

# XII. FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2007. március 16–17.

## 3D PERIODIKUS SEJTRENDSZEREK TOPOLÓGIAI JELLEMZÉSE

Bitay Enikő, Réti Tamás

### Abstract

Combinatorial properties of 3D space filling cellular system are investigated. By introducing new topological shape indices a possible classification of periodic cellular systems is proposed. It is demonstrated that using topological shape factors called asymmetry ( $\Lambda$ ) and consistency (RE), space-filling, triply periodic cellular systems of different topological structure can be classified.

### Összefoglaló

Három-dimenziós térkitöltő celluláris rendszerek kombinatorikus tulajdonságait vizsgáltuk. Új típusú topológiai alaktényezők bevezetését követően kísérletet tettünk a 3D periodikus celluláris rendszerek egy lehetséges osztályozására. Megmutattuk, hogy két topológiai alaktényező az ún. aszimmetria együttható és a konzisztencia együttható felhasználásával a különböző strukturájú celluláris rendszerek egyfajta osztályozása megvalósítható.

### 1. Bevezetés

Az anyagtudomány számos területén az elmúlt évtizedben előtérbe került a celluláris szerkezetű anyagok geometriai felépítésének vizsgálata, ezek számszerű kritériumok alapján való minősítése és osztályozása. A végtelen kiterjedésű sejtrendszereket konvex poliéderek (ún. cellák vagy sejtek) egy véges halmazából konstruálják a 3-dimenziós tér hézagmentes és egyrétű lefedésével.

A következőkben azon vizsgálatok néhány eredményét ismertetjük, amelyek 3D periodikus sejtrendszerek (triply periodic cellular systems, ún. TP rendszerek) egy lehetséges osztályozására irányulnak. Megmutatjuk, hogy a TP rendszerek kombinatorikus jellemzésére és kvantitatív kritériumok szerinti osztályozására előnyösen felhasználhatók az ún. flag-vektor komponenseiből származtatott új típusú topológiai alaktényezők, mindenek előtt az aszimmetria és a konzisztencia együtthatók.

## 2. TP rendszerek kombinatorikus szerkezetének jellemzése flag-vektorral

Feltételeztük, hogy a vizsgált TP rendszer a tér 3-iránya szerint periodikus, következésképpen hozzárendelhető egy véges térfogatú geometriai tartomány, az ún. translációs egység (translation unit), amelynek ismeretében, illetve segítségével a sejtsziszter előállítható, azaz generálható. Az egyértelműség végett azt is feltételezzük, hogy a translációs egység (amely célszerű módon egy 3D paralelepipedonnal is reprezentálható), minimális térfogatú. A translációs egység sajátossága, hogy véges sok konvex poliéder (cella, sejt) alkotja, és ezekre, mint ismeretes, érvényes az alábbi Euler-egyenlet [1-6]:

$$-f_0 + f_1 - f_2 + f_3 = 0 \quad (1)$$

Az (1) egyenletben  $f_0$  a poliéderek csúcscszáma,  $f_1$  az élek száma,  $f_2$  a lapok száma és  $f_3$  pedig a poliéderek (cellák) száma. Hangsúlyozni kell, hogy az (1) egyenlet formailag tökéletesen megegyezik a 4-D politopokra vonatkozó Euler-formulával, és egyben alapját képezi a 4-D politopok és a 3-dimenziós TP rendszerek között fennálló analógiáknak, ismert összefüggéseknek is [1-6].

Fontos hangsúlyozni, hogy mindazon topológiai törvényszerűségek, amelyek a 4-D politopokra vonatkozóan már korábbról ismertek, lényegében változtatás nélkül kiterjeszthetők (konvertálhatók) a 3-dimenziós TP rendszerekre is. Ez lényegesen megkönnyíti az utóbbiak vizsgálatát, kvantitatív jellemzését. A minimális térfogatú translációs egységre vonatkozóan definiáljuk az általa tartalmazott  $f$  lapszámú poliéderek átlagos  $\langle v(f) \rangle$  csúcscszámát, valamint egy közös csúcsra illeszkedő poliéderek átlagos  $[c]$  számát. Felhasználva, hogy e két topológiai invariáns között fenn áll

$$f_3 \langle v(f) \rangle = f_0 [c] \quad (2)$$

ismert azonosság, definiáljuk egy adott TP rendszer ( $\Pi$ ) ún. flag-vektorát az

$$\text{Flag}(\Pi) = (f_0, f_1, f_2, f_3, f_{03}) \quad (3)$$

összefüggéssel, ahol

$$f_{03} = f_3 \langle v(f) \rangle = f_0 [c] \quad (4)$$

Ez a formula minden tekintetben ekvivalens a 4-D polytopokra definiált flag-vektorral [1-5].

Példaként említjük, hogy a szabályos kockákból konstruált „standard” C-6 jelű TP rendszer Flag-vektora: (1,3,3,1,8). A flag-vektor sajátossága, hogy öt komponenséből generálhatók mindazon illeszkedési koefficiensek (incidence numbers), amelyek hasznos információkkal szolgálnak a TP rendszerek topológiai struktúrájáról. A már említett  $\langle v(f) \rangle$  és  $[c]$  mennyiségeken kívül, ezek közé tartoznak a következők:

a) Az  $f \geq 4$  lapszámú poliéderek (cellák) átlagos  $\langle f \rangle$  lapszáma

$$\langle f \rangle = \frac{2f_2}{f_3} \geq 4 \quad (5)$$

b) Az Euler-formulából adódóan az  $f \geq 4$  lapszámú poliéderek (cellák) éleinek átlagos  $\langle e(f) \rangle$  száma

$$\langle e(f) \rangle = \langle f \rangle + \langle v(f) \rangle - 2 = \frac{2f_2 + f_{03}}{f_3} - 2 = \frac{f_{03} + 2(f_1 - f_0)}{f_3} \geq 6 \quad (6)$$

c) A csúcsok átlagos  $[r]$  fokszáma, azaz egy adott csúcsra illeszkedő élek átlagos száma

$$[r] = \frac{2f_1}{f_0} \geq 4 \quad (7)$$

d) A poliéderek közös lapjait alkotó  $n$  oldalszámú sokszögek átlagos  $[n]$  oldalszáma

$$[n] = \frac{2\langle e(f) \rangle}{\langle f \rangle} = 2 \frac{\langle f \rangle + \langle v(f) \rangle - 2}{\langle f \rangle} = \frac{f_{03} + 2(f_1 - f_0)}{f_2} \geq 3 \quad (8)$$

e) Az élek átlagos fokszáma  $[\varepsilon]$ , amely egy adott élre illeszkedő poliéderek átlagos száma

$$[\varepsilon] = \frac{f_2}{f_1} [n] = \frac{f_3 \langle e(f) \rangle}{f_1} = \frac{f_{03} + 2(f_1 - f_0)}{f_1} \geq 3 \quad (9)$$

