FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2000. március 24-25.

SEJTRENDSZEREK KVANTITATÍV TOPOLÓGIAI JELLEMZÉSE

Réti Tamás, Zsoldos Ibolya

ABSTRACT

In order to characterize the topological and geometrical properties of 2-D cellular structures, experiments have been performed with artificially constructed regular patterns. Our investigations have been focused on the study of the so-called Aboav law which is widely applied to the classification of random cellular structures of various types. It has been demonstrated that a reliable and precise topological description of 2-D cellular structures can not be performed by using parameters “a” and “ μ_2 ” of Aboav-equation only.

1. BEVEZETÉS

Jelen dolgozatban kétdimenziós sejtrendszerek topológiai jellemzésének problémáival foglalkozunk. Korábbi átfogó kutatások azt igazolták, hogy ezek a sejtrendszerek előnyösen használhatók fel a fémötvözeteket alkotó szemcseszerkezet 2- illetve 3-dimenziós modellezéséhez. Szabályos, homogén 2-dimenziós sejtrendszerek topológiai szerkezetét elemezve megmutatjuk, hogy az ismert Aboav-formula “a” paramétere valójában egy topológiai invariánsnak tekinthető, amelynek becslése többféle módszerrel is megvalósítható. Az ismertetett háromféle becslési eljárás mindegyike a súlyozott legkisebb négyzetek módszerének elvén alapul. Kísérleti eredményekre támaszkodva bizonyítjuk, hogy a sejtrendszerek topológiai struktúrájának számszerű jellemzése a hagyományos, két-paraméteres Aboav-formulával nem oldható meg. A topológiai mátrix valamint a komplexitási index fogalmának bevezetésével, kísérletet tettünk a sejtrendszerek szerkezetének eddiginél hatékonyabb kvantitatív jellemzésére, hasonlóságuk ill. különbözőségük objektív kritériumon alapuló minősítésére.

2. KÉTDIMENZIÓS SEJTRENDSZEREKRE VONATKOZÓ TOPOLÓGIAI ALAPÖSSZEFÜGGÉSEK

A vizsgálat tárgyát képező sejtrendszerek közös tulajdonsága, hogy sokszögekből (poligonokból) épülnek fel. E sejtrendszerek végtelen kiterjedésűek, és az egymáshoz hézagmentesen illeszkedő sokszögek egyrétűen fedik le a síkot, mégpedig oly módon, hogy

egy csúcsban mindig 3 él találkozik. A sejtrendszer struktúráját a síkban homogénnek feltételezzük.

A fentiekben taglalt sejtrendszerekre, mint ismeretes, érvényesek az alábbi összefüggések [1]:

$$\langle n \rangle = \sum_{n \geq 3} p_n n = 6 \quad (1/1)$$

$$\langle n^2 \rangle = \sum_{n \geq 3} p_n n^2 = \mu_2 + 36 \quad (1/2)$$

$$\langle nm(n) \rangle = \sum_{n \geq 3} p_n nm(n) = \langle n^2 \rangle \quad (1/3)$$

ahol:

- 'n' a sejtrendszert alkotó egyes poligonok (sejtek) oldalélszáma ($n \geq 3$)
- $p_n > 0$, az n-oldalélszámú poligonok előfordulási gyakorisága (ezek összege 1)
- $\langle f^k(n) \rangle = \sum_{n \geq 3} p_n [f(n)]^k$ az $f(n)$ függvény k-adik közönséges momentuma
- $m(n)$ egy n-oldalú sejt közvetlen szomszédjai oldalélszámának átlaga
- $\mu_2 \geq 0$, az 'n' oldalélszám ún. második centrális momentuma (szórásnégyzete), amelyet a

$$\mu_2 = \sum_{n \geq 3} p_n (n - \langle n \rangle)^2 = \sum_{n \geq 3} p_n (n - 6)^2 \quad (2)$$

képlettel definiálunk.

