

УДК 51-74  
МРНТИ 27.35.37; 29.03.77

<https://doi.org/10.55452/1998-6688-2023-20-4-72-84>

<sup>1,2\*</sup>МЕРЕКЕ А.Л., <sup>2</sup>ЧЕКИЕВА А.С., <sup>2</sup>УМИРЗАКОВ А.Г., <sup>1</sup>ЕЛЕМЕСОВ К.К.,  
<sup>3</sup>АБДУГАЛИМОВ А.Ш., <sup>2</sup>ФАСХУТДИНОВ М.Ф., <sup>1,2,4</sup>СЕРИККАНОВ А.С.

<sup>1</sup>Satbaev University, 050032, г. Алматы, Казахстан

<sup>2</sup>Физико-технический институт, г. Алматы 050032, Казахстан

<sup>3</sup>Евразийский национальный университет, г. Астана 010000, Казахстан

<sup>4</sup>Национальная академия наук Республики Казахстан, г. Алматы 050032, Казахстан

## ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ВАНАДИЕВЫХ БАТАРЕЯХ

### Аннотация

Постановка проблемы: в современном мире разработка эффективных источников энергии становится все более важной проблемой. Одним из перспективных направлений в области электрохимических источников энергии являются ванадиевые батареи. Эти батареи основаны на электрохимических процессах, происходящих с участием ванадия в различных окислительных состояниях. Исследование и моделирование электрохимических процессов в ванадиевых батареях имеют важное значение для оптимизации их работы и повышения эффективности использования энергии. Исследование и моделирование электрохимических процессов в ванадиевых батареях играют ключевую роль в разработке эффективных источников энергии. Понимание основных принципов работы ванадиевых батарей, а также разработка точных математических моделей и их численное моделирование позволяют оптимизировать процессы, связанные с хранением и высвобождением энергии. Дальнейшие исследования и разработки в этой области могут привести к созданию более эффективных и устойчивых источников энергии, способных удовлетворить потребности современного общества в устойчивой энергетике. Цель: моделирование процессов ванадиевых редокс проточных батарей (ВРПБ) путем варьирования потока электролита для оптимизации электрохимических процессов, происходящих в граничных условиях мембрана – электрод. Результаты: данное исследование проводит моделирование в пакете программного обеспечения COMSOL Multiphysics электрохимические характеристики ВРПБ в зависимости от потока электролита. Были проведены испытания, в ходе которых были исследованы параметры скорости потока, чтобы оценить их влияние на распределение потенциала и плотности тока. Практическая значимость: энергия в ВРПБ хранится в жидком электролите, который прокачивается через ячейку. Электролит хранится во внешних резервуарах, а не в пористых электродах, как в обычных батареях. Результаты способствуют повышению эффективного хранения энергии, выравниванию нагрузки и сглаживанию пиковой мощности ВРПБ. Построение моделей позволяет предсказать влияние на эффективность перемешивания электролитов, учитывая гидродинамические условия внутри батареи, чтобы определить, как они влияют на перенос ионов ванадия с учетом скорости потока электролита.

**Ключевые слова:** моделирование, ванадиевые редокс проточные батареи, электролит, расход, поляризация, плотность тока.

### Введение

Еще каких-то 15 лет назад в области аккумуляторов не возникало проблем: мобильные телефоны требовали зарядки всего раз в неделю, для небольших переносных устройств хватало недорогих батарей, а электромобилей для массового использования вообще не существовало. Но с появлением новых мобильных устройств ситуация с источниками питания изменилась. На данный момент обладатели мощных смартфонов счастливы, если заряда аккумулятора хватает на сутки [1, 2]. А мечты о запасе хода электромобиля привели к уровню аналогичного бензинового двигателя. Производители практически исчерпали все возможности для улучшения аккумуляторов, но все же находятся в поиске новых материалов и технологий. Что позволяет мобильным устройствам развиваться стремительными темпами, но технологии разработки источников питания не успевают за ними [3–5].

Одним из решений являются ВРПБ, способные накапливать большие объемы энергии, сохраняя ее на длительный срок и высвобождая по необходимости. Их принцип работы очень

похож на тот, что используется в обычных аккумуляторах: есть анод и катод, между которыми происходит реакция окисления и восстановления с высвобождением электронов [6, 7].

Отличительной особенностью от традиционных аккумуляторов является то, что эти реакции происходят в жидких электролитах, а не в твердых электродах. Это приносит ряд преимуществ по сравнению с обычными аккумуляторами. Прежде всего, такие устройства способны сохранять энергию в течение длительного времени практически без потерь, в то время как обычные аккумуляторы сталкиваются с потерями из-за внутренних процессов, приводящих к саморазряду [8–11].

Энергию в проточных окислительно-восстановительных батареях сохраняют в жидких электролитах, которые прокачиваются через элемент. Эти батареи хранятся во внешних резервуарах, а не в пористых электродах, как в обычных батареях [12]. Такой подход предлагает инновационные решения для доступного хранения энергии, выравнивания нагрузки и сглаживания пиковой мощности. В ВРПБ используются два разных раствора электролита: один для отрицательной стороны ячейки и другой для положительной стороны [13]. Оба раствора в ячейке разделяются ионообменной мембраной, которая обеспечивает транспорт ионов, в основном протонов, между двумя частями ячейки. Схема работы ВРПБ показана на рисунке 1 [15].

