GEOFYZIKÁLNÍ ÚSTAV
AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY, v. v. i.

Posudek diplomové práce

Název práce: Role statického zrání v magmatické krystalizaci
Autor práce: Bc. Michal Marek
Vedoucí práce: Mgr. Václav Špillar, Ph.D.
Oponent: RNDr. Ondřej Krýza, Ph.D.

Struktura a cíle práce

Diplomová práce Bc. Michala Marka má charakter vlastního výzkumu, uvozeného rešeršními partiemi, který je zaměřený na vliv Ostwaldova zrání při formování finální textury magmatické horniny.

Text je strukturován do dvanácti kapitol, včetně seznamu literatury a příloh, s celkovým rozsahem 66 stran 35 obrázků, 3 tabulky a 58 citací. Úvodní kapitola představuje přehled fyzikálního popisu procesů nukleace, růstu a zrání krystalů v obecně-fázovém systému. Následuje přehled základní literatury spojené s výzkumem Ostwaldova zrání v geologii, a popisem principu a aplikací celulárního automatu, tvořícího jádro prezentovaného numerického modelu. Nejrozsáhlejší částí práce je vysvětlení algoritmizace a nastavení modelů tvorby úvodní texturní mapy a následného statického zrání, popis zpracování reálné textury a vysvětlení parametrizace výstupních dat. Na tuto část navazuje přehled výsledků, stručná diskuze a závěry.

Ačkoliv název práce zní „Role statického zrání v magmatické krystalizaci“ jako cíl práce je následně v textu uváděna zejména tvorba numerického modelu Ostwaldova zrání. Cílem je rovněž porovnat výsledky modelu s výstupy analýzy reálné textury, pořízené ze vzorku dunitu Kdyňského masivu.

Vlastní výsledky práce

Výsledky spočívají zejména v přípravě, programování a parametrizaci numerického modelu, využívajícího princip celulárního automatu. Jako hlavní výstup modelování jsou extrahovány CSD (Crystal Size Distribution) křivky, ale i další parametry, kvantifikující stav textury ve výpočetní mezifázi (po plném vykrystalování textury z magmatu a před následným statickým zráním) vzhledem ke koncovým hodnotám po skončení fáze Ostwaldova zrání. Sledovány jsou zejména počty krystalů, délka a geometrie hranice zrn, shlukovací index, stupeň rekrystalizace a další.

Chtěl bych zde vyzdvihnout velmi dobrý nápad na použití celulárního automatu a zároveň promyšlenou implementaci vztahů makroskopického popisu krystalizace a zrání do struktury kódu. Rovněž odvození výstupních parametrů modelů je provedeno technicky elegantně a jsou zde prokázány kvalitní matematické (a programátorské) schopnosti kandidáta, ale i schopnost improvizace a kreativity. Nicméně je potřeba připomenout, že takový popis, jak je aplikován, nutně zanedbává procesy mikroměřítka. Např. je zanedbána difuze, ačkoliv je v popisu teoretického modelu zmíněna (více níže v textu).

Formální úroveň práce

Pokud bych měl hodnotit práci jako celek, musím bohužel konstatovat, že práce je velmi rozporuplná a trpí zejména kvůli špatné formální stránce. Vedle nízké kvality textů na mnoha místech, zejména v úvodních partiích, je velmi slabá i rešeršní část a nevhodné řazení jejích

podkapitol. Rešerše samotného Ostwaldova zrání je velmi řídká a nesouvislá, s nedostatečně vyextrahovanými podstatnými informacemi pro výzkumné otázky a následnou diskuzi. Tvoří tak raději seznam prací, které se zabývají „také“ Ostwaldovým zráním a působí spíše jako ukázky. Rovněž diskuze je celkem slabá a vyplývá z ní více otázek, než kolik je zodpovězeno.

