FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2004. március 26-27.

3-DIMENZIÓS MIKROSZERKEZET TOPOLÓGIAI JELLEMZÉSE CELLA-MODELL ALKALMAZÁSÁVAL

Bagyinszki Gyula, Réti Tamás, Felde Imre

Abstract

In order to characterize topologically the polyhedral microstructure of single-phase alloys investigations have been performed on 3-dimensional cellular models. These artificially constructed cellular models are generated from a finite set of space filling convex combinatorial polyhedra (grains). It is shown that the appropriately selected topological shape factors can be efficiently used for the quantitative characterization of computer-simulated microstructures of various types.

1. Bevezetés

A fémötvözetek poliéder alakú szemcsékből álló szövetszerkezetének kvantitatív minősítésére széles körben alkalmazzák a sztereológiai módszerekkel meghatározott különféle típusú alaktényezőket. Ezeket többnyire a mikroszerkezet ún. metrikus geometriai jellemzőiből (felület, térfogat, stb.) szokás származtatni. Mivel a valóságos szemcsék alakja meglehetősen szabálytalan, ezért számos esetben ezek egyszerű geometriai alakzatokkal (gömb, ellipszoid, kocka, stb.), nem modellezhetők, következésképpen a hagyományos metrikus geometriai alapadatok meghatározása is problematikus. Az említett nehézségek azonban kiküszöbölhetők, ha a szemcserendszer topológiai jellemzőit használjuk fel alaktényező definíálására. Szimulációs vizsgálatok eredményeire támaszkodva megmutatjuk, hogy az újonnan bevezetett „topológiai alakjellemzők” eredményesen alkalmazhatók a mikroszerkezet kvantitatív kritériumon alapuló minősítésére, osztályozására.

2. A 3-dimenziós mikroszerkezetre jellemző alapvető topológiai összefüggések

Vizsgálatainkban a 3-D mikroszerkezetet ún. kombinatorikus poliéderek egy végtelen rendszerével (celluláris rendszerrel) modelleztük. Ennek sajátossága, hogy az egymással szomszédos poliéderek a teret hézagmentesen töltik ki. Feltételeztük egyrészt, hogy az ily módon generált sejtszisztéma a tér 3-irányában periodikus, másrészt létezik egy olyan elemi cella, amely a periodikus geometriai

szerkezetet topológiai szempontból tökéletesen reprezentálja. Elemi cellának célszerű a kocka-alakú legkisebb térfogatú cellát (LT-cellát) választani, ami egyszerűsíti a vizsgálatokat. Ez esetben igazolható, hogy az LT-cellában elhelyezkedő poliéderek alkotta periodikus sejt rendszerre (PS-rendszere) érvényes az alábbi Euler-egyenlet [1]:

$$-N + F - E + V = 0. \tag{1}$$

ahol V a poliéderek csúcsszáma, E az élek száma, F a lapok száma és N pedig a poliéderek (cellák) száma. A fentiekből következik, hogy e négy geometriai jellemző közül csupán három független.

A PS-rendszert általában véges sok, különböző lapszámú poliéder alkotja. A cellák teljes száma $N = \sum N_f$, ahol N_f az f -lapszámú poliéderek száma. Nyilván $f \geq 4$, ugyanis a legkisebb lapszámú poliéder a tetraéder. A PS-rendszerben a cellák átlagos $\langle f \rangle$ lapszáma:

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_f f N_f = \sum_f f p_f \tag{2}$$

képlettel határozható, ahol $p_f = N_f/N$ az N_f lapu cellák relatív gyakorisága. Hasonlóképpen számítható, az f -lapszám második momentuma az $\langle f^2 \rangle = \sum f^2 p_f$ formulával. A lapszám $\mu(f)$ varianciáját (azaz szórásnégyzetét) szokásos módon a $\mu(f) = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$ képlettel határozhatjuk meg. A PS-rendszer ún. komponens-számát $\Phi = \sum \text{sgn}(p_f)$ összefüggéssel értelmezzük. A komponens-szám azonos a sejtrendszert felépítő különböző lapszámú poliéderek számával. Azokat a sejtrendszereket, amelyek azonos f -lapszámú poliéderekből épülnek fel, (azaz amelyekre $\Phi=1$ teljesül), lap-homogén sejtrendszereknek nevezzük.