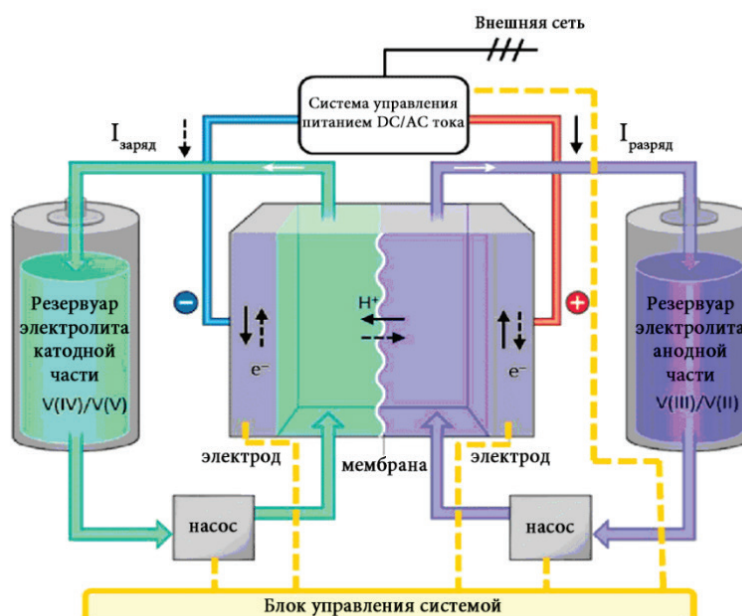


Рисунок 1 – Схематическое изображение системы ВРПБ [15]

### Литературный обзор

Современные научные работы в области ВРПБ и наноматериалов способствуют качественному изучению свойств наноматериалов, что способствует разработкам перспективных решений и позволяет достигнуть более эффективных и устойчивых решений в хранении энергии [11–13, 16–22]. Все эти работы не только расширяют знания в области наноматериалов, но также раскрывают потенциальные пути для повышения эффективности и стабильности ВРПБ. Однако вследствие дороговизны обширных тестовых систем для исследований зачастую приходится исследователям работать с небольшими мембрано-электродными ячейками либо маленькими стеками с площадью активной области не более  $25 \text{ см}^2$ , что мешает объективному исследованию ряда факторов, влияющих на работу ВРПБ.

В работе [17] для разработки и оптимизации систем ВРПБ для различных состояний нагрузки, маршрутов распределения, расходов или качеств материалов была разработана вычислительная гидродинамическая модель в качестве альтернативного инструмента. На основе одномерной модели в работе Vivona и др. [18] были проанализированы лимитирующие про-

цессы в кинетике и массопереносе. Большой вклад в исследования внесены командой Knehr и др. [19], где рассматривались три фундаментальных механизма, а именно диффузия, конвекция и миграция. You и др. [20] исследовали работу ячейки ВРПБ при уменьшении толщины электродов. Ozgoli и др. [21] использовали двумерную модель для изучения гидродинамических и электрохимических характеристик, чтобы оценить распределение ванадия при различных параметрах электродов и мембран. Работа Emmel и др. [22] фокусировалась на электрохимический активной области и исследовала поток электролита через электрод, чтобы определить наиболее активные области, где были зафиксированы самые высокие значения скорости.

Моделирование играет ключевую роль в целях контроля внутри ВРПБ, что позволяет описывать реальное поведение системы, предоставляя информацию и знания о работе системы. Более того, эти модели очень важны для анализа и улучшения систем управления, контроля и средств оценки параметров. Все это улучшит их производительность и сделает их еще более безопасными и надежными устройствами.

### Основные положения. Материалы и методы

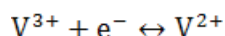
Модель построения включает две части ячейки с разным составом ионов и электродными реакциями, разделенные ионообменной мембраной.

Виды жидких электролитов и электродные реакции.

Отрицательный электролит содержит следующие ионы:

- ♦  $H^+$
- ♦  $HSO_4^-$
- ♦  $SO_4^{2-}$
- ♦  $V^{3+}$
- ♦  $V_2^{3+}$

Отрицательная электродная реакция:



Равновесный потенциал этой реакции рассчитывается по уравнению Нернста по формуле

$$E_{eq,neg} = E_{0,neg} + \frac{RT}{F} \ln\left(\frac{a_{V^{3+}}}{a_{V^{2+}}}\right)$$

где  $E_{0,neg}$  представляет собой опорный потенциал электродной реакции в единицах СИ (вольт),  $a_i$  обозначает химическую активность частицы  $i$  (безразмерная величина),  $R$  – это молярная газовая постоянная (8,31 Дж/(моль·К)),  $T$  – температура ячейки в единицах СИ (кельвины), а  $F$  – постоянная Фарадея (96 485 кулонов в секунду на моль).

Для реакции с отрицательным электродом используется кинетическое выражение Батлера-Фольмера в соответствии с:

$$i_{neg} = A i_{0,neg} \left( \exp\left(\left(\frac{(1 - a_{neg}) F \eta_{neg}}{RT}\right)\right) - \exp\left(\left(\frac{(-a_{neg}) F \eta_{neg}}{RT}\right)\right) \right)$$

$$i_{neg} = F k_{neg} (a_{V^{2+}})^{1-a_{neg}} (a_{V^{3+}})^{a_{neg}}$$

где  $A$  обозначает удельную поверхность пористого электрода в единицах СИ ( $m^2/m^3$ ),  $\alpha_{neg}$  безразмерный коэффициент передачи, а  $k_{neg}$  представляет собой константы скорости. Перенапряжение  $\eta_{neg}$  (в вольтах) вычисляется как

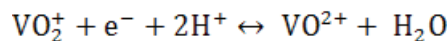
$$\eta = \phi_s - \phi_l - E_{eq}$$

где  $\phi_s$  – электрический потенциал твердой фазы электрода и  $\phi_l$  – потенциал электролита.

