



Aplikace umělé inteligence
a kvantového počítání v energetice

12. listopadu 2025
IT4Innovations



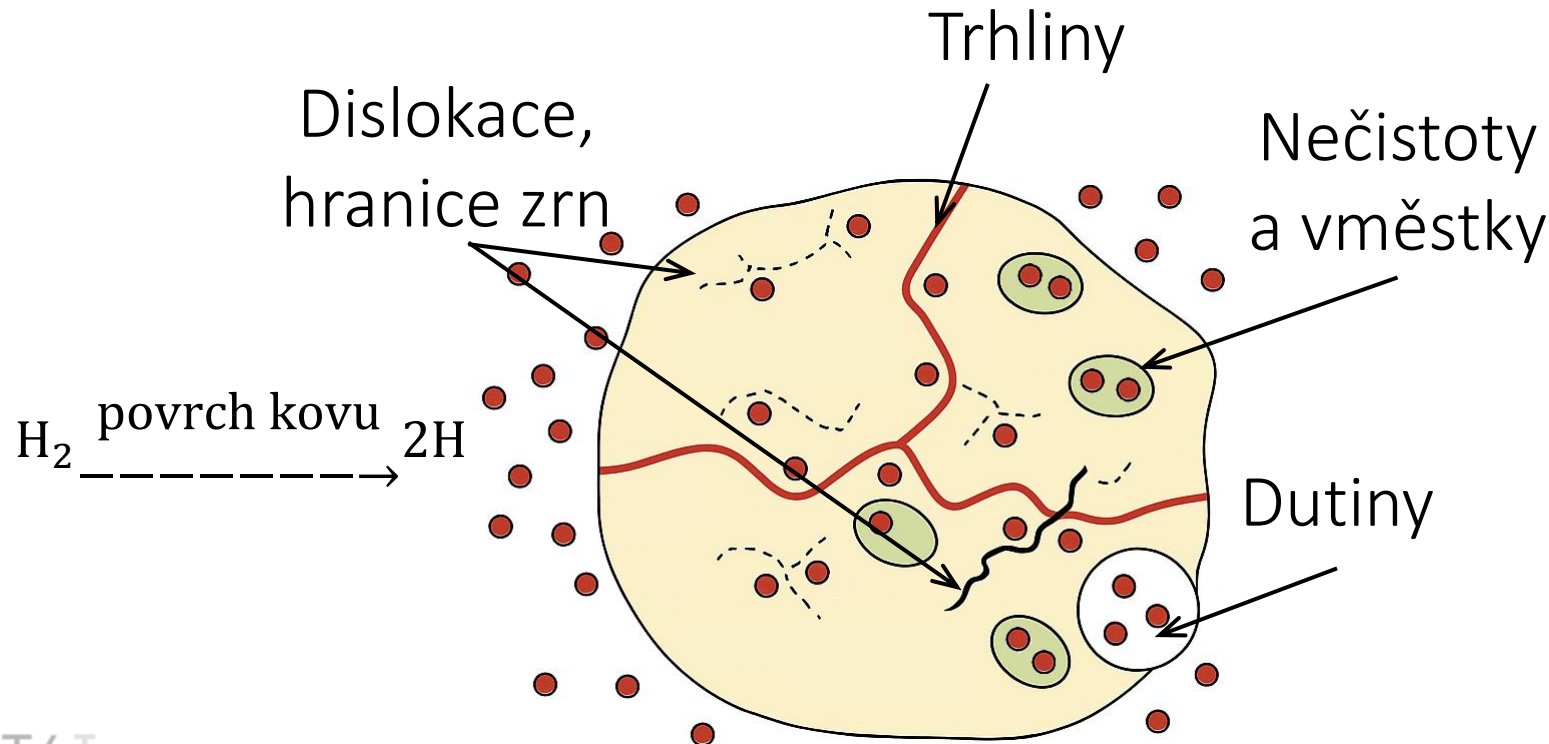
Numerické modelování poškození vodíkem

Petr Ferfecki

Laboratoř vývoje paralelních algoritmů

Motivace

- Pochopení vodíkové koroze/křehkosti způsobené působením vodíku na kov.
- Vytvoření **výpočtového modelu** interakce mezi vodíkem a strukturou s koncentratory napětí.

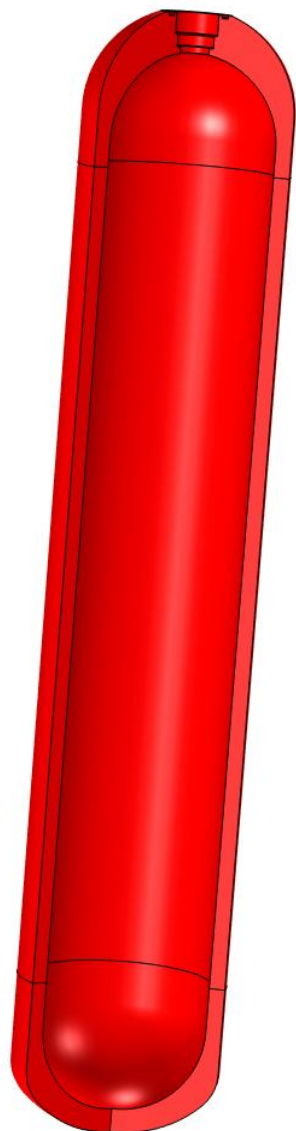


Kangal S, Kartav O, Tanoğlu M, Aktaş E, Artem HS. Investigation of interlayer hybridization effect on burst pressure performance of composite overwrapped pressure vessels with load-sharing metallic liner. *Journal of Composite Materials*. 2019;54(7):961-980. doi:[10.1177/0021998319870588](https://doi.org/10.1177/0021998319870588)

Průmyslový partner – VÍTKOVICE CYLINDERS a.s.



Tlaková láhev LA4-2290



- **Vysokotlaká bezešvá ocelová láhev** se standardním ventilem a ocelovým kloboukem
- **Použití:** Transport a skladování technických plynů H_2 , $N_2 + H_2$
- Parametry láhve: Objem 50 l, **hmotnost láhve** $185 \text{ kg} \pm 10\%$, **hmotnost H_2** $2,4 \text{ kg} \pm 10\%$,
- **Rozměry láhve:** délka 1430 mm, průměr 267 mm
- Materiál: láhev **ocel 34CrMo4**, ventil ocel 316L
- Plnicí tlak 555 bar (55.5 MPa)
- Zkušební tlak **833 bar** (83.3 MPa)

Vázaná úloha přenosu hmoty a pružnosti a pevnosti

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$$

$$\mathbf{J} = -\frac{D_L \bar{V}_H}{RT} \nabla \mu_L$$

$$C = C_L + C_T$$

$$\mu_L = \mu_L^0 + RT \ln C_L + \mu_\sigma$$

$$\mu_\sigma = -\bar{V}_H \sigma_h = -\bar{V}_H \frac{\text{tr}(\sigma)}{3}$$

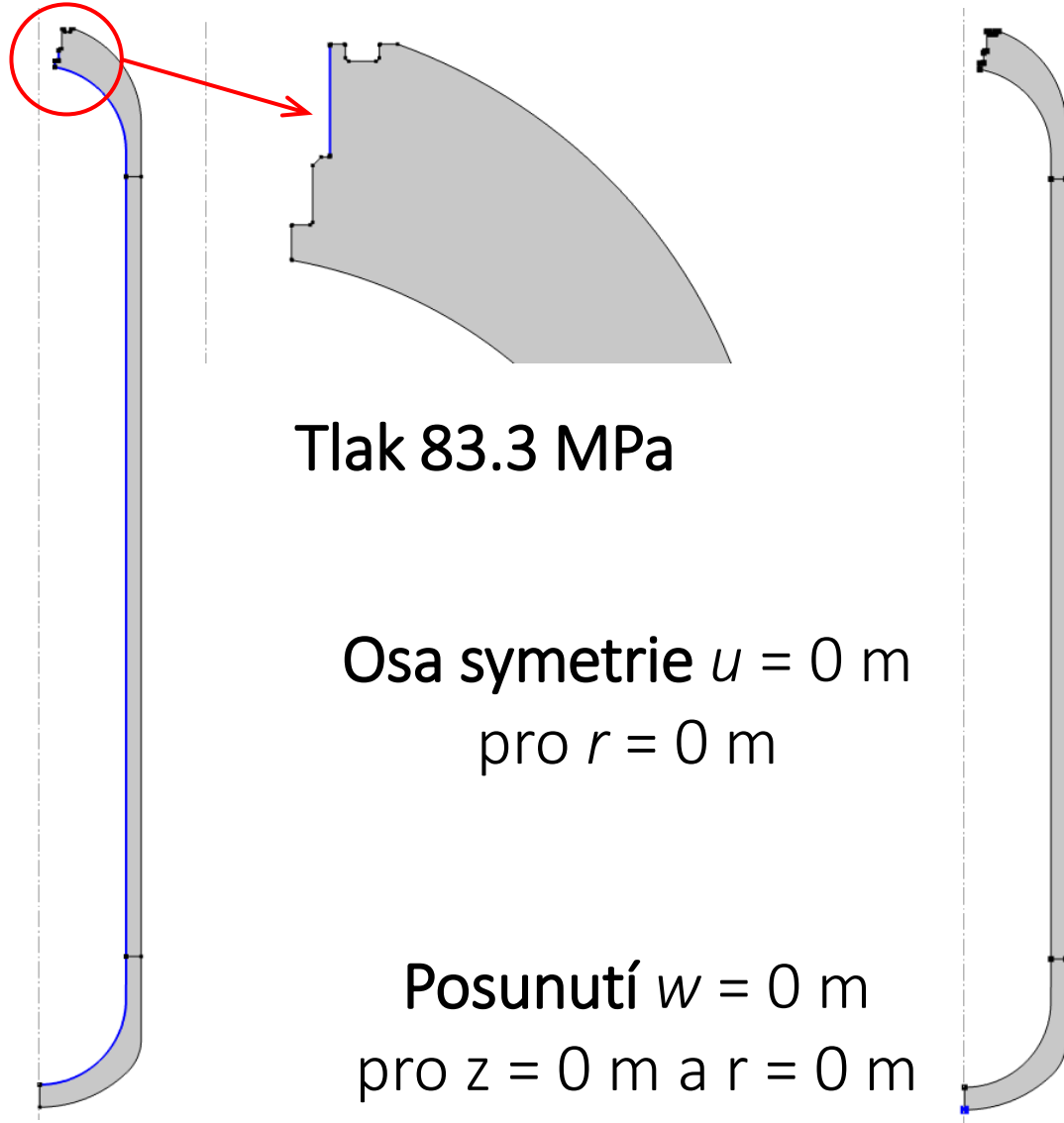
$$\frac{\partial C_L}{\partial t} + \frac{\partial C_T}{\partial t} + \nabla \cdot \left(-D_L \nabla C_L + \frac{D_L \bar{V}_H}{RT} C_L \nabla \sigma_h \right) = 0$$

$$C_T = \frac{K_T N_T C_T}{N_L + K_T C_L}$$

$$\rho \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} + \frac{E}{2(1+\mu)} \Delta \mathbf{u} + \frac{E}{2(1+\mu)(1-2\mu)} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{f} = \mathbf{0}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_T}{\partial t} &= \frac{\partial C_T}{\partial C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \frac{\partial C_T}{\partial N_T} \frac{\partial N_T}{\partial t} + \frac{\partial C_T}{\partial K_T} \frac{\partial K_T}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \\ &= \frac{K_T N_T N_L}{[N_L + (K_T - 1)C_L]^2} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \theta_T \frac{\partial N_T}{\partial \varepsilon_p} \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial t} \end{aligned}$$

