

**DIGITAL TOOLS, AI AND HPC**  
**AS THE GAME CHANGER**  
**IN OPTIMISATION OF**  
**HYDROGEN**

**PRODUCTION**  
**TRANSPORT**  
**AND STORAGE**



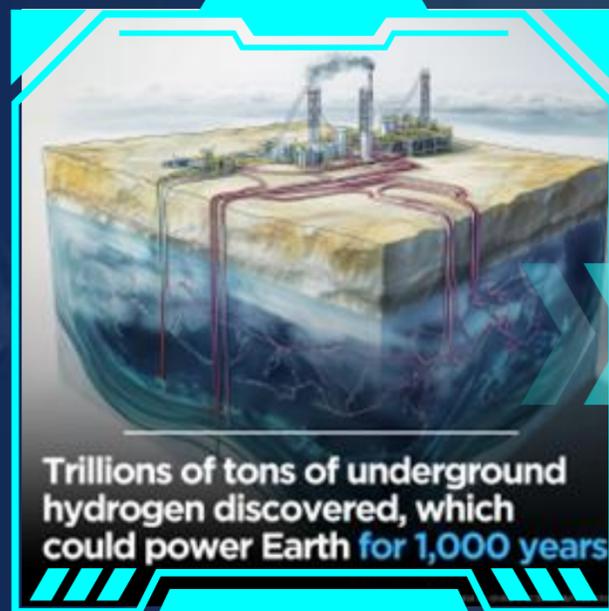
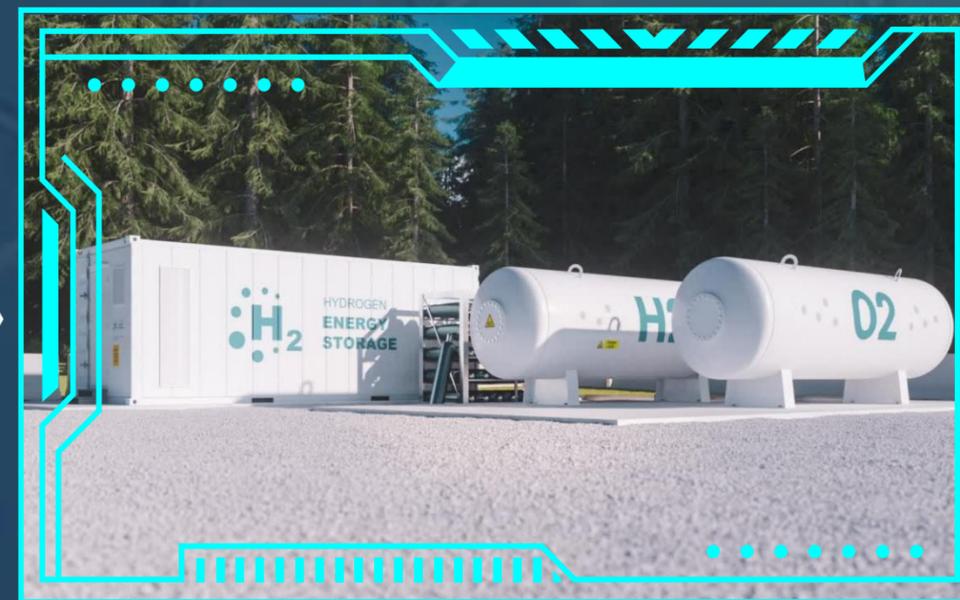
## GREEN ENERGY