Положительный электролит содержит следующие ионы:

- ♦  $H^+$
- ♦  $HSO_4^-$
- ♦  $SO_4^{2-}$
- ♦  $VO^{2+}$
- ♦  $VO_2^+$

Катодная реакция:



с равновесным потенциалом, рассчитанным по формуле:

$$E_{eq,pos} = E_{0,pos} + \frac{RT}{F} \ln \left( \frac{a_{VO_2^+} (a_{H^+})^2}{a_{VO^{2+}}} \right)$$

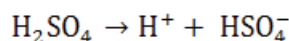
$$i_{pos} = A i_{0,pos} \left( \exp \left( \left( \frac{(1 - a_{pos}) F \eta_{pos}}{RT} \right) \right) - \exp \left( \frac{(-a_{pos}) F \eta_{pos}}{RT} \right) \right)$$

$$i_{0,pos} = F k_{pos} (a_{VO_2^+})^{1-a_{pos}} (a_{VO^{2+}})^{a_{pos}}$$

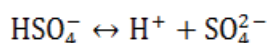
Ионообменная мембрана обеспечивает транспорт следующих ионов:

- ♦  $H^+$
- ♦  $HSO_4^-$
- ♦  $SO_4^{2-}$
- ♦  $VO^{2+}$
- ♦  $VO_2^+$
- ♦  $V^{3+}$
- ♦  $V^{2+}$

Считается, что процесс диссоциации серной кислоты в первой стадии завершен.



второй шаг:



Рассматривается с использованием понятия источника диссоциации,  $r_d$ :

$$r_d = k_d \left( \frac{a_{H^+} - a_{HSO_4^-}}{a_{H^+} + a_{HSO_4^-}} - \beta \right)$$

где  $k_d$  – параметр скорости,  $\beta$  – степень диссоциации.

Уравнения переноса ионов

В этой модели уравнения Нернста–Планка используются для описания потока ионов и переноса заряда, уравнение описывает молярный поток частиц  $i$ ,  $N_i$ , обусловленный диффузией, миграция и конвекция:

$$N_i = -D_i \nabla c_i - z_i u_{mob,i} F c_i \nabla \phi_1 + c_i u$$

Первый элемент – это диффузионный поток, где  $D_i$  представляет собой коэффициент диффузии в единицах СИ ( $m^2/s$ ). Термин «миграция» включает в себя зарядовое число  $z_i$ , подвижность частиц  $u_{mob,i}$  и электролитный потенциал ( $\phi_1$ ). В контексте конвекции  $u$  представляет собой векторную скорость жидкости ( $m/s$ ).

Плотность тока электролита рассчитывается с использованием закона Фарадея путем суммирования вкладов молярных потоков, умноженных на видовые заряды, с учетом того, что конвективный член исчезает из-за условий электронейтральности:

$$i_l = F \sum_{i=1}^n z_i (-D_i \nabla c_i - z_i u_{mob,i} F c_i \nabla \phi_1) \quad (1)$$

Далее применяется закон сохранения заряда для определения потенциала электролита.

$$\nabla_{i_1} = F \sum_{i=1}^n z_i R_i$$

где члены  $R_i$  представляют собой источники реакции, обусловленные реакциями пористого электрода.

В модели используется уравнение 1 для определения потенциала электролита в пористых электродах с помощью третичного распределения тока, интерфейса Нернста–Планка. В областях отрицательного и положительного пористого электрода, где присутствует свободный электролит, концентрации всех ионов одного порядка, а градиенты  $c_i$  пренебрежимо малы. Однако мембрана состоит из полимерного электролита с дополнительными отрицательными ионами, зафиксированными в полимерной матрице, что означает, что концентрация для этого вида постоянна. В области ионообменной мембраны при расчете суммы зарядов  $\rho_{\text{fix}}$  в условии электронейтральности добавляется фиксированный объемный заряд:

$$\rho_{\text{fix}} + F \sum_{i=1}^n z_i c_i = 0 \quad (2)$$

Фиксированный объемный заряд задается через концентрацию заряда мембраны, которая в этой модели варьируется с помощью вспомогательной развертки.

Граничные условия

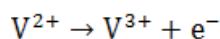
Правила Доннана, на границе между мембраной и пористыми областями электрода устанавливаются определенные условия. Для веществ, присутствующих с обеих сторон мембраны электрода, существует определенная связь между потенциалами и концентрациями:

$$\Phi_{l,m} = \Phi_{l,e} - \frac{RT}{z_i F} \ln\left(\frac{c_{i,m}}{c_{i,e}}\right) \quad (3)$$

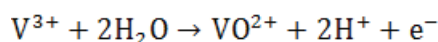
где  $c_{i,m}$  – концентрация частиц в мембране,  $c_{i,e}$  – концентрация частиц в свободном электролите, а  $z_i$  – соответствующий заряд. Сдвиг потенциала, вызванный уравнением 3, называется потенциалом Доннана. Функция «Граница ионообменной мембраны» в Третичном распределении тока, интерфейс Нернста–Планка определяется условиями Доннана [14].

Реакции саморазряда

Предполагается, что на границе мембрана-катод  $V^{3+}$  и  $V^{2+}$  немедленно окисляется



и



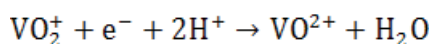
после

$$c_{V^{3+}} = c_{V^{2+}} = 0 \quad (4)$$

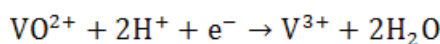
Соответственно,  $VO^{2+}$  и  $VO^{2+}$  концентрация считается равной нулю у границы мембрана – анод:

$$c_{VO^{2+}} = c_{VO^{2+}} = 0 \quad (5)$$

в результате реакций восстановления



и



быстрые реакции окисления/восстановления реализуются с помощью необратимого процесса.

## Результаты и обсуждение

Кривые на рисунке 2 показывают поляризацию и плотность мощности для скорости потока 25 и 50 мл/мин., хорошая корреляция наблюдается между экспериментальными и числовыми результатами. Дополнительные вклады в перенапряжение при больших плотностях тока вносятся за счет массового переноса.

