

Моделирование и исследование в ПО Aspen Plus установки для электрохимического получения водорода

Рецензия эксперта на статью получена 16.05.2026 [The expert review of the article was received on May 16, 2026]

Электролиз воды считается самым экологичным способом производства водорода, применение которого напрямую связано с ростом использования возобновляемых источников энергии (ВИЭ). Из нескольких известных методов электролиза щелочной — самый технологически изученный, благодаря десятилетиям научных исследований, и обладающий высокой эффективностью. В малогабаритных установках — электроводородных генераторах (ЭВГ) — обычно используются технологии низкотемпературного электрохимического расщепления воды, среди которых выделяют три основных типа. Это, собственно, «водно-щелочной электролиз» (Alkaline Water Electrolysis, AWE), «электролиз с протонообменной мембраной» (Proton Exchange Membrane, PEM) и «электролиз с анионообменной мембраной» (Anion Exchange Membrane, AEM). Различия между ними проходят как на уровне химических реакций с разными типами электролита и условиями протекания, так и на конструктивном уровне при реализации технологических схем в установках ЭВГ [1].

В технологиях водно-щелочного электролиза достижения связаны с новыми конструктивными решениями и материалами для диафрагмы и электродов, применением катализаторов, системной интеграцией с ВИЭ. Тем не менее, остаются такие проблемы, как низкая плотность рабочего тока, медленная реакция выделения кислорода и недостаточная совместимость с переменной мощностью ВИЭ-источника электроэнергии [2].

Актуальные исследования направлены на повышение эффективности и снижение затрат на производство водорода

в водно-щелочных электролизёрах. Среди перспективных направлений — использование эффектов турбулентности в потоке электролита, действия ультразвука, а также магнитного поля и связанных с ним магнитогидродинамического и магнитотермального эффектов на пузырьки газов в электролите [1, 2].

Авторами ранее проводилось исследование эффективности ячейки «с нулевым зазором между пористыми электродами и диафрагмой» (Zero Gap Configuration of AWE, ZGAW) [3], а также исследование влияния ультразвука на функциональные характеристики ячейки ЭВГ [4], что позволило предложить новые способы повысить эффективность бытовых и промышленных установок ЭВГ.

В этих работах использовался метод математических моделей («цифровых двойников») ячейки электролизёра, позволяющий ещё на этапе проектирования исследовать функциональные характеристики различных вариантов элементов ячеек и конструкции в целом. Кроме того, проводились параметрические исследования влияния температуры, давления и плотности тока на производительность AWE-ячейки. Разработанные модели применимы для широкого рабочего диапазона параметров, поэтому значительная часть задачи повышения эффективности электролизёра решается оптимизацией математической модели.

Использование цифровых двойников позволяет также внедрять системы мониторинга и адаптивного управления, обучать технический персонал, проводить наладочные и плановые работы по совершенствованию реальных устройств электроводородной генерации.

УДК 661.931, 62-622. Научная специальность: 2.4.5.

Моделирование и исследование в ПО Aspen Plus установки для электрохимического получения водорода

Владимир Алексеевич Сучилин, д.т.н., профессор; **Алексей Сергеевич Кочетков**, старший преподаватель; **Николай Николаевич Губанов**, старший преподаватель, Российский государственный университет туризма и сервиса (РГУТиС)

Для повышения эффективности установок электролизно-водной генерации водорода (ЭВГ) нужно ещё на этапе моделирования исследовать и оптимизировать их функциональные характеристики. Эта задача решается с помощью математических моделей (цифровых двойников) данных систем. Анализ различных методов моделирования показал, что перспективным является использование ПО Aspen Plus, которое позволяет моделировать электрохимические процессы с учётом термодинамики и кинетики, контролировать массовый и энергетический баланс, оптимизировать заданные параметры отдельных узлов и конструкции в целом. Проведено моделирование и параметрическое исследование функциональных характеристик установки ЭВГ в ПО Aspen Plus. Представлены сравнительные результаты для разных моделей и параметров процесса, предложены способы повышения эффективности производства водорода.

Ключевые слова: производство водорода, электролизно-водные генераторы, водно-щелочной электролиз, эффективность, моделирование в ПО Aspen Plus.

UDC 661.931, 62-622. Scientific specialty number: 2.4.5.

Modeling and research in Aspen Plus software of a plant for the electrochemical method of hydrogen production

Vladimir A. Suchilin, Doctor of Technical Sciences, Professor; **Aleksej S. Kochetkov**, senior lecturer; **Nikolaj N. Gubanov**, senior lecturer, Russian State University of Tourism and Service (RGUTIS)

To increase the efficiency of water electrolyzer plants for hydrogen production it is necessary to study and optimize their functional characteristics at the modeling stage. This problem is solved using mathematical models (digital twins) of these systems. An analysis of various modeling methods showed that the use of Aspen Plus software, that allow to simulate electrochemical processes taking into account thermodynamics and kinetics, control mass and energy balance, and optimize the specified parameters of individual components and the structure as a whole, is promising. Modeling and parametric study of the functional characteristics of the water electrolyzer plant were carried out in Aspen Plus software. Comparative results for different models and process parameters are presented, and methods for increasing the efficiency of hydrogen generation are proposed.

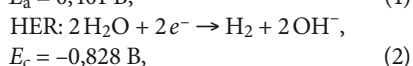
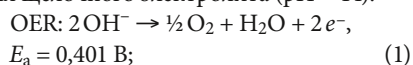
Key words: hydrogen production, water electrolyzers, alkaline water electrolysis, efficiency, modeling in Aspen Plus software.



Детальное моделирование отдельных узлов установки ЭВГ, таких как АВЕ-ячейка и теплообменник, и физических процессов в них, например, движение электролита в пористом проводнике или действие ультразвука на пузырьки газов в растворе, выполнялось авторами в программном обеспечении (ПО) COMSOL Multiphysics, которое имеет необходимый набор мультифизических интерфейсов для задания уравнений и позволяет решать инженерные задачи любой сложности методом конечных элементов.

Но для создания цифрового двойника установки ЭВГ в целом нужно моделировать электрохимические процессы, включая электролиз воды, с учётом термодинамики и кинетики процесса, поддерживать массовый и энергетический баланс отдельных узлов и установки в целом, учитывать распределение реагентов и продуктов в системе, проводить параметрические исследования и анализ чувствительности, варьируя взаимосвязанные входные параметры. Такими возможностями обладает ПО для математического моделирования и оптимизации процессов химической промышленности Aspen Plus. Однако его использование предполагает интеграцию одной из существующих математических моделей ячейки электролизёра с остальными компонентами установки, что позволит получить замкнутую модель установки щелочного электролиза.

Электрохимическое расщепление молекул воды на молекулы водорода и кислорода по схеме $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2$ происходит в результате двух реакций: выделения кислорода на аноде (Oxygen Evolution Reaction, OER) и выделения водорода на катоде ячейки электролизёра (Hydrogen Evolution Reaction, HER). Механизм каждой из этих реакций может быть различным в зависимости от показателя pH раствора электролита. Уравнения реакций для щелочного электролита (pH = 14):



где E_a и E_c — равновесные потенциалы на аноде и катоде при стандартных условиях (температуре 298,15 К и давлении 1 атм). Разность этих потенциалов создаёт равновесное напряжение ячейки $U_{eq} = E_a - E_c = 1,229 \text{ В}$. Под воздействием электрического поля освобожденные на аноде электроны текут по внешней цепи к катоду, в то время как ионы гидроксида OH^- выделяются в электролит и движутся к аноду. Таким образом, U_{eq} — минимальное напряжение, необходимое для протекания реакции.

Однако на практике напряжение ячейки U_{cell} всегда выше равновесного из-за кинетических и резистивных эффектов, вызывающих так называемые «перенапряжения». Это перенапряжения активации U_{act} и концентрации U_{conc} на электродах, которые вычисляются отдельно для катода и анода, и омическое перенапряжение U_{ohm} , связанное с сопротивлением электролита и электронных проводников при прохождении тока.