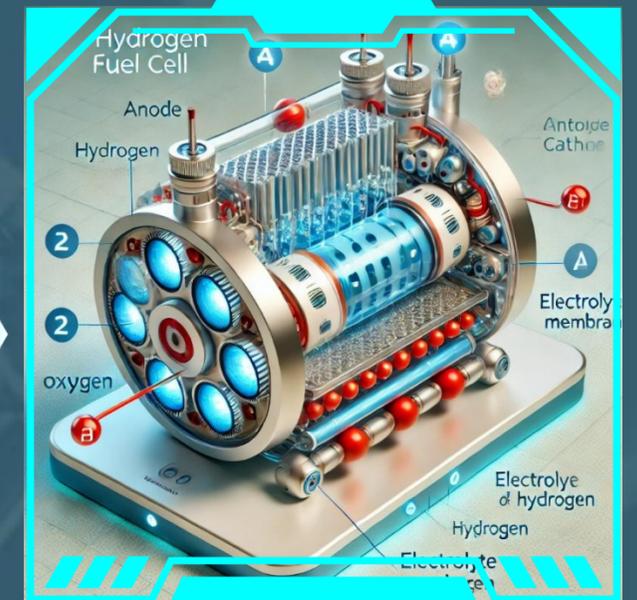
## ELECTROLYSER



## STORAGE



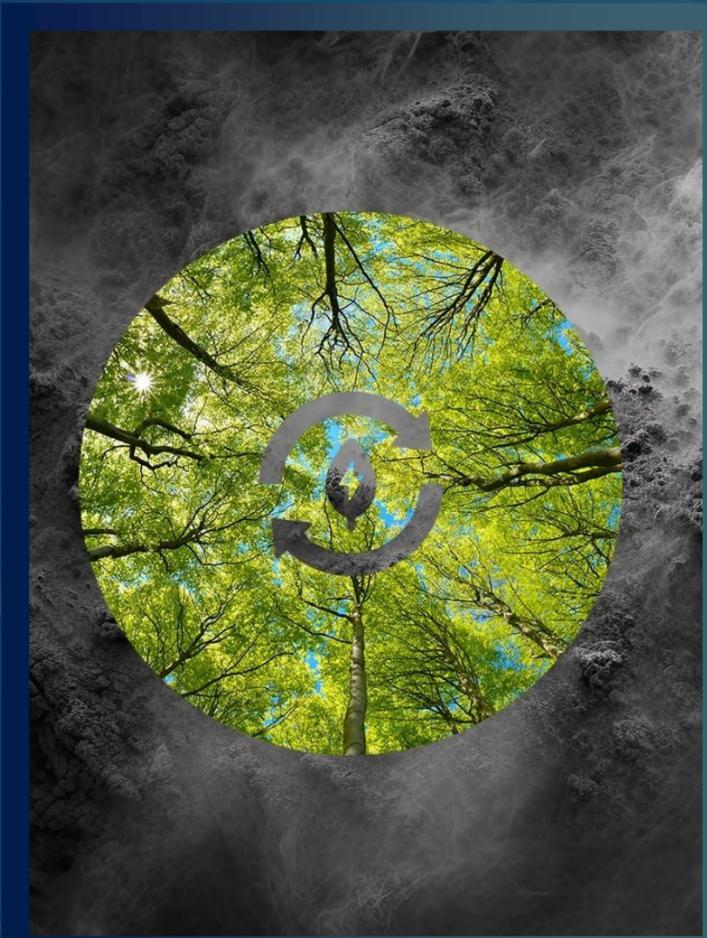
## NATURAL RESOURCES



## FUEL CELL

ADVANCED HYDROGEN RESEARCH AND DEVELOPMENT  
USB-TUO PROJECTS

 **REFRESH**



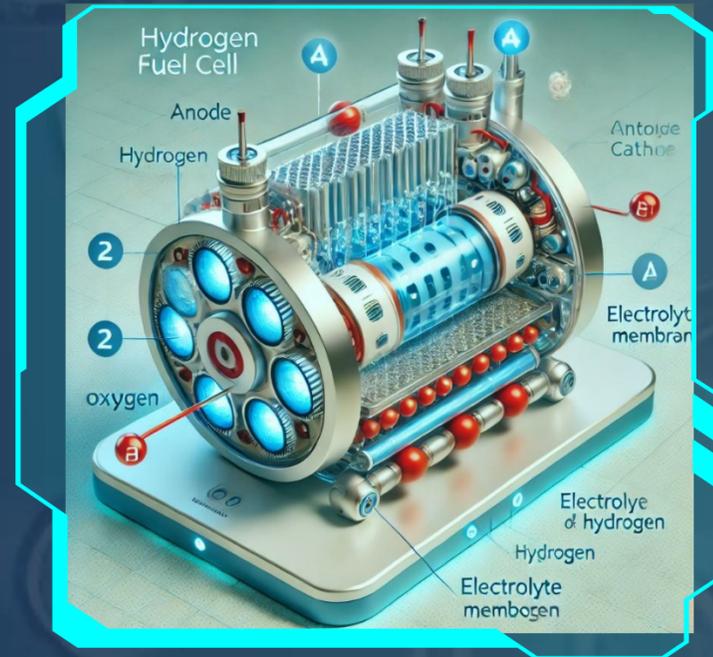
**ZEUS**



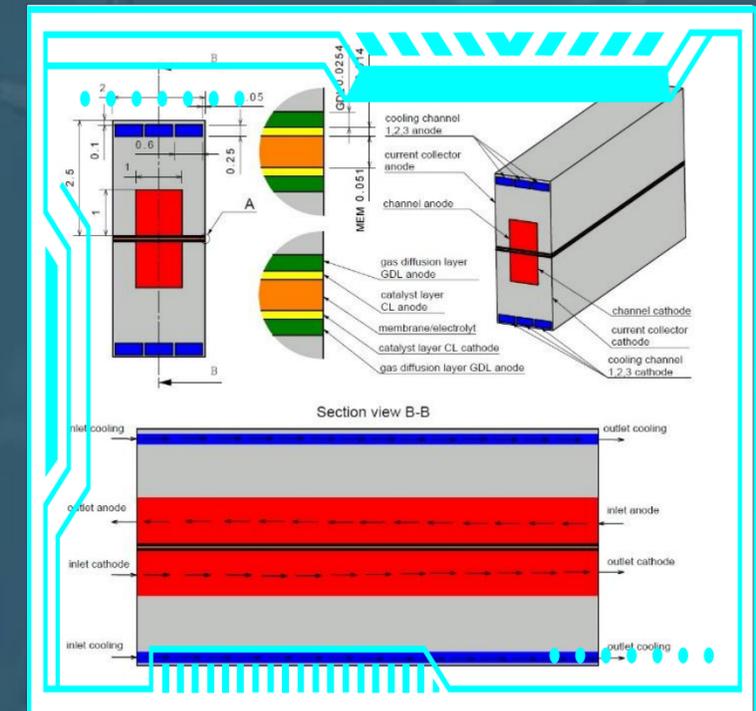
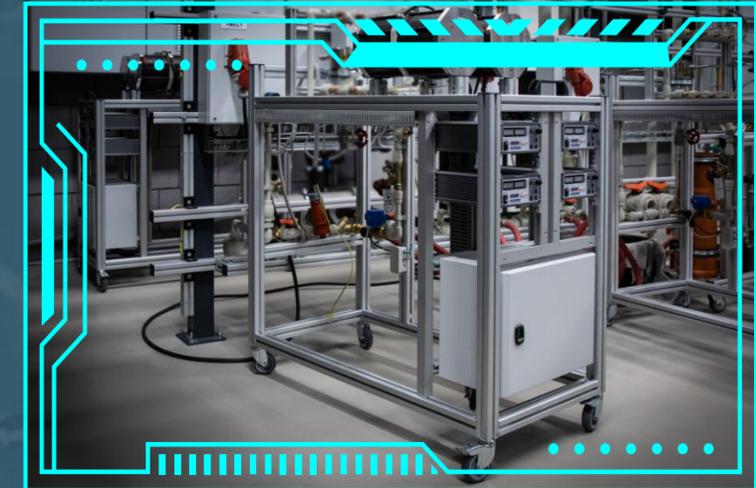
# FUEL CELL DIGITAL TWIN



