

Digitální model prvků výroby, komprese a uskladnění vodíku

R – Software

Simulátor elektrolyzátoru

Typ elektrolyzátoru:

SOEC

Typ elektrolyzátoru ovlivňuje efektivitu a provozní parametry.

Napětí (V):

1,23

Napětí aplikované na elektrolyzátor.

Proud (A):

100

Elektrický proud procházející elektrolyzátelem.

Ref. účinnost (%):

100

Odkazuje na ideální účinnost elektrolyzátoru bez ztrát.

Ambientní teplota (°C):

25

Provozní teplota ovlivňuje účinnost.

Tlak (atm):

1,0

Tlak ovlivňuje produkci vodíku.

Průtok vody (l/s):

5,0

Průtok vody ovlivňuje chlazení a dodávku reaktantů.

Zdroj energie:

Stálá

Typ zdroje energie ovlivňuje stabilitu a náklady.

Zapnout Nernstovo napětí: ☒

Nernstovo napětí zohledňuje změny napětí.

Zapnout Butler-Volmerovo přepětí: ☒

Přepětí podle rovnice Butler-Volmer.

Zapnout ohmické ztráty: ☒

Ohmické ztráty zvyšují potřebnou energii.

Ohmický odpor (Ω):

0,002

Odpor elektrolyzátoru ovlivňuje ohmické ztráty.

Výměnná hustota proudu (A/cm²):

0,05

Určuje kinetiku reakce na elektrodách.

Přenosový koeficient (α):

0,3

Ovlivňuje přepětí a kinetiku reakce.

Provozní teplota (°C):

700

Provozní teplota ovlivňuje účinnost.

Výpočet za:

☐ Sekundu ☐ Za dobu ☒ Simulovat za dobu

Zvolte typ výpočtu.

Doba výroby (hodiny):

1,0

Doba, po kterou bude elektrolyzátor provozován.

Simulovat

Výsledky

Výroba vodíku: 29.81 l
Hmotnost vodíku: 0.0027 kg
Spotřeba energie: 172.51 Wh
Provozní teplota: 50.00 °C
Provozní napětí: 1.73 V
Účinnost: 71.30 %

Graph:

Y-axis: Hmotnost (g)

X-axis: Čas (minuty)

Legend: Hmotnost vodíku (g/min) (blue line), Spotřeba energie (Wh/kWh) (red line)

The graph shows a linear increase in hydrogen mass over time, while energy consumption remains constant at approximately 172.51 Wh.



Tento výsledek je spolufinancován prostřednictvím Technologické agentury ČR v rámci
Národního plánu obnovy z evropského Nástroje pro oživení a odolnost

NÁZEV PUBLIKACE

Digitální model prvků výroby, komprese a uskladnění vodíku

PROJEKT

Národní centrum vodíkové mobility (TN02000007)

NÁZEV DÍLČÍHO PROJEKTU

Podpůrný SW pro akceleraci zavádění vodíkové mobility

AUTOŘI

Stanislav Novotný, Petr Bouchner (Fakulta dopravní, ČVUT v Praze)

AUTORSKÝ TÝM KONCEPČNÍCH MATERIÁLŮ K SOFTWARE

Stanislav Novotný, Petr Bouchner (Fakulta dopravní, ČVUT v Praze)

Jan Přikryl (Výzkumné centrum RICE, Fakulta elektrotechnická, ZČU)

Bronislav Vahalík (Centrum dopravního výzkumu)

Obsah

1	Úvod	4
2	Dosavadní stav techniky.....	5
3	Novost řešení	6
4	Popis SW.....	7
4.1	Koncepční materiály SW.....	7
4.1.1	Použité principy	7
4.1.2	Návrh datových struktur.....	7
4.1.3	Návrh architektury.....	7
4.1.4	Návrh rozhraní	8
4.2	Analýza funkčních požadavků	8
4.2.1	Hlavní funkce softwaru	8
4.2.2	Podpora typů elektrolyzérů	9
4.2.3	Podpora vícestupňové komprese a uskladnění.....	9
4.2.4	Vizualizace výsledků	9
4.2.5	Flexibilita zadávání parametrů	10
4.2.6	Rozšíření funkcionalit	10
4.3	Programátorská dokumentace.....	10
4.3.1	Vývojový diagram softwaru	10
4.3.2	Struktura a klíčové části kódu.....	12
5	Popis ověření funkčnosti SW	14
5.1	Technická validace.....	14
5.2	Testování uživatelského rozhraní.....	14
5.3	Integrace dat a export	15
6	Umístění SW	16
7	Způsob využití	17
7.1	Samostatné využití softwaru	17
7.1.1	Akademické využití	17
7.1.2	Průmyslové využití.....	18
7.2	Role v softwarovém ekosystému	18
8	Seznam příloh.....	19
9	Seznam obrázků	19



1 Úvod

Vodík se stále více uplatňuje v energetice, chemickém průmyslu i dopravě, kde je vnímán jako čistý zdroj energie, přispívající k dekarbonizaci a ochraně životního prostředí. Software pro matematickou simulaci prvků výroby, komprese a uskladnění vodíku byl navržen jako nástroj pro detailní analýzu elektrochemických procesů, které probíhají během výroby zeleného vodíku pomocí elektrolýzy vody, což je proces, při kterém se voda rozkládá na vodík a kyslík za použití elektrického proudu. Modely slouží k i simulaci energetických a ekonomických nároků pro uskladnění takto vyrobeného vodíku v tlakových nádobách.

Cílem softwaru je umožnit uživatelům a zájemcům o vodíkové instalace v detailnější míře modelovat chování celé soustavy elektrolyzéru a vodíkového skladu za různých provozních podmínek, analyzovat jeho výkon a optimalizovat klíčové parametry, jako je produkce vodíku, účinnost a energetická náročnost. Simulace vycházejí z vědeckých principů (Faradayovy zákony, Nernstova rovnice či Butler-Volmerova rovnice), které jsou implementovány do přehledného uživatelského prostředí.

Aplikace tohoto softwaru zahrnuje zájemce o stavbu vodíkových instalací, jimž pomůže odhadnout reálné energetické a ekonomické parametry vyráběného vodíku, a také akademickou sféru, kde je užitečný pro výuku a výzkum, či průmyslové prostředí, kde může pomoci optimalizovat provozní podmínky elektrolyzérů. Software umožňuje snadnou vizualizaci výsledků, což usnadňuje interpretaci dat, a díky flexibilnímu návrhu lze přizpůsobit simulaci různým typům elektrolyzérů. Software se tak stává užitečným nástrojem pro každého, kdo se zabývá vodíkovou ekonomikou a technologiemi souvisejícími s obnovitelnými zdroji energie.