Belátható, hogy fentebb definiált mennyiségekre érvényesek az alábbi

$$3 \leq [n] \leq 6 - \frac{12}{\langle f \rangle} < 6 \quad (10)$$

és

$$3 \leq [\varepsilon] \leq 6 - \frac{12}{[r]} < 6 \quad (11)$$

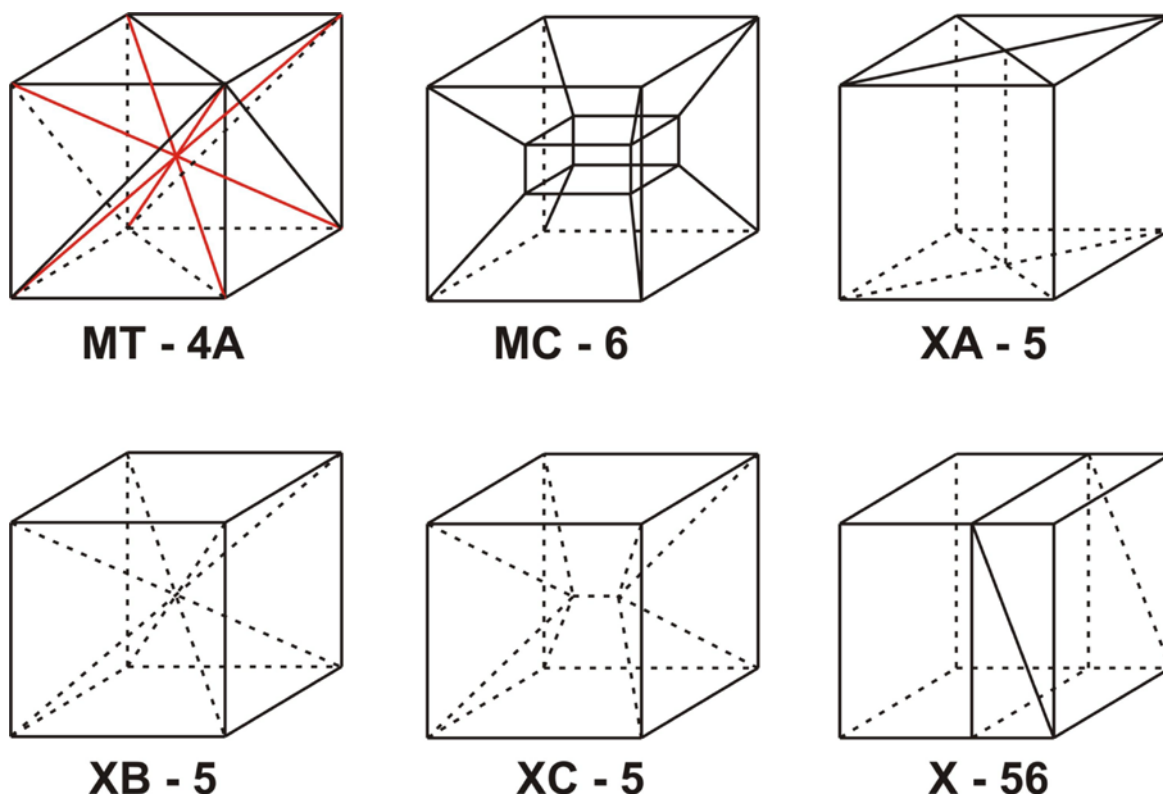
egyenlőtlenségek. Bizonyítható továbbá, hogy

$$[n] = 6 - \frac{12}{\langle f \rangle} \quad (12)$$

illetve

$$[\varepsilon] = 6 - \frac{12}{[r]} \quad (13)$$

ha minden cella trivalens (egyszerű) poliéder. Az 1. ábrán néhány egyszerű TP rendszer translációs egységét tüntettük fel. A megfelelő flag-vektorokat, valamint incidencia együtthatókat az 1. táblázat tartalmazza.



*1. ábra. Néhány egyszerű TP rendszer translációs egysége*

Az MT-4A rendszer kizárólag tetraéderekből, XA-5, XB-5 és XC-5 rendszerek pedig ötlapú poliéderekből áll. Az MC-6 rendszer cellái kombinatorikus kockák, míg az X-56 rendszer translációs egységét két ötlapú poliéder és egy kocka alkotja. Az 1. táblázatban C-6 a kongruens kockákból felépített standard TP rendszert jelöli.

*1. táblázat. Néhány TP rendszer flag-vektora és incidencia koefficiensei*

Kód	$f_0$	$f_1$	$f_2$	$f_3$	$f_{03}$	$\langle f \rangle$	$[r]$	$[n]$	$[\epsilon]$
C-6	1	3	3	1	8	6	6	4	4
C-8	3	12	12	3	22	8	8	3,333	3,333
MT-4A	2	14	24	12	48	4	14	3	5,143
MC-6	9	23	21	7	56	6	5,111	4	3,652
XA-5	2	8	10	4	24	5	8	3,6	4,5
XB-5	2	11	15	6	30	5	11	3,2	4,364
XC-5	3	12	15	6	34	5	8	3,467	4,333
X-56	2	7	8	3	20	5,333	7	3,75	4,286

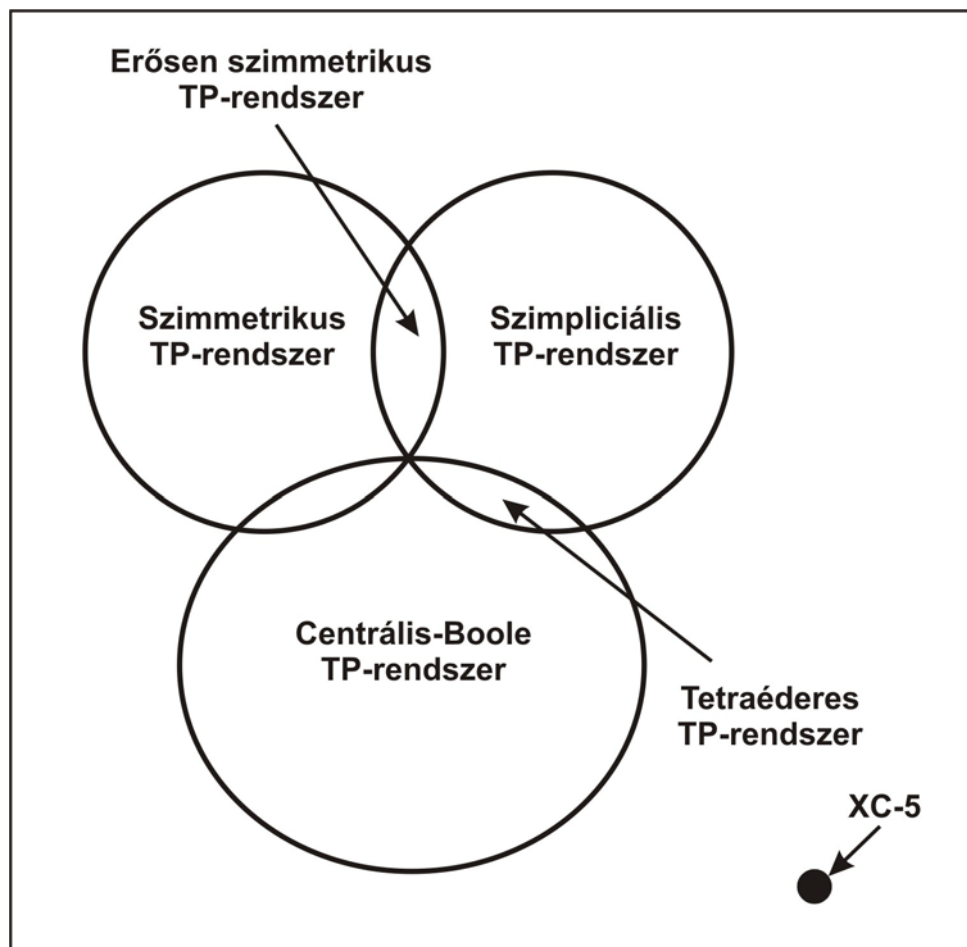
Az illeszkedési együtthatók sajátossága, hogy ezek mindegyike egyértelmű módon definiált egy TP rendszerre nézve, és valamennyi számítható a flag-vektor öt komponense ismeretében. Mindazonáltal fontos megemlíteni, hogy léteznek kombinatorikus különböző típusú TP rendszerek, amelyek azonos

flag-vektorral jellemezhetők. Mindazonáltal – amint az demonstrálni fogjuk –, a flag-vektor komponenseiből származtatott illeszkedési együtthatók, valamint ezek függvényeként generált „topológiai alaktényezők” hasznos kiindulási alapul szolgálnak a TP rendszerek egyfajta, kvantitatív kritériumon alapuló osztályozásához.