 **REFRESH**

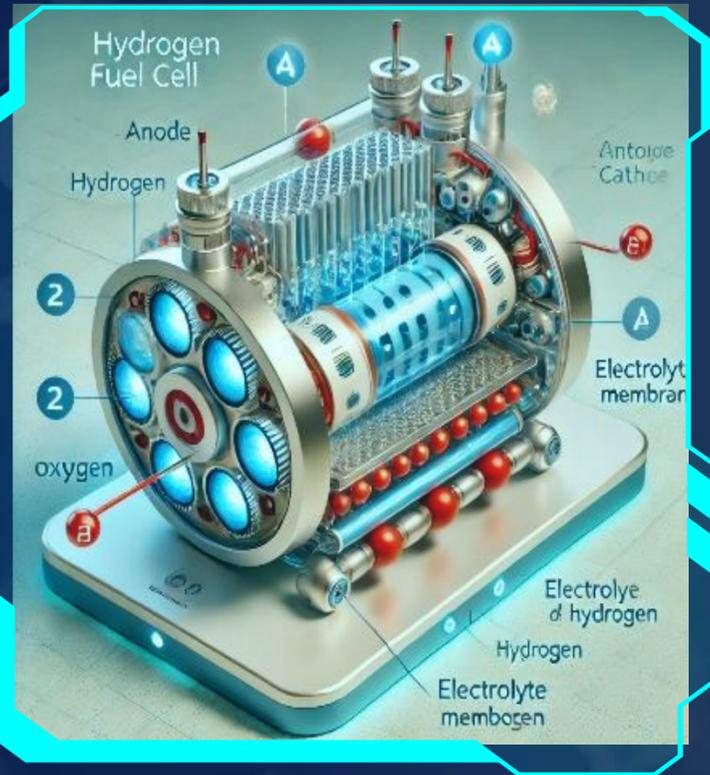


## EXPERIMENTAL DATA

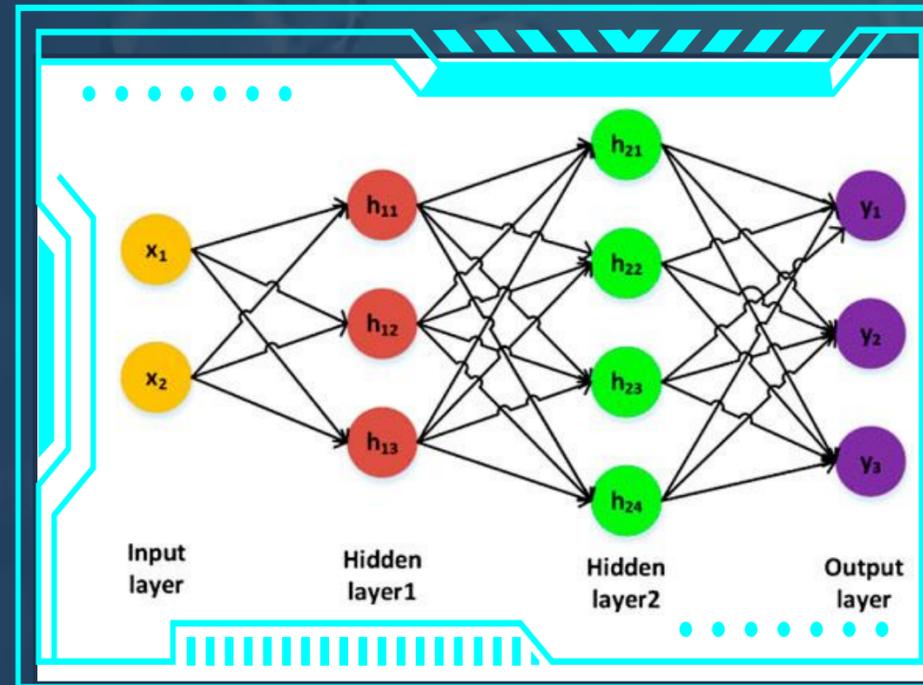


## SIMULATIONS

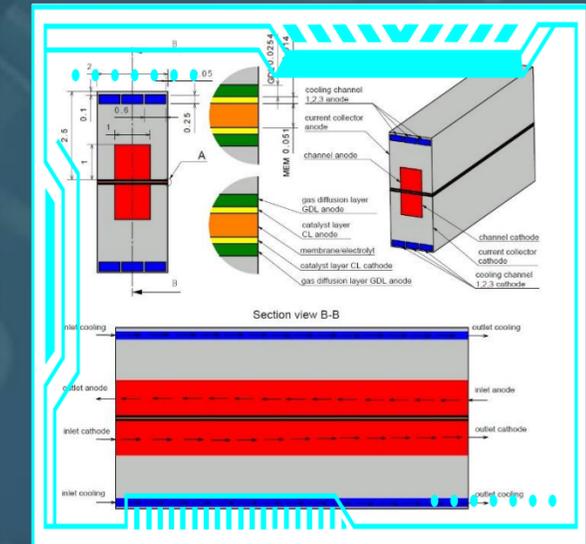
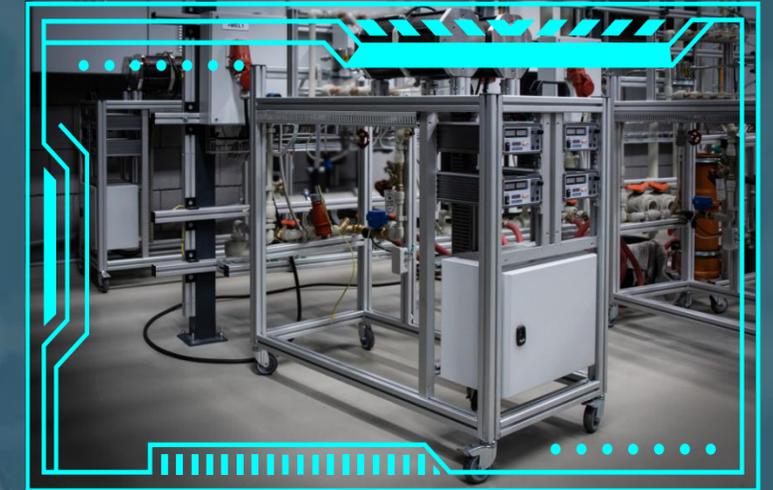
## DIGITAL TWIN