Okrajové podmínky – úloha pružnosti a pevnosti



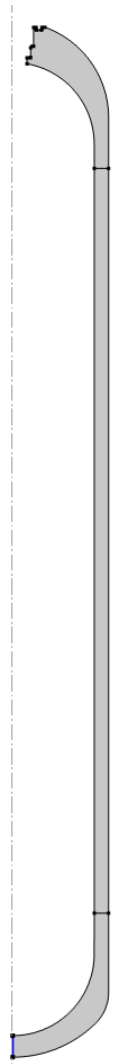
Předpoklady:

- Vlastní tíha nádoby se zanedbává
- Vlastní tíha vodíku se zanedbává
- Neuvažuje se uzavírací ventil láhve
- Materiál láhve je lineární elastický

Parametry:

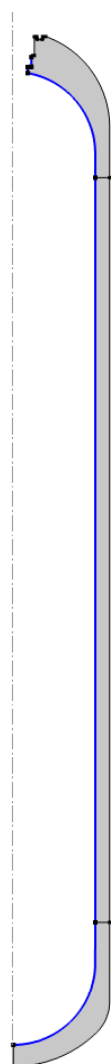
- Modulu pružnosti v tahu $2.1 \cdot 10^{11}$ Pa
- Poissonovo číslo 0.3
- Hustota 7850 kg/m^3
- Mez kluzu Re_{20} 550 MPa
- Mez pevnosti (840-950) MPa

Okrajové podmínky – úloha přenosu hmoty



Osa symetrie pro $r = 0$ m

$$-n \cdot J = 0$$



Koncentrace H_2

$$c_0$$

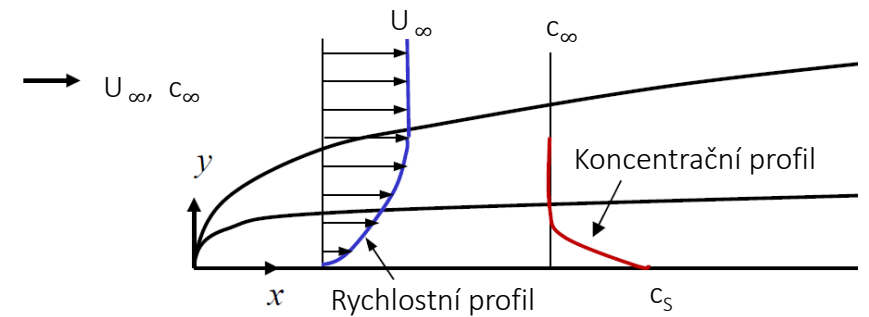
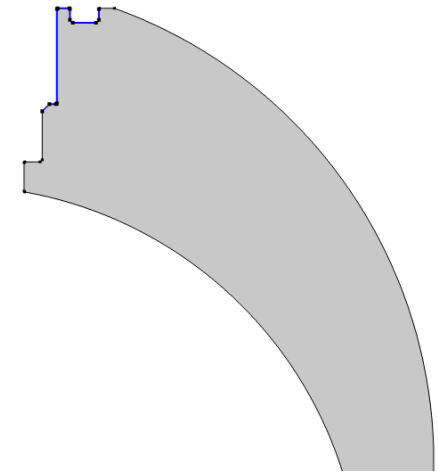


Přestup H_2 do vzduchu

$$-n \cdot (J + u c_S) = k_g (c_\infty - c_S)$$

Nepropustná stěna

$$-n \cdot J = 0$$



Parametry v úloze přenosu hmoty

- Koeficient difuze vodíku v oceli 34CrMo4 $D_L = 8,0 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
- Parciální molární objem vodíku v oceli 34CrMo4 $\bar{V}_H = 1,835 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
- Počet intersticiálních míst v mřížce oceli 34CrMo4 na jednotkový objem $N_L = 8,469 \cdot 10^5 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$
- Vazebná energie pro karbidy a precipitáty $E_b = 60 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
- Počet pastí v mřížce oceli 34CrMo4 na jednotkový objem $N_T = 0,302 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$
- Teplota $T = 300 \text{ K}$, tlak $p = 83.3 \text{ MPa}$, $\Delta H_S = 28,6 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
- Koncentrace vodíku na stěně láhve c_0

$$c_0 = 1,989 \cdot 10^{26} \sqrt{\frac{p}{101\,325}} e^{-\frac{\Delta H_S}{RT}} = 5,977 \cdot 10^{22} \frac{\text{atomů H}_2}{\text{m}^3}$$

Parametry v úloze přenosu hmoty

- **Koeficient přestupu** vodíku z povrchu láhve do vzduchu

$$k_g = \frac{Sh D_{H_2, vzduch}}{D} = \frac{11,216 \cdot 7,57 \cdot 10^{-5}}{0,267} = 3,180 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$$

- Sherwoodovo číslo $Sh = 3,65 + \frac{0,0668 \frac{D}{L} Re \cdot Sc}{1 + 0,04 \left(\frac{D}{L} Re \cdot Sc \right)^{2/3}} = 11,216$

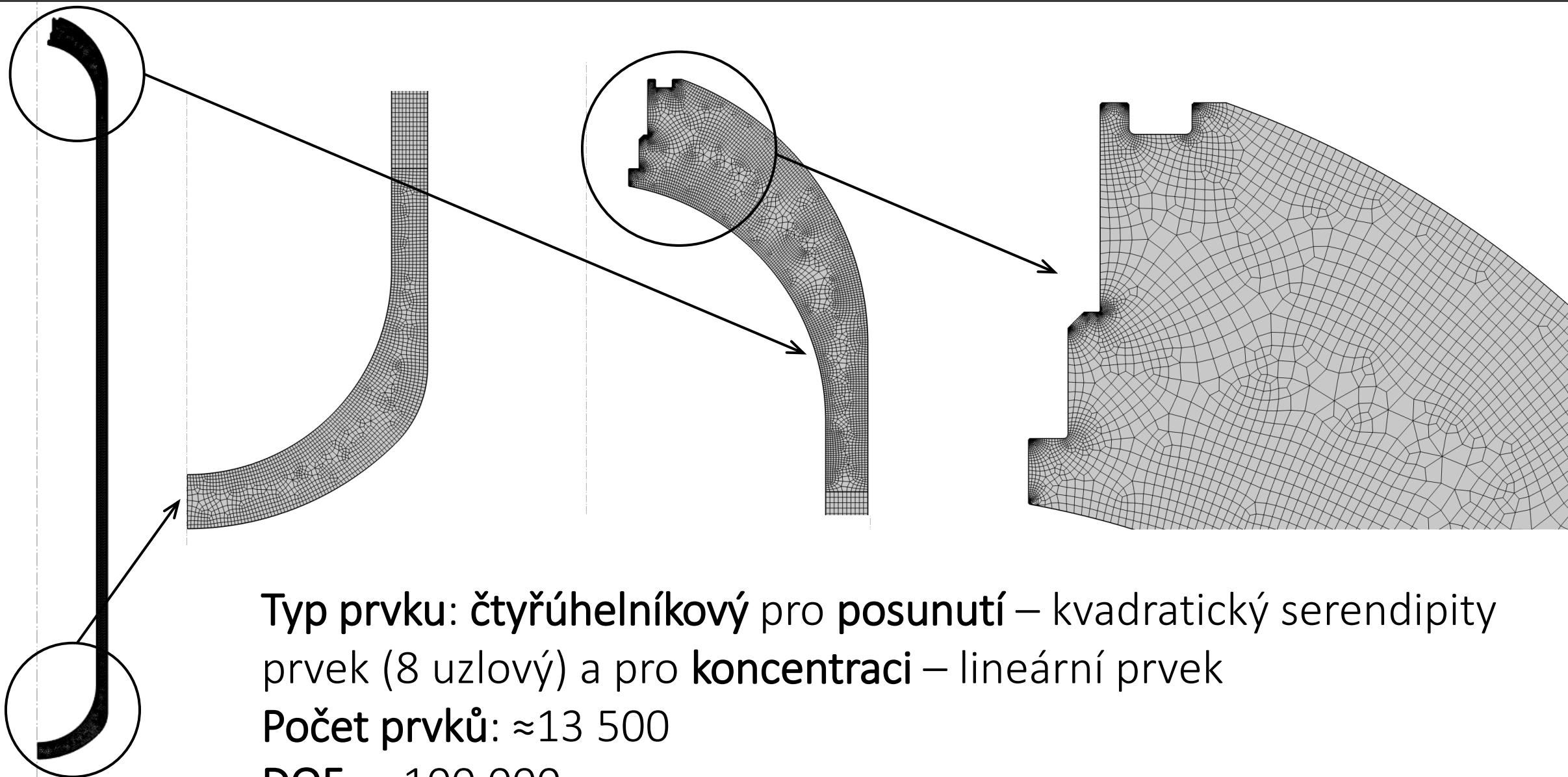
- Koeficient difuze na rozhraní vodík a vzduch

$$D_{H_2, vzduch} = \frac{3,2 \cdot 10^{-8} \cdot T^{1,75}}{p_{vzduch} (N_{H_2}^{1/3} + N_{vzduch}^{1/3})^2} \sqrt{\frac{1}{M_{H_2}} + \frac{1}{M_{vzduch}}} = 7,57 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

- Reynoldsovo číslo $Re = \frac{vD}{\nu} = \frac{0,5 \cdot 0,267}{1,5 \cdot 10^{-5}} = 8900 < 2 \cdot 10^5$ laminární proudění

- Schmidtovo číslo $Sc = \frac{\nu}{D_{H_2, vzduch}} = \frac{1,5 \cdot 10^{-5}}{7,57 \cdot 10^{-5}} = 0,198$