A TP rendszerek osztályozása végett következő definíciókat vezetjük be. Egy TP rendszert akkor nevezünk

- 1) kiegyenlítettnek (balanced), ha minden egyes élben pontosan három poliéder találkozik, azaz minden él fokszáma 3, ( $[\varepsilon] = 3$ ).
- 2) szimpliciálisnak, ha minden cella szimpliciális poliéder, azaz minden egyes poliéder valamennyi lapja háromszög, ( $[n] = 3$ ).
- 3) centrális-Boole típusúnak (center-boulean) ha minden cella trivalens, (egyszerű) poliéder.
- 4) szimmetrikusnak, ha a flag-vektor komponenseire  $f_1 = f_2$ ,  $f_0 = f_3$  teljesül. Szimmetrikus rendszerre  $\langle f \rangle = [r]$  valamint  $\langle v(f) \rangle = [c]$  és  $[n] = [\varepsilon]$  érvényes.
- 5) erősen szimmetrikusnak, ha minden poliéder lapja háromszög és minden élre pontosan három poliéder illeszkedik, azaz  $[n] = [\varepsilon] = 3$  teljesül. Ebből adódik, hogy egy TP rendszer akkor és csak akkor erősen szimmetrikus, ha kiegyenlített és szimpliciális. (Itt jegyezzük meg, hogy az erősen szimmetrikus TP rendszerek definíciója tökéletesen kompatibilis az extrémális tulajdonságú 4-dimenziós, ún.  $2s_2s$  (2-simple, 2-simplicial) politopok definíciójával [1-3]).
- 6) telítettnek (saturated), ha a flag-vektor komponenseire érvényes az  $f_0 + f_1 + f_2 + f_3 = f_{03}$  azonosság.
- 7) túltelítettnek (oversaturated), ha a flag-vektor komponenseire az  $f_0 + f_1 + f_2 + f_3 < f_{03}$  teljesül.
- 8) R-regulárisnak, ha minden csúcsra pontosan R ( $R \geq 4$ ) számú él illeszkedik, azaz minden csúcs fokszáma R. Minden 4-reguláris TP rendszer centrális-Boole típusú és kiegyenlített is.
- 9) stabilnak, ha minden egyes csúcs négy poliéder közös csúcsa, azaz  $[c] = 4$ . Következésképpen adódik, hogy egy TP rendszer akkor és csak akkor stabil, ha 4-reguláris, ezért egy stabil rendszer szükségképpen kiegyenlített és centrális-Boole típusú is.
- 10) tetraédesnek (tetrahedral), ha minden cella tetraéder. Mivel a tetraéder az egyetlen poliéder, amely szimpliciális és trivalens is, ezért minden tetraédes rendszer egyben centrális-Boole típusú és szimpliciális is.

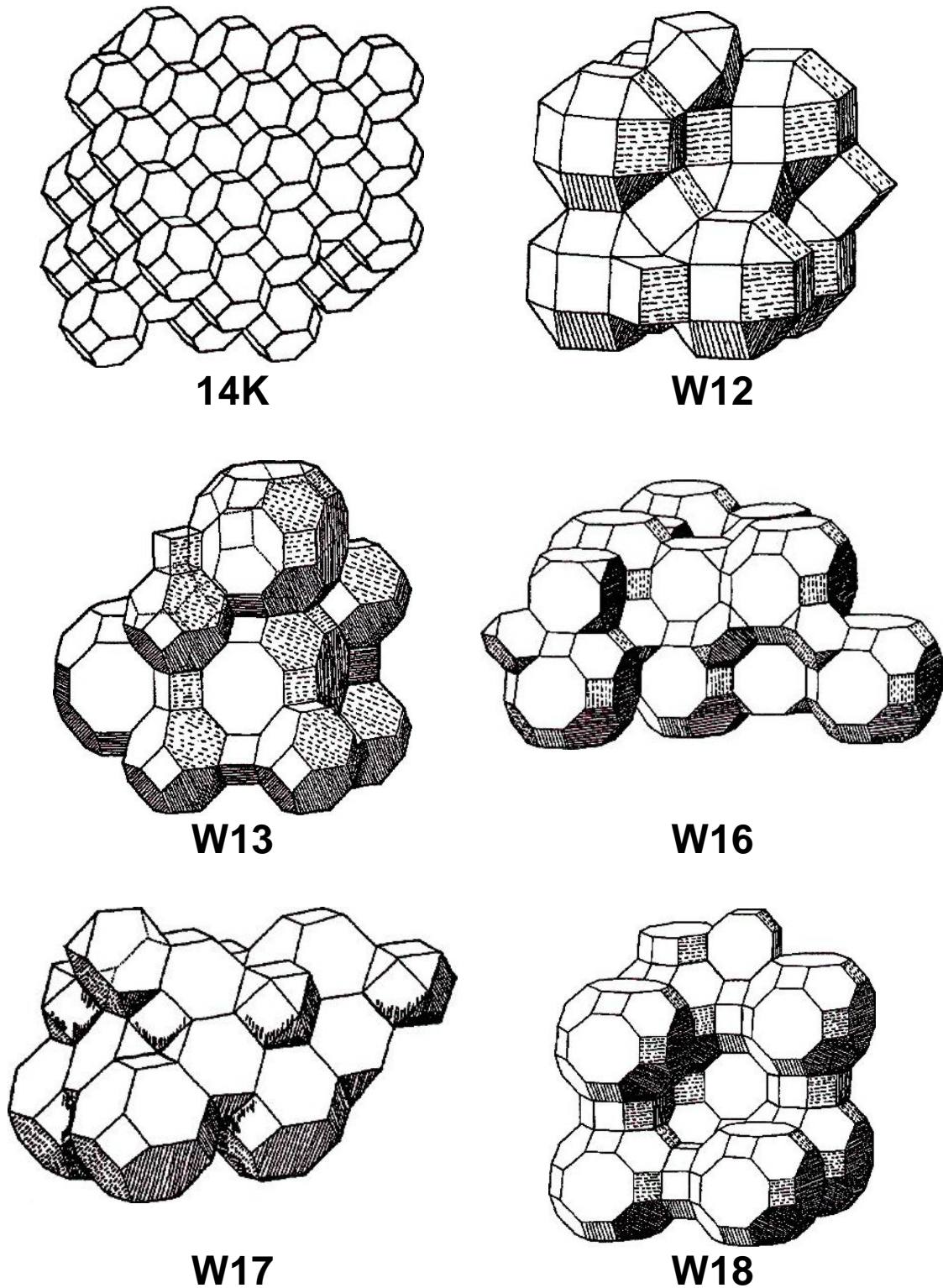
A TP rendszerek fentebb definiált osztályai közötti kapcsolatokat (lehetséges átfedéseket) a 2. ábra szemlélteti. Mint megállapítható, a XC-5 rendszer nem tartozik a fentebb definiált speciális struktúrájú TP rendszerek egyikébe se.



