

Univerzita Karlova
Přírodovědecká fakulta

Studijní program: Geologie

Studijní obor: Geologie

Specializace: Geodynamika



Bc. Michal Marek

Role statického zrání v magmatické krystalizaci

Textural coarsening in magmatic crystallization

Diplomová práce

Vedoucí diplomové práce: Mgr. Václav Špillar, Ph.D.

Praha 2024

Prohlašuji, že jsem závěrečnou práci zpracoval samostatně a že jsem uvedl všechny použité informační zdroje a literaturu. Tato práce ani její podstatná část nebyla předložena k získání jiného nebo stejného akademického titulu.

V Praze dne 17.7. 2024

.....

Poděkování

Děkuji svému vedoucímu práce Václavu Špillarovi, za vlídné vedení a mnohé užitečné nápady pro zlepšení této práce. Také bych rád poděkoval své přítelkyni za pochopení a podporu při práci na simulaci, psaní tohoto textu, a také za jeho finální korekturu.

Abstrakt

Tato práce se zabývá vytvořením simulace procesu Ostwaldova zrání. Ostwaldovo zrání je statický proces (dochází k němu bez působení napětí), který zásadním způsobem mění vzhled textur hornin. Tento proces způsobuje redistribuci hmoty od malých krystalů k velkým, což zapříčiňuje růst velkých krystalů a rozpouštění těch menších. To se děje z důvodu snížení celkové povrchové energie systému. Během procesu Ostwaldova zrání dochází k tomu, že se textura stává čím dál více stejnozrnnou a také dochází k přepsání původního texturního záznamu.

Byla vytvořena zjednodušená simulace krystalizace horniny z magmatu pro účel vygenerování realistické počáteční textury. Poté byla vytvořena simulace Ostwaldova zrání, kde může být vytvořená počáteční textura vystavena zrání. Dále byly vytvořeny programy pro zpracování dat a také pro digitalizaci textury vzorků reálných hornin, se kterými měly být výsledky simulace porovnány. CSD křivky simulovaných textur se vyvíjí dle teoretických předpovědí, tedy z log-lineárních přecházejí v konkávní (především v oblasti malých krystalů), což ukazuje na ochuzení o malé krystaly. Časový vývoj průměrných velikostí krystalů se řídí power-law zákonem, avšak bylo zjištěno, že časové škály simulace neodpovídají zcela realitě. Zastoupení vyrovnaných (120°) trojných bodů v textuře zpočátku rychle narůstá a později dojde ke zpomalení nárůstu až ustálení na hodnotě okolo 20 %. Dále bylo zjištěno, že reálná textura nevykazuje známky výrazného ochuzení o malé krystaly, v čemž by mohlo hrát roli vystavení horniny dynamické rekrystalizaci, která na rozdíl od Ostwaldova zrání způsobuje rozpad velkých krystalů na malé.

Abstract

This thesis is focused on developing simulation of Ostwald ripening. Ostwald ripening is a static process (stress is not applied), which essentially changes the texture of rocks. This process causes a redistribution of mass from the small crystals to the larger ones, which causes growth of the big crystals and dissolution of the smaller ones. This process happens in order to decrease bulk surface energy of the system. During Ostwald ripening, the texture starts to be progressively more fine-grained, and the overprinting of the original textural record occurs.

The simplified simulation of magmatic crystallization was made for the purpose of creation of realistic original texture. After that, the simulation of Ostwald ripening, where the ripening can be applied on generated texture, was developed. Moreover, programs for processing data and for digitalization of texture of real rocks samples, which were supposed to be used for comparison with the data from the simulation, were created. The evolution of CSD curves of simulated textures meet the theoretical predictions, from log-linear to concave shape (mostly in area of small crystals), which indicates the depletion of small crystals. The time evolution of mean sizes of crystals follows the power-law. However, it was found out that the time scales of the simulation are not fully realistic. The concentration of equilibrated triple-points in the texture is increasing quickly at the beginning of the simulation, but starts to slow down later and stabilizes on the value of 20 %. Furthermore, it was found out that the real texture doesn't show any signs of significant depletion of small crystals, which could have been caused by dynamic recrystallization, which unlike Ostwald ripening causes the breakdown of big crystals to the smaller ones.

Obsah

1 Úvod.....	1
2 Fyzikální základy nukleace, růstu a zrání	2
2.1 Nukleace	2
2.2 Růst.....	4
2.3 Zrání.....	5
3 Ostwaldovo zrání v geologii	9
4 Celulární automat	12
4.1 Struktura celulárního automatu	12
4.2 Popis funkce 2D celulárního automatu se čtvercovou sítí buněk.....	13
5 Simulace krystalizace a Ostwaldova zrání	15
5.1 Struktura simulace	15
5.2 Inicializace celulárního automatu	17
5.2.1 Nastavení počátečních hodnot	17
5.2.2 Nastavení okolí buněk.....	18
5.2.3 Soubory pro exportování dat.....	19
5.3 Průběh simulace.....	20
5.3.1 První fáze: nukleace a růst	20
5.3.1.1 Nukleace.....	20
5.3.1.2 Růst.....	21
5.3.2 Druhá fáze: zrání	23
5.3.2.1 Zrání	23
5.3.2.2 Výpočet křivosti	25
5.3.2.3 Kontrola hmotové bilance	26
5.4 Vizualizace průběhu simulace (animace).....	27
6 Zpracování texturních dat.....	29
6.1 Průměrná velikost krystalů	29
6.2 Shlukovací index R	29
6.3 CSD křivky	30
6.4 Úhly v trojných bodech	31
6.5 Stupeň rekrystalizace	33
6.6 Délka mezizrnové hranice	33
7 Zpracování reálné textury.....	34
7.1 Kdyňský masiv	34
7.2 Digitalizace reálné textury.....	35

7.3 Extrahování dat z reálné textury	36
8 Výsledky.....	37
8.1 Data ze simulací.....	37
8.2 Data z reálné textury	45
9 Diskuse	48
9.1 Vývoj průměrné velikosti krystalů	48
9.2 Vývoj úhlů v trojných bodech	49
9.3 Vývoj CSD křivek	50
9.4 Vývoj shlukovacího indexu	51
9.5 Vývoj celkové délky mezizrnové hranice	51
9.6 Vývoj stupně rekrystalizace.....	52
9.7 Data z textury reálné horniny	53
10 Závěr.....	54
11 Zdroje	55
12 Přílohy	59

1 Úvod

Textury magmatických hornin vznikají během krystalizace z magmatu a jejich vzhled je závislý na mnoha faktorech. Důležitými faktory jsou například rychlosti nukleace a růstu jednotlivých minerálů, které mají zásadní vliv na tvar CSD křivek. Ty jsou u magmatických textur často log-lineární (například Cashman, Marsh 1988 nebo Ni et al. 2014). Zajímavé ale je, že textura horniny se může měnit i po skončení krystalizace, kdy je již hornina zcela utuhlá. Během této změny dochází k rozpouštění malých krystalů a růstu těch větších. To je umožněno díky difuzi a také povrchové reakci mezi dvěma sousedními krystaly. Tímto způsobem může dojít k přepsání původního texturního záznamu vzniklého během krystalizace (například Boorman et al. 2004). Popsaný proces se nazývá Ostwaldovo zrání.

Ostwaldovo zrání má velký vliv na materiálové vlastnosti ocelí a jiných slitin (například Kalogeridis et al. 1999, Lescoat et al. 2014 nebo Ji et al. 2018). Ostwaldovo zrání je však velmi důležité také v geologických systémech, kde způsobuje změnu textury horniny a tím přepisuje původní texturní záznam (Boorman et al. 2004). Dále může Ostwaldovo zrání ovlivňovat zonalitu některých minerálů (Miyazaki 1991) nebo má vliv na růst bublin volatilií uvolňujících se z magmatu (Lautze et al. 2011).

Cílem této práce bylo vytvořit simulaci Ostwaldova zrání a následně ověřit její správnost porovnáním dat ze simulace s teorií a s texturou reálných hornin, které Ostwaldovo zrání prodělaly. Simulace byla vytvořena pomocí celulárního automatu, což je simulační model využívající síť buněk. Každá buňka má přiřazen určitý stav a v každém kroku simulace se u každé buňky počítá stav nový na základě definované stavové funkce využívající k výpočtu hodnoty okolních buněk. Pomocí celulárního automatu je možné s použitím jednoduchého pravidla nasimulovat systém s komplikovaným vývojem. Součástí této práce je také vytvoření zjednodušeného modelu krystalizace, která má za cíl vygenerovat realistickou počáteční texturu, sloužící jako počáteční podmínka pro Ostwaldovo zrání.

2 Fyzikální základy nukleace, růstu a zrání

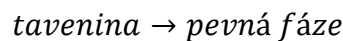
Tato práce se zaměřuje především na simulaci statického zrání v magmatických horninách. Tento jev se však odehrává těsně po krystalizaci, či ještě v jejím průběhu, kdy má hornina dostatečně vysokou teplotu, která je nezbytná pro aktivaci difuze. Z tohoto důvodu je do simulace zahrnuta také krystalizace a s ní spojená nukleace a růst krystalů. V následující části bude podán základní fyzikální přehled těchto tří procesů.

2.1 Nukleace

Nukleace je proces, při kterém v tavenině vznikají zárodky (nuklea) nových krystalů. Tato nuklea jsou tvořena drobnými shluky molekul daného minerálu a slouží jako základní stavební kámen pro další růst tohoto krystalu (viz kapitola 2.2).

Nukleace se dělí na homogenní a heterogenní (Cashman 1990). Při homogenní nukleaci vznikají nuklea náhodnými srážkami částic přímo z taveniny. U heterogenní nukleace se utvářejí nuklea na povrchu již dříve vzniklých heterogenit (např. krystalů, bublin odmišlených plynů atd.), což je energeticky výhodnější než nukleace přímo z taveniny.

Řídící silou nukleace je velikost Gibbsovy energie reakce (ΔG):

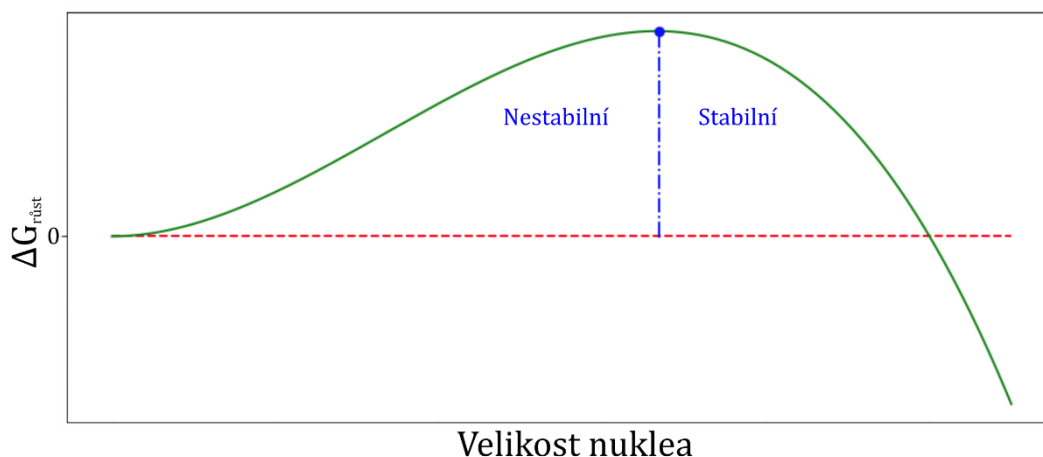


Když se při chladnutí sníží teplota taveniny na teplotu likvidu, je systém v rovnováze a ΔG je rovno 0. K nukleaci tedy nedochází. K tomu je zapotřebí určitý stupeň podchlazení daného systému, které zajistí záporné ΔG (Philpotts 2009).

Aby bylo nukleo při homogenní nukleaci stabilní a mohlo dále růst, je nutné, aby dosáhlo určité kritické velikosti. Pokud by náhodnými srážkami vzniklo nukleo menší než tato velikost, došlo by k jeho rozpadu. To je způsobeno tím, že proti vzniku nuklea působí jeho povrchová energie. Při podchlazení systému totiž pevná fáze sice představuje stav s nižší energií, ale na rozhraní pevná fáze–tavenina vzniknou přerušené chemické vazby, které způsobují energetické znevýhodnění a působí tak proti vzniku nuklea. Na druhou stranu, energetickou výhodnost pevné fáze představuje objemová energie nuklea. Povrchová energie narůstá s druhou mocninou velikosti nuklea, kdežto objemová energie klesá s třetí mocninou velikosti nuklea. Výsledná Gibbsova energie $\Delta G_{\text{růst}}$ je součtem povrchové a objemové energie (Philpotts 2009), tedy:

$$\Delta G_{\text{růst}} = \Delta G_{\text{objem}} + \Delta G_{\text{povrch}} \cdot \{1\}$$

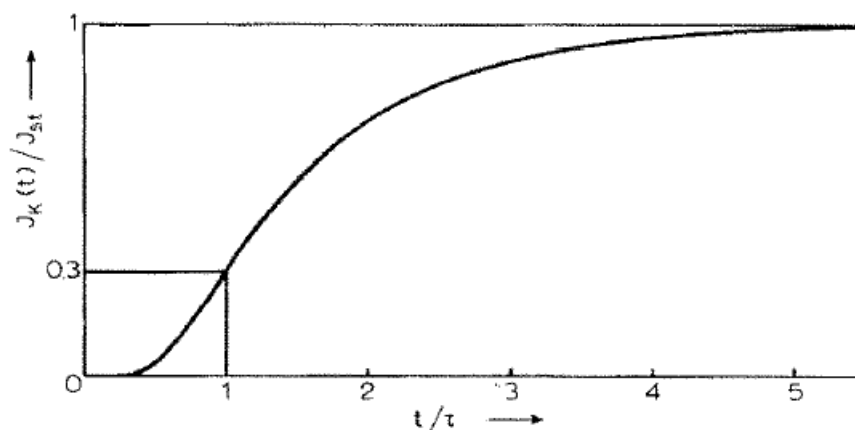
Vývoj $\Delta G_{\text{růst}}$ s nárůstem velikosti nuklea je znázorněn na obrázku 1. Na tomto obrázku je modrou čarou znázorněna kritická velikost nuklea. Nalevo od této velikosti není nukleo stabilní, protože jeho další zvětšování (růst) by vedl k nárůstu $\Delta G_{\text{růst}}$ a je tedy energeticky výhodnější rozpad takového nuklea. Napravo od kritické velikosti je nukleo stabilní, protože jeho další růst způsobí snížení $\Delta G_{\text{růst}}$.



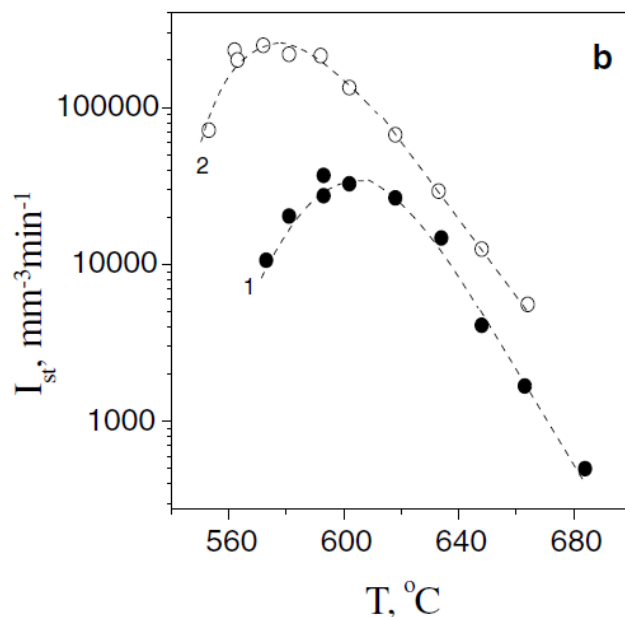
Obr. 1 – Graf závislosti $\Delta G_{\text{růst}}$ na velikosti nuklea (zeleně) s modře vyznačenou kritickou velikostí oddělující pole stability a nestability nuklea. Modrý bod na vrcholu křivky znázorňuje aktivační energii.

Z tohoto důvodu je energeticky výhodnější heterogenní nukleace. Když se totiž nukleo utvoří na povrchu již dříve vzniklého krystalu, je povrchová energie tohoto nuklea nižší oproti případu, kdy je celé nukleo obklopeno taveninou.

Nukleace má dvě fáze, „*transient-state*“ a „*steady-state*“. Tyto dvě fáze se vzájemně liší časovým vývojem rychlosti nukleace. Jako první nastává „*transient-state*“ fáze. Na počátku nukleace je rychlost nukleace nulová a postupně narůstá s časem (Obr. 2). To je způsobeno postupným vznikem „*steady-state*“ distribuce počátečních shluků atomů, tvořících prvotní nuklea (Hammer 2008). Po ustálení systému, kdy rychlost nukleace dosáhne svého maxima, začíná „*steady-state*“ fáze. Během této fáze již není rychlost závislá na čase (mění se s mírou podchlazení, viz Obr. 3).



Obr. 2 – Časový vývoj rychlosti nukleace během „*transient-state*“ fáze (Kashchiev 1969).



Obr. 3 – Vývoj rychlosti „steady-state“ nukleace v závislosti na teplotě (Fokin et al. 2006).

Rychlost „steady-state“ homogenní nukleace pro sférická nuklea je dána vztahem (Cashman 1990)

$$I = vNe^{-\frac{\Delta G_a + \Delta G}{RT}}, \quad \{2\}$$

kde $v = kT/h$, k je Boltzmannova konstanta, h je Planckova konstanta a T je teplota. Proměnná N je počet atomů na jednotku objemu, ΔG_a je aktivační energie a ΔG je dáno vztahem

$$\Delta G = \frac{16\pi}{3} \frac{\sigma^3}{\Delta G_v^2}, \quad \{3\}$$

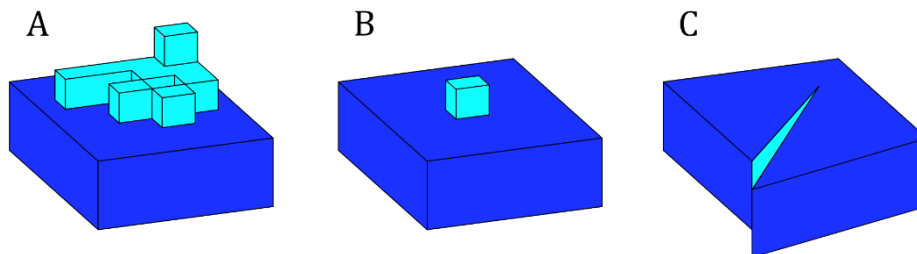
kde σ představuje povrchovou energii a ΔG_v energii objemovou (Cashman 1990).

2.2 Růst

Po vzniku stabilního nuklea následuje jeho růst. Při růstu dochází k připojování nových stavebních prvků (atomů a molekul) daného minerálu ke stávajícímu nukleu.

Rychlost růstu je řízena čtyřmi procesy (Philpotts 2009). Prvním je rychlost difuze stavebních prvků skrze taveninu. Dalším řídicím procesem může být potřeba reakce dílčích komponent, čímž vznikne komponenta vhodná pro připojení ke krystalu. Dále následuje proces připojování stavebních prvků k rostoucímu krystalu. Stavební prvky preferují připojování na takové pozice na povrchu krystalu, kde budou mít největší počet sousedů (Obr. 4A). Tyto pozice jsou totiž energeticky nejvýhodnější. Pokud je však povrch krystalu hladký (nejsou zde pozice, kde by nově připojený stavební prvek mohl mít dva a více sousedů), je třeba, aby se nový stavební prvek připojil na méně energeticky výhodnou pozici a založil tak novou vrstvu, kam se mohou připojovat další stavební prvky (nukleace nové vrstvy – Obr. 4B). Energeticky výhodnější pozice na povrchu krystalu mohou vzniknout také díky přítomnosti šroubové (screw) dislokace

(Obr. 4C). Posledním procesem řídícím rychlost růstu je uvolnění tepla po připojení stavebního prvku a zároveň hromadění komponent, které se k danému krystalu nepřipojují, v těsné blízkosti tohoto krystalu. Tyto nahromaděné komponenty mohou snižovat teplotu likvidu a ve spojení s nárůstem teploty způsobeném uvolňováním tepla při krystalizaci může dojít k výraznému zpomalení či zastavení růstu krystalu. Je tedy třeba uvolněné teplo a nahromaděné komponenty nevstupující do krystalu odvádět pryč. Výsledná rychlost růstu se pak odvíjí od rychlosti nejpomalejšího z těchto čtyř procesů.



Obr. 4 – Příklady možných tvarů povrchu krystalu. A – Obsahuje dostatečný počet energeticky výhodných pozic, na kterých mohou přirůstat nové stavební prvky. B – Na rovném povrchu nebyly žádné energeticky výhodné pozice, proto zde nukleovala nová vrstva. C – Šroubová dislokace, vytváří energeticky výhodnější pozice pro růst krystalu.

Pokud je růst krystalu řízen rychlostí difuze, pak je rychlost růstu dána vztahem (Philpotts 2009)

$$v_r = \frac{k_D}{x}, \quad \{4\}$$

kde k_D je konstanta difuzních procesů a x vyjadřuje velikost krystalu. Pokud je růst řízen rychlostí připojování nových stavebních prvků na povrch krystalu, je rychlost růstu dána vztahem (Philpotts 2009)

$$v_r = k_R, \quad \{5\}$$

kde k_R je konstanta reakce probíhající na povrchu krystalu za účelem připojení nových stavebních prvků.

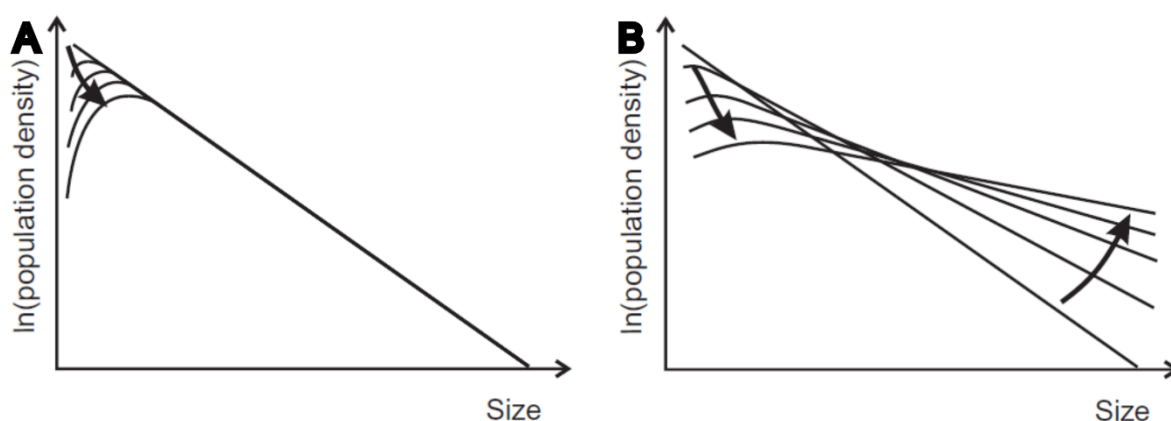
2.3 Zrání

Po krystalizaci, či ještě v jejím průběhu, může začít docházet k procesu zvaném Ostwaldovo zrání. Při tomto procesu dochází k redistribuci hmoty od malých krystalů ke krystalům větším, což má za následek zvětšování větších krystalů na úkor těch menších. Také přitom dochází k vyrovnání úhlů v trojných bodech (místech, kde se stýkají tři krystaly), tj. všechny tři úhly mají 120° (Boor 2016). Jde o důsledek zmenšování poměru povrchu krystalů ku jejich objemu, za účelem snížení celkové povrchové energie systému (Voorhees 1985).

Proces Ostwaldova zrání tak způsobuje, že v čerstvě vykrystalizované hornině ubývá malých krystalů a zvyšuje se počet těch větších (Marsh 1988). Tento jev má velký vliv na tvar distribučních křivek velikostí krystalů (CSD). Distribuční křivky se tak stávají více a více

konkávní, zatímco těsně po vykrytalizování byly spíše lineární a klesající (Obr. 5). CSD křivky jsou vykreslovány v logaritmické škále, proto lineární CSD křivka znamená, že se snižující se velikostí narůstá počet krystalů exponenciálně.

Pokud bychom uvažovali systém, kde jsou krystaly dané pevné fáze rozmístěny v tavenině, je tento proces vysvětlován pomocí odlišných rozpustností krystalů o různých velikostech (Park, Hanson 1999). Menší krystaly mají totiž vyšší rozpustnost než ty větší. To má za následek vyšší nárůst koncentrace stavebních prvků pevné fáze okolo malých krystalů než u velkých krystalů. Díky tomu vznikne gradient koncentrace a stavební prvky se začnou difuzí pohybovat směrem od malých krystalů k těm velkým. Rychlost Ostwaldova zrání je ovlivňována dvěma procesy, difuzí a reakcí na povrchu krystalu. Pomalejší z nich pak rychlost zrání řídí.



Obr. 5 – Příklady tvarů CSD křivek na počátku zrání a na jeho konci (Higgins 2011). Je zde patrné zakřivení křivky vlivem úbytku malých krystalů a zvětšováním relativně větších krystalů. Obrázek A zachycuje vývoj CSD křivek popsany LSW teorií (Lifshitz, Slyozov 1961, Wagner 1961), zatímco na obrázku B je zobrazen vývoj dle teorie „Communicating Neighbours“ (DeHoff 1991). Četnosti jsou v logaritmickém měřítku.

Tento proces však funguje i v systémech, kde již žádná tavenina není a hornina je tak zcela vykrytalizovaná. Zde si krystaly mohou vyměňovat ionty pomocí difuze podél hranic zrn. Pokud spolu přímo sousedí dva krystaly stejného minerálu, může být v tomto místě zrání limitováno rychlostí reakce, při které dojde k oddělení stavebního prvku od menšího z těchto dvou krystalů, jeho přeorientování a opětovnému připojení k většímu krystalu.

První matematický model Ostwaldova zrání řízeného difuzí vytvořili Lifshitz a Slyozov (1961) a Wagner (1961) známý jako LSW teorie. Tato teorie má však určité nedostatky. Například je formulována pro kulové krystaly, které mezi sebou nekomunikují přímo, ale vyměňují si komponenty skrze okolní tekutinu (Higgins 2011). O třicet let později vytvořil DeHoff (1991) novou teorii nazvanou „Communicating Neighbours“ (CN), kde spolu krystaly již komunikují přímo. Také vývoj CSD křivek popsany touto teorií lépe odpovídá pozorováním přírodních systémů (Higgins 1991). Experimentálně se Ostwaldovým zráním zabývalo několik autorů (např. Park, Hanson 1999 nebo Cabane et al. 2005) a simulací se zabýval například Han (2018), který k tomu využil celulární automat (viz kapitola 5).

Dle Humphreyse (1997) lze matematický popis sil působících na hranice krystalů a rychlostí jejich pohybu (Grain Boundary Migration - GBM) provést za pomoci čtyř veličin. Prvním

z nich je misorientace (θ) krystalových mřížek sousedních krystalů (oddělených hranicí, jejíž pohyb popisujeme). Druhou veličinou je energie hranice γ . Tato energie je ovlivněna misorientací. Zpočátku s misorientací narůstá, poté se ale nárůst začne zpomalovat a při větší misorientaci než 10–15° (Boor 2016) je již energie γ konstantní (obr. 4). Humphreys (1997) uvádí závislost γ na θ ve tvaru:

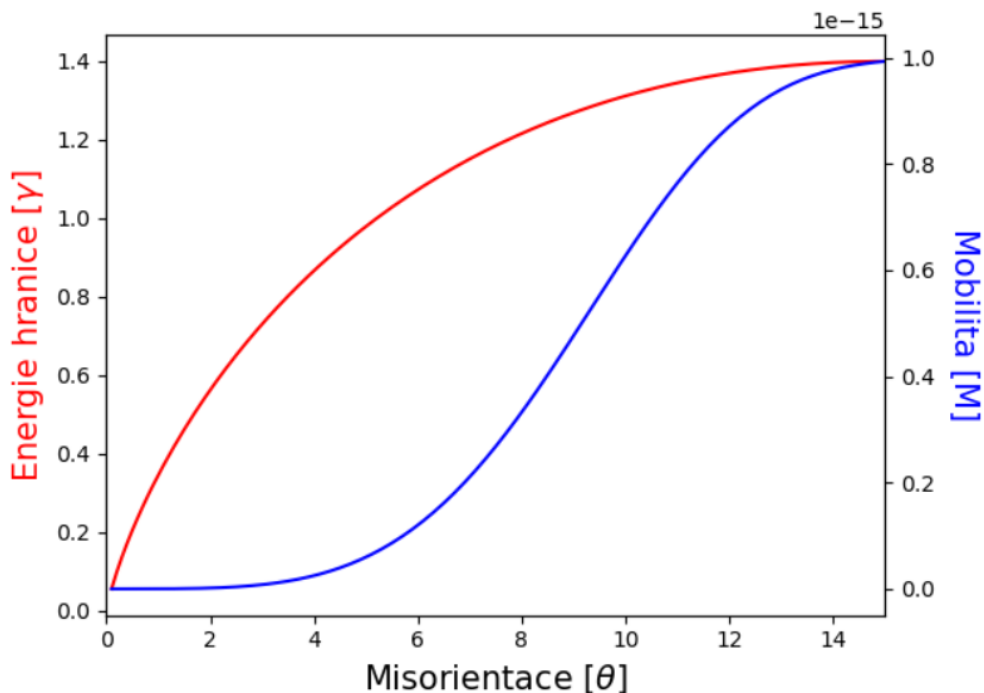
$$\gamma = \gamma_m \frac{\theta}{\theta_m} \left(1 - \ln \left(\frac{\theta}{\theta_m} \right) \right), \quad \{6\}$$

kde θ_m označuje tzv. „high angle“ misorientaci, tedy úhel, od kterého je energie hranice konstantní. Symbol γ_m pak označuje energii hranice při „high angle“ misorientaci.