Поэтому:

$$U_{cell} = U_{eq} + U_{act} + U_{ohm} + U_{conc}. \quad (3)$$

Если условия отличаются от стандартных, равновесное напряжение U_{eq} в этой формуле заменяется на U_{oc} — напряжение разомкнутой цепи (open circuit), которое можно рассчитать с помощью уравнения Нернста как функцию температур ячейки и парциальных давлений H_2 и O_2 на катоде и аноде соответственно. Перенапряжения активации U_{act} связаны с преодолением энергетических барьеров OER- и HER-реакций и могут быть найдены по уравнению Батлера — Фольмера. Омическое перенапряжение вычисляется с использованием закона Ома и эмпирических зависимостей для ионной проводимости электролита [5].

Кроме того, пузырьки газов на электродах и в растворе электролита создают дополнительное пузырьковое перенапряжение, влияние которого на эффективность процесса электролиза и возможный способ устранения пузырьков рассмотрен авторами в [4].

С другой стороны, в рамках термодинамики равновесное напряжение U_{eq} можно трактовать как обратимое напряжение U_{rev} , связанное с изменением энергии Гиббса. Реакция расщепления воды является эндотермической реакцией, общая потребляемая энергия которой складывается из электрической и тепловой энергии и определяется изменением энтальпии ΔH в соответствии с уравнением:

$$\Delta H = \Delta G + Q = \Delta G + T\Delta S, \quad (4)$$

где ΔG — изменение свободной энергии Гиббса — минимальное количество энергии, которое необходимо передать с помощью электричества, а тепловая энергия $Q = T\Delta S$, где T — температура электролиза, а ΔS — изменение энтропии. При стандартных условиях $\Delta G^0 = 237,1 \text{ кДж/моль}$, а тепловая энергия $T\Delta S^0 = 48,7 \text{ кДж/моль}$. Таким образом, $\Delta H^0 = 285,8 \text{ кДж/моль}$. То есть на 1 моль H_2O теоретически требуется 285,8 кДж полной энергии, включая 237,1 кДж электрической и 48,7 кДж тепловой. При низкотемпературном электролизе воды энергия может поступать за счёт дополнительных источников тепла или джоулевого нагрева, вызванного электронным и ионным токами в ячейке.

Термодинамическое обратимое напряжение U_{rev} , теоретически позволяющее инициализировать электролиз воды, вычисляется по изменению свободной энергии Гиббса:

$$U_{rev} = -\frac{\Delta G}{zF}, \quad (5)$$

где $z = 2$ — число обменных электронов на 1 моль H_2 ; $F = 9,65 \times 10^4 \text{ Кл/моль}$ — число Фарадея. В то же время термонеutralное напряжение U_{tn} рассчитывается по изменению энтальпии:

$$U_{tn} = -\frac{\Delta H}{zF}. \quad (6)$$

Отсюда $U_{rev} = 1,23 \text{ В}$, $U_{tn} = 1,48 \text{ В}$ при стандартных условиях. Разница возникает из-за изменения энтропии $T\Delta S^0$ в процессе электролиза и должна быть уравновешена либо подачей, либо отводом тепла из системы [1].

Если вся энергия, необходимая для электрохимического процесса, обеспечивается электричеством, минимальным напряжением для поддержания адиабатического процесса электролиза воды является термонеutralное напряжение ячейки U_{tn} . В этом случае идеальный электролизёр с КПД, равным 100 %, выделял бы количество тепла, равное тому, что необходимо для реакции, и следовательно, находился в тепловом равновесии с окружающей средой.

Если напряжение U_{cell} меньше U_{tn} , но больше U_{rev} , ячейка действует как холодильник, непрерывно поглощающий тепло из окружающей среды. Если $U_{\text{cell}} > U_{\text{tn}}$, выделяется избыточное тепло, которое необходимо отводить во избежание перегрева ячейки. Именно последний вариант соответствует реальному режиму работы электролизёра.

Моделирование установки AWE-электролиза для производства водорода в ПО Aspen Plus требует интеграции указанных процессов в среду химического моделирования и представляет собой комплексный подход к проектированию и оптимизации систем электролиза воды, который позволяет создавать детализированные модели, учитывающие электрохимические, термодинамические, кинетические и транспортные явления.

Блок электролизёра является центральным элементом модели установки ЭВГ. Поскольку в библиотеке оборудования пакета Aspen Plus до версии 14 отсутствовал такой встроенный модуль, как электролизёр, то исследователями было предложено несколько подходов к его реализации в Aspen Plus, которые зависят от типа электролизёра (ALE, PEM, SOEC) и требуемого уровня детализации.

Наиболее универсальный вариант — создание пользовательского блока электролизёра на основе заданных уравнений. Этот способ позволяет учитывать специфические электрохимические характеристики электролизёра, включая перенапряжения, омические потери и кинетику электродных реакций. В работе [6] предложена электрохимическая модель ячейки AWE-электролизёра, входящими переменными которой являются температура ячейки T , давление p и плотность тока i . Формулы, описывающие работу ячейки, основаны как на физических принципах, связанных с процессом электролиза, так и на статистических данных. Для анализа зависимости напряжений ячейки и различных возникающих перенапряжений от плотности тока обычно используют графическое представление в виде поляризационной кривой. Основное уравнение, позволяющее построить поляризационную кривую, выражает эмпирическую зависимость напряжения ячейки от входящих величин:

$$U_{\text{cell}} = U_{\text{eq}} + (r_1 + d_1 + r_2 T + d_2 p) i + s \log \left[\left(t_1 + \frac{t_2}{T} + \frac{t_3}{T^2} \right) i + 1 \right], \quad (7)$$

где r_1 [Ом·м²], d_1 [Ом·м²], r_2 [Ом·м²/°C] и d_2 [Ом·м²/бар] — эмпирические параметры, задающие сопротивление электролита и проводников; s [В], t_1 [м²/А], t_2

[°C·м²/А] и t_3 [°C²·м²/А] — эмпирические параметры, определяющие перенапряжение на электродах. При этом, в отличие от (3), не учитывается концентрационное перенапряжение, так как его влияние при плотности тока, характерной для обычного режима работы электролизёра, несущественно.

Одно из дополнительных уравнений этой модели представляет формулу для фарадеевской эффективности h_F процесса электролиза (отношение измеренного фактического количества произведённого H_2 к теоретически рассчитанному), включающую несколько эмпирических параметров [6].

Эффективность электролизёра также зависит от чистоты состава газов на выходах из ячейки. Диффузия водорода в кислород (Diffusion of Hydrogen to Oxygen, НТО) имеет большее значение, чем обратный процесс, так как количества выделяющихся H_2 и O_2 находятся в отношении 2:1. Кроме того, коэффициенты растворимости и диффузии O_2 в концентрированном КОН меньше. Загрязнение водородом потока кислорода может даже превышать установленный предел безопасности (3,8% моль H_2 при давлении 1 атм и температуре +80°C) [2]. При этом диффузия кислорода в водород составляет не более 0,1–0,5%, поэтому в данной модели не учитывается. Формула для НТО, которая определяет мольную долю H_2 в потоке O_2 на выходе из анода и выражает чистоту состава произведённого газа, содержит две серии эмпирических параметров, отражающих влияние температуры и давления [6].

Данная полуэмпирическая модель в работе [7] была распространена на электролизёр как стек (батарею) ячеек, соединённых параллельно, и интегрирована в Aspen Plus в виде подпрограммы через интерфейс Aspen Custom Modeler. При этом в число входящих переменных модели добавлены активная площадь электродов ячейки A и количество ячеек в батарее N .

Из уравнения Фарадея для ячейки определяется суммарный молярный поток H_2 на катодах батареи, зависящий от фарадеевской эффективности:

$$\dot{n}_{H_2\text{-cath}} = h_F \frac{I}{zF} N, \quad (8)$$

где $I = iA$ — сила тока в ячейке.

Электрическая мощность батареи W_{stack} зависит от напряжения и силы тока ячейки:

$$W_{\text{stack}} = U_{\text{stack}} I = N U_{\text{cell}} i A. \quad (9)$$

Это выражение неявно определяет плотность тока ячейки i , поэтому W_{stack}

можно задавать в качестве одной из входящих переменных.

Материальный баланс модели выражают потоки генерации и потребления. Молярный поток произведённого водорода $\dot{n}_{H_2\text{-prod}}$ находится по формуле (8), а для молярных потоков произведённого кислорода $\dot{n}_{O_2\text{-prod}}$ и расхода воды $\dot{n}_{H_2O}$ из уравнений реакций (1) и (2) следуют отношение $\dot{n}_{O_2\text{-prod}}/\dot{n}_{H_2\text{-prod}} = 1/2$ и равенство $\dot{n}_{H_2O} = \dot{n}_{H_2\text{-cath}}$.