2. ábra. TP rendszerek egyes osztályai közötti kapcsolat szemléltetése

A 3. ábrán néhány jól ismert TP rendszer látható [9,10]. Ezek közül a legegyszerűbb a kongruens, 14-lapú Kelvin poliéderekből konstruált 14K rendszer, ez centrális Boole típusú, kiegyenlített és 4-reguláris, következésképpen stabil is.

A W17 és W18 rendszereket két különböző típusú, a W12, W13 és W16 rendszereket pedig három különböző típusú poliéder alkotja. W17 egy 5-reguláris, nem kiegyenlített rendszer. A W12 rendszer kiegyenlített és 6-reguláris. W13, W16 és W18 stabil (4-reguláris, centrális Boole típusú, kiegyenlített) rendszereket reprezentálnak.



3. ábra. Példák ismert TP rendszerekre

Erősen szimmetrikus TP rendszerre példa a 14K rendszer bipiramidális felbontásával származtatott 14K-BIP rendszer, ennek cellái kizárólag kettős-gúla típusú poliéderek (bipiramid). Erősen

szimmetrikus TP rendszerek könnyen konstruálhatók stabil (4-reguláris) rendszerből kiindulva. A 14K-BIP rendszer a következő módon származtatható a 14K rendszer alkalmas transzformációjával: Helyezzünk minden egyes 14-lapú Kelvin poliéder súlypontjába egy új csúcsot, majd ezen új csúcsok felhasználásával állítsunk elő kettős-gúla típusú szimpliális poliédereket, amelyeknek bázisa a szomszédos Kelvin poliéderek szabályos 4- illetve 6-szögű közös lapjai lesznek. Így minden egyes Kelvin poliéder helyére pontosan három darab 8 lapú oktaéder, és négy darab 12 lapú, hexagonális alapú kettős-gúla kerül.

Telített rendszerre példa a C-6 rendszer, amely kongruens kockákból áll, (ez szimmetrikus rendszer is), valamint az XA-5 rendszer, amely 5-lapú, kongruens és trivalens poliéderekből áll, és az X-56 rendszer, amely 5 és 6 lapú trivalens poliéderekből épül fel (lásd. 1. és 2. táblázatot). Könnyen belátható, hogy végtelen sok kombinatorikusan különböző telített TP rendszer létezik.

Itt jegyezzük meg, hogy létezik olyan szimmetrikus TP rendszer, amely nem centrális Boole típusú, azaz amely nem-trivalens (nem egyszerű) poliéderekből áll. Ilyen rendszer a C-8 jelű, amely a következő módon konstruálható (lásd 1. és 2. táblázat adatait). Tekintsük kiindulásul az XC-5 rendszert, amelynek translációs egysége (1. ábra), 6 darab ötlapú, de kétféle típusú poliédert tartalmaz. Ezen translációs egység sajátossága, hogy felbontható 3 darab 8-lapú poliéderre is, amelyek közül az egyiknek 6 csúcsa van (ez egy oktaéder) a másik kettőnek pedig 8 csúcsa van (e két utóbbit 4 háromszöglap és 4 négyszöglap határolja). Az így származtatott C-8 rendszer szimmetrikus lesz, flag-vektora: (3, 12, 12, 3, 22).

Mint ismeretes, a konvex poliéderekből felépített TP rendszereknek definiálható a duális. Jelölje egy tetszőleges  $\Pi$  periodikus celluláris rendszer duálisát  $\Pi^{\text{dual}}$ . Ekkor a duális TP rendszer flag-vektora:

$$\text{flag}(\Pi^{\text{DUAL}}) = (f_3, f_2, f_1, f_0, f_{03}) \quad (14)$$

A 4-reguláris rendszerek duálisai a tetragonális rendszerek, a szimpliális rendszerek duálisai kiegyenlített (balanced) rendszerek, és fordítva. Fontos felismerés, hogy az erősen szimmetrikus rendszerek kivételes sajátossága, hogy ezek duálisai is erősen szimmetrikusak.

Ha két TP rendszer flag-vektora azonos, abból még nem következik, hogy a két rendszer struktúrája kombinatorikus ekvivalens. A TP rendszerek self-dualitása (öndualitása) meglehetősen ritka jelenség. Még az erősen szimmetrikus TP rendszerekre sem igaz, hogy ezek self-duálisak lennének, példa erre a 14K BIP rendszer. Könnyen igazolható, hogy a 14K BIP rendszert és ennek duálisát kombinatorikusan különböző típusú szimpliális poliéderek alkotják. Self-duál típusú viszont a kongruens kockákból álló C-6 rendszer, amely mint említettük, szimmetrikus, centrális-Boole típusú és telített.

Szimmetrikus és a telített rendszerek esetében csak a flag-vektorokra érvényes a self-dualitás, ami a



definíciókból következően azt jelenti, hogy egy szimmetrikus rendszer duálisa is szimmetrikus, és egy telített rendszerek duálisa is telített.

### 3. TP rendszerekre vonatkozó geometriai egyenlőtlenségek

A TP rendszerekre vonatkozóan számos geometriai egyenlőtlenség vezethető le, ezek többsége - amint később ez példákkal is demonstráljuk – alkalmas arra, hogy belőlük a kombinatorikus szerkezet jellemzésére hivatott ún. topológiai alaktényezőket konstruáljunk.

Felhasználva a (6), (8) és (9) összefüggéseket adódik a

$$\frac{5}{6} > \frac{f_1 + f_2 + f_3}{f_{03} + 2(f_2 - f_3)} = \frac{f_1 + f_2 + f_3}{f_{03} + 2(f_1 - f_0)} = \frac{1}{[\varepsilon]} + \frac{1}{[n]} + \frac{1}{\langle e(f) \rangle} > \frac{1}{3} \quad (15)$$

egyenlőtlenség, amely sajnos „nem éles” egyetlen TP rendszerre nézve sem. Topológiai alaktényezők származtatása céljából elsődlegesen azok az egyenlőtlenségek jönnek számításba, amelyek a TP rendszerek fentebb definiált egyes osztályaira vonatkozóan – speciális esetként – egyenlőség alakját öltik. Ilyen különleges egyenlőtlenségek az alábbiak:

a)

$$f_{03} \leq 4(f_2 - f_3) = 4(f_1 - f_0) \quad (16)$$

amiből következik, hogy

$$f_{03} \leq 2(f_1 + f_2 - f_0 - f_3) \quad (17)$$

Egyenlőség itt kizárólag csak centrális Boole típusú rendszerekre teljesül.

b)

$$f_{03} \geq f_2 + 2f_3 \quad (18)$$

ahol egyenlőség csak szimpliciális rendszerre érvényes ( $[n] = 3$  eset).

c)

$$f_{03} \geq f_1 + 2f_0 \quad (19)$$

ahol egyenlőség csak kiegyenlített rendszerre teljesül ( $[\varepsilon] = 3$  eset).