2 Dosavadní stav techniky

Elektrolýza vody je elektrochemický proces, který byl popsán již v 19. století a dodnes tvoří základ výroby vodíku. Současné technologie elektrolyzérů, jako jsou PEM (proton-exchange membrane) a alkalické elektrolyzéry, využívají principy Faradayových zákonů, Nernstovy rovnice a dalších fyzikálních modelů k optimalizaci svého výkonu. Simulace těchto procesů hrají klíčovou roli při analýze a návrhu efektivních provozních podmínek.

Modelování elektrolyzérů se zaměřuje na výpočet provozního napětí, účinnosti a produkce vodíku, což vyžaduje zahrnutí vlivu teploty, tlaku a proudové hustoty. Mezi hlavní používané přístupy patří Nernstova rovnice pro rovnovážné napětí, Butler-Volmerova rovnice pro kinetiku elektrodových reakcí a modelování ohmických ztrát, které vznikají v elektrolytu a elektrochemickém článku.

Dostupné softwarové nástroje, jako MATLAB, COMSOL Multiphysics nebo Python, umožňují simulaci těchto procesů s vysokou přesností. Simulace jsou využívány nejen pro analýzu vlivu provozních parametrů, ale také pro návrh nových materiálů, například pokročilých membrán nebo katalyzátorů, a pro optimalizaci systémů pracujících s obnovitelnými zdroji energie.

Současné simulace se potýkají s výzvami, jako je modelování dynamických podmínek způsobených fluktuacemi napájení z obnovitelných zdrojů nebo integrace elektrolyzérů do větších systémů. I přes tato omezení poskytují moderní simulační nástroje výkonné prostředky pro pochopení a zlepšování technologie elektrolyzérů, čímž přispívají k rozvoji udržitelné produkce vodíku a jeho širšímu využití v průmyslu a energetice.

3 Novost řešení

Navrhovaný software přináší prvky novosti a pokroku do oblasti simulace elektrolyzérů prostřednictvím unikátní kombinace teoretických modelů, uživatelské přívětivosti a přesnosti výpočtů. Jeho přínos není pouze v samotném použití známých modelů pro nové aplikace, ale v rozšíření znalostí o elektrochemických procesech díky inovativnímu přístupu k jejich simulaci. Novost softwaru je doložena technickou dokumentací, která detailně popisuje architekturu, implementované algoritmy a funkční zpracování jednotlivých výpočtů.

Klíčové prvky novosti softwaru zahrnují:

1. **Kombinace vědeckých modelů s praktickým využitím:** Software implementuje pokročilé fyzikální modely, jako je Nernstova rovnice, Butler-Volmerova rovnice a model ohmických ztrát, a propojuje je s uživatelsky přívětivým prostředím. Tato integrace umožňuje přesnější analýzu provozních podmínek elektrolyzérů než většina současných dostupných nástrojů.
2. **Dynamická simulace:** Software umožňuje simulovat nejen statické provozní podmínky, ale i jejich změny v čase, což je nezbytné například při studiu chování elektrolyzérů napájeného obnovitelnými zdroji energie, kde dochází k fluktuacím napětí a proudu.
3. **Detailní vizualizace výsledků:** Výsledky simulací jsou zobrazeny v interaktivní formě, což uživatelům umožňuje lepší pochopení vlivu jednotlivých parametrů na výstupy, jako je účinnost nebo produkce vodíku.
4. **Podpora více typů elektrolyzérů:** Software je navržen tak, aby podporoval simulaci různých technologií elektrolyzérů, jako jsou PEM a alkalické elektrolyzéry, s možností přizpůsobení parametrů specifických pro každý typ.
5. **Rozšiřitelnost:** Modulární architektura umožňuje snadné přidávání dalších funkcionalit, což zajišťuje dlouhodobou využitelnost softwaru a jeho přizpůsobení specifickým potřebám uživatelů.

Novost řešení spočívá také v tom, že software nejen implementuje teoretické modely známé z literatury, ale propojuje je do uceleného systému, který je snadno použitelný i pro uživatele bez pokročilých znalostí elektrochemie. Technická dokumentace detailně dokládá proces návrhu, vývoje a ověření softwaru, čímž potvrzuje jeho unikátní přístup a přínos k rozšíření znalostí v oblasti modelování elektrolyzérů.

4 Popis SW

4.1 Koncepční materiály SW

Navrhovaný software pro simulaci elektrolyzáru byl vytvořen s cílem zajistit přesné modelování elektrochemických procesů, flexibilitu použití a přehlednost výstupů. Při návrhu byly uplatněny osvědčené principy softwarového inženýrství, jako je modulární architektura, škálovatelnost a uživatelská přívětivost. Tento přístup zajišťuje, že software splňuje požadavky na vědecké i průmyslové použití.

4.1.1 Použité principy

- **Modularita a rozšiřitelnost:**
Software je rozdělen do jednotlivých modulů, které odpovídají klíčovým funkcím, jako jsou výpočet provozního napětí, modelování účinnosti a simulace produkce vodíku. Tento návrh umožňuje snadné rozšíření o další typy elektrolyzáru nebo nové funkce, například výpočet emisí nebo dynamické změny provozních podmínek.
- **Flexibilita:**
Software umožňuje uživatelům upravovat vstupní parametry (napětí, proud, teplotu, tlak) a přizpůsobit simulaci konkrétním požadavkům. Rozhraní je navrženo tak, aby bylo intuitivní a vhodné i pro uživatele bez pokročilých znalostí elektrochemie.
- **Přesnost výpočtů:**
Implementované algoritmy vycházejí z ověřených vědeckých rovnic, jako je Nernstova rovnice, Butler-Volmerova rovnice a Faradayovy zákony. Tyto výpočty jsou optimalizovány pro přesné a rychlé zpracování.

4.1.2 Návrh datových struktur

Pro správné zpracování vstupních parametrů a výstupů byly navrženy následující datové struktury:

- **Parametry simulace:**
Obsahují základní údaje, jako je proud, napětí, teplota, tlak, a další technické charakteristiky elektrolyzáru (např. typ membrány, výměnná proudová hustota).
- **Výstupy simulace:**
Zahrnují hodnoty provozního napětí, účinnosti, produkce vodíku a přepětí. Tyto údaje jsou ukládány do strukturované podoby pro snadnou vizualizaci a export.
- **Konektivita:**
Data jsou ukládána ve formátu vhodném pro export (CSV, JSON) a umožňují propojení s dalšími analytickými nástroji.

4.1.3 Návrh architektury

Architektura softwaru je navržena jako vícevrstvá:

- **Uživatelské rozhraní (UI):**
Zajišťuje interakci s uživatelem prostřednictvím intuitivního webového nebo desktopového rozhraní. Uživatelé mohou zadávat parametry a sledovat výstupy ve formě grafů a tabulek.