Энергетический баланс определяют такие переменные, как общее количество выделяемого тепла Q_{gen} и тепловые потери Q_{loss} .

Так как рабочее напряжение ячейки U_{cell} выше теоретического термонеutralного $U_{\text{tn}} = 1,48$ В, то выделяется избыточная теплота, количество которой прямо пропорционально разнице напряжений:

$$Q_{\text{gen}} = NI(U_{\text{cell}} - U_{\text{tn}}). \quad (10)$$

Это приводит к повышению температуры электролита и образующихся газов, которые необходимо постоянно охлаждать для поддержания заданной рабочей температуры. Предполагается, что часть выделяемого тепла Q_{loss} теряется за счёт теплового излучения, так что чистая избыточная теплота Q_{excess} представляет разность Q_{gen} и Q_{loss} .

Батарея работает адиабатически, за исключением рассеиваемого потока Q_{loss} , величина которого пропорциональна изменению энтальпии ΔH с коэффициентом Q_f . Этот параметр, определяемый конструкцией электролизёра, можно принять равным 10%:

$$Q_{\text{loss}} = Q_f \dot{n}_{H_2\text{-prod}} \Delta H = 0,1 \dot{n}_{H_2\text{-prod}} \Delta H. \quad (11)$$

Оставшаяся часть выделяемого тепла, то есть чистое избыточное тепло Q_{excess} , в сумме с потребляемой электрической мощностью W_{stack} добавляется к общей энтальпии продуктов реакции и учитывается Aspen Plus при расчёте общей температуры батареи.

Модель технологического процесса электролиза была разработана в [7] с учётом всех основных компонентов реальной установки электроводородной генерации. Кроме блока электролизёра, она включает систему подачи раствора электролита, систему отделения газов от жидкости, теплообменники, насосы для циркуляции электролита и контур охлаждения. Эти компоненты были смоделированы с использованием стандартных элементов Aspen Plus.

Термодинамические свойства всех химических веществ, участвующих в процессе, содержатся в решателях Aspen Plus.

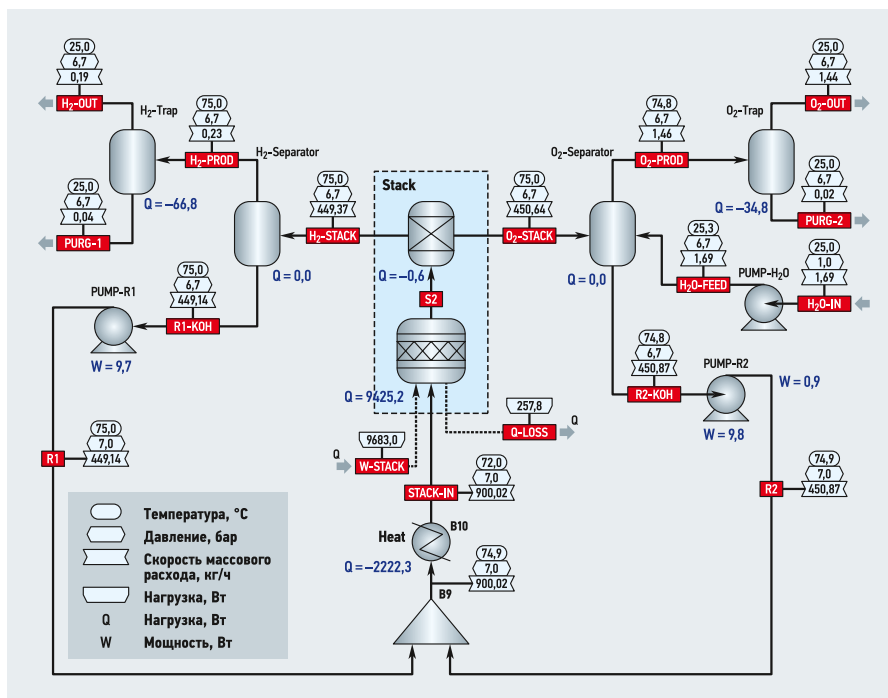


Рис. 1. Схема установки AWE-электролиза и её функциональные характеристики (модель №1)

Задав рабочие параметры отдельных модулей и граничные условия, можно контролировать баланс массы и энергии каждого компонента и всей системы в целом и прогнозировать функциональные характеристики установки ЭВГ: напряжение батареи, выработку водорода и кислорода, содержание примесей H₂ в потоке на выходе из анода и O₂ на выходе из катода соответственно. Эти и ряд других параметрических исследований влияния температуры, давления и плотности тока на общую производительность системы были проведены в [7]. Таким образом, данная модель в Aspen Plus представляет собой полезный инструмент для проведения оптимизации на системном уровне с целью максимизации общей эффективности установки ЭВГ.

Однако создание нового пользовательского блока в Aspen Custom Modeler не является обязательным условием для имплементации эмпирических уравнений в модель Aspen Plus. Основное уравнение (7) можно использовать также и с типовыми блоками из библиотеки оборудования. Для этого достаточно объединить в один технологический узел стехиометрический реактор конверсии, в котором протекает реакция разложения воды, и сепаратор для разделения смеси газов водорода и кислорода. Таким способом в ряде работ [8–10] были построены модели в Aspen Plus установки AWE-электролиза на основе [5, 6], но с использованием

только стандартных модулей из библиотеки Aspen Plus. Однако в этих работах модель подвергалась некоторым упрощениям, например, не учитывались фарадеевская эффективность и НТО, а цикл установки ЭВГ оставался незамкнутым. Таким образом, моделирование являлось скорее учебной иллюстрацией возможностей пакета Aspen Plus, чем рабочим инструментом для проектирования и оптимизации систем производства водорода.

Исследуемая модель и результаты

В данной работе на первом этапе решается задача моделирования и исследования установки AWE-электролиза стандартными средствами Aspen Plus, но с сохранением всех возможностей модели [7] (модель №1). Кроме того, так как блок электролизной батареи присутствует в версии 14 пакета Aspen Plus, установку ЭВГ можно также моделировать с использованием данного модуля (модель №2), чтобы проверить различия этих двух методов и сравнить их результаты.

В расчётах применялся базовый метод свойств ELECNRTL для чистых компонентов и смеси в растворе. Метод Генри применялся для газов O₂ и H₂.

Входные параметры ячейки: плотность тока $i = 4000$ А/м², активная площадь электродов $A = 0,1$ м², количество ячеек в батарее $N = 12$. Параметры входящего потока: температура $T = +72$ °C, давление $p = 7$ бар, массовые доли H₂O и KOH

в растворе электролита: $w_{H_2O} = 0,65$, $w_{KOH} = 0,35$, массовый расход раствора электролита $\dot{m} = 900$ кг/ч. Использовались эмпирические параметры из [7].

Некоторые из функциональных характеристик модели, которые можно вычислить по формулам (7)–(9) до обращения к Aspen Plus, занесены в табл. 1.

Эти значения записываются в настройки блоков как параметры программы и входные переменные. На рис. 1 представлены структурная схема модели установки AWE-электролиза и её функциональные характеристики.

Входящий поток STACK-IN раствора электролита и блок STACK представляют начальный этап цикла. Блок STACK состоит из стехиометрического реактора конверсии B1 и сепаратора компонентов B2. Для реакции конверсии необходимо задать степень превращения γ_{conv} , которая вычисляется по молярному расходу воды следующим образом:

$$\gamma_{conv} = \frac{M_{H_2O} \dot{n}_{H_2O}}{w_{H_2O} \dot{m}} = 0,002758, \quad (12)$$

где молярная масса воды составляет $M_{H_2O} = 18,015$ кг/кмоль.