Síť konečných prvků

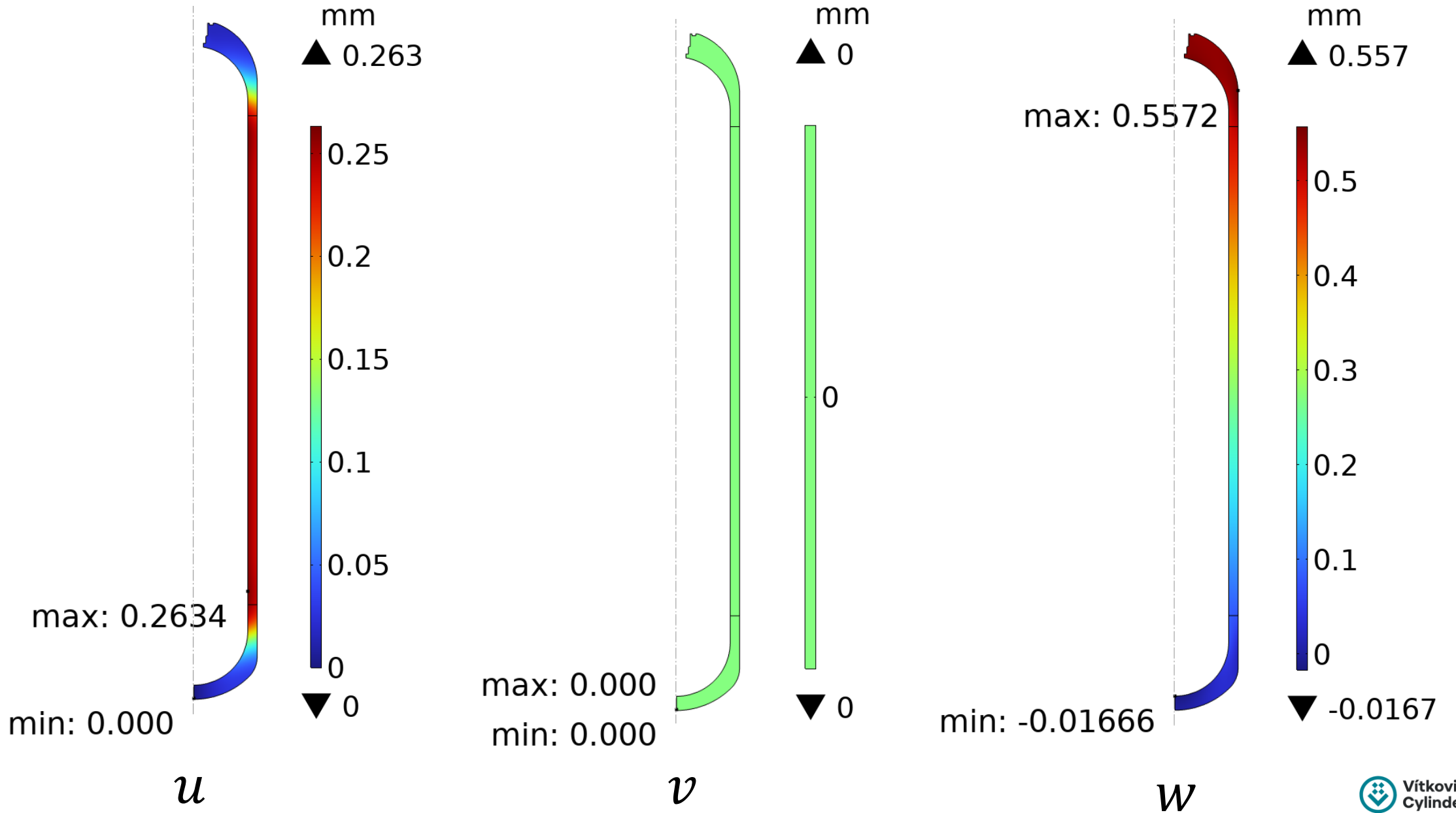


Typ prvku: čtyřúhelníkový pro posunutí – kvadratický serendipity prvek (8 uzlový) a pro koncentraci – lineární prvek

