

УДК 519.6

DOI: 10.46548/21vek-2022-1159-0003

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТОЛЩИНЫ И СВОЙСТВ УГЛЕГРАФИТОВОГО ВОЛОКНИСТОГО МАТЕРИАЛА НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА НА ПРОТОЧНОМ ТРЕХМЕРНОМ ЭЛЕКТРОДЕ МЕТОДАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

© Автор(ы) 2022

SPIN-код: 1569-1966

AuthorID: 47930

ORCID: 0000-0003-3057-4980

ResearcherID: AAD-1496-2021

ScopusID: 8900920000

КОШЕВ Александр Николаевич, доктор химических наук,
профессор кафедры «Информационно-вычислительные системы»
Пензенский государственный университет архитектуры и строительства
(440028, Россия, г. Пенза, ул. Германа Титова, 28, e-mail: koshev@pguas.ru)

SPIN-код: 4008-3010

AuthorID: 43826

ORCID: 0000-0001-8622-9364

ResearcherID: A-0000-0000

ScopusID: 7004176778

ВАРЕНЦОВ Валерий Константинович, доктор технических наук, профессор,
ведущий научный сотрудник лаборатории электрохимии гетерогенных систем
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
(630128, Россия, г. Новосибирск, ул. Кутателадзе, 18, e-mail: vvk@ngs.ru)

SPIN-код: 9075-4096

AuthorID: 642415

ORCID: 0000-0003-4511-7176

ResearcherID: GOP-3388-2022

ScopusID: 57190165261

КУЗИНА Валентина Владимировна, кандидат технических наук,
доцент кафедры «Информационно-вычислительные системы»
Пензенский государственный университет архитектуры и строительства
(440028, г. Пенза, ул. Германа Титова, 28, e-mail: kuzina@pguas.ru)

Аннотация. Приводится исследование влияния различных параметров процесса электровосстановления ионов железа на проточном трехмерном электроде методом математического моделирования. Цель исследования – подбор параметров, позволяющих обеспечить высокую производительность электрохимического процесса на проточных трехмерных электродах (ПТЭ), в том числе из углеродных волокнистых материалов (УВМ). Рассмотрено влияние увеличения толщины углеродных волокнистых электродов (УВЭ) на производительность процессов, анализируется влияние степени сжатия УВЭ на исследуемый процесс. В результате выполненного исследования показано, что, несмотря на резкое снижение значений поляризации и плотности тока в глубине электрода, часть его внутренней поверхности, на которой протекает реакция, с увеличением толщины L электрода, возрастает, однако при этом суммарная внутренняя поверхность электрода, работающая достаточно эффективно, остается неизменной, что приводит к постоянству скорости процесса в этих условиях. Производительность электрохимических процессов определяется величиной поверхности электрода, работающей в условиях предельного диффузионного тока по ионам основного электроактивного компонента. Установлено также, что максимум производительности процесса приходится на сжатие УВЭ в 2,0 – 2,2 раза. Показано влияние на скорость электрохимических процессов свойств материала катода. Для сопоставления работы электродов из разных видов УВМ приводятся результаты моделирования распределения поляризации, тока и концентрации в их объеме. Результаты моделирования дают основание предположить, что скорость реакции будет наиболее высокой на УВМ марки ТВШ. Для других исследованных материалов представляется возможным некоторое снижение толщины электрода без существенного влияния на скорость процесса, поскольку в них наблюдаются внутренние зоны с незначительной поляризацией.

Ключевые слова: трехмерный проточный электрод, электровосстановление ионов железа, математическое моделирование, углеграфитовые волокнистые материалы, подбор параметров.

RESEARCH OF IMPACTS OF THE THICKNESS AND FEATURES OF CARBON-GRAPHITE FIBROUS MATERIAL ON THE EFFICIENCY OF ELECTRICAL RECOVERY OF IRON IONS ON A FLOWING THREE-DIMENSIONAL ELECTRODE BY MATHEMATICAL SIMULATION METHODS

© The Author(s) 2022

KOSHEV Alexander Nikolaevich, doctor of Chemistry Science,
professor of the department «Information and computing systems»

Penza State University of Architecture and Construction
(440028, Russia, Penza, German Titov St., 28, e-mail: koshev@pguas.ru)

VARENTSOV Valery Konstantinovich, doctor of technical Sciences, professor,
leading researcher Laboratory of Electrochemistry of Heterogeneous Systems