V textu se mnohokrát opakují stejná konstatování. Typicky ve většině kapitol jde o celé pasáže parafrázované z předchozích částí (odstavce v abstraktu, úvodu, metodách, rešerši, diskuzi). Taková redundantní opakování se vyskytují i v rámci jednotlivých podkapitol, anebo samotných odstavců. Po jazykové stránce je zde výrazné množství prohřešků proti gramatice a zároveň velmi chudý slovník na odborné termíny, které by text zefektivnily. Naproti tomu některé pasáže jsou zase nedostatečně rozepsány. Velkým neduhem je také nadužívání stejných slov na krátkém úseku nebo přímo v jedné větě (namátkou typicky např. „který“, „Ostwaldovo zrání“, „okolí“ a mnoho dalších). Pokud by byl text pokrácen, respektive napsán úsporněji a výstižněji, věřím, že by byl tak o pětinu kratší.

V technické části by mohlo být více matematické formalizace, vývojových diagramů nebo spojení stávajících obrázků do jednoho. Popisky obrázků jsou také velmi chudé a některé grafiky by mohly být překresleny do vektorového formátu (chápu, že převzaté vykopávky již nemají potřebnou kvalitu, ale dají se za 3 minuty obkreslit – typicky Fig. 2 a 7). Také je velmi nedostatečný obrázek 32, kde chybí viditelné měřítko a hodilo by se ukázat, ze které části vzorku byly sekce pořízeny (např. fotka s popisem).

Našel jsem i dvě chyby v referencích, byť se jedná spíše o překlepy (D’Humiéres a Yuanbao). Nepovažuji za vhodný ani způsob citování, kdy vedle jména chybí čárka oddělující rok a v případě dvou autorů jsou tito odděleni čárkou místo „and“. Pokud je citováno více prací, chybí středníky mezi každým odkazem. Kladné je, že alespoň je tento styl konzistentní v celé práci.

Celková vyváženost práce

Vzhledem k nízké kvalitě formální stránky, slabé rešerši, ale i jisté povrchnosti intepretací a diskuze, je práce nevyvážená. Což je škoda, protože je to značný kontrast vedle dobře napsaných technických kapitol a obecně vedle důležitého tématu, které je originálně zpracováno a to jistě s enormním úsilím i časovou investicí, věnovaným formalizaci, kódování, přemýšlení o zpracování dat a extrakci vhodných parametrů.
Práce tedy působí jako by kandidát byl spíše velmi zručný technik, ale není úplně naplněna vědecká podstata a odpovídající kvalita zpracování.

Splnění cílů práce

Jak autor sám uvádí, výsledné CSD křivky vykazují rozdíl oproti teoretickému modelu, což může být důsledek některých zjednodušení, ale i faktu redukce dimenze na D2 prostor. Je nasnadě ptát se, jak moc je tedy model relevantní k různým složením reálných hornin (?) - respektive, jak zredukovat počet možných intepretací těchto odchylek (viz otázky níže). Rovněž práce působí dojmem, že simulace byly provedeny pouze na čtyřech před-simulovaných texturách. Nedeterministické procesy, které byly zahrnuté do příslušných částí kódu, jako náhodně generovaná bázová čísla pro daný proces, tak znemožňují přesnou reprodukovatelnost simulace a bylo by vhodné toto omezení potlačit třeba skrz statisticky robustní grid simulací (prosím o komentář autora).

Analýza dunitu Kdyňského masivu nakonec nebyla použita pro přímé srovnání se simulacemi kvůli podezření na nevhodnost vzorku vzhledem k pravděpodobně prodělané dynamické rekrystalizaci.

Závěrečné shrnutí

Práce není vyvážená, trpí zejména po formální stránce a působí dojmem jako by textové části, zejména úvodních a koncových kapitol, byly psány „horkou jehlou“ na poslední chvíli. Lze pochopit, že ne vždy se podaří naplnit všechny cíle práce, koneckonců takové je bádání, ale je nutné naučit se dostatečně kvalitně odborně komunikovat své poznatky. Toto je jedním z cílů závěrečných prací, tím spíše v přírodovědných oborech.