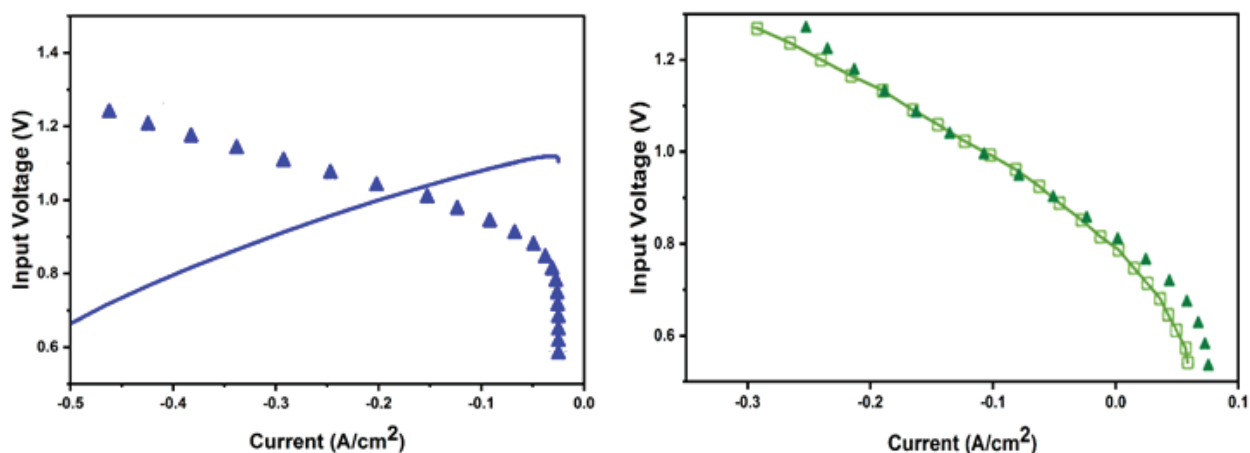


Рисунок 2 – Кривая поляризации и плотности мощности (а) для скорости потока 25 мл/мин и (б) для скорости потока 50 мл/мин

### Изменения скорости потока

Еще один важный рабочий параметр, который следует учитывать, – это скорость потока. Тот же анализ, что и раньше, был выполнен с фиксацией состояния заряда 0,55, входного напряжения 0,5В. Для теста было взято два значения скорости потока: 25 мл/мин и 50 мл/мин. На рисунке 3 показано, что скорость демонстрирует пропорциональную зависимость.

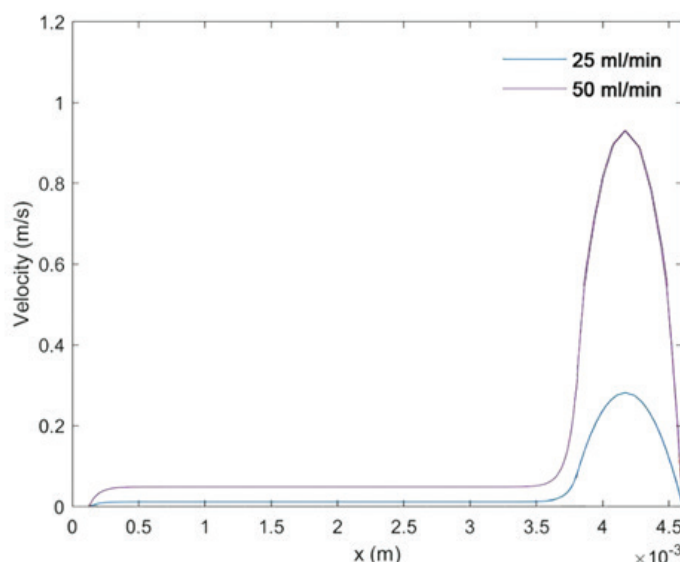


Рисунок 3 – Кривые скорости потока электролита

Скорость реакции зависит от изменения в скорости потока, о чем свидетельствуют данные, представленные на рисунке 4. В частности, при скорости потока установлено, что на уровне 25 мл/мин пиковое значение реакции происходит на границе мембрана – электрод. Это говорит о том, что кинетика реакции особенно активна в этой области при данном потоке условий. При скорости потока 25 мл/мин. отчетливое изменение в распределении скорости реакции, также



изображено на рисунке 4. В этом случае максимальные значения скорости реакции достигаются как на границе мембрана – электрод, так и на границе канал – электрод. Более высокая скорость потока, по-видимому, улучшает транспортировку реагирующих частиц по направлению к обеим границам раздела, тем самым способствуя более интенсивным электрохимическим реакциям в конкретных областях.

