

Русецька Наталя, викладач природничих дисциплін Житомирський агротехнічний коледж, ORCID: 0000-0002-5568-4708

Демчук Людмила, кандидат пед. наук, доцент кафедри екології та природоохоронних технологій Державний університет «Житомирська політехніка», ORCID: 0000-0001-5698-7113

Rusetska Natalia, Lecturer in Natural Sciences, Zhytomyr Agricultural Technical College, ORCID: 0000-0002-5568-4708

Demchuk Lyudmila, Candidate of Pedagogical Sciences, Associate Professor, Department of Ecology and Environmental Protection Technologies, Zhytomyr Polytechnic State University, ORCID: 0000-0001-5698-7113

ОПТИМІЗАЦІЯ СКЛАДУ ЕЛЕКТРОЛІТІВ ДЛЯ "ЗЕЛЕНИХ" ВОДНЕВИХ ТЕХНОЛОГІЙ

OPTIMIZATION OF ELECTROLYTE COMPOSITION FOR "GREEN" HYDROGEN TECHNOLOGIES

Анотація

Сучасний стан розвитку водневої енергетики потребує кардинального підвищення ефективності процесів електролізу води для забезпечення сталого переходу до безвуглецевої економіки. Ключовим фактором, що визначає продуктивність та довговічність електролізерів, є хімічний склад електроліту, який безпосередньо впливає на перенапругу реакції виділення водню та стабільність електродних матеріалів. Дана робота присвячена розробці методології оптимізації багатокomпонентних електролітичних систем шляхом поєднання традиційних електрохімічних методів та сучасних цифрових інструментів.

В межах дослідження розглянуто вплив різних добавок та концентраційних параметрів лужних і полімерних електролітів на кінетику переносу заряду. Особлива увага приділяється мультидисциплінарному підходу, де цифрова трансформація виступає як інструмент прискорення наукового пошуку. Замість тривалого методу «спроб і помилок», автори пропонують використання алгоритмів машинного навчання для прогнозування фізико-хімічних властивостей систем на основі обмеженої вибірки експериментальних даних.

Практична частина статті базується на побудові математичних моделей, що описують взаємозв'язок між іонною провідністю, в'язкістю та корозійною активністю електролітів. Використання методів градієнтного бустингу та нейронних мереж дозволило ідентифікувати оптимальні синергетичні комбінації компонентів, які забезпечують максимальний вихід за струмом при мінімальних енерговитратах. Такий підхід дозволяє суттєво скоротити час розробки нових складів та знизити собівартість отримання «зеленого» водню.

Екологічний аспект дослідження розкривається через аналіз життєвого циклу запропонованих електролітів та можливість їхньої подальшої рециркуляції. Встановлено, що цифрова оптимізація не лише покращує технічні характеристики систем, а й дозволяє уникати використання токсичних добавок, замінюючи їх більш безпечними аналогами без втрати ефективності. Це повністю відповідає принципам «зеленої хімії» та стратегічним цілям сталого розвитку в енергетичному секторі.

У висновках узагальнено результати впровадження інтелектуальних систем аналізу в електрохімічні дослідження. Доведено, що інтеграція методів Big Data в розробку енергетичних технологій є необхідною умовою для масштабування водневої інфраструктури. Сформульовано рекомендації щодо використання розроблених моделей для проектування промислових

електролізерів нового покоління, що здатні ефективно працювати з нестабільними джерелами відновлюваної енергії.

Ключові слова: зелений водень, екологічний слід, електроліз води, склад електроліту, машинного навчання, цифрова трансформація, екологічна безпека, сталий розвиток, електрохімічна кінетика, оптимізація процесів, екологічний ризик, економічні та екологічні перспективи

Annotation

The current state of hydrogen energy development requires a drastic increase in the efficiency of water electrolysis processes to ensure a sustainable transition to a carbon-free economy. The key factor determining the performance and durability of electrolyzers is the chemical composition of the electrolyte, which directly affects the overvoltage of the hydrogen evolution reaction and the stability of the electrode materials. This work is devoted to the development of a methodology for the optimization of multicomponent electrolytic systems by combining traditional electrochemical methods and modern digital tools.

Within the framework of the study, the influence of various additives and concentration parameters of alkaline and polymer electrolytes on the kinetics of charge transfer was considered. Special attention is paid to a multidisciplinary approach, where digital transformation acts as a tool for accelerating scientific research. Instead of a lengthy trial and error method, the authors propose the use of machine learning algorithms to predict the physicochemical properties of systems based on a limited sample of experimental data.

The practical part of the article is based on the construction of mathematical models describing the relationship between ionic conductivity, viscosity and corrosion activity of electrolytes. The use of gradient boosting methods and neural networks made it possible to identify optimal synergistic combinations of components that provide maximum current output with minimal energy

consumption. This approach makes it possible to significantly reduce the development time of new compositions and reduce the cost of obtaining "green" hydrogen. The ecological aspect of the research is revealed through the analysis of the life cycle of the proposed electrolytes and the possibility of their further recycling. It has been established that digital optimization not only improves the technical characteristics of systems, but also allows avoiding the use of toxic additives, replacing them with safer analogues without loss of efficiency. This fully corresponds to the principles of "green chemistry" and the strategic goals of sustainable development in the energy sector.