Itt jegyezzük meg, hogy amennyiben egy TP rendszerre

$$f_{03} < f_1 + 2f_0 \quad (19)$$

teljesülne, ebből már következne, hogy  $[\varepsilon]$  kisebb mint 3, azaz van olyan cella, amely nem konvex poliéder. (Ez esetben létezik olyan él, hol két cella találkozik, az egyik biztosan nem konvex poliéder.)

d)

$$2f_{03} \geq f_1 + f_2 + 2f_0 + 2f_3 \quad (21)$$

$$\frac{2}{3} \geq \frac{(f_1 + f_2)}{f_{03} + 2(f_2 - f_3)} = \frac{(f_1 + f_2)}{f_{03} + 2(f_1 - f_0)} = \frac{1}{\lfloor \varepsilon \rfloor} + \frac{1}{\lfloor n \rfloor} > \frac{1}{3} \quad (22)$$

ahol egyenlőség csak erősen szimmetrikus rendszerre teljesül.

e)

$$2f_{03} \geq f_2 + 6f_3 \quad (23)$$

$$2f_{03} \geq 10f_3 - f_2 \quad (24)$$

$$3 \geq \frac{6(f_2 + f_3)}{f_{03} + 2(f_2 - f_3)} = \frac{6(f_2 + f_3)}{f_{03} + 2(f_1 - f_0)} = \frac{6}{\lfloor n \rfloor} + \frac{6}{\langle e(f) \rangle} > 1 \quad (25)$$

ahol egyenlőség csak tetraéderes rendszerekre teljesül.

f) Telített rendszerekre érvényes az

$$f_{03} = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 \leq 2f_1 + 2f_2 - 2f_0 - 2f_3, \quad (26/a)$$

egyenlőtlenség, amiből következik, hogy minden telített rendszerre:

$$\frac{f_1 + f_2}{f_0 + f_3} \geq 3 \quad (26/b)$$

Továbbá telített rendszerre fenn áll

$$\frac{1}{\lfloor n \rfloor} + \frac{1}{\lfloor \varepsilon \rfloor} = \frac{1}{2} \quad (27)$$

A (26/b) képletben egyenlőséget kapunk, ha a telített rendszer egyben centrális-Boole típusú, azaz trivalens poliéderekből áll. Példa erre az XA-5 rendszer (lásd 1. táblázat). Ennek fordítottja nem igaz, ugyanis léteznek olyan nem-telített TP rendszerek, amelyre a (26/b) összefüggés mégis egyenlőség formájában teljesül. Valószínűleg igaz az a sejtés, hogy minden telített rendszer centrális-Boole típusú. A (27) egyenletből már adódik, hogy túltelített TP rendszerekre  $1/\lfloor n \rfloor + 1/\lfloor \varepsilon \rfloor$  kisebb mint  $1/2$ .

#### 4. TP rendszerek jellemzése topológiai alaktényezőkkel

TP rendszerek kombinatorikus struktúrájának jellemzésére előnyösen használhatók az ún. topológiai alaktényezők, ezek alapul szolgálnak a TP rendszerek kvantitatív kritérium szerinti osztályozásához is. A topológiai alaktényezők, amelyek a flag-vektor komponensei ismertében számíthatók, kétfélek lehetnek: self-duál és nem self-duál típusúak. Nyilván a nem self-duál típusúak diszkriminációs képessége a jobb, ugyanis ezek képesek különbséget tenni egy adott rendszer és annak duálisa között.

##### 4.1 Négy dimenziós politopok osztályozására alkalmazott alaktényezők

Ziegler és munkatársai eredendően 4D politopok stukturális jellemzésére két topológiai alaktényezőt definiáltak, ezek a Fatness (kövérségi együtttható) és a Complexity (komplexitási együtttható) [1-5]. Mindkettő a flag-vektor alapján származtatható, self-duál típusúak, és közvetlenül felhasználhatók TP

rendszerek topológiai szerkezetének minősítésére.

A fatness (FAT) és a complexity (COMP) topológiai alaktényezők az alábbi képletekkel definiáltak:

$$FAT = \frac{f_1 + f_2}{f_0 + f_3} \quad (28)$$

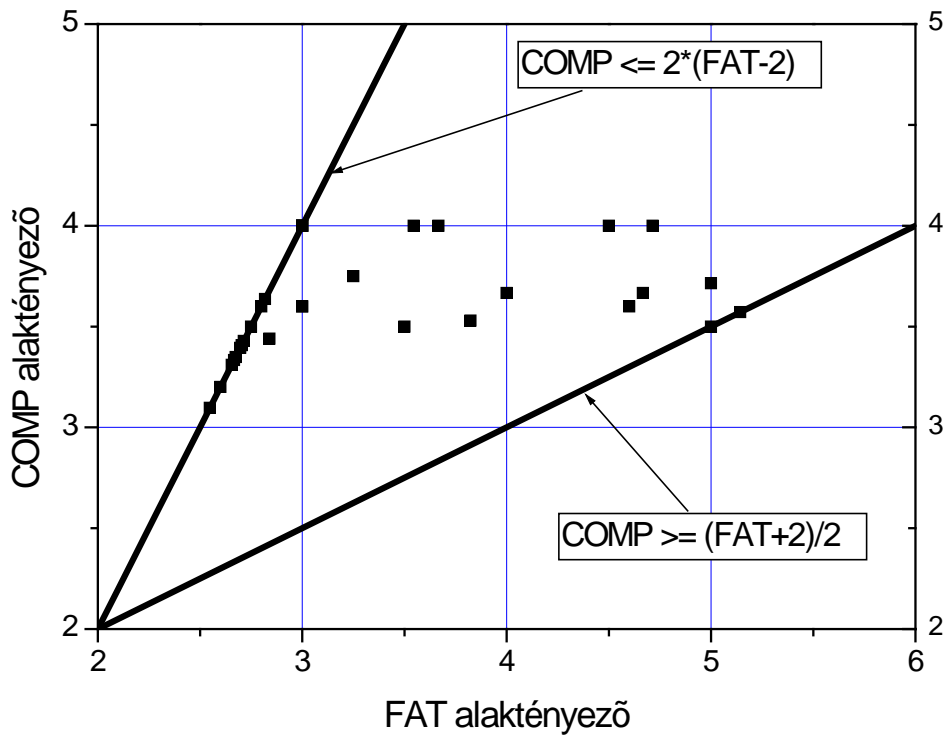
$$COMP = \frac{f_{03}}{f_0 + f_3} \quad (29)$$

Jelenleg is eldöntetlen kérdés, hogy a két mennyiségnek létezik-e felső korlátja [1-5]. Ismert viszont, hogy a két topológiai alaktényezőre érvényesek

$$FAT \leq 2COMP - 2 \quad (30)$$

$$COMP \leq 2FAT - 2 \quad (31)$$

egyenlőtlenségek. A (30) képletben egyenlőség akkor teljesül, ha a 4D politop 2s2s típusú, azaz a TP rendszer erősen szimmetrikus, a (31) képletben pedig egyenlőséget akkor kapunk, ha 4D politop illetve a TP rendszer centrális-Boole típusú [1-4]. Néhány általunk vizsgált TP rendszerre vonatkozóan a két, algebrailag független alaktényező közötti kapcsolatot a 4.ábra szemlélteti. Az ábra diagramjából kitűnik, hogy a FAT és COMP alaktényezők a TP rendszerek szerkezetéről viszonylag kevés információval szolgálnak.