## ARTIFICIAL INTELLIGENCE

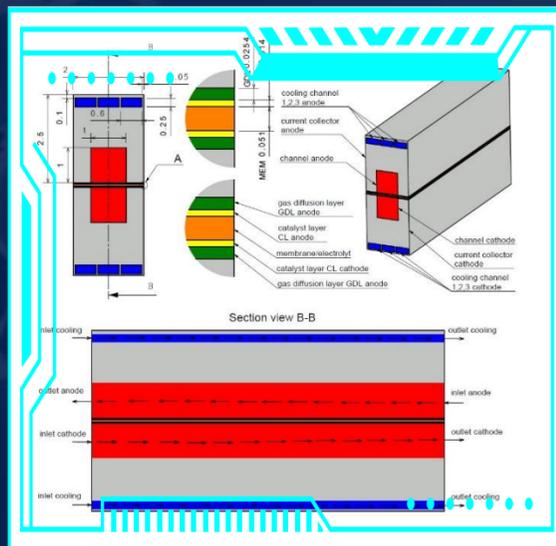


## EXPERIMENTAL DATA



## COMPUTED DATA

## SIMULATIONS



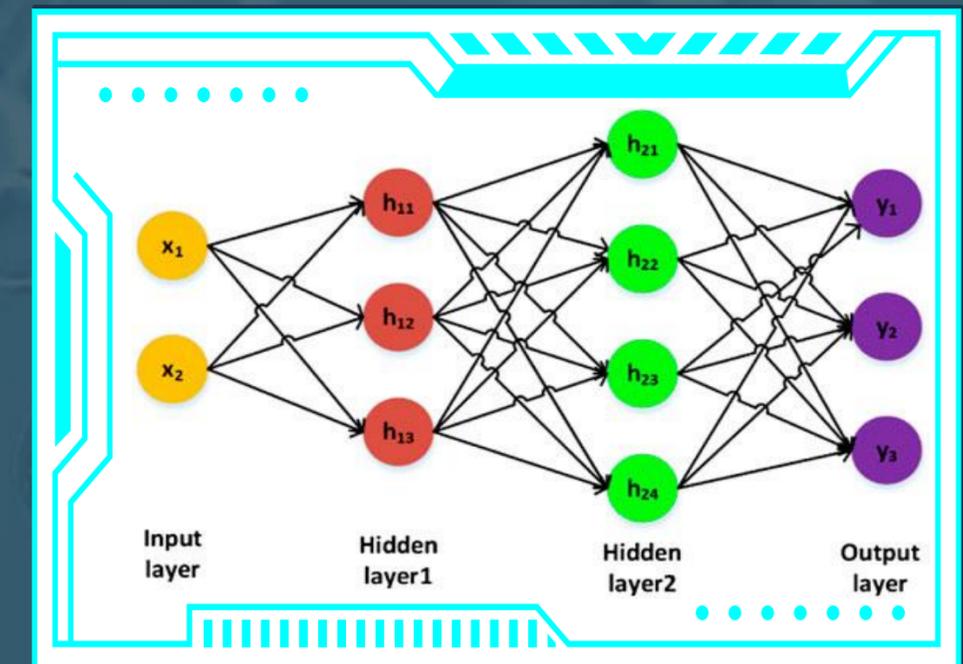
$$R_{an} = (\zeta_{an} j_{an}(T)) \left( \frac{[A]}{[A]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} \left( e^{\alpha_{an}^{act} F \eta_{an} / RT} - e^{-\alpha_{an}^{cat} F \eta_{an} / RT} \right)$$

$$j_{an}(T) = \frac{E_{an} = 0}{j_{an}^{ref}} e^{E_{an} / RT (1 - T / T_{ref}^{act})}$$

$$R_{cat} = (\zeta_{cat} j_{cat}(T)) \left( \frac{[C]}{[C]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \left( e^{\alpha_{cat}^{act} F \eta_{cat} / RT} + e^{-\alpha_{cat}^{cat} F \eta_{cat} / RT} \right)$$

Model	Parameters	Anode	Cathode	Electrolyte
Electrochemistry				
Anode				
$i_{ref}$ (A/m <sup>2</sup> )		$i_{ref}$ (A/m <sup>2</sup> )	$i_{ref}$ (A/m <sup>2</sup> )	
$\alpha_{an}^{act}$		1.0	1.0	
$\alpha_{an}^{cat}$		1.0	1.0	
Can. Equiv. (F)		1	1	
Exch. Coeff. (s)		Exch. Coeff. (s)	Exch. Coeff. (s)	
Exch. Coeff. (a)		1	1	
Exch. Coeff. (c)		1	1	
Std. State E0 (V)		Std. State E0 (V)	Std. State E0 (V)	
0		1.2284	1.2284	
Entropy (J/gmol-K)		Entropy (J/gmol-K)	Entropy (J/gmol-K)	
0		-16330	-16330	

## ARTIFICIAL INTELLIGENCE



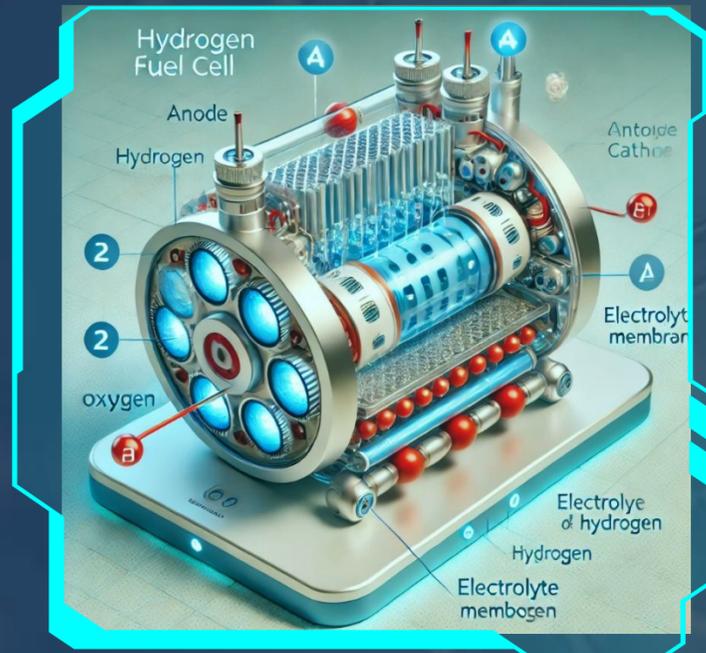
MEMBRANE PARAMETERS WILL BE  
DETERMINED USING A NEURAL NETWORK.

# FUEL CELL DIGITAL TWIN

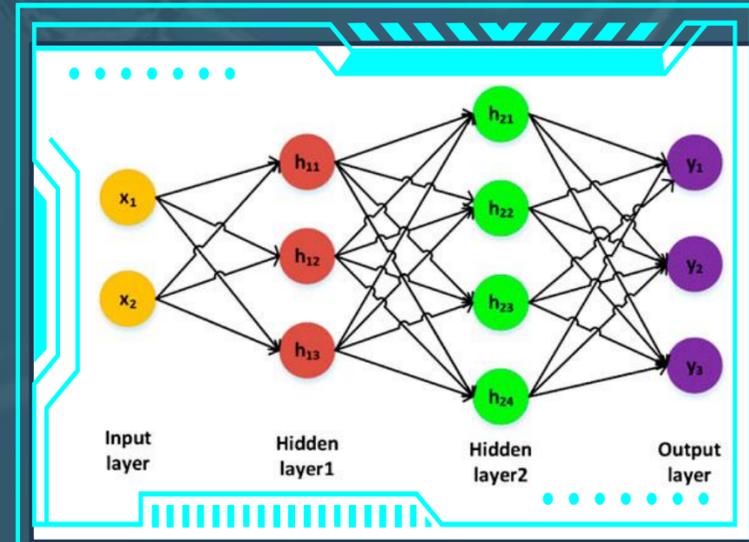
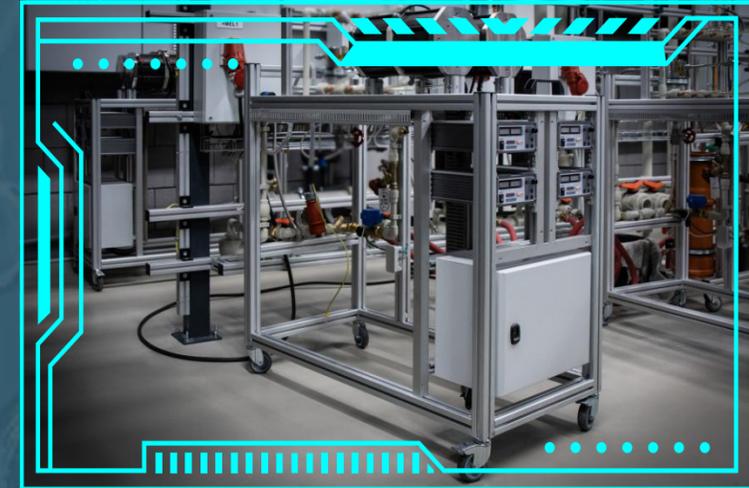