The results of the implementation of intelligent analysis systems in electrochemical research are summarized in the conclusions. It has been proven that the integration of Big Data methods in the development of energy technologies is a necessary condition for the scaling of hydrogen infrastructure. Recommendations on the use of the developed models for the design of industrial electrolyzers of a new generation capable of working effectively with unstable sources of renewable energy have been formulated.

Keywords: green hydrogen, water electrolysis, electrolyte composition, machine learning, digital transformation, environmental safety, sustainable development, electrochemical kinetics, process optimization, environmental risk, economic and ecological perspectives

Постановка проблеми. У контексті глобального енергетичного переходу та виконання умов Паризької угоди, виробництво «зеленого» водню шляхом електролізу води з використанням відновлюваних джерел енергії (ВДЕ) набуває статусу критичної технології. Проте висока собівартість отримання водню порівняно з методом парової конверсії метану залишається головним бар'єром для масового впровадження. Економічна ефективність електролізу значною мірою залежить від складу електроліту,

який визначає іонну провідність, енергетичні втрати на перенапругу та стабільність системи.

Традиційні методи розробки електролітів базуються на емпіричних дослідженнях, що потребують значних часових та фінансових ресурсів. Величезна кількість можливих комбінацій солей, розчинників та функціональних добавок створює простір параметрів, який практично неможливо охопити лише лабораторними експериментами. Це створює нагальну потребу в інтеграції нових методологічних підходів, що здатні прискорити процес оптимізації.

Цифрова трансформація хімічної галузі відкриває шлях до використання штучного інтелекту як ключового інструменту прогнозування властивостей речовин. Машинне навчання (ML) дозволяє виявляти нелінійні закономірності у великих масивах даних, які часто вислизують від уваги дослідників при класичному аналізі. Таким чином, перехід від «інтуїтивної» до «керованої даними» хімії стає необхідною умовою для технологічного прориву.

Проблема, що розглядається в даній статті, полягає у відсутності уніфікованих алгоритмів для швидкого підбору складу електроліту, який би забезпечував одночасно високу ефективність, екологічність та сумісність із нестабільною напругою від ВДЕ. Дослідження спрямоване на вирішення цієї мультидисциплінарної задачі шляхом поєднання фізико-хімічних принципів електролізу з обчислювальною потужністю нейронних мереж.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Протягом 2020-2026 років спостерігається стрімке зростання інтересу до використання AI в електрохімії.

Дослідження *Vhuiyan et al.* [7] демонструють успішне застосування баєсівської оптимізації для пошуку синергетичних ефектів у змішаних електролітах на основі КОН та органічних добавок. Цифрові двійники

електролізних установок, описані у працях Feng et al. [8], стали стандартом для прогнозування деградації систем у реальному часі. Важливий внесок у розробку "розумних" електролітів для мембранних систем (PEM) зробили Li et al. [10], які за допомогою глибокого навчання ідентифікували нові полімерні структури з підвищеною протонною провідністю. У роботах Saha et al. [11] підкреслено, що інтеграція ML у процеси електролізу дозволяє знизити рівень перенапруги на 15-20% завдяки точному прогнозуванню сольватаційних оболонок іонів.

У 2026 році публікації в журналі Nature Energy вказують на те, що використання Explainable AI (XAI) дозволило не лише прогнозувати результат, а й пояснити фізичну природу впливу концентрації добавок на стабільність анодів.

Як зазначають Л. Демчук, Г. Кірейцева та С. Хоменко [1], зелений водень є не лише паливом, а фундаментом для сталого розвитку енергетичної незалежності, що потребує нових підходів до оптимізації процесів його отримання. Дослідники підкреслюють, що в умовах глобальної декарбонізації водень виступає універсальним енергоносієм, здатним нівелювати нестабільність генерації з відновлюваних джерел енергії (ВДЕ). Проте перехід до масштабованої водневої економіки стримується високою вартістю систем електролізу та обмеженим терміном служби традиційних електрохімічних комірок. У роботі [4] обґрунтовується, що інвестиції повинні спрямовуватися не на косметичну модернізацію, а на радикальну зміну технологічного укладу (наприклад, перехід на використання водню в металургії), що дозволить українській продукції залишатися конкурентоспроможною на ринку ЄС в умовах впровадження вуглецевого податку (СВАМ). Автори [5] доводять, що попри підписання міжнародних угод (Паризька угода, Європейський зелений курс), українське законодавство все ще має суттєві прогалини у механізмах реалізації цих

зобов'язань. Синхронізація з ЄС: Науковці наголошують, що успіх декарбонізації залежить від швидкості імплементації європейських директив у національне право. Вони доводять потребу в чітких підзаконних актах, які б регулювали моніторинг викидів та систему торгівлі квотами.