Institute of Solid State Chemistry and Mechanochemistry of Siberian branch of Russian Academy of Science
(630128, Russia, Novosibirsk, st. Kutateladze, 18, e-mail: vvk@ngs.ru)

KUZINA Valentina Vladimirovna, candidate of Technical Sciences,
associate professor of the department «Information and computing systems»

Penza State University of Architecture and Construction
(440028, Russia, Penza, German Titov St., 28, e-mail: kuzina@pguas.ru)

Abstract. The following research represents the influence of various parameters of the process of electrical recovery of iron ions on a flowing three-dimensional electrode by the methods of mathematical modeling. The purpose of this research is to select the parameters which make it possible to ensure the high performance of the electrochemical process on flowing three-dimensional electrodes (FTE), including those made of carbon fiber materials (CFM). The effect which causes the increase of the thickness of carbon fiber electrodes (CFE) on the productivity processes is considered, and the effect which causes the degree of CFE compression was analyzed in this research. As a result of the research, it was shown that, despite a sharp decrease in the values of polarization and current density in the depth of the electrode, the part of its inner surface, on which the reaction occurs, increases with an increase in the thickness L of the electrode, however, the total inner surface of the electrode, which works quite efficiently, still remains unchanged, which leads to the constancy of the process rate under these conditions. The productivity of electrochemical processes is determined by the size of the electrode surface operating under the conditions of the current limited diffusion through the ions of the main electro active component. It has also been analyzed that the maximum productivity of the process falls on UHE compression by 2.0 – 2.2 times. It is shown the influence of the characteristics of the cathode material on the rate of electrochemical processes. To compare the operation of electrodes from different types of CCMs, the results of mathematical modeling are presented of the distribution of current polarization and the concentration in their volumes. The simulation results provide the subject to assume that the reaction rate will be the highest on TVSh grade of CFM. In other studied materials, it seems possible to slightly reduce the thickness of the electrode without a significant effect on the rate of the process, since internal zones with insignificant polarization are observed in them.

Keywords: flowing three-dimensional electrode, electroreduction of iron ions, mathematical modeling, carbon-graphite fibrous materials, selection of parameters.

Для цитирования: Кошев А.Н. Исследование влияния толщины и свойств углеграфитового волокнистого материала на эффективность электровосстановления ионов железа на проточном трехмерном электроде методами математического моделирования / А.Н. Кошев, В.К. Варенцов, В.В. Кузина // XXI век: итоги прошлого и проблемы настоящего плюс. – 2022. – Т. 11. – № 3(59). – С. 19-25. – DOI: 10.46548/21vek-2022-1159-0003.

Введение. При решении задачи повышения эффективности электрохимических систем с проточными трехмерными электродами (ПТЭ) возникает проблема обеспечения равномерного распределения потенциала по толщине электрода, позволяющего интенсифицировать процесс электроизвлечения металлов путем оптимизации токового и гидродинамического режима электролиза, а также оптимизации конструктивных параметров ПТЭ, таких, например, как толщина или удельная электропроводность электрода. Распределение потенциала, в свою очередь, определяется кинетикой электродного процесса, зависящей от электрохимических характеристик электролита и электрода, а также выбранными параметрами режима процесса электроосаждения.

Таким образом, для совершенствования работы электрохимических систем с ПТЭ необходимы исследования влияния на эффективность электрохимических процессов различных составляющих

процесса электролиза, а также определение наиболее благоприятных режимов осаждения.

Вопросы изучения методов электровосстановления ионов различных металлов актуальны и представлены в работах многих исследователей [1 – 6 и др.], однако значимых результатов в части электрохимического процесса восстановления ионов железа на проточных трехмерных электродах из волокнистых углеграфитовых материалов математическими методами не получено. Метод математического моделирования, описанный, например, в работах [7, 8] позволяет исследовать процесс электровосстановления ионов железа на проточном трехмерном электроде в динамике, а также проанализировать влияние различных параметров процесса на эффективность с целью оптимизации условий электролиза [9, 10]. Анализ последних публикаций [11–20], в которых рассматривались свойства и применимость проточных трехмерных материалов в качестве электродов, показывает

целесообразность исследований этой проблемы для электрохимического процесса восстановления ионов железа.

