## УПРАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИМ РЕАКТОРОМ С ПРОТОЧНЫМИ ТРЕХМЕРНЫМИ ЭЛЕКТРОДАМИ ЗА СЧЕТ ОПТИМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ СИСТЕМЫ

## Гвоздева И.Г.<sup>1</sup>, Кошев А.Н.<sup>2</sup>

Пензенский Государственный Университет архитектуры и строительства, Пенза) Варенцов В.К.<sup>3</sup>

(Новосибирский Государственный технический университет, Новосибирск)

Математическая модель стационарного окислительновосстановительного процесса в электрохимических системах с проточными объемно пористыми электродами (ОПЭ) представляет собой систему дифференциальных уравнений с сильно нелинейной правой частью, решение которой обладает свойством классической неустойчивости. Граничные условия задачи задаются для части неизвестных функций в виде значений производных, а для части функций в виде значений производных, а для части функций в виде значений самих функций на разных концах интервала интегрирования, что вызывает трудности при проведении численных расчетов. В данной работе приводится алгоритм расчета электропроводности твердой фазы системы, как функции координаты по

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Ирина Геннадьевна Гвоздева, старший преподаватель (gvozdev@pguas.ru).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Александр Николаевич Кошев, проректор по информатизации, доктор химических наук, профессор (koshev@pguas.ru)

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Валерий Константинович Варенцов, зав. кафедрой химии, доктор технических наук, профессор

толщине электрода, для обеспечения равномерного распределения электрохимического процесса по толщине трехмерного пористого электрода (ТПЭ). Проведено численное исследование закономерностей работы ТПЭ при различном распределении электропроводности по толщине проточного электрода.

Ключевые слова: электрохимическая система, пористый электрод, математическая модель, оптимизация, алгоритм расчета.

Электрохимические реакторы с трехмерными проточными электродами (**TПЭ**) на основе углеродных волокнистых материалов (**УВМ**) используются для интенсификации различных окислительно-восстановительных процессов, в том числе для извлечения металлов из растворов электролитов [1 - 3]. Одной из основных задач оптимизации работы такого рода реакторов является обеспечение высокой эффективности электрохимического процесса, что подразумевает равномерное осаждение металла на реакционной поверхности с высокой скоростью его осаждения.

Для постановки задачи отыскания оптимальных условий электролиза требуется изучение физико-химических закономерностей процесса восстановления электроактивных компонентов на трехмерных проточных электродах. При этом, большое значение имеет учет изменения параметров, характеризующих систему электрод - раствор с течением протекания процесса, таких, например, как электропроводность твердой и жидкой фаз, коэффициент массопереноса, пористость, реакционная поверхность, линейная скорость протока электролита и пр.; а также кинетических параметров процесса. Все эти параметры имеют распределенный характер по толщине электрода [1, 4, 5].

Одним из эффективных управляющих параметров работы электрохимической системы с трехмерными проточными электродами является электропроводность материала, из которого изготовлен электрод. Наибольший интерес представляет случай, когда в качестве материала катода используется УВМ с неодинаковыми электропроводящими свойствами в различных точках по толщине ТПЭ.

Такого рода электроды могут быть составлены из УВМ с различным исходным сопротивлением. Основным недостатком таких электродов является наличие переходных границ, что предопределяет скачок электропроводности в области контакта слоев УВМ. В настоящее время появилась возможность использовать углеродные волокнистые электроды с непрерывно изменяющейся по толщине электрода электропроводностью. Электроды такого вида могут быть получены катодной или анодной обработкой исходного материала в растворах кислоты, щелочи или соли. Профиль электропроводности по толщине электрода обеспечивается режимом электролиза, природой и составом электролита и видом исходного УВМ [6, 7].

Наиболее эффективным аппаратом исследования и подбора оптимальных условий функционирования ТПЭ, является математическое моделирование. В статье [5] изложены основные подходы и программа исследований закономерностей функционирования проточных трехмерных электродов из УВМ с использованием методов математического моделирования и экспериментальных методов для различных окислительновосстановительных процессов, в том числе электроосаждения металлов. В статье [8], приведена постановка задачи оптимального управления, где в качестве управляющего воздействия выбрана зависимость электропроводности углеграфитовой основы проточного электрода и намечены пути решения задачи. Однако, при реализации разработанных в статье методов отыскания оптимального распределения электропроводности УВМ, возникают две трудности. Во-первых, расчет оптимального математического управления является сложной задачей вычислительной математики, при использовании предложенного подхода необходимо учитывать специфику каждой конкретной исследуемой системы и учитывать эту специфику при проведении расчетов. То есть такой метод наиболее эффективно применим при решении конкретной задачи оптимизации электропроводности электрода. Во-вторых, для решения задачи определения электропроводности ТПЭ, как задачи оптимального математического управления, необходимо знать начальное приближение к решению, достаточно близкое к оптимальному. В противном случае итерационный процесс оптимизации может оказаться не сходящимся к оптимуму.