3. AZ ABOAV-FORMULA ÉS AZ ABOAV-PARAMÉTER BECSLÉSE

Aboave "természetes" (random) sejtrendszerek, így többek között ötvözetek síkmetszeti szemcseszerkezetét elemezve empirikus összefüggést állapított meg, amellyel egy adott sejtrendszerre vonatkozóan adott $p_n > 0$ gyakorisággal előforduló n-oldalú sejt szomszédainak $m(n)$ átlagos oldalélszáma az 'n' függvényében megbecsülhető. A feltételezések szerint $m(n)$ az 'n' hiperbolikus függvénye, és ez a függvénykapcsolat az alábbi formulával reprezentálható:

$$m(n) = 6 - a + \beta/n \quad (3)$$

A (3) egyenletben 'a' és 'β' konstansok, közülük az "a"-t Aboav-paraméternek is nevezik. Aboav azzal a további feltételezéssel élt, hogy 'β' nem független konstans, hanem eleget tesz a $\beta = 6a + \mu_2$ összefüggésnek. A következőkben egy sejtrendszert Aboav-rendszernek nevezünk, ha léteznek olyan a^* és β^* konstansok, amelyeket a (3) egyenletbe helyettesítve az $m(n)$ hiba nélkül számítható az 'n' függvényében. Bizonyítható, hogy ilyen sejtrendszerek léteznek, feltételezésünk szerint minden binér típusú, azaz (3,N), (4,N) és (5,N) alakú sejtrendszer (ahol N hatnál nagyobb természetes szám) Aboav-rendszer.

A következőkben megmutatjuk, hogy a (3) egyenlet konstans paramétereit - a súlyozott legkisebb négyzetek módszerét alkalmazva - többféleképpen is becsülhetők. Ezt három példán is demonstráljuk. Az alkalmazott becslési eljárások az

$$E(a, \beta) = \sum_{n \geq 3} W_n [m(n) - (6 - a + \beta/n)]^2 \quad (4)$$

hibafüggvény minimalizálásán alapulnak, ahol W_n súlyfüggvények alkalmasan választott pozitív mennyiségek. A (3) és (4) képletekből következik, hogy egy sejtrendszer akkor és csak akkor Aboav-rendszer, ha léteznek olyan a^* , β^* paraméterek, amelyekre $E(a^*, \beta^*) = 0$.

I. Módszer. Amennyiben a súlyfüggvényeket $W_n = np_n$ alakúnak választjuk, speciális esetként a

$$E_R(a, \beta) = \sum np_n [m(n) - (6 - a + \beta/n)]^2 = \sum p_n [nm(n) - (6 - a)n - \beta]^2 \quad (5)$$

hibafüggvényt kapjuk. Az ismeretlen 'a' és 'β' paraméterek becslése szokásos módon a $\partial E_R/\partial a=0$ és $\partial E_R/\partial \beta=0$ lineáris egyenletrendszer megoldására vezethető vissza. Eredményül

$$a_R = 6 - \frac{1}{\mu_2} \sum p_n n(n-6)m(n) = 12 + \frac{1}{\mu_2} \left[216 - \langle n^2 m(n) \rangle \right] \quad (6)$$

valamint

$$\beta_R = 6a_R + \langle nm(n) \rangle - 36 = 6a_R + \mu_2. \quad (7)$$

minimalizáló paraméterekhez jutunk. A fentiekből adódik, hogy az a_R paraméter ismeretében lehetőség nyílik arra, hogy 'n' függvényében az $nm(n)$ értékét a

$$g(n) = (6 - a_R)n + 6a_R + \mu_2. \quad (8)$$

formulával becsülhessük. A (8) egyenletet a szakirodalomban az Aboav-formula linearizált változatának nevezik.

II. Módszer. Ha a súlyfüggvényeket $W_n = p_n$ összefüggéssel definiáljuk, továbbá még azt is feltételezzük, hogy β paraméterre a $\beta = 6a + \mu_2$ összefüggés teljesül, akkor a (4) képletből adódóan az

$$E_Z(a) = \sum p_n [m(n) - (6 - a + \beta/n)]^2 = \sum p_n [m(n) - (6 - a + \frac{6a + \mu_2}{n})]^2 \quad (9)$$

hibafüggvényt kapjuk eredményül. Az 'a' paraméter becslése ekkor $E_Z = E_Z(a)$ minimumának, következésképpen a $\partial E_Z/\partial a=0$ lineáris egyenlet megoldásának meghatározására egyszerűsödik.

A számításokat elvégezve az E_Z hibafüggvényt minimalizáló ' a_Z ' paraméterre az

$$a_Z = \frac{\sum p_n \left(\frac{n-6}{n} \right) \left[6 + \frac{\mu_2}{n} - m(n) \right]}{\sum p_n \left(\frac{n-6}{n} \right)^2} \quad (10)$$

kifejezés adódik.