 **REFRESH**

## DIGITAL TWIN



## EXPERIMENTAL DATA



## PREDICTION



**ZEUS**

# RESEARCH AND DEVELOPMENT IN THE FIELD OF DIGITALIZATION OF HYDROGEN TECHNOLOGIES





Union of Concerned Scientists

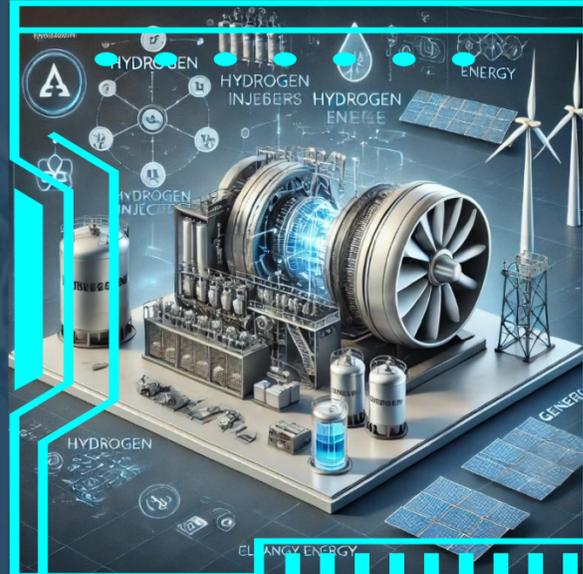
### The EQUATION

Hydrogen Combustion Is a Dead-End Technology for Heavy-Duty Trucks

December 21, 2023 | 9:21 am

ERRETT BARTHELEMY/ANGLAS

This block contains a screenshot of a webpage. The main headline reads "Hydrogen Combustion Is a Dead-End Technology for Heavy-Duty Trucks" with a sub-headline "The EQUATION". Below the text is a photograph of a road that ends abruptly at a yellow "DEAD END" sign. The page also features a search bar, a "DONATE" button, and a date "December 21, 2023 | 9:21 am".



