FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2001. március 23-24.

AZ ABOAV-EGYENLET EGY LEHETSÉGES ÁLTALÁNOSÍTÁSA

A possible generalization of the Aboav-law

Réti Tamás, Zsoldos Ibolya

Abstract

The so-called Aboav-law is generally used for the topological characterization of space-filling cellular structures. In the present work, two possible models for the generalization of the Aboav-law are described. The practical applicability of the models suggested have been tested on 2-D artificially constructed cellular mosaics. This approach may as well be applied to 3D cellular structures.

A két és három dimenziós sejtrendszerek topológiai tulajdonságainak kvantitatív jellemzésére széles körben alkalmazzák az ún. Aboav-formulát, amely összefüggést állapít meg a sejtek oldalélszáma (n) valamint az n -oldalú sejt szomszédainak $m(n)$ átlagos oldalélszáma között. Jelen dolgozatban a kétdimenziós sejtrendszerekre vonatkozóan megmutatjuk, hogy az Aboav-formula messzemenően általánosítható, és ennek eredményeként számítási pontossága jelentősen megnövelhető. Az általánosítás lehetőségeit és módszerét először elvileg elemezzük, majd a gyakorlati alkalmazásban rejlő előnyöket példákon is demonstráljuk.

1. Kétdimenziós sejtrendszerekre vonatkozó topológiai alapösszefüggések

A vizsgálat tárgyát képező sejtrendszerek közös tulajdonsága, hogy sokszögekből (poligonokból) épülnek fel. E sejtrendszerek végtelen kiterjedésűek, és az egymáshoz

$$3 \leq \langle e_k \rangle = \frac{2\langle n \rangle}{\langle n \rangle - 2} \leq 6 \quad (4.2)$$

összefüggés.

Egy sejtrendszer „*regulárisnak*” nevezünk, ha minden csúcspontban mindig három él találkozik. Az ilyen sejtrendszerekre, mint ismeretes, teljesülnek a

$$\langle n \rangle = 2\langle e_k \rangle = 6 \quad (5.1)$$

$$\langle n^2 \rangle = \langle nm(n) \rangle = 36 + \mu_2 \quad (5.2)$$

összefüggések, következésképpen minden reguláris sejtrendszer szükségképpen homogén is egyúttal.

Aboav feltételezése szerint tetszőleges reguláris sejtrendszerre vonatkozóan $p_n > 0$ ($n=3,4,5,6,7,\dots,N$) gyakorisággal előforduló n -oldalú sejtek szomszédainak $m(n)$ (átlagos) oldalélszáma az „ n ” függvényében a

$$m(n) = 6 - a + \frac{6a + \mu_2}{n} \quad (6)$$

empirikus formulával becsülhető. A (6) egyenletben az „ a ” konstans Aboav-paraméternek nevezik. A gyakorlatban a (6) egyenlet helyett annak „linearizált”,

$$nm(n) = (6 - a)n + 6a + \mu_2 \quad (7)$$

változatát használják, amely az $nm(n)$ mennyiségek becslésére hivatott. Az elnevezés arra utal, hogy a (7) egyenletben a jobb oldalán található

$$V(n) = (6 - a)n + 6a + \mu_2 = a(6 - n) + 6n + \mu_2 \quad (8)$$

kifejezés lineáris függvénye az n változónak. Hangsúlyozni kell, hogy a $V(n)$ függvény csak közelítő becslését adja az $nra(n)$ mennyiségnek, erre korábban már Aboav is felhívta a figyelmet [1]. Ez a felismerés motiválta a tradicionális Aboav-formula becslési pontosságának javítására, illetve általánosítására irányuló erőfeszítéseket [2]. A következőkben az Aboav-formula kiterjesztési lehetőségeit elemezve, megmutatjuk, hogy az általánosítás célszerű módon két lépésben végezhető el.

3. Az aboav-formula kiterjesztése

3.1 Az Aboav-formula általánosításának első fázisa

A tradicionális Aboav-formula általánosításának alapját az $nm(n)$ mennyiségek becslésére hivatott

$$W(n) = \langle nm(n) \rangle + \langle n \rangle [n - \langle n \rangle] + A [\langle n \rangle - n] = \langle nm(n) \rangle - \{ \langle n \rangle - A \} \langle n \rangle - n \quad (9)$$

függvény képezi, amely elvileg tetszőleges sejtrendszerre definiált. Amint a (9) képletből is kitűnik, ennek sajátossága, hogy eleget tesz a

$$\langle W(n) \rangle = \sum_n p_n W(n) = \sum_n p_n nm(n) = \langle nm(n) \rangle \quad (10)$$

egyenlőségnek. A fentiekből következik, hogy homogén sejtrendszerre a (9) formula felírható

$$W(n) = \langle n^2 \rangle + \langle n \rangle [n - \langle n \rangle] + A \{ \langle n \rangle - n \} = \mu_2 + n \langle n \rangle + A \{ \langle n \rangle - n \} \quad (11)$$

alakban. E formula érdekessége, hogy $n = \langle n \rangle$ esetében fenn áll a

$$W(\langle n \rangle) = \mu_2 + \langle n \rangle \langle n \rangle = \langle n^2 \rangle \quad (12)$$