Давление в реакторе предполагается постоянным: $p_1 = 7$ бар, избыточная теплота Q_{gen} находится по формуле (10): $Q_{gen} = 2577,93$ Вт, тепловые потери $Q_{loss} = 257,79$ Вт, тепловая нагрузка:

$$Q = W_{stack} - Q_{loss} = 9425,21 \text{ Вт.}$$

Температура продуктов реакции T_1 вычисляется средствами Aspen Plus и передаётся в блок B2 как температура входящего потока S2. В параметрах блока B2 задаются части компонент входящего потока, идущие в выходящие потоки сепаратора. Из-за диффузии водорода компонент H₂ потока S2 входит в поток O₂-STACK с коэффициентом $k_{H_2} \neq 0$. Из отношения потоков:

$$\frac{\dot{n}_{O_2-Prod}}{\dot{n}_{H_2-Prod}} = \frac{1}{2}$$

значение $k_{H_2} = \frac{1}{2} HTO = 0,00402648$.

Также для сепаратора задаётся падение давления до $p_2 = 6,7$ бар. Температура на выходе T_2 и тепловая нагрузка Q_2 вычисляется средствами Aspen Plus.

В реальной AWE-ячейке блоку B2 соответствует мембрана-сепаратор с хорошей ионной проводимостью, которая разделяет объём ячейки на две части, так что реакции (1) и (2) протекают каждая в своей зоне и выделяющиеся H₂ и O₂ непосредственно не смешиваются.

Однако растворённые в электролите газы могут проникать через разделительную мембрану, перекрёстно загрязняя обе половины ячейки. Газожидкостная смесь поступает в разделительные камеры.

Функциональные характеристики установки (модель №1)

табл. 1

Напряжение ячейки U_{cell} , В	Фарадеевская эффективность η_F	НТО	Электрическая мощность W_{stack} , Вт	Молярный поток H ₂ на катодах $\dot{n}_{H_2-cath}$, кмоль/ч
2,017	0,947339	0,00805296	9683	0,9089

Здесь пузырьки газа отделяются и скапливаются в верхней части камер, а избыток газа, превышающий предел растворимости, вытекает вместе с жидкостью в виде мелких пузырьков.

В данной модели потоки H_2 -STACK и O_2 -STACK направляются в двухфазные сепараторы-испарители для разделения жидкости и газа ($SEP-H_2$ и $SEP-O_2$, соответственно), работающие адиабатически при постоянных температуре и давлении. Здесь разделяются потоки жидкого раствора электролита ($R1-KOH$ и $R2-KOH$) и потоки газов (H_2-PROD и O_2-PROD), но небольшое количество водяного пара уходит вместе с водородом (молярный поток $\dot{n}_{out1}$) и кислородом (молярный поток $\dot{n}_{out2}$). Поэтому предусмотрен дополнительный поток H_2O-IN деионизированной воды ($T_3 = 25^\circ C$, $p_3 = 1$ бар), которая насосом $PUMP-H_2O$ (давление на выходе $p_4 = 6,7$ бар) подаётся в кислородный сепаратор $SEP-O_2$ (поток $H_2O-FEED$). Необходимый для восполнения потерь воды молярный поток $\dot{n}_{H_2O-in}$ вычисляется с помощью встроенной функции Aspen Plus «калькулятор» как сумма потерь и молярного расхода в процессе электролиза.

Из-за добавления холодной воды температура потоков O_2-PROD и $R2-KOH$ T_6 на выходе из сепаратора $SEP-O_2$ немного ниже, чем температура $T_5 = T_2$ потоков H_2-PROD и $R1-KOH$. Потоки $R1-KOH$ и $R2-KOH$ поступают в рециркуляционные насосы ($PUMP-R1$ для катодного контура и $PUMP-R2$ для анодного контура), повышающие давление на выходе до заданного $p = 7$ бар. Потоки жидкости $R-1$ и $R-2$ соединяются смесителем $B9$ перед теплообменником $B10$, где электролит охлаждается до заданной температуры $T = +72^\circ C$ перед подачей в батарею ($STACK-IN$).

Водород и кислород, отделённые в двухфазных сепараторах (потоки H_2-PROD и O_2-PROD), проходят через дополнительные испарители ($TRAP-H_2$ и $TRAP-O_2$, соответственно) при постоянном давлении $p_8 = 6,7$ бар и охлаждении до $T_8 = 25^\circ C$, чтобы удалить максимальное количество конденсатной воды в потоках очищенных продуктов H_2-OUT и O_2-OUT .

Полученные в результате моделирования параметры потоков занесены в табл. 2. Видно, что в замкнутом цикле установки ЭВГ такие значения, как массовый расход электролита во входящем потоке $STACK-IN$ и молярный поток H_2 в потоке $H_2-STACK$, подверглись небольшой корректировке по сравнению с входными параметрами и переменными.

Оценка эффективности установки должна включать как количество произведённого водорода, так и степень его чистоты.

Параметры потоков установки (модель №1)

табл. 2

Потоки/параметры	STACK-IN	H ₂ -STACK	O ₂ -STACK	R1	R2	H ₂ -OUT	O ₂ -OUT
Температура, °C	72,0	74,9865	75,9865	75,0084	74,8708	25	25
Давление, бар	7,0	6,7	6,7	7,0	7,0	6,7	6,7
Массовый расход, кг/ч	900,02	449,374	450,642	449,142	450,87	0,1876	1,4375
Молярная доля пара / жидкости	0 / 1	0,0042 / 0,9958	0,0021 / 0,9979	0 / 1	0 / 1	1 / 0	1 / 0
Молярный поток H ₂ O, кмоль/ч	32,4725	16,1914	16,1914	16,1886	16,2839	4,3302 e ⁻⁴	2,2681 e ⁻⁴
Молярный поток H ₂ , кмоль/ч	4,2702 e ⁻⁴	0,08961	3,62275 e ⁻⁴	4,2362 e ⁻⁴	3,4012 e ⁻⁶	0,08919	3,5887 e ⁻⁴
Молярный поток O ₂ , кмоль/ч	4,6994 e ⁻⁴	0	0,04524	0	4,6999 e ⁻⁴	0	0,0448
Молярный поток KOH, кмоль/ч	5,6144	2,8072	2,8072	2,8072	2,8072	0	0

Производительность установки измеряется величиной потока на выходе $\dot{n}_{H_2-out} = 0,08919$ кмоль/ч. По табл. 2 легко проверить, что очистка газов в сепараторах от водяного пара практически не изменяет молярную долю H_2 в потоках анодного контура: 0,0080105 в потоке O_2-OUT против 0,0080073 в потоке $O_2-STACK$.

Таким образом, уже известная величина $HTO = 0,00805296$ является хорошим показателем чистоты процесса.

Важной характеристикой установки ЭВГ является её энергоэффективность [эффективность преобразования электроэнергии в теплотворную энергию водорода, которая определяется ростом его энтальпии ΔH в ходе реакции электролиза (4)]. Различают два вида теплотворной способности энтальпии. «Высшая теплотворная способность» (Higher Heating Value, HHV) водорода определяется как количество теплоты, выделяемое в результате сгорания одного моля H_2 при начальной температуре $+25^\circ C$ и последующем охлаждении продукта сгорания — H_2O до исходной температуры при условии конденсации образующегося водяного пара. То есть HHV учитывает всю тепловую энергию, выделяющуюся при сгорании топлива, включая скрытую теплоту парообразования воды. В стандартных условиях $HHV_{H_2} = 285,8$ кДж/моль, что соответствует термонеutralному напряжению $U_{tn} = 1,48$ В.

В отличие от HHV, определение «нижней теплотворной способности» (Lower Heating Value, LHV) предполагает, что продукт сгорания находится в состоянии пара в конце процесса, то есть скрытая теплота парообразования не учитывается. Это фактическое количество полезной энергии, получаемой в процессе горения, поскольку из общей теплотворной способ-

ности вычитается энергия, затрачиваемая на испарение воды. При условии конечной температуры водяного пара $150^\circ C$ $LHV_{H_2} = 241,8$ кДж/моль, что соответствует термонеutralному напряжению $U_{tn} = 1,25$ В.

Энергетическая HHV-эффективность батареи находится по формуле:

$$\eta_{HHV} = \frac{\dot{n}_{H_2-out} HHV_{H_2}}{W_{stack}}. \quad (13)$$

В аналогичную формулу для энергетической LHV-эффективности входит указанная величина LHV_{H_2} . Для данной модели $\eta_{HHV} = 0,73123$, $\eta_{LHV} = 0,61865$.