# HYDROGEN V8!

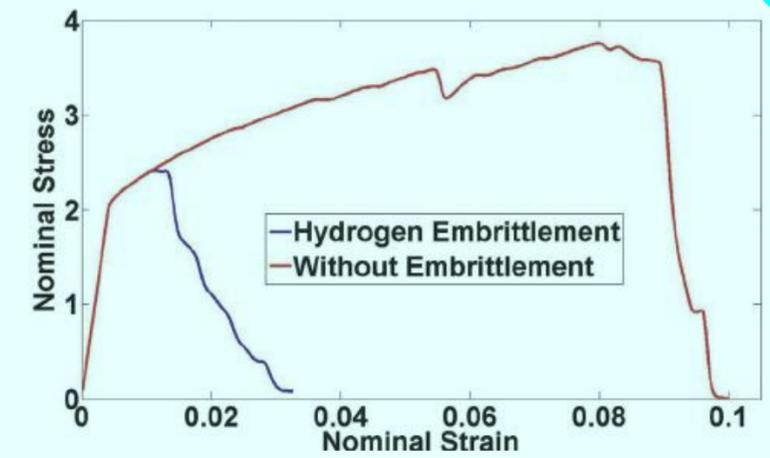


## STORAGE AND TRANSPORTATION CHALLENGES

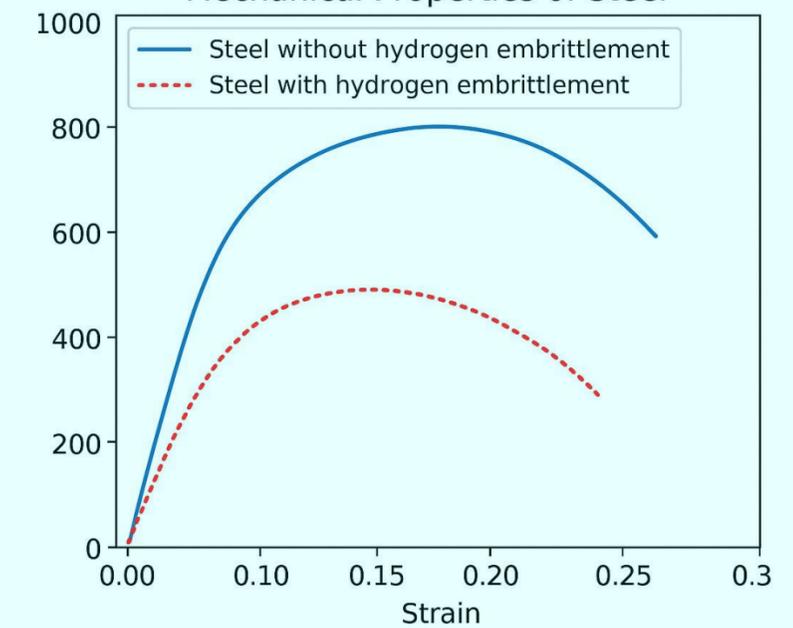
### STEEL X HYDROGEN

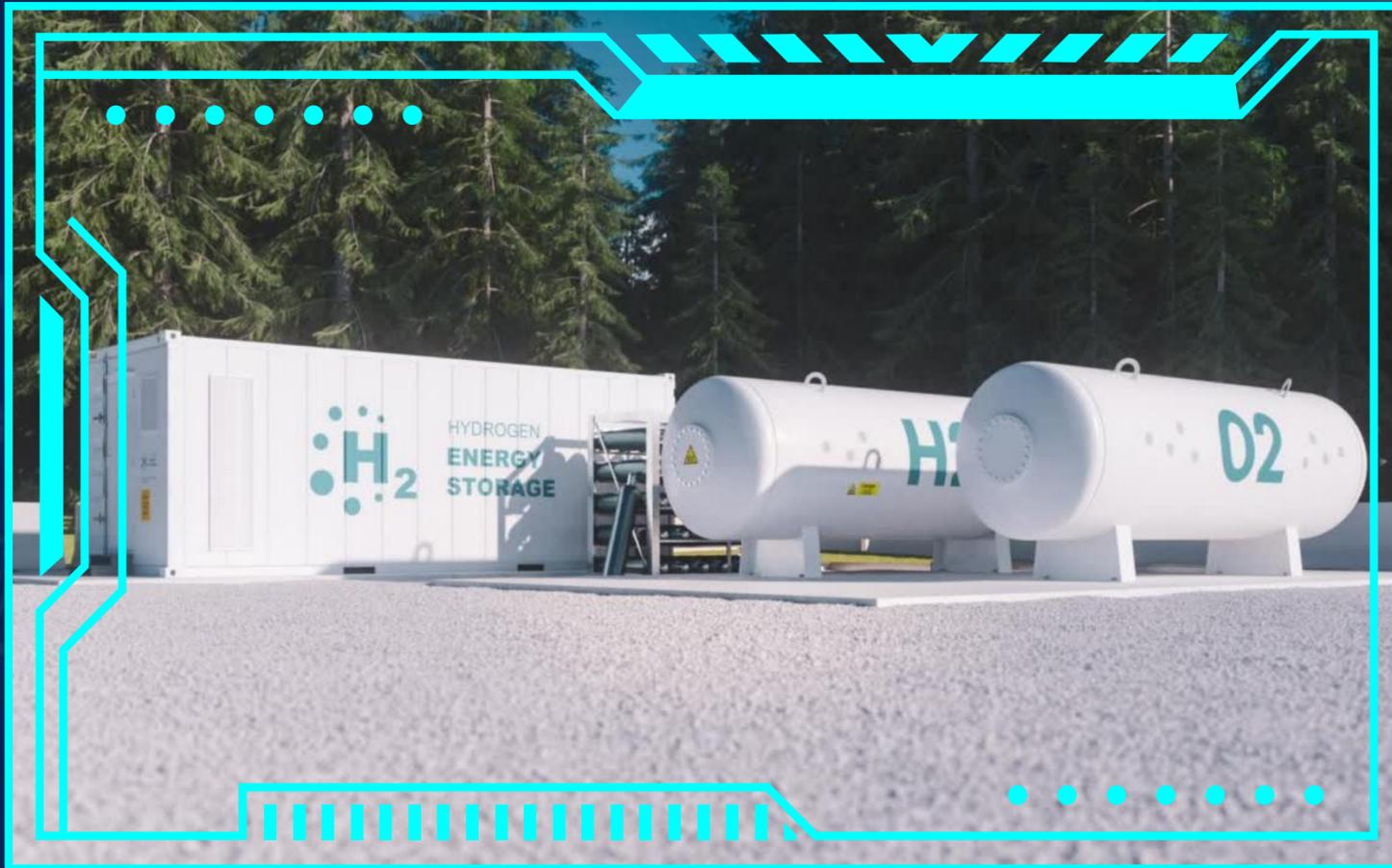


## HYDROGEN CORROSION



Effect of Hydrogen Embrittlement on Mechanical Properties of Steel





## STORAGE CONTAINER SIMULATIONS BASED ON INDUSTRY STANDARDS

ČSN EN ISO 3834-2 - Požadavky na kvalitu při tavném svařování kovových materiálů - Část 2: Komplexní požadavky na kvalitu

ČSN EN ISO 12944-2 - Nátěrové hmoty - Protikorozní ochrana ocelových konstrukcí ochrannými nátěrovými systémy - Část 2: Klasifikace vnějšího prostředí

ČSN 078304 - Tlakové nádoby na plyny - provozní pravidla

ČSN EN ISO 11114-1 - Lahve na plyny - Kompatibilita materiálů lahve a ventilu s plynným obsahem - Část 1: Kovové materiály

ČSN EN 13480-1 - Kovová průmyslová potrubí - Část 1: Obecně

ČSN EN 13480-2 - Kovová průmyslová potrubí - Část 2: Materiály

ČSN EN 13480-3 - Kovová průmyslová potrubí - Část 3: Konstrukce a výpočet

ČSN EN 13480-4 - Kovová průmyslová potrubí - Část 4: Výroba a montáž

ČSN EN 13480-5 - Kovová průmyslová potrubí - Část 5: Kontrola a zkoušení

ČSN EN ISO 1127 - Trubky z korozivzdorných ocelí - Rozměry, mezní úchytky rozměrů a hmotností na jednotku délky

ČSN EN 10216-5 - Bezešvé ocelové trubky pro tlakové nádoby a zařízení - Technické dodací podmínky - Část 5: Trubky z korozivzdorných ocelí

ČSN EN10088-3 - Korozivzdorné oceli - Část 3: Technické dodací podmínky pro polotovary, tyče, válcované dráty, profily a lesklé výrobky z ocelí odolných korozi pro obecné použití

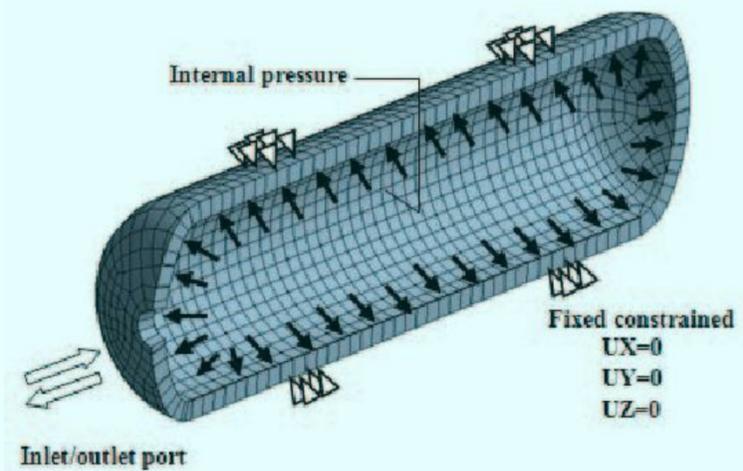
EN 736-1+3 - Armatury - Terminologie

ČSN EN 12266-1 - Průmyslové armatury - Zkoušení kovových armatur - Část 1: Tlakové zkoušky, postupy zkoušek a přijímací kritéria - Závazné požadavky

ČSN EN ISO 4126-1 - Bezpečnostní pojistná zařízení proti nadměrnému tlaku - Část 1: Pojistné ventily

ČSN EN 837-1 - Měřidla tlaku - Část 1: Tlakoměry s pružnou trubicí - Rozměry, metrologie, požadavky a zkoušení

ČSN EN 837-2 - Měřidla tlaku - Část 2: Doporučení pro volbu a instalaci tlakoměrů



