газожидкостных сред в процессах электролиза // Теплофизика высоких температур. 2021. Т. 59. № 6. С. 869–876. DOI: 10.31857/S0040364421060089.
17. Дмитриев М.С., Кашапов Н.Ф., Чебакова В.Ю., Кормушин К.В. Моделирование выделения цинка в накопителях гибридного типа // Современные наукоемкие технологии. 2024. № 10. С. 44–48. DOI: 10.17513/snt.40170.
18. Якименко Л.М., Модылевская И.Д., Ткачек З.А. Электролиз воды. М.: Химия, 1970. 264 с.
19. Takeuchi N., Ishii Y., Yasuoka K. Modelling chemical reactions in dc plasma inside oxygen bubbles in water Plasma Sources Sci. Technol. 2012. 21. Art. 015006. DOI: 10.1088/0963-0252/21/1/015006.
20. Чебакова В.Ю. Электроэкстракция цинка. Математическое моделирование в одномерном приближении // Информационно-технологический вестник. 2025. № 3 (45). С. 76–88. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=83000299> (дата обращения: 29.10.2025). EDN: AZIHXC.
21. Асхатов Р.М., Буянов В.Ю., Кудрявый А.Д., Хафизова А.Д., Чебакова В.Ю., Чебакова Е.В. Программа для определения пространственных характеристик в щелочных электролитах при электролизе // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2025619226, 14.04.2025. Заявка № 2025618007 от 10.04.2025. [Электронный ресурс]. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=80655581> (дата обращения: 15.09.2025).

Конфликт интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest: The authors declare that there is no conflict of interest.

Финансирование: Работа выполнена за счет предоставленного в 2024 г. Академией наук Республики Татарстан гранта на осуществление фундаментальных и прикладных научных работ в научных и образовательных организациях, предприятиях и организациях реального сектора экономики Республики Татарстан.

Financing: The work was carried out using a grant provided by the Academy of Sciences of the Republic of Tatarstan in 2024 for fundamental and applied research in scientific and educational organizations, enterprises, and organizations in the real sector of the economy of the Republic of Tatarstan.