Суммарная электрическая мощность установки W_{net} складывается из электрической мощности батареи и всех прочих используемых устройств. В данной модели это мощности нескольких насосов. Эти величины приводятся в табл. 3. Видно, что исключительный вклад (99 %) в потребляемую электрическую мощность установки вносит батарея, которая определяет энергоэффективность системы в целом.

Однако здесь не учитываются энергозатраты на охлаждение электролита перед входом в батарею. Основную часть избыточного тепла $Q_{excess} = 2321,04$ Вт рассеивает теплообменник $B10$, который имеет тепловую нагрузку $Q = -2222,3$ Вт. В реальной установке ЭВГ он является частью контура охлаждения, водяного или воздушного, с дополнительными модулями, требующими затрат электроэнергии.

Кроме того, изменение давления в блоке $STACK$ задаётся как параметр для выходных потоков из сепаратора $B2$, а не вычисляется, не учитывается также зависимость от температуры электрических характеристик процесса, таких как перенапряжения активации и обратимое на-
пряжение U_{rev} .

Электрические мощности модулей установки (модель №1)

табл. 3

Модули	W_{stack}	$W_{pump-R1}$	$W_{pump-R2}$	W_{pump-H_2O}	W_{net}
Эл. мощность, Вт	9683	9,7146	9,7614	0,9089	9703,38

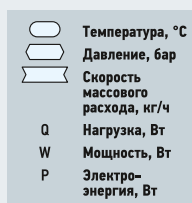


Рис. 2. Схема установки AWE-электролиза и её функциональные характеристики (модель №2)

Наконец, параметрическое исследование характеристик модели №1 затруднено необходимостью перенастройки входных переменных (табл.1) и производных от них (как γ_{conv}), как это показано выше.

Эти ограничения и недостатки можно преодолеть, используя пакет Aspen Plus версии 14, где блок электролизёра уже присутствует (модель №2).

Реализация электролизёра в Aspen Plus основана на усовершенствованной одномерной модели AWE-ячейки [11], состоящей из трёх основных модульных компонентов: анод, катод и напряжение. Формулы изменения напряжения и падения давления в элементах ячейки выводятся из физических принципов.

Параметры модели определяются конструкционными материалами и конфигурацией компонентов. Это позволяет применять её к различным вариантам щелочных электролизёров, тогда как полуэмпирическая модель [7] разрабатывалась для конкретной ячейки.

По сравнению с моделью № 1 данная модель точнее описывает электрохимические процессы в AWE-ячейке.

Во-первых, учитывается электроосмотический эффект, приводящий к миграции воды и растворённых газов через разделительную мембрану, что снижает чистоту продуктов реакции.

Во-вторых, основной негативный процесс — это реакция рекомбинации воды ($2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$), в которой расходуются произведённые газы, снижающая фарадеевскую эффективность электроли-

зёра. Предполагается, что реакция рекомбинации эффективно происходит только в катодном канале.

Для анода и катода задаются уравнения материального и энергетического баланса, представляющие расширенный вариант уравнений (7), (8) и (10), (11) модели № 1.

Например, уравнение молярного баланса для катода:

$$\begin{aligned} \dot{F}_{\text{in}}^{\text{cath}} - \dot{F}_{\text{out}}^{\text{cath}} - \dot{N}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{cons}} + \dot{N}_{\text{H}_2}^{\text{gen}} - \dot{N}_{\text{H}_2}^{\text{cr}} + \\ + \dot{N}_{\text{O}_2}^{\text{cr}} - \dot{N}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{cr}} - 0,5\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{rec}} = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\dot{F}_{\text{in}}^{\text{cath}}$ и $\dot{F}_{\text{out}}^{\text{cath}}$ — входящий и выходящий катодные молярные потоки; $\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{cons}}$ и $\dot{N}_{\text{H}_2}^{\text{gen}}$ — молярные потоки потребляемой на катоде воды и произведённого на катоде водорода; $\dot{N}_{\text{H}_2}^{\text{cr}}$, $\dot{N}_{\text{O}_2}^{\text{cr}}$ и $\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{cr}}$ — молярные потоки кислорода, водорода и воды, проходящие через разделительную мембрану; $\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{rec}}$ — молярный поток реакции рекомбинации воды.

Молярный поток воды:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{cr}} = n_{\text{osmo.drag}} \dot{N}_{\text{H}_2}^{\text{gen}}, \quad (15)$$

где $n_{\text{osmo.drag}}$ — коэффициент осмотического сопротивления, типичное значение $n_{\text{osmo.drag}} = 6,0$.

Молярный поток реакции рекомбинации воды:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{rec}} = k_{\text{rec}} z_{\text{H}_2}^{\text{cath,in}} z_{\text{O}_2}^{\text{an,in}} V_{\text{chan}}^{\text{cath}}, \quad (16)$$

где k_{rec} — постоянная скорости реакции рекомбинации, значение которой принято 2,7778 кмоль/(ч·м³); $z_{\text{H}_2, \text{in}}^{\text{cath}}$ и $z_{\text{O}_2, \text{in}}^{\text{an}}$ — молярные доли H_2 и O_2 в потоках, соответственно, $\dot{F}_{\text{in}}^{\text{cath}}$ и $\dot{F}_{\text{in}}^{\text{an}}$; $V_{\text{chan}}^{\text{cath}}$ — объём катодного канала.

Вычисление потоков генерации и потребления основано на уравнении Фарадея и начинается с величины $N_{H_2}^{gen}$ аналогично (8), но фарадеевская эффективность напрямую не входит в формулу.

Энергетический баланс выражается уравнением для энтальпии:

$$\dot{F}_{\text{in}}^{\text{cath}} H_{\text{in}}^{\text{cath}} - \dot{F}_{\text{out}}^{\text{cath}} H_{\text{out}}^{\text{cath}} + \dot{F}_{\text{in}}^{\text{an}} H_{\text{in}}^{\text{an}} - \dot{F}_{\text{out}}^{\text{an}} H_{\text{out}}^{\text{an}} + W + Q = 0, \quad (17)$$

где $H_{\text{in}}^{\text{cath}}$, $H_{\text{out}}^{\text{cath}}$, $H_{\text{in}}^{\text{an}}$ и $H_{\text{out}}^{\text{an}}$ — молярные энтальпии входящего и выходящего потоков для катода и анода; W — электрическая мощность ячейки; Q — тепловая нагрузка.

Напряжение ячейки U_{cell} рассчитывается по формуле (3) из уравнений Нернста и Батлера — Фольмера, причём напряжение разомкнутой цепи U_{oc} уменьшается при увеличении температуры за счёт вклада энтропии и возрастает по мере роста давления за счёт свободной энергии образующихся газов [11].

Структура модели №2 установки ЭВГ показана на рис. 2. Основные отличия от предыдущей модели, кроме блока STACK, связаны с системами охлаждения электролита и дополнительной очистки водорода. Контур водяного охлаждения (синие линии) включает два противоточных теплообменника IC-R1 и IC-R2, понижающих температуру потоков R-1 и R-2 до заданной температуры +72°C. Используются встроенные функции Aspen Plus, регулирующие массовый расход охлаждающей воды $\dot{m}_{\text{H}_2\text{O-cool}} = 300 \text{ кг/ч}$ и его распределение между двумя теплообменниками с помощью делителя потока B18.

После теплообменников потоки H_2O-1 и H_2O-2 соединяются смесителем B5 в поток H_2O-HOT , который нуждается в охлаждении. Воздушный охладитель с вентилятором FAN регулируемой мощности W_{fan} понижает температуру воды T_{H_2O-hot} до $T_{H_2O-cool}$. Потери давления воды компенсируются насосом PUMP-COOL, который направляет поток COOL-IN через делитель B18 в теплообменники.

В отличие от модели №1, поток $H_2O-FEED$ насосом PUMP- H_2O (давление на выходе $p_4 = 7$ бар) подаётся в смеситель B9 для соединения с потоками раствора электролита S-1 и S-2 во входящий поток STACK-IN. Параметры потока STACK-IN те же, что и модели №1, но на катод и анод блока STACK подаются отдельные потоки CATH-IN и AN-IN в заданном отношении $\dot{n}_{cath-in}/\dot{n}_{an-in} = 1/1$. Блок STACK имеет расширенные геометрические настройки для электродов, каналов электролита и мембраны, основные из которых приведены в табл. 4.