III. Módszer. Amennyiben a súlyfüggvényeket $W_n = p_n$ összefüggéssel definiáljuk, és a 'β' paraméterre vonatkozóan semmiféle korlátozó feltevést nem teszünk, akkor a (4) képlet speciális eseteként

$$E_W(a, \beta) = \sum p_n [m(n) - (6 - a + \beta/n)]^2 \quad (11)$$

hibafüggvény adódik. A minimalizálás alapját képező $\partial E_W/\partial a = 0$ és $\partial E_W/\partial \beta = 0$ lineáris egyenletrendszert megoldva, kapjuk az a_W és β_W paramétereket:

$$a_W = 6 - \langle m(n) \rangle - \frac{\sum p_n V(n) [m(n) - \langle m(n) \rangle]}{\sum p_n V^2(n)} \quad (12)$$

$$\beta_W = \frac{a_W + \langle m(n) \rangle - 6}{\sum p_n \frac{1}{n}} \quad (13)$$

ahol a $V(n)$ függvény a

$$V(n) = 1 - \frac{1}{n \sum p_n \frac{1}{n}} \quad (14)$$

alakban értelmezett.

A becsült paraméterek visszahelyettesítésével kapjuk az $m(n)$ becslésre hivatott alábbi $h_W(n)$ függvényt

$$\begin{aligned} h_W(n) &= (6 - a_W)V(n) + [1 - V(n)] * \langle m(n) \rangle = \\ &= 6 - a_W + \frac{a_W + \langle m(n) \rangle - 6}{n \sum p_n \frac{1}{n}} \end{aligned} \quad (15)$$

Az előző megfontolásokból következik, hogy a (15) formulával értelmezett $h_W(n)$ függvény szolgáltatja a legjobb becslést $m(n)$ értékére. Az is igaz, hogy az ' a_Z ' paraméter felhasználásával definiált

$$h_Z(n) = 6 - a_Z + (6a_Z + \mu_2)/n \quad (16)$$

függvény $m(n)$ becslésekor jobb eredményt ad mint a

$$h_R(n) = 6 - a_R + (6a_R + \mu_2)/n \quad (17)$$

képlettel értelmezett közelítő függvény. Ennek magyarázata a négyzetes közelítés "jóságát" minősítő hibafüggvények eltérő jellegében rejlik.

Az a_R , a_Z és a_W paraméterek topológiai invariánsok, ezért a sejttrendszerek topológiai szerkezetének kvantitatív jellemzésére is előnyösen felhasználhatók. Aboav-féle sejttrendszer esetén a háromféle becslési eljárás azonos paraméterekhez vezet, ennek következtében $a_Z = a_R = a_W$ érvényes.

4. SEJTRENDSZEREK KVANTITATIV TOPOLÓGIAI JELLEMZÉSE

Sejttrendszerek topológiai szerkezetének minősítésekor az "a" Aboav paraméter és a μ_2 szórásnégyzet - szakirodalmi tapasztalatok szerint - a leginkább használatos számszerű, statisztikai módszerrel becsült jellemzők. Bár ezek algebrailag független mennyiségek, mindazonáltal könnyű megmutatni, hogy azonos "a" és μ_2 paraméterekkel jellemzett sejttrendszerek topológiai szerkezete meglehetősen eltérő jellegű lehet. Szemléletes példa erre az 1.a és 1.b ábrán látható 5, 6 és 7 oldalú poligonokból konstruált A és B jelű sejttrendszerek. Mindkét sejttrendszerben az 5, 6 és 7-szögek azonos gyakorisággal találhatók meg, nevezetesen $p_5 = 1/6$, $p_6 = 4/6$, $p_7 = 1/6$. Másrészt belátható az is, hogy mindkét sejttrendszerre nézve a μ_2 és a_R paraméterek is megegyeznek, konkrétan, fennáll a $\mu_2 = 1/3$ és $a_R = 1$ összefüggés.

Igazolható továbbá, hogy az B sejttrendszer Aboav-rendszer, viszont az A rendszer nem az. A korábbi megfontolásokból következik ezért, hogy a B rendszerre nézve a három eltérő módszerrel becsült "a" paraméter szükségképpen azonos értékű, (vagyis $a_R = a_Z = a_W = 1$ teljesül). Ezzel szemben az A rendszerre vonatkozóan a háromféle becslési eljárás eltérő eredményre vezet, nevezetesen: $a_R = 1$, $a_Z = 0.89189$ illetve $a_W = 0.89091$.