Tekintve, hogy a PS-rendszert térkitöltő konvex poliéderek alkotják, ebből következik, hogy egy lapon pontosan két poliéder-cella érintkezik egymással, továbbá egy élre legalább három poliéderlap, és egy csúcsra legalább négy él és legalább három poliédercella illeszkedik. Egy X csúcsot r -valenciájúnak nevezünk, ha az X csúcsra pontosan r -számú él illeszkedik. Az egyes csúcsokra azonban különböző számú él illeszkedhet, ezért a PS-rendszerben a csúcsok átlagos $[r]$ valenciaszámát az

$$[r] = \frac{1}{V} \sum_r r V_r \tag{3}$$

összefüggés definiálja, ahol V_r a r -valenciájú csúcsok száma. Amennyiben minden csúcs r valenciája azonos ($r=R=4,5,\dots$ minden csúcsra vonatkozóan) a PS-rendszert R -valenciájú, reguláris rendszernek nevezzük.

Analóg módon egy Y élet k -fokúnak nevezünk, ha az Y élben pontosan k -számú lap találkozik.

Következésképpen egy PS-rendszerben az élek átlagos $[s]$ fokszáma:

$$[\varepsilon] = \frac{1}{E} \sum_k k E_k \quad (4)$$

ahol E_k a k -fokú élek száma. Igazolható, hogy a sejtrendszerben a poliéderlapok átlagos $[n]$ oldalélszámát meghatározhatjuk az

$$[n] = \frac{1}{F} \sum_k F_k = \frac{E}{F} [\varepsilon] = [\varepsilon] \frac{[r](\langle f \rangle - 2)}{\langle f \rangle([r] - 2)} \quad (5)$$

képlettel, ahol F_k a k -oldalél számú lapok száma, amelyekre $\sum F_k = F$ teljesül.

Mivel poliéderek legkisebb oldalélszámú lapja háromszöglap, ezért az n oldalélszám minimális értéke 3, következésképpen tetraéderekből illetve oktaéderekből álló sejtrendszerekre $[n]=3$. Az előző megfontolásokból bármely PS-rendszerre $[r] \geq 4$, $\langle f \rangle \geq 4$ és $[\varepsilon] \geq 3$ és $[n] \geq 3$ becslések adódnak.

Továbbá könnyen igazolható, hogy a topológiai paraméterekre nézve teljesülnek a $2E = [r]V \geq 4V$, $2F = N \langle f \rangle \geq 4N$ valamint $3 \leq [n] \leq 6 - 12/\langle f \rangle < 6$, a $3 \leq [\varepsilon] \leq 6 - 12/[r] < 6$ és $9 < [n][\varepsilon] < 36$ összefüggések [2].

3. Topológiai alaktényezők származtatása

A 3-dimenziós poliéderes mikroszerkezet strukturális minősítése céljából a négy topológiai alapparaméter (nevezetesen V , E , F és N) felhasználásával különféle alakjellemzőket definiáltunk. Az alaktényezők „szelektivitását”, azaz diszkriminációs képességét számítógéppel generált sejtrendszereken teszteltük. Részletes vizsgálatokat az alábbi négy (Λ , CI , Δ és Ψ) topológiai alaktényezővel végeztünk.

$$\Lambda = \frac{F - E}{E} = -1 + \frac{[\varepsilon]}{[n]} = \frac{2([r] - \langle f \rangle)}{[r](\langle f \rangle - 2)} \quad (6)$$

$$CI = \frac{N + F + E + V}{N} = 2 + \frac{2E}{N} = 1 + \frac{\langle f \rangle}{2} + \frac{1}{2}(\langle f \rangle - 2) \left(\frac{[r] - 2}{[r] + 2} \right) \leq 2\langle f \rangle - 2 \quad (7)$$

$$\Delta = \frac{FE}{4VN} = \frac{\langle f \rangle [r]}{16} \geq 1 \quad (8)$$

$$\Psi = \frac{N\langle f^2 \rangle}{8F} = \frac{\langle f^2 \rangle}{4\langle f \rangle} = \frac{1}{4} \left(\frac{\mu(f)}{\langle f \rangle} + \langle f \rangle \right) \geq \frac{\langle f \rangle}{4} \geq 1 \quad (9)$$