Целью данной работы является построение алгоритма расчета электропроводности твердой фазы системы, как функции координаты по толщине электрода, для обеспечения равномерного распределения электрохимического процесса по толщине ТПЭ, при этом предлагается решать задачу как задачу математического программирования, а не как задачу оптимального управления.

Кроме того, в цель работы входило численное исследование закономерностей работы ТПЭ при различном распределении электропроводности по толщине проточного электрода. Равномерное распределение электрохимического процесса по толщине электрода особенно важно при электроосаждении металлов на УВЭ, так как определяет максимально возможное количество метала, осаждаемого на единицу веса электрода.

Ниже приводится вывод дифференциального уравнения, связывающего функции плотности тока J(x) и потенциала E(x) в каждой точке ТПЭ - x, когда удельная электропроводность твердой фазы  $\chi_{T}$  есть функция от координаты -  $\chi_{T}$ .

 $J_{\rm T}(x)$  - плотность тока в твердой фазе пористой системы в точке электрода *x*;

 $J_{\mathcal{K}}(x)$  - плотность тока в жидкой фазе пористой системы в точке электрода *x*;

J(x) - общая плотность тока в точке электрода x,  $(A/cm^2)$ ;

 $\chi_{T}(x), \chi_{\mathcal{H}}(x)$  - удельные сопротивления твердой и жидкой фаз, (1 / ( *Ом* · *см* ));

E(x) - потенциал в точке электрода с координатой x, (B);

 $S_{v}$  - удельная реакционная поверхность,  $(1/c_{M})$ ;

E'(x) - производная от потенциала по переменной x, ( $B/c_M$ );

4

E''(x) - вторая производная от потенциала по переменной x,  $(B/cM^2)$ ;

 $\chi_{T}'(x), \chi_{\mathcal{K}}'(x)$  - производные по *x* от удельных сопротивлений твердой и жидкой фаз, (1 / ( *Ом* ·*cm*<sup>2</sup>));

 $J_{\rm T}'(x), J_{\rm K}'(x)$  - производные от плотностей тока;

В соответствии с известными положениями (В.С. Даниель-Бек, ЖФХ, т.22, вып.6), если  $\chi_{T}(x)$ ,  $\chi_{K}(x)$  константы, имеем:

$$(1) \quad J_{\mathrm{T}}(\lambda) + J_{\mathrm{w}}(\lambda) = 0$$

(2) 
$$\frac{J_{\rm T}(x)}{\chi_{\rm T}} - \frac{J_{\rm m}(x)}{\chi_{\rm m}} = E'(x)$$

$$(3) \quad J'_{\mathrm{T}}(x) = S_{v}J_{s}(x)$$

(4) 
$$-J'_{\mathfrak{K}}(x) = S_{v}J_{s}(x)$$

Положим:  $\rho_{T}(x) = 1 / \chi_{T}(x)$ ,  $\rho_{\mathbb{K}}(x) = 1 / \chi_{\mathbb{K}}(x)$ . Тогда (2) перепишется в виде

(5) 
$$J_{\rm T}(x)\rho_{\rm T}(x) - J_{\rm *}(x)\rho_{\rm *}(x) = E'(x)$$

Дифференцирование этого выражения приведет к следующему:

$$E''(x) = (J_{T}(x)\rho_{T}(x) - J_{*}(x)\rho_{*}(x))' \Leftrightarrow E''(x) = J'_{T}(x)\rho_{T}(x) + J_{T}(x)\rho'_{T}(x) - J'_{*}(x)\rho_{*}(x) - J_{*}(x)\rho'_{*}(x)$$
  
Следовательно, из (3), (4):  
(6)  

$$E''(x) = S_{v}J_{s}(x)(\rho_{T}(x) + \rho_{*}(x)) + J_{T}(x)\rho'_{T}(x) - J_{*}(x)\rho'_{*}(x)$$

Предположим, что  $\rho_{\mathbb{K}}$  - константа и, следовательно,  $\rho_{\mathbb{K}}$ ' (*x*) = 0.