összefüggés, ami arra utal, hogy $W(\langle n \rangle)$ értéke független az A paraméter nagyságától. Reguláris sejtrendszerre speciális esetként a (11) képletből

$$W(n) = \mu_2 + 6n + A[6 - n] = [6 - A]n + 6n + \mu_2 \quad (13)$$

adódik, tehát a hagyományos Aboav-formulát kapjuk vissza.

A (9) szerinti $W(n)$ függvény ismeretlen A paraméterének becsléséhez kézenfekvő a súlyozott legkisebb négyzetek módszerének alkalmazása, amely végül is az

$$E(A) = \sum_n p_n \{ nm(n) - W(n) \}^2 = \sum_n p_n [nm(n) - \langle nm(n) \rangle - \{ A - \langle n \rangle \} \langle n \rangle - n]^2 \quad (14)$$

hibafüggvény minimalizálását feltételezi. Megoldva a $5E(A)/5A=0$ egyenletet, eredményül

$$A_s = \langle n \rangle + \frac{1}{\mu_2} \sum_n p_n n \{ \langle n \rangle - n \} m(n) = \langle n \rangle + \frac{1}{\mu_2} \{ \langle n \rangle nm(n) \} - \langle n^2 m(n) \rangle \quad (15)$$

adódik: Abban a speciális esetben, ha a sejtrendszer reguláris, akkor a

$$A_s = 12 + \frac{1}{\mu_2} \{216 + \langle n^2 m(n) \rangle\} \quad (16)$$

képlethez jutunk.

3.2. Az Aboav-formula általánosításának második fázisa

A (9) szerinti összefüggés tovább általánosítható, amennyiben több konstans is figyelembe vesszünk a becslés pontosságának növelése végett. Az általánosítás alapjául ezúttal

$$W(n) = \langle nm(n) \rangle + \langle n \rangle \{n - \langle n \rangle\} + A \{n - n\} + CG(n) \quad (17)$$

függvény szolgál, amelyben A és C konstans paraméterek és G(n) az alábbi módon definiált függvény:

$$G(n) = \sum_{j=1}^J A_j \{g_j(n) - g_j(n)\} \quad (18)$$

A (18) egyenletben A_j és $g_j(n)$, ($j=1,2,...,J$) lényegében tetszőleges konstansok illetve valós függvények. A (17) szerinti $W(n)$ függvény ismeretlen konstans paraméterei egyszerűen becsülhetők többváltozós lineáris regresszió alkalmazásával. Valójában, ami igazán nyitott és vitatott kérdés: miként célszerű definiálni a $g_j(n)$ függvényeket. A következőkben azt az egyszerű esetet vizsgáljuk, amikor $J=1$ és $A_i=1$. Ekkor nyilván fenn áll a $G(n) = \langle g_1(n) \rangle - g_1(n)$ összefüggés, ezért a (17) formula speciális eseteként W az alábbi két-paraméteres függvény alakjában adható meg:

$$W(n, A, C) = \langle nm(n) \rangle + \langle n \rangle \{n - \langle n \rangle\} + A \{n - n\} + C \{g_1(n) - g_1(n)\} \quad (19)$$

Itt jegyezzük meg, hogy amennyiben a sejtrendszer reguláris, a (19) függvény a

$$W(n, A, C) = \mu_2 + 6n + A(6 - n) + C \{g_1(n) - g_1(n)\} \quad (20)$$

alakra egyszerűsödik.