A fenti alaktényezőkre nézve, különféle egyenlőtlenségek állnak fenn, ezek többsége könnyen igazolható. Többek között belátható, hogy a A topológiai alaktényezőre érvényes

$$-\frac{1}{2} < \frac{\langle f \rangle - 4}{4 - 2\langle f \rangle} \leq \Lambda \leq 1 - \frac{4}{[r]} < 1 \quad (10)$$

becslés. E szerint $\Lambda \geq 0$, ha $[r] \geq \langle f \rangle$, valamint $\Lambda \leq 0$, ha $[r] \leq \langle f \rangle$. Következésképpen adódik, hogy $\Lambda = 0$, akkor és csak akkor, ha $\langle f \rangle / [r] = [n] / [\varepsilon] = 1$.

4. Poliéderezes sejtrendszerek topológiai vizsgálata

A szakirodalomban nagy számban találhatók térkitöltő poliéderekből felépített különféle periodikus sejtrendszerek, amelyek előnyösen felhasználhatók a topológiai alaktényezők hatékonyságának tesztelésére [3,4]. Ezek közül kiválasztottuk egy sorozatot, de magunk is generáltunk mintegy húsz sejtrendszert vizsgálati célra. Az 1. ábrán példaként bemutatott hat sejtrendszer a legismertebbek közé tartozik [3,4].

A 14K jelű rendszer lap-homogén, ugyanis geometriailag azonos típusú poliéderek halmaza. E rendszer alapját képező 14-lapú, ún. Kelvin-poliéder sajátossága, hogy felszín-térfogat viszony tekintetében leginkább „használt” a gömbhöz valamennyi térkitöltő poliéder között. A W17 és W18 rendszer két különböző típusú, a W12, W13 és W16 rendszer pedig három különböző típusú poliédert tartalmaz. További hat eltérő jellegű, számítógéppel konstruált sejtrendszer kocka alakú egységcelláját szemlélteti a 2. ábra.

Truncated octahedra 14K

Model W12

Model W13

Model W16

Model W17

Model W18

1. ábra A legismertebb periodikus sejtrendszerek [4]

Mint megállapítható, közülük az első öt egyetlen fajta poliéderből felépülő lap-homogén rendszer. Nevezetesen, MT-4A tetraéderekből, MC-6 kockákból, XA-5, XB-5 és XC-5 pedig kizárólag ötlapú poliéderekből generált sejtrendszer. Az X-56 jelű sejtrendszer kétkomponensű, 5 és 6 lapú poliéderek

alkotják. A vizsgálatokba bevont, összesen 21 sejtrendszer topológiai jellemzőit, köztük a négy topológiai alaktényező számított értékeit az 1. táblázat összesíti. A topológiai alaktényezők tesztelése során kapott vizsgálati eredményeket a 3-6. ábrák diagramjai szemléltetik.

MT - 4A

MC - 6

XA - 5

XB - 5

XC - 5

X - 56

2. ábra A vizsgálatokhoz alkalmazott, számítógéppel előállított kocka alakú egységcellák

Rendszer (kód)	Poliéderek lapszáma	Topológiai jellemzők							
		$\langle f \rangle$	[n]	[r]	[ε]	Cl	Λ	Ψ	Δ
C-6	6	6	4	6	4	8	0	1.5	2.25
H-8	8	8	4.5	5	3.6	12	-0.2	2	2.5
D-12R	12	12	4	5.3333	3	18	-0.25	3	4
D-12E	12	12	4.667	4.5	3.111	20	-0.333	3	3.375
14K	14	14	5.143	4	3	26	-0.417	3.5	3.5
MT-4A	4	4	3	14	5.143	4.333	0.714	1	3.5
MT-4B	4	4	3	11.6	4.965	4.417	0.655	1	2.9
MC-6	6	6	4	5.111	3.652	8.571	-0.087	1.5	1.917
MO-8	8	8	3	11	3.273	9.333	0.091	2	5.5
XA-5	5	5	3.6	8	4.5	6	0.25	1.25	2.5
XB-5	5	5	3.2	11	4.364	5.667	0.364	1.25	3.438
XC-5	5	5	3.467	8	4.333	6	0.25	1.25	2.5
X-56	5.6	5.333	3.75	7	4.286	6.667	0.143	1.344	2.333
W12	6,14,26	11.6	3.724	6	3	16.4	-0.194	4.224	4.35
W13	6,14,26	11.6	4.966	4	3	21.2	-0.396	4.224	2.9
W16	8,14,26	14	5.143	4	3	26	-0.417	4.464	3.5
W17	8,14	11	4.364	5	3.2	17	-0.267	2.955	3.438
W17A	8,14	11	4.364	5	3.2	17	-0.267	2.955	3.438
W17B	8,14	11	3.273	8	3	14	-0.083	2.955	5.5
W18	10,26	14	5.143	4	3	26	-0.417	4.357	3.5
W-P	12,14	13.5	5.111	4	3	25	-0.413	3.389	3.375