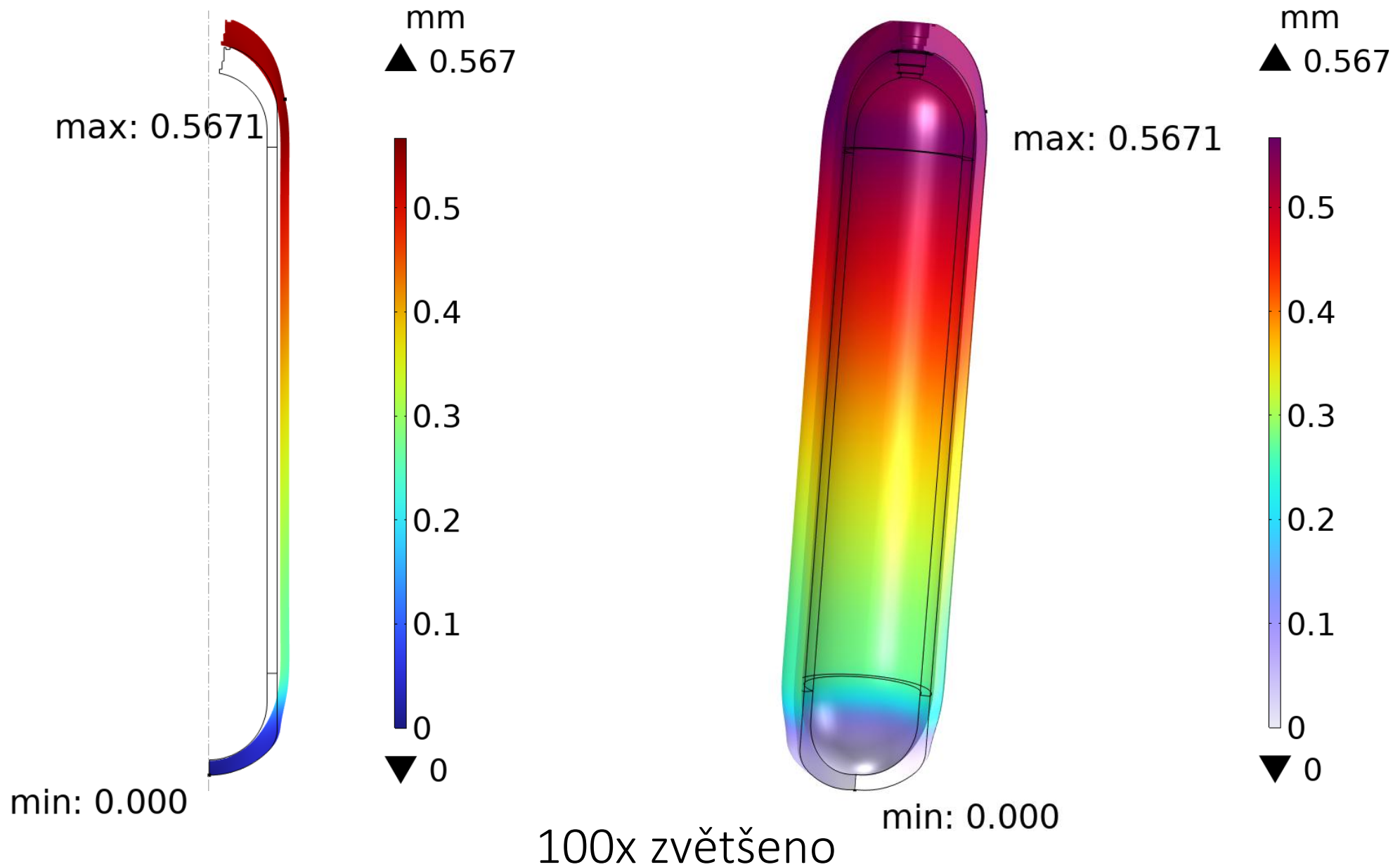
Počet prvků: $\approx 13\,500$

DOF: $\approx 100\,000$

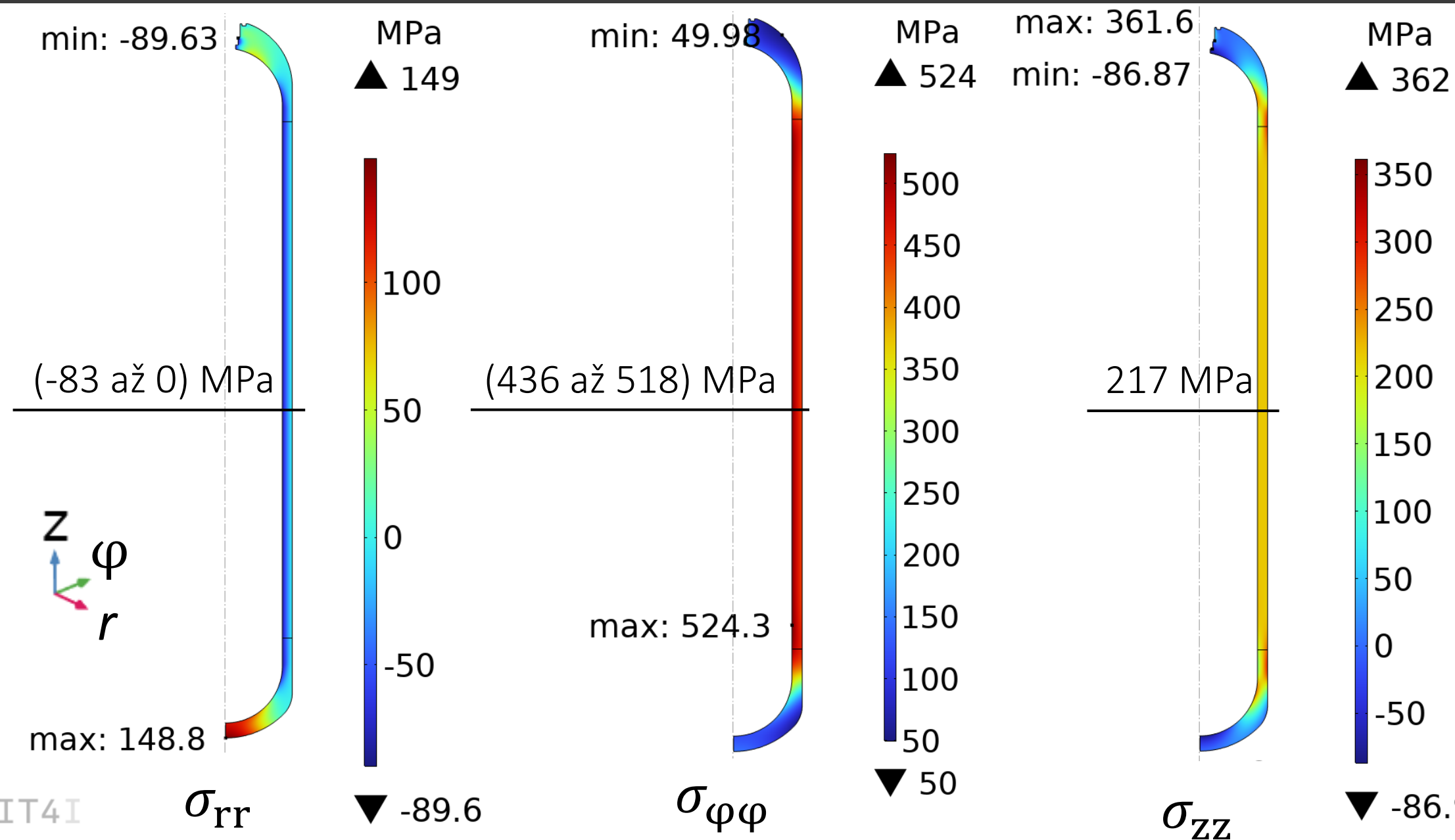
Složky posunutí



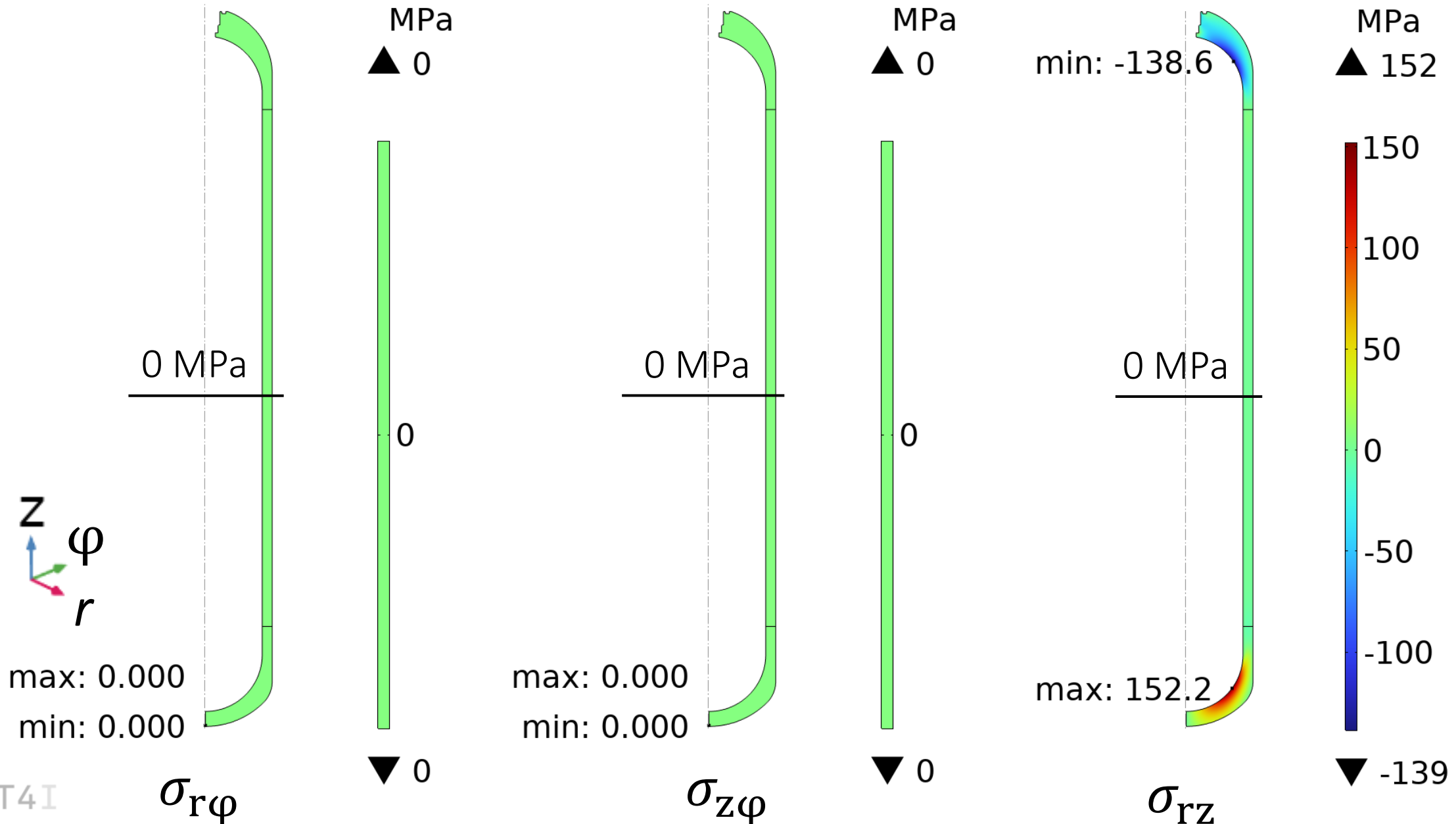
Celkové posunutí



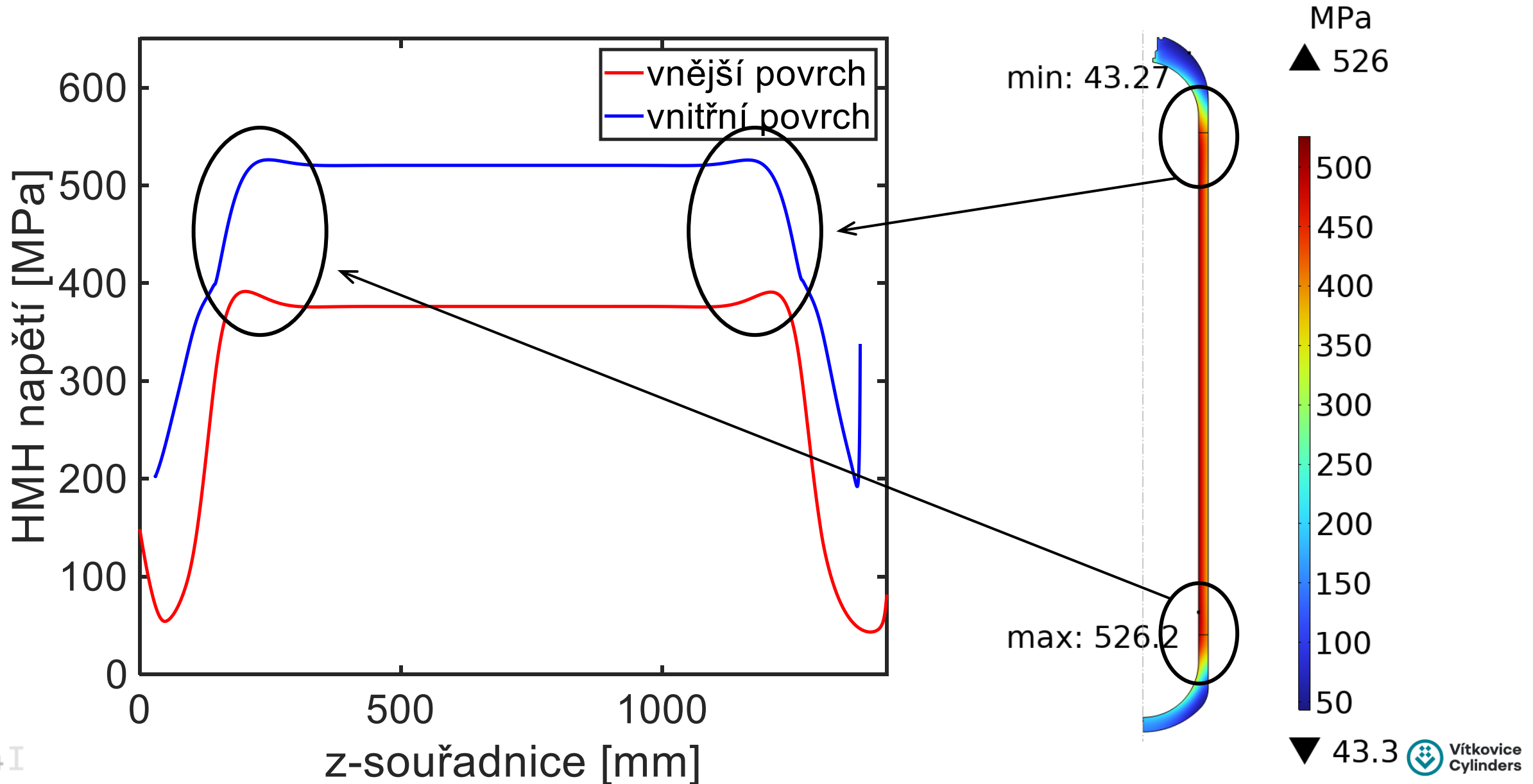
Složky tenzoru napětí



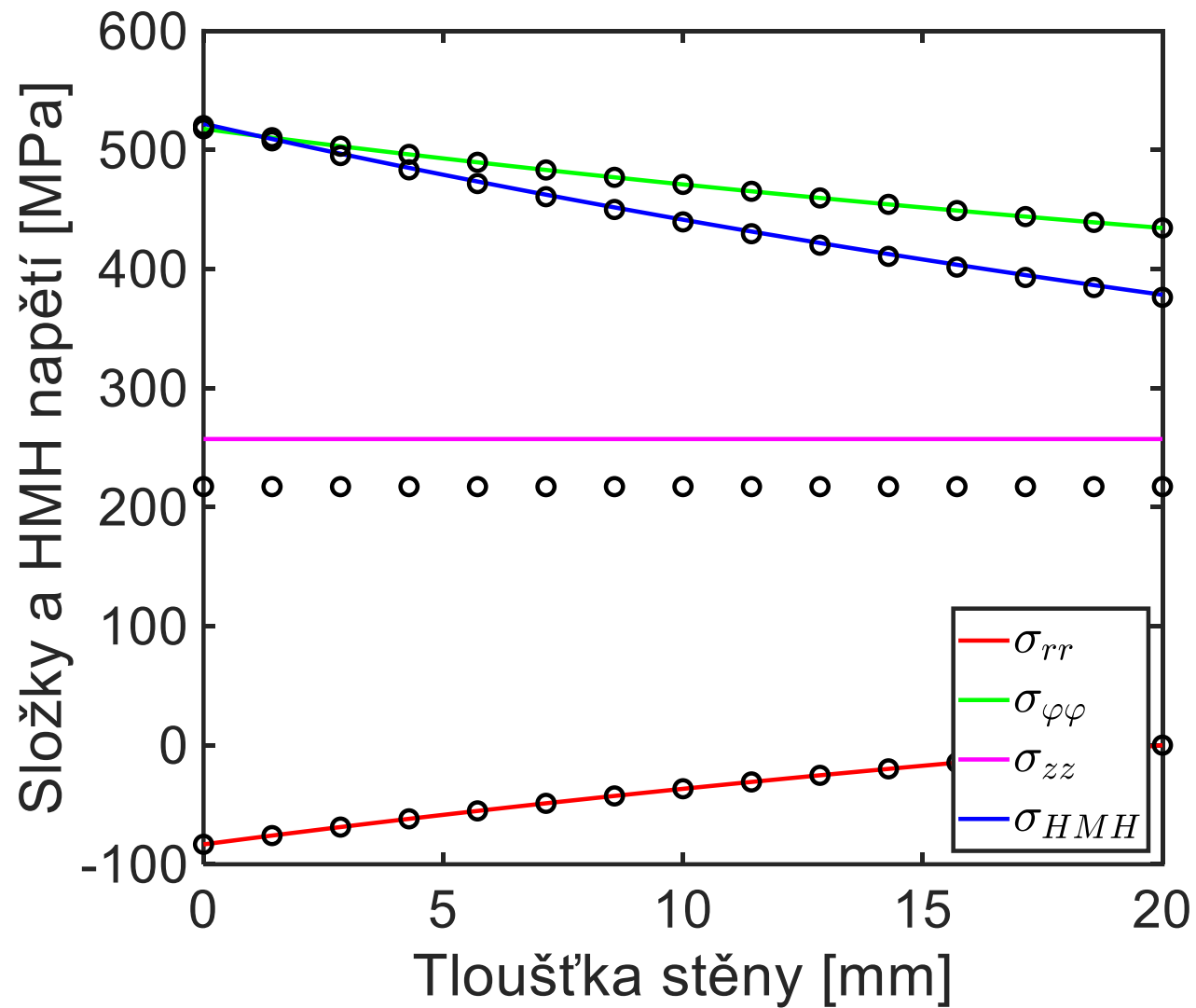
Složky tenzoru napětí



Redukované napětí podle teorie HMM

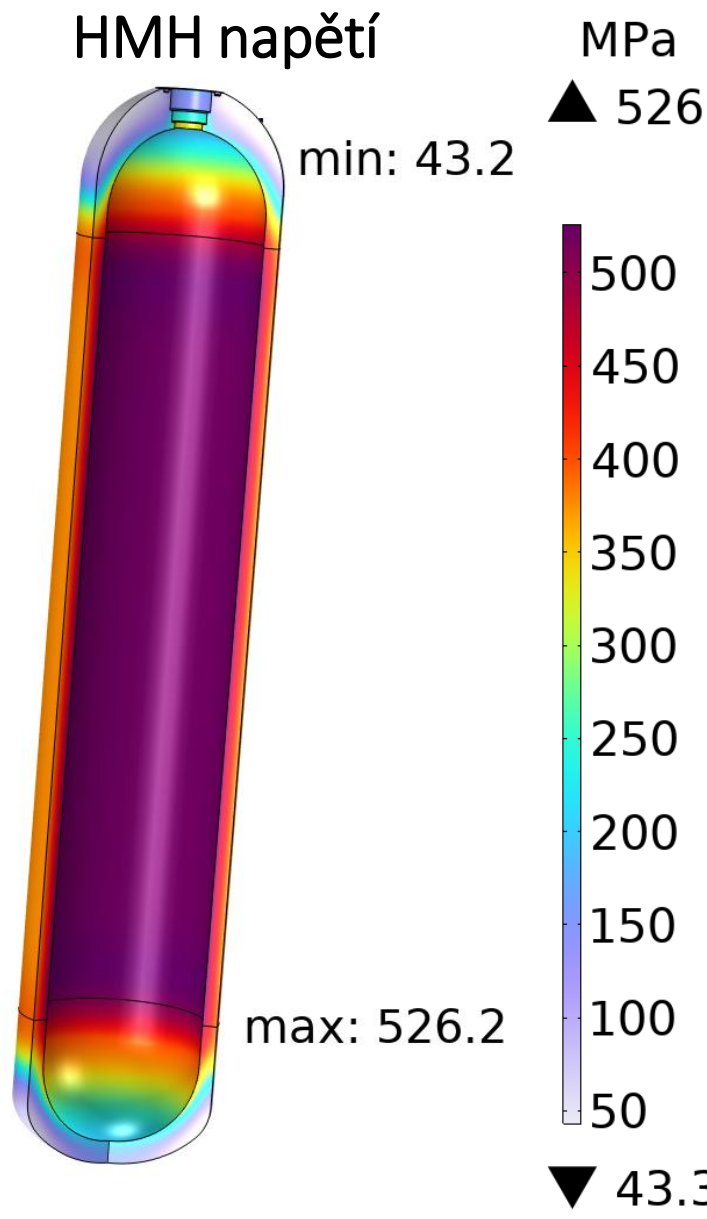


Verifikace MKP výpočtu napětí



Analytické řešení podle teorie tlustostěnných rotačně