4. ábra. COMP és FAT alaktényezők közötti összefüggés

A FAT és COMP felhasználásával könnyen konstruálhatók más alaktényezők is, többek között olyanok is, amelyeknek létezik alsó és felső korlátja is. Ezek közé tartoznak az alább definiált ZE és ZU alaktényezők. A ZE alaktényezőt a

$$ZE = \frac{2COMP}{2 + FAT} = \frac{2f_{03}}{f_1 + f_2 + 2(f_0 + f_3)} \geq 1 \quad (32)$$

képlettel értelmeztük. A definícióból adódik, hogy  $ZE=1$  egyenlőség akkor és csak akkor teljesül, ha a TP rendszer erősen szimmetrikus. (Négy-dimenziós politopokra vonatkozóan ez azt jelenti, hogy  $ZE=1$ , akkor és csak akkor, ha a politopok  $2s2s$  típusúak [2-3]).

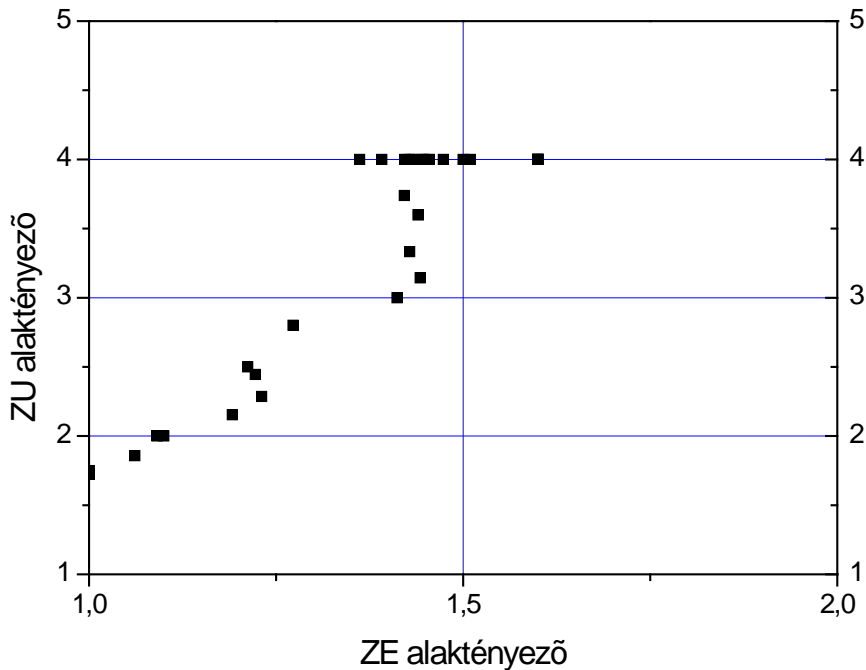
A másik, a ZU alaktényező a

$$ZU = \frac{2COMP}{FAT - 1} = \frac{2f_{03}}{f_1 + f_2 - (f_0 + f_3)} \leq 4 \quad (33)$$

képlettel definiált. Könnyen belátható a (17) képlet felhasználásával, hogy  $ZU=4$ , ha a TP rendszer centrális Boole típusú. A fenti formulákból következik, hogy ZE felülről korlátos, mivel

$$ZE = \frac{2f_{03}}{f_1 + f_2 + 2(f_0 + f_3)} < ZU = \frac{2f_{03}}{f_1 + f_2 - (f_0 + f_3)} = \frac{2 * COMP}{FAT - 1} \leq 4 \quad (34)$$

A ZE és ZU alaktényezők egymástól algebrailag független mennyiségek. Ezt szemlélteti az 5. ábra, amelyen néhány TP rendszerre nézve feltüntettük a két alaktényező számított értékeit.



5. ábra. ZE és ZU alaktényezők közötti összefüggés

Amint az 5. ábrából is kitűnik, a ZE és ZU alaktényezők hátrányos tulajdonsága, hogy a TP rendszerek egymástól való megkülönböztetésére kevésbé alkalmasak, diszkriminációs képességük meglehetősen korlátozott. Ezért az osztályozás céljára hatékonyabb, új típusú alaktényezők származtatására tettünk kísérletet.

#### 4.2 Új típusú alaktényezők TP rendszerek osztályozására

A fentebb vizsgált topológiai alaktényezők (FAT, COMP, ZE, ZU) számított értékeit néhány vizsgált TP rendszerre vonatkozóan a 2. táblázat tartalmazza. Ezek közös sajátossága, hogy mivel self-duál típusúak, ezért a TP rendszerek közötti különbségek kimutatásához nem eléggé érzékenyek.

2. táblázat. Topológiai alaktényezők néhány TP rendszerre vonatkozóan

Kód	$\Lambda$	FAT	COMP	ZE	ZU	RE
C-6	0	3	4	1,6	4	1,778
C-8	0	4	3,667	1,222	2,444	1,235
MT-4A	0,714	2,71	3,429	1,455	4	1,714
MC-6	-0,087	2,75	3,5	1,474	4	1,623
XA-5	0,25	3	4	1,6	4	1,8
XB-5	0,364	3,25	3,75	1,429	3,333	1,552
XC-5	0,25	3	3,778	1,511	3,778	1,669
X-56	0,143	3	4	1,6	4	1,786
14K	-0,417	2,71	3,429	1,455	4	1,714
W12	-0,194	3,82	3,529	1,212	2,5	1,241
W13	-0,396	2,66	3,31	1,422	4	1,655
W16	-0,417	2,71	3,429	1,455	4	1,714
W17	-0,267	3,25	3,75	1,429	3,333	1,552
W18	-0,417	2,71	3,429	1,455	4	1,714
14K-BIP	0	5,14	3,571	1	1,724	1

A következőkben két új alaktényezőt értelmezünk, amelyek TP rendszerek osztályozására az előbbieknél hatékonyabban alkalmazhatók. Ezek az ún. aszimmetria együttható ( $\Lambda$ ) és konzisztencia együttható (RE). Az aszimmetria együttható ( $\Lambda$ ), definíció szerint

$$\Lambda = \frac{f_2 - f_1}{f_1} = \frac{[e]}{[n]} - 1 = \frac{\langle f \rangle ([r] - 2)}{[r] (\langle f \rangle - 2)} - 1 = \frac{2([r] - \langle f \rangle)}{[r] (\langle f \rangle - 2)} \quad (35)$$

amelyre érvényes a

$$-\frac{1}{2} < \frac{\langle f \rangle - 4}{4 - 2\langle f \rangle} \leq \Lambda \leq 1 - \frac{4}{[r]} < 1 \quad (36)$$

egyenlőtlenség [7-8]. Mint megállapítható, az aszimmetria együttható nem self-duál típusú, és  $\Lambda = 0$  akkor és csak akkor, ha a TP rendszer szimmetrikus. A konzisztencia együtthatót, amely self-dual típusú, a

$$RE = \frac{[n][\varepsilon]}{9} \geq 1 \quad (37)$$

összefüggéssel értelmeztük. A (8) és (9) formulák alapján adódik:

$$RE = \frac{[n][\varepsilon]}{9} = \frac{\{2(f_1 - f_0) + f_{03}\}^2}{9f_1f_2} \geq 1 \quad (38)$$