Методология. Цель исследования – посредством математического моделирования и численных расчетов определить значения электрохимических и технологических параметров, обеспечивающих достаточную интенсивность и производительность процесса электролиза в проточных трехмерных электродах из углеродных волокнистых материалов. В частности, в данной работе рассмотрено влияние на процесс электровосстановления железа до металлической формы таких параметров, как толщина с учетом ее сжатия, а также свойства материала катода, выполненного из углеродных волокнистых материалов (УВМ).

Математические описания, модели и методы вычислений приведены, например, в работах авторов [8-11], в которых моделируются процессы восстановления n компонентов в объеме пористого электрода, с учетом того, что при протекании процессов на УВЭ преимущественный перенос массы и заряда проходит путем принудительной конвекции, когда диффузией и естественной конвекцией можно пренебречь. В данной работе были выполнены численные решения систем дифференциальных, интегральных и алгебраических уравнений с использованием математической модели, соответствующей процессу восстановления железа до металлической фазы, определяемому электрохимическими реакциями вида $Fe(III) + e \rightarrow Fe(II)$; $Fe(II) + 2e \rightarrow Fe^0$.

Математическая модель для расчета данной электрохимической системы на ПТЭ основана на научном представлении о движении ионов трех и двухвалентного железа в электрическом поле с учетом конвективного переноса:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -div(z_i \mu_i F C_i grad(U) + C_i v). \quad (1)$$

В этом уравнении z_i , C_i , μ_i – соответственно, заряд, концентрация (Моль/см³) и подвижность i -го электроактивного компонента в псевдогомогенной среде; F – число Фарадея (Кл·моль⁻¹), div – обозначение дивергенции; $grad(U)$ – обозначение градиента потенциала электрического поля (В); v – скорость потока электролита на входе в электролизер.

Уравнение (1) может быть преобразовано в соответствие с правилами применения дифференциальных операторов, и для одномерного случая, который соответствует рассматриваемой технологической задаче будет иметь вид соответствующий следующей дифференциальной системе:

$$\frac{d^2 U}{dx^2} = S_V \left(\frac{1}{z_T(x)} + \frac{1}{z_C(x)} \right) (j_M(x) + j_H(x)); \quad (2)$$

$$|v| z_F \frac{\partial C}{\partial x} = -S_V j_M(x), \quad (3)$$

Здесь S_V , j_M , j_H , χ_T , χ_C – соответственно, реакционная поверхность (см²/см³), парциальные плотности тока по ионам металла и водород (А/см²), удельные электропроводности материала электрода и раствора.

Свободная переменная x соответствует координате по толщине ПТЭ.

Для стационарного случая, преобразуя уравнение (1), получим систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial(z \frac{dv}{dx})}{\partial x} + v F \sum z_i \frac{\partial C_i}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} F \sum z_i C_i = 0, \quad (4)$$

$$|v| \frac{\partial C_i}{\partial n} = -\frac{S_V}{z_i F} j_{Si}. \quad (5)$$

Здесь j_{Si} – плотность поляризующего тока по i -му компоненту (см²/см³), n – направление движения электролита, χ – величина, характеризующая электропроводные свойства системы (См/см).

Система уравнений (4) – (5) должна быть дополнена поляризационными кинетическими уравнениями, связывающими значения плотностей тока и потенциала в точке x :

$$j_{Si}(x) = j_{0i} \frac{e^{\frac{\alpha_i z_i F (U - \phi_{Ri})}{RT}} - e^{\frac{(\alpha_i - 1) z_i F (U - \phi_{Ri})}{RT}}}{1 + \frac{j_{0i} e^{\frac{\alpha_i z_i F (U - \phi_{Ri})}{RT}}}{z_i F K_{mi} C_i}} \quad (6)$$

с начальными и граничными условиями, накладываемыми на неизвестные функции:

$$\frac{\partial U}{\partial x}(0) = I \rho_T; \quad \frac{\partial U}{\partial x}(L) = I \rho_G; \quad C_i(0) = C_{i0}. \quad (7)$$

Здесь I – габаритная плотность тока (А/см²), проходящего через электрод, L – толщина ПТЭ.

Следует отметить, что уравнение (5) для концентрации второго электроактивного компонента (Fe^{+2}) рассматриваемой электрохимической системы $Fe(III)/Fe(II)/Fe$ должно быть существенно преобразовано, поскольку в силу электродной реакции $Fe^{+3} \rightarrow Fe^{+2}$ в процессе восстановления трехвалентного железа до двухвалентного с течением времени концентрация двухвалентного железа в электролите будет меняться.