Dále je pak rychlost pohybu hranice řízena mobilitou (M), která je podobně jako hraniční energie závislá na misorientaci:

$$M = M_m \left(1 - e^{-B \left(\frac{\theta}{\theta_m} \right)^n} \right), \quad \{7\}$$

kde M_m je opět high angle mobilita. Humphreys (1997) zároveň uvádí hodnoty konstant $B = 5$ a $n = 4$. Vývoj mobility s misorientací je však od vývoje hraniční energie odlišný. Zpočátku se mobilita s narůstající misorientací téměř nemění, poté dochází k rychlému nárůstu a poté opět ke zpomalení a ustálení na konstantní hodnotě. Jde tedy o sigmoidální vývoj (Obr. 6).



Obr. 6 – Vývoj energie hranice γ (červeně) a mobility M (modře) použitých v simulaci v závislosti na misorientaci θ .

Poslední veličinou řídící rychlost pohybu hranice zrn je dle Humphreys (1997) velikost zrna vyjádřena jako poloměr R . Vztah pro výpočet rychlosti hranice je pak:

$$v = M \left(\frac{\bar{\gamma}}{\bar{R}} - \frac{\gamma}{R} \right), \quad \{8\}$$

kde $\bar{\gamma}$ a \bar{R} jsou průměrné hodnoty těchto veličin. V simulaci, jež je součástí této práce, se však nepracuje s kulovými zrny, ale zrna mají spíše obecné tvary. Z tohoto důvodu není poloměr vhodným parametrem pro popis velikosti zrn. Vhodnějším parametrem pro výpočet rychlosti by byla křivost hranice, přesněji poloměr křivosti. Pro tyto účely uvádí Porter et al. (2009) následující vztah.

$$v = \alpha M \frac{2\gamma}{D}, \quad \{9\}$$

kde D je právě poloměr křivosti hranice v daném bodě a α je konstanta úměrnosti.

Nyní tak máme potřebné vztahy pro výpočet hraniční energie γ a mobility M v závislosti na misorientaci θ (implementace misorientace v simulaci viz kapitola 5.3.1.2). Víme také, jak tyto veličiny, spolu s poloměrem křivosti, použít pro výpočet rychlosti pohybu hranice zrn. Nyní už zbývá pouze určit hodnoty high-angle mobility a hraniční energie a také určit způsob výpočtu poloměru křivosti (viz kapitola 5.3.2.2). Hodnota high-angle energie je pro olivín při 1 000°C $\gamma_m = 1,4 \text{ Jm}^{-2}$ (Duyster, Stöckhert 2001). Hodnota high-angle mobility pro olivín nebyla nalezena, proto byla zvolena $M_m = 10^{-15} \text{ m}^3\text{s}^{-1}\text{J}^{-1}$, která reprezentuje střední odhad pro peridotity (Evans et al. 2001).

3 Ostwaldovo zrání v geologii

Ostwaldovo zrání je v geologických systémech rozšířený jev. Uplatňuje se jak u magmatických hornin, kterými se zabývá tato práce, tak i v metamorfovaných horninách. V obou případech se podílí na utváření výsledné textury těchto hornin. Od krystalizace, ať je to krystalizace z magmatu či krystalizace nových minerálů v metamorfovaných horninách, se tento proces odlišuje především tím, že při krystalizaci dochází ke zvyšování obsahu daného minerálu v hornině. V průběhu Ostwaldova zrání naopak zůstává obsah minerálu konstantní a dochází tak pouze k transportu stavebních prvků daného minerálu směrem od menších krystalů k těm relativně větším (Miyazaki 1991). To způsobuje zmenšování menších krystalů a zvětšování relativně větších krystalů.

Tento proces je důležitý pro materiálové vlastnosti ocelí a jiných slitin a existuje tak řada materiálově zaměřených prací zabývajících se studiem a simulacemi Ostwaldova zrání (například Kalogeridis et al. 1999, Lescoat et al. 2014 nebo Ji et al. 2018). V této části práce se však omezíme na význam Ostwaldova zrání v geologických systémech.

Procesem Ostwaldova zrání se zabýval například Miyazaki (1991), který zkoumal jeho vliv na tvary CSD křivek a na zonalitu granátů ve vysokotlakých a vysokoteplotních metamorfovaných horninách, a porovnával tento vliv s vlivem nukleace a růstu v těchto horninách. Výsledkem této práce je zjištění, že u zkoumaných vzorků jsou CSD křivky výsledkem Ostwaldova zrání spíše než výsledkem nukleace a růstu (Carlson 1989). Miyazaki zároveň však poukazuje na vliv rychlosti ohřívání horniny, což ovlivňuje, který s těchto jevů bude dominantní. Ostwaldovo zrání je dominantní u hornin, které byly ohřívány pomaleji, zatímco vliv nukleace a růstu převládá u hornin s rychlým ohřevem. Tomu odpovídají také výsledky Carlsona (1989). Ze závěru Miyazakiho však vyplývá, že Ostwaldovo zrání není procesem ovlivňujícím pouze texturu horniny, ale že ovlivňuje také zonalitu krystalů některých minerálů.

Zonalita je velmi důležitá například u zirkonů, u kterých mohou jednotlivé zóny uchovávat informaci o stáří vzniku této zóny a tím o stáří procesu, při kterém tato zóna vznikla. Zonalita zirkonů je tak velice důležitá pro datování (například Pidgeon 1992 nebo Yuanbau, Yongfei 2004). Vlivem Ostwaldova zrání na vznik přírůstkových zón zirkonů se zabývali Nemchin et al. (2001). Zkoumali procesy, které vedly ke vzniku přírůstkových zón a CSD zirkonů v horninách vystavených anatexi. K tomu využili migmatity a zkoumali, zda mohly přírůstkové zóny vzniknout díky precipitaci ze zirkonem saturované taveniny. Zjistili, že ke vzniku pozorovaného objemu přírůstkových zón takto dojít nemohlo a že zde musel hrát významnou roli ještě jiný proces, který umožnil potřebný transport Zr mezi jednotlivými zirkonovými krystaly.

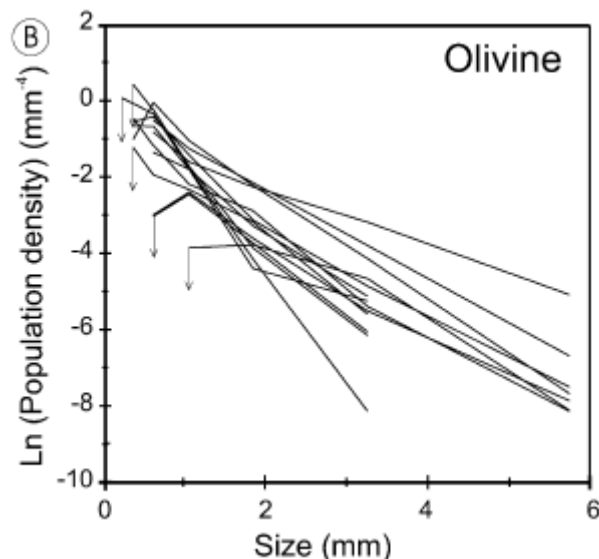
Ostwaldovo zrání významně ovlivňuje vzhled textury horniny, která zrání prodělala. Higgins (2002) zkoumal CSD křivky plagioklasu, olivínu a klinopyroxenu v mafické zvrstvené intruzi Kiglapait. Na všech třinácti vzorcích zjistil, že jsou ochuzeny o malé krystaly, ale zároveň jsou v oblasti relativně větších velikostí zrn mírně konvexní (Obr. 7). Výsledkem výzkumu bylo zjištění, že na vývoj textury mělo velký vliv Ostwaldovo zrání, které mimo jiné způsobilo, že efekt kompakce a gravitačního usazování krystalů („*crystal settling*“) již není na textuře horniny znatelný (vzorky ze spodní části intruze důkazy o kompakci stále uchovávají). Pozorování Higginse (2002) se shoduje s prací Boormana et al. (2004) z Bushveldského komplexu, který poukazuje na to, že Ostwaldovo zrání přepisuje původní texturu horniny. Pokud je tedy textura horniny použita pro odvozování magmatických procesů, které probíhaly

během jejího vzniku, je nejprve třeba vyloučit, že textura horniny podstoupila Ostwaldovo zrání, či jiné modifikace (Boorman et al. 2004).

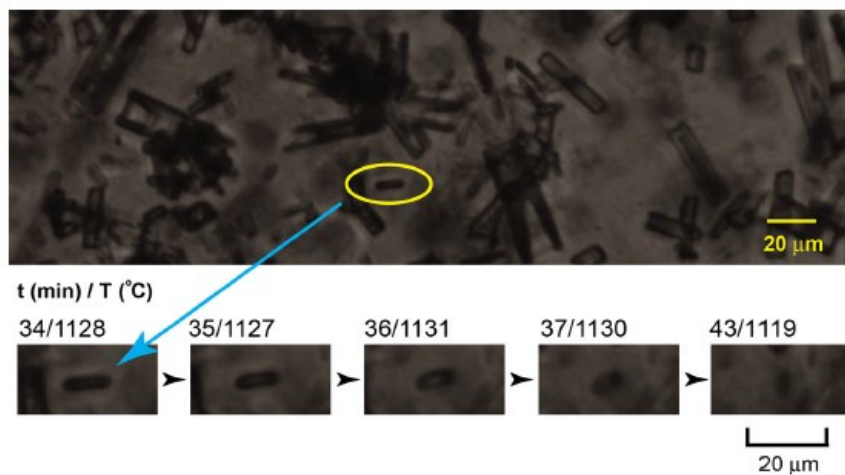
Ostwaldovo zrání pozorovali také Ni et al. (2014) v průběhu svého experimentu, při kterém sledovali krystalizaci bazaltické taveniny *in situ*. Na CSD křivkách z jejich experimentů je vidět ochuzení výsledné textury o malé krystaly. Během tohoto experimentu bylo také přímo pozorováno rozpouštění olivínových krystalů při současném zaoblování jeho hran, jak to předpovídá Ostwaldovo zrání (Obr. 8). Z časových údajů uvedených v tomto obrázku vyplývá, že rozpouštění sledovaného krystalu o velikosti necelých 20 μm trvá pouhých 9 minut. Jde tedy o velmi rychlý proces.

Odlíšným uplatněním Ostwaldova zrání se zabývali Lautze et al. (2011). Zkoumali jeho vliv na růst bublin volatilií (H_2O a $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$) unikajících z magmatu. Experimentální pozorování zde porovnávali s teoretickými předpověďmi rychlostí Ostwaldova zrání pro *steady-state* a *transient-state*. Zjistili, že v průběhu simulace dochází ke snižování počtu bublin malých rozměrů, a naopak dochází ke zvětšování těch větších až do milimetrových rozměrů. Při těchto velikostech mají bubliny již dostatečný vztlak, umožňující jejich rychlý vzestup. Ukázali tak, že Ostwaldovo zrání může hrát významnou roli také při transportu volatilních látek unikajících z magmatu. Zjistili také, že je rychlost Ostwaldova zrání vyšší u bublin tvořených pouze H_2O než u směsi $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$. Toto vysvětlují pomalejší difuzí CO_2 skrze silikátovou taveninu.

Je tedy vidět, že Ostwaldovo zrání je významným procesem uplatňujícím se nejen v geologii, ale také v materiálově orientované literatuře. V geologii pak může významným způsobem měnit texture hornin, zonalitu krystalů, což může mít vliv také na možnosti datování hornin pomocí zirkonů, a také může ovlivňovat unikání fluidní fáze z magmatu, což může mít důležité důsledky například v oboru ložiskové geologie (například Heinrich 2007). Z těchto důvodů je důležité proces Ostwaldova zrání nadále zkoumat.



Obr. 7 – CSD křivky olivínu ve zvrstvené intruzi Kiglapait (Higgins 2002). Na některých CSD křivkách je zde vidět ochuzení o malé krystaly.



Obr. 8 – Obrázek zachycuje krystal olivínu rozpouštěný v průběhu experimentu, při kterém byl pozorován průběh krystalizace bazaltické taveniny (Ni et al. 2014).

4 Celulární automat

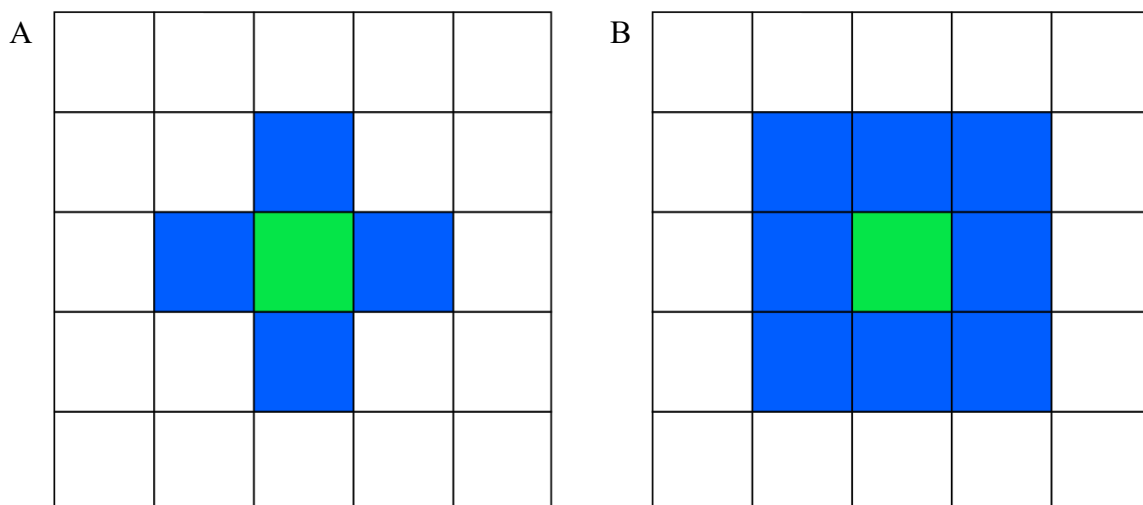
Celulární automat (CA) je jedním ze simulačních modelů využívaných v různých vědních oborech. Ve fyzice byl CA použit například pro simulaci Isingova modelu magnetu (např. Creutz 1986 nebo Aktekin 1995), nebo se využívá v mechanice tekutin (Lattice gas automata, např. D’Humières, Pallemmand 1986). CA našel také využití významné pro geologii, a to simulaci texturního zrání (např. Han 2018 nebo Yang et al. 2011). CA poprvé představil John von Neumann v roce 1963 a jeho výhodou je možnost simulování složitých systémů pomocí jednoduchých stavových funkcí (viz kapitola 4.2).

4.1 Struktura celulárního automatu

Obecně je CA tvořen sítí buněk. Tyto buňky se mohou nacházet v jednom z několika předdefinovaných stavů. V každém kroku simulace se pomocí zadané stavové funkce vypočítá pro každou buňku stav nový.

Každý CA je definován několika vlastnostmi (Sarkar 2000 a Janssens 2010). Sít' CA, ve které jsou rozmístěny buňky, může být n -rozměrná a může mít různou velikost. Samotné buňky mohou mít různé tvary (čtverce, trojúhelníky, šestiúhelníky aj., Janssens 2010). Dalším důležitým aspektem CA je typ okrajové podmínky. Těmto vlastnostem se souhrnně říká geometrie CA (Sarkar 2000). Dále je CA definován sadou (nebo sadami) stavů, ve kterých se mohou nacházet jednotlivé buňky.

Další vlastností popisující CA je okolí buněk. Okolím buněk se rozumí buňky nacházející se v blízkém definovaném sousedství kontrolované buňky. Tyto sousední buňky (jejich stavy) se využívají ke stanovení nového stavu kontrolované buňky (viz kapitola 4.2). Definice okolí buňky záleží jednak na účelu, ale také třeba na geometrii CA (na rozměru – 2D vs. 3D, tvaru buněk atd.). Pro dvourozměrný CA je možno jako okolí definovat například čtyři nebo osm nejbližších buněk (Obr. 9).

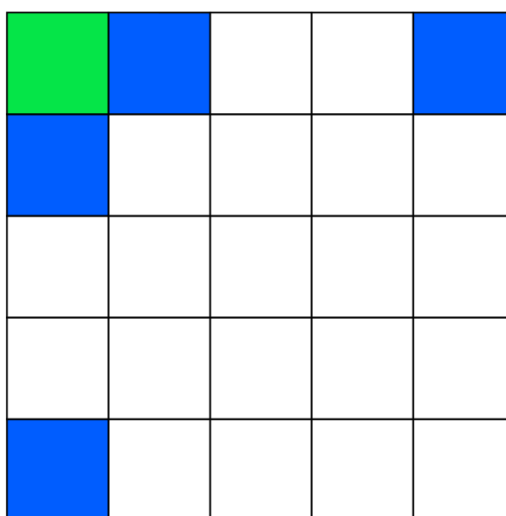


Obr. 9 – Příklady možných definic okolí ve 2D CA se čtvercovou sítí buněk. Na obrázku A je znázorněno 4-okolí (Von Neumannovo), na obrázku B je vidět 8-okolí (Mooreovo). Kontrolovaná buňka zeleně, její okolí modře.

Poslední vlastností, definující CA, je stavová funkce. Jde o funkci, která na základě definovaného pravidla, i velmi jednoduchého, určí nový stav buňky. Vstupem do této funkce jsou hodnoty stavů buněk ve zvoleném okolí právě kontrolované buňky, a také samotné kontrolované buňky.

4.2 Popis funkce 2D celulárního automatu se čtvercovou sítí buněk

Nyní uvažujme dvourozměrný CA se čtvercovou sítí buněk, podobně jako je tomu na obrázku 9. Tato síť bude mít rozměr 1000×1000 buněk. Budeme zde uvažovat pouze dva stavy. Označme je *stav-1* a *stav-2*. Jako okolí jsme si definovali čtyři nejbližší sousedy (Obr. 9A). To je však problémové u okrajových buněk CA, které mají pouze tři z těchto sousedů a rohové buňky mají pouze dva. Z tohoto důvodu je ještě potřeba definovat okrajové podmínky. Je možné například přidat ještě jednu pomocnou vrstvu buněk okolo CA a jejich stav nastavit na nějakou konstantní hodnotu, která by se v průběhu simulace neměnila. V tomto případě je však použita periodická okrajová podmínka, protože tato byla využita v simulaci popsané dále v tomto textu. Tato okrajová podmínka zajistí, že například buňka v levém horním rohu čtvercové sítě, která má pouze dva přímé sousedy, získá jako zbylé dva sousedy buňky v levém dolním rohu a pravém horním rohu (Obr. 10).

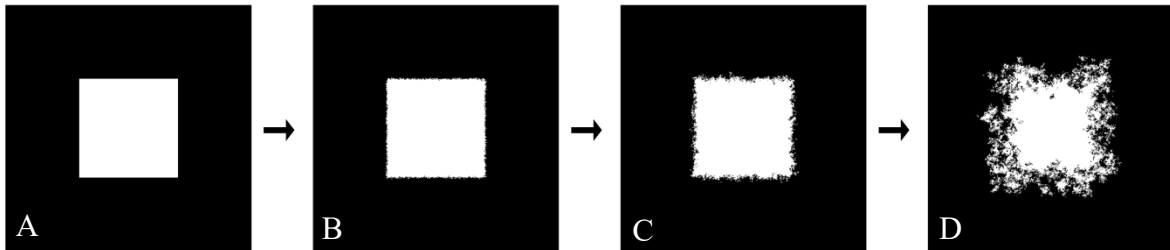


Obr. 10 – Znázornění principu periodické okrajové podmínky. Kontrolovaná buňka zeleně, její Von Neumannovo okolí modře.

Na počátku simulace (v čase $t = 0$) se každá buňka nachází v jednom z definovaných stavů. Náš uvažovaný CA tedy inicializujeme tak, že všechny buňky, kromě čtvercové oblasti o rozměrech 400×400 buněk nacházející se uprostřed čtvercové sítě, nastavíme na *stav-1*. Buňky ve čtvercové oblasti nastavíme na *stav-2* (Obr. 11A).

Nyní je třeba definovat stavovou funkci. Tato funkce může být deterministická, ale může také pracovat s pravděpodobností. Pro náš uvažovaný CA nyní definujeme jednoduchou pravděpodobnostní stavovou funkci, která počítá pravděpodobnost změny stavu na základě počtu okolních buněk s odlišným stavem. Pro danou kontrolovanou buňku spočítá počet

okolních sousedů se stavem *stav-1* a tento počet poté vynásobí hodnotou 0,25, čímž získáme hodnotu P (pravděpodobnost výskytu stavu *stav-1*). Poté funkce vygeneruje náhodné číslo (*rand*) v rozmezí od 0 do 1. Nyní už je určení stavu kontrolované buňky jednoduché. Pokud je $rand > P$, pak se stav kontrolované buňky nastaví na *stav-2*, v opačném případě na *stav-1*. Vývoj podobné simulace je znázorněn na obrázku 11.



Obr. 11 – Vývoj jednoduchého 2D CA. Obrázek A zachycuje iniciální stav, obrázek D stav po ukončení simulace (po 1000 krocích). Obrázek B zachycuje stav simulace po 20 krocích a obrázek C po 100 krocích. Buňky se stavem *stav-1* černě, buňky se stavem *stav-2* bíle.

Jak je z obrázku 11 vidět, i takto jednoduchá stavová funkce může vést ke komplikovanému chování systému. Stavová funkce může být komplexnější a teoreticky může být pro každou buňku jiná. Také je možné stavovou funkci v průběhu simulace měnit. Tyto vlastnosti dávají možnost zkoumat v rámci jedné simulace více jevů (například nukleaci s růstem následované Ostwaldovým zráním, viz kapitola 5.3).

5 Simulace krystalizace a Ostwaldova zrání

Tato práce si dala za cíl vytvořit simulaci procesu Ostwaldova zrání (viz kapitola 2.3). Dále byla z důvodu potřeby vygenerování počáteční textury vytvořena simulace nukleace a růstové fáze (viz kapitola 5.3.1). Výsledky této simulace byly následně použity k porovnání s teoretickými modely Ostwaldova zrání (LSW teorie – Lifshitz, Slyozov 1961, Wagner 1961 a CN teorie – DeHoff 1991) a s texturou vzorků reálných hornin.

Pro vytvoření simulace byl zvolen jazyk C++, z důvodu vysoké rychlosti, která pramení z toho, že C++ je kompilovaný programovací jazyk. Díky kompilaci (překladač) zdrojového kódu a vytvoření spustitelného binárního souboru, který obsahuje přímo instrukce pro procesor, může být překladačem provedena efektivní optimalizace kódu. Kromě standardní knihovny byly využity také knihovny SFML pro vytvoření animace a Qt pro vytvoření grafického rozhraní (GUI). Od grafického rozhraní bylo ale po jeho vytvoření upuštěno z důvodu snazšího ladění programů. Jazyka C++ bylo využito také pro zpracování dat simulace. Pro vizualizaci dat byl použit jazyk Python. V Pythonu byly použity knihovny Pandas pro načítání zpracovaných dat, Numpy pro finální zpracování dat a knihovna Matplotlib pro tvorbu grafů (vizualizaci dat).

V této části práce bude vysvětlen princip fungování vytvořené simulace a s ní souvisejících programů. U vybraných partií bude podán také detailnější technický popis řešení daného problému v podobě pseudokódů.

5.1 Struktura simulace

Vytvořená simulace je založena na principu celulárního automatu (viz kapitola 4). Použitý celulární automat se skládá z pravidelné čtvercové mřížky buněk o celkové velikosti 1000×1000 buněk. Každá buňka se může vyskytovat v jednom ze tří stavů. Prvním stavem je *tavenina*, druhým *krystal* a posledním *hranice krystalu*. V průběhu simulace se tyto stavy mění v závislosti na dané stavové funkci. Tyto stavové funkce jsou v simulaci tři a to, která je v daném kroku použita, určuje chování simulace v tomto kroku. Všechny tři stavové funkce jsou naprogramovány tak, aby simulovaly jeden ze tří dějů, které chceme simulovat. Jsou to nukleace krystalů, jejich růst a zrání.

Simulace je rozdělena na dvě fáze. První fází je krystalizace magmatu a stavy všech buněk jsou tak na začátku simulace nastaveny na stav *tavenina*. V této fázi se uplatňují první dvě stavové funkce (*nukleace* a *růst*, viz kapitola 5.3.1). Tato fáze trvá tak dlouho, dokud nevykrystalizuje všechna tavenina, tedy dokud je v celulárním automatu alespoň jedna buňka se stavem *tavenina*. Pokud již v automatu žádná taková buňka není, dojde ke změně používaných stavových funkcí a simulace tak přechází do druhé fáze. V této fázi je simulováno Ostwaldovo zrání (viz kapitola 2.3). Je zde tedy použita pouze jedna stavová funkce, a to *zrání* (viz kapitola 5.3.2). Druhá fáze již není omezena ničím jiným než předem nastaveným počtem kroků simulace. S ukončením druhé fáze končí i celá simulace.

K Ostwaldovu zrání může v přírodě docházet již v průběhu krystalizace, nikoli až po ní. V zájmu zjednodušení a snahy studovat Ostwaldovo zrání samostatně byly tyto procesy od sebe odděleny a krystalizace je zde simulována pouze za účelem vytvoření počáteční textury, která by následně podléhala zrání.

Simulace je schopna simulovat interakce nejen mezi krystaly v jednosložkovém systému, kde jsou všechny krystaly tvořeny stejným minerálem, ale také interakce krystalů ve dvousložkovém systému. Schopností interakcí je zde myšleno jejich technické řešení. Tyto interakce však vycházejí z fyzikálních procesů, které toto technické řešení reflektuje a využívá k tomu rovnic popsaných v kapitole 2.3, avšak omezením jsou zde chybějící kinetická data.

Obecná a zjednodušená struktura simulace je znázorněna v pseudokódu 1 a jednotlivé části budou detailněji popsány níže.

Počet kroků simulace $nSteps = X$;
Vytvoř celulární automat $automata(1000, 1000)$;

Pro každou buňku $bunka$ z $automata$:
 $bunka.stav = tavenina$;

Pro každý krok $step$ z $nSteps$:
Nastav $isTavenina = false$;
Pro každou buňku $bunka$ z $automata$:
Pokud $bunka.stav$ je rovno $tavenina$:
 $isTavenina = true$;

Pokud $isTavenina$ je rovno $true$:
Pro každou buňku $bunka$ z $automata$:
 $bunka.Nukleace()$;

Pro každou buňku $bunka$ z $automata$:
 $bunka.Rust()$;

Jinak:
Pro každou buňku $bunka$ z $automata$:
 $bunka.Zrani()$;

Pseudokód 1 – Obecný zjednodušený pseudokód simulace. Proměnná X je počet kroků simulace nastavený uživatelem.

Z pseudokódu 1 je vidět, že nejprve dojde k vytvoření a inicializaci celulárního automatu o velikosti 1000×1000 buněk. Inicializaci zde představuje nastavení stavů všech buněk na stav $tavenina$, v samotné simulaci se při inicializaci nastavuje více proměnných (viz kapitola 5.2). Poté se spustí cyklus, který se provede tolikrát, kolik kroků simulace nastavil uživatel. Při každém cyklu se nastaví logická proměnná $isTavenina$ na hodnotu $false$, a poté se u každé buňky automatu zkontroluje, zda je ve stavu $tavenina$. Pokud ano, $isTavenina$ se přepíše na hodnotu $true$. Tímto způsobem se zkontroluje, zda se v simulaci nachází ještě nějaká $tavenina$, nebo zda může začít druhá fáze, tedy fáze $zrani$.

Po této kontrole následují dvě podmínky. Pokud je logická proměnná *isTavenina* rovna *true* (v simulaci je tavenina) spustí se pro všechny buňky v simulaci (pokud jsou ve stavu *tavenina*) stavová funkce *nukleace* (viz kapitola 5.3.1.1), která určí, zda dojde ke změně stavu dané buňky ze stavu *tavenina* na stav *hranice krystalu*. Poté, co se zkontrolují všechny buňky, provede se totéž ještě jednou, ale tentokrát se spustí stavová funkce *růst* (viz kapitola 5.3.1.2). Ta zajistí růst krystalů vzniklých při nukleaci.

Pokud je logická proměnná *isTavenina* rovna *false* (v simulaci již žádná tavenina není), spustí se pro všechny buňky v simulaci (se stavem *hranice krystalu*) stavová funkce *zrání*, která určí, zda se má v daném kroku simulace daná hraniční buňka přiřadit k jinému krystalu či nikoliv, tedy zda se hranice krystalu, ke kterému daná buňka náleží, posune a pokud ano, tak kterým směrem.

5.2 Inicializace celulárního automatu

Před začátkem samotné simulace je třeba celulární automat inicializovat, tedy nastavit počáteční hodnoty, nastavit okolí buněk a otevřít soubory pro exportování dat ze simulace. V této části textu jsou proto blíže popsány tyto funkce.

5.2.1 Nastavení počátečních hodnot

V simulaci jsou dvě hlavní struktury (třídy). Samotný celulární automat, který celou simulaci řídí a poté buňky, ze kterých je celulární automat složen. Obě třídy obsahují určité proměnné a členské funkce. Mezi členské funkce patří například již zmíněné stavové funkce. Tato část se však věnuje podání stručného přehledu hlavních proměnných, které se v těchto třídách nacházejí, jejich inicializaci a vysvětlení důvodu jejich zavedení.

Ve třídě buňka se nachází osm hlavních proměnných. Jsou to *stav*, *krystal*, *minerál* a *orientace*, každá z nich ve dvou verzích, *stará* a *nová*. V proměnné *stav* je uložen stav (*tavenina*, *krystal* nebo *hranice krystalu*), ve kterém se daná buňka nachází. Proměnná *krystal* uchovává číslo krystalu, ke kterému náleží (pokud daná buňka není ve stavu *tavenina*). Proměnná *minerál* obsahuje informaci o tom, jaký minerál se na pozici dané buňky nachází (opět pouze pokud buňka není ve stavu *tavenina*). Poslední proměnnou je *orientace*. Tato proměnná obsahuje orientaci krystalu, ke kterému daná buňka náleží. Orientací je zde myšlen úhel, o který je krystal natočen podle osy kolmé na plochu simulace. Pro zjednodušení jsou rotace podle ostatních os totožné pro všechny krystaly. Jinými slovy, orientace krystalů je dána pouze jedním úhlem a misorientace dvou krystalů je rovna rozdílu jejich orientací.