Nicméně, vzhledem k naplnění hlavního cíle (tvorby modelu) a veškerého úsilí, které je z této odpovídající části práce patrné, navrhuji práci přijmout k obhajobě. Níže je seznam otázek, a prosím kandidáta, aby se k nim během obhajoby vyjádřil. Pokud bude práce obhájena, doporučuji hodnotit známkou 3 („dobře“).

Přikládám také pdf s podrobnými poznámkami, komentáři a otázkami, na které zde není prostor.

Otázky

1. Jaký by v modelu byl vliv latentního tepla uvolněného lokálně, dle rychlosti krystalizace? Může tak v izolovaném systému modelu vzniknout nějaká podoblast tavby?

2. Bylo zmíněno, že k Ostwaldovu zrání může docházet během fáze krystalizace, (kdy je v systému ještě dostatek kapalné fáze, např. ve formě tenkého filmu taveniny mezi zrny). Jak by tento proces ovlivnil výsledné CSD křivky, potažmo distribuci tepla, a jak citlivý by mohl být systém na tento mezikrok, pokud by byl implementován v modelu?

3. Jaký by mohl být vliv zjednodušení problému redukcí 3D->2D (např. energie obvodu vs povrchu ve srovnání s energiemi povrchů vs objemů jednotlivých zrn)? Pokud se týká vícesložkových systémů, jak se vyrovnat s odlišným tvarem jiných minerálů, které statisticky ve 2D řezu budou mít jiné geometrické vlastnosti?

4. Byl testován vliv rozlišení gridu buněk na hranice a jejich křivost, stejně jako na trojné body? Pokud by se rozlišení modelu dostatečně zvýšilo, nebylo by možné použít přímo definici parametrizace křivky dle délky oblouku s využitím buněk jako reprezentativnějších elementů křivky? Jak by rozlišení měnilo vypočtené parametry a CSD křivky?

5. Jaký lze očekávat vývoj trojných bodů ve vícesložkovém systému (např. plagioklas + olivín) jak toto kalibrovat na zjednodušení 2D skutečné 3D struktury?

6. Difuze není v jednosložkovém systému zohledněna, jak je psáno v diskuzi. Jak je tedy nahrazena nebo mimikována a jaký možný to má dopad na výsledky modelů a tedy

odchylku od pozorovaných teoretických křivek CSD, případně dalších geometrických parametrů zrn?

7. V práci jsou zmíněny teorie LSW a CN (DeHoff) jako „konkurenční“ popis na základě komunikace krystalů přes kapalnou fázi nebo v přímém kontaktu. Není možné, že platnost mají obě dvě, respektive existuje prostorová i časová doména, ve které působí jedna, a ve které druhá? Není možné, že dojde také k přechodům mezi oběma popisy vzhledem ke změně geometrie krystalů i mezizrnných prostorů? Nebo během fáze zrání z taveniny v jedné oblasti, zatímco v jiné v přímém kontaktu hranic zrn? Prosím o komentář.

8. Jaké jsou výhody a nevýhody celulárního automatu oproti jiným metodám a jaké limity to přináší pro mikroskopický popis procesu O. zrání.

9. Jak je konkrétně řešeno omezení modelu vyplývající z nedostatečných kinetických dat?

10. Bylo by možné aplikovat nějakou formu pseudo-infinitního gridu – s vlastní reprodukcí buněk tak, aby v určitém momentu došlo k přeškálování na větší měřítko a zjemnila se tak struktura domén nukleace. Např. volná hranice domény modelu, která by se zvětšovala časem? Případně vnést tvorbu kumulátů zrn nějakého vyššího/zvyšujícího se řádu?

11. Byla testována minimální vhodná velikost von Neumannova okolí? Jestli ano, tak jak? Jak testováno například na vhodnost výpočtu křivosti hranice?

Praha, Srpen 28, 2024

…….

RNDr. Ondřej Krýza, Ph.D.

Geofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Boční II/1401, 141 31 Praha 4, Česká Republika
e-mail: kryza@ig.cas.cz, http://www.ig.cas.cz, tel: (+420)267103361, IČ: 67985530, DIČ: CZ67985530