Направление протока электролита в рассматриваемом случае проведения электролиза совпадает с направлением распределения плотности тока – x , поэтому уравнение (5) может быть записано в виде $|v| \frac{dC_i}{dx} = -\frac{S_V j_{Si}}{z_i F}$. Изменение концентрации первого компонента электродной реакции (Fe^{+3}) можно рассчитать по формуле: $|v| = -\frac{S_V j_{S1}}{z_1 F} dx$, либо в конечно-разностной форме: $\Delta C_1(x_i) = -\frac{S_V}{|v| z_1 F} j_{S1} \Delta x_i$.

Очевидно, что отрицательное приращение концентрации трехвалентного железа в точке электрода x_i равно приращению концентрации двухвалентного железа в той же точке. Следовательно, разностное уравнение для концентрации двухвалентного железа из группы (5) можно записать в виде $\Delta C_2(x_i) = \left(\frac{S_V}{|v| z_1 F} j_{S1} + \frac{S_V}{|v| z_2 F} j_{S2} \right) \Delta x_i$.

В этом случае моделирующее уравнение (5) для расчета распределения концентрации Fe^{+2} на ПТЭ, примет следующий вид $|v| \frac{dC_2}{dx} = \frac{S_V}{F} \left(\frac{j_{S1}}{z_1} + \frac{j_{S2}}{z_2} \right)$.

Решение системы дифференциальных уравнений (4) – (7) позволяет рассчитывать искомые электрохимические функций $U(t, x)$, $C_i(t, x)$. Методы решения означенной системы описаны, например, в работе [10], при этом учитывалась возможность изменения электрохимических параметров в процессе электро-

лиза. С этой целью разработаны алгоритмы их пересчета с течением времени процесса в каждой точке по толщине ПТЭ.

Результаты. Состав электролита, для которого проводились численные и экспериментальные исследования, выбран следующим: концентрация ионов $Fe(II)$ постоянна и равна 2,5 моль/л, концентрация ионов $Fe(III)$ варьировалась в пределах от $1,8 \cdot 10^{-3}$ до $1,8 \cdot 10^{-1}$ моль/л. Электропроводность раствора составила $\chi_{ж} = 0,14$ См/см. Катоды в ПТЭ были выполнены из УВМ следующих марок: ВИНН-250, НТМ-100, НТМ-200, ВВП-66-95, КНМ, ВНГ-50, ТГН и ТВШ. Электрохимические характеристики для перечисленных марок УВМ, такие как удельная реакционная поверхность электрода S_v (см²/см³), электропроводность электрода χ_e (См/см¹) и пористость материала электрода (ϵ) известны и приведены, например, в литературных источниках [12, 13]. Плотность поляризующего тока j , (А/см²) и начальная скорость потока электролита u , (см/с) задавалась в соответствии с задачами исследований.

Выбор толщины электрода. Одним из определяющих факторов эффективности процессов в системах с ПТЭ является реакционная поверхность материала катода. Увеличение реакционной поверхности ПТЭ возможно, очевидно, при увеличении размеров электролизера и, в частности, увеличением его толщины. Однако, увеличение толщины углеродистых катодов лимитируется возникновением областей с малой интенсивностью процесса электроосаждения вплоть до возникновения анодной зоны на катодно поляризованном электроде [15]. Целесообразно стремиться к достижению максимальной производительности электролиза, которая определяется поверхностью электрода, работающей на предельном диффузионном токе по ионам извлекаемого в ПТЭ металла [13].

На рисунке 1 приведена расчетная кривая зависимости C_0/C_t при росте толщины электрода L . Результаты показывают, что с возрастанием толщины электрода возрастает производительность процесса $Fe(III) + e \rightarrow Fe(II)$ с дальнейшей стабилизацией концентрации ионов $Fe(II)$ при значениях $L = 0,1 \dots 0,3$ см. Такая закономерность объясняется расширением зоны минимума поляризации с ростом толщины электрода, что и ограничивает рост продукта реакции $Fe(III) + e \rightarrow Fe(II)$.