- **Výpočetní jádro:**
Jádro softwaru obsahuje implementované vědecké rovnice a algoritmy pro simulaci elektrolytických procesů. Je navrženo tak, aby umožňovalo rychlé a přesné výpočty.
- **Datová vrstva:**
Spravuje ukládání a načítání dat simulací. Používá se interní datový formát, který je snadno převoditelný do běžně používaných formátů (např. CSV pro analýzy).

4.1.4 Návrh rozhraní

Rozhraní bylo navrženo s důrazem na jednoduchost a intuitivní ovládání:

- **Zadávání parametrů:**
Uživatelé mohou zadat vstupní údaje prostřednictvím textových polí, posuvníků nebo přednastavených šablon.
- **Vizualizace výsledků:**
Výsledky jsou zobrazovány v přehledných grafech a tabulkách s možností exportu do dalších aplikací.
- **Rozšiřitelnost:**
Rozhraní podporuje připojení k dalším nástrojům, jako jsou datové analytické platformy nebo zařízení pro sběr reálných dat.

4.2 Analýza funkčních požadavků

Při návrhu softwaru byly definovány klíčové funkční požadavky, které odpovídají cílům aplikace. Tyto požadavky zajišťují, že software bude splňovat nároky na přesnost simulací, flexibilitu použití a uživatelskou přívětivost. Funkční požadavky byly rozděleny do několika oblastí, zahrnujících zadávání vstupních parametrů, výpočetní funkce, vizualizaci výsledků a možnosti rozšíření.

4.2.1 Hlavní funkce softwaru

Simulace elektrolytických procesů:

Software umožňuje simulovat provozní podmínky elektrolyzátoru, jako jsou napětí, proud, teplota, tlak a specifické charakteristiky materiálů elektrod a membrán. Díky těmto parametrům lze modelovat reálné provozní podmínky a analyzovat jejich vliv na výkon elektrolyzátoru. Výpočty zahrnují Nernstovo napětí, které určuje rovnovážné napětí článku, Butler-Volmerovo přepětí pro modelování kinetiky elektrodových reakcí a ohmické ztráty způsobené odporem elektrolytu a dalších součástí systému. Uživatelské rozhraní bylo navrženo tak, aby umožňovalo snadné zadávání těchto parametrů a poskytovalo okamžitou zpětnou vazbu ve formě výpočtů a vizualizace výsledků.

Výpočet výkonu a účinnosti:

Klíčovou funkcí je přesné určení provozního napětí elektrolyzátoru a jeho účinnosti na základě zadaných vstupních podmínek. Software vypočítává účinnost jako poměr mezi standardním napětím, které reprezentuje ideální podmínky, a skutečným provozním napětím zahrnujícím ztráty. Díky simulaci vlivu změn provozních parametrů, jako jsou teplota, proud a tlak, mohou uživatelé optimalizovat provozní podmínky tak, aby dosáhli maximální účinnosti při co nejnižších energetických ztrátách.

Modelování produkce vodíku:

Software využívá Faradayovy zákony elektrolýzy k výpočtu teoretické produkce vodíku na základě zadaného proudu a času. Dále zohledňuje účinnost procesu a přepočítává výsledky na hmotnost a objem vyprodukovaného vodíku za standardních nebo specifikovaných podmínek. Výstupy simulace jsou prezentovány ve srozumitelné formě, například jako přehledné grafy a tabulky, a lze je exportovat pro další analýzu v jiných aplikacích.

Modelování komprese vodíku:

Softwarový model komprese představuje model termodynamického procesu, při němž modelujeme vícestupňovou kompresi vodíku s průběžným sledováním kompresních poměrů v jednotlivých stupních. Systém kontinuálně vyhodnocuje teploty média během komprese a počítá aktuální příkon kompresoru a nutnost případného chlazení média. V rámci výpočtů jsou zohledněny reálné vlastnosti vodíku při vysokých tlacích včetně jeho odchylek od ideálního chování, zatímco mezi jednotlivými kompresními stupni je simulováno mezichlazení pro optimalizaci celého procesu a minimalizaci energetické náročnosti komprese.

Modelování uskladnění vodíku:

Simulace skladování vodíku zahrnuje modelování chování tohoto plynu v tlakových lahvích, kde software v reálném čase vypočítává množství uskladněného vodíku v závislosti na měnících se parametrech tlaku a teploty, přičemž současně analyzuje tepelnou výměnu s okolním prostředím a monitoruje skladovací kapacity, to vše při kontinuálním sledování dynamických tlakových změn během procesů plnění a vyprazdňování zásobníků s ohledem na bezpečnostní limity systému.

4.2.2 Podpora typů elektrolyzérů

Software podporuje simulaci více technologií elektrolyzérů:

- **PEM elektrolyzéry:** Modely zahrnují vlastnosti protonově-výměnné membrány, která slouží jako klíčová součást těchto elektrolyzérů. Simulace zohledňují vliv její teploty, vlhkosti a případného stárnutí na výkon systému.
- **Alkalické elektrolyzéry:** Tyto modely se zaměřují na vliv koncentrace a teploty elektrolytu, který ovlivňuje vodivost a účinnost elektrolyzéru.
- **Další typy:** Software nabízí flexibilitu pro přizpůsobení dalším technologiím, například vysokoteplotním SOEC elektrolyzérům, na základě konkrétních požadavků.

4.2.3 Podpora vícestupňové komprese a uskladnění

Software podporuje simulaci vícestupňové komprese vodíku a různých konfigurací jeho uskladnění v tlakových nádobách.

4.2.4 Vizualizace výsledků

Jedním z klíčových požadavků je přehledná a snadno interpretovatelná vizualizace výstupů simulace. Software zahrnuje:

- **Grafické zobrazení:** Výsledky, jako je provozní napětí v závislosti na čase, účinnost při různých teplotách nebo množství vyprodukovaného vodíku, jsou zobrazeny v interaktivních grafech, které uživatelé mohou snadno analyzovat.
- **Numerické tabulky:** Hodnoty simulací jsou zobrazovány v tabulkové podobě, což usnadňuje jejich interpretaci a následný export.
- **Reporty:** Automaticky generované zprávy poskytují shrnutí výsledků simulace, včetně doporučení pro optimalizaci provozních podmínek nebo dalších kroků.

4.2.5 Flexibilita zadávání parametrů

Software umožňuje upravit širokou škálu vstupních parametrů, které ovlivňují průběh simulace:

- **Elektrické parametry:** Zadávání hodnot napětí, proudu a odporu umožňuje simulovat specifické provozní podmínky. Obdobně jsou parametrizované i komponenty tlakovací a uskladňovací soustavy.
- **Provozní podmínky:** Teplota, tlak a koncentrace elektrolytu jsou klíčové proměnné, které ovlivňují účinnost i produkci vodíku, stejně tak na kompresi vodíku mají vliv parametry okolního prostředí.
- **Technické vlastnosti:** Uživatelé mohou specifikovat typ membrány, hustotu proudu nebo výměnnou proudovou hustotu pro přesnější modelování konkrétního typu elektrolyzéru či výkon kompresoru a objem vodíkového skladu.