**Ansys**

**ESPRESO**

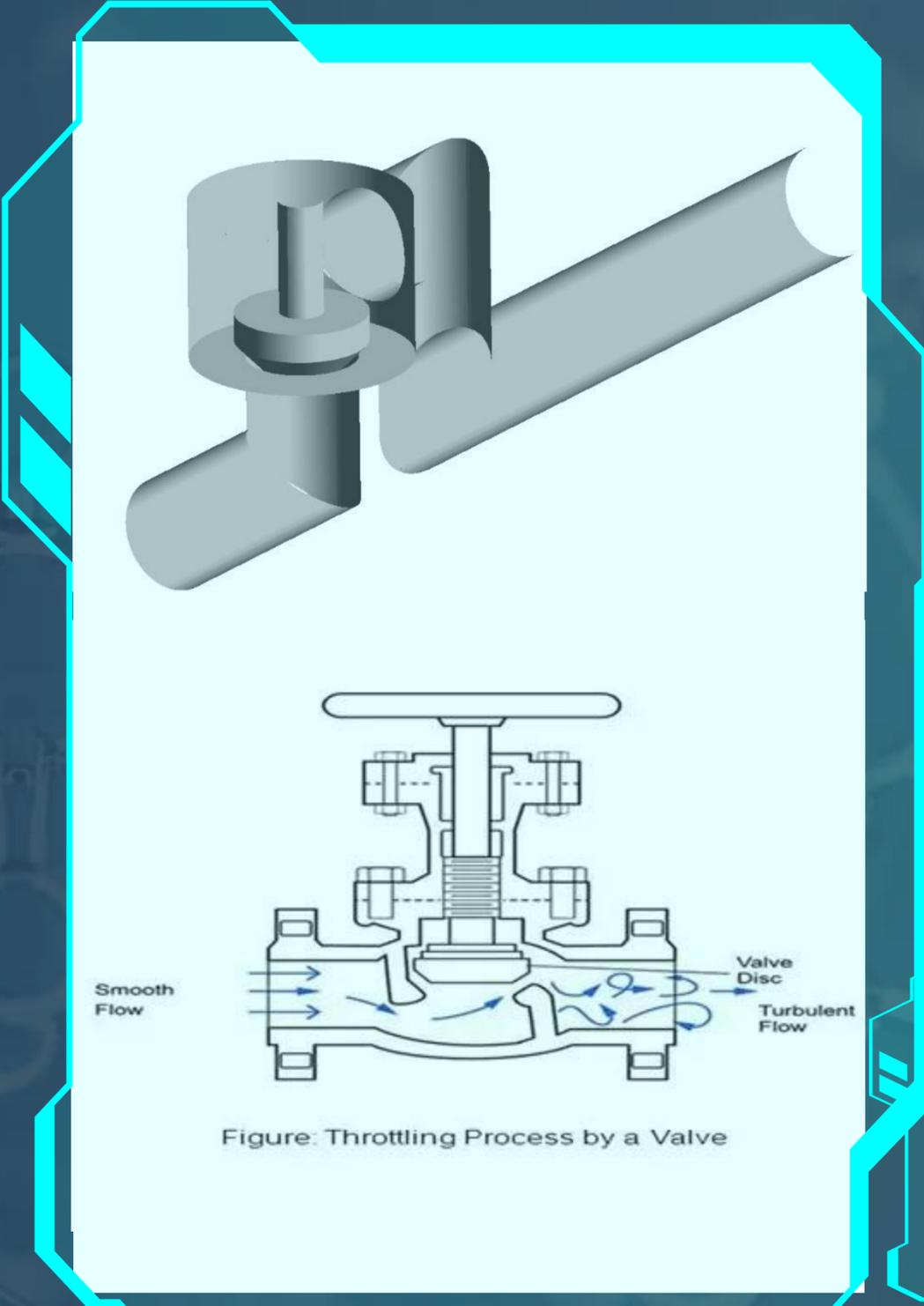
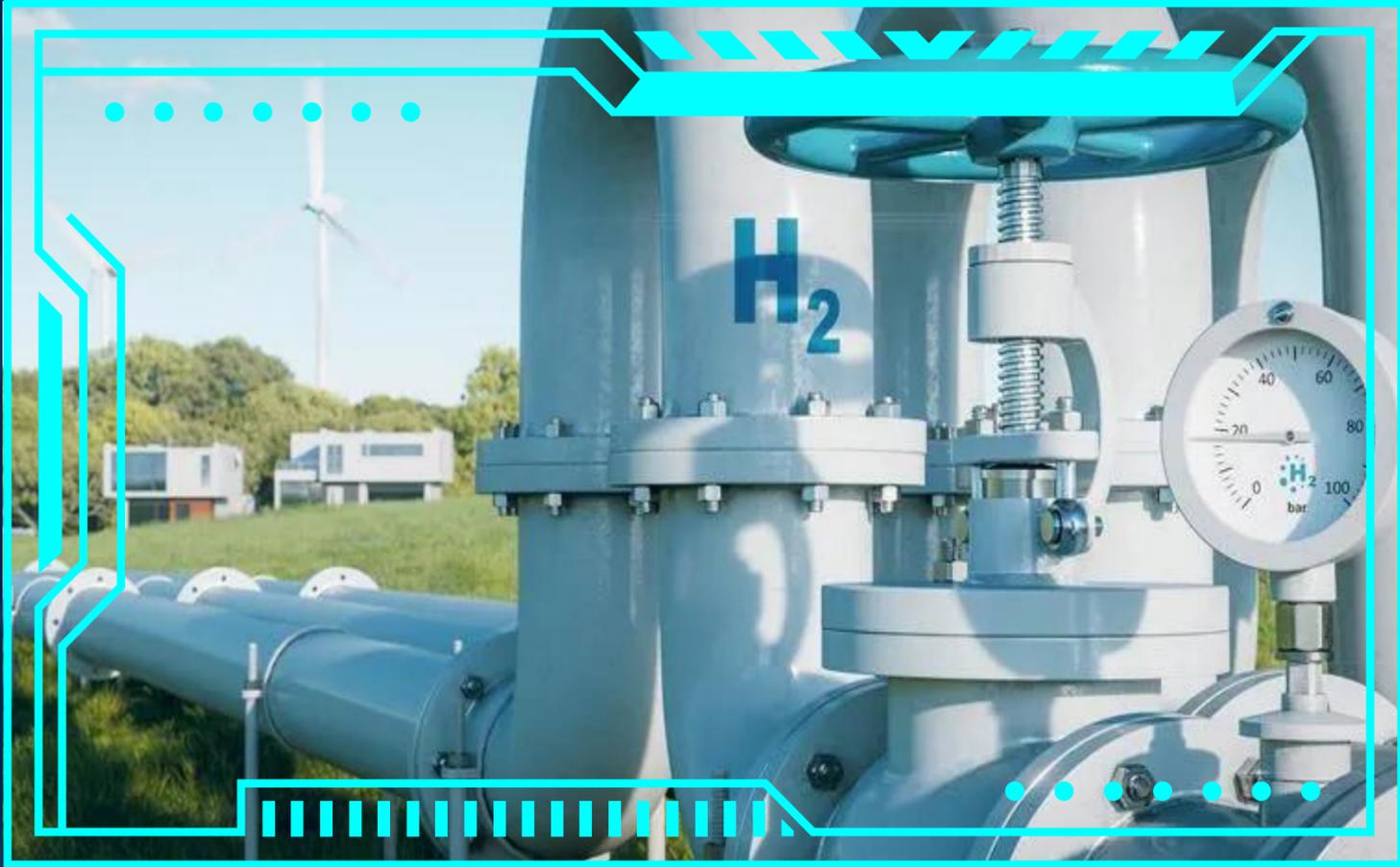