IT4I symetrických válcových nádob a MKP řešení označeno symbol „o“



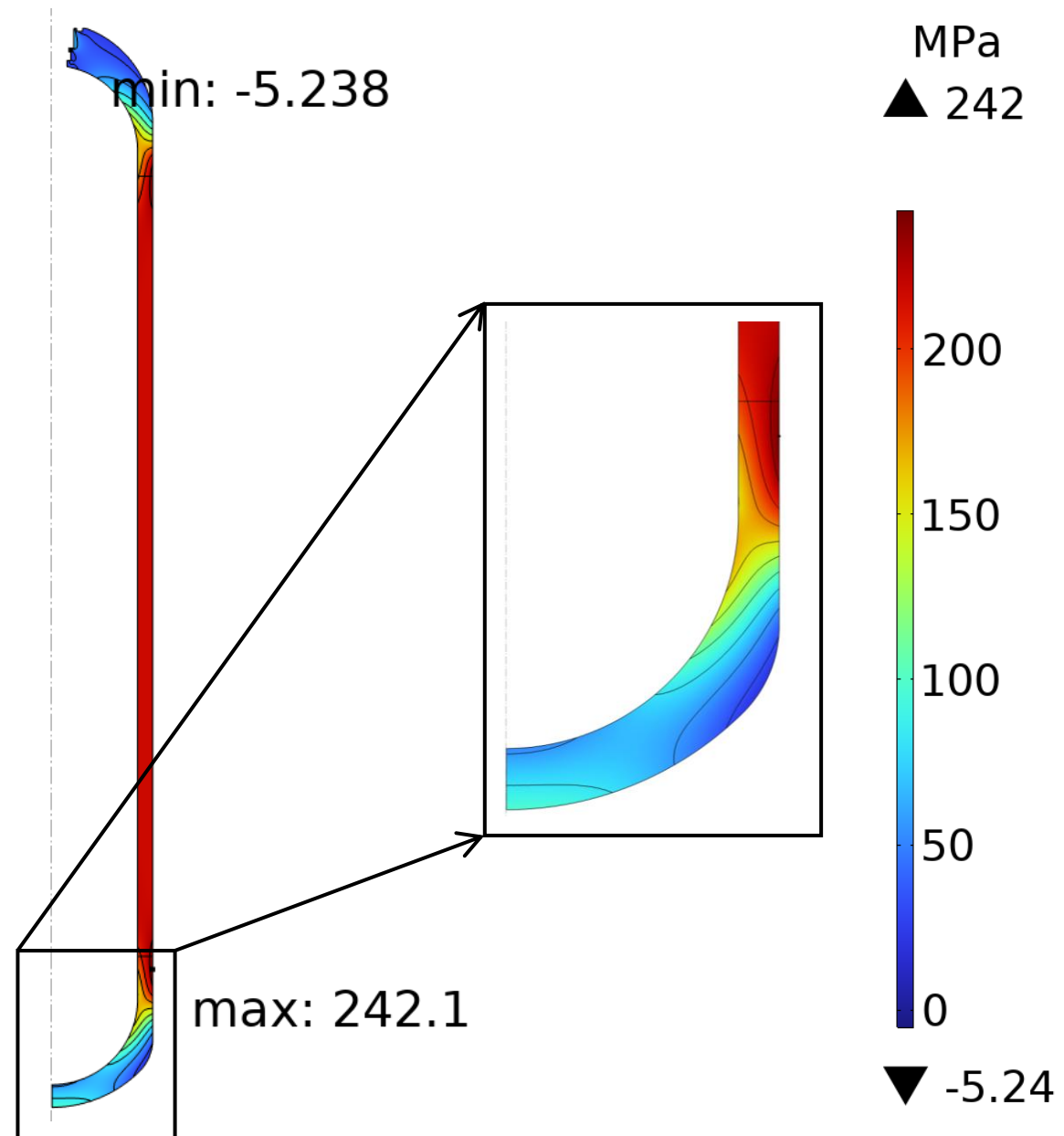
Hydrostatické (střední) napětí

Cauchyho tenzor napětí

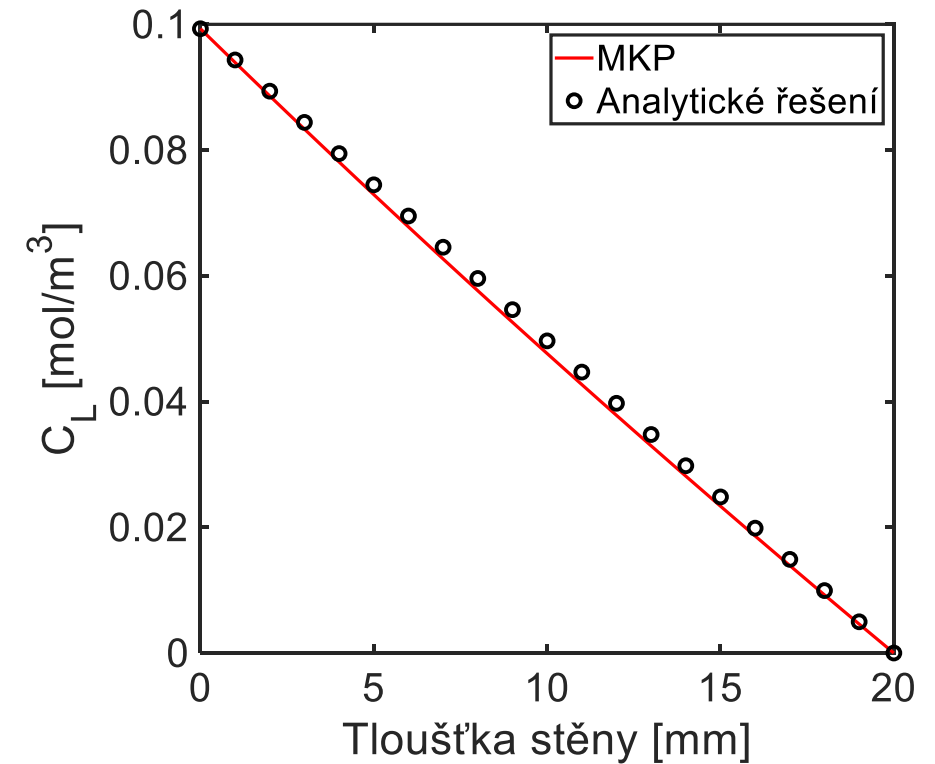
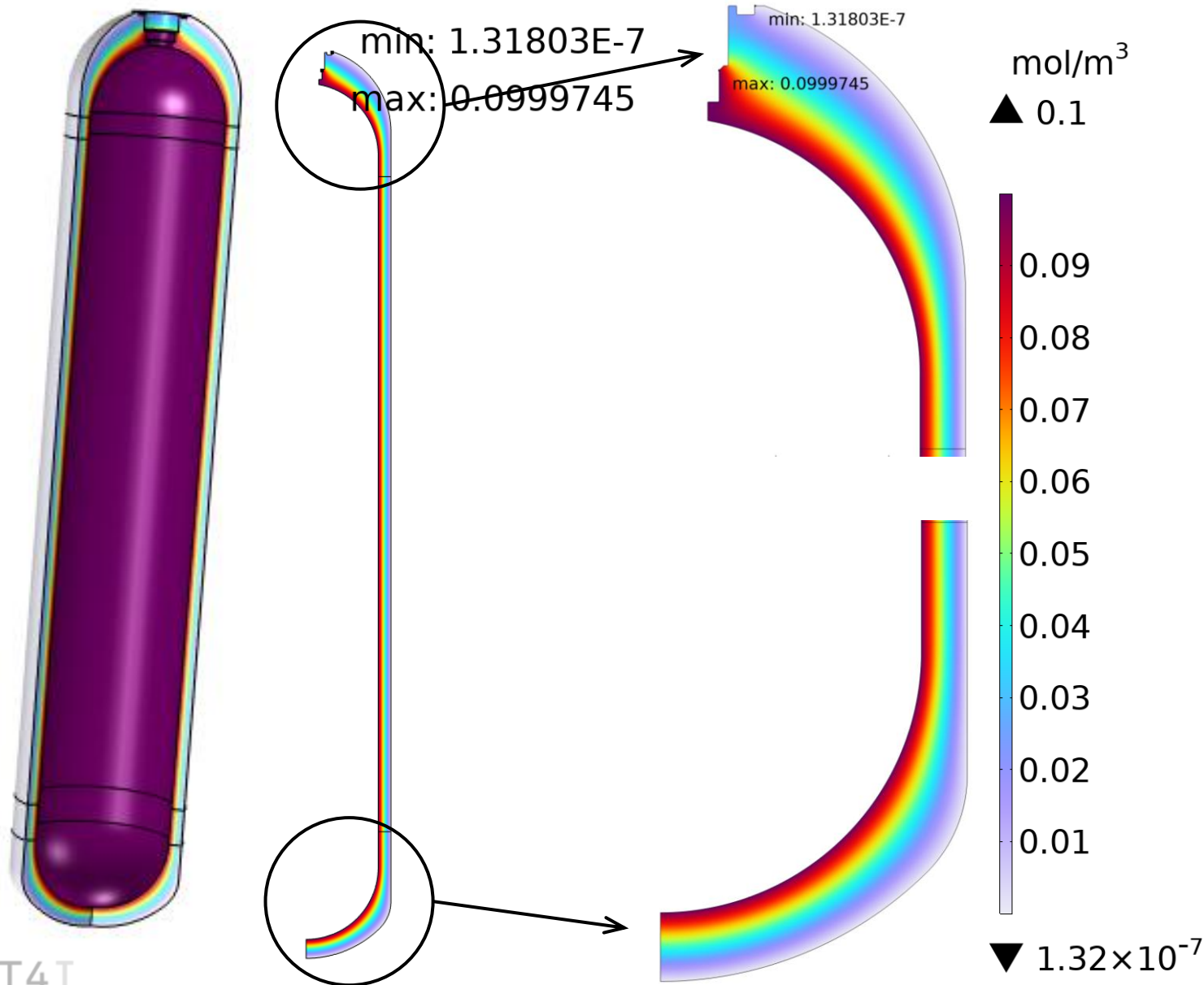
$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{rr} & \tau_{r\varphi} & \tau_{rz} \\ \tau_{\varphi r} & \sigma_{\varphi\varphi} & \tau_{\varphi z} \\ \tau_{zr} & \tau_{z\varphi} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

