

# Oponentský posudek na disertační práci

RNDr. Miroslava Frosta

nazvanou:

## Modeling of phase transformations in shape memory materials

Předložená disertační práce věnovaná matematickému popisu materiálů s tvarovou pamětí, které představují významné téma z oblasti tvorby konstitutivních vztahů heterogenních a nelineárních kontinuí s fázovými přechody. Autor vychází z pečlivého studia dosud používaných modelů a přístupů, upozorňuje na jejich nedostatky a formuluje tři cíle své práce směřující k odstranění některých z nich: 1) formulovat termodynamicky konsistentní 3D konstitutivní model navíc postihující přechodovou fázi R a anizotropii transformace s ohledem na texturu a nesymetrii odezvy vzhledem ke kompresi-extenzi, 2) formulovat evoluční úlohu kvazistatického zatěžování s předepsanou teplotou a provést kvalitativní analýzu řešení, 3) implementovat získaný konstitutivní model v komerčně dostupném systému.

Autor člení práci do 6 kapitol a dodatku s vybranými poznatky konvexní analýzy. V úvodu je uveden přehled existujících modelů s diskusí k jejich vlastnostem, v 2. kapitole je vysvětlena základní koncepce výstavby termodynamicky konsistentní konstitutivní teorie, souhrn nejnovějších modelů SMA polykrystalů obsahuje kapitola 3. Kapitoly 4 a 5 tvoří nejdůležitější část práce: jsou zde odvozeny výrazy pro Helmholtzovu energii a disipační funkci, jednak s využitím experimentálních výsledků, jednak s využitím koncepce nerovnovážné termodynamiky a patřičných předpokladů modelování. Získaný model je pak podroben analýze existence a jednoznačnosti řešení evoluční úlohy. Pro tyto účely je teorie rychlostně nezávislých termodynamických procesů doplněna o vliv teploty. V kapitole 6 je vysvětlena implementace modelu v prostředí výpočtového software (SW) Abaqus a jsou zde s úspěchem porovnány experimentální výsledky s výstupy numerického modelování.

### Připomínky a dotazy.

1. Strana 39: Chybný odkaz na rovnici (4.42) místo (4.20)?
2. Byla zvažována možnost použít algoritmus nehladké optimalizace, viz diskuse na straně 81?
3. Strana 51: jaký je fyzikální podklad výpočtu homogenizovaného smykového modulu tuhosti pro sériové řazení dílčích komponent? (Viz formule (5.9).)
4. Důkaz tvrzení propozice 5.2.2 by mohl být napsán přehledněji. Výsledná nerovnost v (5.37) není jasná.
5. Byla zvažována eventualita řešit problém TIP metodami nehladké optimalizace? Nakolik se promítá do numerické realizace řešení počátečně-okrajových úloh skutečnost, že disipační funkce je nehladká?
6. Formulace vazeb úlohy (6.11) je podivná – neúplná.

7. Interpretace citlivosti řešení na velikost inkrementu v odstavci 6.4.2 není jasná. Graf 6.4 vypovídá, že pro oba zvolené kroky přírůstku jsou výsledky velmi podobné. Bylo by zajímavé zjistit případ, kdy se výsledky rozcházejí.
8. Model obsahuje několik materiálových parametrů. Byla zvažována možnost získat některé z nich (např.  $\sigma^{reo}$ ,  $\Delta s^{AR}$ , moduly  $G$ ) pomocí řešení inverzních úloh, tedy optimalizačních?
9. Jelikož zkoumané materiály vykazují výraznou texturu s lokálně periodickým uspořádáním, bylo by patrně možné využít metod homogenizace odvození některých parametrů na základě dvouškálového modelování. Jaký je názor autora na použití takových postupů modelování?
10. Autor by ve své obhajobě měl shrnout zásadní výstupy své práce, svůj osobní přínos v oblasti reformulace konstitutivních vztahů a v oblasti rozšíření použité teorie rychlostně nezávislých procesů.

**Celkové hodnocení a doporučení.** Disertační práce RNDr. Miroslava Frosta je po obsahové i jazykové stránce velmi kvalitní. Je psána korektní angličtinou a její členění do jednotlivých kapitol je vesměs logické. Zvláště lze ocenit jeho přínos v kapitole věnované matematické analýze modelu a zpracování jednotlivých důkazů využívajících a doplňujících výsledky prací renomovaných odborníků. Samotný důkaz o existenci energetických řešení je rozčleněn do několika etap, jež jsou zpracovány v jednotlivých podkapitolách. Dle autorova vyjádření se jedná o standardní schema důkazu, které je ovšem upraveno pro daný případ časově proměnné teploty okolí a pro odpovídající formu disipační vzdálenosti. Postup důkazu se zdá být správný, ale v některých případech by jeho konkrétní kroky mohly být zpracovány s větším porozuměním pro čtenáře – jedná se o práci na pomezí aplikovaného výzkumu, nelze tedy očekávat, že většina zájemců mimo matematickou obec bude lehce vstřebávat náznaky použití hlubších matematických tvrzení a operací, byť jsou tyto v užší komunitě samozřejmé. Namátkou mohu zmínit nejednoznačnost zápisu vztahů (6.11) nebo (5.119). V tomto ohledu lze velmi pozitivně hodnotit dodatek práce, ačkoliv se domnívám, že zrovna pasáž věnovaná konvexní analýze (pojem konvexní funkce, či Legendre-Fenchelova transformace ...) není tím nejpotřebnějším, o co by práce mohla být doplněna.

Pro matematický model byl navržen iterační dvoukrokový algoritmus výpočtu stavu, který ve svých poditeracích umožňuje využít standardní SW Abaqus pro výpočet deformačního pole a s jeho znalostí aktualizovat vnitřní parametry modelu. Lze očekávat, že navržený postup využívající komerční SW lze využít i pro jiné výpočtové systémy na bázi MKP. Na několika numerických příkladech jsou ukázány některé vlastnosti navrženého způsobu výpočtu a zejména vlivy různých parametrů na chování materiálů s tvarovou pamětí, jako je teplota nebo předpětí.

Závěrem mohu konstatovat, že metody a postupy použité v práci jsou adekvátní. Teoretické výsledky jsou velmi vhodně vyváženy praktickým ověřením a ukázkami použití velmi netriviálního modelu, jenž v dané oblasti materiálů s tvarovou pamětí nepochybě patří ke "state of the art". Vědecký přínos disertační práce a její přínos pro rozvoj vědního oboru jsou

zcela nepochybné, což dokládají i autorovy publikace (patrně 9 publikací, z toho 6 časopiseckých – seznam nebyl přiložen).

Disertační práce výjimečné kvality jasně prokazuje, že RNDr. Miroslav Frost se zapojil do odborné komunity a nabyté vědomosti dokáže dále rozvíjet a aktivně samostatně používat k získání nových výsledků. Proto **vřele doporučuji, aby mu byl na základě obhajoby udělen titul doktor.**

V Plzni 12.11.2012

Prof. Dr. Ing. Eduard Rohan, DSc.  
Katedra mechaniky  
a Katedra matematiky,  
Západočeská univerzita v Plzni