Tekintettel arra, hogy a (19) egyenlettel definiált $W(n, A, C)$ függvényt az $nm(n)$ mennyiség becslésére használjuk, felírható

$$nm(n) - \langle nm(n) \rangle - \langle n \rangle \{n - \langle n \rangle\} = A \{ \langle n \rangle - n \} + C \{ \langle g_1(n) \rangle - g_1(n) \} \quad (21)$$

összefüggés, amely végül is a gyakorlati számításokhoz előnyös

$$Z_n = AX_n + CY_n \quad (22)$$

alakra transzformálható, bevezetve

$$X_n = \langle n \rangle - n \quad (32/1)$$

$$Y_n = \langle g_1(n) \rangle - g_1(n) \quad (23/2)$$

$$Z_n = nm(n) - \langle nm(n) \rangle - \langle n \rangle \{n - \langle n \rangle\} \quad (23/3)$$

képletek szerint definiált új változókat. A (19) egyenlet ismeretlen A és C paramétereit szokásos módon a súlyozott legkisebb négyzetek módszerével becsülhetjük. E célból minimalizálni kell a

$$E(A, C) = \sum_n p_n [Z_n - AX_n - CY_n]^2 \quad (24)$$

hibafüggvényt, következésképpen a paraméterek meghatározása a $\partial E / \partial A = 0$ és $\partial E / \partial C = 0$ lineáris egyenletrendszer megoldására vezethető vissza. A megoldás eredményeként

$$A_R = \frac{\langle X_n Y_n \rangle \langle Y_n Z_n \rangle - \langle Y_n^2 \rangle \langle X_n Z_n \rangle}{\langle X_n Y_n \rangle \langle X_n Y_n \rangle - \langle X_n^2 \rangle \langle Y_n^2 \rangle} \quad (25)$$

illetve

$$C_R = \frac{\langle Y_n Z_n \rangle}{\langle Y_n^2 \rangle} - A_R \frac{\langle X_n Y_n \rangle}{\langle Y_n^2 \rangle} \quad (26)$$

adódik. A becsült AR és CR paraméterek felhasználásával az általánosított Aboav formula az alábbi alakban írható fel:

$$nm(n) = W(n, A_R, C_R) = \langle nm(n) \rangle + \langle n \rangle \{n - \langle n \rangle\} + A_R \{ \langle n \rangle - n \} + C_R \{ \langle g_1(n) \rangle - g_1(n) \} \quad (27)$$

A fenti egyenlet következménye, hogy homogén sejtrendszerre fenn áll, a

$$W(n, A_R, C_R) = \mu_2 + \langle n \rangle \langle n \rangle + A_R [\langle n \rangle - n] + C_R \{ \langle g_1(n) \rangle - g_1(n) \} \quad (28)$$

összefüggés.

Reguláris sejtrendszerre $n=6$ esetében

$$W(6, A_R, C_R) = \langle nm(n) \rangle + C_R \{ \langle g_1(n) \rangle - g_1(6) \} = \mu_2 + 36 + C_R \{ \langle g_1(n) \rangle - g_1(6) \} \quad (29)$$

teljesül.

Az $G(n) = \langle g_1(n) \rangle - g_1(n)$ függvény megválasztására többféle lehetőség is kínálkozik. Kézenfekvőnek tűnik például e célra az n közönséges momentumait felhasználni. Szimulációs vizsgálatok alapján arra következtettünk, hogy az $nm(n)$ számítására alkalmazott formulákat összehasonlítva, a legkisebb becslési hibát az alábbi $G(n)$ függvények szolgáltatják:

$$G_R(n) = \langle \exp\{n - \langle n \rangle\} \rangle - \exp\{n - \langle n \rangle\} \quad (30)$$

$$G_Z(n) = \langle n^3 \rangle - n^3 \quad (31)$$

Feltételezhető, hogy a fenti két függvény

$$G_S(n) = qG_Z(n) + (1-q)G_R(n) \quad (32)$$

súlyozott középértékét alkalmazva, ahol $0 \leq q \leq 1$, még jobb eredmény érhető el a predikció pontosságát illetően.

4. Az általánosított aboav-formula gyakorlati alkalmazása

A következőkben ismertetett kísérletek homogén, de nem reguláris sejtrendszerek topológiai elemzésére, nevezetesen a (9) és a (19) képletekkel definiált általánosított Aboav-formulák alkalmazhatóságának tesztelésére irányultak.

Példaképpen az 1. és 2. ábrákon feltüntetett **A-346** valamint a **B-346** jelű sejtrendszerekre vonatkozó eredményeket ismertetjük. Mindkettő 4, 5 és 6-szögekből épül fel, de ezek p_n előfordulási valószínűségei sejtrendszerenként különbözők. Mint látható, az A-346 sejtrendszerben minden csúcspontosan 4 él közös pontja. Ezzel szemben a B-456 sejtrendszer csúcspontjaiban 4 illetve 5 él találkozik.