A definícióból az is következik, hogy  $RE=1$  akkor és csak akkor, ha a rendszer erősen szimmetrikus, minden más esetben  $RE$  nagyobb, mint egy. Az aszimmetria és konzisztencia együtthatók között létezik bizonyos kapcsolat, annak ellenére, hogy ezek algebrailag független mennyiségek:

$$RE = \frac{f_2}{9f_1} [n]^2 = \frac{(1+\Lambda)}{9} [n]^2 = \frac{f_1}{9f_2} [\varepsilon]^2 = \frac{[\varepsilon]^2}{9(1+\Lambda)} \quad (39)$$

Mint megállapítható,

$$RE = \frac{f_2}{9f_1} [n]^2 = \frac{(1+\Lambda)}{9} [n]^2 < 4(1+\Lambda) \quad (40)$$

és

$$RE = \frac{f_1}{9f_2} [\varepsilon]^2 = \frac{[\varepsilon]^2}{9(1+\Lambda)} < \frac{4}{(1+\Lambda)} \quad (41)$$

Következésképpen  $RE = f_2/f_1 = 1+\Lambda$  akkor és csak akkor, ha a rendszer szim pliciális, azaz  $[n]=3$  érvényes, és  $RE = f_1/f_2 = 1/(1+\Lambda)$  akkor és csak akkor, ha a TP rendszer kiegyenlített, azaz  $[\varepsilon]=3$  teljesül. Felhasználva a (10) és (11) egyenlőtlenségeket a  $RE$  alaktényezőre az alábbi becslések adódnak:

$$RE \leq \frac{1}{9} \left(6 - \frac{12}{[r]}\right) \left(6 - \frac{12}{\langle f \rangle}\right) = 4 \left(1 - \frac{f_3}{f_2}\right) \left(1 - \frac{f_0}{f_1}\right) < 4 \quad (42)$$

és

$$1 \leq \max \left\{ (1+\Lambda), \frac{1}{(1+\Lambda)} \right\} \leq RE \leq \min \left\{ 4(1+\Lambda), \frac{4}{(1+\Lambda)} \right\} < 4 \quad (43)$$

A (12-13) azonosságokból következik, hogy ha a TP rendszer centrális-Boole típusú, akkor

$$RE = \frac{1}{9} \left(6 - \frac{12}{[r]}\right) \left(6 - \frac{12}{\langle f \rangle}\right) = 4 \left(1 - \frac{f_3}{f_2}\right) \left(1 - \frac{f_0}{f_1}\right) \quad (44)$$

Ilyen például az X-56 rendszer, amely trivalens 5 és 6 lapú poliéderekből áll (1. ábra), vagy Kelvin poliéderekből konstruált stabil 14K rendszer (3. ábra). A fentiekből következik

$$RE = \frac{[\varepsilon][n]}{9} \geq \begin{cases} 1 + \Lambda & \text{ha } 0 \leq \Lambda \leq 1 \\ \frac{1}{1 + \Lambda} & \text{ha } -1/2 < \Lambda \leq 0 \end{cases} \quad (45)$$

Amint korábban már megállapítást nyert,  $RE = 1 + \Lambda$  ha a TP rendszer szimpliciális (azaz  $[n]=3$  teljesül). Ilyenek például az oktaéderekből és/vagy tetraéderekből konstruált rendszerek. Másrészt  $RE = 1/(1 + \Lambda)$  ha a TP rendszer kiegyenlített (azaz  $[\varepsilon]=3$  teljesül). Ilyen például a W12 rendszer, amely kiegyenlített, de nem centrális-Boole típusú (2.ábra).

A RE topológiai alaktényezőre a (40-41) összefüggések következményeként az alábbi felső becslés adható:

$$RE = \frac{[\varepsilon][n]}{9} \leq \begin{cases} 4/(1 + \Lambda) & \text{ha } 0 \leq \Lambda \leq 1 \\ 4(1 + \Lambda) & \text{ha } -1/2 < \Lambda \leq 0 \end{cases} \quad (46)$$

Ami a „telített” rendszereket illeti, nem nehéz igazolni, hogy ezekre

$$[\varepsilon] = 4 + 2 \frac{f_2 - f_1}{f_1} = 4 + 2\Lambda < 6 \quad (47)$$

és

$$[n] = 2 + \frac{2}{1 + \Lambda} < 6 \quad (48)$$

teljesül, amiből már következik, hogy telített rendszerre érvényes a

$$[n] = \frac{2[\varepsilon]}{[\varepsilon] - 2} \quad (49)$$

azonosság (lásd (27) képletet). Ekkor szükségképpen  $[\varepsilon] > 3$  és  $[n] > 3$ , ezért egy telített rendszer nem lehet sem kiegyenlített, sem szimpliciális. (Szimmetrikus azonban lehet, példa erre kockákból álló C-6 rendszer, amelyre  $[\varepsilon] = [n] = 4$ .) A (47-49) egyenletekből az is következik, hogy

$$\frac{16}{9} \leq RE = \frac{2}{9} \left\{ \frac{[\varepsilon]^2}{[\varepsilon] - 2} \right\} < 2 \quad (50)$$

valamint

$$\frac{16}{9} \leq RE = \frac{1}{9} \left\{ 16 + \frac{4\Lambda^2}{1 + \Lambda} \right\} < 2 \quad (51)$$

Megállapítható továbbá, hogy  $RE=16/9=1,7778$  akkor és csak akkor, ha a telített rendszer szimmetrikus is, (ekkor  $\Lambda=0$ , és  $[n] = [\varepsilon] = 4$ ). Következésképpen adódik, hogy ha egy TP rendszer flag-vektorára

$$f_{03} \leq f_0 + f_1 + f_2 + f_3 \quad (52)$$

teljesül, akkor

$$RE \leq \frac{1}{9} \left\{ 16 + \frac{4\Lambda^2}{1+\Lambda} \right\} < 2 \quad (53)$$

Ha azonban a TP rendszer túltelített, azaz fenn áll

$$f_{03} > f_0 + f_1 + f_2 + f_3 \quad (54)$$

egyenlőtlenség, akkor

$$RE > \frac{1}{9} \left\{ 16 + \frac{4\Lambda^2}{1+\Lambda} \right\} \quad (55)$$