Входные параметры модели №1 используются также и в модели №2, что позволяет сравнить их функциональные характеристики, но вместо плотности тока ячейки i задаётся электрическая мощность батареи, равная мощности в модели №1, $W_{stack} = 9683$ Вт.

В модель включены также дополнительные модули для очистки водорода от примесей. Стехиометрический реактор при постоянных температуре и давлении CATCON предназначен для преобразования O_2 в потоке H_2-PROD в H_2O со степенью превращения 1,0. На последнем этапе для получения чистого водорода используется сепаратор компонентов PSA в котором газ H_2 (поток H_2-PURE , $T = +25^\circ C$) отделяется от конденсата H_2O .

В расчётах использовался базовый метод свойств ENRTL-RK для описания поведения чистых компонентов и смеси в растворе электролита. Метод Генри использовался для газов O_2 и H_2 . Равновесие между H_2O , OH^- и H_3O^+ и диссоциация КОН на OH^- и K^+ указаны для определения химического состава раствора. Результаты моделирования сведены в табл. 5.

Сравнение функциональных характеристик моделей №2 и №1 показывает, что при равной мощности W_{stack} напряжение ячейки U_{cell} меньше, чем в модели №1 (1,989 против 2,017 В), а сила тока I больше (405,755 против 400 А). Однако производительность установок практически совпадает (0,9084 против 0,9089 кмоль/ч H_2). В то же время фарадеевская эффективность выше в модели №2, а НТО меньше (0,994 и 0,00482 против 0,947 и 0,00805, соответственно).

Геометрические параметры ячейки (модель №2)

табл. 4

Активная область, м ²	Ширина канала, м	Длина канала, м	Пористость электродов	Толщина канала, м	Толщина мембраны, м	Пористость мембраны
0,1	0,1	1,0	0,3	0,02	0,0005	0,42

Функциональные характеристики установки (модель №2)

табл. 5

Напряжение ячейки U_{cell} , В	Фарадеевская эффективность η_F	НТО	Электрическая мощность W_{stack} , Вт	Скорость производства H_2 , кмоль/ч
1,989	0,994	0,00482	9683	0,9084

Параметры основных потоков модели №2 показаны в табл. 6. Видно, что на выходе блока STACK вычисленное средствами Aspen Plus давление выше, чем заданный параметр в модели №1 (6,87 бар против 6,7 бар). Также надо отметить, что, несмотря на заданное равенство входящих анодного AN-IN и катодного CATH-IN потоков электролита, массовый расход выходящего потока AN-OUT (463,635 кг/ч) на 6% больше, чем CATH-OUT (437,817 кг/ч). Это объясняется учётом вклада в материальный баланс воды, произведённой на аноде и потребляемой на катоде. В модели №1 эта разница меньше 0,3% (450,642 против 449,374 кг/ч).

Энергетическая эффективность батареи рассчитывается средствами Aspen Plus: для данной модели $\eta_{HHV} = 0,7448$, $\eta_{LHV} = 0,6302$.

Работа AWE-установки требует охлаждения потоков электролита перед входом в батарею, то есть рассеивания избыточного тепла. По формуле (10): избыточная теплота $Q_{gen} = 2478,35$ Вт, тепловые потери батареи $Q_{loss} = 247,84$ Вт, а тепловая нагрузка $Q = W_{stack} - Q_{loss} = 9435,16$ Вт. В модели №2 основная часть избыточного тепла передаётся охлаждающей воде в теплообменниках IC-R1 (1068,18 Вт) и IC-R2 (1133,46 Вт) и рассеивается воздушным охладителем B1 с вентилятором FAN (2206,98 Вт). Последний

обеспечивает воздушный поток 20 тыс. кг/ч со скоростью 5,86 м/с. Потребляемая электрическая мощность рассчитывается средствами Aspen Plus: $W_{fan} = 548,87$ Вт.

В модели №2 суммарная электрическая мощность установки W_{net} складывается из электрической мощности батареи, используемых в системе насосов и вентилятора. Эти величины приводятся в табл. 7. Видно, что, хотя основной вклад в потребляемую электрическую мощность установки по-прежнему даёт батарея, W_{fan} вносит 5,35%, и энергоэффективность системы в целом немного меньше: $\eta_{HHV} = 0,6963$, $\eta_{LHV} = 0,5891$.

Сравнение результатов моделирования показывает, что основанная на физических принципах модель №2, имеет преимущество перед эмпирической моделью №1 в понимании вклада в работу установки ЭВГ её отдельных компонентов. Таким образом, она может быть полезна в качестве руководства для повышения производительности в целом за счёт улучшения функциональных характеристик AWE-ячейки (изменения геометрии и свойств электродов), теплообменников и насосов.

Для дальнейшего анализа термодинамического поведения системы и оптимизации эффективности нужно провести исследование влияния входных параметров на её функциональные характеристики.

Параметры потоков установки (модель №2)

табл. 6

Потоки/параметры	STACK IN	CATH-OUT	AN-OUT	R-1	R-2	H_2-PURE	O_2-OUT
Температура, °C	71,97	74,87	74,87	74,912	74,912	25	25
Давление, бар	7,0	6,87	6,87	7,5	7,5	6,87	6,87
Массовый расход, кг/ч	901,45	437,817	463,635	437,587	462,164	0,1816	1,4497
Молярная доля пара/жидкости	0/1	0,0051/0,9949	0,0024/0,9976	0/1	0/1	1/0	1/0
Молярный поток H_2O , кмоль/ч	32,458	15,5028	16,8649	15,5001	16,8634	0	$2,2226 \cdot 10^{-4}$
Молярный поток H_2 , кмоль/ч	$4,1711 \cdot 10^{-4}$	0,09052	$2,22019 \cdot 10^{-4}$	$4,1493 \cdot 10^{-4}$	$2,1912 \cdot 10^{-6}$	0,09011	$2,1799 \cdot 10^{-4}$
Молярный поток O_2 , кмоль/ч	$5,0285 \cdot 10^{-4}$	$8,04368 \cdot 10^{-9}$	0,04566	$4,1107 \cdot 10^{-11}$	$5,0258 \cdot 10^{-4}$	0	0,0452
Молярный поток КОН, кмоль/ч	5,6446	2,8223	2,8223	2,8223	2,8223	0	0

Электрические мощности модулей установки (модель №2)

табл. 7

Модули	W_{stack}	$W_{pump-R1}$	$W_{pump-R2}$	W_{pump-H_2O}	$W_{pump-cool}$	W_{fan}	W_{net}
Эл. мощность, Вт	9683	19,595	20,998	0,963	8,561	548,87	10273,42

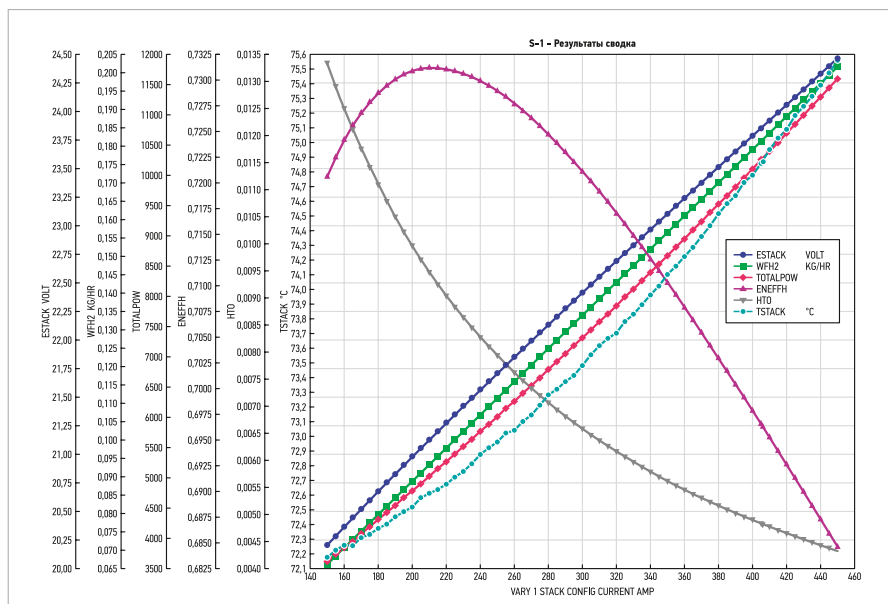


Рис. 3. Зависимости функциональных характеристик установки от силы тока (модель №2)

На рис. 3 представлены результаты параметрического исследования модели №2 при изменении силы тока I в ячейке от 150 до 450 А с шагом 5 А. При этом некоторые функциональные характеристики растут почти линейно: напряжение U_{stack} — от 20,207 до 24,461 В (синяя линия), производство водорода $\dot{m}_{H_2-prod}$ — от 0,062 до 0,202 кг/ч (зелёная линия), общая мощность системы W_{net} — от 3620,7 до 11 597,8 Вт (красная линия). В то же время энергоэффективность η_{HNV} и НТО изменяются нелинейно: первая растёт от 0,721 до наибольшего значения 0,731 при $I = 210$ А и затем быстро уменьшается до 0,685 (розовая линия), а вторая убывает от 0,0133 до 0,00433 (серая линия). Температура батареи T изменяется нелинейно и скачками растёт от +72,18 до +75,56 °C (салатовая линия). Полученные данные в целом близки к известным результатам

эмпирической модели [7], что подтверждает корректность исследуемой физической модели установки ЭВГ.