4.2.6 Rozšíření funkcionalit

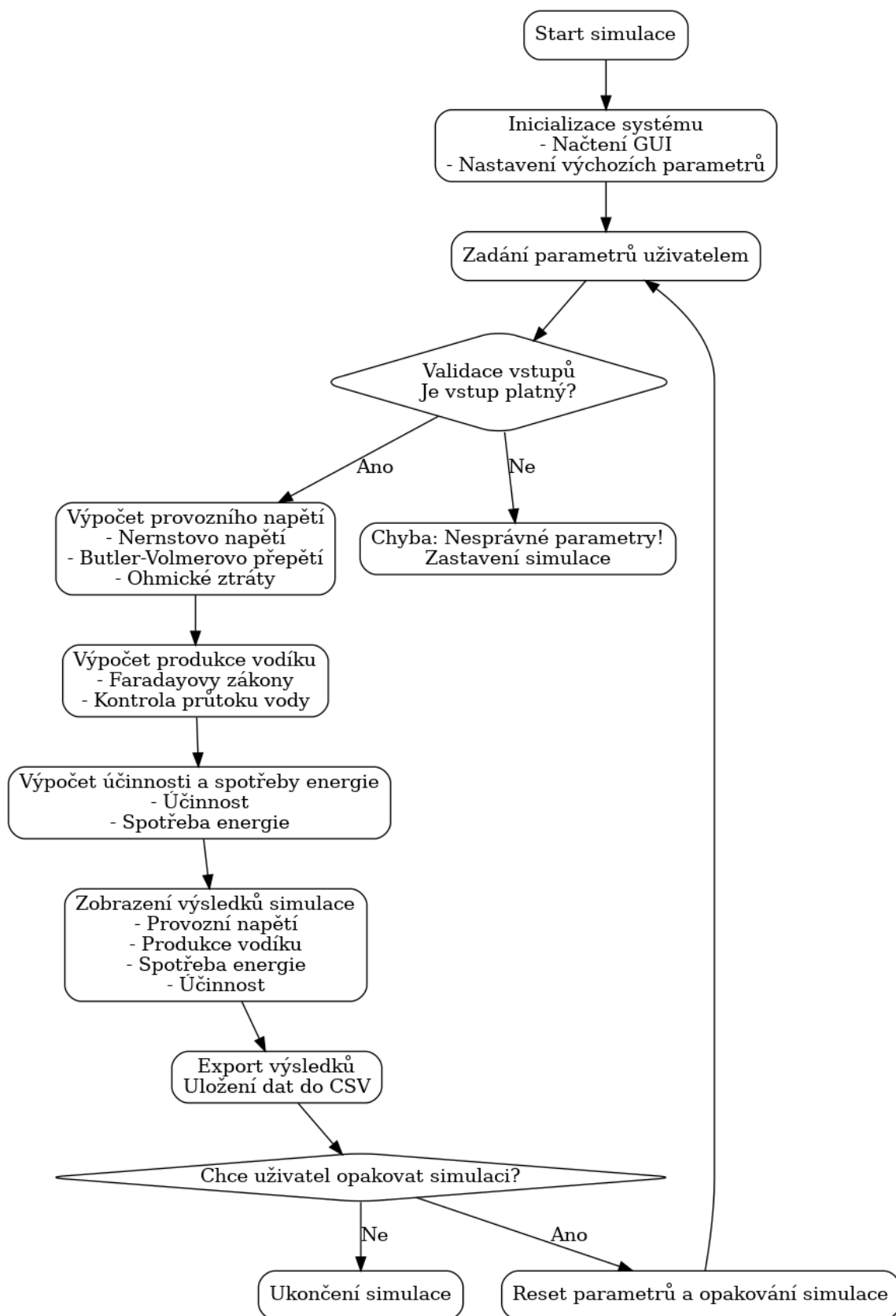
Software byl navržen s důrazem na modulární architekturu, která umožňuje snadné rozšiřování funkcí, například:

- **Dynamické simulace:** Simulační software umožňuje simulovat proměnlivé provozní podmínky, například proměnný dodávaný výkon včetně kolísání napětí nebo proudu při napájení z obnovitelných zdrojů energie.
- **Integrace s IoT:** Podpora připojení k senzorům a dalším zařízením pro sběr reálných dat z provozu elektrolyzéru.
- **Pokročilé výstupy:** Rozšíření o výpočty emisí nebo uhlíkové stopy v případě napájení z konvenčních zdrojů energie a možnost vizualizace procesů v 3D prostředí.

4.3 Programátorská dokumentace

4.3.1 Vývojový diagram softwaru

Níže je zobrazen vývojový diagram, který detailně popisuje klíčové kroky a logiku simulace elektrolyzéru. Tento diagram vizualizuje proces od inicializace až po zobrazení výsledků, včetně možnosti opakování simulace nebo jejího ukončení.



OBRÁZEK 1: VÝVOJOVÝ DIAGRAM SOFTWARE

4.3.2 Struktura a klíčové části kódu

Software je implementován jako samostatně stojící knihovna doplněná o webovou aplikaci, která obsahuje:

Frontend (HTML/JavaScript):

Poskytuje uživatelské rozhraní, kde lze zadávat parametry simulace a zobrazovat výsledky. Zajišťuje:

- Dynamické formuláře pro vstupy.
- Vizualizaci výsledků pomocí grafů a tabulek.

Backend (Python/C++):

Obsahuje výpočetní logiku pro simulaci fyzikálně-chemických procesů, komprese a uskladnění vodíku. Implementované modely výroby zahrnují:

- Výpočet Nernstova napětí.
- Butler-Volmerovu rovnici pro přepětí.
- Ohmické ztráty a energetickou bilanci.
- Faradayovy zákony pro produkci vodíku.

V případě kompresní soustavy uvažujeme modely dvou základních typů kompresorů, membránového a pístového, s volitelným počtem kompresních stupňů podle požadovaného výstupního tlaku a kompresního poměru na stupeň.

Datové operace:

Ukládání a načítání výsledků simulací, export dat do formátu CSV, možný import výkonového průběhu napájení opět ve formátu CSV.

Na následujícím obrázku je ukázka uživatelského rozhraní aplikace v části simulace elektrolýzy vody.

Simulátor elektrolyzáru

Typ elektrolyzáru:

PEM

Typ elektrolyzáru ovlivňuje efektivitu a provozní parametry.

Napětí (V):

1,23

Napětí aplikované na elektrolyzář.

Proud (A):

100

Elektrický proud procházející elektrolyzářem.

Ref. účinnost (%):

100

Odkazuje na ideální účinnost elektrolyzáru bez ztrát.

Ambientní teplota (°C):

25

Provozní teplota ovlivňuje účinnost.

