

Posudek disertační práce

Uchazeč Ing. Karel Mikeš

Název disertační práce Quasicontinuum-inspired modeling of inelastic materials

Studijní program Fyzikální a materiálové inženýrství

Školitel prof. Ing. Milan Jirásek, DrSc.

Oponent doc. Ing. Jan Eliáš, Ph.D.

e-mail jan.elias@vut.cz

Aktuálnost tématu disertační práce

komentář: Disertační práce se věnuje redukci výpočtové náročnosti mechanických modelů, což je obecně velmi aktuální téma. Navíc tak činí na modelech snažících se přímo zohlednit materiálovou vnitřní strukturu, což považuji také za velmi aktuální. Ačkoliv je většina modelů dvourozměrných, metodiku lze přímo rozšířit také na trojdimenzionální modely a práce také několik prostorových výpočetních modelů obsahuje.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Splnění cílů disertační práce

komentář: První kapitola uvádí tři cíle. Prvním z nich je rozšíření metody kvazikontinua (QC) pro materiály s nepravidelnou vnitřní strukturou a neelastickým chováním. Druhým cílem je vyvinutí adaptivní QC metody pro tyto materiály. Třetím cílem je prokázání toho, že navržené metody fungují s dostatečnou přesností a efektivitou. Domnívám se, že všechny tři cíle byly splněny.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Metody a postupy řešení

Komentář: Práce se skládá z pěti hlavních kapitol, které se všechny věnují metodě kvazikontinua. Jednotlivé kapitoly jsou samostatné články publikované nebo zaslané k recenznímu řízení do různých časopisů.

Druhá kapitola (první je úvodní kapitola) přináší rozšíření QC na nepravidelnou geometrii při uvažování lineárně elastického chování. Ukazuje několik způsobů, jak lze pomocí QC odhadnout elastické charakteristiky diskrétního systému. Metody mají různou přesnost a také různou výpočetní náročnost.

Třetí kapitola je poměrně krátká a představuje adaptivní techniku založenou na jednoduchém kritériu zjemnění modelu. Kdykoliv dojde k inicializaci poškození v některém elementu, jeho okolí je převedeno z elastického QC do plného modelu s poškozením. K nelineárnímu výpočtu je zde použit sekvenčně lineární řešič v totální variantě. Zajímalo by mě, jak by stejná metodologie fungovala pro model s plasticitou a s inkrementální variantou sekvenčního řešiče.

Další kapitola ukazuje aplikaci adaptivní QC metody při modelování šíření dislokací vyvolaných při nanoindentaci. Jsou porovnávána tři sofistikovanější kritéria pro zjemnění a také různé druhy

modelů.

Pátá kapitola se mi zdá z celé práce nejzajímavější, neboť ukazuje použití QC také pro neelastické oblasti. V tomto případě je uvažována plasticita. QC metoda kinematicky svazuje deformace plného modelu stejným způsobem, jakým mikroploškový model promítá makroskopický tenzor deformace na jednotlivé plošky. Práce ukazuje, že lze integrovat napětí na mikroploškách (s váhou odpovídající zastoupení jednotlivých úhlů v plném modelu) a získat tak aproximaci makroskopického tenzoru napětí. Tento přístup selhává při lokalizaci přetvoření, což je ale vyřešeno adaptivním změnou QC na plný model. Neporozuměl jsem, jak přesně probíhá zjemnění v oblastech, kde již došlo k plastickému přetváření. Jsou tyto plastické deformace přeneseny zpět do plného modelu pro odpovídající úhly, nebo jsou zapomenuty?

Šestá kapitola porovnává QC přístup s klasickou homogenizační technikou, kde je homogenizace prováděna předem. Zde bych jen opravil rovnici (6.29), kde by místo aktuální deformace měla vystupovat největší historicky dosažená deformace. Velmi jsem ocenil, že kapitola se kromě zjemnění věnuje i zpětnému procesu, kdy je do modelu navržena hrubší diskretizace.

V disertační práci je mnoho odkazů na články v mezinárodních časopisech a některé kapitoly/články jsou vytvořeny ve spolupráci se zahraničními kolegy. První kapitola je navíc upraveným článkem, který byl publikován v mezinárodním časopise *Computers and Structures*. To svědčí o vynikající odborné kvalitě práce.

Metodologii bych vytkl pouze to, že žádná ze simulací není porovnána s experimentem. Ačkoliv srovnání QC metody a plného modelu je pro účely práce dostatečné, zdálo by se mi vhodnější provádět tato srovnání s použitím modelů a parametrů reprezentujících reálné materiály a jejich chování.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Výsledky disertace - konkrétní přínosy disertanta

komentář: Nemám s QC technikou žádnou předchozí zkušenost a je pro mě tedy poměrně obtížné zhodnotit, které myšlenky jsou převzaty z literatury a které jsou zcela nové. Jednoznačně se mi zdá, že mezi nové myšlenky a postupy patří (i) rozšíření QC pro materiály s nepravidelnou vnitřní strukturou a (ii) použití mikroploškového modelu pro homogenizaci diskrétní struktury s uvažováním plasticity.