Указанные разнонаправленные тенденции и взаимная корреляция функциональных характеристик не позволяют оптимизировать процесс. Так максимум энергоэффективности $\eta_{HNV} = 0,731$ достигается при слишком малой производительности $\dot{m}_{H_2-prod} = 0,093$ кг/ч, а рост последней сопровождается ростом температуры, потребляемой мощности и уменьшением энергоэффективности. Необходимо ввести дополнительные ограничения, например, зафиксировать проектную мощность установки $W_{net} = 10$ кВт и найти оптимальную силу тока для максимума энергоэффективности. Это можно сделать с помощью утилиты Aspen Plus «оптимизация»: при $I_{opt} = 396$ А $\dot{m}_{H_2-prod} = 0,178$ кг/ч, $\eta_{HNV} = 0,698$.

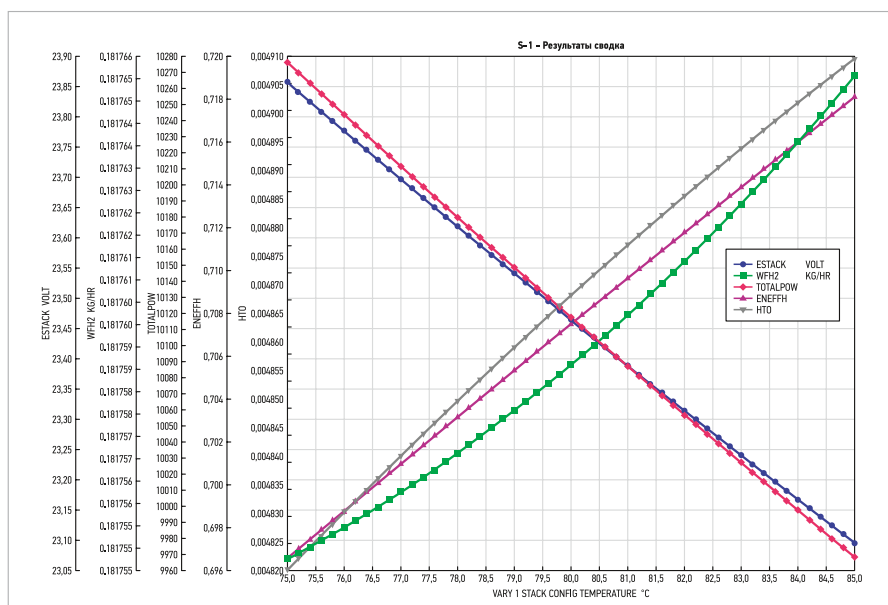


Рис. 4. Зависимости функциональных характеристик установки от температуры (модель №2)

На рис. 4 даны результаты параметрического исследования модели №2 при изменении температуры батареи T_{stack} от +75 до +85 °C с шагом 0,2 °C при постоянной силе тока $I = 406$ А. Видно, что при увеличении температуры убывают напряжение U_{stack} — от 23,856 до 23,095 В (синяя линия) и общая мощность системы W_{net} — от 10 276 до 9968,3 Вт (красная линия), а энергоэффективность η_{HNV} возрастает от 0,6966 до 0,7181 (розовая линия). В то же время НТО и производство водорода $\dot{m}_{H_2-prod}$ изменяются незначительно: от 0,00482 до 0,00491 (серая линия) и от 0,18176 до 0,18177 кг/ч (зелёная линия).

Следовательно, если необходимо минимизировать энергетические затраты при наибольшей энергоэффективности производства H_2 , нужно выбрать верхнюю границу диапазона рабочих температур. Аналогичный вывод по оптимизации системы сделан в [7], а в [2] температуры +80...+90 °C указаны как основа для краткосрочного развития AWE-технологии с дальнейшим ростом выше +90 °C.

Модель Aspen Plus, основанная на стационарных уравнениях [11], способна прогнозировать производительность установки ЭВГ при различных нагрузках (потребляемой мощности) в устойчивых условиях эксплуатации

Таким образом, эта модель Aspen Plus, основанная на стационарных уравнениях [11], способна прогнозировать производительность установки ЭВГ при различных нагрузках (потребляемой мощности) в устойчивых условиях эксплуатации. Чтобы оценить работу системы в переходные периоды, на основе стационарной модели можно построить динамическую модель, используя интерфейс Aspen Dynamics, как предлагается в [7].

Однако динамические процессы, происходящие в ячейке электролизёра, изначально могут быть описаны дифференциальными уравнениями электрохимической модели электролиза, как например в [12]. Предложены и другие динамические модели, например, термальная, основанная на энергетическом балансе и динамическая модель чистоты газа [5, 13]. Подобные математические модели обычно реализуются средствами MATLAB и в среде динамического моделирования Simulink, например, [14]. Возможность интеграции их с Aspen Plus нуждается в дополнительной разработке.

Заключение

1. Целью моделирования установки ЭВГ был анализ производительности и оптимизация полной системы производства водорода, включающей, кроме электролизёра, систему подачи раствора электролита, систему отделения газов от жидкости, теплообменники, насосы для циркуляции электролита и контур охлаждения, средствами ПО для математического моделирования и оптимизации процессов химической промышленности Aspen Plus.

2. Преимущество Aspen Plus перед другим ПО в том, что моделируется термодинамика и кинетика электрохимических процессов, контролируется материальный и энергетический баланс отдельных узлов и установки в целом, учитывается распределение реагентов и продуктов в системе, проводятся параметрические исследования, анализ чувствительности и оптимизация.

Преимущество Aspen Plus перед другим ПО в том, что моделируется термодинамика и кинетика электрохимических процессов, контролируется материальный и энергетический баланс отдельных узлов и установки в целом

3. Электролизёр в модель установки ЭВГ можно включить разными способами: как пользовательский блок на основе заданных эмпирических уравнений, комбинацию типовых блоков из библиотеки оборудования или модуль электролизёра в Aspen Plus версии 14. В последнем случае используется физическая модель электролиза воды. В статье сравниваются эти варианты, использованные в моделях № 1 и № 2 установки ЭВГ.

4. Преимущество физической модели электролизёра — в большей точности описания электрохимических процессов, гибкости настроек и применимости к широкому классу моделируемых устройств. Результаты модели № 2 уточняют и дополняют результаты модели № 1, в частности фарадеевская эффективность выше в модели № 2, а НТО и энергоэффективность системы ниже. Кроме того, выполнить параметрическое исследование и оптимизацию функциональных характеристик модели № 2 проще.

5. Параметрические исследования модели № 2 подтвердили, что хотя рост силы тока увеличивает скорость электрохимической реакции и повышает выход водорода, энергоэффективность, начиная



с некоторого момента, снижается. Оптимальным при данных параметрах является значение $I_{\text{opt}} = 396$ А. Повышение рабочей температуры снижает омическое сопротивление, ускоряет кинетику реакций и увеличивает выход водорода, причём растёт и энергоэффективность, следовательно, оптимальной является верхняя граница заданного диапазона температур $T_{\text{opt}} = +85^\circ\text{C}$.