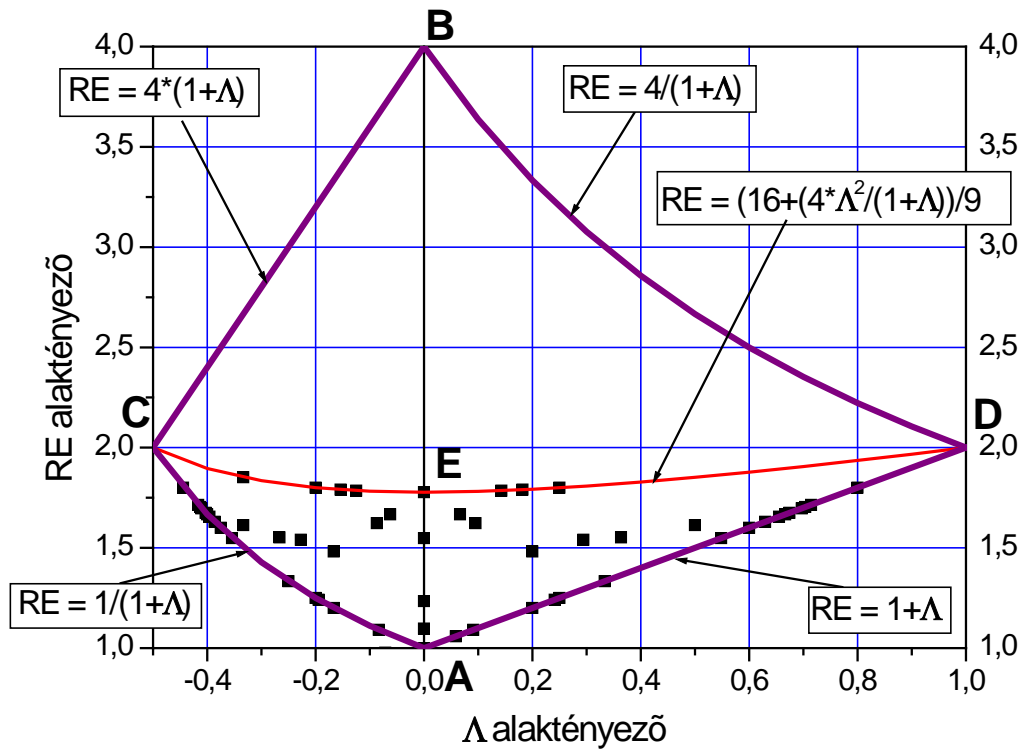
adódik. Olyan túltelített TP rendszerek konstruálására, amelyre nézve RE értéke nagy (pl. nagyobb mint 2) létezik módszer, bár ez nem túl egyszerű [11]. Nyitott kérdés, létezik-e olyan TP rendszer, melyre nézve RE értéke megközelíti a felső korlátot, amely 4.

## 5. TP rendszerek egy lehetséges osztályozása

Az aszimmetria és a konzisztencia együtthatók felhasználásával lehetőség kínálkozik a TP rendszerek osztályozására. Amennyiben a  $\Lambda$  és RE alaktényezőket egy-egy TP rendszerre meghatározzuk, és a kapott  $(\Lambda, RE)$  adatpárokat közös koordináta rendszerben feltüntetjük (6.ábra), lehetőség kínálkozik a TP rendszerek árnyaltabb megkülönböztetésére, azaz egyfajta osztályozására.

A 6. ábra diagramjában az egyes pontok eltérő struktúrájú TP rendszereket reprezentálnak, többségüket mesterségesen konstruáltuk, számítógéppel generáltuk. A diagramon az C, A, D és B csúcspontokkal kijelölt tartományt a (45-46) egyenletekkel definiált görbék határolják, e négy görbeszakasz által szegélyezett tartomány elvben „lefedi” az összes lehetséges TP rendszert.





6. ábra. TP rendszerek osztályozása  $\Delta$  és RE topológiai alaktényezők felhasználásával

A 6. ábra diagramját elemezve az alábbi következtetések adódnak:

- i. Az A és B csúcspontokat összekötő függőleges egyenes szakasz (amelyre  $\Delta=0$  érvényes), reprezentálja a szimmetrikus TP rendszereket, maga az A pont ( $\Delta=0$ ,  $RE=1$ ) az erősen szimmetrikus rendszerek osztályát képviseli.
- ii. Az ábrán a C-A görbeszakasz a kiegyenlített TP rendszereknek felel meg,  $[\varepsilon] = 3$  eset.
- iii. A szimpliciális TP rendszereket az A-D egyenes szakasz reprezentálja, amelyekre  $[n] = 3$ .
- iv. A telített rendszereket képviselik a C-E-D görbeív pontjai. A görbén a minimum helyet kijelölő E pont, ( $\Delta=0$ ,  $RE=16/9=1,7778$ ) a telített és egyúttal szimmetrikus TP rendszereknek feleltethető meg. Telített és szimmetrikus TP rendszer végtelen sok van, triviális példa a kockákból felépített C-6 rendszer.
- v. Kevés információ van arra vonatkozóan, hogy milyen a szerkezete azon túltelített TP rendszereknek, amelyek a C-E-D görbeív feletti tartományba tartoznak. Annyi bizonyos, hogy ilyen rendszerek valóban generálhatók speciális struktúrájú 4-D politopok Schlegel-diagramjainak felhasználásával, bár konstrukciójuk meglehetősen bonyolult [11].

**Irodalom**

- [1] Ziegler G.M.: *Convex polytopes: Extremal Constructions and f-Vector Shapes*, Lecture 4, f-Vectors of 4-Polytopes, IAS/Park City Mathematical Series, Vol. 14 (2004) p. 47-54.
- [2] Ziegler G.M.: *Convex polytopes: Extremal Constructions and f-Vector Shapes*, Lecture 3, 2-Simple 2-Simplicial 4-Polytopes, IAS/Park City Mathematical Series, Vol. 14 (2004) p. 35-45.
- [3] Eppstein D., Kuperberg, G and Ziegler G.M.: *Fat 4-polytopes and fatter 3-spheres*, in Discrete Geometry: In honor of W. Kuperberg's 60th birthday: A. Bezdek, ed., Pure and Applied Mathematics. A series of Monographs and Textbooks, Vol. 253, Marcel Dekker Inc., New York, 2003, p.239-265.
- [4] Ziegler G.M.: *Face numbers of 4-polytopes and 3-spheres*, Proceedings of the International Congress of Mathematicians, (ICM 2002 Beijing), Vol. III. Higher Education Press, Beijing, (2002) p. 625-634.
- [5] Ziegler G.M.: *On the Complexity of Space Tilings*,  
[www.math.tu-berlin.de/EuroComb05/Talks/Invited/IX-Ziegler.pdf](http://www.math.tu-berlin.de/EuroComb05/Talks/Invited/IX-Ziegler.pdf)
- [6] B. Grünbaum and G.C. Shephard: *Tilings and Patterns*, W.H. Freeman and Company, New York, 1987.
- [7] Reti T., Böröczky K.: *Topological Characterization of Finite Cellular Systems Represented by 4-Dimensional Polytopes*, Materials Science Forum, Vols. 474-474, (2005) p. 381-388.
- [8] Reti T., Csizmazia A., Felde I.: *On the Topological Characterization of 3-D Polyhedral Microstructures*, Materials Science Forum, Vols. 537-538, (2007) p. 563-570.
- [9] Williams R.: *The Geometrical Foundation of Natural Structure: A Source Book of Design*. New York, Dove, 1979.
- [10] Chraponski J., Malinski M. and Cwajna J.: *Stereological parameters of model polycrystalline structures built from polyhedra of various shape and size*. Acta Stereologica, Vol. 13, Part 3, (1994) p. 299-303.
- [11] Ziegler G.M.: *Personal communication*, 2007.

**Dr. Bitay Enikő**, tudományos főkutató  
 Erdélyi Múzeum-Egyesület, Kutatóintézet  
 Ro-400009 Kolozsvár, Jókai / Napoca u. 2-4.  
 E-mail: bitay@eme.ro

**Dr. Réti Tamás**  
 Budapest Polytechnic, Budapest  
 H-1081 Budapest, Népszínház u. 8, Hungary  
 E-mail: Reti.tamas@bgk.bmf.hu