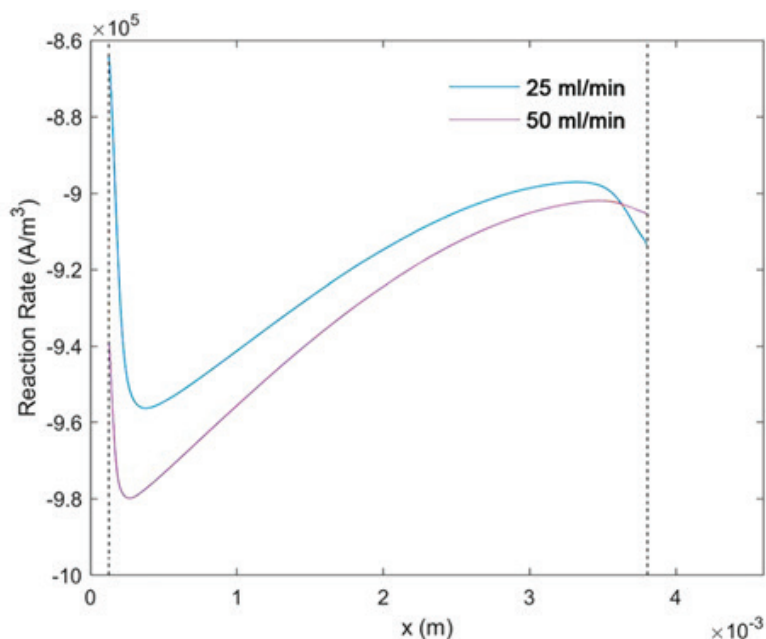


Рисунок 4 – Распределение скорости реакций

Интересно, что при дальнейшем увеличении скорости потока на 50 мл/мин. заметный сдвиг наблюдается на месте максимальной скорости реакции. Он приближается к границе раздела канал – электрод, что свидетельствует о более высокой концентрации реагентов в области из-за увеличения конвективного переноса, вызванного более высокими скоростями потока. Скорость потока оказывает существенное влияние на градиенты концентрации, как показано на рисунке 5.

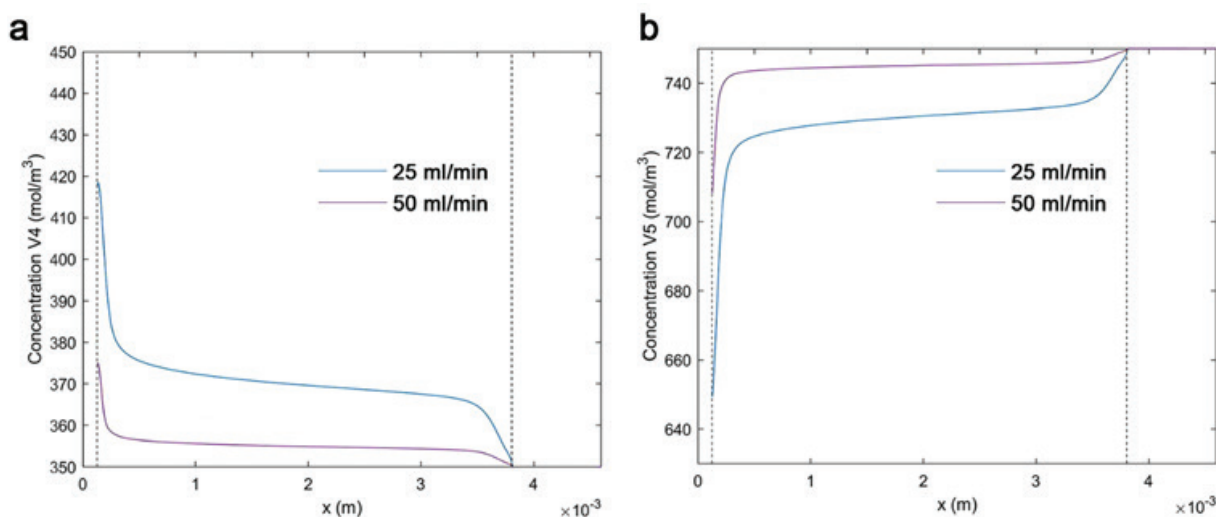


Рисунок 5 – Кривые (a) V(IV) и (b) V(V) концентрации реагентов в электролите

Более низкие скорости потока приводят к более высокому градиенту концентрации из-за более длительного времени пребывания электролита внутри ячейки. Явное неравенство наблюда-

ется при скорости потока 25 мл/мин., где достигается наивысшая концентрация V(IV). Данное поведение объясняется снижением скорости потока, что положительно влияет на более равномерное распределение электролита. Примечательно, что градиенты концентрации демонстрируют быстрые изменения в электрод-мембранных взаимодействиях и границы электрод – канал для всех скоростей потока, а линейное поведение наблюдается при прохождении всей ячейки. Крайне важно тщательно сбалансировать преимущества увеличенного времени прохождения и градиенты концентрации против потенциальных недостатков повышенного перенапряжения, как показано на рисунке 6. Достижение оптимальной скорости потока имеет решающее значение для обеспечения эффективного и контролируемого электрохимического процесса, так как низкий поток имеет тенденцию приводить к более высоким перенапряжениям.

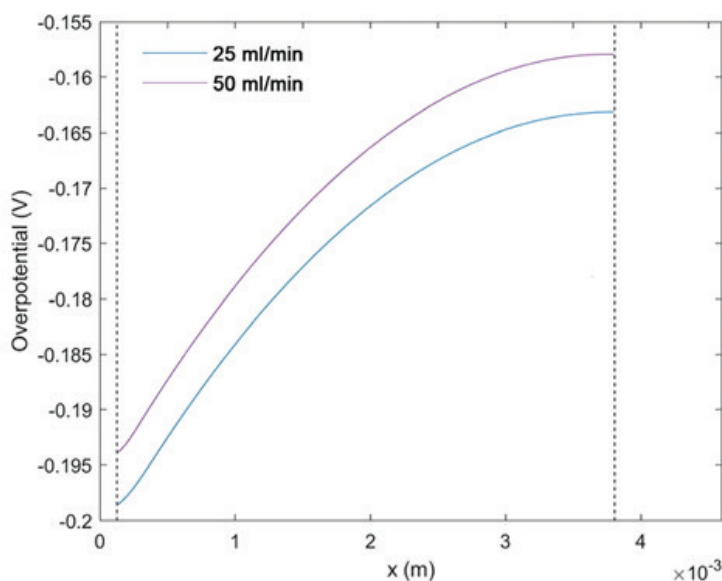


Рисунок 6 – Градиенты концентрации в зависимости от потенциальных недостатков повышенного перенапряжения

## Закключение

Настоящая работа представляет собой вычислительную модель половины ячейки ВРПБ. Производительность ячейки была протестирована при различной скорости потока электролита в пакете программного обеспечения COMSOL Multiphysics.