Решаем систему (1), (5) относительно величин  $J_{\rm T}(x)$ ,  $J_{\rm W}(x)$  и подставляем решения в уравнение (6). Получим:

(7) 
$$E''(x) = S_v J_s(x)(\rho_T(x) + \rho_{\pi}(x)) + \frac{1}{\rho_{;\pi}(x) + \rho_T(x)}E'(x)\rho'_T(x)$$

Итак, переходя к удельным сопротивлениям, окончательно имеем:

(8) 
$$\frac{d^{2}E}{dx^{2}} = -\frac{\chi_{T}'(x)\chi_{\#}}{\chi_{T}(x)(\chi_{T}(x)+\chi_{\#})}\frac{dE}{dx} + S_{\nu}\left(\frac{1}{\chi_{T}(x)}+\frac{1}{\chi_{\#}}\right)J_{s}(x).$$

Учет изменения профиля электропроводности электрода производился по способу, описанному в статье [10], указанной в списке литературы.

Функция J(x) в общем случае может быть представлена как функция потенциала электрода и концентрации электроактивного компонента C(x):

(9) 
$$J(x) = j_0 \frac{\exp(\alpha ZFE(x)/RT) - \exp((\alpha - 1)ZFE(x)/RT)}{1 + j_0 \exp(\alpha ZFE(x)/RT)/ZFK_m C(x)}$$

Кроме того, плотность тока J(x) и концентрация электроактивного компонента C(x) связаны уравнением:

(10) 
$$\frac{dC}{dx} = -\frac{S_v}{wZF}J(x)$$

В уравнениях (2), (3)  $j_0$  - плотность тока обмена,  $K_m$  - коэффициент массопереноса  $K_m = 1.9 \cdot 10^{-2} \cdot w^{0.35}$  [9], w - линейная скорость протока электролита.

Начальные и граничные условия запишем в виде:

(11) 
$$\frac{dE}{dx}(0) = -\frac{J_{cp}}{\chi_T(0)}; \frac{dE}{dx}(L) = \frac{J_{cp}}{\chi_{\pi}}; C(0) = C_0.$$

Система уравнений (8) - (11) полностью описывает распределение потенциала и тока в порах ТПЭ при электроосаждении одного компонента, если пренебречь процессом выделения водорода, который, при необходимости может быть легко учтен.

Таким образом, задача заключается в определении функции  $\chi_{T}(x)$ , такой, чтобы решение уравнений (8) - (11) удовлетворяло критерию наилучшей равномерности распределения тока, например:

(12) 
$$\int_{0}^{L} \left| E(x) - \frac{\int_{0}^{L} E(x) dx}{L} \right| dx \to \min$$

Функцию распределения электропроводности УВМ по толщине пористого электрода, вид которой необходим для проведения численных экспериментов, мы принимали как постоянной, так и в виде линейной и квадратичной зависимости  $\chi_{T}$ , от координаты *x*.

Если зависимость электропроводности твердой фазы  $\chi_T$  от координаты по толщине электрода *x* представить в виде параболы  $\chi_T(x) = A \cdot x^2 + B \cdot x + C$ , то, выбрав оптимальным образом коэффициенты *A*, *B* и *C*, можно достичь улучшения равномерности распределения электрохимического процесса по объему электрода.

Заметим, что если принудительно принять A = 0, B = 0, то после оптимизации получим значение  $\chi_T(x)$  в виде постоянной величины, а если только A = 0, то в виде линейной формы.

Таким образом, в математической постановке получаем задачу многомерной оптимизации с сильно нелинейным критерием (12). В качестве ограничений на параметры оптимизации и решение принимались естественные ограничения на значения потенциала электрода и его электропроводность.

Задача оптимизации решалась в два этапа. Вначале находили приближение к оптимальным значениям коэффициентов функции  $\chi_T(x)$  методом перебора следующим образом. Строилась сетка, где ось *x* соответствует толщине электрода, а ось *y* значениям электропроводности электрода. Поочередно вершина параболы помещалась в каждый узел сетки, в зависимости от значения коэффициента *C*, вычислялись значения коэффициентов *A* и *B*. Далее решалась система дифференциальных уравнений, вычислялся критерий оптимизации. В результате, по окончании первого этапа найдены значения коэффициентов *A*, *B*, *C*,

7

при которых критерий оптимизации имеет минимально возможное значение по принятому алгоритму. Эти значения представляют собой некоторое приближение к оптимуму, поэтому далее они уточнялись методом покоординатного поиска. Кроме того, при решении задачи оптимизации на каждом шаге следили, чтобы значения электропроводности находились в заданных допустимых границах.