$$\sigma_h = \frac{\text{tr}(\boldsymbol{\sigma})}{3} = \frac{I_1}{3}$$

$$\sigma_h = \frac{\sigma_{rr} + \sigma_{\varphi\varphi} + \sigma_{zz}}{3}$$



Koncentrace vodíku v mřížce C_L pro stacionární stav

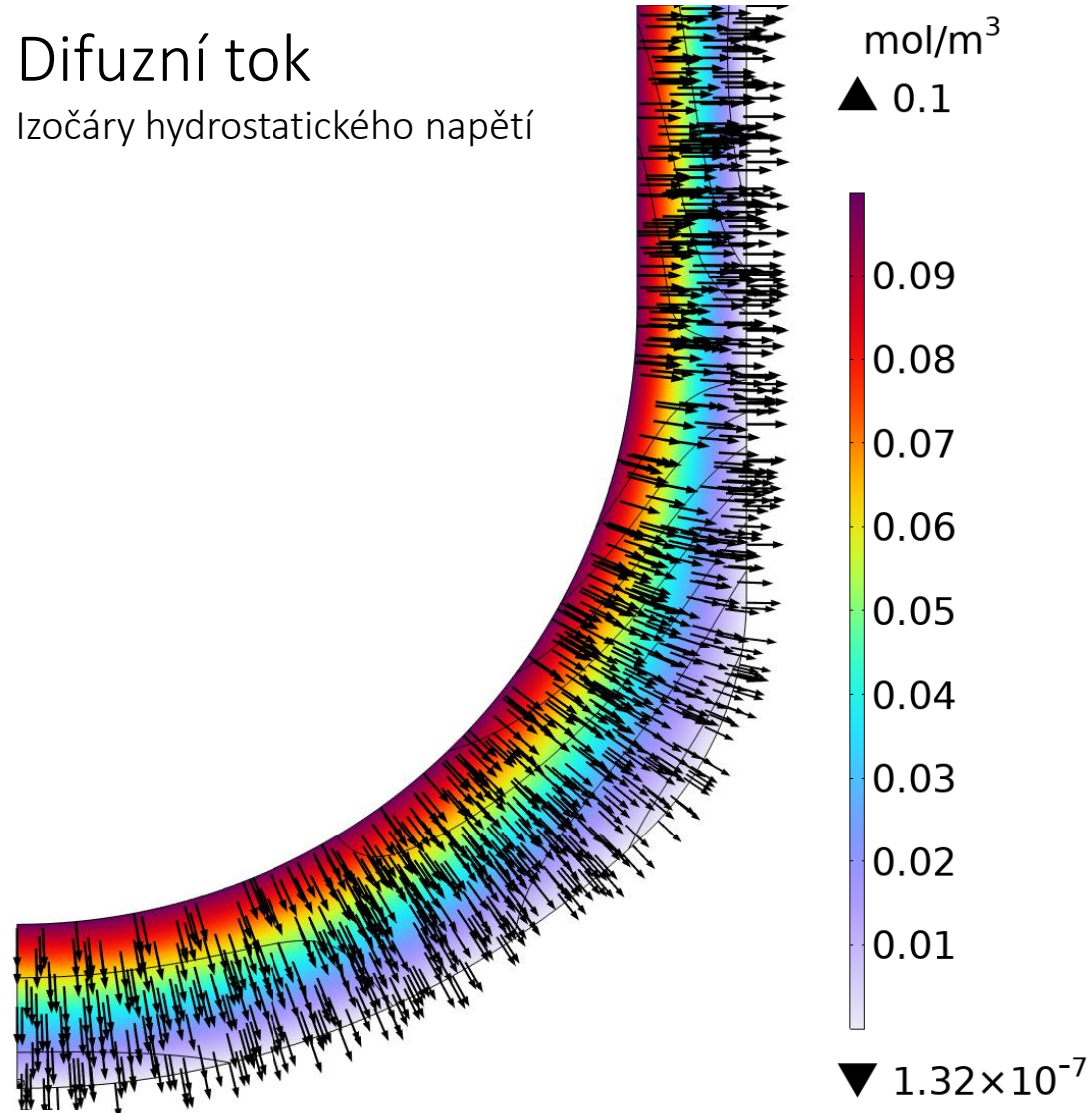


Koncentrace vodíku se ve stěně tlakové láhve vyrovná při teplotě -40°C , 25°C a 80°C přibližně za 196,1 hod., 14,1 hod. a 3,2 hod.