Tlak (atm):

1,0

Tlak ovlivňuje produkci vodíku.

Průtok vody (l/s):

5,0

Průtok vody ovlivňuje chlazení a dodávku reaktantu.

Zdroj energie:

Stálá

Typ zdroje energie ovlivňuje stabilitu a náklady.

Zapnout Nernstovo napětí: ☒
Nernstovo napětí zohledňuje změny napětí.

Zapnout Butler-Volmerovo přepětí: ☒
Přepětí podle rovnice Butler-Volmer.

Zapnout ohmické ztráty: ☒
Ohmické ztráty zvyšují potřebnou energii.

Ohmický odpor (Ω):

0,002

Odpor elektrolyzáru ovlivňuje ohmické ztráty.

Výměnná hustota proudu (A/cm²):

0,005

Určuje kinetiku reakce na elektrodách.

Přenosový koeficient (α):

0,5

Ovlivňuje přepětí a kinetiku reakce.

Provozní teplota (°C):

70

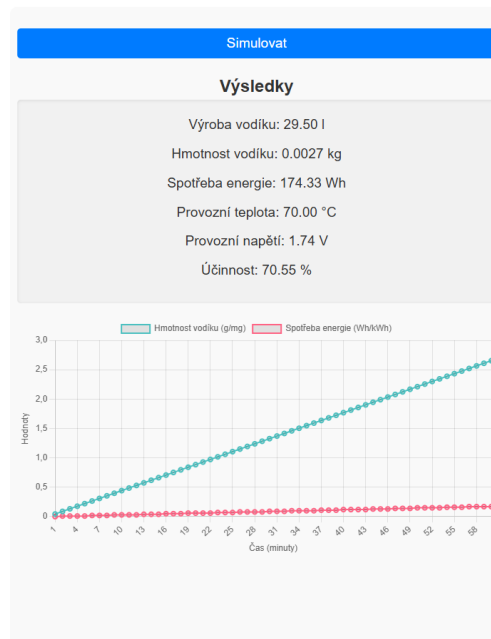
Provozní teplota ovlivňuje účinnost.

Výpočet za:
☐ Sekundu ☐ Za dobu ☒ Simulovat za dobu
Zvolte typ výpočtu.

Doba výroby (hodiny):

1,0

Doba, po kterou bude elektrolyzář provozován.



OBRÁZEK 2: UŽIVATELSKÉ ROZHRANÍ APLIKACE

5 Popis ověření funkčnosti SW

Ověření funkčnosti software pro digitální model prvků výroby, komprese a uskladnění vodíku probíhalo ve dvou hlavních rovinách: *technické validace* implementovaných modelů a *testování uživatelské interakce* v reálných scénářích. Tyto kroky byly nezbytné pro zajištění přesnosti výpočtů, správnosti simulace a intuitivního ovládání. Na základě provedených testů bylo potvrzeno, že software:

- Spolehlivě simuluje klíčové fyzikální procesy elektrolyzéru.
- Poskytuje přesné výsledky s minimální odchylkou od experimentálních dat.
- Nabízí intuitivní a uživatelsky přívětivé rozhraní.
- Podporuje flexibilitu při práci s daty díky možností exportu, ukládání a importu.

5.1 Technická validace

V rámci technické validace byly implementovány komplexní testovací procedury zahrnující verifikaci termodynamických výpočtů, kontrolu bilančních rovnic a ověření přesnosti kompresních modelů. Zvláštní pozornost byla věnována validaci chování systému v mezních stavech, včetně extrémních provozních podmínek a nestandardních situací. Software byl testován na rozsáhlém souboru experimentálních dat získaných z reálných instalací, přičemž byla sledována shoda predikovaných hodnot s naměřenými parametry v klíčových bodech procesu – od elektrolyzy přes vícestupňovou kompresi až po finální uskladnění vodíku.

Pro zajištění komplexní funkčnosti byla provedena série testů zaměřených na stabilitu výpočtů, správnost implementace bezpečnostních limitů a alarmů, verifikaci správného zpracování různých formátů vstupních dat, kontrolu konzistence výstupních reportů a ověření přesnosti exportovaných dat pro následné zpracování.

Byly provedeny následující testy:

Ověření rovnic a modelů:

Implementované fyzikální modely byly porovnány s publikovanými zdroji a jejich výsledky byly validovány proti očekávaným hodnotám.

Srovnání s experimentálními daty:

Výsledky simulace byly porovnány s daty získanými z reálného provozu elektrolyzérů (např. produkce vodíku, účinnost a spotřeba energie). Rozdíl mezi simulací a experimentálními výsledky byl v rámci přijatelné odchylky (<5 %).

Stresové testy:

Testování softwaru na krajní hodnoty parametrů (např. extrémně vysoké proudy nebo teploty) potvrdilo stabilitu aplikace.

5.2 Testování uživatelského rozhraní

Testování uživatelského rozhraní se zaměřilo na to, aby software byl přístupný a snadno ovladatelný i pro uživatele bez pokročilých znalostí programování nebo elektrochemie.

Intuitivnost ovládání:

Rozhraní bylo testováno s uživateli z různých cílových skupin a upraveno na základě jejich zpětné vazby. Funkce, jako zadávání parametrů, spouštění simulace a vizualizace výsledků, byly upraveny tak, aby byly maximálně srozumitelné.

Rychlost zpracování:

Bylo ověřeno, že výsledky simulace jsou generovány během několika sekund, což zajišťuje plynulý pracovní proces.

Kompatibilita:

Rozhraní bylo testováno v různých prohlížečích (Chrome, Firefox, Edge) a na různých zařízeních (desktop, notebook, tablet), aby byla zajištěna jeho univerzálnost.

5.3 Integrace dat a export

Další klíčovou funkcí softwaru je práce s daty, jejich ukládání a export. Tyto funkce byly otestovány následovně:

Ukládání výsledků simulací:

Výsledky simulace byly úspěšně ukládány do interní databáze nebo souborového systému ve formátu CSV.

Export dat:

Export do standardních formátů (např. CSV) byl ověřen z hlediska přesnosti dat a kompatibility s externími nástroji (např. Excel, Python pro další analýzy).

Import reálných dat:

Software dokázal pracovat s reálnými daty z externích zdrojů, například z IoT senzorů, a tyto údaje zahrnout do simulací.

6 Umístění SW

Software pro simulaci výroby vodíku je navržen jako flexibilní nástroj, který může být využit jak v akademických výzkumných a vzdělávacích projektech, tak v průmyslových aplikacích zaměřených na optimalizaci vodíkových technologií a infrastruktury. Jeho distribuce je záměrně koncipována tak, aby byl přístupný oprávněným uživatelům a zároveň zajišťoval ochranu duševního vlastnictví autorů.