V průběhu simulace se tyto proměnné průběžně mění v závislosti na stavové funkci. Stavové funkce obecně využívají k rozhodování o změně stavu hodnoty těchto a jiných proměnných dané buňky, ale také hodnoty proměnných okolních buněk (viz kapitoly 4.1 a 5.2.2). Z tohoto důvodu jsou všechny čtyři proměnné ve dvou verzích. Do verze *nová* se ukládají nové hodnoty při změně stavu (změnou stavu je zde myšlena změna těchto čtyř proměnných obecně, nikoliv pouze proměnné *stav*), zatímco ve verzi *stará* jsou uloženy hodnoty z předchozího kroku a v průběhu aktuálního kroku se nemění. Tato stará verze proměnných je využívána k výpočtu a k jejich přepsání dochází až na konci kroku, kdy jsou do nich uloženy hodnoty z nové verze těchto proměnných.

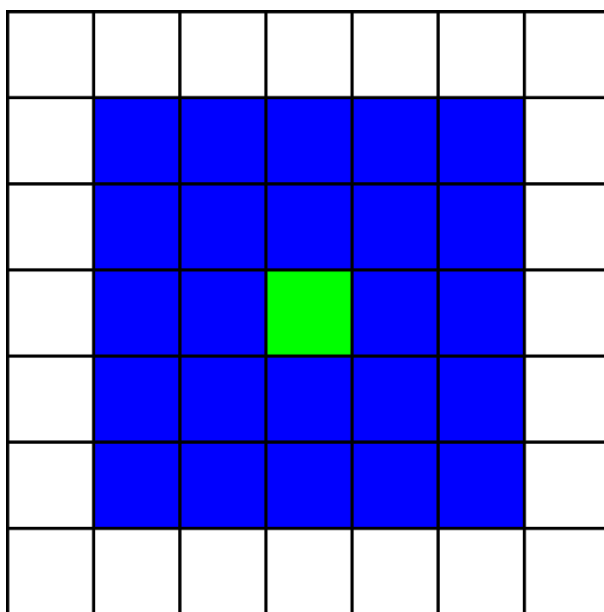
Uchovávání obou verzí je nezbytné, protože při použití pouze jedné verze proměnných by byl výsledek změny stavu buněk ovlivněn ne stavy okolních buněk, které měly po konci předešlého kroku simulace, ale stavy vypočtenými v tomtéž kroku, ve kterém je určován stav aktuální buňky.

Další užitečnou proměnnou, uloženou ve třídě buňka, je *pozice buňky*. V této proměnné je uchována dvojice celých čísel, určující řádek a sloupec, ve kterých se daná buňka nachází uvnitř mřížky celulárního automatu. Na začátku simulace jsou všechny tyto hodnoty nastaveny na 0 (v případě proměnné *stav* jde o kódové označení, kde 0 = *tavenina*, 1 = *krystal* a 2 = *hranice krystalu*, podobně je tomu i u proměnné *minerál*).

Ve třídě celulární automat se nacházejí proměnné uchovávající hodnoty fyzikálních parametrů využívaných pro výpočty, jsou zde uloženy všechny krystaly (viz kapitola 5.3.1.2), ale je zde také uložena *výška* a *šířka* mřížky celulárního automatu a samozřejmě také samotná mřížka se všemi buňkami. Při inicializaci automatu je vytvořena dvourozměrná struktura o zadané výšce a šířce, a poté je vyplněna buňkami, které jsou následně inicializovány výše popsaným způsobem.

5.2.2 Nastavení okolí buněk

Jak již bylo zmíněno v kapitole 4.1, pro funkci celulárního automatu je nezbytné definovat okolí buněk. V simulaci bylo použito upravené Mooreovo okolí rozšířené o jednu vrstvu (Obr. 12). Takto velké okolí bylo definováno z důvodu výpočtu křivosti hranice zrn (viz kapitola 5.3.2.2). Pro některé výpočty je však využito Von Neumannovo okolí (Obr. 9A).

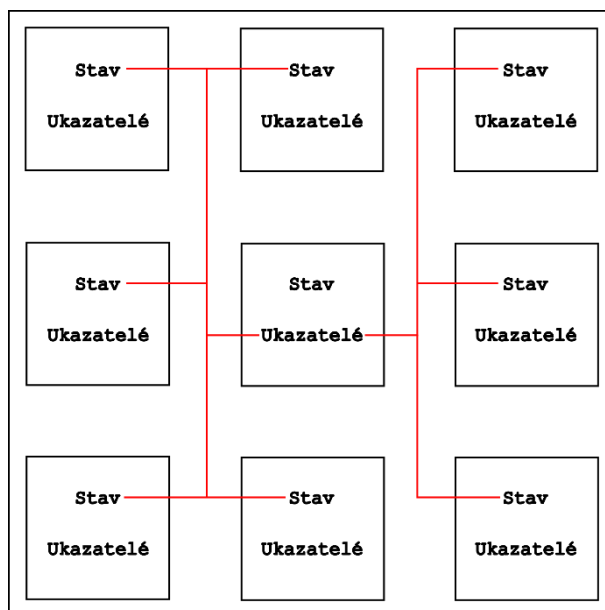


Obr. 12 – Okolí buněk definované v simulaci. Zeleně buňka, pro kterou je okolí definováno, a modře okolí.

V simulaci je okolí implementováno tak, že si každá buňka uchovává čtyři dvourozměrná pole ukazatelů. Tyto ukazatele jsou v průběhu inicializace celulárního automatu nastaveny na čtyři

hlavní proměnné okolních buněk (*stav*, *krystal*, *minerál*, *orientace*), tedy na starou verzi těchto proměnných (viz kapitola 5.2.1).

Pro ilustraci uvažujme dvourozměrné pole ukazatelů 5×5 , které má ukazovat na proměnnou *stav*. V průběhu inicializace je na první pozici pole uložen ukazatel na proměnnou *stav* první buňky okolí (na obrázku 12 je to buňka vlevo nahoře). Na druhou pozici pole je uložen ukazatel na proměnnou *stav* druhé buňky (nalevo od první) atd. Graficky jsou ukazatele na okolí zobrazeny na obrázku 13. Toto řešení pomocí ukazatelů umožňuje snadný a rychlý přístup k potřebným proměnným během výpočtů.



Obr. 13 – Grafické znázornění ukazatelů na okolní proměnné. Každá buňka má proměnnou *Stav* a pole ukazatelů *Ukazatelé*. Červenými čarami jsou znázorněny ukazatele, které jsou uloženy ve středové buňce a ukazují na proměnné okolních buněk.

V simulaci je použita periodická okrajová podmínka (Obr. 10). To znamená, že se ukazatele okrajových buněk, které by měly ukazovat na souseda, který zde ale chybí, nastaví na sousední buňku dle periodické okrajové podmínky (viz kapitola 4.2).

5.2.3 Soubory pro exportování dat

Při inicializaci celulárního automatu dojde také k otevření/vytvoření šesti binárních souborů. Do těchto souborů jsou ukládána data přímo v průběhu simulace. Těmito daty jsou pozice buněk patřící k jednotlivým krystalům, pozice hraničních buněk jednotlivých krystalů, čas jednotlivých kroků simulace (viz kapitola 5.3.2.1), krystal, který se v daném kroku nachází na okraji simulace (mřížky celulárního automatu), trojné body (viz kapitola 6.4) a jednorázově se uloží informace o tom, který krystal náleží kterému minerálu.

Přesto, že jsou soubory vytvořeny již při inicializaci celulárního automatu, tedy na začátku simulace, všechna tato data se začínají ukládat až ve druhé fázi simulace, tedy ve fázi zrání.

5.3 Průběh simulace

V této části se dostáváme k popisu fungování samotné simulace. Budou zde popsány jednotlivé fáze simulace a použité stavové funkce. V pseudokódu 1 jde o část opakující se při každém kroku simulace.

5.3.1 První fáze: nukleace a růst

V první fázi simulace dochází ke krystalizaci magmatu. Tímto způsobem je vytvořena počáteční textura horniny, která může být následně vystavena zrání ve druhé fázi simulace (viz kapitola 5.3.2). Počáteční textura pro zrání tedy vzniká in situ krystalizací. Vzorek, se kterým jsou výsledky simulace porovnávány, pochází z dunitu z Kdyňské intruze, jde o kumuláty. Důvodem, proč byl zvolen způsob generování počáteční textury pomocí in situ krystalizace je, že je tento proces simulovatelný snáze než vytváření kumulátové textury. Výsledkem je textura s rovnoměrně distribuovanými krystaly různých velikostí a jejíž CSD křivka je v logaritmické škále lineární.

Tato fáze probíhá, dokud je v simulaci alespoň jedna buňka se stavem *tavenina*. Výpočty stavových funkcí jsou založeny na pravděpodobnosti, s jakou dojde ke změně stavu dané buňky. Do výpočtů je tedy zahrnuto také generování pseudonáhodného čísla za pomoci generátoru typu xorshift (Marsaglia 2003). To má za následek, že simulace není deterministická a je při každém spuštění trochu odlišná. I přesto, že se výsledky liší, celkové parametry výsledné textury jsou stále určeny především nastavenými parametry simulace. Při dvojitým spuštění simulace s totožnými parametry tak sice vznikne trochu odlišná textura, ale její parametry by měly být podobné. Ani při nastavení totožných parametrů simulace tak není jisté, ve kterém kroku k úplnému vykrytalizování dojde. Krok, ve kterém dojde ke změně fáze simulace tak nemůže být předem nastaven a je třeba průběžně kontrolovat, zda se v simulaci nachází alespoň jedna buňka se stavem *tavenina*. Pokud je taková buňka nalezena, hledání je ukončeno a spustí se část kódu simulující nukleaci a růst krystalů.

5.3.1.1 Nukleace

Aby mohly krystaly růst, musejí nejprve vzniknout jejich zárodky, nuklea. K tomu je využita první stavová funkce, *nukleace*. Právě tato funkce využívá generování náhodného čísla a zajišťuje tak vznik jedinečné počáteční textury.

Tato stavová funkce funguje tak, že pro každou buňku celulárního automatu vygeneruje náhodné celé číslo v intervalu od 0 do x . Proměnná x je předem definované celé číslo vyjadřující pravděpodobnost, s jakou dojde v dané buňce k nukleaci. Pokud je vygenerované číslo rovno 1, k nukleaci dojde, pokud je vygenerováno jiné číslo, k nukleaci nedojde. Číslo x je v daném kroku pro všechny buňky stejné, ale na konci každého kroku dojde k jeho zmenšení. Tím dojde ke zvýšení pravděpodobnosti, že bude vygenerována 1 a tedy že dojde k nukleaci.

Zmenšení čísla x je provedeno jeho vydělením určitou konstantou k . Tato konstanta je opět předem nastavena a vyjadřuje rychlost změny pravděpodobnosti mezi jednotlivými kroky. Nárůst rychlosti nukleace je zde implementován, aby alespoň přibližně simuloval skutečnou změnu rychlosti nukleace, ke které dochází v přírodě (Marsh 1998) a která má za následek vznik

lineární klesající CSD křivky (lineární v log škále). Má tedy za následek vznik textury s velkým množstvím malých krystalů a menším množstvím relativně větších krystalů. Takovéto textury jsou běžné u magmatických hornin (Cashman, Marsh 1988, Resmini, Marsh 1995 nebo Higgins 2002).

Pokud u dané buňky k nukleaci dojde, je její stav změněn ze stavu *tavenina* na stav *hranice krystalu* a do zbylých hlavních proměnných této buňky (viz kapitola 5.2.1) je nastaveno číslo krystalu (u prvního vzniklého krystalu 1, u druhého 2 atd.), k jakému minerálu tento krystal patří, a orientace krystalu. Orientace je náhodně generována v rozsahu 0 až 179 stupňů. Tímto způsobem vznikne textura s náhodnou orientací krystalů. Pokud bychom chtěli simulovat zrání hornin s nějakou přednostní orientací krystalů, je možno rozsah generovaných úhlů libovolně měnit.

Nukleace se vypočítává pouze u buněk se stavem *tavenina*. Tím se při pokračující krystalizaci snižuje počet výpočtů nukleace.

5.3.1.2 Růst

Nyní, když vznikla první nuklea krystalů, může začít jejich růst. Prvotní myšlenka způsobu implementace růstu opět spočívala ve využití pravděpodobnosti za účelem zachování hlavního principu, jakým dochází v celulárním automatu k výpočtu změny stavu, tedy využitím hodnot stavů okolních buněk. Takový způsob byl vytvořen, ale náhodný prvek výpočtu spjatý s pravděpodobností bohužel neumožňoval vytvořit euhedrání krystaly. Namísto toho vznikaly krystaly zaoblené s nerovnými hranami. Ani implementace preferovaných směrů růstu jednotlivých krystalů v závislosti na jejich orientaci nikterak nepomohla tento problém vyřešit. Z tohoto důvodu bylo přistoupeno ke zcela odlišnému řešení.

Toto nové řešení spočívá ve vytvoření nového objektu, kterým je virtuální krystal. Virtuální krystal je vlastně obdélník, jehož střed je umístěn do buňky, ve které příslušný krystal vznikl. Virtuální krystal tedy vznikne již při nukleaci a jeho růst je zajištěn vždy na konci kroku simulace. Strana *a* obdélníku může mít jinou rychlost růstu než strana *b*, čímž vznikne obdélníkový tvar krystalu. Pokud by byly rychlosti stran *a* a *b* totožné, vznikl by čtvercový krystal. Růst virtuálních krystalů je nastaven tak, že rychlejší strana se během jednoho kroku zvětší o vzdálenost odpovídající velikosti právě jedné buňky. Toto omezení sníží výpočetní náročnost následujícího výpočtu změny stavu buněk. Ke změně stavu dochází u těch buněk, které se v daném kroku nacházejí uvnitř některého z virtuálních krystalů (Obr. 14). Takovéto řešení použili již například Hersum a Marsh (2006) a Špillar a Dolejš (2014).

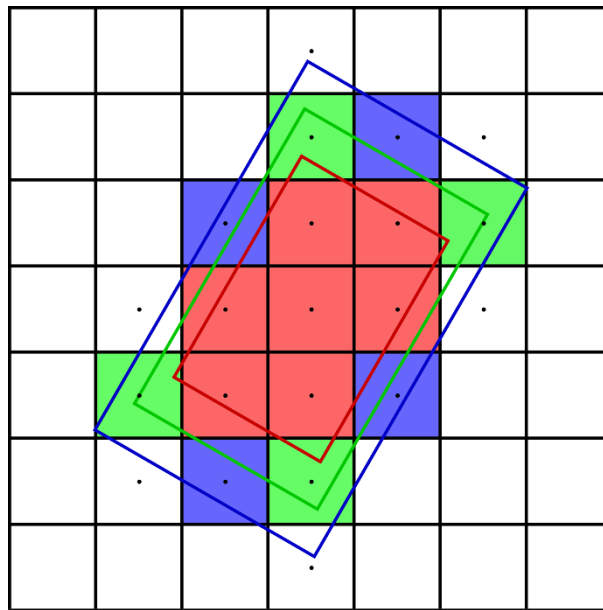
Samotný výpočet, zda některá z buněk se stavem *tavenina* změní svůj stav na stav *hranice krystalu*, tedy zda se daná buňka nachází uvnitř některého z virtuálních krystalů, se provádí pomocí transformace souřadnic (Obr. 15). Při této transformaci je pozice buňky, uložená v souřadnicovém systému celulárního automatu (řádek a sloupec), převedena do nové pozice v prostoru s počátkem ve středu daného virtuálního krystalu a natočeného o úhel daný orientací příslušného krystalu. Transformace souřadnic je dána rovnicemi:

$$x'_{bod} = \cos(-\theta) * (x_{bod} - x_{střed\ krystalu}) - \sin(-\theta) * (y_{bod} - y_{střed\ krystalu}) \quad \{10\}$$

$$y'_{bod} = \cos(-\theta) * (y_{bod} - y_{střed\ krystalu}) + \sin(-\theta) * (x_{bod} - x_{střed\ krystalu}) \quad \{11\}$$

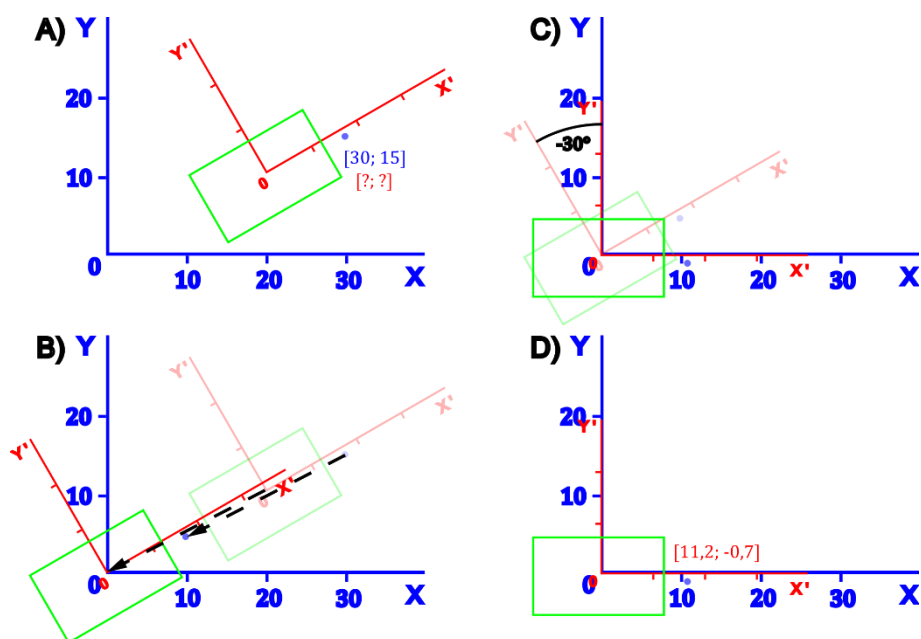
kde θ je orientace krystalu. Po této transformaci se provede kontrola, zda se transformované souřadnice x' a y' nacházejí v rozmezí hodnot daných velikostmi stran obdélníku a a b , tedy jestli se x' nachází v rozmezí hodnot od $-a/2$ do $a/2$ a y' v rozmezí hodnot od $-b/2$ do $b/2$.

Výše zmíněné snížení výpočetní náročnosti z důvodu omezení rychlosti růstu rychlejší strany obdélníku spočívá v tom, že se kontrola, zda buňka leží uvnitř některého z virtuálních krystalů, a tedy výpočet transformace, provádí pouze u těch buněk, které se nacházejí vedle buňky s již změněným stavem (se stavem *hranice krystalu*). Navíc se při nalezení takovéto buňky zjistí, pomocí kterých virtuálních krystalů došlo ke změně u vedlejších buněk. Kontrolovaná buňka se pak porovnává pouze s těmito virtuálními krystalu a nemusí se porovnávat se všemi.



Obr. 14 – Růst za pomoci virtuálního krystalu natočeného o 30° . Červený obdélník představuje virtuální krystal po dvou krocích od jeho nukleace. Červeně vyznačené buňky jsou ty, které v tomto kroku patřily ke krystalu. Zelený obdélník představuje tentýž virtuální krystal o jeden krok později a zelené buňky jsou ty, které se v tomto kroku ke krystalu přidaly. Totéž pro modrý obdélník a modré buňky. Bílé jsou buňky ve stavu *tavenina*.

V přírodních horninách jsou sousedící krystaly stejné fáze odlišeny díky své odlišné orientaci. Pokud by byly orientované totožně, došlo by při jejich vzájemném kontaktu k jejich spojení a vznikl by tak jeden krystal. Toto je v simulaci implementováno pomocí funkce, která kontroluje, zda při kontaktu dvou krystalů nemají tyto krystaly stejnou orientaci. Pokud ano, dojde k jejich propojení (a tedy ke zrušení jejich vzájemné hranice) a nadále je s těmito dvěma krystalu zacházeno jako s jedním.



Obr. 15 – Transformace souřadnic bodu z globálního souřadného systému celulárního automatu (řádek, sloupec – modře) do lokálního souřadného systému virtuálního krystalu (červeně). Virtuální krystal je vyznačen zeleně. Na obrázku A je zobrazen počáteční stav. Obrázek B znázorňuje translaci (posunutí počátku lokálního souřadného systému do počátku globálního). Na obrázku C je rotace o úhel daný orientací virtuálního krystalu. Obrázek D ukazuje výsledný stav (na globální ose lze odečíst lokální souřadnice bodu).

5.3.2 Druhá fáze: zrání

Ve druhé fázi simulace je již hornina plně vykrystalizovaná a je tedy vytvořena počáteční textura. Tato textura může nyní začít zrást.

Doba trvání této fáze není na rozdíl od fáze první omezena žádnou speciální podmínkou. Trvá, dokud neuplyne předem stanovený počet kroků. Zároveň je v této fázi použita pouze jedna stavová funkce, a to *zrání*. Poslední změnou oproti první fázi je, že nyní začíná ukládání dat v průběhu simulace.

5.3.2.1 Zrání

V této fázi simulace dochází k simulaci Ostwaldova zrání. Fyzikální podstata tohoto jevu je popsána v kapitole 2.3. Zde je popsána jeho technická implementace.

Při Ostwaldově zrání dochází k pohybu hranic krystalů v závislosti na jejich misorientaci, termodynamických vlastnostech daných minerálů a křivosti hranice. Výpočet rychlosti pohybu hranice se provádí pomocí rovnice {9}. Do této rovnice vstupuje poloměr křivosti hranice v daném místě, energie hranice a mobilita. Pro výpočet energie hranice a mobility je použita misorientace obou sousedících krystalů (rovnice {6} a {7}). Proces výpočtu poloměru křivosti je popsán v kapitole 5.3.2.2.

Výsledkem výpočtů je tedy rychlost, s jakou se hranice pohybuje. Pro fungování celulárního automatu je však tato rychlost nevhodným parametrem pro rozhodování o změně stavu buněk. Lepší by byla pravděpodobnost, s jakou ke změně dojde. Je tedy třeba vypočtenou rychlost hranice převést na pravděpodobnost, s jakou nastane změna stavu dané buňky.

Přepočtení rychlosti na pravděpodobnost je vyřešen následujícím způsobem. Pro všechny buňky se stavem *hranice krystalu* jsou vypočítány rychlosti pohybu hranice a z nich je nalezena ta nejvyšší. Pravděpodobnosti jsou poté nastaveny tak, že vypočtené rychlosti buněk jsou vyděleny maximální rychlostí v daném kroku simulace, čímž jsou získány hodnoty mezi 0 a 1. Tyto hodnoty představují pravděpodobnosti změny stavu.

Zároveň s těmito výpočty je také vypočtena délka trvání daného kroku. Tento výpočet vychází z toho, že v daném kroku nastane pohyb rovný velikosti jedné buňky. Velikost buňky je předem nastavena a k výpočtu délky trvání tak stačí jen velikost buňky vydělit maximální rychlostí hranice v daném kroku simulace. Tento čas je následně zapsán do příslušného binárního souboru (viz kapitola 5.2.3).

Změnou stavu je v tomto případě myšlena změna krystalu, kterému daná buňka náleží. To je opět provedeno přepsáním hlavních proměnných dané buňky (viz kapitola 5.2.1). Toto lze snadno implementovat pro případ, kdy spolu sousedí dva krystaly. V místě, kde spolu sousedí tři nebo čtyři krystaly je výpočet změny stavu o něco komplikovanější. Pro tyto případy se u každé buňky uloží nejen její rychlost, ale také rychlosti jejích čtyř okolních buněk daných Von Neumannovým okolím (Obr. 9A) a čísla krystalů, ke kterým náležejí. Poté, pokud dojde ke změně stavu buňky, je tato buňka přiřazena ke krystalu, ke kterému patří nejrychlejší z okolních buněk (aby ke změně mohlo dojít, je třeba, aby rychlost kontrolované buňky byla vyšší než rychlost nejrychlejší buňky v okolí). Směr rychlosti je dán křivostí hranice. Pokud je křivost kladná, hranice ustupuje. Pokud je křivost záporná, hranice postupuje na úkor okolních krystalů (viz pseudokód 2).

Pokud *bunka.krivost* > 0:

bunkaSign = 1;

Jinak:

bunkaSign = -1;

Pokud *okoli[maxRI].krivost* > 0:

okoliSign = 1;

Jinak:

okoliSign = -1;

Pokud (*bunkaSign* × |*bunka.rychlost*|) > (*okoliSign* × |*okoli[maxRI].rychlost*|):

Pokud (|*bunka.rychlost*| / *maxRychlost*) > *Random*(0, 1):

Pokud *bunka.staryMineral* == *okoli[maxRI].staryMineral*:

bunka.novyKrystal = *okoli[maxRI].staryKrystal*;

bunka.novyOrientace = *okoli[maxRI].staryOrientace*;

Jinak **Pokud** *bunka.staryMineral* != *okoli[maxRI].staryMineral*:

Pokud *MassBallanceControl*() == true:

bunka.novyKrystal = *okoli[maxRI].staryKrystal*;

bunka.novyOrientace = *okoli[maxRI].staryOrientace*;

bunka.novyMineral = *okoli[maxRI].staryMineral*;

Pseudokód 2 – Zjednodušený pseudokód stavové funkce *zrání*. Proměnné *bunkaSign* a *okoliSign* jsou zde pro určení směru rychlosti. Podmínka změny stavu buňky je pak nastavena tak, že pokud má hranice v místě kontrolované buňky postupovat, zatímco okolní mají ustupovat, ke změně stavu nedojde. Naopak, pokud má hranice v místě kontrolované buňky ustupovat, zatímco okolní postupovat, ke změně dojde. Pokud by kontrolovaná buňka i okolí měly ustupovat, ke změně dojde pouze pokud kontrolovaná buňka ustupuje rychleji (má vyšší rychlost). Pokud by naopak obě hranice měly postupovat, ke změně stavu kontrolované buňky dojde pouze, pokud má tato buňka nižší rychlost než okolí.

5.3.2.2 Výpočet křivosti

Pro druhou fázi simulace je nezbytné určování křivosti hranic krystalů. K tomuto účelu byla zvolena metoda, při níž se určuje počet buněk v okolí, které náleží stejnému krystalu jako kontrolovaná buňka. Výsledná křivost je pak vypočítána takto (Janssens 2010):

$$křivost = 15 - \sum_{i=1}^{25} B_i * S_i \quad \{12\}$$

Zde *B* je hodnota určující příslušnost dané buňky ke kontrolovanému krystalu. Nabývá hodnoty 1, pokud ke kontrolovanému krystalu patří a 0, pokud nepatří. *S* je „*scaling*“ faktor. Tento faktor slouží pro škálování hodnoty křivosti tak, aby odpovídala křivosti skutečné. Pokud je v daném místě výpočtu křivosti součet hodnot *B* roven 15, pak by byla křivost rovna 0. Tento případ však může nastat i v případě kruhového krystalu o velkém poloměru, kdy by vypočtená

křivost bez škálovacího faktoru vyšla 0, zatímco skutečná křivost je nenulová. V tomto případě je vhodné zavést pro každou buňku v okolí určitou hodnotu škálovacího faktoru různou od jedné. V simulaci se však nepracuje s krystaly kruhového tvaru a je potřeba zde zachovat možnost získat křivost rovnou 0. Proto byl tento faktor z výpočtu vyřazen. Výpočet křivosti se provádí na okolí 25 buněk (včetně kontrolované). Toto okolí je znázorněno na obrázku 12.

5.3.2.3 Kontrola hmotové bilance

Pokud přejdeme ze simulace jednosložkového systému na dvousložkový, objeví se nový problém, a sice možnost porušení hmotové bilance. U jednosložkového systému k tomu výše popsaným způsobem dojít nemůže, protože při každé změně stavu buňky bude daná buňka před i po změně stavu náležet stejnému minerálu. U dvousložkového systému tomu tak být nemusí a buňka náležící například olivínu může při změně stavu změnit také minerál, ke kterému náleží, například na plagioklas. Výše popsaným procesem zrání by tak mohlo dojít k situaci, kdy je v počáteční textuře velké množství velkých krystalů olivínu a malé množství krystalů plagioklasu, které mohou být navíc malé. To následně způsobí, že v daném kroku simulace bude velké množství buněk plagioklasu, které změní svou minerální příslušnost na olivín, ale pouze malé množství buněk olivínu změněných na plagioklas. Pokud by tedy bylo v počáteční textuře například 100 000 buněk plagioklasu a 900 000 buněk olivínu, pak by po více popsaném kroku simulace mohlo být například 90 000 buněk plagioklasu a 110 000 buněk olivínu. Množství olivínu se tedy zvětšilo a množství plagioklasu zmenšilo. Došlo tedy k porušení hmotové bilance. V pseudokódu 2 je zmíněna funkce `MassBallanceControl()`. Tato funkce zajišťuje zachování hmotové bilance systému v průběhu simulace.

Jak již bylo zmíněno výše, v případě jednosložkového systému není tato funkce zapotřebí. Všechny buňky v simulaci patří ke stejnému minerálu a mění se tak pouze jejich příslušnost ke krystalům. Z tohoto důvodu není funkce `MassBallanceControl()` použita v první podmínce po spuštění změny stavu buňky. Tato část platí právě v případě, že spolu sousedí dva krystaly stejného minerálu, což v jednosložkovém systému platí vždy.

Pro účel simulace dvousložkového systému je v pseudokódu 2 zahrnuta ještě druhá podmínka, která platí, leží-li vedle sebe krystaly odlišných minerálů. Právě v této části je použita funkce `MassBallanceControl()`. První pokus implementace této funkce fungoval na principu toho, že danou změnu stavu neprovede, dokud v simulaci nenastane opačný případ. Pokud by tedy mělo dojít ke změně buňky z plagioklasu na olivín, neprovede se tato změna, dokud v simulaci nedojde k opačné změně olivínu na plagioklas. Při nalezení takového opačného případu se provedou obě změny současně a poměr počtu buněk obou minerálů v simulaci, a tím i hmotová bilance, zůstanou zachovány.

Popsaným postupem však vznikne další problém. Pokud si opět představíme případ s velkým počtem krystalů olivínu a malým počtem krystalů plagioklasu, pak tímto způsobem hrozí, že se simulace dostane do stavu, kdy se zrání podél hranic krystalů rozdílných fází výrazně zpomalí, až zastaví. To je způsobeno velkým počtem přeměn plagioklasu na olivín a malým, až žádným počtem olivínu na plagioklas. Pokud se totiž žádné buňky nepřeměňují z olivínu na plagioklas, pak zachování hmotové bilance vyžaduje, aby se ani žádný plagioklas nepřeměňoval na olivín.