Описанный алгоритм решения задачи позволяет, во-первых, свести оптимизацию к наименьшему числу шагов и, во-вторых, отслеживать все локальные минимумы целевой функции.

На каждом шаге итерационного процесса поиска оптимума решалась задача Коши для системы дифференциальных уравнений (8) - (11), причем, для ее решения необходимо каждый раз находить недостающее начальное условие *E*(0). Система дифференциальных уравнений решалась методом Рунге-Кутта. Недостающее начальное условие находилось известным в вычислительной математике «методом стрельбы».

Программа вычислений выполнена в интегрированной вычислительной среде MathCad. Там же построены все графические зависимости.

Параметры электрода и электролита, используемые при проведении расчетов соответствовали системе для извлечения серебра из тиомочевинных растворов на электрод из УВМ и приведены в табл. 1.

В расчетах использовался электрод с тыльным токоподводом и тыльной подачей раствора в электрод, т.е. наиболее распространенная в практике конструкция электрохимических реакторов с углеродно-волокнистыми электродами (УВЭ) [2].

Таблица 1	. Парамет	ры электро	да и э	лектролитс	а, используе
мые при п	роведении	расчетов			

Наименование параметра	Обозна-	Зна-	Размер-
	чение	чение	ность
Электропроводность электролита	χ <sub>ж</sub>	0.1	См∙см⁻¹

Скорость протока раствора	W	0.5	см/с
Удельная реакционная поверх-	Sv	300	$cm^2/cm^3$
ность			
Ток обмена	$j_0$	10 <sup>-5</sup>	A/cm <sup>2</sup>
Габаритная плотность тока	$J_{ m cp}$	0.2	A/см <sup>2</sup>
Концентрация	$C_0$	10-5	моль/см <sup>3</sup>
Коэффициент переноса	α	0.5	-
Заряд иона	Ζ	1	-
Толщина электрода	L	0.4	СМ
Равновесный потенциал серебра	$E_{p}$	-0.07	В

Наилучшие результаты расчетов оптимального распределения электропроводности по толщине объемно-пористого электрода, характеризуемые равномерностью распределения серебра по толщине электрода и степенью его извлечения, приведены в табл. 2. Заметим, что для всех приведенных в данной статье параметров процесса степень извлечения серебра из раствора вычислялась по формуле  $R = 1 - C_L / C_0$  при однократном прохождении раствора сквозь объем электрода.

Таблица 2. Наилучшие результаты расчетов оптимального распределения электропроводности по толщине объемнопористого электрода

N⁰	$\chi_{\rm T} = Ax^2 + Bx + C$		К <sub>р</sub> -показатель	R – степень	
	А	В	С	равномерности	извлечения
1			0.2	0.011304	0.424
2		0.25	0.1	0.012850	0.465
3		-1	0.5	0.009508	0.284
4	-22.5	9	0.1	0.008740	0.419
5	10	-4	0.7	0.015652	0.431
6	-1.315	0.026	0.3	0.0090009	0.317
7	2.63	-0.053	0.3	0.0135555	0.483
8	-0.625	0.5	0.1	0.0125456	0.495

9 5.625 -4.5 1 0.0115009 0.254
--------------------------------

Ниже на рис. 1 и рис. 2 приведены кривые распределения электропроводности, иллюстрирующие расчеты, приведенные в табл. 2 и соответствующие им кривые распределения потенциала.



а) распределение электропроводности







в) распределение тока

Рис. 1. Распределение электрохимических функций при линейной форме распределения электропроводности ТПЭ. 1, 2, 3 – распределения, соответствующие строкам 1, 2, 3 табл.2.



а) распределение электропроводности



б) распределение потенциала



в) распределение тока

Рис. 2. Распределение электрохимических функций при параболической форме распределения электропроводности ТПЭ. 1, 2, 3, 4, 5, 6 – распределения, соответствующие строкам 4, 5, 6, 7, 8, 9 табл. 2.