На рисунке 2(а, б) кривые 5 иллюстрируют интересное как с точки зрения теории, так и с позиций практики, явление – появление области с анодной реакцией окисления ионов $Fe(II)$ до $Fe(III)$ на катодно поляризованном электроде. Закономерности возникновения такого явления описаны в работах [14, 15] и обуславливаются существенной неравномерностью распределения поляризации на ПТЭ, что приводит к смещению процессов восстановления металла на края электрода вследствие значительного роста электропроводности электрода в областях у токоподвода и токоотвода и малому росту элект-

ропроводности в средней части ПТЭ. В силу описанного явления при увеличении толщины электрода до 2 см поляризация электрода смещается в электроположительную сторону $Fe(II)$ до $Fe(III)$.

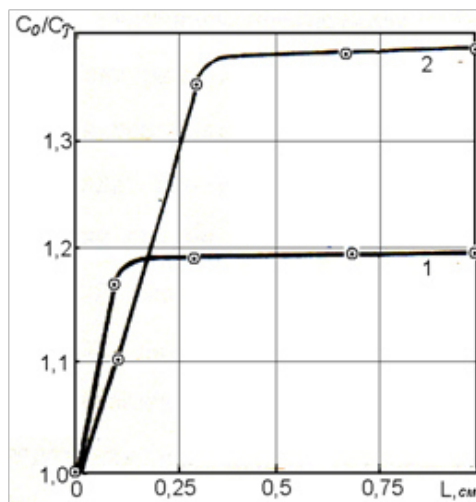


Рисунок 1 – Зависимость величины C_0/C_t от толщины ПТЭ – L при различных значениях габаритной плотности тока (А/м²): 1 – 500; 2 – 1000. Материал катода – ВИНН-250; скорость потока электролита $u = 0,36$ мл/с; исходная концентрация трехвалентного железа $8,9 \cdot 10^{-3}$ моль/л

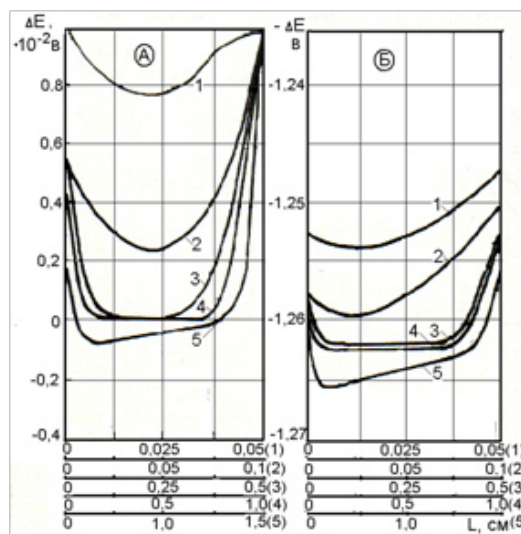


Рисунок 2 – Распределения парциальных поляризаций реакций вида $Fe(III) + e \rightarrow Fe(II)$ (А) и $Fe(II) + 2e \rightarrow Fe^0$ (Б) при различных значениях толщины ПТЭ, (см): 1 – 0,05; 2 – 0,1; 3 – 0,5; 4 – 1,0; 5 – 2,0

Из результатов численных расчетов можно сделать вывод о существовании некоторого оптимального значения толщины электрода, при котором ПТЭ работает наиболее эффективно.

Анализ показывает, что распределения поляризации электродных реакций $Fe(II) + 2e \rightarrow Fe^0$ и $Fe(III) + e \rightarrow Fe(II)$ имеют сходный характер и, следовательно, процесс извлечения металлического железа наиболее эффективен при небольшой толщине ПТЭ, причем преимущественно на фронтальной стороне электрода. На рисунке 3 представлены кривые распределения парциальных токов и концентраций

рассматриваемых реакций восстановления ионов железа, полностью подтверждающие этот вывод.

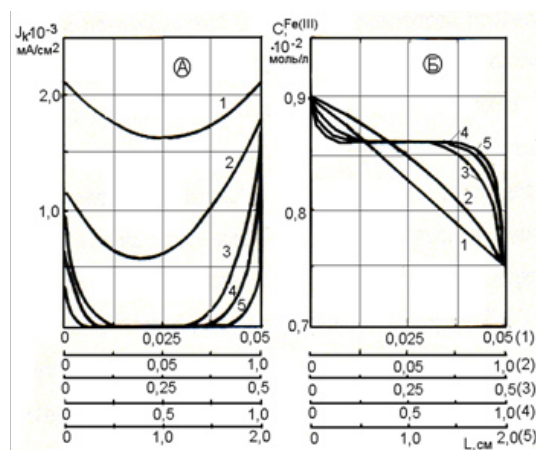


Рисунок 3 – Распределение парциальных локальных плотностей тока реакций $Fe(III) + e \rightarrow Fe(II)$ (А) и $Fe(II) + 2e \rightarrow Fe^0$ (Б) и концентрации ионов $Fe(III)$ при различных значениях толщины ПТЭ (см): 1 – 0,05; 2 – 0,1; 3 – 0,5; 4 – 1,0; 5 – 2,0