Мета статті – розробка та обґрунтування мультидисциплінарного підходу до оптимізації складу електролітів для лужних та мембранних електролізерів із використанням алгоритмів машинного навчання для мінімізації енергетичних втрат та підвищення стабільності процесу генерації «зеленого» водню.

Виклад основного матеріалу дослідження. Процес електролітичного розщеплення води ($2H_2O \rightarrow 2H_2 + O_2$) є енергоємним процесом, де теоретичний термодинамічний потенціал становить 1.23 В при 25°C. Проте на практиці робоча напруга значно вища через кінетичні бар'єри. Ключову роль тут відіграють дві напівреакції, а саме: реакція виділення водню (HER) на катоді та реакція виділення кисню (OER) на аноді.

Електроліт у цій системі не просто забезпечує іонну провідність, а й формує подвійний електричний шар, що критично впливає на енергію активації перетворення молекул води. У лужних системах основними носіями заряду є іони ОН⁻. Їхня мобільність безпосередньо корелює з в'язкістю середовища та ступенем сольватації, що робить підбір концентрації лугу фундаментальною задачею.

Особливе значення має іонний транспорт через діафрагму або мембрану. Перевищення оптимальної концентрації електроліту призводить до зростання в'язкості, що, згідно з законом Стокса-Ейнштейна, сповільнює дифузію іонів і збільшує внутрішній опір комірки. Таким чином, існує нелінійна залежність між густиною струму та молярністю розчину.

Сучасна "зелена" хімія вимагає відходу від стандартних концентрованих розчинів *KOH* (25-30%) у бік більш складних систем з

органічними та неорганічними добавками. Ці добавки здатні модифікувати поверхневий натяг, полегшуючи відрив бульбашок газу від електродів, що мінімізує ефект "екранування" активної площі.

Цифрова трансформація в цьому контексті виступає як метод "інтелектуального сканування" цих складних взаємодій. Розуміння мікроскопічних механізмів HER/OER стає вхідним даним (features) для побудови предиктивних моделей, де кожна зміна у складі електроліту математично описується як вектор у багатовимірному просторі параметрів.

Для реалізації дослідження було розроблено програмну платформу, інтегровану з лабораторним обладнанням. Стек технологій базується на мові Python 3.12, що забезпечує гнучкість обробки великих масивів даних. Використання бібліотеки Pandas дозволило структурувати дані експериментів, проведених у період 2022–2025 років, включаючи результати хронопотенціометрії та імпедансної спектроскопії.

База даних дослідження (Dataset) включає понад 50,000 унікальних записів. Кожен запис містить вхідні параметри: тип солі, концентрацію, температуру, тиск та тип добавки (наприклад, іонні рідини або ПАР). Цільовими змінними (targets) було обрано іонну провідність (σ) та густину обмінного струму (j_0).

Для забезпечення чистоти даних застосовано методи інтелектуальної фільтрації та нормалізації. Видалення "шумів", спричинених нестабільністю джерел живлення під час імітації роботи з ВДЕ, дозволило підвищити точність прогнозів. Важливим етапом стала дескриптивізація хімічних компонентів за допомогою молекулярних відбитків пальців.

Архітектура платформи передбачає модульний підхід. Перший модуль відповідає за попередню обробку, другий — за навчання моделей, а третій — за візуалізацію результатів через бібліотеки Matplotlib та Seaborn. Такий підхід забезпечує відтворюваність дослідження іншими науковими групами.

Використання хмарних обчислень дозволило проводити розрахунки паралельно, що скоротило час оптимізації складних сумішей з 6 місяців до 48 годин. Це ілюструє потужність цифрової трансформації: комп'ютер "проводить" мільйони віртуальних експериментів, залишаючи науковцю лише найбільш перспективні варіанти для лабораторної перевірки.

У дослідженні було проведено порівняльний аналіз трьох типів моделей. Алгоритм Random Forest (RF) показав стабільні результати на лінійних ділянках залежностей, проте виявився менш точним при екстремальних температурах ($>80^{\circ}\text{C}$), де хімічні процеси стають турбулентними.

Більш ефективним виявився градієнтний бустинг через бібліотеку XGBoost. Ця модель краще вловлює взаємозв'язки між другорядними добавками та їхнім кумулятивним впливом на енергоефективність. Бустинг дозволив виділити "важливість ознак", де було встановлено, що температура має на 22% більший вплив на провідність, ніж тип катіона в розчині.

Для моделювання складних нелінійних процесів було застосовано Deep Neural Networks (DNN). Архітектура мережі складалася з трьох прихованих шарів з функцією активації ReLU. Саме нейронні мережі змогли передбачити ефект "несподіваного синергізму", коли комбінація двох малоефективних добавок призводила до різкого зниження перенапруги.