Myslím, že u dalších témat, jako například adaptivita či homogenizace, nepřináší práce nové nápady, ale spíše variace postupů z literatury. Přínos disertanta v těchto případech spatřuji v podrobném vysvětlení těchto postupů a také v celé řadě porovnání různých metod mezi sebou.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Význam pro praxi a pro rozvoj vědního oboru

komentář: Práci bych klasifikoval jako základní výzkum, ovšem s velkým potenciálem pro praktické aplikace. Homogenizační techniky a redukce výpočtové náročnosti jsou z praktického pohledu velmi atraktivní témata.

Práce má význam i pro rozvoj vědního oboru. Domnívám se, že články, ze kterých se práce skládá, najdou vysoký počet čtenářů. QC metoda je využívána spíše v oblastech mikrosvěta, kde atomy tvoří pravidelné mřížky. Její rozšíření na nepravidelné struktury umožní využití QC i v jiných oblastech.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Formální úprava disertační práce a její jazyková úroveň

komentář: Práce je napsaná bezchybnou angličtinou a velmi plynule. Dobře se čte a snadno se v ní orientuje. Při čtení jsem narazil pouze na jeden překlep, což je opravdu úctyhodné. Občas mě překvapila terminologie. Například pojem „particle“ si spojuji s objektem, který má translační i rotační stupně volnosti. Zde se používá k označení uzlů bez rotačních stupňů volnosti.

Jediné, co bych vytkl, je chybějící provázanost kapitol. Dizertační práce je vytvořena spojením pěti nezávislých článků, které představují jednotlivé hlavní kapitoly. Články využívají stejnou základní metodologii, a ta je tak popsána v každé kapitole zvlášť a opakuje se. Bylo by vhodnější QC metodu uvést pouze jednou a poté se na její popis jen odkazovat. Stejně je to s rovnicemi: zdá se mi, že rovnice (4.3), (5.1) a (6.11) nebo (4.4), (5.2) a (6.12) jsou identické a jejich opakování je trochu matoucí. Navíc používají jiné značení. To se týká především kapitoly 6, kde se zcela změnil způsob značení proměnných a některé veličiny jsou zapisovány jiným způsobem. Nejvíce mě zmátlo značení modulu pružnosti E . V rovnici (2.20) je použit symbol E pro makroskopický modul pružnosti a rovnice (2.17) používá symbol E s indexem prutu pro označení elastické konstanty diskrétních elementů. Ta je pak značena E_l ale v kapitole 5 zase E_t . V kapitole 6 je to pak samotné E . K tomu je ještě ve čtvrté kapitole symbol E použit pro energii, která je však v různých kapitolách značena také různě. Poslední výtkou k provázanosti je odkazování na původní články místo na kapitoly v dizertaci, což by bylo jistě vhodnější. I přes uvedené výhrady ale výsledná práce působí kompaktně.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Připomínky

Při odborné rozpravě nad disertační prací by Karel Mikeš mohl zodpovědět některé z následujících dotazů:

1. V práci jsou pro aproximaci posunů využity vždy pouze simplexy (trojúhelníky a čtyřstěny). V textu se ale píše, že lze použít i jiné aproximační objemy. Přináší to nějaké komplikace? Proč se v práci používají jen simplexy?
2. Využívá se QC také pro dynamické modely? Jakým způsobem je možné zohlednit rychlosti a zrychlení částic? Lze použít identická aproximační a sumační pravidla?
3. Zaujalo mě, že okrajové podmínky v příkladu z obrázku 5.9 je nutné vnášet pomocí dodatečných uzlů a elementů. Rád bych si poslechl podrobnější vysvětlení týkající se vzniklého problému i jeho řešení. Například proč se tento postup neuplatní i na vodorovných okrajích? Nedochozí tam také k narušení struktury modelu?
4. Při čtení práce jsem pořád doufal, že některý z diskrétních modelů bude obsahovat i rotační stupně volnosti, a tedy i smykové síly. Použité modely totiž neumožňují měnit Poissonovo číslo a některé odborné články tvrdí, že ani neposkytují realistické chování materiálů. Rotace jsou zmíněny nakonec pouze v závěru práce jako její možné pokračování. Mohl by autor naznačit, jakým způsobem by se daly rotace do QC zavést? Zdá se mi, že jedinou možností je považovat je v interpolovaných oblastech za nulové.
5. V závěru práce je zmíněna možnost použití přesnějšího Cauchy-Born pravidla, například v oblasti povrchů. Je to možné i pro nepravidelné vnitřní struktury? Zdá se mi, že při vnesení náhodnosti se složitější interpolace využít nedá. Základní Cauchy-Born pravidlo se mi jeví identické s Voigt pravidlem využívaným v homogenizačních technikách. Je mezi nimi nějaký rozdíl?

Závěrečné zhodnocení disertace

Předložená disertační práce obsahuje cenné původní vědecké výsledky a Karel Mikeš jí prokázal schopnost samostatné vědecké činnosti. Práci celkově hodnotím jako vynikající a jednoznačně ji doporučuji k obhajobě.

Doporučuji po úspěšné obhajobě disertační práce udělení titulu Ph.D. **ano** **ne**

Datum: 14. května 2021

Podpis oponenta: 