Z tohoto důvodu je třeba funkci `MassBallanceControl()` upravit tak, aby u dvousložkového systému docházelo k upravování rychlostí posouvání hranice dvou odlišných minerálů. Funkce

by vlastně mohla pracovat na stejném principu jako ta předešlá, jen s tím rozdílem, že pokud by byl na konci kroku přebytek jednoho typu přeměny, například plagioklasu na olivín, pak by funkce v následujícím kroku rychlost opačného typu přeměny úměrně snížila. To by zajistilo, že se v některých místech simulace budou krystaly plagioklasu zmenšovat a v jiných místech budou naopak krystaly plagioklasu růst. Tím by byla zajištěna hmotová bilance a zároveň by tím byl v simulaci zachován transport komponent minoritního minerálu.

5.4 Vizualizace průběhu simulace (animace)

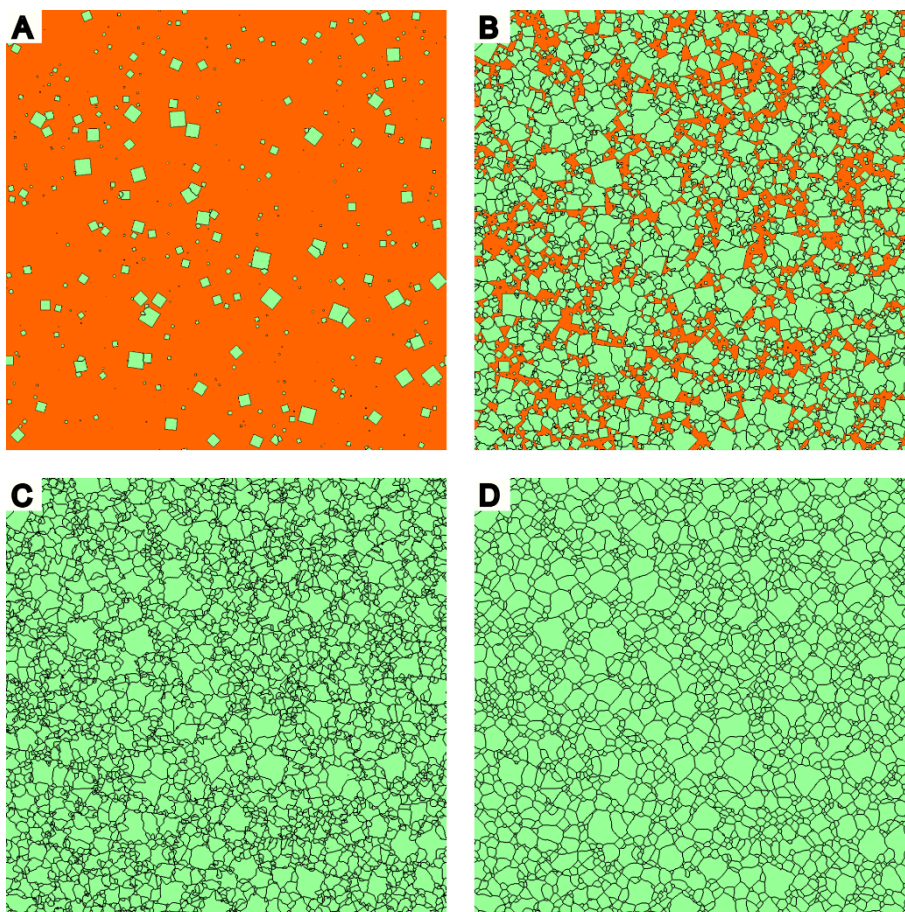
Průběh simulace je dobré nějakým způsobem vizualizovat, abychom mohli sledovat, co se v průběhu simulace děje a vizuálně tak zhodnotit výsledek a obecně chování celé simulace.

Pro tento účel byla vytvořena funkce, která dokáže vytvořit bitmapový obrázek o velikosti odpovídající velikosti použitého celulárního automatu (v našem případě 1000×1000 pixelů). Poté dokáže převést hodnoty stavů jednotlivých buněk na barvy, které jsou následně uloženy do příslušného pixelu bitmapového obrázku. Jeden pixel tak barevně reprezentuje stav právě jedné buňky. To umožňuje pozorovat chování simulace na úrovni jednotlivých buněk. Toho bylo využito především při hledání chyb ve zdrojovém kódu v průběhu vývoje simulace.

Buňky se mohou nacházet ve třech stavech (*tavenina*, *krystal* a *hranice krystalu*). Těmto stavům byly přiřazeny barvy následovně: buňky se stavem *tavenina* jsou zobrazeny oranžově, buňky se stavem *hranice krystalu* černě a barva buněk se stavem *krystal* závisí ještě na minerálu, ke kterému daná buňka patří. Pokud je daný krystal olivín, pak jsou příslušné buňky vykresleny zeleně. Pokud jde o plagioklasový krystal, jsou jeho buňky zobrazeny bíle.

Tímto způsobem byly ukládány obrázky po každém kroku simulace. Je ovšem možné frekvenci ukládání libovolně měnit. Změna frekvence ukládání obrázků nijak neovlivňuje ukládání ostatních dat simulace (viz kapitola 5.2.3), jde o dvě zcela odlišné funkce. Je tedy možné obrázky ukládat jednou za dva kroky simulace, zatímco ostatní data lze stále ukládat po každém kroku. Dále je možné ukládat obrázky také z první fáze simulace, v průběhu které se žádná další data neukládají. Příklady těchto obrázků z obou fází simulace jsou vidět na obrázku 16.

Dále byl za pomoci knihovny SFML vytvořen program, který zobrazuje jednotlivé obrázky ze simulace rychle za sebou, čímž vzniká video přehrávající průběh simulace.



Obr. 16 – Příklady bitmapových obrázků ze simulace. Na obrázku A (krok 40) je vidět počátek krystalizace taveniny. Je možné si zde všimnout různé orientace jednotlivých krystalů. Obrázek B (krok 70) naopak ukazuje závěrečnou fázi krystalizace. Zde je vidět, jak se krystaly v růstu navzájem omezují. Na obrázku C (krok 90) je vidět zcela vykrytalizovaná (počáteční) textura. V tuto chvíli dochází k přechodu simulace do druhé fáze. Je zde možné vidět mnoho malých krystalů, které nukleovaly až v závěrečné fázi krystalizace. Na obrázku D (krok 500) je pak vidět vyzrálá textura na konci simulace. V porovnání s obrázkem C je vidět výrazný úbytek malých krystalů. Obrázky jsou ilustrační a nejsou škálovány na fyzikální jednotky (nemají definované měřítko). Obrázky pocházejí ze simulace o velikosti 1 000×1 000 buněk.

6 Zpracování texturních dat

Tato kapitola popisuje způsob zpracování dat, uložených v průběhu simulace, při kterém jsou získávány parametry potřebné pro popis stavu vyzrálé textury a k porovnání simulované textury s teorií Ostwaldova zrání a s reálnou texturou (viz kapitola 9). Pro tyto účely byl vytvořen další program pomocí jazyka C++, který zpracování dat provádí, a následně byl vytvořen skript v jazyce Python, který zpracovaná data vizualizuje.

6.1 Průměrná velikost krystalů

Prvním parametrem vhodným pro popis simulované textury je vývoj průměrné velikosti krystalů v průběhu simulace. K získání tohoto parametru jsou využity polohy buněk náležících jednotlivým krystalům, které byly průběžně ukládány do binárních souborů během druhé fáze simulace. Pro jednotlivé krystaly jsou tak spočítány buňky, kterými je daný krystal tvořen. Tento počet je následně vynásoben plochou jedné buňky (ta je nastavena na počátku simulace na 1 μm), čímž získáme plochy jednotlivých krystalů. Pro popis velikosti krystalů však není použita jejich plocha, ale poloměr kruhových krystalů o stejné ploše. Vypočtené plochy krystalů je tak třeba přepočítat na poloměr dle vzorce pro výpočet obsahu kruhu:

$$S = \pi r^2 . \quad \{13\}$$

Jeho úpravou získáme potřebný vzorec pro výpočet poloměru kruhového ekvivalentu skutečného krystalu:

$$r = \frac{\sqrt{S}}{\sqrt{\pi}} . \quad \{14\}$$

Takto získané velikosti krystalů jsou vykresleny do grafu vůči času simulace a data jsou proložena křivkou teoretického vývoje průměrné velikosti krystalů vycházející z prací Lifshitze a Slyozova (1961) a Wagnera (1961). Z LSW (Lifshitz-Slyozov-Wagner) teorie vyplývá, že by se měl vývoj průměrné velikosti krystalů řídit následující rovnicí:

$$r^n - r_0^n = kt . \quad \{15\}$$

Zde je k rychlostní konstanta, jejíž hodnota závisí na termodynamických vlastnostech systému. Proměnná n je časový exponent, pro který platí, že $n = m + 2$, kde $0 \leq m \leq 1$ (Ardell 2010). Z toho vyplývá, že n nabývá hodnot od 2 do 3.

6.2 Shlukovací index R

Dalším parametrem, popisujícím vývoj textury v průběhu zrání, je shlukovací index R (Clark, Evans 1954). Tento index se používá ke kvantifikaci míry uspořádání určité populace krystalů a v geologii ho použil například Kretz (1966) nebo Jerram et al. (1996). Princip výpočtu tohoto indexu spočívá v nalezení průměrné vzdálenosti nejbližšího souseda pro každý krystal v dané populaci (vzdálenost je měřena mezi těžišti krystalů). Poté je vypočítána teoretická průměrná vzdálenost nejbližších sousedů, pro daný počet krystalů rozložených na dané ploše, tedy pro počet krystalů ve zkoumané populaci a plochu, na které jsou tyto krystaly rozloženy. Tato

teoretická průměrná vzdálenost nejbližších sousedů odpovídá případu, kdy jsou krystaly v dané ploše rozloženy náhodně a vypočítá se pomocí vzorce:

$$D_0 = \frac{1\sqrt{A}}{2\sqrt{n}}, \quad \{16\}$$

kde je A plocha, na které jsou krystaly rozmístěny a n je počet krystalů. Tato teoretická vzdálenost je následně použita pro výpočet shlukovacího indexu pomocí vzorce:

$$R = \frac{D}{D_0}, \quad \{17\}$$

kde D představuje vypočtenou průměrnou vzdálenost nejbližších sousedů pro zkoumanou populaci. Z toho vyplývá, že R je rovno 1 v případě, kdy $D = D_0$. Tedy v případě, že jsou krystaly rozmístěny náhodně, tj. nejsou uspořádané ani netvoří shluky. Pokud by krystaly byly uspořádané, pak by průměrná vzdálenost nejbližších sousedů narůstala. Pokud by naopak krystaly tvořily shluky, pak by se tato vzdálenost zmenšovala. Proto, pokud je $R > 1$, jsou krystaly uspořádané a naopak, pokud je $R < 1$, krystaly tvoří shluky.

V simulované i reálné textuře se vyskytují hraniční krystaly. Tyto krystaly mohou mít nějaké sousedy, které do zkoumané oblasti nezasahují. Takovéto vnější krystaly mohou mít těžiště k danému hraničnímu krystalu blíže než kterýkoliv krystal ležící ve zkoumané oblasti, což do výpočtu vnáší určitou chybu. Tuto chybu lze kompenzovat pomocí empiricky zjištěné úpravy vzorce pro výpočet D_0 (Donnelly 1978):

$$D_0 = \frac{1\sqrt{A}}{2\sqrt{n}} + \frac{(0,0514 + \frac{0,0412}{\sqrt{n}})*O}{n}. \quad \{18\}$$

Zde proměnná O představuje obvod plochy A .

6.3 CSD křivky

Protože v průběhu Ostwaldova zrání dochází ke snižování počtu malých krystalů, a naopak ke zvětšování těch větších, měla by být tato změna patrná na distribuci velikostí krystalů. Pro magmatické horniny je typická log-lineární CSD křivka (Cashman, Marsh 1988). Čím je křivka strmější, tím je textura dané horniny jemnozrnnější. Pokud je křivka konvexní, znamená to, že se v hornině vyskytuje velké množství malých krystalů a jen malé množství velkých. Je zde také snížen počet středně velkých krystalů, což vede ke smazání pozvolného přechodu mezi malými krystaly a těmi opravdu velkými. Konvexní CSD křivku má tedy porfyrická textura. Naopak stejnozrnná textura má CSD křivku konkávní (Marsh 1998).

V průběhu Ostwaldova zrání, kdy dochází k úbytku malých krystalů a zvětšování těch větších, by mělo docházet ke změně tvaru CSD křivky z log-lineární na konkávní (Marsh 1988). CSD křivky simulovaných dat byly vytvořeny z histogramů poloměrů ekvivalentních kruhů, získaných z ploch krystalů a vznikly spojením vrcholů pěti binů histogramu s proměnnou velikostí (šířka binů se s rostoucí velikostí zrna mírně zvětšuje za účelem odstranění problémů spojených s malým počtem velkých krystalů).

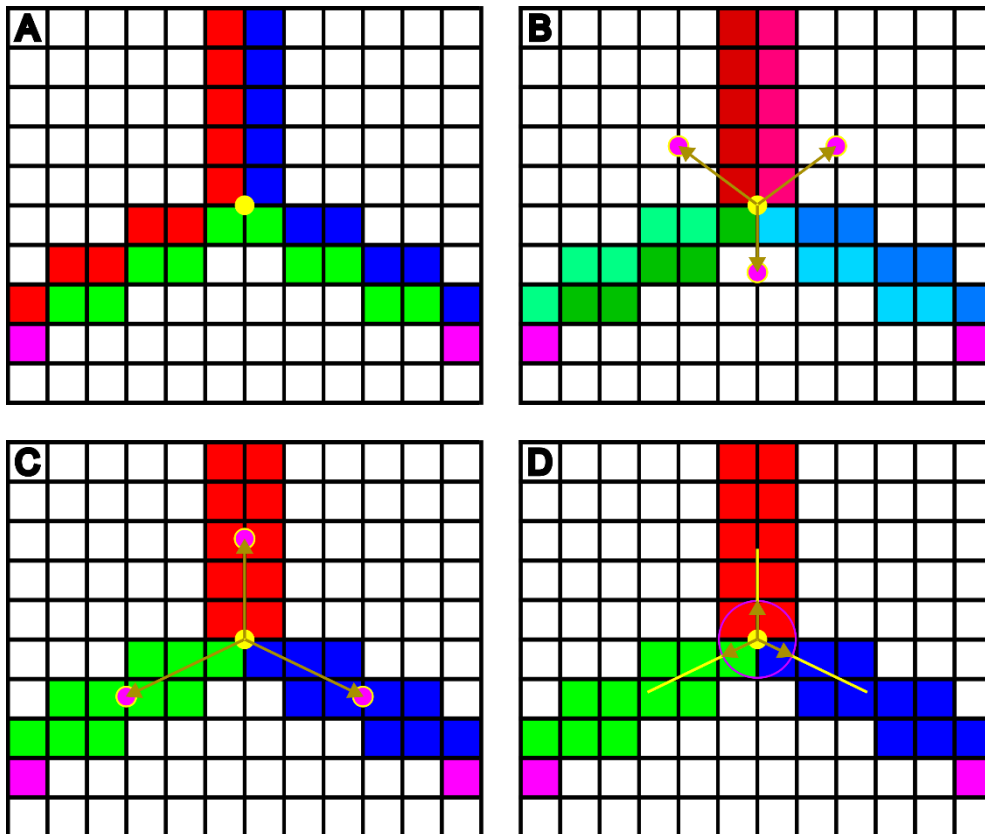
6.4 Úhly v trojných bodech

Dalším předpokládaným výsledkem Ostwaldova zrání jsou vyrovnané úhly v trojných bodech. Čím je textura horniny vyzrálejší, tím by se mělo objevovat více trojných bodů (míst, kde se stýkají tři krystaly), ve kterých svírají všechny tři hranice sousedících krystalů úhly 120° (Boor 2016). Tento předpoklad vychází z toho, že důvodem, proč k Ostwaldovu zrání dochází, je snaha snížit celkovou povrchovou energii systému. Při tomto procesu tak nedochází k pouhému rozpouštění malých krystalů a růstu těch větších, ale také k optimalizaci poměru objemu krystalů ku jejich povrchu. Jinými slovy, Ostwaldovo zrání se snaží minimalizovat plochu povrchu krystalů. Tělesem s minimálním povrchem vzhledem k danému objemu je koule. Ve 2D je to kruh. V textuře horniny nemohou být krystaly kulové a ve 2D řezu pak nemohou být kruhové. Pokud bychom totiž vedle sebe naskládali kruhové krystaly, vznikl by mezi nimi prázdný prostor, k čemuž v přírodě samozřejmě nedochází. Namísto toho se tvary krystalů při Ostwaldově zrání přibližují jinému tvaru, který se blíží tvaru kruhovému, ale je s ním možno vyplnit beze zbytku celý prostor. Tímto tvarem je šestiúhelník. Pokud vedle sebe umístíme tři šestiúhelníky, pak jejich hranice svírají v trojném bodě právě 120° .

Pro určení úhlů v trojných bodech je nejprve potřeba tyto trojné body nalézt. To se provádí ještě v průběhu simulace. Po každém kroku simulace, kdy se exportují data, dochází také ke hledání trojných bodů. Hledání se provádí tak, že se pro každou hraniční buňku spočítá, kolik má ve svém Mooreově okolí odlišných krystalů. Pokud má daná buňka ve svém okolí právě dva krystaly jiné, než ke kterému daná buňka náleží, pak jde o trojný bod. Poloha trojného bodu je vypočtena jako těžiště kontrolované buňky a dvou buněk z okolí, u kterých byly identifikovány sousední krystaly. Pokud pro danou kombinaci krystalů ještě žádný trojný bod nalezen nebyl, pak je informace o poloze tohoto trojného bodu a informace o tom, mezi kterými krystaly leží, uložena do binárního souboru. Pokud by pro danou kombinaci krystalů již nějaký trojný bod nalezen byl, pak je tento nově nalezený totožný s tím předchozím a je tedy ignorován. Tímto způsobem jsou nalezeny trojné body ve všech krocích simulace.

Nyní je třeba určit směry, kterými z trojného bodu vycházejí hranice mezi krystaly. Uložené trojné body jsou následně načteny programem pro zpracování dat psaným v jazyce C++. Společně s nimi jsou načteny také hraniční buňky všech krystalů. Protože známe pro každý trojný bod jeho polohu a také víme, mezi kterými třemi krystaly leží, je možné nalézt pro příslušné krystaly 10 hraničních buněk, které jsou trojnému bodu nejbližší (Obr. 17A). Po nalezení těchto hraničních buněk pro všechny tři krystaly je vypočítáno jejich těžiště pro každý krystal zvlášť. Tím dostaneme tři těžiště (Obr. 17B). Každé z těchto těžišť by mělo ležet uvnitř příslušného krystalu. Poté jsou vytvořeny tři vektory směřující od trojného bodu k jednotlivým těžištům (Obr. 17B). Tyto vektory nyní rozdělují 10 hraničních buněk příslušného krystalu na dvě části, část nalevo od daného vektoru a napravo od něj.

Nyní je potřeba zjistit, které hraniční body jednotlivých krystalů leží napravo a které nalevo od příslušného dělicího vektoru. K tomu je využito vektorového součinu. Vektorový součin se provede vždy mezi příslušným dělicím vektorem a vektorem směřujícím od trojného bodu k dané hraniční buňce. Protože pracujeme ve 2D prostoru, mají tyto vektory svou třetí složku vždy nulovou. Výsledkem vektorového součinu je nový vektor, který je k oběma vstupním vektorům kolmý, má tedy nenulovou pouze třetí složku. Pokud je tato složka kladná, leží daná buňka nalevo od příslušného dělicího vektoru, pokud je záporná, pak buňka leží napravo.



Obr. 17 – Vizualizace procesu výpočtu úhlů v trojném bodě. Na obrázku A jsou znázorněny hranice tří krystalů, které jsou barevně odlišeny dle příslušnosti ke krystalu. Žlutý bod uprostřed představuje polohu trojného bodu. Obrázek B zachycuje stav, kdy jsou vytvořeny tři dělicí vektory a podle nich jsou hraniční buňky rozděleny do šesti skupin. Fialové body představují těžiště hraničních buněk jednotlivých krystalů. Na obrázku C je šest skupin hraničních buněk sloučeno do tří skupin (červeně, modře a zeleně). Fialovými body jsou zde opět vyznačena těžiště tří vzniklých skupin hraničních buněk a hnědě jsou zde vyobrazeny hraniční vektory, směřující ve směrech hranic krystalů. Obrázek D zachycuje závěr výpočtu, kdy jsou hraniční vektory normalizovány a jsou mezi nimi vypočteny úhly.

Takto získáme pro každý krystal dvě skupiny buněk, celkem tedy šest skupin. Tyto skupiny nyní musíme sloučit do tří skupin. Šest nalezených skupin totiž tvoří dvojice (Obr. 17B), přičemž každá dvojice leží mezi dvěma dělicími vektory. Jinými slovy, mezi každými dvěma vektory leží právě dvě skupiny. Při slučování budeme hledat tyto dvojice a slučovat je do jedné skupiny. Nejprve jsou vypočtena těžiště všech šesti skupin. Poté je určeno, mezi kterými dělicími vektory dané těžiště leží. Každé těžiště vždy leží mezi dvěma dělicími vektory, a protože vektory jsou tři, stačí nalézt vektor, který nevymezuje prostor, kde dané těžiště leží. Všechny tři dělicí vektory jsou tedy normalizovány a poté je vypočtena vzdálenost mezi daným těžištěm a vrcholy všech tří dělicích vektorů. Vektor, jehož vrchol je nejdále od daného těžiště, je oním vektorem, který nevymezuje prostor s výskytem daného těžiště. Tímto způsobem jsou tedy těžiště šesti skupin rozděleny do tří skupin podle „nejvzdálenějšího“ dělicího vektoru.

Tyto skupiny již obsahují buňky příslušející vždy jedné ze tří hranic vycházejících z trojného bodu (Obr. 17C). Následně je opět třeba vypočítat těžiště těchto tří nových skupin, a poté

vytvořit tři nové vektory směřující od trojného bodu k danému hraničnímu těžišti. Tím získáme tři hraniční vektory, které směřují ve směru jednotlivých hranic (Obr. 17C a 17D).

Dále stačí vypočítat úhly mezi těmito vektory. Pro tento účel jsou hraniční vektory normalizovány (Obr. 17D), a poté jsou mezi nimi vypočteny skalární součiny. Tím získáme tři hodnoty skalárních součinů pro jednotlivé dvojice hraničních vektorů a dle vzorce pro skalární součin {19} je na tyto hodnoty aplikována funkce arkuskosinus:

$$a \cdot b = |a||b| \cos(\varphi) . \quad \{19\}$$

Tímto způsobem jsou z trojných bodů vypočteny úhly mezi hranicemi. Pro každý trojný bod je nalezen minimální a maximální úhel a v každém kroku jsou pak vypočteny průměrné hodnoty minimálních a maximálních úhlů.

6.5 Stupeň rekrystalizace

Stupněm rekrystalizace se zde rozumí počet buněk, které v průběhu simulace změny svou příslušnost ke krystalu, tj. aktuální krystal ke kterému daná buňka přísluší se liší od krystalu, ke kterému tato buňka náležela na počátku simulace (v počáteční textuře). Jde tak tedy o míru popisující rozdíl mezi současnou a počáteční texturou. Stupeň rekrystalizace je udáván v procentech buněk, jejichž příslušnost ke krystalu se v daném kroku liší od té v počáteční textuře.

6.6 Délka mezizrnové hranice

Ostwaldovo zrání by mělo způsobovat pokles povrchové energie systému, čehož by mělo být dosaženo zmenšením celkového povrchu krystalů. Po každém kroku simulace je tedy spočítán počet hraničních buněk. Protože je hranice mezi dvěma sousedními krystaly tvořena vždy dvěma řadami hraničních buněk, je nutné celkový počet hraničních buněk vydělit dvěma. Tento počet je vynásoben velikostí jedné buňky, a protože může daná buňka přispívat k délce hranice délkou své hrany, tedy velikostí jedné buňky, nebo délkou své diagonály, tedy velikostí jedné buňky vynásobené druhou odmocninou ze dvou, je počet buněk vynásoben ještě hodnotou $(1 + 2^{1/2}) / 2$. Tímto způsobem je získána přibližná hodnota celkové délky hranice.

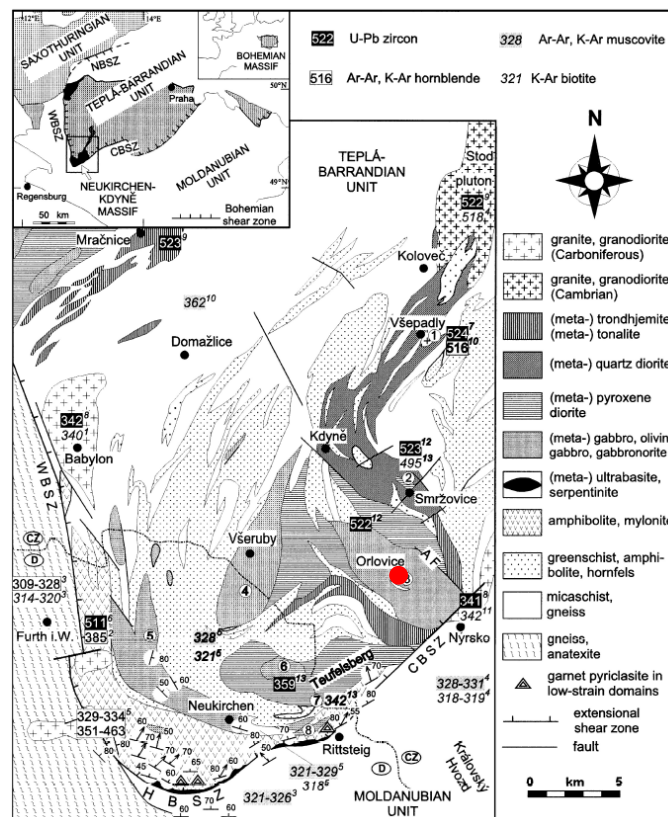
7 Zpracování reálné textury

Jedním z cílů této práce je porovnání výsledků simulace s texturami vzorků reálných hornin, u kterých se předpokládá, že prodělaly Ostwaldovo zrání. K tomuto účelu byl využit vzorek dunitu z Kdyňského masivu. V této části bude popsán postup zpracování těchto textur za použití softwaru Inkscape a programu pro zpracování reálné textury, který byl pro tento účel vytvořen v jazyce C++. Také zde bude podán základní geologický popis Kdyňského masivu.

7.1 Kdyňský masiv

Kdyňský masiv je plutonický komplex ležící v jihozápadní části Českého masivu a má rozlohu okolo 300 km² (Bues et al. 2002). Tento intruzivní komplex leží převážně na českém území, ale zasahuje také na území Německa. Stáří Kdyňského komplexu je kambrické (všepadlovský granodiorit – 524 ± 3 Ma (U-Pb, Dörr et al. 2002), smržovický tonalit – 522 ± 6 až 523 ± 3 Ma (U-Pb, Dörr et al. 2002), smržovické gabro – 523 ± 1 Ma (U-Pb, Dörr et al. 2002), orlovické gabro – 524 ± 0,8 Ma (U-Pb, Dörr et al. 2002)).

Jihozápadní část komplexu je tvořena převážně olivinickými gabry, gabry, gabronority, peridotity a pyroxenovými diority, zatímco v severovýchodní části převládají křemenné diority (Bues et al. 2002). Tyto horniny intrudují do kadomských siliciklastyk blovického komplexu (Syahputra et al. 2023). Použitý vzorek (DV-3) pochází z lokality Orlovická hora (Obr. 18), na jejímž vrcholu se nachází stará limonitová dobývka.



Obr. 18 – Geologická mapa kdyňského masivu (Bues et al. 2002). Přibližná poloha místa odběru vzorku DV-3 je na mapě vyznačeno červeně.

Masiv je možné rozdělit na tři jednotky (Vejnar 1984). Ve spodní zóně se nacházejí především olivinická gabra a gabronority. Střední zóna je tvořena dioritem a svrchní zóna pak křemenným dioritem. Tyto jednotky představují starší intruzivní fázi a v okolí se nacházejí horniny mladší intruzivní fáze, kterými jsou tonality až trondhjemitity (Vejnar 1984). Dále se uvnitř masivu vyskytují čočky a žíly granitu, granitového a dioritového porfyru, aplitu a pegmatitu.

V SV pokračování Kdyňského masivu se nachází kambrická granitoidní intruze stodského plutonu a Kdyňský masiv má výraznou kontaktní aureolu v okolních siliciklastikách (Vejnar 1984). Orlovická hora, z níž pochází vzorek DV-3, leží ve spodní jednotce Kdyňského masivu a je tvořena právě olivinickými gabry a gabronority a dunity.

7.2 Digitalizace reálné textury

Textura horniny byla nafocena pod optickým polarizačním mikroskopem při zkřížených nikolech. Pro každou zkoumanou oblast byly pořízeny tři snímky při různých stupních natočení stolku. Díky tomu bylo možné rozlišit jednotlivé krystaly. Pokud bychom měli k dispozici pouze jeden snímek, byly by na něm některé krystaly zhaslé a mohlo by dojít přehlédnutí hranice mezi dvěma zhaslými krystaly. Více snímky při různém natočení se tento problém eliminuje. Všechny snímky byly pořízeny při zvětšení 4×10 .

Následně byly snímky jednotlivých oblastí přeloženy přes sebe a byly ručně obkresleny hranice mezi krystaly. K tomu byl využit software Inkscape. Obkreslené hranice byly vyexportovány ve formátu PNG a následně načteny programem pro zpracování reálné textury. Obrázky s obkreslenými hranicemi mají u všech pixelů, kterými hranice neprochází, nastavenou průhlednost na 0 (pixely jsou průhledné).