В строках 1 - 4 табл. 2 приведены характеристики линейного распределения электропроводности основы ТПЭ, а на рис. 1 приведены соответствующие им результаты расчетов распределения потенциала и тока по толщине электрода. Из рассмотренных случаев, лучшим с точки зрения равномерности распределения тока по толщине электрода является распределение  $\chi_{T}(x)$ в виде убывающей линейной формы. Характер распределения потенциала по толщине электрода для линейных профилей электропроводности по толщине электрода логичен и согласуется с известными теоретическими представлениями о работе проточных трехмерных электродов. В рассматриваемых случаях наибольшее значение потенциала наблюдается на фронтальной стороне электрода.

В строках 4 – 8 табл. 2 приведены параметры параболических распределений электропроводности ТПЭ по толщине электрода. При этом вершины парабол фиксировались в различных точках по толщине электрода. Ветви же параболы могли быть направлены как вверх, так и вниз относительно координатной оси. Лучший результат был достигнут, когда парабола ориентирована выпуклостью вверх.

Чтобы убедиться, что данная тенденция сохраняется независимо от исходных данных, были произведены расчеты с другим значением электропроводности жидкой фазы ( $\chi_{\pi} = 0.2 \ Cm \ cm^{-1}$ ). Результаты помещены в табл. 3.

Таблица 3. Наилучшие результаты расчетов оптимального распределения электропроводности по толщине объемнопористого электрода ( $\gamma_{\rm T} = 0.2 \text{ См} \cdot \text{см}^{-1}$ )

№	$\chi_{\rm T} = Ax^2 + Bx + C$		К <sub>р</sub> -показатель	R – степень	
	А	В	С	равномерности	извлечения
1			0.3	0.007569	0.438
2		0.25	0.3	0.007921	0.467
3		-0.75	0.5	0.006556	0.345
4	-20	8	0.2	0.005846	0.435
5	10	-4	0.7	0.010417	0.447
6	-1.972	0.03 9	0.5	0.006277	0.344
7	2.63	-0.053	0.3	0.008852	0.521
8	-0.625	0.5	0.2	0.00799	0.478
9	5	-4	1	0.007795	0.295

Результаты расчетов позволяют сделать вывод о том, что лучшими из рассмотренных форм кривых распределения элек-

тропроводности являются убывающая линейная (строка 3, табл. 2, табл. 3) и выпуклая вверх параболическая (строка 4, табл. 2, табл. 3) зависимости  $\chi_T(x)$ . Вместе с тем следует отметить, что равномерное распределение электрохимического процесса по толщине электрода не обуславливает высокую степень извлечения металла (*R*). Наиболее равномерное распределение электрохимического процесса для выбранной системы (электроосаждесеребра из сернокислого тиомочевинного раствора) ние соответствует параболическому изменению удельной электропроводности по толщине электрода. Обеспечение достаточно равномерного распределения процесса осаждения серебра по толщине электрода и его высокой степени извлечения > 0.4 (при однократном прохождении раствора сквозь объем электрода) также характерно для параболического профиля электропроводности со смещенной от центра вершиной параболы.

Данные, приведенные в табл. 4 показывают, что высокая степень извлечения серебра обеспечивается в условиях не оптимальных с точки зрения равномерного распределения целевого электрохимического процесса по толщине электрода, что также согласуется с теоретическими представлениями о функционировании электродов из УВМ. Известно, что высокая степень извлечения металла на УВЭ достигается в условиях работы всего или значительного объема электрода на предельном диффузионном токе. В этом случае распределение процесса по толщине электрода является не равномерным, так как подчиняется экспоненциальной зависимости.

В табл. 4 представлены расчеты распределения электропроводности с наибольшей степенью извлечения металла. Из таблицы видно, что больше всего металла извлекается, когда функция распределения электропроводности возрастающая (будь то прямая или ветвь параболы).

Таблица 4. Расчеты распределения электропроводности с наибольшей степенью извлечения металла

N⁰	$\chi_{\rm T} = A$	$Ax^2 + Bx + C$		К <sub>р</sub> -показатель	К <sub>р</sub> -показатель	R –
	Α	В	С	равномерности	равномерности	степень
				(по потенциалу)	(по току)	извлече-
						ния
1			1	0.015899	0.000487	0.431
2		1.75	0.1	0.014047	0.000441	0.5949
3		-0.5	0.6	0.013800	0.000422	0.406
4	-10	4	0.3	0.011317	0.000355	0.428
5	22.5	-9	1	0.1799360	0.000533	0.4336
6	-2.63	0.053	0.7	0.0133659	0.000394365	0.376
7	5.917	- 0.118	0.101	0.0148815	0.000068	0.601
8	- 5.625	4.5	0.1	0.0136425	0.000067	0.601
9	3.125	-2.5	1	0.0151950	0.000085	0.399

Очевидно, что оптимальное распределение электропроводности по толщине электрода будет определяться индивидуальными свойствами системы электрод-раствор (удельными электропроводностями раствора и электродного материала, кинетикой электродного процесса), толщиной электрода, токовым и гидродинамическим режимом, наличием параллельно протекающих электродных реакций и др.