Az 1a és b. ábrán táblázatos formában külön feltüntettük a két sejttrendszer topológiai felépítését jellemző ún. topológiai mátrixokat, továbbá a megfelelő $m(n)$ mennyiségeket, amelyek a táblázatok utolsó oszlopát képezik. A topológiai mátrix a szomszédos sokszögek kapcsolódási módozatait jellemzi, és oszlopainak száma mindig megegyezik a sejttrendszert alkotó poligontípusok számával. (Jelen esetben mindkét sejttrendszerben háromféle sokszög található, ezért az oszlopok száma is három.) A mátrix sorainak száma azonos, vagy nagyobb mint az oszlopok száma. A topológiai mátrix i-edik sorához és j-edik oszlopához tartozó (i,j)

elem (amely egy természetes szám), megadja, hogy a sejtrendszerben az i -oldalszámú poligonnak, hány darab j -oldalszámú szomszédja van.

A topológiai mátrix ismeretében lehetőség kínálkozik a sejt kapcsolódások árnyaltabb számszerű minősítésére, így többek között definiálható a sejtrendszer I_C komplexitási indexe. Ez utóbbit a topológiai mátrix N_S sorainak és N_O oszlopainak különbségeként, azaz az $I_C = N_S - N_O$ kifejezéssel értelmezzük. A definícióból következően a komplexitási index egy nemnegatív egész szám, és I_C értéke akkor és csak akkor zérus, ha a topológiai mátrix sorainak és oszlopainak száma azonos.

Ha a komplexitási index zérus, akkor a különböző oldalszámú poligonok (sejtek) egymáshoz "egyszerű módon" kapcsolódnak, következésképpen a sejtrendszert alkotó i -oldalszámú poligonnak nincs többféle, topológiailag "eltérő típusú" környezete az i -számú közvetlen sejt szomszédok vonatkozásában. Amint az 1. ábrából kitűnik, a komplexitási indexek alapján a két sejtrendszer már megkülönböztethető egymástól. Az A sejtrendszer topológiai indexe $6-3=3$, míg a B rendszeré $12-3=9$. Mint megállapítható, az utóbbi rendszer struktúrája bonyolultabb is: a B rendszerben az egyes poligonok kapcsolódása a szomszédos sejtekhez lényegesen többféle konfiguráció szerint történhet, mint az A rendszer esetében.

db	Típus	5	6	7	m(n)
2	5	0	4	1	31/5
2	6a	0	4	2	73/12
2	6b	2	3	1	
2	6c	1	4	1	
2	6d	1	3	2	
2	7	1	6	0	41/7

1. a. ábra

db	Típus	5	6	7	m(n)
1	5a	0	3	2	94/15
2	5b	0	4	1	
3	6a	1	3	2	109/18
1	6b	2	4	0	
1	6c	2	2	2	
1	6d	0	3	3	
2	6e	1	5	0	
2	6f	0	5	1	
2	6g	1	4	1	124/21
1	7a	1	5	1	
1	7b	2	4	1	
1	7c	1	6	0	

1.b. ábra

5. KÖVETKEZTETÉSEK

Az "a" Aboav paraméter becslésére három különböző módszert ismertettünk. Az elemzésből kitűnt, hogy becslés eredményeként kapott a_z , a_R és a_W mennyiségek topológiai invariánsok, amelyek sejtrendszerek topológiai struktúrájának minősítésére is alkalmasak. Aboav-típusú sejtrendszerek esetében a háromféle eljárással becsült "a" paraméter szükségképpen megegyezik. Példával demonstráltuk, hogy az I_C komplexitási index eredménnyel alkalmazható 2-dimenziós sejtrendszerek topológiai szerkezetének számszerű kritériumon alapuló minősítéséhez.

[1] S. N. Chiu: Aboav-Weaire's and Lewis' Laws - A Review, Materials Characterization, Vol. 34, 1995, p. 149-165.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A témakörben készült munka az Országos Tudományos Kutatási Alap támogatásával történt a T 030521 sz. projekt keretében.

Réti Tamás

Budapesti Műszaki Főiskola, Budapest

Zsoldos Ibolya

Szent István Egyetem, Gépészmérnöki Kar, Gödöllő