Скорость потока электролита влияет на градиент концентрации и скорость реакций. Было обнаружено, что более низкая скорость потока приводит к более выраженным градиентам концентрации из-за увеличения времени пребывания электролита в ячейке. Более того, скорость реакции была выше на границе электрод – канал при более низких скоростях потока, хотя наблюдается однородность на протяжении моделирования всего электрода при более высоких скоростях потока. Однако важно отметить, что более низкие скорости потока также могут привести к значительным перенапряжениям.

## Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан в рамках проекта BR18574141 «Комплексная многоцелевая программа повышения энергоэффективности и ресурсосбережения в энергетике и машиностроении для промышленности Казахстана», за что авторы выражают огромную благодарность.



## ЛИТЕРАТУРА

- 1 Iwakiri I., Antunes T., Almeida H., Sousa J.P., Figueira R.B., Mendes A. (2021) Redox flow batteries: materials, design and prospects, *Energies* 14, <https://doi.org/10.3390/en14185643>.
- 2 Lourenssen K., Williams J., Ahmadpour F., Clemmer R., Tasnim S. (2019) Vanadium redox flow batteries: a comprehensive review, *J. Energy Storage* 25, <https://doi.org/10.1016/j.est.2019.100844>.
- 3 Khazaeli A., Vatani A., Tahouni N., Panjeshahi M.H. (2015) Numerical investigation and thermodynamic analysis of the effect of electrolyte flow rate on performance of all vanadium redox flow batteries, *J. Power Sources*, 293, pp. 599–612, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2015.05.100>.
- 4 Wen Y., Neville T.P., Sobrido A.J., Shearing P.R., Brett D.J.L., Jervis R. (2023) Bismuth concentration influenced competition between electrochemical reactions in the all-vanadium redox flow battery, *J. Power Sources* 566, 232861.
- 5 Sum E. and Skyllas-Kazacos M. (1985) *Power Sources* 16(2), 85, [https://doi.org/10.1016/0378-7753\(85\)80082-3](https://doi.org/10.1016/0378-7753(85)80082-3).
- 6 Rong Y. (2015) Study on Stability and Electrochemical Performance of New Vanadium Battery Electrolyte, Beijing University of Chemical Technology.
- 7 Rao P. and Jayanti S. (2021) *Power Source*, 482, 228988, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2020.228988>.
- 8 Tai Z., Hanawa K., Ju D. and Luo W., *Chem J.* (2021) (1), <https://doi.org/10.1155/2021/6646256>.
- 9 Messaggi M., Rabissi C., Gambaro C., Meda L., Casalegno A. and Zago M. (2020) *Power Sources*, 449, 227588, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2019.227588>.
- 10 Gencten M., Gursu H., Sahin Y. (2017) Anti-precipitation effects of TiO<sub>2</sub> and TiOSO<sub>4</sub> on positive electrolyte of vanadium redox battery, *Hydrog. Energy*, 42, 25608–25618.
- 11 Bafekry A., Faraji M., Stampfl C., Abdolhosseini Sarsari I., Abdollahzadeh Ziabari A., Hieu N.N., Karbasizadeh S. and Ghergherechi M. (2021) *Phys. D Appl.*, 55, 035301, <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac2cab>.
- 12 Bafekry A., Faraji M., Fadlallah M.M., Jappor H.R., Karbasizadeh S., Ghergherechi M., Abdolhosseini Sarsari I. and Abdollahzadeh Ziabari A. (2021) *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23(34), 18752, <https://doi.org/10.1039/D1CP02590B>.
- 13 Bafekry A., Faraji M., Fadlallah M.M., Mortazavi B., Ziabari A.A., Khatibani A.B., Nguyen C.V., Ghergherechi M. and Godova D. (2021) *Phys. Chem. C*, 125(23), 13067, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c03749>.
- 14 Electrochemistry module user's guide (2023) COMSOL Multiphysics, v. 5.5. COMSOLAB, Stockholm, Sweden, URL: [www.comsol.com](http://www.comsol.com).
- 15 Trovò A. (2020) Battery management system for industrial-scale vanadium redox flow batteries: Features and operation, *Journal of Power Sources*, 465, 228229, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2020.228229>.
- 16 Bafekry A., Faraji M., Karbasizadeh S., A.B.A.A. Ziabari, Godova D. and Ghergherechi M. (2021) *Phys. Chem*, 23(42), 24301, <https://doi.org/10.1039/D1CP03421A>.
- 17 Aramendia I., Fernandez-Gamiz U., Martinez-San-Vicente A., Zulueta E. and Lopez-Guede J.M. (2020) *Energies* 14(1), 176, <https://doi.org/10.3390/en14010176>.
- 18 D. Vivona, M. Messaggi, A. Baricci, A. Casalegno, and M. Zago // *J. Electrochem. Soc.* 2020, <https://doi.org/10.1149/1945-7111/aba36b>.
- 19 Knehr K.W., Agar E., Dennison C.R., Kalidindi A.R. and Kumbur E.C. (2012). *Electrochem. Soc.*, 159(9), A1446, <https://doi.org/10.1149/2.017209jes>.
- 20 You D., Zhang H. and Chen J. (2009) *Electrochim. Acta*, 54(27), 6827, <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2009.06.086/>.
- 21 Ozgoli H.A., Elyasi S. and Mollazadeh M. (2015). *Mech. Ind.* 16(2), 201, <https://doi.org/10.1051/meca/2014071>.
- 22 Emmel D., Hofmann J.D., Arlt T., Manke I., Wehinger G.D., Schröder D. and Appl A.C.S. (2020) *Energy Mater.* 3(5), 4384 <https://doi.org/10.1021/acsaem.0c00075>.

