

Posudek habilitační práce

Habilitační obor: Teorie stavebních konstrukcí a materiálůUchazeč: Ing. Václav Kočí, Ph.D.Oponent: prof. Ing. RNDr. Stanislav Šťastník, CSc., Ph.D.Název habilitační práce: Correction of Systematic Errors of Calorimetric Measurements Using Computational Modelling

aktuálnost námětu habilitační práce

komentář:

V současné době umožňují počítačové možnosti výpočetního modelování i rozsáhlých termodynamických soustav s vysokou složitostí vnitřního systému a probíhajících chemicko fyzikálních dějů. Při modelování je důležitá přitom adekvátnost popisu systému tak, aby vystihoval průběh reálně probíhajících dějů.

Habilitant k tomu využil znalosti hydratačního tepla silikátových pojiv a výstupu procesu kalorimetrických měření, které se využívají pro kvantifikaci obsahu analyzovaných látek. Tento princip umožňuje vzájemně vymezit a kvantifikovat jednotlivé tepelné procesy probíhající v kalorimetru v průběhu kalorimetrických měření.

☐ vynikající ☒ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý

přístup k řešení

komentář:

Poměrně přesnou metodou minimalizace systematických chyb je užití výpočetního modelování, které je schopné vytvořit velmi přesnou „repliku“ tepelné interakce systému kalorimetr – vzorek umožňující přizpůsobení probíhajících procesů ve vzorku tak, že poskytuje adekvátní výstupy na teplotních čidlech jako procesy skutečného experimentu v kalorimetru. Přímým využitím naměřených údajů ze vzorku lze sestavit přesný popis probíhajícího tepelného procesu včetně související akumulací tepla nebo jeho další redistribucí.

Cílem práce habilitanta je využití možností výpočetní techniky, která je schopna snížit či eliminovat vliv systematické chyby u kalorimetrických měření. K dosažení cíle je třeba splnit následující dílčí úkoly:

- výběr kalorimetrů,
- popis zařízení včetně jejich specifik,
- konstrukce, kalibrace a validace výpočetních modelů kalorimetrů, a
- aplikace výpočetních modelů na praktické příklady.

☐ vynikající ☒ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý

kvalita a správnost dosažených výsledků

komentář:

Různé typy kalorimetrů a jejich konstrukce popisované v práci doprovází těžkosti související s přesností pořízených dat. Zdroje nepřesností bývají různé, většinou jsou však vázány na měření teploty nebo jiných souvisejících veličin popisující probíhající procesy uvnitř kalorimetrů.

Protože teplotní čidla nelze obvykle zavádět do vzorků přímo, přenos tepla ze zdroje do čidel projevuje jisté časové zpoždění, a pokud je mezi zdrojem tepla a teplotním čidlem překážka, typicky stěna kelímku, zvyšuje to nepřesnost tím, že spotřebovává určité teplo, případně jej redistribuuje. Materiálem teplotních čidel jsou převážně kombinace různých kovů, které bývají charakteristické vysokou hodnotou tepelné vodivosti a výrazně vyšší než tepelná vodivost vzorků měřených stavebních materiálů. Přítomnost termočlánků může mít v kalorimetrické soustavě vliv tím, že spotřebuje určitou část tepla na ohřátí, a tím přispívá ke zkreslení teplotního pole uvnitř systému.

Existuje několik metod, jak lze tyto projevy řešit. Přesná experimentální kalibrace zařízení představuje počáteční krok k minimalizaci systematických chyb. K tomuto účelu se většinou používají kalibrační standardy o známých vlastnostech nebo elektrické kalibrační smyčky vybavující Jouleovo teplo. Využití korekčních faktorů je nejjednodušší způsob, jak tyto chyby minimalizovat, což se provádí u adiabatických kalorimetrů. Matematicko-numerické korekce představují další způsob minimalizace chyb. Aplikace dekonvoluční metody patří v tomto smyslu k typickým příkladům, avšak tyto metody nemusí být vždy úspěšné.