Поэтому параметры (A, B, C) зависимостей  $\chi_T(x)$  должны определяться посредством оптимизации для каждого конкретного электрохимического процесса электроосаждения на проточный объемно-пористый электрод.

Приведенные выше результаты свидетельствуют о корректности предложенного подхода для решения поставленной задачи и позволяют в дальнейшем рассмотреть влияние параметров электрода, электролита и процесса электролиза на оптимальное распределение электропроводности ТПЭ в процессах, связанных с осаждением металлов с учетом основных положений проведения исследований в этом направлении, изложенных в [5, 8].

## Литература

- 1. ВАРЕНЦОВ В.К.// Интенсификация электрохимических процессов. /Под ред. А.П. Томилова. М. Наука, 1988. С. 94 118.
- 2. ВАРЕНЦОВ В.К. // Химия в интересах устойчивого развития, 1997. В. 5. С 147 – 156.
- 3. ВАРЕНЦОВ В.К. // Известия СО АН СССР. Сер. хим. наук, 1988. В. 3. С. 124-131.
- 4. КОШЕВ А.Н., ВАРЕНЦОВ В.К., КАМБУРГ В.Г. // Известия СО АН СССР. Серия хим. наук, 1984. В. 17. С. 24 – 27.
- 5. ВАРЕНЦОВ В.К. КОШЕВ А.Н. // Известия СО АН СССР. Серия хим. наук, 1988. № 12. С. 117 -125.
- 6. ВАРЕНЦОВ В.К., ВАРЕНЦОВА В.И. // Журн. прикладной химии, 1999, № 4, С.605-609.
- ВАРЕНЦОВ В.К. ВАРЕНЦОВА В.И. // Электрохимия, 2001. Т. 37. С. 811-820.
- 8. КОШЕВ А.Н., ВАРЕНЦОВ В.К., ГЛЕЙЗЕР Г.Н. // Электрохимия, 1992, Т. 28, С. 1265-1270.
- 9. БЕК Р.Ю., ЗАМЯТИН А.П. // Электрохимия, 1978. Т. 14. С. 1196 1201.
- 10. КОШЕВ А.Н., ВАРЕНЦОВ В.К., ГЛЕЙЗЕР Г.Н. Влияние заполнения проточного объемно-пористого катода осаждающимся металлом на электропроводность твердой фазы системы электрод-электролит // Электрохимия, 1992, №8, С. 1270-1274.

## ARTICLE TITLE (CONTROL BY ELECTROCHEMIKAL REACTOR WITH FLOW THREE-DIMENSIONAL ELECTRODE BY MEANS OF OPTIMUM DISTRIBUTION OF CONDUCTION OF THE SYSTEM)

Irina Gvozdeva, Penza State University of the Architecture and Building, lecturer, Penza (gvozdev@pguas.ru).

Alexander Koshev, Penza State University of the Architecture and Building, Penza, Doctor of Chemical Science, professor (koshev@pguas.ru).

**Valery Varentsov**, Novosibirsk State Technical University, Doctor of the Technical Sciences.

Abstract: The mathematical model of stationary oxidative-reducing process in electrochemikal systems with the leaking volume-porous electrode is a differential equation system with the very nonlinear right-hand part. The solution of this system has a classical instability property. The boundary conditions of problem for some part of functions have been assigned as the values of derivatives, and for another part of functions - as the values of own functions on the different ends of integration interval, that's lead to difficulties of numerical calculations. In this work the algorithm of calculation of the system solid phase electrical conduction as a function of the coordinate on electrode thickness have been presented to provide the uniform distribution of electrochemical process within a whole thickness of the three-dimensional porous electrode (TPE). The computational investigation of TPE behavior with different distribution of electrical conduction within the thicknes of leaking electrode has been produced.

Keywords: electrochemical system, porous electrode, mathematical model, optimization, algorithm of calculation.