Po načtení obrázku je vytvořena síť buněk, podobně jako je tomu v případě celulárního automatu, jejíž velikost odpovídá velikosti načteného obrázku. V těchto buňkách je uchována informace o stavu (*krystal* nebo *hranice krystalu*) a také číslo krystalu, ke kterému náleží. Číslo krystalu je u všech buněk na začátku nastaveno na 0. Poté začne program kontrolovat hodnoty průhlednosti pixelů v prvním řádku za účelem nalezení prvního krystalu. Při objevení pixelu s hodnotou průhlednosti 0 je tento pixel považován za první pixel náležící nově nalezenému krystalu. Poloha tohoto pixelu je uložena a buňce na příslušné pozici je nastaven stav na *krystal* a číslo příslušného krystalu je nastaveno na 1 (první krystal). Nyní pokračuje kontrola pixelů v řádku, přičemž každý následující pixel, který má hodnotu průhlednosti 0 a příslušná buňka ještě nebyla přiřazena žádnému krystalu (buňka má číslo krystalu nastaveno na 0), je považován za pixel náležící prvnímu krystalu, respektive naposledy nalezenému krystalu. Proto je vždy příslušné buňce změněn stav na *krystal* a číslo krystalu je nastaveno na číslo naposledy nalezeného krystalu. Pokud program v řádku objeví pixel s hodnotou průhlednosti větší než 0 nebo pixel, jehož příslušná buňka již byla k nějakému krystalu přiřazena, případně prohledávání narazí na konec řádku, kontrola pixelů se v tomto řádku ukončí a je vrácena zpět na první nalezený pixel daného krystalu. Odtud je kontrola přesunuta o řádek níže. Zde je opět zkontrolována hodnota průhlednosti pixelu. Pokud je rovna 0, provede se přiřazení ke krystalu a poté je zkontrolován pixel nalevo od současného. Pokud má tento pixel hodnotu průhlednosti 0, proces se opakuje. Tímto způsobem postupuje kontrola a přiřazování buněk k danému krystalu směrem doleva, dokud program nenarazí na pixel, který má hodnotou průhlednosti větší než 0 nebo byl již přiřazen k některému krystalu, případně dokud program nenarazí na

konec řádku. Poté se program posune zpět doprava a začne kontrola pixelů na pravé straně stejně jako probíhala v prvním řádku.

Pokud se však při posunutí o řádek níže program ocitne na pixelu, jehož hodnota průhlednosti není 0 nebo byl tento pixel již přiřazen k jinému krystalu, program se vrátí o řádek nahoru a posune se zde o jeden pixel doprava, pokud tento pixel náleží právě prohledávanému krystalu. Tento proces se stále opakuje a kontrolují se další a další řádky, dokud nenastane situace, kdy program nemůže nalézt ještě nepřirazený pixel s hodnotou průhlednosti 0. To znamená, že byly přiřazeny všechny pixely, které tímto způsobem pro daný krystal přiřazeny být mohly. Program se poté opět vrátí na první nalezený pixel daného krystalu a výše popsaným způsobem začne hledat krystal nový. Nově nalezený krystal pak bude mít číslo o jedno vyšší než krystal předchozí.

Tímto způsobem však nedojde k dokonalé identifikaci krystalů. Některé skutečné krystaly mohou být po této fázi rozděleny do několika dílčích krystalů. Proto zde musí být ještě druhá fáze, při které dojde ke sloučení všech dílčích krystalů. Tím získáme jednotlivé krystaly. Ty jsou ale ještě odděleny hranicí, která má na šířku více než dva pixely. Proto nastane ještě třetí fáze, během které jsou hraniční pixely (pixely s hodnotou průhlednosti větší než 0) postupně přiřazovány ke krystalu, se kterým daná buňka sousedí. To se děje, dokud nejsou ke krystalům přiřazeny všechny hraniční pixely. Na závěr jsou ještě nalezeny buňky, které mají za svého souseda buňku náležící odlišnému krystalu, a těmto buňkám je změněn stav z *krystal* na *hranice krystalu*. Tak získáme plně digitalizovanou texturu reálné horniny, kterou je možno analyzovat stejnými metodami jako simulované textury.

7.3 Extrahování dat z reálné textury

Digitalizovaná reálná textura, získaná procesem popsaným v kapitole 7.2, je uložena v podobném formátu jako textura vzniklá během simulace. To umožňuje použít pro získání dat z reálné textury stejné postupy, jako v případě textury simulované. Rozdíl je především v tom, že zatímco u simulované textury je možné sledovat vývoj jednotlivých parametrů, například shlukovacího indexu, reálná textura představuje stav v určitém časovém okamžiku. Navíc tento časový okamžik neznáme a neznáme ani počáteční texturu, a tudíž není možné nastavit počáteční podmínky simulace tak, že bychom následně dokázali určit, jak dlouho byla daná hornina vystavena texturnímu zranění.

U reálné textury je počítána průměrná velikost krystalů (viz kapitola 6.1), shlukovací index R (viz kapitola 6.2) a CSD křivka (viz kapitola 6.3). Získávaná data jsou tedy stejná pro reálnou i simulovanou texturu a jsou pořízena stejnými metodami. Je tak možné jejich porovnání.

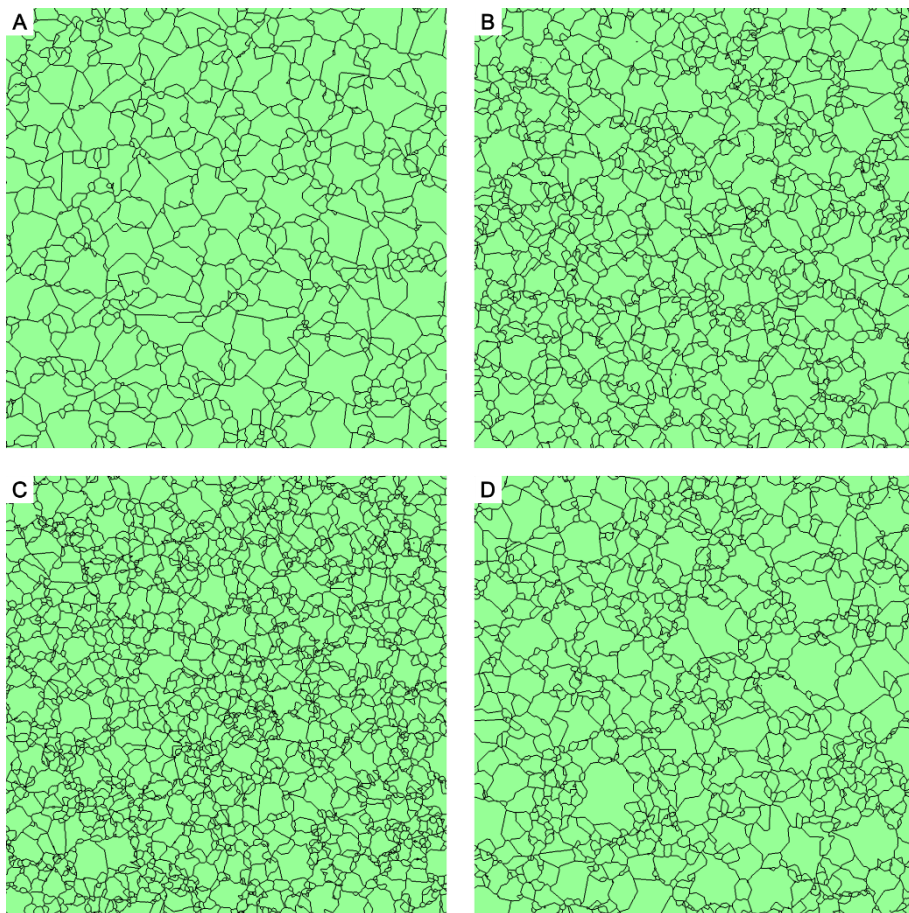
8 Výsledky

V této části budou prezentována data získaná ze simulací a z reálné textury. Data byla získána z jednoho vzorku reálné horniny (vzorek DV-3) na kterém byly pořízeny snímky čtyř oblastí a na těchto snímcích byly následně ručně obkresleny hranice krystalů olivínu. Následně byly tyto hranice zpracovány tak, jak je to popsáno v kapitolách 7.2 a 7.3. Pro získání dat ze simulací byly vytvořeny čtyři počáteční textury. Tyto textury byly generovány pomocí první fáze simulace (viz kapitola 5.3.1), přičemž pro každou z nich byly použity odlišné rychlosti nukleace. Všechny čtyři textury pak byly vystaveny druhé fázi simulace (viz kapitola 5.3.2), ve které dochází ke zrání. Zrání probíhalo po dobu 2 000 kroků (1 878,1 až 2 025,6 let v závislosti na počáteční textuře). V průběhu simulací byla exportována data (viz kapitola 5.2.3), která byla následně zpracována dle popisu v kapitole 6.

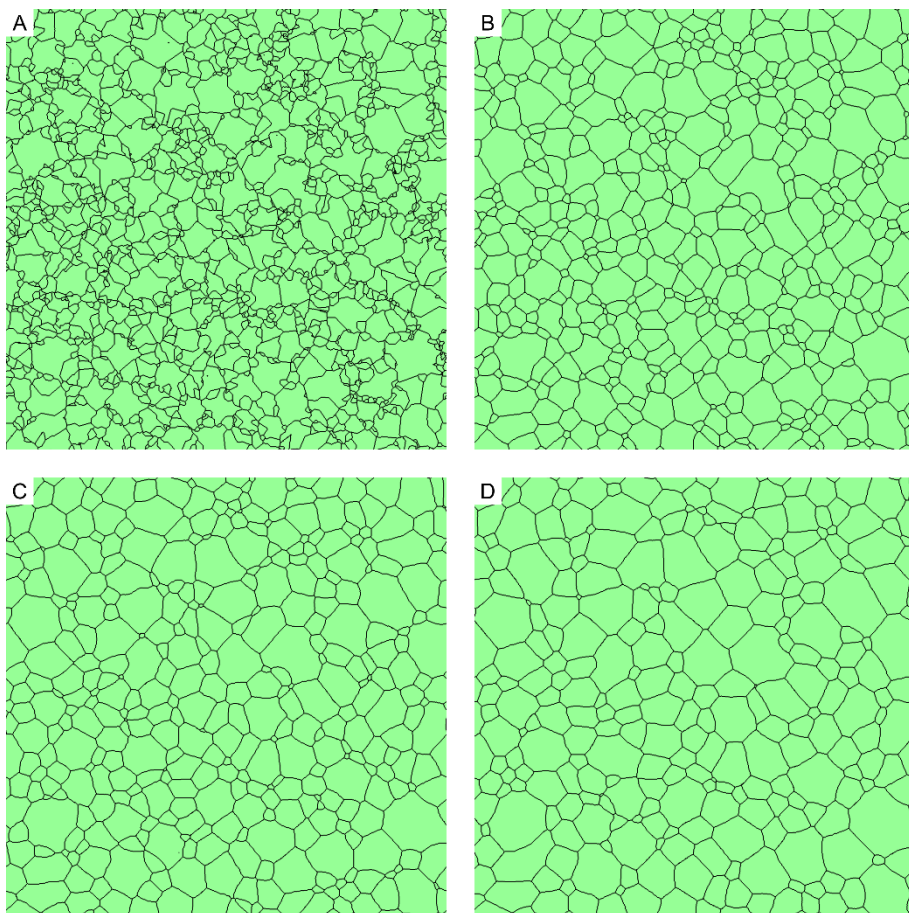
8.1 Data ze simulací

Jak bylo řečeno výše, pro účely simulace byly vytvořeny čtyři odlišné počáteční textury, které byly následně vystaveny simulaci Ostwaldova zrání. Tyto počáteční textury jsou znázorněny na obrázku 19, a na obrázku 20 je zachycen vývoj textury B v průběhu simulace. Jednotlivé počáteční textury se liší zrnitostí, čehož bylo dosaženo použitím odlišných rychlostí nukleace, čím vyšší rychlost nukleace, tím menší velikost krystalů. Při generování počátečních textur byla snaha o to, aby připomínaly textury magmatických hornin s víceméně log-lineární CSD křivkou (Cashman, Marsh 1988). Generování takto odlišných počátečních textur mělo za cíl otestovat, zda při simulaci Ostwaldova zrání dochází k přepisu původního texturního záznamu horniny (Boorman et al. 2004). Z CSD křivky textury po skončení simulace by tak nemělo být možné vyčíst, jak vypadala CSD křivka počáteční textury. Startovní a výsledné hodnoty parametrů jednotlivých počátečních textur jsou uvedeny v tabulce 1. Ze všech čtyř simulací byla pořízena data stejného typu, proto zde budou prezentovány pouze ukázky těchto dat. Kompletní data ze všech čtyř simulací je možné nalézt v přílohách 1 až 12.

Prvním sledovaným parametrem je časový vývoj průměrné velikosti krystalů (Obr. 21). Velikosti krystalů jsou reprezentovány poloměrem kruhu o stejném obsahu jako je obsah daného krystalu. Ve všech provedených simulacích průměrná velikost krystalů narůstá a počáteční a výsledné průměrné velikosti jsou uvedeny v tabulce 1. Nárůst průměrné velikosti krystalů je nejrychlejší na začátku simulace a postupně se rychlost růstu zpomaluje.



Obr. 19 – Čtyři počáteční textury použité v simulacích, lišící se zrnitostí, čehož bylo dosaženo různými rychlostmi nukleace. Šířka textur je vždy 1 mm. Textura na obrázku A je tvořena 655 krystaly, textura na obrázku B 1 420 krystaly, textura C obsahuje 2 492 krystalů a textura D 1 213 krystalů.

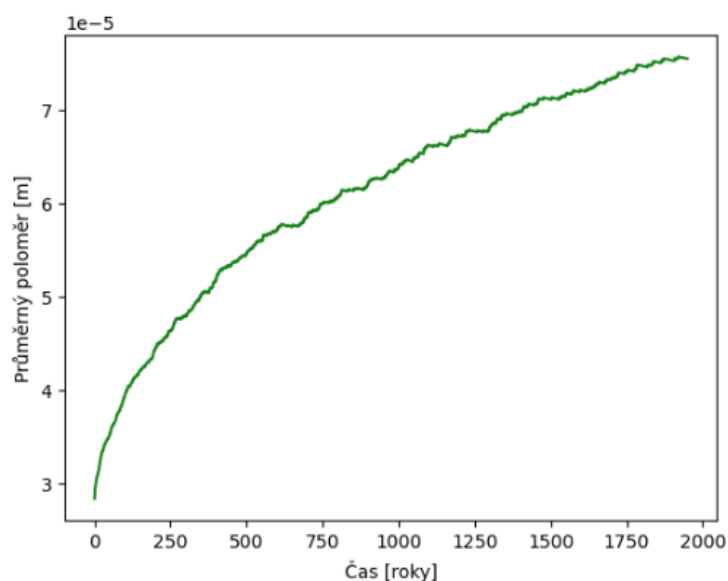


Obr. 20 – Obrázky textury ze simulace s počáteční texturou B. Délka hrany obrázku odpovídá 1 mm. Na obrázku A je počáteční textura. Na obrázku B je textura po 500 krocích simulace (440,1 let) a obrázek C zachycuje texture po 1 000 krocích simulace (931,8 let). Na obrázku D je vidět výsledná textura po 2 000 krocích (1 948,8 let).

Počáteční textura	Počáteční počet krystalů	Výsledný počet krystalů	Počáteční shlukovací index	Výsledný shlukovací index
A	655	200	1,19924	1,22514
B	1 420	270	1,15536	1,34375
C	2 492	334	1,16057	1,36423
D	1 213	225	1,12191	1,27293

Počáteční délka hranice [m]	Výsledná délka hranice [m]	Počáteční průměrná velikost krystalů [m]	Výsledná průměrná velikost krystalů [m]	Výsledný stupeň rekrytalizace [%]
0,049	0,026	4,37E-05	8,63E-05	37,65
0,069	0,031	2,84E-05	7,55E-05	44,13
0,089	0,035	2,14E-05	6,80E-05	52,94
0,062	0,028	3,01E-05	8,05E-05	42,81

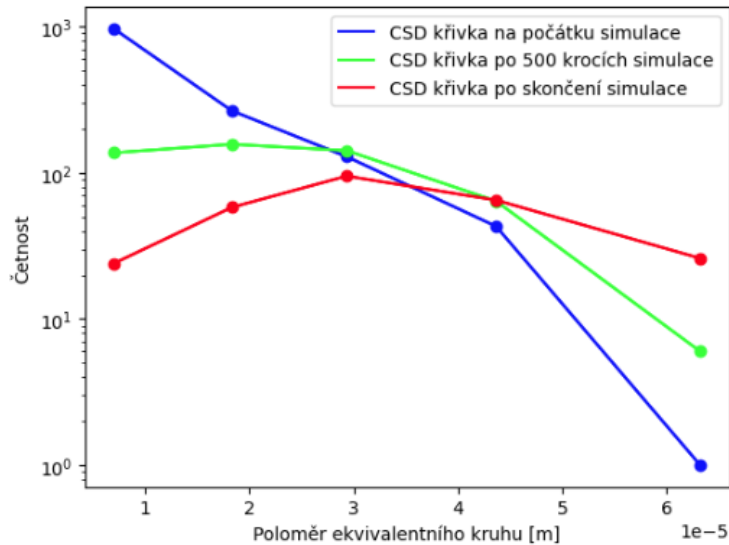
Tab. 1 – Startovní a výsledné hodnoty parametrů počátečních textur A až D.



Obr. 21 – Časový vývoj průměrné velikosti krystalů v simulaci B. Velikosti krystalů odpovídají poloměrům kruhů o stejné ploše, jakou má daný krystal. Čas v sekundách byl vypočítán v průběhu simulace (viz kapitola 6.3.2.1), později byl přepočítán na roky.

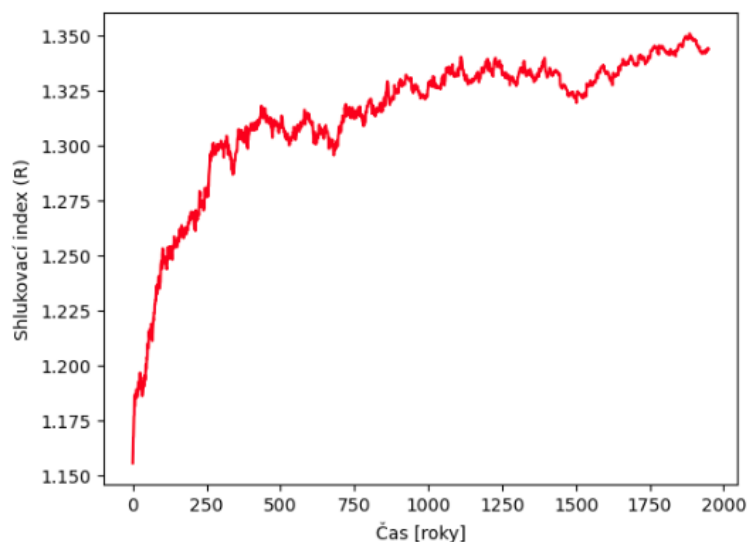
Parametr charakterizující texturu jako celek je CSD křivka. Proto byly pro simulace vykresleny tři CSD křivky, na nichž je vidět vývoj textury v průběhu simulace (Obr. 22). První CSD křivka popisuje počáteční texturu, druhá zachycuje texturu po 500 krocích (427,9 až 474,3 let) a poslední CSD křivka je pro finální texturu (1 878,1 až 2 025,6 let). Z obrázku 22, který představuje vývoj textury B, je vidět přechod od log-lineární až konvexní CSD křivky na počátku simulace, ke křivce konkávní v závěru simulace. Tento trend je stejný pro všechny provedené simulace (Přílohy 1 až 4). Ke změně od log-lineární křivky po konkávní dochází převážně v části CSD křivky reprezentující malé krystaly, u větších krystalů zůstává křivka více

méně log-lineární a mění se spíše její sklon. Protože se jednotlivé počáteční textury liší zrnitostí, jejich počáteční CSD křivky mají odlišný sklon.

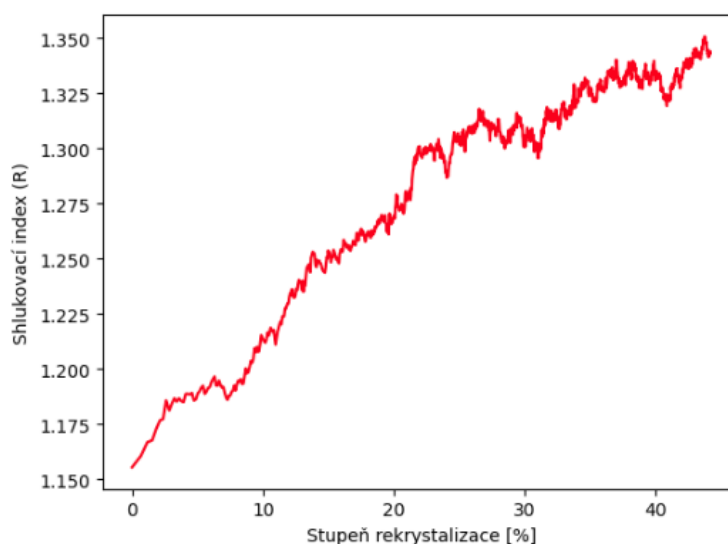


Obr. 22 – CSD křivky pro simulovanou texturu B na počátku simulace, po prvních 500 krocích simulace (440,1 let a 26,62 % rekrystalizace) a na konci simulace (1 948,8 let a 44,13 % rekrystalizace).

Dalším významným parametrem pro popis textury je shlukovací index R (viz kapitola 6.2). Shlukovací index byl počítán v každém kroku simulace a příklad jeho časového vývoje ze simulace B je vidět na obrázku 23. Protože je čas citlivý na specifickou volbu řady parametrů (například mobility), které se mohou v geologických systémech významně měnit, byla data vykreslena také v závislosti na jiném parametru, který představuje míru vyžralosti textury a může tak být použit namísto času. Tímto parametrem je stupeň rekrystalizace a příklad vývoje shlukovacího indexu v závislosti na stupni rekrystalizace je zachycen na obrázku 24. Vývoje pro jednotlivé simulace se výrazně liší (přílohy 1–4D a 5–8A). Zatímco v případě počáteční textury B je viditelný rostoucí trend v průběhu celé simulace, u textury A dochází po počátečním rychlém nárůstu k otočení trendu na klesající. U textury C dochází po počátečních strmém růstu k ustálení na hodnotě okolo 1,36, kdežto u textury D po počátečním růstu dojde pouze ke zpomalení a rostoucí trend pokračuje do času cca 500 let (asi 25 % rekrystalizace), poté dochází k ustálení na hodnotě okolo 1,29.



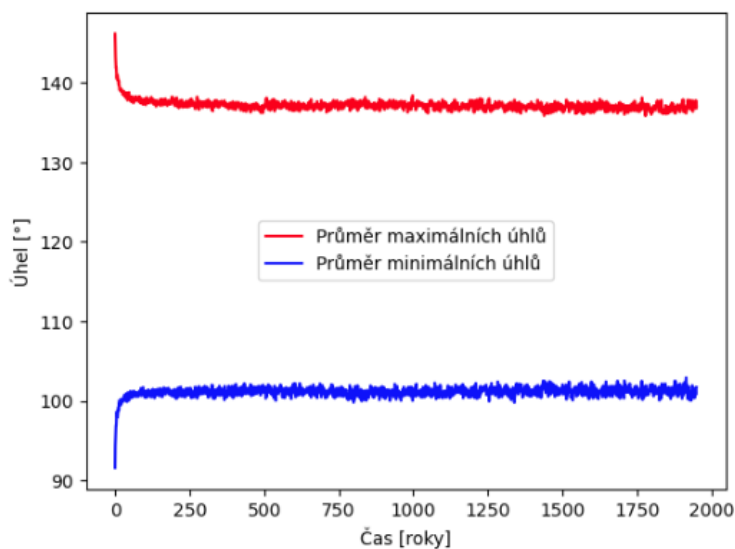
Obr. 23 – Časový vývoj shlukovacího indexu R pro simulaci B.



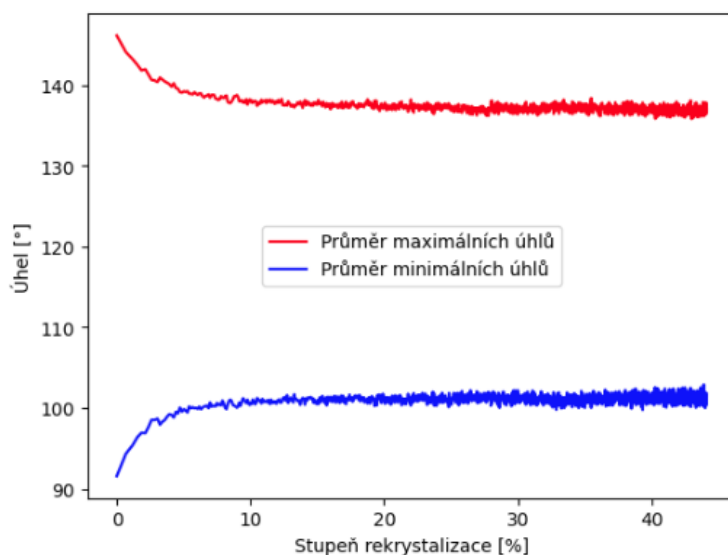
Obr. 24 – Vývoj shlukovacího indexu v závislosti na stupni krystalizace. Data zobrazená na obrázku pocházejí ze simulace B.

Jedna z předpovědí, kterou teorie Ostwaldova zrání poskytuje, je že by v trojných bodech měly být vyrovnané úhly (viz kapitola 2.3). Proto byly při zpracování dat vypočítány úhly v trojných bodech (viz kapitola 6.4) a následně byly vypočítány průměrné hodnoty minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech v každém kroku simulace. Časový vývoj těchto průměrných hodnot je vykreslen na obrázku 25 a vývoj v závislosti na stupni rekrystalizace je zachycen na obrázku 26. V obou obrázcích je vidět rychlé přibližování obou křivek na počátku simulace (do cca 8 % rekrystalizace), zatímco později dochází ke zpomalení vzájemného přibližování až k ustálení. Tento vývoj je opět podobný pro všechny provedené simulace. Protože je celulární automat založen na síti buněk a jde tak o diskrétní systém, nikoliv spojitý, je obtížné sestavit z buněk hranice tak, aby svíraly dokonale úhly 120° . Z tohoto důvodu je za 120° trojný bod považován každý trojný bod, jehož rozdíl mezi maximálním a minimálním úhlem je menší než 20° . Takovéto trojné body byly nalezeny a jejich počet byl vydělen

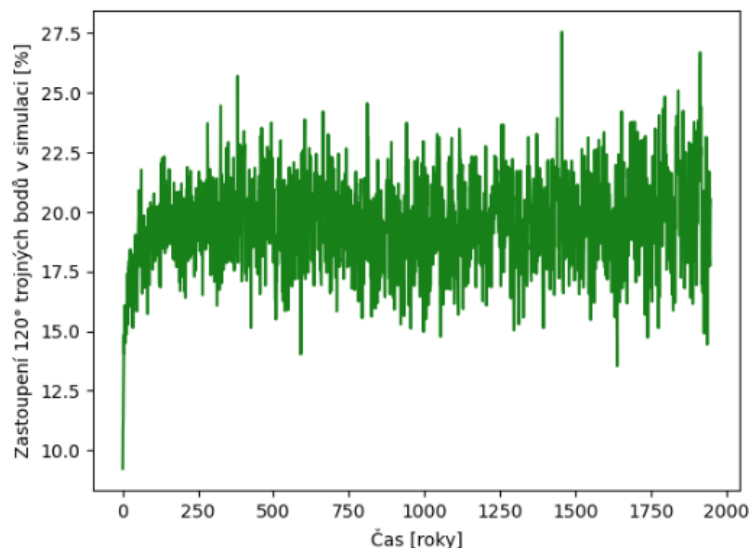
celkovým počtem trojných bodů v daném kroku simulace. Tím bylo získáno zastoupení 120° trojných bodů v textuře. Jeho časový vývoj je na Obr. 27 a vývoj vůči stupni rekrystalizace je znázorněn na obrázku 28. Opět je zde vidět rychlý počáteční nárůst zastoupení vyrovnaných (120°) trojných bodů a následné ustálení okolo hodnoty 20 %. Tento vývoj, i ustálená hodnota 20 %, jsou stejné u všech provedených simulací. Na časovém vývoji (Obr. 27) je vidět, že k ustálení dojde velmi brzy po spuštění simulace. Z vývoje zastoupení vyrovnaných trojných bodů v simulaci v závislosti na stupni rekrystalizace (Obr. 28) je vidět, že k největší změně dochází do cca 20 % rekrystalizace (v případě textury A dochází k největší změně jen do cca 7 % rekrystalizace).



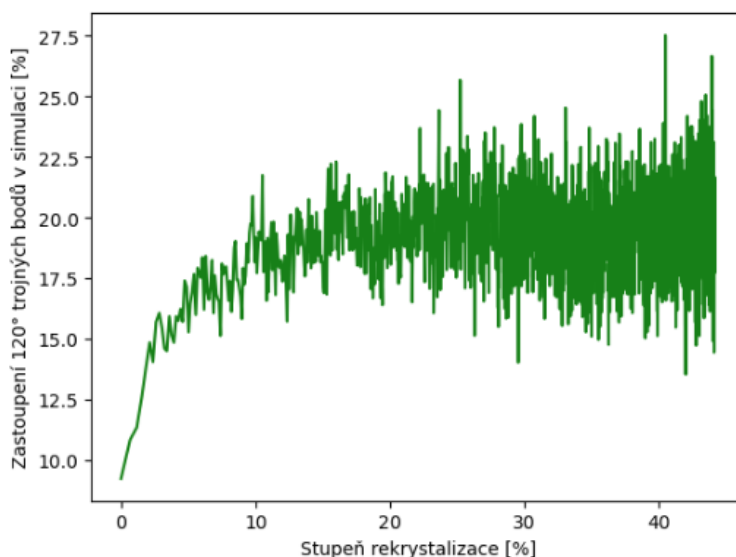
Obr. 25 – Časový vývoj průměrných minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech. Data pocházejí ze simulace B.



Obr. 26 – Vývoj průměrných minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech v závislosti na stupni rekrystalizace.