Koncentrace vodíku v mřížce C_L pro stacionární stav

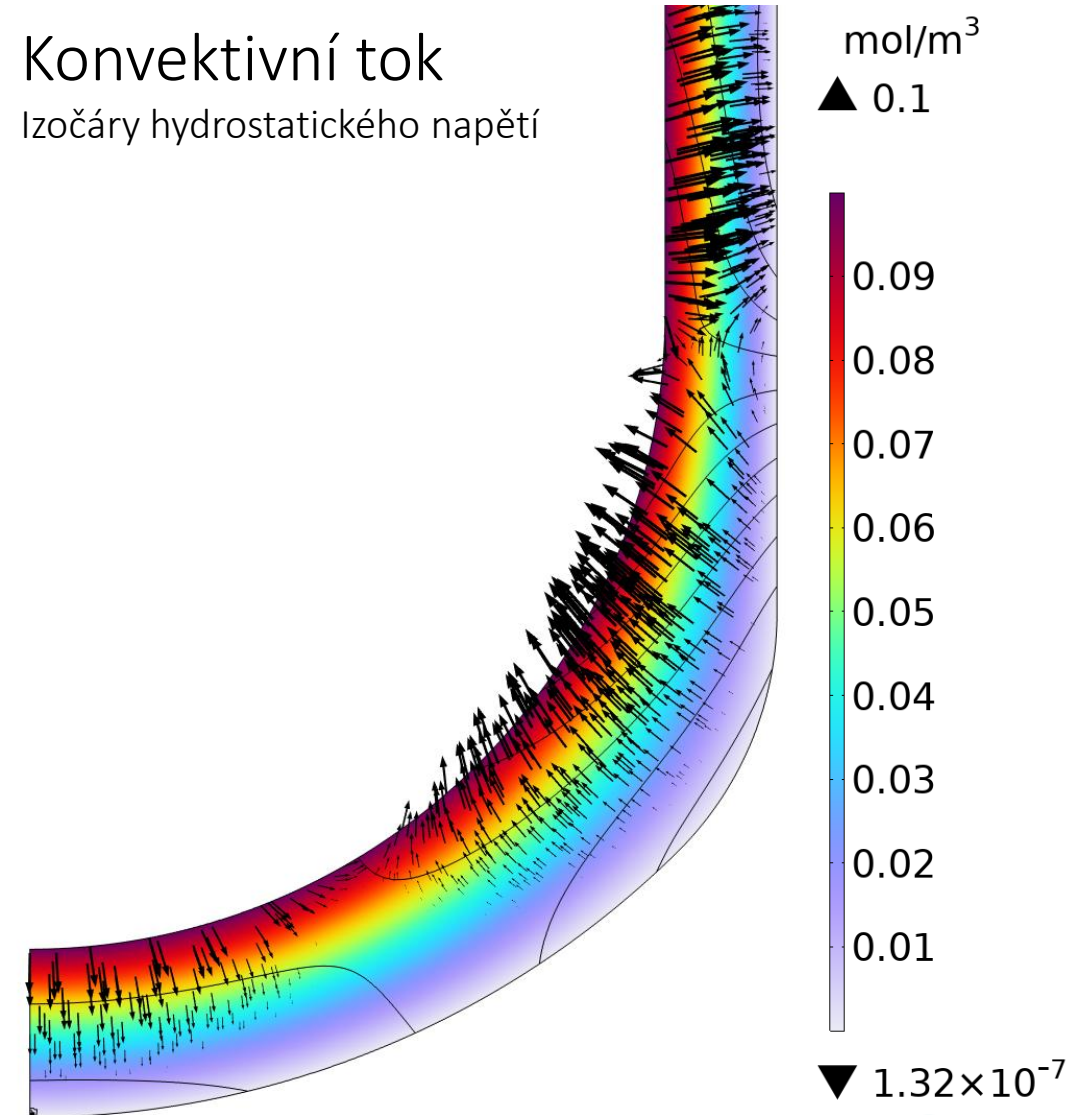
Difuzní tok

Izočáry hydrostatického napětí

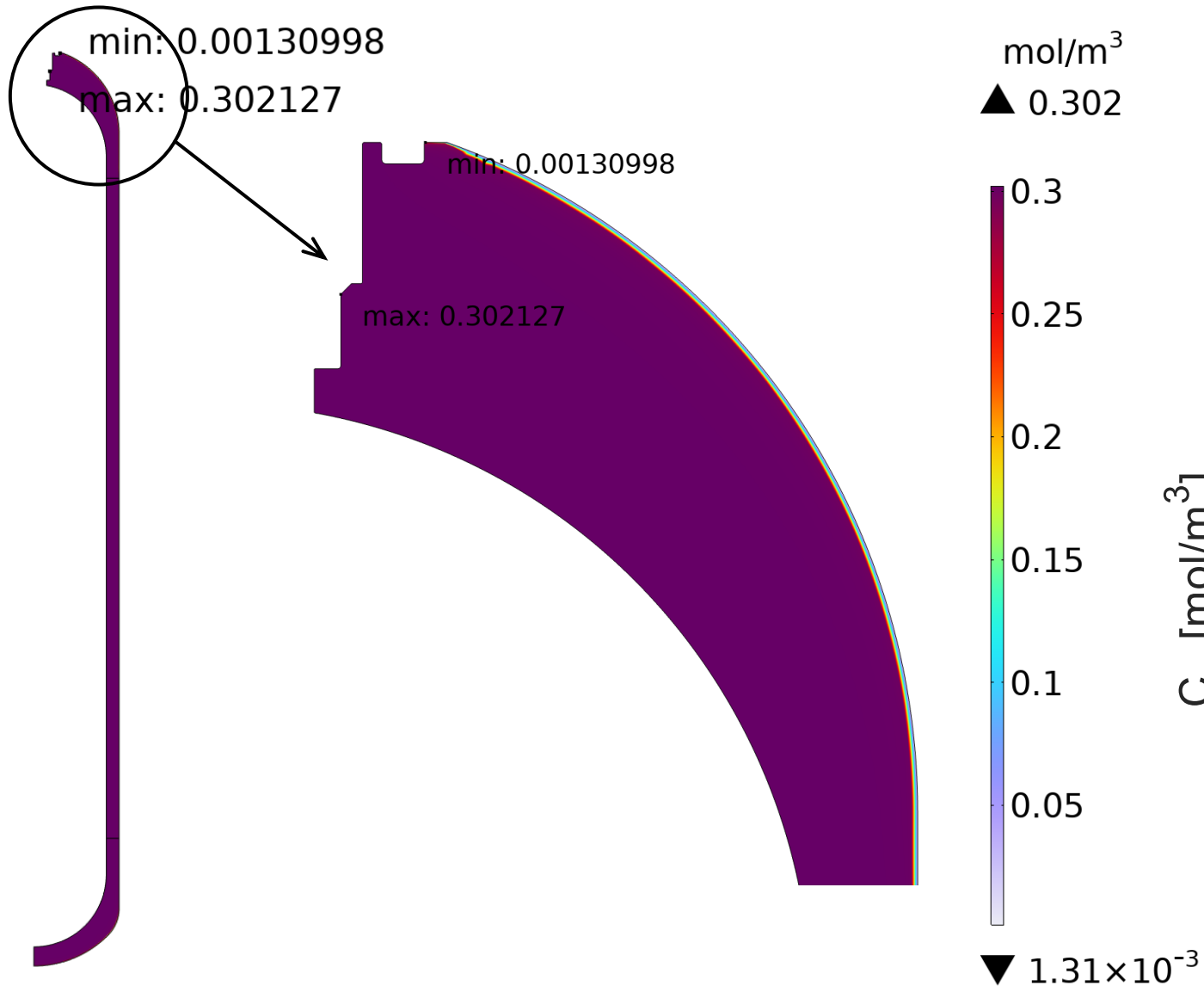


Konvektivní tok

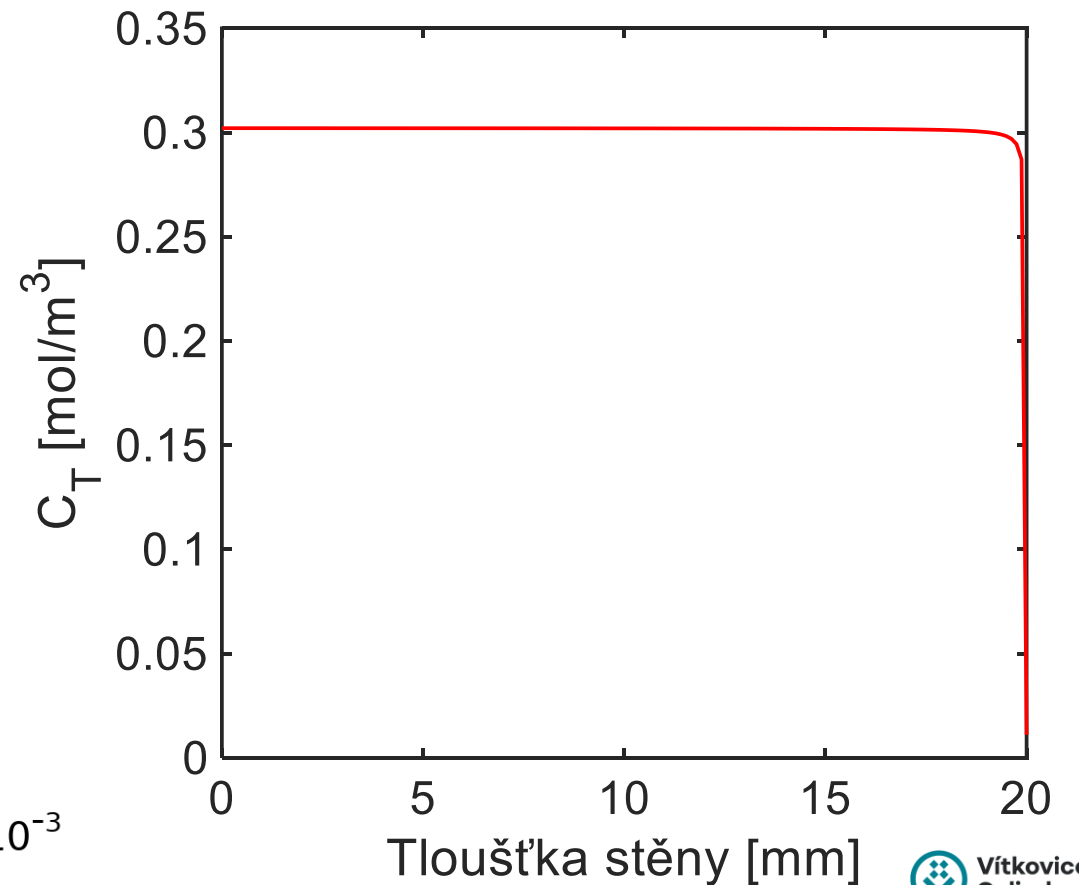
Izočáry hydrostatického napětí



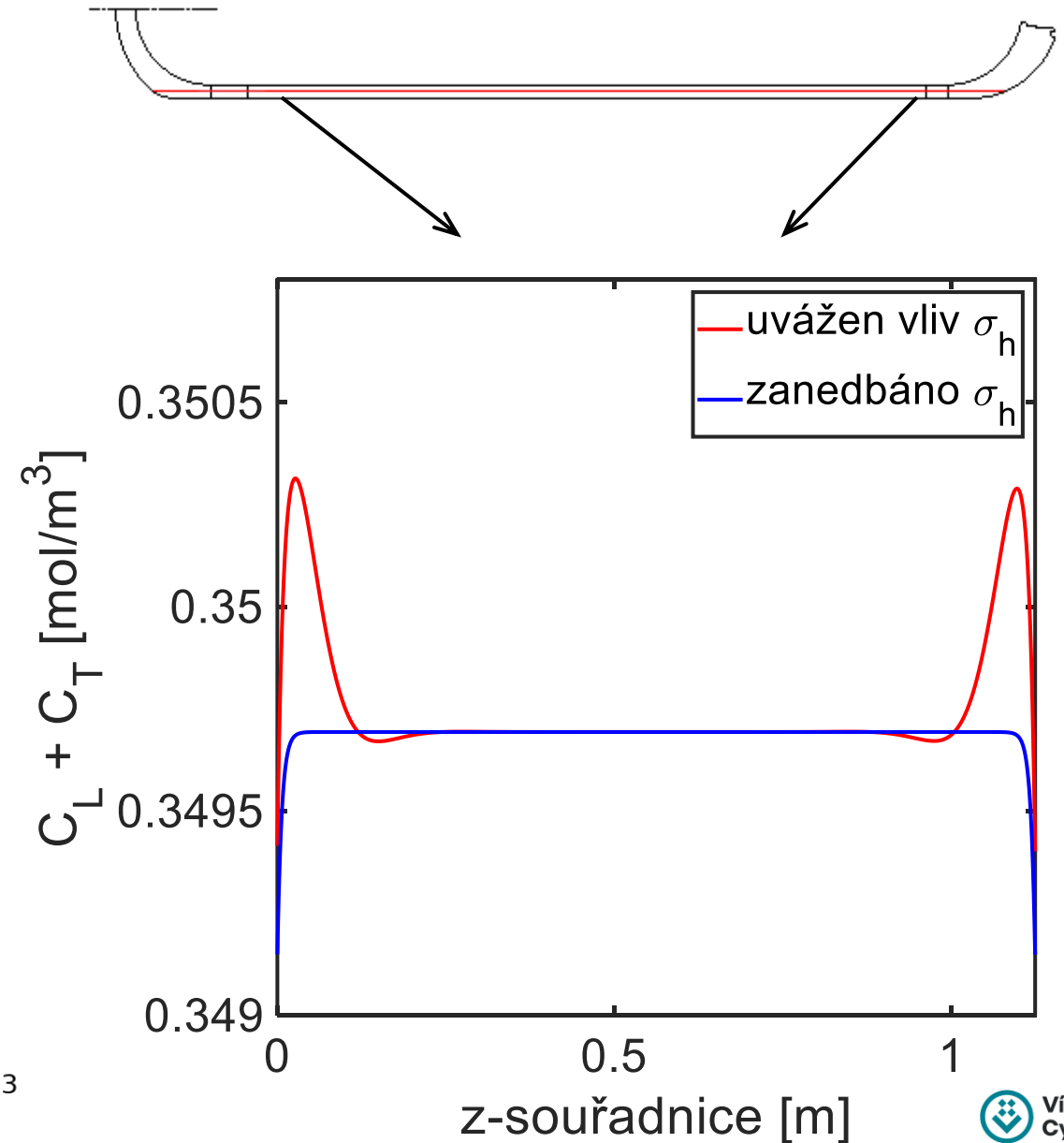
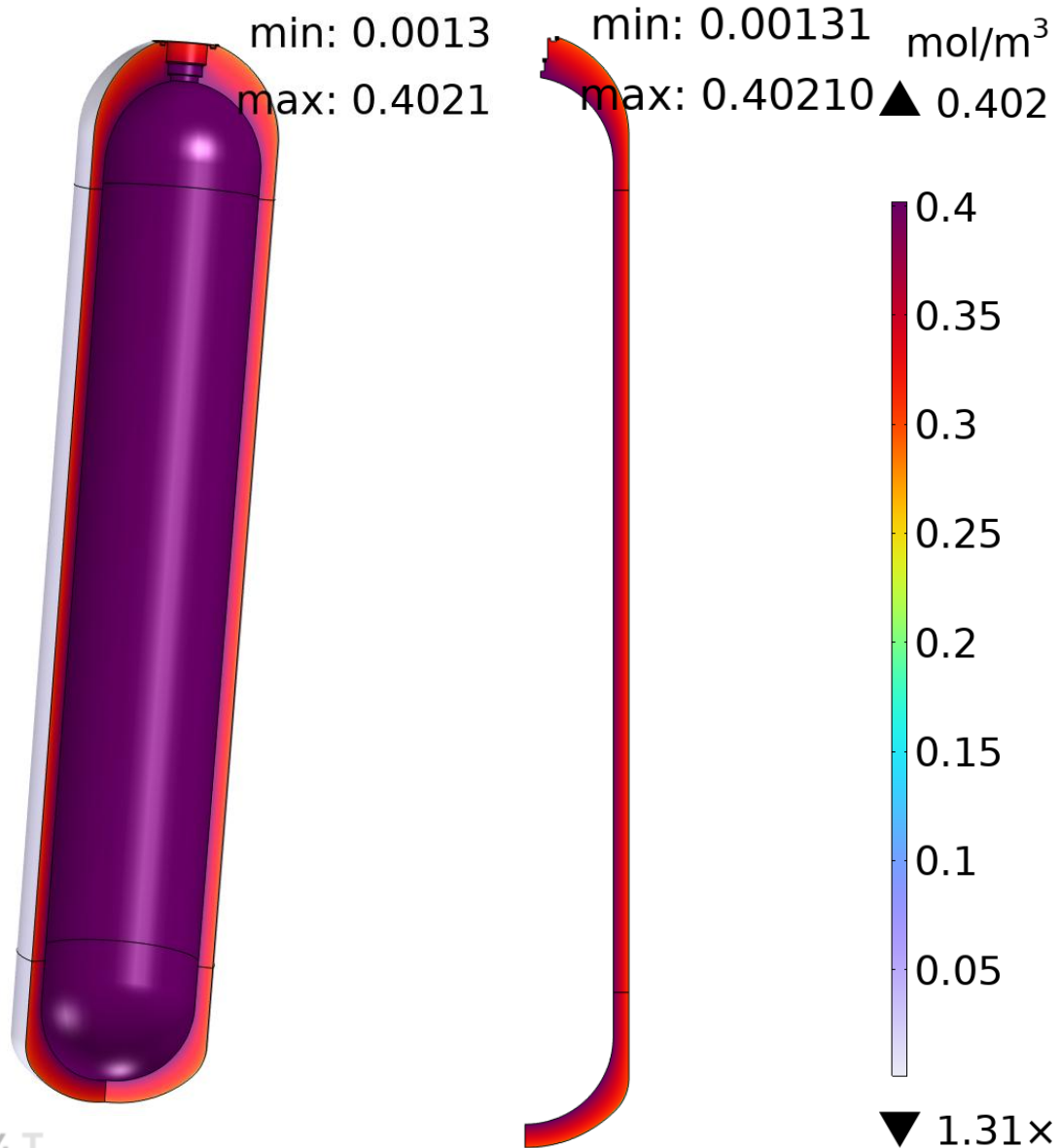
Koncentrace vodíku v pastech C_T pro stacionární stav



