

Posudek habilitační práce

Habilitační obor: Teorie stavebních konstrukcí a materiálůUchazeč: Ing. Václav Kočí, Ph.D.Oponent: doc. Ing. Jiří Němeček, Ph.D., DSc.Název habilitační práce: Correction of Systematic Errors of Calorimetric Measurements Using Computational Modelling**aktuálnost námětu habilitační práce**

komentář: Uchazeč se zabývá korekcí kalorimetrických měření stavebních materiálů, které tvoří základ termodynamických úloh a modelování základních chemických procesů v materiálech. Svůj postup demonstruje na několika příkladech, např. vývinu hydratačního tepla vápenného hydrátu a Portlandského cementu, tj. klasických stavebních hmot. Jedná se tedy z hlediska popisu materiálu o fundamentální poznatky a charakterizace. Téma se řadí mezi aktuální problematiky materiálového inženýrství, i když je škoda, že uchazeč neuvádí další příklady progresivních hmot, např. směsných cementů, které se dostávají do popředí zájmu z hlediska snížené energetické náročnosti a využití alternativních pojmů.

☐ vynikající ☒ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý**přístup k řešení**

komentář: Uchazeč v práci analyzuje dva typy kalorimetrických zařízení: izotermální kalorimetr (IC) a diferenční skenovací kalorimetr (DSC). Oba jsou v praxi hojně využívány. Zařízení vykazují určitou míru tepelné setrvačnosti, což může vést k chybám při stanovení vývinu či spotřebování tepla při rychlých jevech, zejména na počátku hydratace a při rychlých fázových přechodech. Uchazeč vyvinul detailní konečně-prvkový model, který popisuje všechny součásti kalorimetru a vzorku. Pro transport tepla použil třídimenzionální popis vedení tepla v izotropním materiálu, založeném na klasickém Fourierově zákonu. Vzhledem ke komplexitě geometrie vede úloha na řešení velkých soustav rovnic, kde se uplatňuje řešení pomocí paralelních algoritmů. Pro správné fitování funkcí využívá uchazeč genetické algorithmy.

☐ vynikající ☒ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý**kvalita a správnost dosažených výsledků**

komentář: Vyvinutý model je kalibrován na několika standardech, je použita jedno či dvoufázová kalibrace na hliníkovém standardu procházejícím procesem tání a fázová přeměna křemene (α - β). Zkalibrovaný model vykazuje velmi dobrou shodu s experimentálními daty. Uchazeč uvádí i nejistoty spojené s použitými parametry při kalibraci, které vykazují akceptovatelné meze.

Model je dále aplikován pro interpretaci měření hydratace vápenného hydrátu a Portlandského cementu s globálně dobrou shodou, resp. je ukázán přínos korekce i pro postižení krátkodobého výkonu při rychlých dějích, které nejsou běžně postiženy.

☒ vynikající	☐ nadprůměrný	☐ průměrný	☐ podprůměrný	☐ slabý
--	--------------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------

původnost dosažených výsledků				
komentář: Habilitační práce představuje originální vědecké výsledky, zejména numerický přístup s popisem nejistot pomocí optimalizace parametrů genetickými algoritmy a použití paralelních algoritmů při řešení rozsáhlých soustav rovnic v inženýrské úloze. Autor se omezil na použití vyvinutého modelu a korekcí na klasické stavební materiály, kde ověřil použitelnost výsledků pro interpretaci kalorimetrických měření.				
☒ vynikající	☐ nadprůměrný	☐ průměrný	☐ podprůměrný	☐ slabý

publikování výsledků				
komentář: Uchazeč publikoval jako autor nebo spoluautor celkem 44 recenzovaných článků (Article in Scopus/WoS), 69 konferenčních příspěvků (Conference Paper in WoS), 4 review (review in WoS) a je autorem jedné kapitoly v knize. Většina prací se zabývá transportními procesy v obvodových a dalších stavebních konstrukcích, materiálovým výzkumem a část je věnována kalorimetrii.				
☐ vynikající	☒ nadprůměrný	☐ průměrný	☐ podprůměrný	☐ slabý