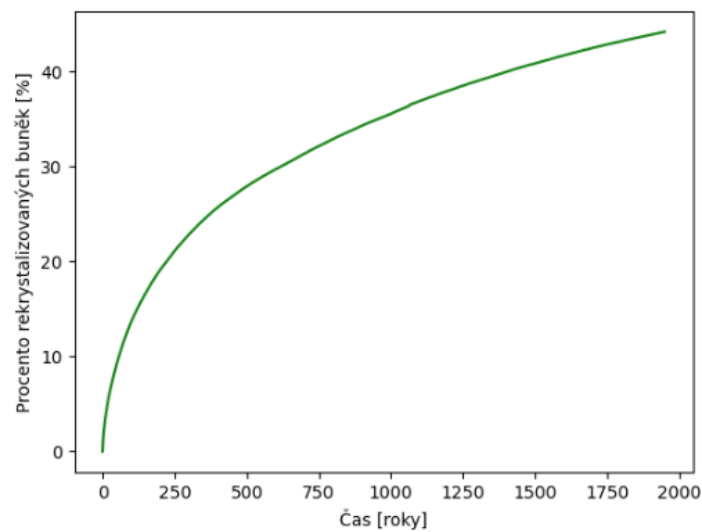
Obr. 27 – Časový vývoj zastoupení 120° trojných bodů v simulaci B.



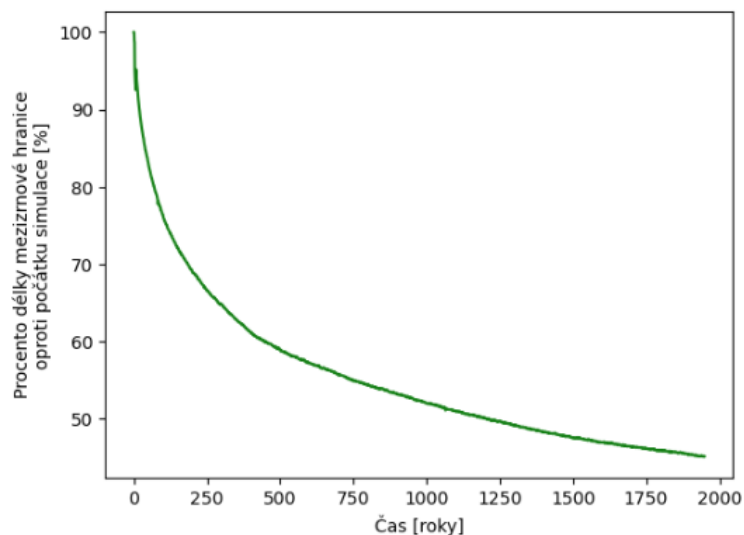
Obr. 28 – Vývoj zastoupení 120° trojných bodů v simulaci B v závislosti na stupni rekrystalizace.

Posledními dvěma parametry popisujícími průběh simulace jsou stupeň rekrystalizace (viz kapitola 6.5) a celková délka hranice mezi krystaly (viz kapitola 6.6). Časový vývoj stupně rekrystalizace je zachycen na obrázku 29 a změna celkové délky hranice s časem je vidět na obrázku 30. Vývoj celkové délky hranice v závislosti na stupni rekrystalizace je zobrazen na obrázku 31. Stupeň rekrystalizace byl použit jako náhrada při vizualizaci dat za méně vhodný čas (viz kapitola 9). U všech provedených simulací je opět vidět stejný rostoucí trend, který se udržuje po celou dobu simulace, pouze dochází ke zpomalení rychlosti růstu. Jednotlivé simulace se liší maximálním dosaženým stupněm rekrystalizace (Tab. 1). Nejvyššího stupně rekrystalizace dosáhla simulace s počáteční texturou C, která má současně nejmenší počáteční

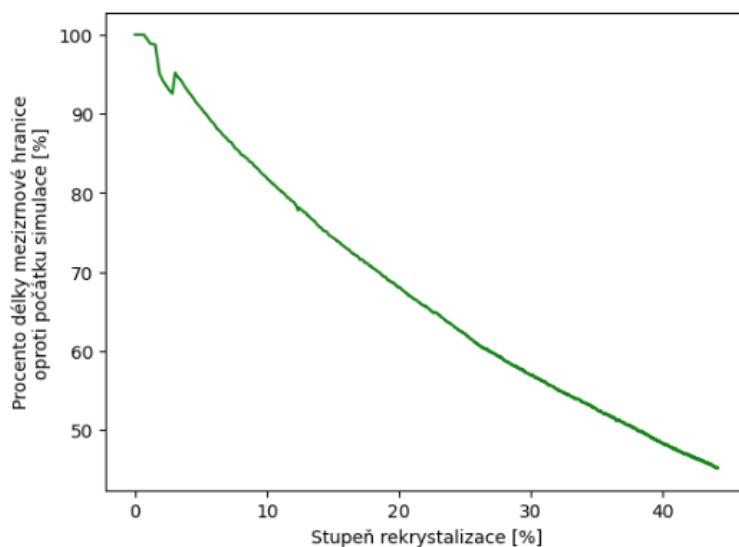
průměrnou velikost krystalů. Nejmenšího stupně rekrystalizace dosáhla simulace A, která má ze všech provedených simulací největší počáteční průměrnou velikost krystalů. Průměrná velikost krystalů je na počátku simulací B a D podobná, čemuž odpovídají také podobné hodnoty maximálního dosaženého stupně rekrystalizace. Z obrázků 30 a 31 je vidět, že celková délka hranice postupně klesá, přičemž rychlost zkracování mezizrnové hranice s časem rovněž klesá. Vůči stupni rekrystalizace dochází ke zkracování hranice rovnoměrněji než vůči času. I u tohoto parametru platí, že mají všechny simulace stejný klesající trend, liší se pouze počáteční a výslednou délkou mezizrnové hranice, přičemž počáteční délka hranice opět souvisí s počáteční průměrnou velikostí krystalů. Čím je počáteční průměrná velikost krystalů menší, tím je počáteční mezizrnová hranice delší (Tab. 1).



Obr. 29 – Časový vývoj stupně rekrystalizace v průběhu simulace B.



Obr. 30 – Časový vývoj celkové délky hranice mezi krystaly v simulaci B normalizované počáteční délkou hranice.

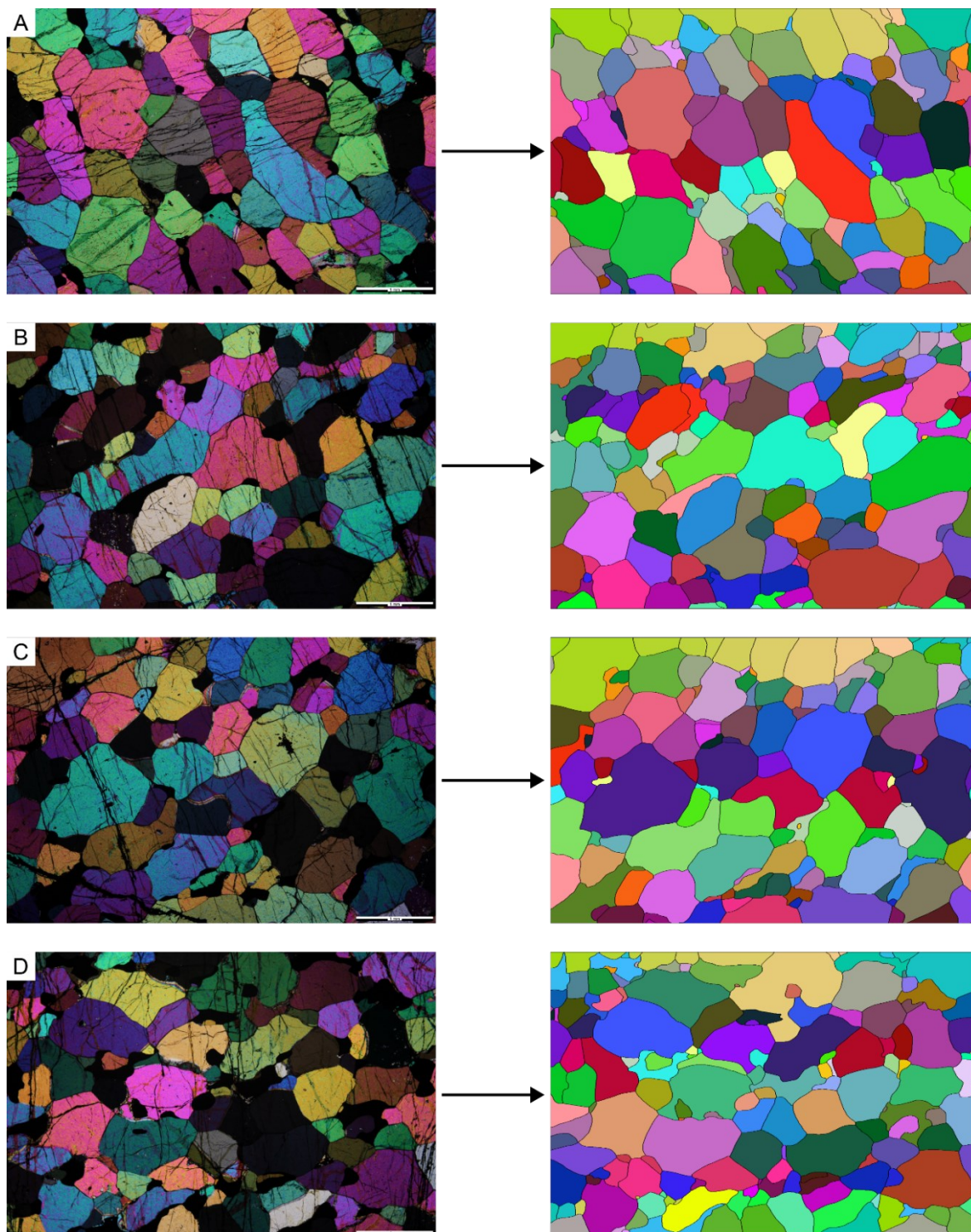


Obr. 31 – Vývoj celkové délky mezizrnové hranice simulace B normalizované počáteční délkou hranice v závislosti na stupni rekrystalizace.

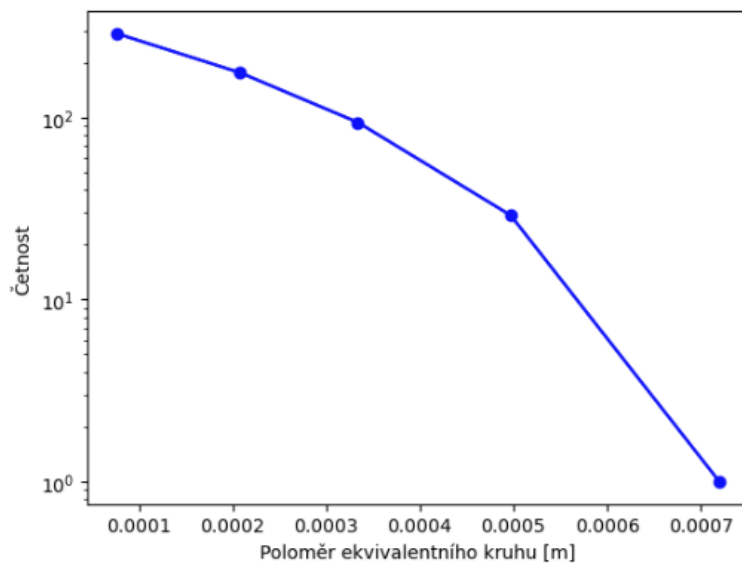
8.2 Data z reálné textury

Textura reálné horniny měla být porovnávána s výsledky simulace jednosložkového systému, proto byl z dostupných vzorků vybrán vzorek dunitu DV-3, pocházející z Orlovické hory ležící v Kdynšském masivu. Tento vzorek byl zvolen, protože oproti ostatním obsahoval nejmenší množství minerálů jiných než olivín (plagioklas, klinopyroxen). Přesto však obsahoval značné množství rudních minerálů. Ze vzorku byly pořízeny snímky ze čtyř oblastí, které byly co možná nejméně kontaminovány těmito minerály (Obr. 32). Z obrázku 32 je vidět slabé protažení a přednostní orientace krystalů. Následně byly vzorky zpracovány dle popisu v kapitolách 7.2 a 7.3 a výsledky budou prezentovány v této části práce.

Všechny čtyři nafocené oblasti pocházejí z jednoho vzorku, a tedy z jedné textury. Proto byly velikosti krystalů z jednotlivých oblastí sloučeny do jednoho datasetu, ze kterého byla vykreslena CSD křivka popisující texturu tohoto vzorku (Obr. 33). Z CSD křivky zobrazené na obrázku 33 je konkávní zakřivení zantelné pouze velmi slabě, není zde jasně viditelné ochuzení o malé krystaly, jako je tomu u simulovaných textur (Přílohy 1–4C). Křivka se jeví spíše log-lineárně a pokles v oblasti velkých krystalů je způsoben malým zastoupením velmi velkých krystalů. Dále byly do tabulky 2 zapsány počty krystalů, hodnoty shlukovacího indexu, celkové délky mezizrnové hranice a průměrné velikosti krystalů pro jednotlivé oblasti.



Obr. 32 – Nalevo fotky jednotlivých oblastí na vzorku DV-3 a nalevo příslušná digitalizovaná textura. Na obrázku A je fotka a digitalizovaná textura oblasti DV-3_1, obrázek B náleží oblasti DV-3_2, obrázek C patří oblasti DV-3_3 a na obrázku D je oblast DV-3_4. Délka měřítka je 1 mm a fotky byly pořízeny pomocí polarizačního mikroskopu při zkřížených nikolech a zvětšení 4×10.



Obr. 33 – CSD křivka textury vzorku DV-3. Vytvořeno z dat velikostí krystalů ze všech čtyř oblastí, které byly na vzorku pořízeny (celkem z 589 krystalů). Křivka je v oblasti malých krystalů jen velmi slabě konkávní.

Textura	Počet krystalů	Shlukovací index	Celková délka hranice [m]	Průměrná velikost krystalů [m]
DV-3_1	132	1,38365	0,094	1,89E-04
DV-3_2	154	1,28058	0,097	1,74E-04
DV-3_3	136	1,2755	0,091	1,84E-04
DV-3_4	167	1,26594	0,101	1,66E-04

Tab. 2 – Základní texturní parametry jednotlivých oblastí ze vzorku DV-3.

9 Diskuse

V této části proběhne diskuse výsledků simulace s teorií. Dále zde budou diskutovány výsledky zpracování reálné textury.

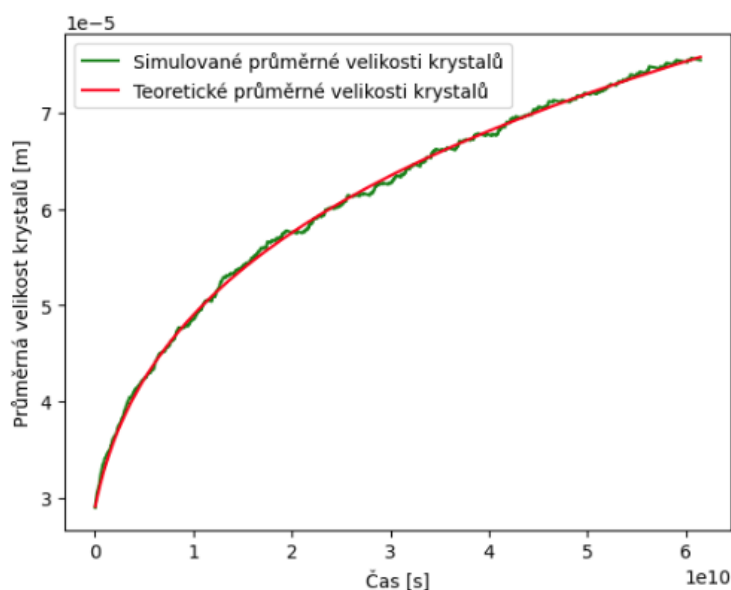
9.1 Vývoj průměrné velikosti krystalů

Jako první zde bude diskutován časový vývoj průměrné velikosti krystalů. Dle LSW teorie (Lifshitz, Slyozov 1961 a Wagner 1961) by se měl vývoj velikosti krystalů řídit „power-law“ zákonem (rovnice {15}). Dále by mělo pro Ostwaldovo zrání platit, že exponent n (z rovnice {15}) nabývá hodnot od 2 do 3 (Ardell 2010). Simulovaná data byla tedy proložena křivkou danou rovnicí {15} (Obr. 34). Proložená křivka má v případě všech počátečních textur exponent n mimo požadovaný rozsah od 2 do 3 (Tab. 3). Navíc z teorie vyplývá, že by hodnota exponentu $n = 3$ měla odpovídat Ostwaldovu zrání, jehož rychlost je řízena difuzí, a hodnota $n = 2$ Ostwaldovu zrání při kterém je rychlost řízena reakcí mezi sousedními krystaly (Ardell 2010). V simulaci jednosložkového systému není vliv difuze nijak zohledněn, a proto je očekávaná hodnota exponentu n blízká 2, čemuž proložená křivka neodpovídá.

Hodnota exponentu n vyšší než 3 by mohla být vysvětlena nevhodností některé ze zvolených metod použitých při výpočtu rychlostí pohybu hranic. Mohlo by jít o chybu při určování křivosti, použité při výpočtu rychlosti (viz rovnice {9}). Pro stanovení hodnoty poloměru křivosti byla totiž kvůli snížení výpočetní náročnosti zvolena výpočetně nejjednodušší metoda (viz kapitola 5.3.2.2). Je možné, že při použití přesnější, ale výpočetně náročnější metody (jako je například metoda „*Variation of the unite vector normal*“ (Wei et al. 2016)), by změny průměrné velikosti krystalů lépe odpovídaly očekávané hodnotě. Dále by mohl být na vině způsob, jakým se v simulaci pracuje s vypočtenou rychlostí pohybu hranice. Vypočtená rychlost totiž není použita přímo, ale je převedena na pravděpodobnost, s jakou dojde ke změně stavu příslušné hraniční buňky, pro kterou byla rychlost vypočtena. Tento přístup by mohl do simulace Ostwaldova zrání vnést určitou chybu, která by mohla přispívat k pozorovanému chování. Dalším vysvětlením by mohlo být, že LSW teorie pracuje s kruhovými krystaly, zatímco v simulaci se vyskytují obecné tvary krystalů, které mají mnohdy od kruhových tvarů daleko. Proto by se mohly pozorované změny průměrné velikosti lišit od teoretických daných rovnicí {15}. Také by mohlo být na vině, že LSW teorie platí pro trojrozměrný systém, zatímco vytvořená simulace pracuje ve dvojrozměrném prostoru.

Z výše řečeného vyplývá, že se časový vývoj průměrné velikosti krystalů „power-law“ zákonem daným rovnicí {15} řídí, ale hodnota exponentu n je vyšší než předpokládaná hodnota. Hodnota exponentu n určuje, jak moc je křivka zakřivena. Pokud by platilo, že $n = 1$, křivka by byla lineární a čím je n vyšší, tím je křivka zakřivenější. Časový vývoj průměrné velikosti krystalů je zakřiven způsobem, jaký je vidět na obrázku 34, z důvodu postupného snižování rychlosti, s jakou se textura horniny mění. Rychlost přetváření textury je nejvyšší na začátku simulace z důvodu velké křivosti hranic krystalů a přítomnosti velkého počtu malých krystalů v počáteční textuře. Tyto ostré hranice se v průběhu zrání zaoblí a dojde k rozpuštění malých krystalů, což způsobí pokles celkové křivosti hranic mezi krystaly. Tím dojde po rychlém počátečním zrání způsobeném velkou křivostí mezizrnové hranice a vymizením velmi malých krystalů k postupnému poklesu rychlosti, s jakou se mění průměrná velikost krystalů a s postupujícím zráním se tato rychlost nadále snižuje. Vysoká hodnota exponentu n však

znamená, že k popsané změně rychlosti dochází rychleji, než by podle teorie mělo. Vysoké n tedy ukazuje na chybu ve výpočtu rychlostí, jak je popsáno výše. Zároveň s chybnými rychlostmi souvisí také výpočet doby trvání jednotlivých kroků simulace, vůči kterým jsou vykreslována data. To omezuje naše možnosti porovnávání výsledků simulace s texturou reálných hornin. Při porovnávání simulovaných dat s reálnou texturou tak nemůžeme určit, jak dlouho daná textura podléhala Ostwaldovu zrání. V tomto ohledu jde tedy o chybu, avšak tato chyba není fatální, protože znemožňuje pracovat pouze s časem, ale stále je možné posoudit, zda simulace splňuje jiné předpovědi vycházející z teorie. Navíc schopnost určit dobu zrání reálné textury je omezena i jinými faktory. Tím hlavním je neznalost počáteční textury reálné horniny a také mobilit, které jsou známy spíše řádově a silně závisejí na teplotě (Evans et al. 2001).



Obr. 34 – Časový vývoj průměrné velikosti krystalů v průběhu simulace s proloženou křivkou dle rovnice {15}. Křivka má hodnotou exponentu $n = 3,9$.

Počáteční textura	Exponent n	Rychlostní konstanta k
A	3,8	$1e-26,28$
B	3,9	$1e-26,868$
C	3,5	$1e-25,392$
D	3,4	$1e-24,73$

Tab. 3 – Tabulka hodnot exponentu n a rychlostní konstanty proložených křivek pro jednotlivé počáteční textury.

9.2 Vývoj úhlů v trojných bodech

Teorie Ostwaldova zrání také předpovídá vyrovnání úhlů v trojných bodech, tedy aby všechny tři úhly v trojném bodě měli 120° . V simulaci byly úhly počítány postupem popsaným v kapitole 6.4 a časový vývoj průměrných maximálních a minimálních úhlů je zachycen na obrázku 25. Očekávaný vývoj vykreslených křivek je, že by se k sobě měly průměrné minimální

a maximální úhly přibližovat. K tomu dochází především na začátku simulace, ale později se vývoj viditelně zpomalí. V tomto případě nejde o chybu, ale tento rozdíl mezi minimem a maximem, který se ani po 2 000 krocích simulace významně nepřiblíží k nule, je dán jednak tím, že nulový rozdíl mezi průměrným minimem a maximem je ideální stav, ale také na tom nese podíl diskrétní povaha celulárního automatu (viz kapitola 8.1).

Ideální stav nastane tehdy, když se v systému vyskytují pouze trojné body s vyrovnanými úhly. Pokud se však v systému vyskytují také nevyrovnané trojné body, které se v simulaci samozřejmě vyskytují, dojde k navýšení průměrné hodnoty maximálních úhlů a ke snížení průměru minimálních úhlů. Rozdíl mezi minimem a maximem tak naroste. Křivky na obrázku 25 se tedy neseťkají. Dalším důležitým faktorem je, že pokud v některém trojném bodě dojde k vyrovnání úhlů, neznamená to, že bude toto vyrovnání zachováno. Jeden z krystalů tvořících daný vyrovnaný trojný bod může být později rozpuštěn ve prospěch jiného. Pokud se tak stane, daný trojný bod zanikne a je nahrazen jiným, který vyrovnané úhly mít nemusí.

Protože v průběhu zrání ze systému mizí také vyrovnané trojné body, nedává smysl sledovat vývoj jejich počtu. Namísto toho byly počty vyrovnaných trojných bodů vyděleny celkovým počtem trojných bodů, čímž bylo získáno zastoupení vyrovnaných trojných bodů v simulované textuře. Průběh tohoto zastoupení napříč simulací je znázorněn na obrázku 27. Na začátku simulace zde můžeme pozorovat prudký nárůst v zastoupení 120° trojných bodů, ale záhy dojde k výraznému zpomalení až mírnému snížení jejich zastoupení v textuře. Na obrázku je také patrný značný rozptyl hodnot, který by mohl být důsledkem náhlých narušení lokálních rovnováh zapříčiněných rozpouštěním malých krystalů, čímž mohou náhle zaniknout některé vyrovnané trojné body. U simulace s počáteční texturou D je možné vidět slabý rostoucí trend, ale obecně dochází k největšímu nárůstu zastoupení na začátku simulace a velmi brzy dochází k ustálení na přibližně 20 %. Oproti počáteční textuře tedy došlo při všech provedených simulacích k nárůstu zastoupení vyrovnaných trojných bodů. Dále již také víme, že během simulace se textura neustále vyvíjí a rovnovážný stav by nastal až ve chvíli, kdy by byla celá textura tvořena pouze jedním krystalem. Po celou dobu simulace jde tedy o dynamický systém, což má za následek, že vzniklé vyrovnané trojné body nemusejí být zachovány. Zastoupení 120° trojných bodů tak může v průběhu simulace kolísat, ale protože nenastane rovnovážný stav, pak ani toto zastoupení nebude 100 %. Z tohoto pohledu tak simulace odpovídá teorii, protože na počátku simulace k nárůstu zastoupení vyrovnaných trojných bodů dochází. K ověření, zda hodnota 20 %, okolo které zastoupení kolísá během ustáleného stavu, odpovídá realitě, by bylo třeba spočítat zastoupení 120° trojných bodů v textuře reálné horniny, která prokazatelně podstoupila Ostwaldovo zrání.

9.3 Vývoj CSD křivek

Nyní zde budou diskutovány CSD křivky, které zachycují stav textury jako celku a je na nich tedy možné sledovat její celkový vývoj, tedy vývoj zrnitosti simulované textury. Na CSD křivkách počátečních textur (přílohy 1–4C) je vidět, že nejsou ideálně lineární a textura B má jistý nadbytek velmi malých krystalů. Různé počáteční textury byly vytvořeny především proto, aby ověřili tvrzení, že Ostwaldovo zrání přepisuje starší texturní záznam (Boorman et al. 2004). V případě všech čtyř simulovaných textur je pozorován stejný trend, totiž výrazný úbytek malých krystalů a nárůst počtu velkých krystalů v průběhu simulace. Všechny CSD křivky se tak mění z pseudolineárních a konvexních na konkávní (v logaritmickém měřítku), textura se

tak stává v průběhu simulace stále více stejnozrnou (Přílohy 1–4C a 9–12). Toto chování je v souladu s předpovědí teorie (Marsh 1988, Ni et al. 2014). Jak je možné vidět na obrázku 22, z výsledné CSD křivky nelze vyčíst tvar CSD křivky počáteční textury, ani její sklon. Tento výsledek je tedy ve shodě s Boormanem et al. (2004). Navíc, protože mají všechny textury podobný trend, dochází také ke stírání rozdílů, které mezi nimi existovaly na začátku simulace zrání. Zajímavé je také porovnání vývoje CSD křivek ze simulací s obrázkem 5, na kterém jsou vykresleny CSD křivky dle LSW teorie (Obr. 5A) a také CSD křivky podle teorie „*Communicating Neighbours*“ (Obr. 5B). Z tohoto porovnání vyplývá, že vývoj CSD křivek v simulaci se podobá spíše CSD křivkám vykresleným v souladu s teorií „*Communicating Neighbours*“ (DeHoff 1991).

9.4 Vývoj shlukovacího indexu

Dalším parametrem popisujícím texturu jako celek, tentokrát z pohledu prostorového uspořádání krystalů, je shlukovací index R . Příklad časového vývoje shlukovacího indexu je zachycen na obrázku 23, jde o data ze simulace s počáteční texturou B. Vývoj shlukovacího indexu pro všechny čtyři počáteční textury je možné nalézt v přílohách 1–4D. V případě tohoto parametru je mezi jednotlivými počátečními texturami rozdíl. U všech simulací dochází zpočátku k rychlému růstu shlukovacího indexu, tj. krystaly jsou čím dál tím více prostorově uspořádané. Krátce po začátku simulace se však vývoje jednotlivých textur začnou lišit. U počáteční textury B dojde ke zpomalení růstu hodnoty R , ale růst i nadále pokračuje. Při simulaci zrání textury A došlo po počátečním rychlém růstu k postupnému klesání hodnoty R (viz Příloha 1D). U textury D došlo nejprve ke zpomalení růstu, podobně jako u textury B, ale později se vývoj hodnoty R ustálil okolo hodnoty 1,285. Vývoj parametru R u textury C se ustálil na cca 1,36 již krátce po počátečním růstu. Kromě textury A došlo u všech textur k nárůstu uspořádanosti. V případě simulace s počáteční texturou A vedlo zrání naopak k prostorovému uspořádání krystalů, které se více přibližuje náhodnému rozmístění.

Maximální hodnota R , která odpovídá ideálně uspořádané textuře, je rovna 2,148 (Jerram et al. 1996). Jerram et al. (1996) také upozorňuje na možný vznik chyby, způsobené malou populací krystalů. Zároveň však uvádí, že populace nad 300 zrn vykazují jen zanedbatelnou odchylku hodnoty shlukovacího indexu. Nejmenší počáteční populaci krystalů má simulace A s 655 krystaly. Počet krystalů ve všech simulacích však postupně klesá, a to až k hodnotě 200 krystalů, opět u simulace A. Jediná simulace, která si zachová počet krystalů nad 300 až do konce simulace, je simulace C. U simulací by tak vzniklá chyba dle Jerrama et al. (1996) neměla být větší než asi $\pm 0,04$, přičemž na začátku simulace se může chyba pohybovat okolo $\pm 0,02$ (nad 1 000 krystalů – Jerram et al. 1996). Trochu jinak je tomu pak u reálné textury, kde se počty krystalů v jednotlivých výřezích pohybují v rozmezí od 132 do 167 krystalů. Dle Jerrama et al. (1996) to odpovídá chybě v určení hodnoty R pro jednotlivé výřezy zhruba mezi $\pm 0,04$ a $\pm 0,06$.