Анализ представленных на рисунках 1 – 3 численных расчетов, а также результатов многочисленных расчетов, не приведенных в данном сообщении из соображений лаконичности, дает возможность заключить, что оптимальная толщина ПТЭ для наибольшей эффективности его работы находится в пределах 0,15 – 0,30 см.

Проведенное численное моделирование позволило оценить влияние степени сжатия УВЭ на эффективность процессов восстановления железа на ПТЭ. Показано, что наиболее эффективным представляется сжатие материала катода примерно в два раза, дальнейшее сжатие материала приводит к снижению производительности процесса несмотря на значительный рост реакционной поверхности ПТЭ (например, при сжатии материала в пять раз для материала ВИНН-250 реакционная поверхность увеличивается также в пять раз). При увеличении сжатия до 2,0 – 2,2 раза интенсивность работы части поверхности ПТЭ уменьшается, и поляризация в глубине электрода снижается. Распределение плотности тока аналогично соответствующим изменениям поляризации, однако при этом значения поляризации и плотности тока на тыльной стороне увеличиваются, что приводит к ускорению целевого процесса в этих условиях. При увеличении степени сжатия в три и более раз происходит увеличение неравномерности распределения поляризации внутри электрода с одновременным уменьшением ее значений на сторонах УВЭ и, соответственно, снижение общей поверхности электрода, на которой целевой процесс идет с достаточной скоростью.

Влияние вида материала катода. В статье [16] приведен анализ накопленной обширной информации о роли материала электрода в электрохимических процессах. Электрод практически участвует в редокс-процессе, являясь своего рода универсальным

реагентом, заменяющим множество химических восстановителей и окислителей. Природа материала электрода при этом является важным фактором, определяющим свойства этого реагента. Как известно [11, 12], углеродные волокнистые материалы разных промышленных марок имеют различные электрохимические свойства существенно влияющие на скорость процессов электрохимической обработки железосодержащих растворов. Для сопоставления работы электродов из разных видов УВМ авторами проведены численные исследования распределения основных электрохимических функций: поляризации, тока и концентрации в ПТЭ.

На рисунке 4(а) приведены рассчитанные профили концентрации и поляризации $Fe(III)$ по толщине ПТЭ для следующих условий электролиза: исходная концентрация $8,9 \cdot 10^{-3}$ моль/л; $u = 0,36$ мл/с; габаритная плотность тока 500 А/м². Результаты расчетов показывают, что процесс восстановления трехвалентного железа до двухвалентного в заданных условиях наиболее равномерно распределяется по объему электрода при использовании УВМ марки ТВШ. Для всех других марок УВМ изучаемый процесс наиболее интенсивно протекает на тыльной и фронтальной стороне электрода, при этом центральная часть электрода работает не эффективно.

Приведенные на рисунке 4(б) профили распределения поляризации на ПТЭ для случая указанных ранее марок УВМ аналогичны результатам предыдущего исследования, они свидетельствуют о существенном отличии распределения процессов восстановления на электроде из УВМ марки ТВШ от материалов других марок. При этом, как и в предыдущем случае, правомерно сделать вывод о значительно большей эффективности процесса электрохимического восстановления железа при использовании в качестве материала катода УВМ марки ТВШ.