Distribuce softwaru je koncipována tak, aby byla efektivní a zároveň chránila autorská práva:

Prostřednictvím interních datových úložišť:

- Software je poskytován organizacím, které jej mohou interně šířit mezi své výzkumné nebo projektové týmy.
- Tento přístup zajišťuje kontrolu nad distribucí, verzováním a správou přístupů.

Na vyžádání u autorů:

- Jednotliví uživatelé nebo organizace mohou o software požádat přímo autory projektu.
- Tento proces umožňuje autorům:
 - Ověřit účel a oprávněnost použití softwaru.
 - Poskytnout uživatelům technickou podporu a pomoc s implementací.
 - Uzavřít s uživateli dohodu o podmínkách použití, včetně pravidel pro ochranu duševního vlastnictví.

7 Způsob využití

Software pro digitální model prvků výroby, komprese a uskladnění vodíku je vytvářen primárně jako samostatný SW, případně lze využít i jako jedna z komponent distribuovaného softwarového ekosystému pro vyhodnocování záměrů ostrovních vodíkových instalací. Tento modul se zaměřuje na simulaci a optimalizaci procesů souvisejících s výrobou, kompresí a skladováním vodíku, což je nezbytné pro navazující části systému, jako jsou doprava, distribuce a spotřeba vodíku.

7.1 Samostatné využití softwaru

Software pro digitální model prvků výroby, komprese a uskladnění vodíku je navržen tak, aby sloužil jak akademickým institucím, tak průmyslovým subjektům. Jeho flexibilita, přesnost simulací a uživatelská přívětivost umožňují využití v širokém spektru projektů, od výzkumných studií po praktické průmyslové aplikace.

Software nachází uplatnění i ve veřejné správě, především v kontextu strategického plánování a implementace politik zaměřených na dekarbonizaci a rozvoj vodíkové infrastruktury. Samosprávy a státní instituce mohou využívat tento nástroj k modelování a optimalizaci budoucích regionálních vodíkových ekosystémů, včetně posouzení energetických nároků, ekonomické efektivity a environmentálních dopadů.

Klíčovou roli v tomto procesu jako gestor vodíkové strategie na národní úrovni hraje Ministerstvo průmyslu a obchodu (MPO). Díky simulacím, které software umožňuje, může MPO efektivně podporovat

- **strategické rozhodování** o prioritních investicích do vodíkových technologií v rámci Národního akčního plánu čisté mobility,
- **analýzu potenciálu** vodíkových řešení pro průmysl, dopravu a energetiku,
- **optimalizaci podpory samosprávám** při realizaci lokálních vodíkových projektů (např. vodíkové plnicí stanice či komunální energetika).

Ve spolupráci s MPO a dalšími partnery lze software rozšířit o analytické moduly podporující rozhodování o státních pobídkách a dotačních programech či o přípravu podkladů pro monitoring plnění závazků vůči Evropské unii v oblasti obnovitelné energie a snižování emisí CO₂.

7.1.1 Akademické využití

Software je ideálním nástrojem pro použití v akademických projektech, protože poskytuje pokročilé možnosti simulace a podporuje vzdělávací aktivity.

- **Výzkumné projekty:**
Umožňuje vědcům testovat teoretické modely výroby vodíku, analyzovat provozní parametry a navrhnout efektivnější systémy. Výsledky simulací mohou být využity jako podklad pro publikace v odborných časopisech nebo pro prezentace na konferencích.
- **Výuka:**
Software může být nasazen jako výukový nástroj na univerzitách a technických školách. Umožňuje studentům interaktivně porozumět klíčovým principům vodíkové technologie, jako jsou výroba, komprese a skladování.

7.1.2 Průmyslové využití

Software je navržen tak, aby odpovídal požadavkům průmyslových projektů zaměřených na implementaci a optimalizaci vodíkové infrastruktury.

- **Optimalizace průmyslových procesů:**
Simulace pomáhají identifikovat úspory energie, optimalizovat provozní parametry elektrolyzátoru a navrhnout efektivní systémy skladování a distribuce vodíku.
- **Podpora inovací:**
Software lze využít při vývoji a testování nových technologií, jako jsou pokročilé elektrolyzátoři, plnicí stanice nebo zařízení pro kompresi a skladování vodíku.

7.2 Role v softwarovém ekosystému

Popisovaný výsledek představuje i součást softwarového ekosystému zaměřeného na efektivní správu vodíkových technologií. Modul umožňuje přesnou simulaci výroby vodíku pomocí elektrolyzátoru, jeho komprese na skladovací tlak a uložení v skladovacích nádobách, přičemž modeluje vliv provozních parametrů, jako jsou napětí, proud, teplota a tlak, na efektivitu procesu. Zajišťuje také výpočet reálné produkce vodíku na základě Faradayových zákonů a analýzu spotřeby energie při různých provozních režimech. Výsledek má následující role:

- **Poskytování klíčových dat:**
Modul generuje data o provozních parametrech (produkce vodíku, účinnost, energetické nároky) a logistických požadavcích (množství skladovaného vodíku, tlak, kapacita). Tato data slouží jako vstupy v softwarovém ekosystému, které je dále analyzují a vizualizují.
- **Podpora analýzy a rozhodování:**
Výstupy jsou začleněny do jednotné databáze, což umožňuje jejich další využití při analýze vodíkového řetězce. Dále přispívá k identifikaci klíčových optimalizačních příležitostí, jako je snížení energetické náročnosti nebo návrh efektivních skladovacích systémů.
- **Vizualizace výsledků:**
Softwarový ekosystém využívá výstupy pro tvorbu přehledných grafů, tabulek a mapových vizualizací, které pomáhají uživatelům lépe pochopit simulované procesy. Příklad vizualizace zahrnuje zobrazení závislosti produkce vodíku na provozních podmínkách nebo kapacit skladování v reálném čase.
- **Integrace s ostatními moduly:**
V softwarovém ekosystému propojuje simulátor výroby vodíku s dalšími moduly systému (např. plnicí stanice, doprava, palivové články) a zajišťuje, že výstupy jsou kompatibilní s jejich vstupy. Díky tomu lze například kombinovat simulace výroby vodíku s logistickými modely dopravy nebo potřebami palivových článků.



8 Seznam příloh

Příloha 1: Videosoubor se záznamem funkčnosti

- [NAHYC_DP003N-V06-Elektrolyzer.mp4](#)

Příloha 2: Uživatelská příručka pro digitální model prvků výroby, komprese a uskladnění vodíku

Viz níže

9 Seznam obrázků

Obrázek 1: Vývojový diagram softwaru	11
Obrázek 2: Uživatelské rozhraní aplikace	13

Příloha 2

Uživatelská příručka pro digitální model prvků výroby, komprese a uskladnění vodíku

Úvod

Tento software je komplexní nástroj pro simulaci procesů výroby, komprese a uskladnění vodíku. Umožňuje modelovat elektrolytický proces výroby vodíku a simulovat energetické nároky na kompresi a uskladnění vodíku v tlakových nádobách. Software pomáhá uživatelům analyzovat provozní parametry, jako je produkce vodíku, účinnost a spotřeba energie, a optimalizovat provozní podmínky pro různé systémy, včetně elektrolyzérů a kompresorů.