<sup>1,2\*</sup>МЕРЕКЕ А.Л., <sup>2</sup>ЧЕКІЕВА А.С., <sup>2</sup>УМИРЗАКОВ А.Г., <sup>1</sup>ЕЛЕМЕСОВ К.К.,  
<sup>3</sup>АБДУГАЛИМОВ А.Ш., <sup>2</sup>ФАСХУТДИНОВ М.Ф., <sup>1,2,4</sup>СЕРИККАНОВ А.С.

<sup>1</sup>Satbaev University, 050032, Алматы қ., Қазақстан

<sup>2</sup>Физика-техникалық институты, 050032, Алматы қ., Қазақстан

<sup>3</sup>Еуразия ұлттық университеті, 010000, Астана қ., Қазақстан

<sup>4</sup>Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 050032, Алматы қ., Қазақстан

## Ванадий батареяларындағы электрохимиялық процестерді зерттеу және модельдеу

### Андатпа

Мәселені қалыптастыру: қазіргі әлемде тиімді энергия көздерін дамыту барған сайын маңызды мәселеге айналады. Электрохимиялық энергия көздері саласындағы перспективті бағыттардың бірі – ванадий батареялары. Бұл батареялар ванадийдің әртүрлі тотығу күйлеріндегі электрохимиялық процестерге негізделген. Ванадий батареяларындағы электрохимиялық процестерді зерттеу және модельдеу олардың жұмысын оңтайландыру және энергия тиімділігін арттыру үшін маңызды. Ванадий батареяларындағы электрохимиялық процестерді зерттеу және модельдеу тиімді энергия көздерін дамытуда шешуші рөл атқарады. Ванадий батареяларының жұмысының негізгі принциптерін түсіну, сондай-ақ дәл математикалық модельдерді әзірлеу мен оларды сандық модельдеу энергияны сақтау және босатумен байланысты процестерді оңтайландыруға мүмкіндік береді. Осы саладағы одан әрі зерттеулер мен әзірлемелер заманауи қоғамның тұрақты энергия қажеттіліктерін қанағаттандыра алатын тиімдірек және тұрақты энергия көздерін құруға әкелуі мүмкін. Мақсат: мембраналық-электродтық шекаралық жағдайларда жүретін электрохимиялық процестерді оңтайландыру үшін электролит ағынын өзгерту арқылы ванадий-тотықсыздандырғыш батареяларының (ВТБ) процестерін модельдеу. Нәтижелер: бұл зерттеу COMSOL Multiphysics бағдарламалық пакетінде электролит ағынының функциясы ретінде ВТБ электрохимиялық сипаттамаларын модельдейді. Ағыс жылдамдығының параметрлері олардың потенциалды бөлуге және ток тығыздығына әсерін бағалау үшін сынақтар жүргізіліп, зерттелді. Практикалық маңызы: ВТБ-да энергия жасуша арқылы айдалатын сұйық электролитте сақталады. Электролит кәдімгі аккумуляторлардағыдай кеуекті электродтарда емес, сыртқы резервуарларда сақталады. Нәтижелер энергияны тиімді сақтауды жақсартуға, жүктемені теңестіруге және ВТБ қуатының максималды тегістелуіне ықпал етеді. Модельдерді құрастыру электролит ағынының жылдамдығын ескере отырып, олардың ванадий иондарын тасымалдауға қалай әсер ететінін анықтау үшін аккумулятор ішіндегі гидродинамикалық жағдайларды ескере отырып, электролиттерді араластыру тиімділігіне әсерін болжауға мүмкіндік береді.

**Тірек сөздер:** модельдеу, ванадий тотықсыздандырғыш батареялары, электролит, шығын, поляризация, ток тығыздығы

<sup>1,2\*</sup>MEREKE A.L., <sup>2</sup>CHEKIYEVA A.S., <sup>2</sup>UMIRZAKOV A.G., <sup>1</sup>ELEMESOV K.K.,  
<sup>3</sup>ABDUGALIMOV A.SH., <sup>2</sup>FASKHUTDINOV M.F., <sup>1,2,4</sup>SERIKKANOV A.S.

<sup>1</sup>Satbaev University, 050032, Almaty, Kazakhstan

<sup>2</sup>Physico-Technical Institute, Almaty, 050032, Almaty, Kazakhstan

<sup>3</sup>Eurasian National University, Astana, 010000, Kazakhstan

<sup>4</sup>National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, Almaty 050032, Kazakhstan

## RESEARCH AND SIMULATION OF ELECTROCHEMICAL PROCESSES IN VANADIUM BATTERIES

### Abstract

Formulation of the problem: In the modern world, the development of efficient energy sources is becoming an increasingly important issue. One of the promising areas in the field of electrochemical energy sources is vanadium batteries. These batteries are based on electrochemical processes involving vanadium in various oxidative states. Research and modeling of electrochemical processes in vanadium batteries are important to optimize their performance and improve energy efficiency. Research and modeling of electrochemical processes in vanadium batteries play a key role in the development of efficient energy sources. Understanding the basic principles of operation of vanadium

batteries, as well as the development of accurate mathematical models and their numerical simulation, allows optimizing the processes associated with storing and releasing energy. Further research and development in this area could lead to the creation of more efficient and sustainable energy sources that can meet the sustainable energy needs of modern society. Objective of the project: modeling the processes of vanadium redox flow batteries (VRFB) by varying the electrolyte flow to optimize electrochemical processes occurring under membrane-electrode boundary conditions. Results: this study simulates in the COMSOL Multiphysics software package the electrochemical characteristics of HFSC as a function of electrolyte flow. Tests were carried out in which the flow velocity parameters were examined to evaluate their effect on the potential distribution and current density. Practical significance: the energy in an HFSC is stored in a liquid electrolyte that is pumped through the cell. The electrolyte is stored in external reservoirs rather than in porous electrodes as in conventional batteries. The results contribute to improved efficient energy storage, load balancing, and peak power smoothing of the GRPB. The construction of models allows us to predict the effect on the efficiency of mixing electrolytes, taking into account the hydrodynamic conditions inside the battery to determine how they affect the transport of vanadium ions, taking into account the electrolyte flow rate.