Figure: Throttling Process by a Valve

**Ansys**

OpenFOAM

# VELOCITY

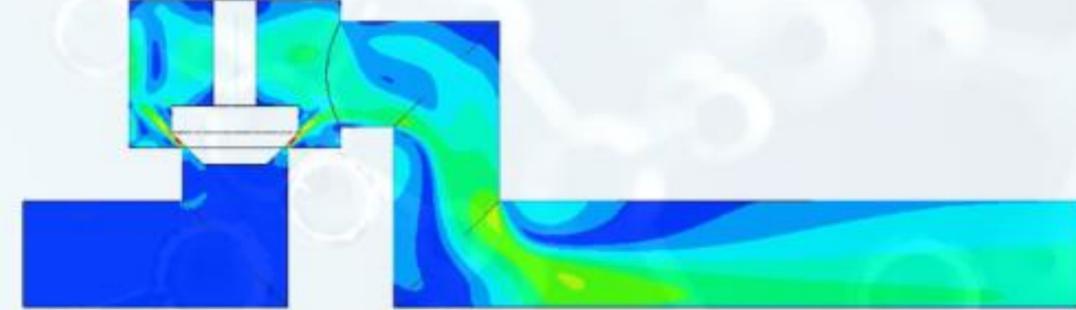


## AIR



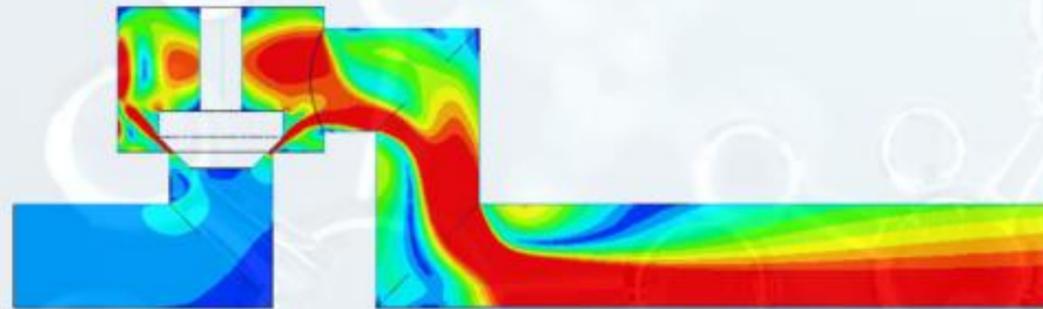
$U_{MAX}$  482 M/S

## METHANE



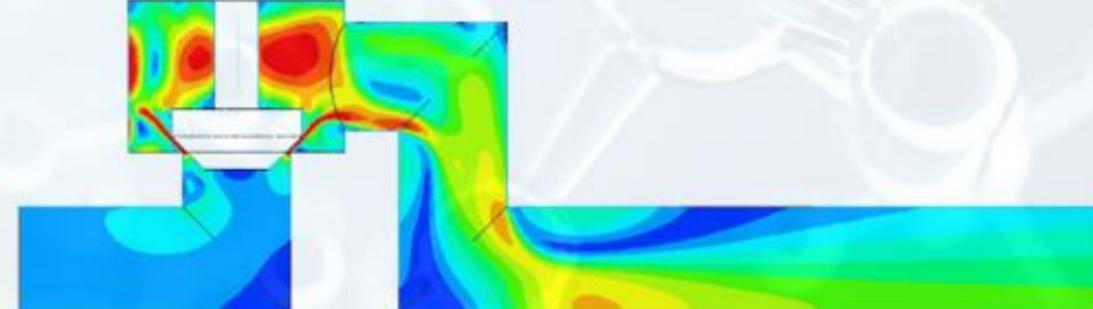
$U_{MAX}$  666 M/S

## HYDROGEN



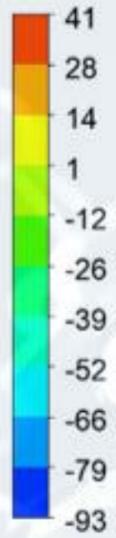
$U_{MAX}$  1821 M/S

## HYDROGEN

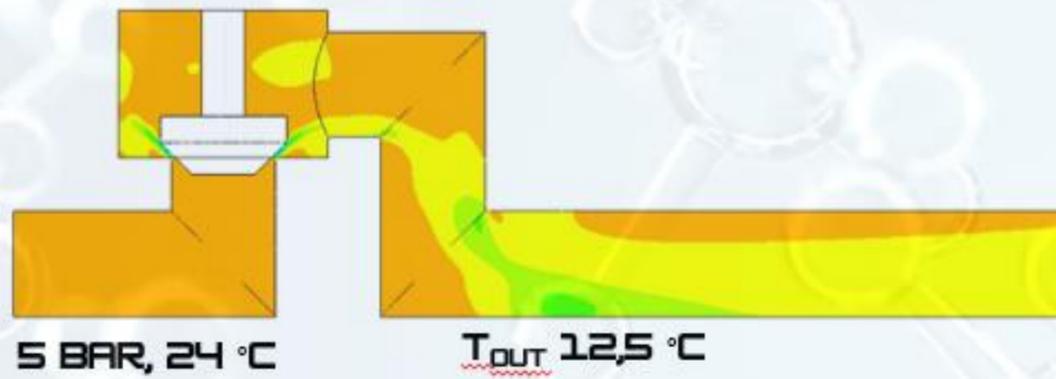


$U_{MAX}$  1506 M/S

# TEMPERATURE



**AIR**



**METHANE**



**HYDROGEN**



**HYDROGEN**





# TOMÁŠ KARÁSEK

HEAD OF NATIONAL COMPETENCE CENTER IN HPC

HEAD OF PARALLEL ALGORITHMS RESEARCH LAB

AT IT4INNOVATIONS NATIONAL SUPERCOMPUTING CENTER

VSB - TECHNICAL UNIVERSITY OF OSTRAVA

[TOMAS.KARASEK@VSB.CZ](mailto:TOMAS.KARASEK@VSB.CZ)

[WWW.IT4I.CZ](http://WWW.IT4I.CZ)

VSB TECHNICAL  
UNIVERSITY  
OF OSTRAVA

IT4INNOVATIONS  
NATIONAL SUPERCOMPUTING  
CENTER