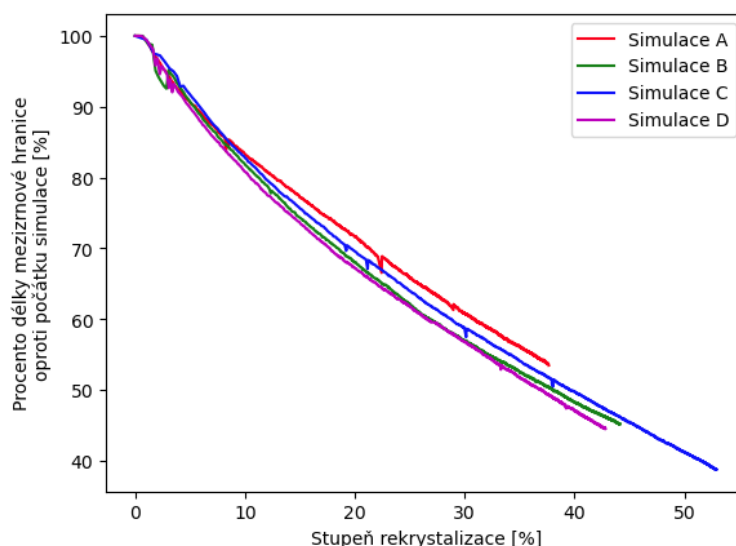
9.5 Vývoj celkové délky mezizrnové hranice

K Ostwaldovu zrání dochází z důvodu snížení povrchové energie systému, proto by u textury, která Ostwaldovo zrání prodělala, mělo dojít ke snížení celkové délky mezizrnové hranice. Časový vývoj tohoto parametru je zachycen na obrázku 30. Časový průběh celkové délky

hranice mezi krystaly je u všech počátečních textur podobný. Dochází k postupnému zmenšování délky hranice, a to v průběhu celé simulace. Opět je pokles nejrychlejší zpočátku a postupně se zkracování hranice zpomaluje. Takovýto vývoj je tedy v souladu s předpokladem, že při Ostwaldově zrání dochází ke zmenšení povrchu krystalů za účelem snížení povrchové energie (Voorhees 1985).

9.6 Vývoj stupně rekrystalizace

Jako poslední získaný parametr je stupeň rekrystalizace, který je představován procentem buněk, jejichž aktuální příslušnost ke krystalu se neshoduje s příslušností v počáteční textuře, tj. buňka v daném kroku náleží jinému krystalu než na začátku simulace. Příklad vývoje stupně rekrystalizace, pocházející ze simulace s počáteční texturou B, je zobrazen na obrázku 29. Vývoj tohoto parametru je opět velmi podobný u všech počátečních textur a potvrzuje trend, který je možné vidět u všech předchozích parametrů, tedy rychlé zrání na počátku simulace a postupné zpomalování. Toto pozorování je tak také v souladu s teorií, protože rychlé počáteční zrání a následné zpomalování úzce souvisí s vývojem průměrných velikostí krystalů, které se má dle teorie řídit rovnicí {15} (Ardell 2010). Protože tento parametr určitým způsobem popisuje, v jakém stádiu vyžrálosti se textura nachází, byl použit jako náhrada za čas a byl vůči němu zkoumán vývoj jednotlivých parametrů (shlukovací index, úhly v trojných bodech atd.). Z vývoje celkové délky mezizrnové hranice je vidět, že k největší změně dochází na začátku simulace (Obr. 30), ale vůči stupni rekrystalizace je vidět, že ke změně délky hranice dochází s narůstající rekrystalizací poměrně rovnoměrně (Obr. 31). Tento přístup odstraňuje problémy spojené s časem. Na obrázku 35 jsou znázorněny všechny čtyři vývoje celkové délky hranice normalizované délkou hranice příslušné počáteční textury. Z tohoto obrázku je vidět, že se vývoje pro různé počáteční textury příliš neliší (nejvýše o cca 4 % počáteční délky hranice).



Obr. 35 – Vývoje délek mezizrnových hranic normalizované délkou hranice počáteční textury vykreslené vůči stupni rekrystalizace pro všechny čtyři provedené simulace.

9.7 Data z textury reálné horniny

Nyní zde budou diskutovány výsledky zpracování reálné textury. Data z reálné textury byla pořízena a zpracována stejnými postupy jako v případě dat ze simulací. Je tak možné oba výsledky navzájem porovnat. Nevýhodou reálných vzorků však je, že neznáme jejich počáteční texturu a nemohli jsme sledovat ani jejich vývoj, známe tak pouze finální texturu. Dalším problémem, který se u reálných textur dunitu objevil je, že neobsahuje pouze olivín, ale jsou v něm přítomny také jiné minerály (plagioklas, klinopyroxen, rudní minerály). Jak již bylo řečeno v kapitole 8.2, byl zvolen vzorek, který je nejméně kontaminovaný těmito minerály (vzorek DV-3). Minimální počet minerálů jiných, než olivín byl požadován z důvodu potřeby porovnávat získaná data se simulací zrání jednosložkového systému. Vzorek DV-3 však stále obsahuje značné množství rudních minerálů (cca 4 až 7 mod. %), a i přes snahu pořídit snímky z oblastí s co nejmenší kontaminací nechtěnými minerály, nebylo možné v požadované velikosti oblastí přítomnost těchto minerálů zcela eliminovat. Při digitalizaci snímků tak byly tyto minerály považovány v rámci textury rovněž za olivín. Tento přístup vnesl do zpracování dat určitou chybu.

Při následném vykreslení CSD křivky vytvořené z dat ze všech čtyř oblastí (Obr. 33) bylo zjištěno, že textura nevykazuje známky výrazného úbytku malých krystalů, jak to předpovídá teorie Ostwaldova zrání (Marsh 1988). Namísto toho je CSD křivka v oblasti malých krystalů téměř log-lineární, což je běžné spíše u původních magmatických textur (například Cashman, Marsh 1988). Tento trend se objevuje i u CSD křivek jednotlivých oblastí. Tento výsledek znamená, že textura horniny nemůže být považována za výsledek pouze procesu Ostwaldova zrání. Výsledná CSD křivka, ze které není patrné ochuzení textury o malé krystaly, je patrně ovlivněna chybou způsobenou přítomností rudních minerálů. Pokud hornina skutečně Ostwaldovo zrání prodělala, mohla být původně vyzrálá textura později přetvořena jinými procesy, které vedly k přepsání původního texturního záznamu. Takovým procesem by mohla být například dynamická rekrytalizace (například Urai et al. 1986 nebo Huang, Logé 2016). Během tohoto procesu se větší krystaly „rozpadají“ na menší, z důvodu působícího napětí. To by tak mohlo vysvětlit, že textura není ochuzena o malé krystaly. Pro toto tvrzení hovoří také slabé protažení krystalů a jejich přednostní orientace, kterou je možné vidět na obrázku 32, především pak na obrázku 32A. Z tohoto důvodu bohužel nejsou získaná data z reálné textury vzorku DV-3 relevantní pro další porovnávání se simulovanými daty. Pro porovnání by bylo třeba digitalizovat vzorek, který by lépe odpovídal jednosložkovému systému a zároveň na něm bylo patrné ochuzení o malé krystaly. Takovýto vzorek však bohužel nebyl v době zpracování dat k dispozici.

10 Závěr

Cílem této práce bylo vytvoření simulace procesu Ostwaldova zrání a následné zhodnocení její správnosti pomocí porovnání výsledků této simulace s teorií a s texturou vzorků reálných hornin, které Ostwaldovo zrání prodělaly. Simulace Ostwaldova zrání byla skutečně vytvořena a v rámci této práce byla vytvořena také zjednodušená simulace krystalizace horniny z magmatu, za účelem získání realistické počáteční textury, která byla následně vystavena zrání. Poté byl vytvořen program na zpracování dat exportovaných v průběhu simulace, v rámci kterého byla mimo jiné vyvinuta metoda na výpočet úhlů v trojných bodech. Dále byl vytvořen program na digitalizaci reálné textury, který zároveň z dané textury extrahuje data, která mohou být použita pro porovnávání s výsledky simulace. V průběhu simulace je možné exportovat bitmapové obrázky, zachycující aktuální stav simulované textury. Samotná simulace i všechny zmíněné pomocné programy byly vytvořeny v jazyce C++. Výsledná vizualizace dat byla následně provedena v jazyce Python.

Při porovnávání s teorií byla u simulace zjištěna odchylka od teorie týkající se pravděpodobně vypočtených rychlostí pohybu hranice, která omezila možnosti porovnávání dat s texturou reálných hornin. Nicméně ostatní diskutované parametry se s teorií v zásadě shodují, ať jde o vývoj CSD křivky simulované textury, vývoj shlukovacího indexu, vypočtené úhly v trojných bodech, či o vývoj délky mezizrnové hranice. CSD křivka simulované textury se postupně mění z log-lineární až mírně konvexní v oblasti malých krystalů na křivku konkávní. To znamená, že v textuře ubývá malých krystalů a zvětšují se ty větší, tak jak to vyplývá z teorie (Marsh 1988, Higgins 2011), a textura se tak stává více stejnozrná (Marsh 1998). Hodnota shlukovacího indexu dle očekávání v průběhu simulace narůstá, s výjimkou jedné simulace. Rovněž narůstá také zastoupení vyrovnaných trojných bodů v simulované textuře, přičemž k největšímu nárůstu dochází na počátku simulace a později dochází k ustálení na hodnotě okolo 20 %. Také celková délka mezizrnové hranice klesá. Zkracování délky hranice je opět nejrychlejší na začátku simulace a postupně se zpomaluje. Vůči stupni rekrystalizace je však zkracování téměř lineární s narůstajícím stupněm rekrystalizace (Příloha 5–8B). Simulace tedy funguje v zásadě správně, teorii neodpovídají pouze doby trvání jednotlivých kroků simulace. Po odstranění této chyby by tak mohlo jít o funkční simulaci, která by mohla být použita pro další výzkum.

Cílem, který se v této práci nepodařilo zcela naplnit, je porovnávání vzorků reálných hornin s výsledky simulace. Byl vytvořen celý postup získávání a zpracování dat reálných textur. Při jeho použití se však objevil problém se samotnou reálnou texturou, který znemožnil relevantní porovnávání dat. Problémem je jednak to, že textura obsahuje mimo olivín ještě další minerály, jejichž přítomnost ovlivňuje data, ale také to, že reálná textura zřejmě prodělala dynamickou rekrystalizaci. To způsobilo přepsání texturního záznamu a pokud textura v minulosti Ostwaldovo zrání prodělala, případně k němu docházelo společně s dynamickou rekrystalizací, která ale probíhala s větší rychlostí, není to na ní již zcela patrné. Tento cíl byl tak vyřešen po teoretické i praktické stránce, ale nebylo možné ho zcela dokončit z důvodu absence vhodné reálné textury.

11 Zdroje

- Aktekin N. Simulation of three-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1995; 219 (3–4), str. 436–446.
- Ardell A. J. Quantitative predictions of the trans-interface diffusion-controlled theory of particle coarsening. *Acta Materialia*. 2010; 58, str. 4325–4331.
- Boor B. Curvature-driven grain growth. Delft University of Technology. 2016; str. 1–47.
- Boorman S., Boudreau A., Kruger F. J. The lower zone – critical zone transition the Bushveld complex: a quantitative textural study. *Journal of petrology*. 2004; 45 (6), str. 1209–1235.
- Bues C., Dörr W., Fiala J., Vejnar Z., Zulauf G. Emplacement depths and radiometric ages of Paleozoic plutons of the Neukirchen–Kdyně massif: differential uplift and exhumation of Cadomian basement due to Carboniferous orogenic collapse (Bohemian Massif). *Tectonophysics*. 2002; 352, str. 225–243.
- Cabane H., Laporte D., Provost A. An experimental study of Ostwald ripening of olivine and plagioclase in silicate melts: implications for the growth and size of crystals in magmas. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 2005; 150, str. 37–53.
- Carlson W. D. The significance of intergranular diffusion to the mechanisms and kinetics of porphyroblast crystallization. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 1989; 103, str. 1–24.
- Cashman K. V., Marsh B. D. Crystal size distribution (CSD) in rocks and the kinetics and dynamics of crystallization II: Makaopuhi lava lake. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 1988; 99, str. 292–305.
- Cashman K. V. Textural constraints on the kinetics of crystallization of igneous rocks. *Reviews in mineralogy and geochemistry*. 1990; 24 (1), str. 259–314.
- Clark P. J., Evans F. C. Distance to nearest neighbor as a measure of spatial relationships in populations. *Ecology*. 1954; 35 (4), str. 445–453.
- Creutz M. Deterministic Ising dynamics. *Annals of physics*. 1986; 167, str. 62–72.
- D’Humières D., Lallemand P. Lattice gas automata for fluid mechanics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1986; 140 (1–2), str. 326–335.
- DeHoff R. T. A geometrically general theory of diffusion controlled coarsening. *Acta Metallurgica et Materialia*. 1991; 39 (10), str. 2349–2360.
- Donnelly K. Simulations to determine the variance and edge-effect of total nearest neighbor distance. In *Simulations Methods in Archeology* (ed. I. Hodder). Cambridge University Press, Cambridge. 1978; str. 91–95.
- Dörr W., Zulauf G., Fiala J., Franke W., Vejnar Z. Neoproterozoic to Early Cambrian history of an active plate margin in the Tepla’–Barrandian unit—a correlation of U–Pb isotopic-dilution- TIMS ages (Bohemia, Czech Republic). *Tectonophysics*. 2002; 352, str. 65–85.
- Duyster J., Stöckhert B. Grain boundary energies in olivine derived from natural microstructures. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 2001; 140, str. 567–576.
- Evans B., Renner J., Hirth G. A few remarks on the kinetics of static grain growth in rocks. *International journal of earth science*. 2001; 90, str. 88–103.

- Fokin V. M., Zanotto E. D., Yuritsyn N. S., Schmelzer J. W. P. Homogeneous crystal nucleation in silicate glasses: A 40 years perspective. *Journal of non-crystalline solids*. 2006; 352, str. 2681–2714.
- Hammer J. E. Experimental studies of the kinetics and energetics of magma crystallization. *Reviews in mineralogy and geochemistry*. 2008; 69, str. 9–59.
- Han F. Cellular Automata Modeling of Ostwald Ripening and Rayleigh Instability. *Materials*. 2018; 11 (10), str. 1–17.
- Heinrich Ch. A. Fluid-Fluid Interactions in Magmatic-Hydrothermal Ore Formation. *Reviews in mineralogy and geochemistry*. 2007; 65, str. 363–387.
- Hersum T. G., Marsh B. D. Igneous microstructures from kinetic models of crystallization. *Journal of volcanology and geothermal research*. 2006; 154, str. 34–47.
- Higgins M. D. The origin of laminated and massive anorthosite, Sept Iles layered intrusion, Québec, Canada. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 1991; 106, str. 340–354.
- Higgins M. D. A crystal size-distribution study of the Kiglapait layered mafic intrusion, Labrador, Canada: evidence fo textural coarsening. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 2002; 144, str. 314–330.
- Higgins M. D. Textural coarsening in igneous rocks. *International geology review*. 2011; 53 (3–4), str. 354–376.
- Huang K., Logé R. E. A review of dynamic recrystallization phenomena in metallic materials. *Materials & Design*. 2016; 111, str. 548–574.
- Humphreys F. J. A unified theory of recovery, recrystallization and grain growth, based on the stability and growth of cellular microstructures—I. The basic model. *Acta Materialia*. 1997; 45 (10), str. 4231–4240.
- Janssens K. G. F. An introductory review of cellular automata modeling of moving grain boundaries in polycrystalline materials. *Mathematics and computers in simulation*. 2010; 80, str. 1361–1381.
- Jerram D. A., Cheadle M. J., Hunter R. H., Elliott M. T. The spatial distribution of grains and crystals in rocks. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 1996; 125, str. 60–74.
- Ji Ch., Yao J., Zhu M. Effect of Ostwald ripening of carbide particles on mechanical properties of SCM435 steel during subcritical annealing. *Journal of iron and steel Research international*. 2018; str. 25, 724–731.
- Kalogeridis A., Pesicka J., Nembach E. On the increase of the precipitated volume fraction during Ostwald ripening, exemplified for aluminium–lithium alloys. *Materials science and engineering: A*. 1999; 268 (1–2), str. 197–201.
- Kashchiev D. Solution of the non-steady state problém in nucleation kinetics. *Surface science*. 1969; 14 (1), str. 209–220.
- Kretz R. Grain-size distribution for certain metamorphic minerals in relation to nucleation and growth. *The journal of geology*. 1966; 74 (2), str. 147–173.
- Lautze N. C., Sisson T. W., Mangan M. T., Grove T. L. Segregating gas from melt: an experimental study of the Ostwald ripening of vapor bubbles in magmas. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 2011; 161, str. 331–347.

Lescoat M.-L., Ribis J., Chen Y., Marquis E. A., Bordas E., Trocellier P., Serruys Y., Gentils A., Kaitasov O., de Carlan Y., Legris A. *Acta Materialia*. 2014; 78, str. 328–340.

Lifshitz I. M., Slyozov V. V. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions. *Journal of physics and chemistry of solids*. 1961; 19 (1–2), str. 35–50.

Marsaglia G. Xorshift RNGs. *Journal of statistical software*. 2003; 8 (14), str. 1–6.

Marsh B. D. Crystal size distribution (CSD) in rocks and the kinetics and dynamics of crystallization I. Theory. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 1988; 99, str. 277–291.

Marsh B. D. On the interpretation of crystal size distributions in magmatic systems. *Journal of petrology*. 1998; 39 (4), str. 553–599.

Miyazaky K. Ostwald ripening of garnet in high *PIT* metamorphic rocks. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 1991; 108, str. 118–128.

Nemchin A. A., Giannini L. M., Bodorkos S., Oliver N. H. S. Ostwald ripening as a possible mechanism for zircon overgrowth formation during anatexis: Theoretical constraints, a numerical model, and its application to pelitic migmatites of the Tickalara Metamorphics, northwestern Australia. *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 2001; 65 (16), str. 2771–2787.

Ni H., Keppler H., Walte N., Schiavi F., Chen Y., Masotta M., Li Z. In situ observation of crystal growth in a basalt melt and the development of crystal size distribution in igneous rocks. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 2014; 167 (1003), str. 1–13.

Park Y., Hanson B. Experimental investigation of Ostwald-ripening rates of forsterite in the haplobasaltic system. *Journal of volcanology and geothermal research*. 1999; 90, str. 103–113.

Philpotts A. R., Ague J. J. *Principles of igneous and metamorphic petrology*. 2nd ed. Cambridge (UK). University Press. 2009.

Pidgeon R. T. Recrystallisation of oscillatory zoned zircon: some geochronological and petrological implications. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 1992; 110, str. 463–472.

Porter D. A., Easterling K. E., Sherif M. Y. *Phase transformations in metals and alloys*. 3rd ed. Boca Raton, Florida (USA). CRC Press. 2009.

Resmini R. G., Marsh B. D. Steady-state volcanism, paleoeffusion rates, and magma system volume inferred from plagioclase crystal size distributions in mafic lavas: Dome Mountain, Nevada. *Journal of volcanology and geothermal research*. 1995; 68, str. 273–296.

Sarkar P. A brief history of cellular automata. *ACM computing surveys*. 2000; 32 (1), str. 80–107.

Syahputra R., Žák J., Tomek F., Kachlík V. Hot plutonism in a cold accretionary wedge: What terminated the Cadomian orogeny along the northern periphery of Gondwana?. *Precambrian research*. 2023; 390, str. 1–18.

Špillar V., Dolejš D. Kinetic model of nucleation and growth in silicate melts: Implications for igneous textures and their quantitative description. *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 2014; 131, str. 164–183.

Urai J. L., Means W. D., Lister G. S. Dynamic recrystallization of minerals. *Mineral and rock deformation: Laboratory studies*. 1986; 36, str. 161–199.

Vejnar Z. The Kdyně massif, South-West Bohemia – a tectonically modified intrusion. *Sborník geologických věd.* 1984; 41, str. 9–67.

von Neumann J. *Papers of John von Neumann on computing and computer theory in reprint series on the history of computing.* MIT Press. 1963; 12.

Voorhees P. W. The theory of Ostwald ripening. *Journal of statistical physics.* 1985; 38, str. 231–252.

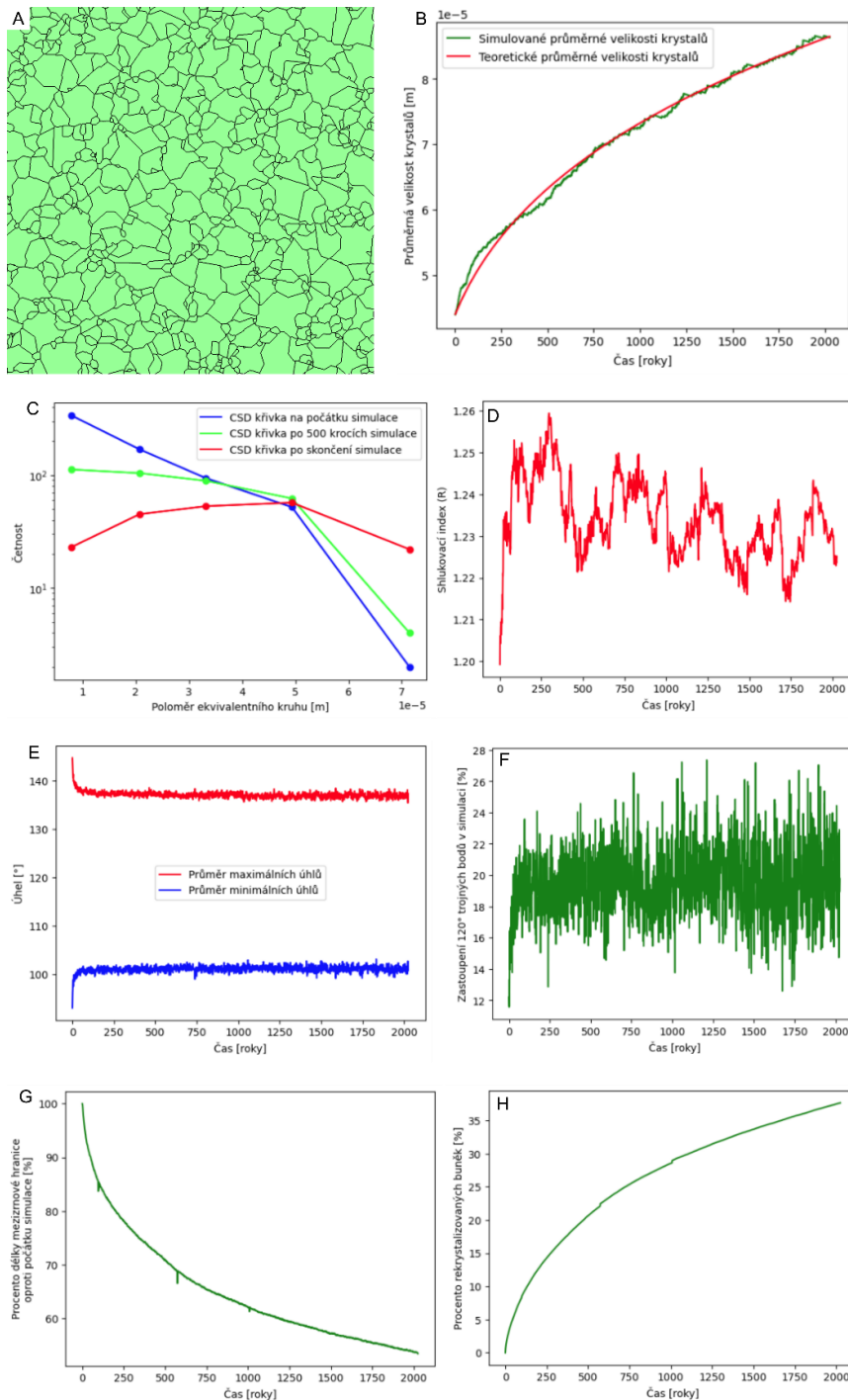
Wagner C. Theorie der Alterung von Niederschlägen durch Umlösen (Ostwald-Reifung). *Zeitschrift für Elektrochemie.* 1961; 65 (7–8), str. 581–591.

Wei L., Lin X., Wang M., Huang W. Low artificial anisotropy cellular automaton model and its applications to the cell-to-dendrite transition in directional solidification. *Materials discovery.* 2016; 3, str. 17–28.

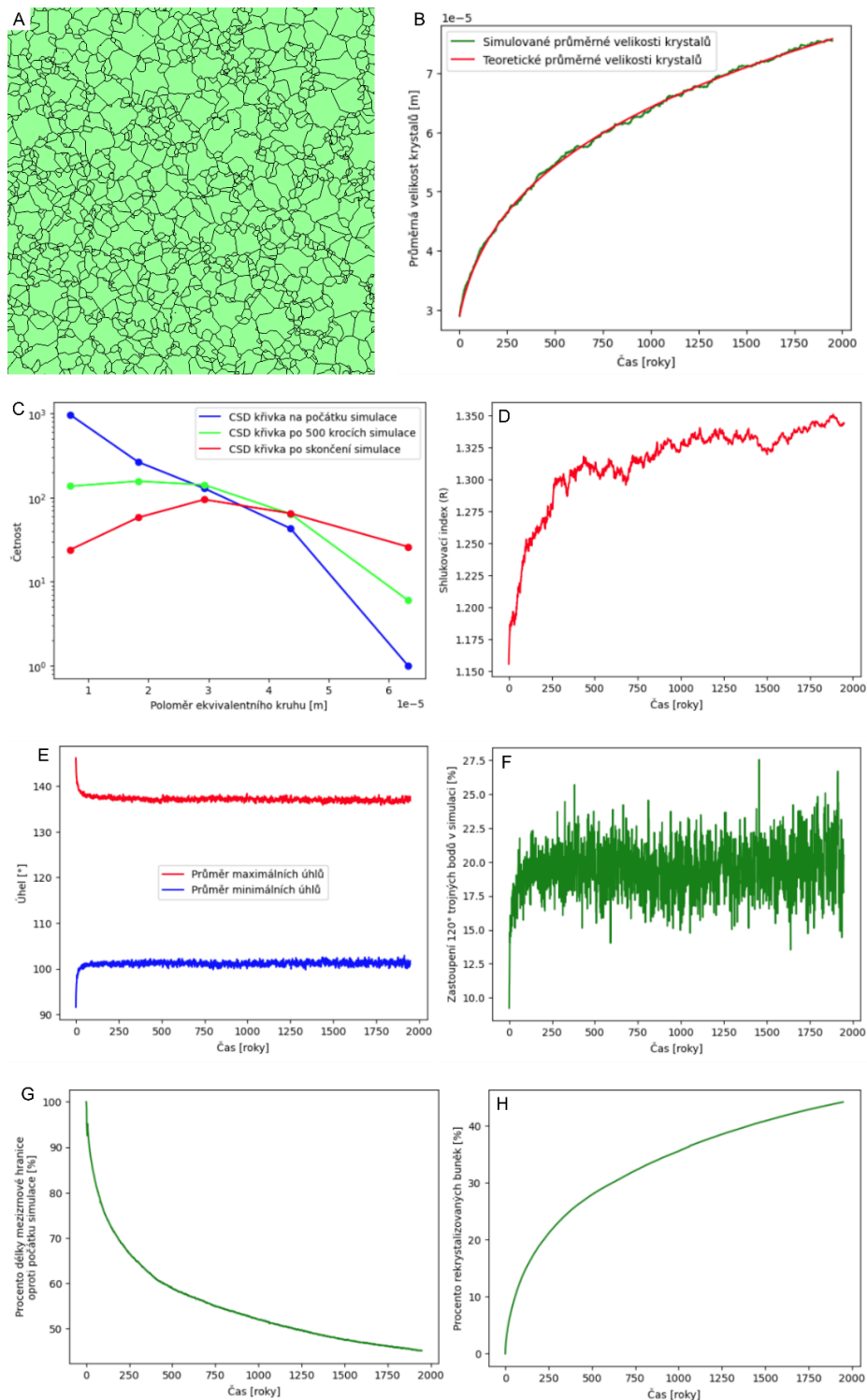
Yang H., Wu Ch., Li H., Fan X. Review on cellular automata simulations of microstructure evolution during metal forming process: Grain coarsening, recrystallization and phase transformation. *Science China technological sciences.* 2011; 54 (8), str. 2107–2118.

Yuanbao W., Yongfei Z. Genesis of zircon and its constraints on interpretation of U-Pb age. *Chinese Science Bulletin.* 2004; 49 (15), str. 1554–1569.