$$C_T = \frac{K_T N_T}{N_L \left(1 + K_T \frac{C_L}{N_L} \right)^2}$$

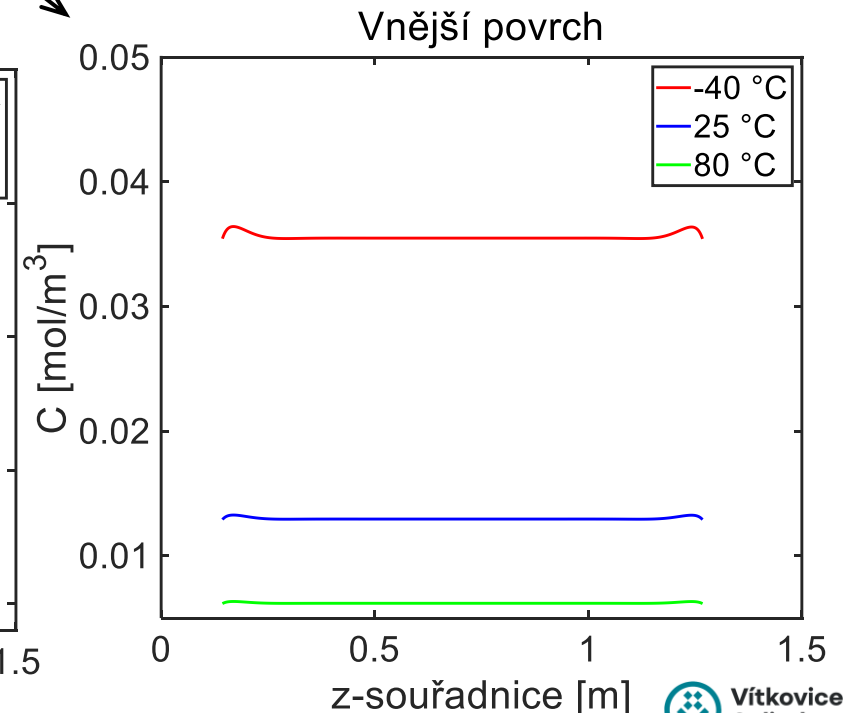
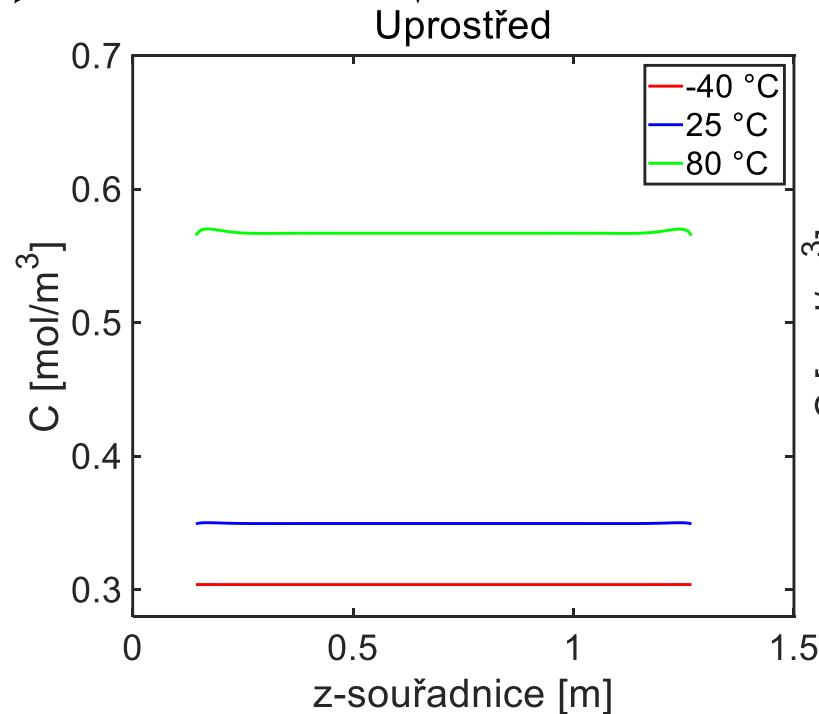
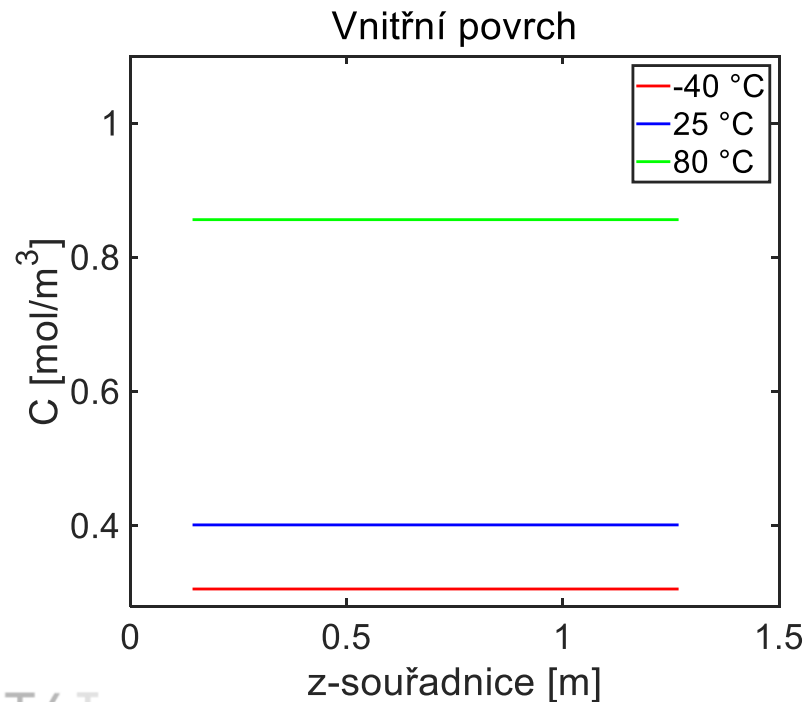
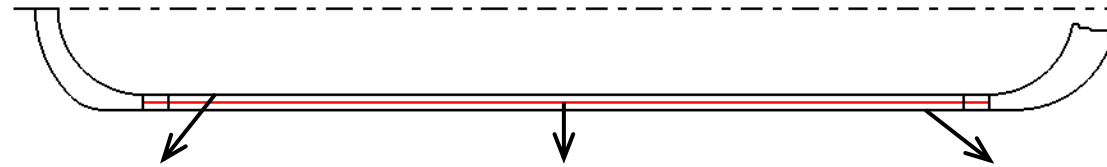


Celková koncentrace vodíku $C = C_L + C_T$ pro stacionární stav



Celková koncentrace vodíku $C = C_L + C_T$ pro stacionární stav

T (°C)	D_L (m ² /s)	$\bar{V}_H$ (m ³ /mol)	c_0 (atomů H ₂ /m ³)	k_g (m/s)	E (GPa)	μ (—)
−40	$5,74 \cdot 10^{-11}$	$1,64 \cdot 10^{-6}$	$2,21 \cdot 10^{21}$	$2,43 \cdot 10^{-3}$	215	0,297
25	$8,00 \cdot 10^{-10}$	$1,84 \cdot 10^{-6}$	$5,98 \cdot 10^{22}$	$3,18 \cdot 10^{-3}$	210	0,300
80	$3,49 \cdot 10^{-9}$	$2,00 \cdot 10^{-6}$	$3,34 \cdot 10^{23}$	$3,82 \cdot 10^{-3}$	205	0,303



Závěr

- Byla vytvořena **sdružená úloha přenosu hmoty a pružnosti a pevnosti**.
- Byly diskutovány **parametry potřebné pro výpočetní simulaci**.
- **MKP výpočet** realizovaný v prostředí softwaru **COMSOL Multiphysics** byl **verifikován** vzhledem k **analytickému řešení**.
- Byly stanoveny **složky tenzoru napětí v tlakové láhvi typu LA4-2290** a bylo **vypočítáno rozložení koncentrace vodíku pro stacionární případ**.
- V důsledku **gradientu hydrostatického napětí** dochází ke **zvýšení koncentrace vodíku** v oblastech s vyšším tahovým napětím.

Děkuji za pozornost.

Ing. Petr Ferfecki. Ph.D.

senior researcher

petr.ferfecki@vsb.cz

www.vsb.cz

Poděkování



Aplikace umělé inteligence
a kvantového počítání v energetice

12. listopadu 2025
IT4Innovations



Zvýšení odolnosti energetických sítí v kontextu dekarbonizace,
decentralizace a udržitelného socioekonomického rozvoje

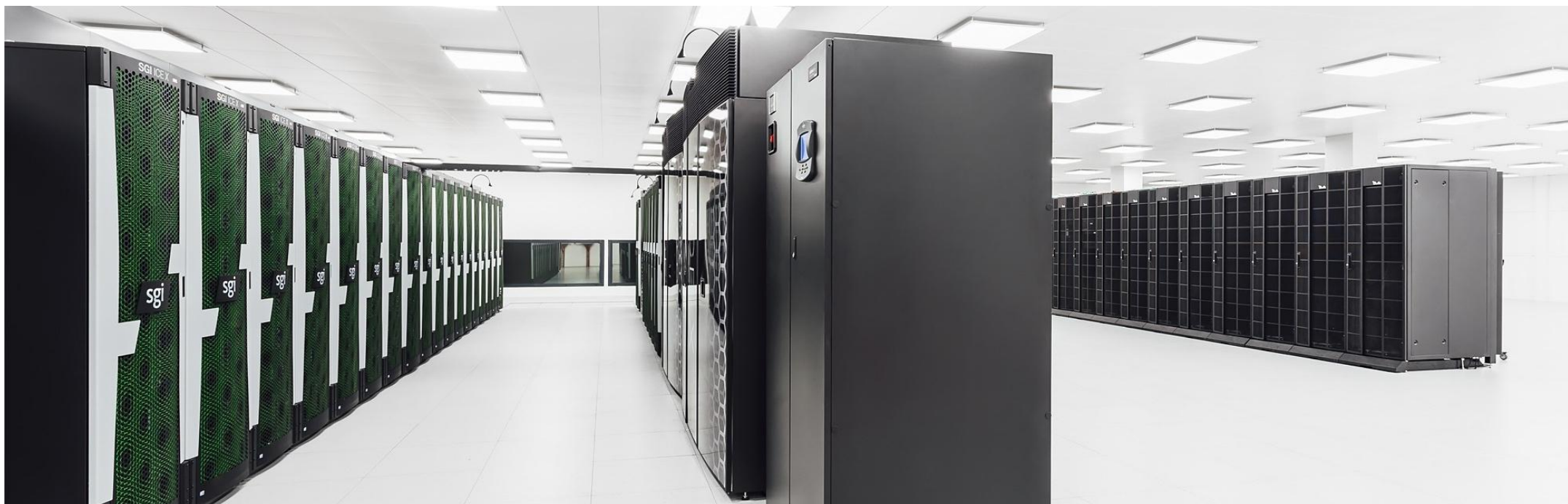
CZ.02.01.01/00/23_021/0008759

Operační program Jan Amos Komenský



Spolufinancováno
Evropskou unií





Laboratoř vývoje paralelních algoritmů
IT4Innovations národní superpočítačové centrum
VŠB – Technická univerzita Ostrava

Studentská 6231/1B
708 00 Ostrava-Poruba
Česká republika
www.it4i.cz

VŠB TECHNICKÁ
UNIVERZITA
OSTRAVA

IT4INNOVATIONS
NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ
CENTRUM