**Key words:** modeling, vanadium redox flow batteries, electrolyte, flow rate, polarization, current density

### Информация об авторах

**Мереке Алмаз Лукматулы ((автор для корреспонденции))**

Научный сотрудник, Satbaev University, Физико-технический институт, 050032, г. Алматы, Казахстан

ORCID ID: 0000-0002-8945-9648

E-mail: mereke.almaz@mail.ru.

**Чекиева Аружан Сунгатолдакызы**

Младший научный сотрудник, Физико-технический институт, 050032, г. Алматы, Казахстан,

ORCID ID: 0000-0002-5343-5054

E-mail: aruqkz@gmail.com

**Умирзаков Арман Ганидинович**

Научный сотрудник, Физико-технический институт, 050032, г. Алматы, Казахстан

ORCID ID: 0000-0002-0941-0271

E-mail: a.umirzakov@sci.kz

**Елемесов Касым Коптлеуович**

Кандидат технических наук, ассоциированный профессор, директор Института энергетики и машиностроения, Satbaev University, 050032, г. Алматы, Казахстан

ORCID ID: 0000-0001-6168-2787

E-mail: k.yelemessov@satbayev.university

**Абдугалимов Алишер Шериязданович**

Аспирант Евразийского национального университета, 010000, г. Астана, Казахстан

ORCID ID: 0009-0004-8864-9230

E-mail: abdugalimov@gmail.com

**Фасхутдинов Марат Флурович**

Кандидат химических наук, Satbaev University, 050032, г. Алматы, Казахстан

E-mail: fffmarat@mail.ru

**Серикканов Абай Серикканович**

Кандидат физико-математических наук, вице-президент, Национальная академия наук Республики Казахстан, 050032, г. Алматы, Казахстан

ORCID ID: 0000-0001-6817-9586

E-mail: a.serikkanov@gmail.com

## Авторлар туралы мәліметтер

### **Мереке Алмаз Лукматулы** (корреспонденция авторы)

Ғылыми қызметкер, Satbaev University, Физика-техникалық институты, 050032,

Алматы қ., Қазақстан

ORCID ID: 0000-0002-8945-9648

E-mail: mereke.almaz@mail.ru.

### **Чекиева Аружан Сунгатолдақызы**

Кіші ғылыми қызметкер, Физика-техникалық институты, 050032, Алматы қ., Қазақстан,

ORCID ID: 0000-0002-5343-5054

E-mail: aruqkz@gmail.com

### **Умирзаков Арман Ганидинович**

Ғылыми қызметкер, Физика-техникалық институты, 050032, Алматы қ., Қазақстан

ORCID ID: 0000-0002-0941-0271

E-mail: a.umirzakov@sci.kz

### **Елемесов Касым Коптлеуович**

Техника ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Энергетика және машина жасау институтының директоры, Satbaev University, 050032, Алматы қ., Қазақстан

ORCID ID: 0000-0001-6168-2787

k.yelemessov@satbayev.university

### **Абдугалимов Алишер Шериязданович**

Еуразия ұлттық университетінің аспиранты, 010000, Астана қ., Қазақстан

ORCID ID: 0009-0004-8864-9230

E-mail: abdugalimov@gmail.com

### **Фасхутдинов Марат Флурович**

Химия ғылымдарының кандидаты, Satbaev University, 050032, Алматы қ., Қазақстан

E-mail: ffmarat@mail.ru

### **Серикканов Абай Серикканович**

Физика-математика ғылымдарының кандидаты, вице-президент, Қазақстан Республикасының

Ұлттық ғылым академиясы, 050032, Алматы қ., Қазақстан

ORCID ID: 0000-0001-6817-9586

Email: a.serikkanov@gmail.com

## Information about authors

### **Mereke Almaz Lukmatuly** (corresponding author)

Researcher, Satbaev University, Institute of Physics and Technology, 050032, Almaty, Kazakhstan

ORCID ID: 0000-0002-8945-9648

E-mail: mereke.almaz@mail.ru.

### **Chekiyeva Aruzhan Sungatoldakyzy**

Junior Researcher, Institute of Physics and Technology, 050032, Almaty, Kazakhstan,

ORCID ID: 0000-0002-5343-5054

E-mail: aruqkz@gmail.com

### **Umirzakov Arman Ganidinovich**

Researcher, Institute of Physics and Technology, 050032, Almaty, Kazakhstan

ORCID ID: 0000-0002-0941-0271

E-mail: a.umirzakov@sci.kz

### **Yelemesov Kasym Koptleuovich**

Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Director, Institute of Power Engineering and Mechanical Engineering, Satbaev University, 050032, Almaty, Kazakhstan

ORCID ID: 0000-0001-6168-2787

k.yelemessov@satbayev.university

**Abdugalimov Alisher Sheriyazdanovich**

Postgraduate student, Eurasian National University, 010000, Astana, Kazakhstan

ORCID ID: 0009-0004-8864-9230

E-mail: abdugalimov@gmail.com

**Faskhutdinov Marat Flurovich**

Candidate of Chemical Sciences, Satbaev University, 050032, Almaty, Kazakhstan

E-mail: ffmarat@mail.ru

**Serikkanov Abay Serikkanovich**

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Vice-President, National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 050032, Almaty, Kazakhstan

ORCID ID: 0000-0001-6817-9586

E-mail: a.serikkanov@gmail.com