6. Предложенная стационарная модель установки ЭВГ в Aspen Plus способна прогнозировать её производительность в устойчивых условиях эксплуатации. Чтобы моделировать работу системы в переходные периоды или при интеграции с ВИЭ переменной мощности, например, солнечной батареей, нужно использовать Aspen Dynamics и динамическую модель ячейки электролизёра. ●

- Li W., Tian H., Ma L., Wang Y., Liu X., Gao X. Low-temperature water electrolysis: Fundamentals, progress, and new strategies. *Materials Advances*. 2022. Vol. 3. Pp. 5598–5644.
- Shehzad B., Latif Sh., Wahab A., Shafique M.U., Ch. A.R. Progress and challenges in alkaline water electrolysis for sustainable hydrogen production. *Discover Chemistry*. 2026. Vol. 3. No. 118.38 p.
- Сучилин В.А., Кочетков А.С., Губанов Н.Н. Моделирование и исследование в ПО COMSOL Multiphysics электрохимического метода получения водорода для коммунального и бытового применения // *Журнал СОК*. 2024. №6. С. 64–69.
- Сучилин В.А., Кочетков А.С., Губанов Н.Н., Кочеткова Я.А. Моделирование и исследование в ПО COMSOL Multiphysics влияния ультразвука на эффективность электрохимического метода получения водорода // *Журнал СОК*. 2025. №6. С. 46–55.
- Olivier P., Bourasseau C., Bouamama P.B. Low-temperature electrolysis system modelling: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2017. Vol. 78. Pp. 280–300.
- Sánchez M., Amores E., Rodríguez L., Clemente-Jul C. Semiempirical model and experimental validation for the performance evaluation of a 15 kW alkaline water electrolyzer. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2018. Vol. 43. Pp. 20332–20345.
- Sánchez M., Amores E., Abad D., Rodríguez L., Clemente-Jul C. Aspen Plus model of an alkaline electrolysis system for hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2020. Vol. 45. Pp. 3916–3929.
- Микитова К.К., Василенко В.А., Кольцова Э.М. Разработка компьютерной модели технологической схемы получения водорода методом электролиза // *Успехи в химии и химической технологии*, 2022. Т. XXXVI. №11. С. 18–20.
- Pandey A.K., Patel N., Singh A. Simulation and analysis of an alkaline electrolysis system for hydrogen production using Aspen Plus model. *RERIC Proceedings*. 2025. Issue 1. Pp. 11–18.
- Mohd Nazir N.M., Zaine S.N.A. Optimization of alkaline electrolysis system for hydrogen production: A simulation study. *Materials Research Proceedings*. 2025. Vol. 53. Pp. 482–497.
- Abdin Z., Webb C.J., Gray E.M.A. Modelling and simulation of an alkaline electrolyser cell. *Energy*. 2017. Vol. 138. Pp. 316–331.
- David M., Alvarez H., Ocampo-Martinez C., Sánchez-Peña R. Dynamic modelling of alkaline self-pressurized electrolyzers: A phenomenological-based semiphenomenological approach. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2020. Vol. 45. Pp. 22394–22407.
- Hu S., Guo B., Ding Sh., Yang F., Dang Ji., Liu B., Gu Ju., Ma Ju., Ouyang M. A comprehensive review of alkaline water electrolysis mathematical modeling. *Applied Energy*. 2022. Vol. 327.
- Миронов Е.А. Моделирование и управление процессами производства водорода на основе электролиза // *Вестник СамГТУ. Технические науки*, 2023. Т. 31. №2. С. 70–84.

References — see page 80.

Modeling and research in Aspen Plus software of a plant for the electrochemical method of hydrogen production. Pp. 68–76.

Vladimir A. Suchilin, Doctor of Technical Sciences, Professor; **Aleksej S. Kochetkov**, senior lecturer; **Nikolaj N. Gubanov**, senior lecturer, Russian State University of Tourism and Service (RGUTIS)

1. W. Li, H. Tian, L. Ma, Y. Wang, X. Liu, X. Gao. Low-temperature water electrolysis: Fundamentals, progress, and new strategies. *Materials Advances*. 2022. Vol. 3. Pp. 5598–5644.
2. B. Shehzad, Sh. Latif, A. Wahab, M.U. Shafique, A.R. Ch. Progress and challenges in alkaline water electrolysis for sustainable hydrogen production. *Discover Chemistry*. 2026. Vol. 3. No. 118. 38 p.
3. [V.A. Suchilin, A.S. Kochetkov, N.N. Gubanov. Modelirovanie i issledovanie v PO COMSOL Multiphysics elektrokhimicheskogo metoda polucheniya vodoroda dlja kommunal'nogo i bytovogo primeneniya \[Modeling and research in COMSOL Multiphysics electrochemical method of hydrogen production for communal and domestic usage\]. Zhurnal Santechnika, otoplenie, konditsionirovanie \(SOK\) \[Journal of Plumbing, Heating, Ventilation\]. 2024. No. 6. Pp. 64–69. \[In Russian\]](#)
4. [V.A. Suchilin, A.S. Kochetkov, N.N. Gubanov, Ja.A. Kochetkova. Modelirovanie i issledovanie v PO COMSOL Multiphysics vlijaniya ul'trazvuka na jeffektivnost' jelektrikhimicheskogo metoda polucheniya vodoroda \[Modeling and research in COMSOL Multiphysics influence of ultrasound on the efficiency of the electrochemical method of hydrogen production\]. Zhurnal Santechnika, otoplenie, konditsionirovanie \(SOK\) \[Journal of Plumbing, Heating, Ventilation\]. 2025. No. 6. Pp. 46–55. \[In Russian\]](#)
5. P. Olivier, C. Bourasseau, P.B. Bouamama. Low-temperature electrolysis system modelling: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2017. Vol. 78. Pp. 280–300.
6. M. Sánchez, E. Amores, L. Rodríguez, C. Clemente-Jul. Semiempirical model and experimental validation for the performance evaluation of a 15 kW alkaline water electrolyzer. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2018. Vol. 43. Pp. 20332–20345.
7. M. Sánchez, E. Amores, D. Abad, L. Rodríguez, C. Clemente-Jul. Aspen Plus model of an alkaline electrolysis system for hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2020. Vol. 45. Pp. 3916–3929.
8. K.K. Mikitova, V.A. Vasilenko, E.M. Koltsova. *Razrabotka komp'yuternoj modeli tekhnologicheskoy skhemy polucheniya vodoroda metodom elektroliza* [Development of a Computer Model of a Flow Chart for Hydrogen Production by Electrolysis]. *Uspekhi v khimii i khimicheskoy tekhnologii* ["Advances in Chemistry and Chemical Technology" Magazine]. 2022. Vol. XXXVI. No. 11. Pp. 18–20. [In Russian]
9. A.K. Pandey, N. Patel, A. Singh. Simulation and analysis of an alkaline electrolysis system for hydrogen production using Aspen Plus model. *RERIC Proceedings*. 2025. Issue 1. Pp. 11–18.
10. N.M. Mohd Nazir, S.N.A. Zaine. Optimization of alkaline electrolysis system for hydrogen production: A simulation study. *Materials Research Proceedings*. 2025. Vol. 53. Pp. 482–497.
11. Z. Abdin, C.J. Webb, E.M.A. Gray. Modelling and simulation of an alkaline electrolyser cell. *Energy*. 2017. Vol. 138. Pp. 316–331.
12. M. David, H. Alvarez, C. Ocampo-Martinez, R. Sánchez-Peña. Dynamic modelling of alkaline self-pressurized electrolyzers: A phenomenological-based semiphenomenological approach. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2020. Vol. 45. Pp. 22394–22407.
13. S. Hu, B. Guo, Sh. Ding, F. Yang, Ji. Dang, B. Liu, Ju. Gu, Ju. Ma, M. Ouyang. A comprehensive review of alkaline water electrolysis mathematical modeling. *Applied Energy*. 2022. Vol. 327.
14. [E.A. Mironov. Modelirovanie i upravlenie protsessami proizvodstva vodoroda na osnove elektroliza \[Modeling and control of hydrogen production processes based on electrolysis\]. Vestnik SamGTU. Tekhnicheskie nauki \[Bulletin of Samara State Technical University. Series: Technical sciences\]. 2023. Vol. 31. No. 2. Pp. 70–84. \[In Russian\]](#)