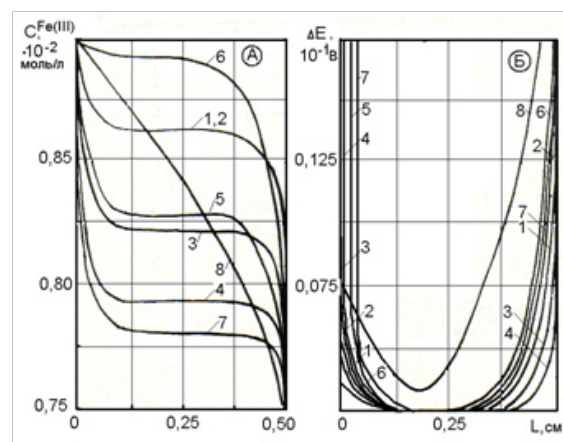


Рисунок 4 – Распределение концентрации ионов $Fe(III)$ (А) и поляризации (Б) по толщине ПТЭ для различных марок углеродных волокнистых материалов:

1 – ВИНН-250; 2 – НТМ-200; 3 – НТМ-100; 4 – ВВП-66-95; 5 – ТНГ; 6 – ВНГ-50; 7 – КНМ; 8 – ТВШ

При использовании в качестве материала катода

УВМ других материалов представляется необходимым уменьшение толщины электрода, что, по-видимому, не приведет к существенному снижению общей скорости процесса из-за более эффективного использования срединной области ПТЭ в силу улучшения равномерности распределения локальных плотностей тока по толщине ПТЭ.

Обсуждение. Изучение электрохимических процессов экспериментальным путем даже для самых простых электрохимических систем представляет собой сложную, трудоемкую задачу, для решения которой необходимо тонкое дорогостоящее оборудование и материалы. Сами исследования необходимо производить в условиях хорошо оборудованных химических лабораторий с соответствующей системой техники безопасности. В силу сказанного, использование математического моделирования и численных расчетов является привлекательным методом для исследователей. Однако для разработки математических моделей, адекватно описывающих реальные физико-химические процессы, необходимо исходить из электрохимической теории, которая не всегда достаточно развита для определенного вида электрохимических процессов. К таким процессам можно отнести окислительно-восстановительные процессы в объеме проточных трехмерных электродов. Тем не менее, в литературе имеются работы, посвященные исследованиям процессов в ПТЭ (см., например, работу [21] и библиографию к ней). Однако все доступные статьи, как в отечественных, так и в зарубежных журналах рассматривают электрохимические системы с одним, максимум двумя электроактивными компонентами, чего явно недостаточно для описания электрохимических процессов в ПТЭ. Модели, составленные и используемые авторами настоящей статьи, способны описывать процессы с любым количеством электродных реакций. Кроме того, разработанные модели позволяют описывать многостадийные процессы восстановления компонентов электролитов, что было применено в настоящей работе и позволило получить выводы, имеющие значения как для теории, так и для практики реальных электрохимических процессов.

Выводы. В результате математического моделирования распределения электроактивных компонентов при электровосстановлении ионов железа на проточном трехмерном электроде, выполненных численных экспериментов и экспериментальных исследований выявлено характерное влияние таких параметров, как толщина электрода, степень сжатия объемно-пористого катода из УВМ, а также свойств материала катода на производительность электрохимического процесса в электролизерах с проточными трехмерными электродами. Определены оптимальные численные значения рассмотренных характеристик электрода и электролита, представлены рекомендации по использованию различных марок материалов катода, позволяющие интенсифицировать электролиз и в целом повысить эффективность

изучаемых процессов.