ohlasy výsledků				
komentář: Web of Science u autora vykazuje 116 publikací, 520 citací, 384 bez autocitací, 4.48 citace/článek, h-index 13. Aktivita autora prudce narůstá od r.2016. Nejvyšší podíl na citacích tvoří články s tematikou obvodových plášťů, energetické efektivity, vedení tepla a charakterizace nových materiálů. Celkově tedy je publikační aktivita a její ohlasy dobré. Přímou kalorimetrií se zabývají 4 články. Nejvyšší počet citací autora u těchto článků je 5. Nedá se tedy říci, že by byly zásadní pro obor a těžiště prací uchazeče leží spíše v oblasti modelování materiálů obecně, vedení tepla a vlhkosti v materiálech, kde ovšem kalorimetrie má též své nezastupitelné místo.				
☐ vynikající	☐ nadprůměrný	☒ průměrný	☐ podprůměrný	☐ slabý

uplatnitelnost výsledků pro rozvoj oboru a další bádání				
komentář: Kalorimetrická měření pro charakterizaci kinetiky hydratace a fázových změn ve stavebních materiálech je stále aktuální téma vzhledem k velkému množství nových hmot na bázi odpadních surovin, alternativních pojiv, více-fázových systémů apod. Parametry získané pomocí kalorimetrie tvoří základ pro termodynamické modelování chemických procesů probíhajících ve stavebních hmotách jako je hydratující cement, vápno, sádra a další směsná pojiva.				
☐ vynikající	☒ nadprůměrný	☐ průměrný	☐ podprůměrný	☐ slabý

uplatnitelnost výsledků pro technickou praxi				
komentář: Habilitační práce ukazuje dva případy uplatnitelnosti korekcí chyb pomocí vyvinutého modelu. Pro nalezení závislostí je uplatněn i přístup popisu nejistot a sensitivity na základě genetických algoritmů. Vyvinutý model je rozsáhlý a značně výpočetně náročný, což ho částečně diskvalifikuje pro široké použití. Autor také nevyužil plné síly modelu pro popis méně známých nebo nedostatečně prozkoumaných jevů při kinetice ternárních či více fázových pojiv, kde by jistě model našel své uplatnění. Přitom jsou tato netradiční nebo alternativní pojiva obsahem další práce habilitanta, např. směsi s keramickým prachem nebo materiály s fázovou přeměnou.				

☐ vynikající	☐ nadprůměrný	☒ průměrný	☐ podprůměrný	☐ slabý
-------------------------------------	--------------------------------------	--	--------------------------------------	--------------------------------

splnění požadavků na habilitační práci - úroveň habilitační práce

komentář: Habilitační práce je srozumitelně a přehledně sepsaná a logicky členěná do kapitol. je psaná v anglickém jazyce na dobré jazykové úrovni.

Práce uvádí modely dvou kalorimetrů a výsledky ilustruje na dvou typech materiálů. Je dosaženo velmi dobré predikce a korekce měření. Jiné postupy kalibrace a korekce jsou však uváděny pouze jako reference a není provedeno srovnání různých přístupů a srovnána jejich efektivita versus vyvinutý model. Vypočtené příklady jsou dobře popsány a interpretovány s občasnými drobnými nejasnostmi ve značení veličin. V práci postrádám řešení nových materiálů, které se mohou značně odlišovat od tradičních hmot a bylo by potřeba rozšířit znalosti tímto směrem.

☐ vynikající	☒ nadprůměrný	☐ průměrný	☐ podprůměrný	☐ slabý
-------------------------------------	---	-----------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------

Připomínky

Hlavní připomínky:

1. Autor se v mnoha částech práce odvolává na srovnání s tradičními postupy, např. Tianovu rovnici (Calvet and Prat, 1963). Tato rovnice však není v práci uvedena a není provedeno její srovnání s přístupem autora.
2. V kapitole 4.1.1 autor dospěl k formulaci problému na základě FEM modelu o 366544 elementech. V kapitole 4.2 dokonce o 692071 elementech. Nutnost tak značného počtu prvků a neznámých podle mě není zcela odůvodněná. Dle Fig 4.3, resp. 4.9 se zdá, že model by mohl být značně redukován např. s využitím symetrií. Autor také nezmiňuje detaily modelu, jako např. typ použitého prvku a stupeň aproximace. Není také uvedeno, jak je model numericky stabilní a zda nepřináší problém např. velmi rozdílná velikost mezi jednotlivými prvky v síti.
3. Jaký je praktický význam rozdílu zjištěného v Fig. 5.4 (str. 53) a 5.6 (str.56)? Jaký dopad má zjištěný rozdíl v kumulativních parametrech (Fig. 5.3, 5.8)?
4. v kapitole 5.1.4 nejsou poskytnuty žádné detaily inverzní analýzy založené na GA a jak se podílí použitá metoda na zpřesnění výsledků, resp. jaká je přesnost vzhledem k jiným metodám?