PARAMÉTEREK

$$\langle n \rangle = 4$$

$$\mu_2 = 1$$

$$A_S = 0$$

$$\langle e_k \rangle = 4$$

$$\langle nm(n) \rangle = \langle n^2 \rangle = 17$$

$$A_R = -4,844615$$

$$C_R = 0,0769$$

p_n	n	3	4	6	$m(n)$	$nm(n)$
2/6	3	0	3	0	4	12
3/6	4	2	0	2	4,5	18
1/6	6	0	6	0	4	24

1. ábra Az A-346 sejtrendszer és topológiai mátrixa

PARAMÉTEREK

$$\langle n \rangle = 3,6$$

$$\mu_2 = 0,64$$

$$A_5 = -0,525$$

$$\langle e_k \rangle = 4,5$$

$$\langle nm(n) \rangle = \langle n^2 \rangle = 13,6$$

$$A_R = 0,5615$$

$$C_R = -0,0192$$

p_n		n	3	4	6	$m(n)$	$nm(n)$	
8/15	2/15	3a	0	4	0	15/4	12	45/4
	6/15	3b	1	2	0		11	
6/15		4	3	0	1	15/4	15	
1/15		6	0	6	0	4	24	

2. ábra A B-346 sejtrendszer és topológiai mátrixa.

Mindkét ábrán feltüntettük az egyes sokszögfajták p_n előfordulási valószínűségét, az n -oldalú sejtekkel szomszédos sejtek átlagos $m(n)$ oldalélszámát, valamint az ún. topológiai mátrixokat is. 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 topológiai minősítésére. Mint megállapítható, az B-346 rendszer struktúrája a bonyolultabb, ugyanis itt a háromszögek kapcsolódása a szomszédos 4 és 6 oldalú sejtekhez kétféle konfiguráció szerint történhet. A két sejtrendszert egymástól eltérő topológiai mennyiségek jellemzik. Az A-346 sejtrendszerre $\langle n \rangle = 4$, $u_{1,2} = 1$, $\langle nm(n) \rangle = \langle n^2 \rangle = 17$, a B-346 sejtrendszerre pedig $\langle n \rangle = 3,6$ és $J_{1,2} = 0,64$, $\langle nm(n) \rangle = \langle n^2 \rangle = 13,6$ adódott. Az egy-paraméteres, azaz a

(9) képlet szerint általánosított Aboav-formulát felhasználva az A-346 sejtrendszerre $A_s=0$, míg a B-345 sejtrendszerre $A_s=-0,525$ értéket kaptunk.

A számításokat a (19) képlet szerint általánosított, két-paraméteres Aboav-formulával is elvégeztük, e célra a (31) kifejezés szerint definiált $G(n)=\langle n^3 \rangle - n^3$ függvényt használtuk. Eredményként az A-346 sejtrendszerre $AR=-4,844615$ és $CR=0,0769$, a B-346 sejtrendszerre pedig $AR=0,5615$ és $CR=-0,0192$ adódott. Természetesen az ún. ternér sejtrendszerekre, amelyek mindössze háromféle sokszögből tevődnek össze, az Aboav-formula két-paraméteres általánosított változata mindig abszolút pontos. Nyilvánvaló, hogy a paraméterek számának növelése javít a becslés pontosságán, de a paraméterek topológiai szempontból való értelmezése mind inkább nehézségbe ütközik.

5. Következtetések

Módszereket ismertettünk az Aboav-formula lehetséges általánosítására. A kétféle (egy-paraméteres valamint több-paraméteres) modellváltozat alapvető közös sajátossága, hogy nemcsak a hagyományos reguláris sejtrendszerek, hanem tetszőleges homogén sejtrendszerek kvantitatív minősítésére is felhasználható. A bemutatott számítási eredmények a javasolt modellek gyakorlati alkalmazhatóságát igazolják. Bár az ismertetett modellek 2-dimenziós típusúak, ennek ellenére minden nehézség nélkül kiterjeszthetők 3-dimenziós sejtrendszerek topológiai jellemzésére is. Ez oly módon valósítható meg, hogy a megfelelő képletekbe a síkbeli cellák szomszédainak átlagos $m(n)$ oldalszáma helyébe az F lapszámú térbeli cellák szomszédainak $m(F)$ átlagos lapszámát írjuk.

[1] D. A. Aboav: The Arrangement of Cells in a Net, Metallography, Vol. 13, 1980, p.43-58.

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

Köszönetnyilvánítás

A témakörben végzett munkát az Országos Tudományos Alap támogatásával, a T 030521 sz. projekt keretében végeztük.

Dr Réti Tamás

Budapest Polytechnic, Budapest
Budapesti Műszaki Főiskola, Budapest
H-1081 Budapest, Népszínház u. 8., Hungary
E-mail: reti@zeus.banki.hu

Zsoldos Ibolya

Szent István Egyetem,
Gépészmérnöki Kar, Gödöllő