Software podporuje různé typy elektrolyzérů (např. PEM, alkalický, SOEC) a umožňuje provádět simulace za různých podmínek, včetně proměnlivých parametrů, jako jsou kolísající napětí při napájení z obnovitelných zdrojů.

Popis softwaru elektrolyzérů

Software je navržen tak, aby byl snadno použitelný, a poskytoval detailní analýzu procesů spojených s výrobou vodíku. Uživatelé mohou zadat různé parametry, jako napětí, proud, teplota, tlak a typ elektrolyzérů, a okamžitě vidět výsledky simulace.

Hlavní funkce:

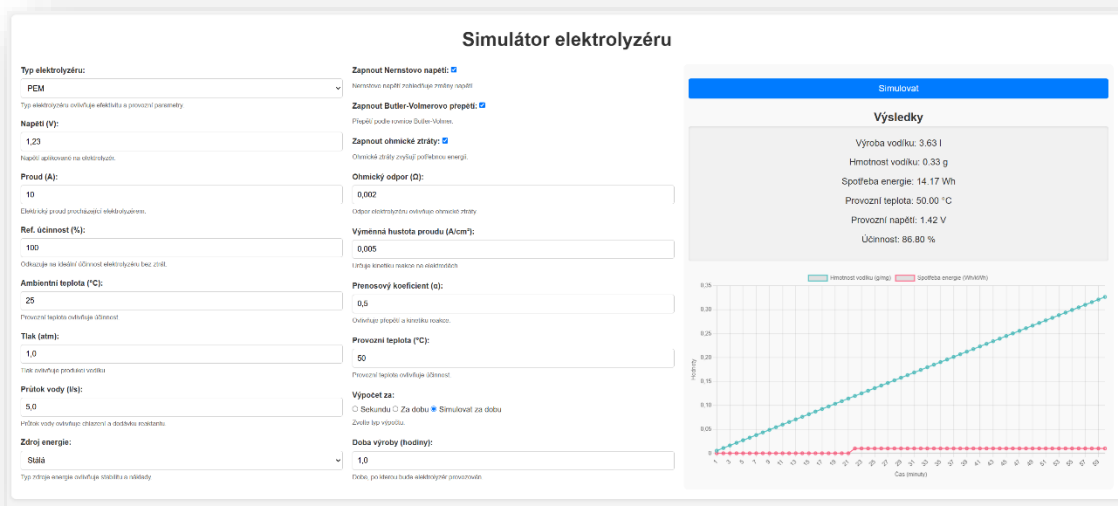
- ❖ **Simulace výroby vodíku:** Simulace pro různé typy elektrolyzérů, včetně PEM, alkalických elektrolyzérů a SOEC.
- ❖ **Kompresní procesy a uskladnění vodíku:** Simulace komprese vodíku a jeho chování při uskladnění v tlakových nádobách.
- ❖ **Výpočet energetické náročnosti:** Simulace spotřeby energie pro elektrolyzéry a kompresory.
- ❖ **Optimalizace parametrů:** Možnost optimalizovat parametry pro maximální účinnost a minimální spotřebu energie.

Použití softwaru a uživatelské rozhraní

Software má přehledné uživatelské rozhraní (GUI), které je rozděleno do několika sekcí a umožňuje snadné zadání parametrů a okamžité zobrazení výsledků simulace.

Hlavní obrazovka

Po spuštění aplikace se zobrazí hlavní obrazovka s názvem "Simulátor elektrolyzáru" a sekcemi pro zadávání parametrů a zobrazování výsledků simulace.



Sekce pro zadání parametrů

❖ Výběr typu elektrolyzáru:

- Uživatel si vybírá mezi různými typy elektrolyzáru (PEM, alkalický, SOEC).
- Tento výběr ovlivňuje výpočty týkající se účinnosti a dalších parametrů.

❖ Napětí (V):

- Uživatel zadává napětí, které bude aplikováno na elektrolyzáru. Toto napětí přímo ovlivňuje výkon elektrolyzáru a množství vyrobeného vodíku.

❖ Proud (A):

- Uživatel zadává proud, který bude procházet elektrolyzárem. Tento parametr je klíčový pro výpočet produkce vodíku.

❖ Teplota (°C):

- Teplota elektrolyzáru ovlivňuje jeho účinnost a celkovou energetickou náročnost.

❖ Tlak (atm):

- Tlak, při kterém probíhá elektrolyza, má vliv na rovnovážné napětí a produkci vodíku.

Typ elektrolyzáru:

PEM

Typ elektrolyzáru ovlivňuje efektivitu a provozní parametry.

Napětí (V):

1,23

Napětí aplikované na elektrolyzáru.

Proud (A):

10

Elektrický proud procházející elektrolyzárem.

Ref. účinnost (%):

100

Odkazuje na ideální účinnost elektrolyzáru bez ztrát.

Ambientní teplota (°C):

25

Provozní teplota ovlivňuje účinnost.

Tlak (atm):

1,0

Tlak ovlivňuje produkci vodíku.

Průtok vody (l/s):

5,0

Průtok vody ovlivňuje chlazení a dodávku reaktantů.

Zdroj energie:

Stálá

Typ zdroje energie ovlivňuje stabilitu a náklady.

❖ **Průtok vody (l/s):**

- Tento parametr určuje množství vody, které bude procházet elektrolyzérem za sekundu. Vyšší průtok vody může zlepšit účinnost a stabilitu reakce.

❖ **Zdroj energie:**

- Uživatel si vybírá, jaký zdroj energie bude použit pro napájení elektrolyzáru (stálý, solární, větrný).

Pokročilá nastavení

❖ **Nernstovo napětí**

- Uživatel může zvolit, zda chce zohlednit Nernstovo napětí při výpočtu simulace. Toto napětí je důležité pro výpočet rovnovážného napětí elektrolyzáru.

❖ **Butler-Volmerovo přepětí**

- Tento model je důležitý pro výpočty týkající se přepětí vzniklého na elektrodách během elektrolyzáru. Uživatel může zapnout nebo vypnout tento model.

❖ **Ohmické ztráty**

- Ohmické ztráty ovlivňují spotřebu energie, protože vznikají při průchodu proudu elektrolytem. Tato volba umožňuje zahrnout ohmické ztráty do simulace.

Výsledky simulace

Po zadání parametrů a spuštění simulace se zobrazí výsledky v textové podobě a v grafech. Sekce výsledků obsahuje:

- ❖ **Výroba vodíku:** Zobrazuje množství vyrobeného vodíku (v gramech nebo kilogramech).
- ❖ **Hmotnost vodíku:** Počet kilogramů vyprodukovaného vodíku.
- ❖ **Spotřeba energie:** Celkové množství energie, které bylo spotřebováno během simulace.
- ❖ **Provozní napětí:** Napětí potřebné pro provoz elektrolyzáru.
- ❖ **Účinnost:** Efektivita elektrolyzáru.