Результаты выполненных исследований показывают эффективность использования методов математического моделирования для решения задач, подобных рассмотренным в настоящей работе, и обосновывают дальнейшее совершенствование математических моделей, методов расчетов и компьютерных процедур.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Варенцов В.К., Варенцова В.И. Электролиз с углеродными волокнистыми электродами в процессах извлечения платиновых металлов из минерального и техногенного сырья // Журнал прикладной химии. – 2020. Т. 93. № 7. – С. 1033-1042.
2. Варенцов В.К. Электролиз с объемно-пористыми проточными электродами в гидрометаллургии благородных металлов // Изв. СО АН СССР. Сер. хим. наук. – 1984. № 17, вып. 6. – С. 106-120.
3. Ковалева О.В. Электрохимическое исследование редокс-процессов в железосодержащих водных растворах // Revista științifică a Universității de Stat din Moldova «Studia Universitatis», Seria «Științe ale Naturii». – 2009. № 6 (26). – Рр. 195-203.
4. Ивашкин Ю.А., Плескачева О.Ю., Бокова Д.Ю. Получение мелкодисперсного порошка железа // Агротехника и энергосбережение. – 2017. № 2 (15). – С. 38-43.
5. Перельгин Ю.П., Киреев С.Ю., Кирилина Ю.Н. Реакции на катоде при электроосаждении металлов // Гальванотехника и обработка поверхности. – 2019. Т. 27. № 4. – С. 28-32.
6. Варенцов В.К., Кошев А.Н., Сухов И.Ф. Процессы совместного электроосаждения золота и серебра из серно-кислых растворов на проточном электроде // Теоретические основы химической технологии. – 2018. Т. 52. № 4. – С. 391-402.
7. Математическое моделирование и теория распределения поляризации в электрохимических реакторах с проточными объемно-пористыми катодами / А.Н. Кошев, В.К. Варенцов, М.А. Чиркина, В.Г. Камбур // Математическое моделирование. – 2011. Т. 23. № 8. – С. 110-126.
8. Кошев А.Н., Кузина В.В. Разработка и исследование математических моделей нестационарных процессов в электрохимических реакторах с проточными трехмерными электродами: моногр. Пенза: ПГУАС. – 2011. – 119 с.
9. Окислительно-восстановительные процессы на трехмерных электродах. Математическое моделирование, теория, эксперимент: моногр. / В.К. Варенцов, А.Н. Кошев, В.И. Варенцова, В.В. Кузина. Пенза: ПГУАС. – 2020. – 172 с.
10. Варенцов В.К., Кошев А.Н., Варенцова В.И. Современные проблемы электролиза и задачи оптимизации процессов в реакторах с трехмерными углеродными электродами: моногр. Пенза: ПГУАС. – 2015. – 286 с.
11. Углеродные волокнистые электроды: свойства, модификация, процессы и электролизеры. Математическое моделирование и оптимизация: моногр. / В.К. Варенцов, А.Н. Кошев, В.И. Варенцова, В.В. Кузина. Пенза: ПГУАС. – 2021. – 176 с.
12. Варенцов В.К., Жеребилов А.Ф., Малей М.Д. Углеродные волокнистые материалы – новые электроды для извлечения металлов из разбавленных растворов. 1. Нетканые углеродные волокнистые материалы. // Изв. СО АН СССР. Сер. хим. наук. – 1984. № 17, вып. 6. – С. 120-127.
13. Кошев А.Н., Варенцов В.К. Математическое и численное моделирование работы реактора с проточными трехмерными электродами в режиме предельного диффузионного тока в условиях нестационарности // Теоретические основы химической технологии. – 2018. Т. 52. № 5. – С. 497-503.
14. Жеребилов А.Ф., Варенцов В.К. Экспериментальное подтверждение наличия анодных зон на катоде из углеродных волокнистых материалов // Изв. СО АН СССР. Сер. хим. наук. – 1985. № 8. Вып. 3. – С. 35-39.
15. Варенцов В.К., Кошев А.Н. Теоретические и экспериментальные исследования образования анодных зон в объеме катодно поляризованного трехмерного электрода

из углеродного волокнистого материала // Теоретические основы технологической технологии. – 2022. Том 54. № 4. – С. 464-473.

16. Янилкин В.В. Роль материала электрода в электрохимии. Бутлеровские сообщения. – 2021. Т. 65. № 2. – С. 63-86.

17. Graphite felt as a versatile electrode material: Properties, reaction environment, performance and applications. / L. Fabián, F.C. Walsh, J.L. Nava, C.P. de León // *Electrochimica Acta*. – 2017. – 258 p. DOI:10.1016/j.electacta.2017.11.165.

18. Review – Carbon Cloth as a Versatile Electrode: Manufacture, Properties, Reaction Environment, and Applications / M.I. León, L.F. Castañeda, A.A. Márquez, F.C. Walsh, J.L. Nava // *Journal of the Electrochemical Society*. – 2022. 169(5), 053503.

19. Catalytic graphitization of residual carbon from gasification fine slag with ferric chloride as catalyst / X. Zhao, K. Liu, F. Guo, Y. Zhang, J. Wu // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. – 2022.

20. Mathematical modeling and simulation of electrochemical reactors: A critical review / F.F. Rivera, T. Pérez, L.F. Castañeda, J.L. Nava // *Chemical Engineering Science*. – 2021. Vol. 239, 116622. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.116622>.

21. Maslil A.L., Poddubnyi N.P., Medvedev A.Z. Distribution of geometrical current density inside a flow-by porous electrode: effect of electrode parameters and electrochemical reactions. // *Russian Journal of Electrochemistry*. – 2016. V. 52. №6. – Pp. 576-583.

Статья поступила в редакцию 18.07.2022

Статья принята к публикации 16.09.2022