☐ vynikající ☒ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý

původnost dosažených výsledků

komentář:

Metodologie a postupy řešení uvedené v jeho práci vychází z autorova dřívějšího výzkumu, který již byl publikován v uznávaných časopisech v databázi Web of Science, a uvádí přehled čtyř nejvýznamnějších publikací. Jde o recenzované články, jež vytváří jádro jeho práce a přehledu o studované odborné oblasti. Uvedené práce byly publikovány v recenzovaných časopisech kategorizovaných převážně jako Q1/D1. Jde o originální publikace, habilitant je uváděn jako první autor.

☒ vynikající ☐ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý

publikování výsledků

komentář:

V databázi WoS eviduje přehled 85 položek habilitanta, z toho je 35 článků v impaktovaných časopisech, 49 konferenčních příspěvků a 1 kapitola v knize.

Habilitant publikoval zejména o počítačovém modelování šíření tepla i vlhkosti.

☒ vynikající ☐ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý

ohlasy výsledků

komentář:

Databáze Web of Science eviduje u habilitanta 395 citací, což činí 4,65 citace na publikaci habilitanta. Hodnota H-indexu habilitanta v současné době nabývá 12.

Ohledně zaměření jeho habilitačního spisu lze související publikace datovat v období 2017 - 2020, počet citací habilitanta je proto nižší a činí hodnotu 3,3 citace na publikaci.

☒ vynikající ☐ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý

uplatnitelnost výsledků pro rozvoj oboru a další bádání

komentář:

Habilitation se zaměřil na zkoumání tepelných procesů doprovázející kalorimetrická měření s cílem specifikovat a eliminovat doprovázející systematické chyby při vlastním měření. Zvoleny byly dva typy kalorimetrů, izotermický kalorimetr (IC) a diferenční skenovací kalorimetr (DSC). Provedené analýzy vnitřních tepelných procesů v kalorimetrech doprovází výpočetní reprezentace jednotlivých zařízení pomocí modelování, jejich kalibrace a validace z hlediska eliminace chyb systematického měření. Postupy kalibrace a validace modelu byly navrženy ve formě komplexního modelu schématem zahrnující kombinaci experimentální a výpočetní kalibrační techniky, také ověřovací přístup založený na použití nezávislé funkce bilance tepelné energie. Porovnání experimentálního a výpočetního výstupu prokázalo velmi těsnou shodu, což naznačuje výhody aplikovaného přístupu modelování oproti běžně používaným matematickým opravám experimentálních výstupů izotermických kalorimetrů.

Pro kalibraci DSC kalorimetru bylo použito pět standardních kovů se známými vlastnostmi při šíření tepla a akumulace. Standardy prošly procesem tavení, přičemž byl zaznamenán a vypočten související tepelný výkon. Srovnáním jednotlivých výstupů s referenčními hodnotami byly jako funkce teploty určeny experimentální a výpočetní kalibrační křivky. Po kalibraci byla shledána velmi těsná shoda s experimentálními výstupy. Zkoumání efektivní měrné tepelné kapacity křemene jako zástupce běžně studovaných materiálů, které však nejsou standardizovány pro DSC kalorimetrii, včetně jeho přechodu $\alpha - \beta$, prokázal habilitant těsnou shodu mezi experimentálními a výpočetními výsledky. Získané hodnoty efektivní měrné tepelné kapacity a měrné entalpie dobře korespondují s výsledky jiných měření dostupné z literatury. Vyvinutý výpočetní model lze považovat za kalibrovaný a připravený pro praktické aplikace.

V poslední části je uveden hlavní přínos práce, který demonstruje schopnosti vyvinutých výpočetních modelů. Zejména IC model byl použit pro hodnocení procesů rychle vyvíjejících teplo, což umožnilo rekonstruovat experimentální výsledky, které mohou souviset se zkreslením teplotních údajů a jejich zpožděním hlavně v počáteční fázi měření. Navrhovaná technika využívala inverzní analýzu přechodových procesů šíření tepla ve výpočetním modelu systému kalorimetr - vzorek. Tímto způsobem aplikovaný přístup umožnil identifikovat vnitřní procesy z tepelných bilancí, které je pozorovatelné konkrétním experimentálním průběhem teploty (včetně vlivu vnitřní akumulace s projevem tepelné setrvačnosti). Vypočtená funkce tepelného výkonu představuje ideální stav bez vlivu setrvačnosti tepla a není ovlivněna vnitřními nedostatky experimentální techniky.