Export výsledků

Uživatel může exportovat výsledky do formátu **CSV** nebo **Excel** pro další analýzu nebo uchování.

Výpočet za:

☐ Sekundu ☐ Za dobu ☒ Simulovat za dobu

Zvolte typ výpočtu.

Doba výroby (hodiny):

1,0

Doba, po kterou bude elektrolyzáru provozován.

Zapnout Nernstovo napětí: ☒

Nernstovo napětí zohledňuje změny napětí.

Zapnout Butler-Volmerovo přepětí: ☒

Přepětí podle rovnice Butler-Volmer.

Zapnout ohmické ztráty: ☒

Ohmické ztráty zvyšují potřebnou energii.

Ohmický odpor (Ω):

0,002

Odpor elektrolyzáru ovlivňuje ohmické ztráty.

Výměnná hustota proudu (A/cm^2):

0,005

Určuje kinetiku reakce na elektrodách.

Přenosový koeficient (α):

0,5

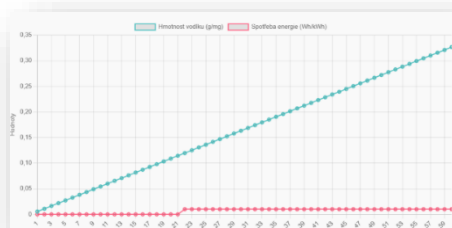
Ovlivňuje přepětí a kinetiku reakce.

Provozní teplota ($^{\circ}C$):

50

Provozní teplota ovlivňuje účinnost.

Výsledky	
Výroba vodíku:	3.63 l
Hmotnost vodíku:	0.33 g
Spotřeba energie:	14.17 Wh
Provozní teplota:	50.00 $^{\circ}C$
Provozní napětí:	1.42 V
Účinnost:	86.80 %



Instalace a nastavení

Pro instalaci a nastavení softwaru postupujte následovně:

Požadavky na systém

- ❖ **Operační systém:** Windows, Linux, macOS
- ❖ **Webový prohlížeč:** Pro spuštění aplikace stačí kompatibilní prohlížeč (např. Chrome, Firefox).
- ❖ **Požadavky na hardware:** Běžný desktopový počítač s připojením k internetu.

Instalace

- ❖ Stáhněte zip soubor softwaru.
- ❖ Rozbalte soubor na požadované místo v počítači.
- ❖ Otevřete soubor index.html v kompatibilním webovém prohlížeči.
- ❖ Software se automaticky načte a je připraven k použití.

Verze v C++

Pokud chcete použít **C++ verzi** softwaru, stáhněte si soubory zdrojového kódu (např. elektrolyzer.cpp, elektrolyzer.h, main.cpp) a proveďte kompilaci pomocí příslušného kompilátoru:

Nastavení

Software nevyžaduje složitou konfiguraci. Všechny parametry lze zadat přímo v uživatelském rozhraní.

Příklady použití

Příklad použití softwaru pro simulaci elektrolyzéru:

- ❖ Otevřete software a vyberte typ elektrolyzéru (např. **PEM**).
- ❖ Zadejte hodnoty pro napětí (2.0 V), proud (10 A), teplotu (25 °C), tlak (1 atm) a průtok vody (5 l/s).
- ❖ Klikněte na **Simulovat** a počkejte na dokončení výpočtů.
- ❖ Výsledky simulace vám ukáží produkci vodíku, spotřebu energie a účinnost.

Odstraňování problémů

Pokud narazíte na problémy při používání softwaru, zde jsou některé běžné problémy a jejich řešení:

- ❖ **Software se nenačítá**

- Ujistěte se, že používáte kompatibilní webový prohlížeč. Zkuste použít aktuální verzi Google Chrome nebo Mozilla Firefox.

❖ **Problémy s výpočty**

- Pokud výpočty neprobíhají správně, ujistěte se, že jste zadali všechny povinné parametry správně.

❖ **Nezobrazují se výsledky**

- Pokud výsledky nejsou zobrazeny, zkuste resetovat všechny parametry a znovu spustit simulaci.

API pro komunikaci s externími systémy

Pro integraci s externími nástroji nebo pro automatizované spuštění simulací je software vybaven API, které umožňuje HTTP komunikaci. API poskytuje rozhraní pro:

- ❖ **Spuštění simulace:** Umožňuje spustit simulaci s parametry zadanými v požadavku.
- ❖ **Získání výsledků simulace:** Umožňuje získat výsledky simulace po jejím dokončení.

Popis HTTP komunikace

- ❖ **Požadavek (POST) na /startSimulation:** Tento koncový bod spustí simulaci s parametry, které jsou odeslány v těle požadavku (např. napětí, proud, teplota).
 - **Parametry:**
 - **type:** typ elektrolyzáru (např. "PEM", "alkalický")
 - **voltage:** napětí v voltech
 - **current:** proud v ampérech
 - **temperature:** teplota v °C
 - **pressure:** tlak v atmosférách
 - **flow_rate:** průtok vody v litrech za sekundu
 - **Odpověď:**
 - **status:** stav simulace ("running" nebo "completed")
 - **simulation_id:** unikátní ID simulace
- ❖ **Požadavek (GET) na /getSimulationResults:** Tento koncový bod vrátí výsledky simulace na základě unikátního ID simulace.
 - **Parametry:**
 - **simulation_id:** ID simulace
 - **Odpověď:**
 - **status:** stav simulace
 - **hydrogen_production:** množství vyrobeného vodíku
 - **energy_consumption:** spotřebovaná energie
 - **efficiency:** účinnost elektrolyzáru

Příklad použití API

Pro spuštění simulace prostřednictvím API by mohl vypadat následující HTTP požadavek:

❖ Požadavek (POST):

- `POST /startSimulation { "type": "PEM", "voltage": 2.0, "current": 10, "temperature": 25, "pressure": 1.0, "flow_rate": 5.0 }`

❖ Odpověď (JSON):

- `{ "status": "running", "simulation_id": "12345" }`

Pro získání výsledků simulace pak použijete:

❖ Požadavek (GET):

- `GET /getSimulationResults?simulation_id=12345`

❖ Odpověď (JSON):

- `{ "status": "completed", "hydrogen_production": 1.23, "energy_consumption": 500, "efficiency": 85 }`

Možnosti rozšíření

Software je modulární a lze jej snadno rozšířit o nové funkce:

- ❖ Podpora nových typů elektrolyzérů.
- ❖ Pokročilé analytické nástroje pro analýzu výsledků.
- ❖ Integrace s IoT zařízeními pro monitorování reálných dat.