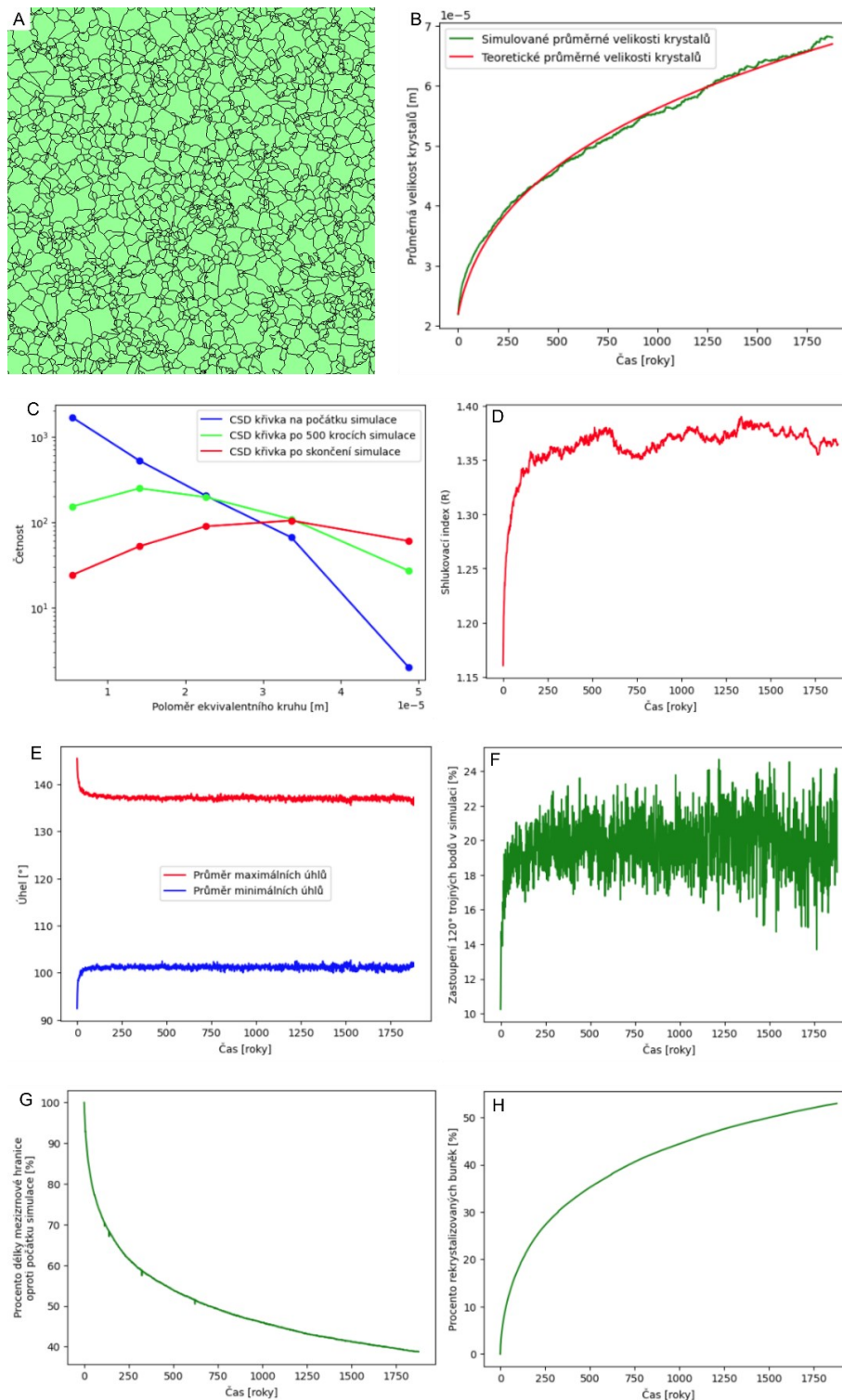
12 Přílohy



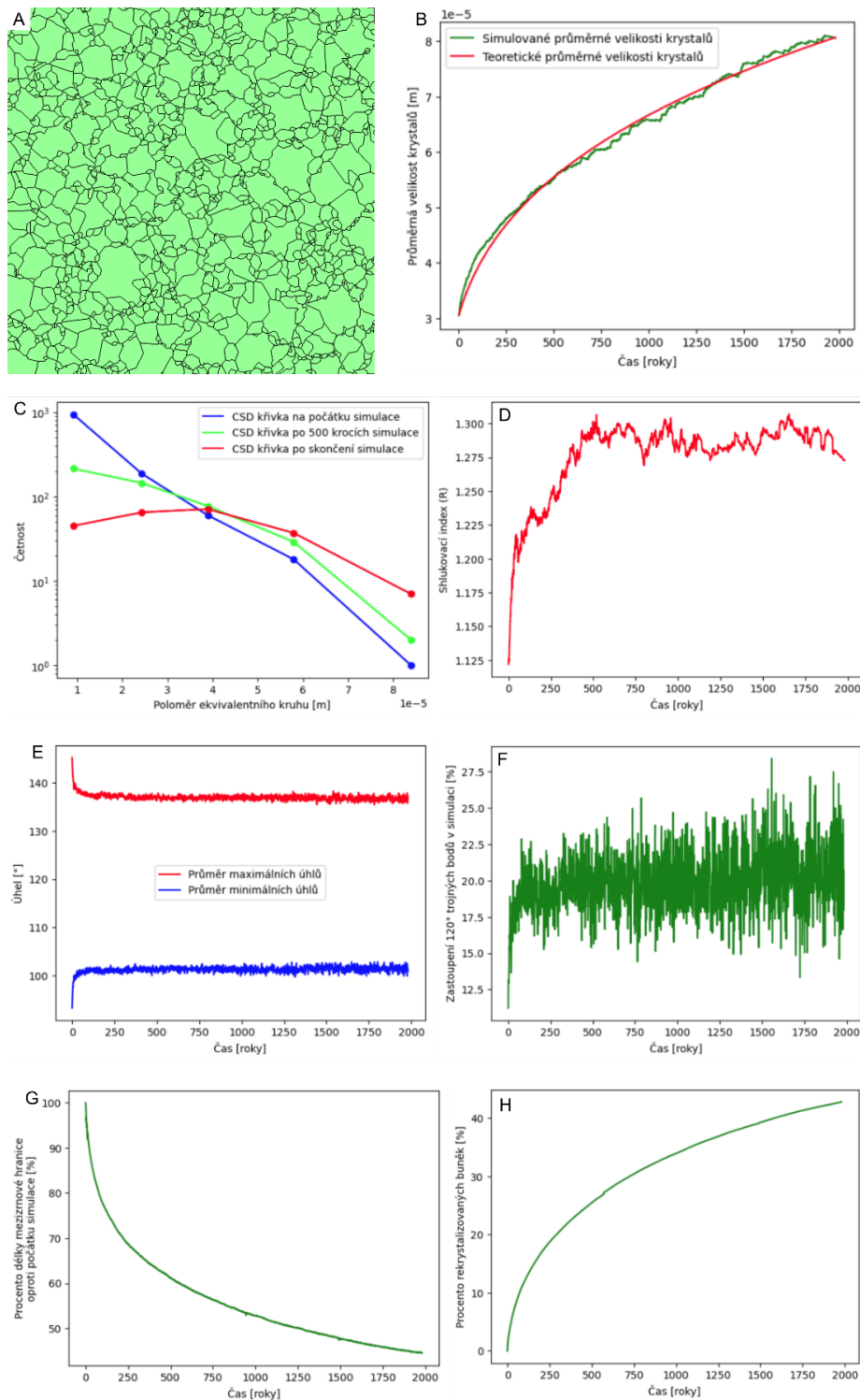
Příloha 1 – Data ze simulace zrání s počáteční texturou A. Na obrázku A (délka hrany je 1 mm) je počáteční textura. Obrázek B znázorňuje vývoj průměrné velikosti krystalů a křivku proloženou těmito daty, dle rovnice {15}. Na obrázku C jsou vykresleny tři CSD křivky zachycující vývoj textury v průběhu simulace. Obrázek D zobrazuje časový vývoj shlukovacího indexu R . Na obrázku E je vidět průběh průměrných hodnot minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech a obrázek F zachycuje vývoj zastoupení 120° trojných bodů v simulaci. Obrázek G znázorňuje vývoj celkové délky mezizrnové hranice a na obrázku H je zobrazen průběh stupně rekrystalizace systému.



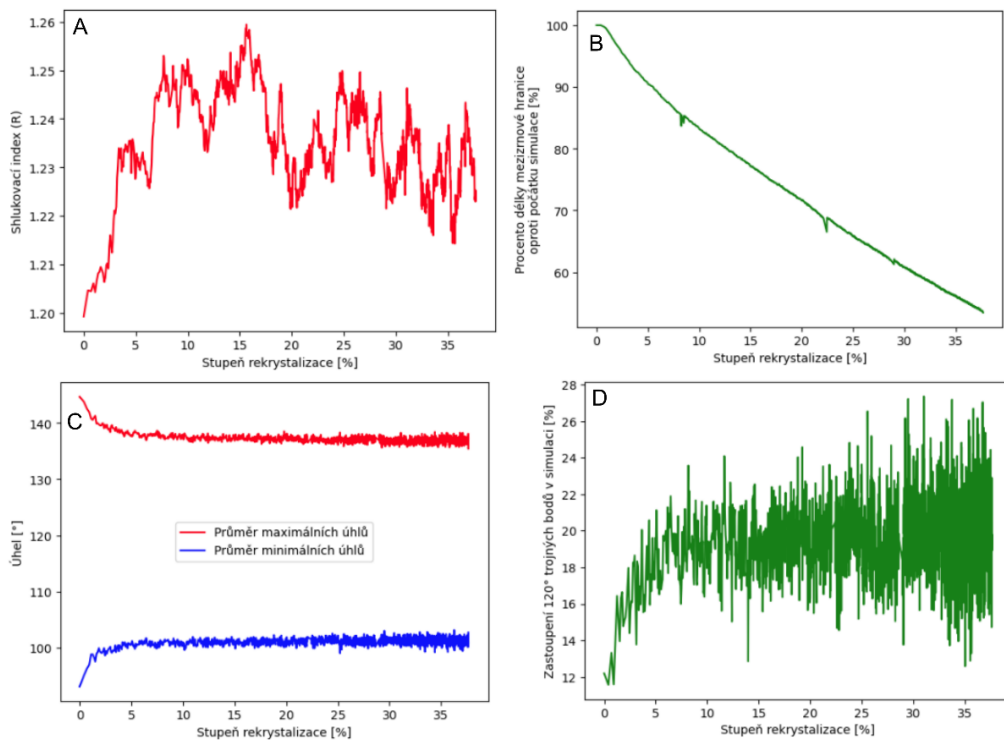
Příloha 2 – Data ze simulace zrání s počáteční texturou B. Na obrázku A (délka hrany je 1 mm) je počáteční textura. Obrázek B znázorňuje vývoj průměrné velikosti krystalů a křivku proloženou těmito daty, dle rovnice {15}. Na obrázku C jsou vykresleny tři CSD křivky zachycující vývoj textury v průběhu simulace. Obrázek D zobrazuje časový vývoj shlukovacího indexu R . Na obrázku E je vidět průběh průměrných hodnot minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech a obrázek F zachycuje vývoj zastoupení 120° trojných bodů v simulaci. Obrázek G znázorňuje vývoj celkové délky mezizrnové hranice a na obrázku H je zobrazen průběh stupně rekristalizace systému.



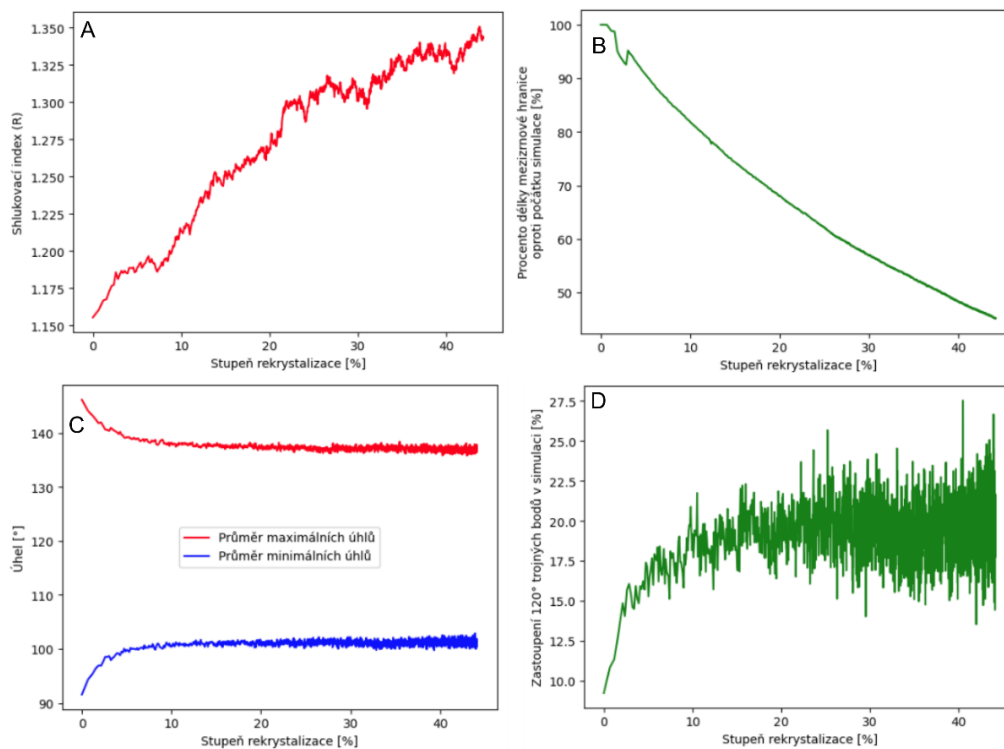
Příloha 3 – Data ze simulace zrání s počáteční texturou C. Na obrázku A (délka hrany je 1 mm) je počáteční textura. Obrázek B znázorňuje vývoj průměrné velikosti krystalů a křivku proloženou těmito daty, dle rovnice {15}. Na obrázku C jsou vykresleny tři CSD křivky zachycující vývoj textury v průběhu simulace. Obrázek D zobrazuje časový vývoj shlukovacího indexu R . Na obrázku E je vidět průběh průměrných hodnot minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech a obrázek F zachycuje vývoj zastoupení 120° trojných bodů v simulaci. Obrázek G znázorňuje vývoj celkové délky mezizrnové hranice a na obrázku H je zobrazen průběh stupně rekristalizace systému.



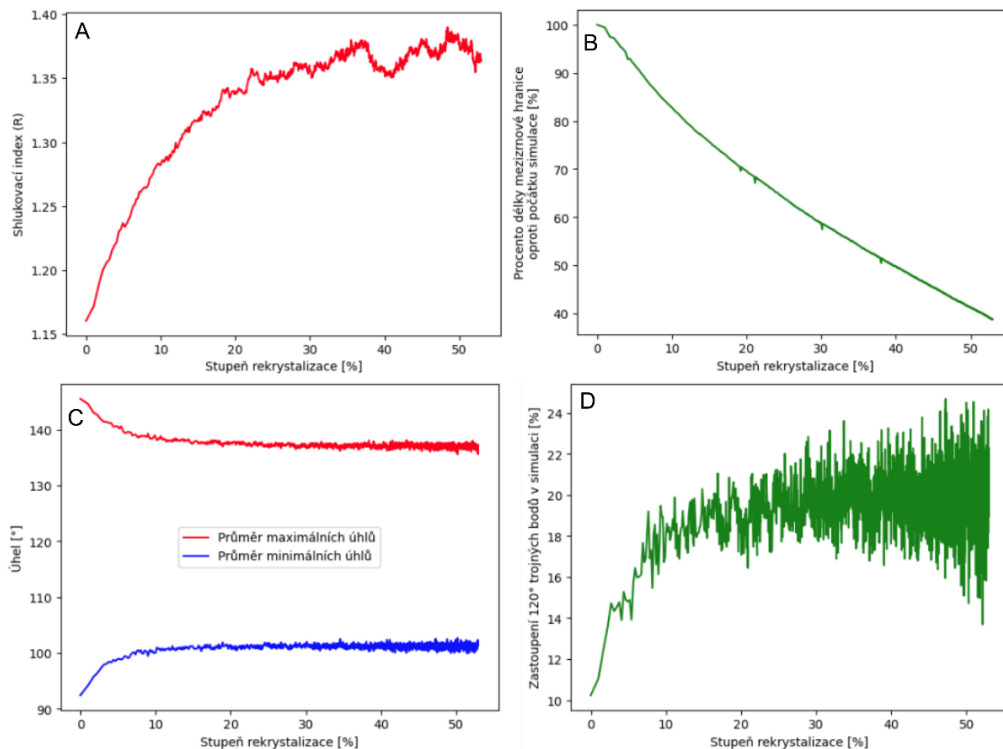
Příloha 4 – Data ze simulace zrání s počáteční texturou D. Na obrázku A (délka hrany je 1 mm) je počáteční textura. Obrázek B znázorňuje vývoj průměrné velikosti krystalů a křivku proloženou těmito daty, dle rovnice {15}. Na obrázku C jsou vykresleny tři CSD křivky zachycující vývoj textury v průběhu simulace. Obrázek D zobrazuje časový vývoj shlukovacího indexu R . Na obrázku E je vidět průběh průměrných hodnot minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech a obrázek F zachycuje vývoj zastoupení 120° trojných bodů v simulaci. Obrázek G znázorňuje vývoj celkové délky mezizrnové hranice a na obrázku H je zobrazen průběh stupně rekristalizace systému.



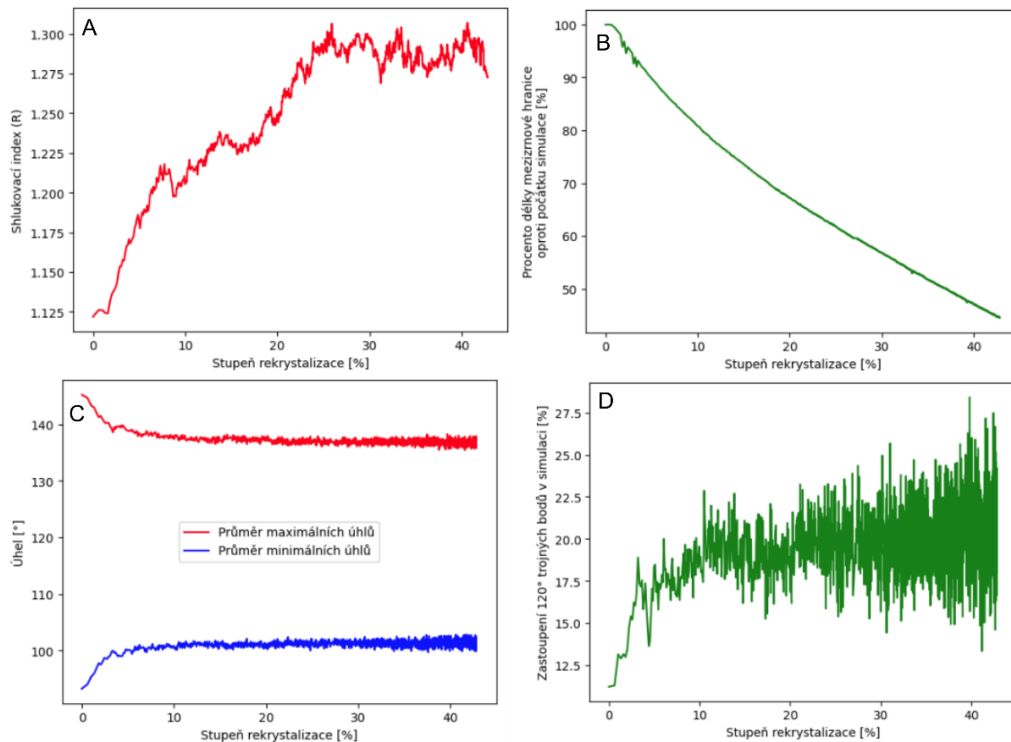
Příloha 5 – Vývoj shlukovacího indexu (A), celkové délky mezizrnové hranice normalizované délkou hranice počáteční textury (B), průměrných hodnot minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech (C) a zastoupení 120° trojných bodů v simulaci A v závislosti na stupni rekystalizace.



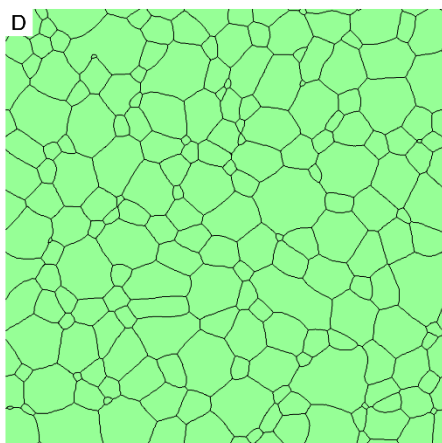
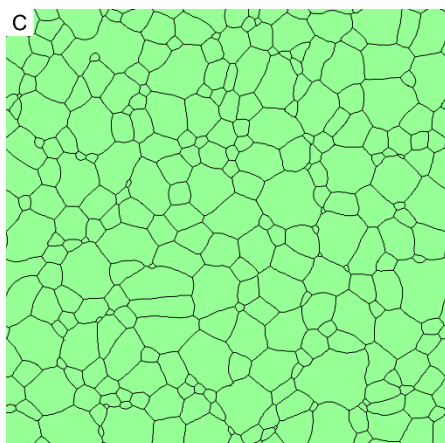
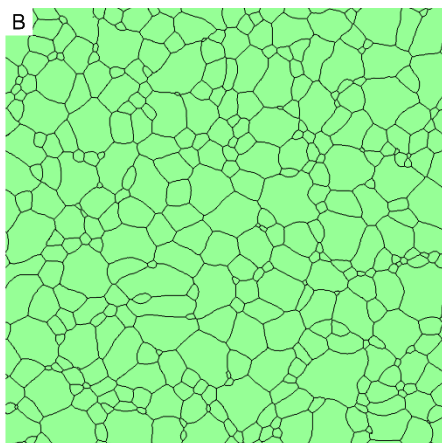
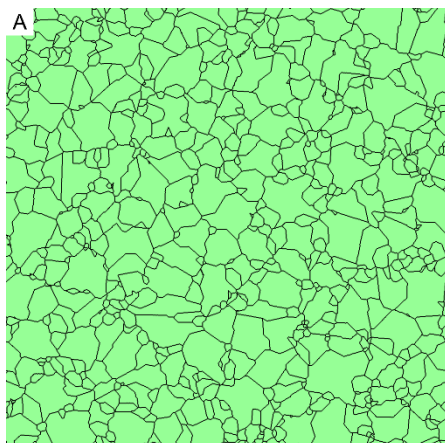
Příloha 6 – Vývoj shlukovacího indexu (A), celkové délky mezizrnové hranice normalizované délkou hranice počáteční textury (B), průměrných hodnot minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech (C) a zastoupení 120° trojných bodů v simulaci B v závislosti na stupni rekystalizace.



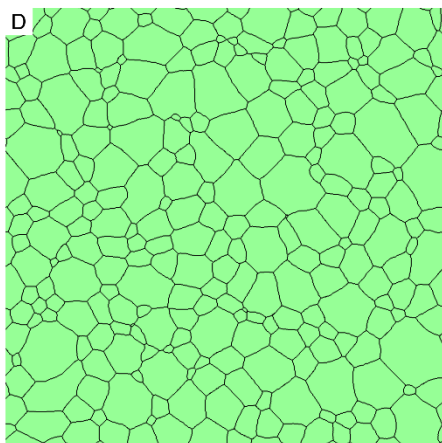
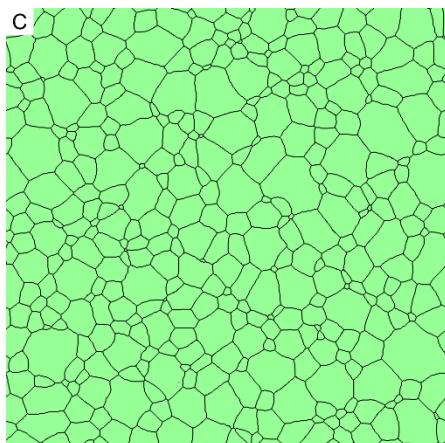
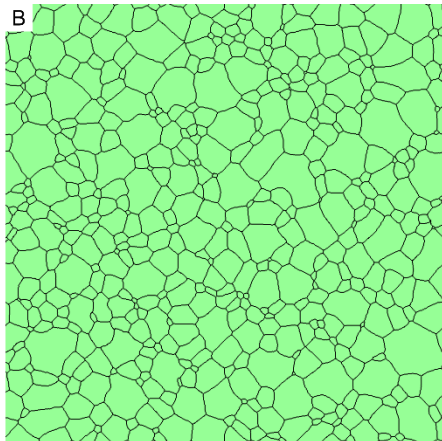
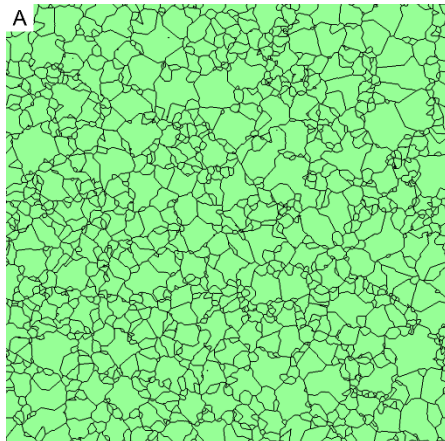
Příloha 7 – Vývoj shlukovacího indexu (A), celkové délky mezizrnové hranice normalizované délkou hranice počáteční textury (B), průměrných hodnot minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech (C) a zastoupení 120° trojných bodů v simulaci C v závislosti na stupni rekrystalizace.



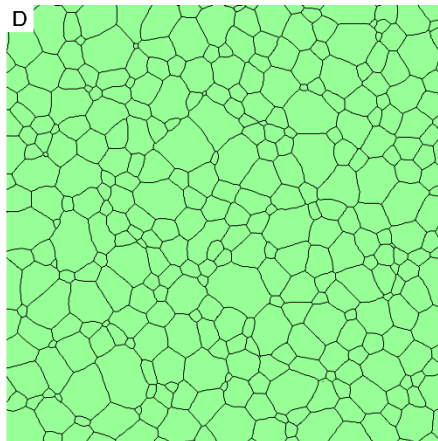
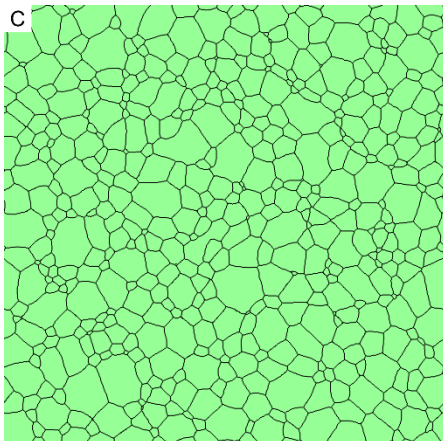
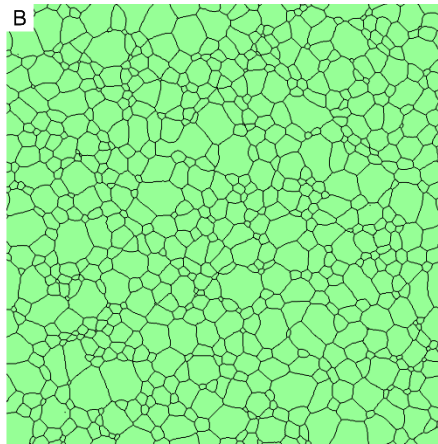
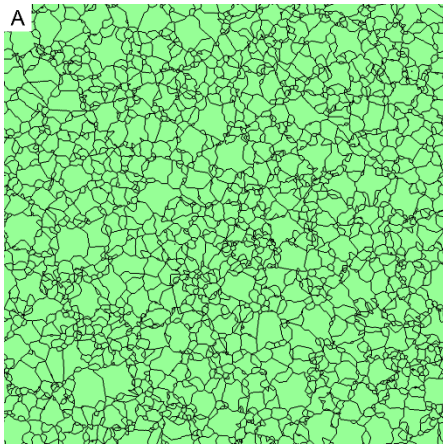
Příloha 8 – Vývoj shlukovacího indexu (A), celkové délky mezizrnové hranice normalizované délkou hranice počáteční textury (B), průměrných hodnot minimálních a maximálních úhlů v trojných bodech (C) a zastoupení 120° trojných bodů v simulaci D v závislosti na stupni rekrystalizace.



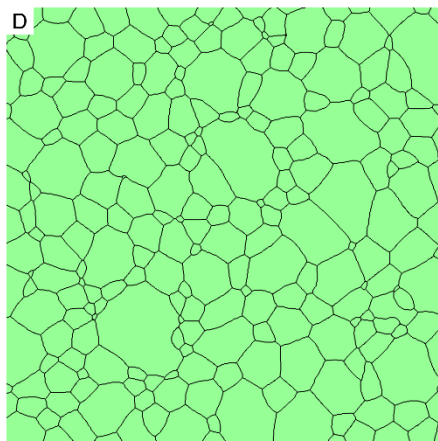
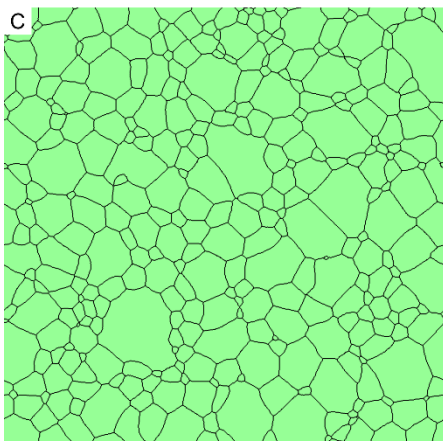
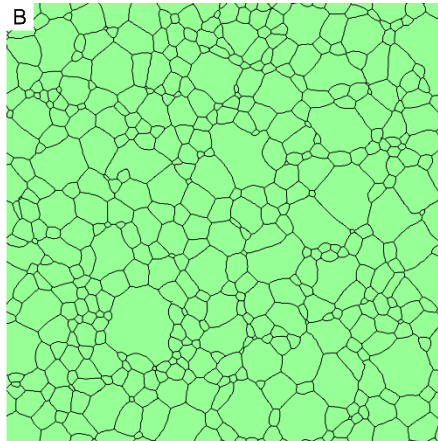
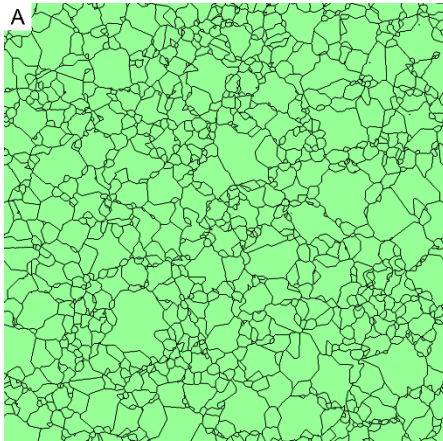
Příloha 9 – Obrázky textury ze simulace s počáteční texturou A. Délka hrany obrázku odpovídá 1 mm. Na obrázku A je počáteční textura. Na obrázku B je textura po 500 krocích simulace (474,3 let) a obrázek C zachycuje texture po 1 000 krocích simulace (971,9 let). Na obrázku D je vidět výsledná textura po 2 000 krocích (2 025,6 let).



Příloha 10 – Obrázky textury ze simulace s počáteční texturou B. Délka hrany obrázku odpovídá 1 mm. Na obrázku A je počáteční textura. Na obrázku B je textura po 500 krocích simulace (440,1 let) a obrázek C zachycuje texture po 1 000 krocích simulace (931,8 let). Na obrázku D je vidět výsledná textura po 2 000 krocích (1 948,8 let).



Příloha 11 – Obrázky textury ze simulace s počáteční texturou C. Délka hrany obrázku odpovídá 1 mm. Na obrázku A je počáteční textura. Na obrázku B je textura po 500 krocích simulace (427,9 let) a obrázek C zachycuje texture po 1 000 krocích simulace (894 let). Na obrázku D je vidět výsledná textura po 2 000 krocích (1 878,1 let).



Příloha 12 – Obrázky textury ze simulace s počáteční texturou D. Délka hrany obrázku odpovídá 1 mm. Na obrázku A je počáteční textura. Na obrázku B je textura po 500 krocích simulace (450,3 let) a obrázek C zachycuje texture po 1 000 krocích simulace (942,7 let). Na obrázku D je vidět výsledná textura po 2 000 krocích (1 981,1 let).