Z uvedeného vyplývá, že způsob uplatnění výsledků je bezprostřední, rovněž umožňuje i další rozšiřování poznatků formou dalšího výzkumu.

☐ vynikající ☒ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý

uplatnitelnost výsledků pro technickou praxi

komentář:

Praktická aplikace metody byla prokázána u případů rychlého vývoje tepla. Prokazuje to například v systému vápenný hydrát – voda, kdy byly předloženy odlišné tepelné výkony i časové

údaje oproti reálným výsledkům měření.

Cenné poznatky byly předloženy i o časovém průběhu hydratace portlandského cementu s vodou.

☐ vynikající ☒ nadprůměrný ☐ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý

splnění požadavků na habilitační práci - úroveň habilitační práce

komentář:

Habilitační spis je celý sepsán v anglickém jazyce na 71 stranách s 10 stranami příloh při zachování všech obvyklých pravidel psaní odborných a vědeckých textů. Práce je členěna do šesti kapitol obsahující 40 obrázků a 12 tabulek.

Podle vyjádření specialisty na anglický jazyk z Filosofické fakulty Masarykovy university v Brně se uvádí obecně celkem dobrá angličtina; vyskytují se sice v textu chyby, ale povětšinou nezabraňují pochopení textu;

- někdy přílišná komplikovanost vět, která brání porozumění a umožňuje dvojí vyznění textu (jde ale o zcela běžný nedostatek textů, které píší technici / inženýři bez hlubšího studia cizího jazyka);

- občas špatně použité členy, čárky, předložky, typografické chyby (ty jsou i v českém abstraktu, jde o nesprávné používání spojovníku), shoda podmětu s přísudkem;

- použití dvojího zápisu stejného výrazu (například modeling X modelling); zájmena slovních kategorií (např. adverbium místo adjektiva – releasing místo released/being released).

☐ vynikající ☐ nadprůměrný ☒ průměrný ☐ podprůměrný ☐ slabý

Připomínky

i) na straně 26, 27 a vícekrát v textu dále se uvádí hodnoty nejistoty měření napětí a tepelného výkonu, avšak neuvádí se hladina spolehlivosti, na níž byly uváděné hodnoty nejistot měření vyčísleny;

ii) vlivy projevující se v tepelné bilanci v procesu měření kalorimetrem jsou sice zahrnuty, při vlastním měření se uplatní řada vedlejších vlivů, například výparné teplo kapalin v rozpouštěcí kalorimetrii nebo smáčecí teplo při měření sypkých vzorků. Chtěl bych se dotázat na způsob jejich vyčíslení nebo míru projevu v celkové tepelné bilanci, pokud byly zohledněny;

iii) u rozměrných železobetonových konstrukcí se při ukládání betonu do stavby projeví hydratační teplo pojiva obvykle nerovnoměrným oteplením masivu. Jakým způsobem lze využít poznatků o dynamice vývoje hydratačního tepla pro formulaci teplotního pole masivu, případně pro vyloučení vzniku trhlin například u staveb typu "Weiße Wanne".

Závěrečné zhodnocení habilitační práce

I přes uvedené připomínky, které sice snižují celkovou úroveň předložené práce, je habilitační spis pana Ing. Václava Kočího, Ph.D., na vysoké odborné i vědecké úrovni, doporučuji proto jeho práci připustit k obhajobě před Vědeckou radou Fakulty stavební ČVUT v Praze.

Doplňující poznámky k habilitační práci a k osobě uchazeče:

Profil habilitanta vypovídá o jeho poměrně širokém odborném "záběru" do problematiky, přitom nejde pouze o chemismus reakcí, jejich reakční tepla probíhající v kalorimetru, nýbrž také o problematiku šíření tepla tělesem kalorimetru, tepelné interakci s okolím kalorimetru, zvláště u dlouhodobých kalorimetrických měření, které musel analyzovat, formulovat do strojových algoritmů a zpracovat tak, aby byly prakticky použitelné. K tomu zcela jednoznačně nevystačí jen popis šíření tepla vedením podle Fourierovy rovnice.

jmenování docentem doporučuji

ano ☒

ne ☐

Datum: 24.09.2021.

Podpis oponenta:

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