1. táblázat A vizsgált sejtrendszerek topológiai jellemzői

3. ábra A CI komplexitási index és Λ topológiai alaktényező közti összefüggés

4. ábra A Ψ és Λ topológiai alaktényezők közti összefüggés

5. ábra A Δ és Λ topológiai alaktényezők közti összefüggés

6. ábra A CI komplexitási index és a Ψ topológiai alaktényező közti összefüggés

5. Összefoglalás, következtetések

A sejttrendszerek strukturális jellemzése céljából folytatott vizsgálatok legfontosabb eredményei a következők:

- A kiválasztott négy topológiai alaktényező mindegyike alkalmas a vizsgált sejttrendszerek topológiai szerkezetének kvantitatív jellemzésére, minősítésére. A négy topológiai jellemző között mutatkozik némi sztochasztikus jellegű kapcsolat, ami a számított R_c lineáris korrelációs tényező is tükröz. Mint megállapítható, a legnagyobb korrelációs tényező a Ψ és CI mennyiségek között adódik ($R_c = 0.929$, míg a legkisebb a Λ és Δ mennyiségek között ($R_c = -0.131$). Mindebből következik, hogy a négy topológiai alaktényező között a lineáris jellegű függvénykapcsolat kizárható.
- A vizsgált sejttrendszerek között található három különleges tulajdonságú, (nevezetesen a 14K, W16 és W18 sejttrendszerek), amelyekre nézve $\langle f \rangle$, $[n]$, $[r]$, $[\varepsilon]$, CI , Λ és Δ értéke azonos. Következésképpen mindhárom sejttrendszerre: $\langle f \rangle=14$, $[n]=36/7=5.143$, $[r]=4$, $[\varepsilon]=3$, $CI=26$, $\Lambda=-0.417$ és $\Delta=3.5$ adódik. Valószínűnek tűnik az a sejtés, hogy nem létezik olyan sejttrendszer, amelyre $\langle f \rangle$, $[n]$ és CI nagyobb lenne, mint $\langle f \rangle=14$, $M=36/7=5.143$ és $CI=26$. Úgy véljük, - bár erre jelenleg nincs bizonyíték -, hogy e három topológiai mennyiség egyfajta felső korlátnak, azaz elméleti határértéknek tekinthető.

Irodalom

- [1] H.S.M. Coxeter: Regular Polytopes, Macmillan, New York, 1963, p. 72-73.
- [2] T. Réti and K. Böröczky: Topological Characterization of Cellular Structures, in preparation.
- [3] R. Williams: The Geometrical Foundation of Natural Structure: A Source Book of Design. New York, Dove, 1979.
- [4] J. Chraponski, M. Malinski and J. Cwajna: Stereological parameters of model polycrystalline structures built from polyhedra of various shape and size. Acta Stereologica, Vol. 13, Part 3, (1994) p. 299-303.

Dr. Réti Tamás egyetemi tanár

BMF-BGK, Anyag és Alakítástechnológiai Tanszék, Budapest 1081 Népszínház u. 8.

Tel: (+36-1) 314-1438; E-mail cím: reti@zeus.banki.hu

Dr. Bagyinszki Gyula főiskolai docens

BMF-BGK, Anyag és Alakítástechnológiai Tanszék; Budapest 1081 Népszínház u. 8.

Tel: (+36-1) 314-1438; E-mail cím: bagyula@zeus.banki.hu

Felde Imre

Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Alapítvány, Anyagtudományi és Technológiai Intézet
H-1116 Budapest, Fehérvári út 130.

Tel: (+36 1) 463 0500, Fax: (+36 1) 463 0529

felde@bzaka.hu