Vedlejší připomínky:

1. V kapitole 1 postrádám zmínku o přínosu J.P. Jouleovi, jeho přínosu vědě a kalorimetrii zvlášť a o Jouleově kalorimetru.
2. Rovnice 1.1 používá značení malé q , běžně užívané pro tok tepla. Logičtější by bylo zapsat rovnici jako bilance tepla s označením velké Q , a upravit navazující text pro bilanci tepla.
3. Rovnice 1.2 chybně obsahuje plochu A , ačkoliv tepelný tok (W/m^2) je definován jako $q=U(T_1-T_2)$ nebo se mělo jednat o prošlé teplo?
4. V kapitole 3.1.2 by bylo vhodné zmínit normové přístupy používané v kalorimetrii (např. ČSN EN 196-8) a jejich použitelnost či nedostatky.
5. Autor používá zvláštní terminologii na str. 17 "unsmoothed curves". Pravděpodobně má na mysli skokové tvary (jump, impulse apod.).
6. Na str. 24 mi není pochopitelná věta " The evaluation of results was the same, in principle, as the evaluation of real experimental data"
7. V kapitole 4.1.2.3 autor uvádí koeficient přesnosti $CoA=2+-0.6V$. Jde skutečně o tak velký rozptyl?
8. V tabulce 4.3 (str. 28) autor uvádí kalibrační konstantu v jednotkách W/K . Není úplně zřejmé, o jakou konstantu jde a zda se nejedná o apparent thermal conductivity $W/m/K$?
9. V rovnici 3.4 (str. 41) je uveden vztah pro radiaci na základě Stefan-Boltzmannova zákona s konstantou λ_{rad} . Jak byla tato konstanta určena a jaký je její vztah s konstantou λ_{sg} z Tab 4.9, resp. Fig. 4.18?

Závěrečné zhodnocení habilitační práce

Habilitační práce se věnuje problému kalibrace a korekce kalorimetrických měření prováděných rutinně na stavebních materiálech. Habilitant sestavil rozsáhlý výpočetní model, který s úspěchem použil pro interpretaci kalorimetrických měření dvou stavebních materiálů na bázi cementu a vápna. Z práce na dané téma vzešly 4 časopisové publikace s průměrným citačním ohlasem. Zde se domnívám, že relativně velké množství práce a dobré výsledky habilitant nedostatečně uplatnil pro popis nových materiálů a zde vidím velký prostor pro budoucí práci. Práce však vznikala v relativně nedávné době, cca od r. 2015, což skýtá naději pro další publikační a citační potenciál. Celková publikační aktivita habilitanta a její ohasy jsou na velmi dobré úrovni.

Práce dle mého názoru splňuje vědecké požadavky na použité metody, řešení, diskusi a interpretaci výsledků. Autor provedl řádné zhodnocení a validaci použitých přístupů. Autor dosáhl ve vybraném tématu dobrého pokroku, s jasným potenciálem pro použití a charakterizaci dalších stavebních hmot. Práce ukazuje vztah k dalším tématům a obsahuje značné množství referencí na vlastní díla i práce dalších autorů.

Proto doporučuji práci autora k obhajobě a doporučuji, aby mu byl po úspěšné rozpravě udělen titul docent.

Doplňující poznámky k habilitační práci a k osobě uchazeče:

K habilitační práci a k osobě uchazeče nemám dalších poznámek.

jmenování docentem doporučuji

ano ☒

ne ☐

Datum: 15.9.2021

Podpis oponenta:

S vypracováním oponentského posudku dávám souhlas s jeho zveřejněním na webových stránkách Fakulty stavební ČVUT v Praze.