

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta strojního inženýrství

**RNDr. Petr Ponížil, Ph.D.**

**PROSTOROVÉ TESELACE**  
**Klasifikace a využití v materiálovém inženýrství**

**SPATIAL TESSELLATIONS**  
**Classification and utilization in material engineering**

ZKRÁCENÁ VERZE HABILITAČNÍ PRÁCE



BRNO 2003

## **KLÍČOVÁ SLOVA**

prostorová Voronoiova teselace, mozaika, generující bodový proces, indukovaná rovinná a lineární teselace, odhad velikosti zrna

## **KEY WORDS**

spatial Voronoi tessellation, generating point process, induced planar and line tessellation, grain size estimation

## **MÍSTO ULOŽENÍ PRÁCE**

oddělení pro vědu a výzkum FSI VUT v Brně

# OBSAH

PŘEDSTAVENÍ AUTORA .....	4
1 ÚVOD .....	5
1.1 Základní poznatky o teselacích .....	5
1.2 Přehled uskutečněného výzkumu .....	6
1.3 Charakteristiky Voronoiových teselací .....	7
2 INTERNETOVÁ DATABÁZE PROSTOROVÝCH A JIMI INDUKOVANÝCH ROVINNÝCH A ČÁROVÝCH TESELACÍ .....	10
2.1 Popis databáze .....	10
2.2 Přehled generujících bodových procesů .....	11
2.2.1 <i>Procesy s pevným jádrem a Gibbsovy bodové procesy</i> .....	11
2.2.2 <i>Translační a posunuté mřížky</i> .....	11
2.2.3 <i>Shluková bodová pole</i> .....	11
2.3 Hlavní charakteristiky generovaných teselací .....	12
3 PŘEHLED ZÍSKANÝCH POZNATKŮ .....	15
3.1 Základní vlastnosti a klasifikace teselací .....	15
3.1.1 <i>Teselace generované Nemanovými-Scottovými shlukovými poli.</i> .....	15
3.1.2 <i>Teselace generované úplně nebo částečně uspořádanými bodovými procesy.</i> .....	15
3.1.3 <i>Teselace generované Bernoulliiovými shlukovými poli.</i> .....	16
3.1.4 <i>Indukované teselace.</i> .....	16
3.1.5 <i>Klasifikace teselací.</i> .....	18
3.2 Přehled realizovaných aplikací .....	18
3.2.1 <i>Odhad velikosti zrna polykrystalů.</i> .....	18
3.2.2 <i>Zákonitosti šíření a hodnocení interkrystalického lomu.</i> .....	18
3.2.3 <i>Kinetika růstu polykrystalů.</i> .....	19
3.2.4 <i>Stereologické metody odhadu anizotropie.</i> .....	19
3.2.5 <i>Klasifikace generujícího bodového procesu.</i> .....	19
4 PŘEHLED PRACÍ TVOŘÍCÍCH ZÁKLAD HABILITAČNÍ PRÁCE .....	20
5 POUŽITÁ LITERATURA .....	24
ABSTRACT .....	29

## PŘEDSTAVENÍ AUTORA



Petr Ponižil se narodil v roce 1965 v Kroměříži. Středoškolské vzdělání získal na gymnáziu v Kroměříži v letech 1979-1983 a úspěšně je zakončil maturitní zkouškou v roce 1983. V roce 1988 absolvoval s vyznamenáním přírodovědeckou fakultu UJEP v Brně, obor fyzika pevných látek. V letech 1988 – 1990 pracoval jako odborný asistent laboratoře diagnostiky křemíku, společné laboratoře PŘF UJEP Brno a TESLA Rožnov p.R., kde se zabýval jednak optickými vlastnostmi tenkých vrstev, jednak modelováním senzorů na měření tlaku na bázi monokrystalu křemíku.

Od roku 1990 dosud pracuje jako odborný asistent Ústavu fyziky a materiálového inženýrství na fakultě technologické Univerzity Tomáše Bati (před rokem 2001 VUT Brno). V letech 1990 – 1994 se věnoval počítačovým simulacím šíření akustických kmitů vrstevnatými strukturami.

V letech 1994 - 1999 absolvoval doktorandské studium na Technologické fakultě VUT s tématem disertační práce „Prostorové teselace“. Zabývá se počítačovým modelováním struktury takových materiálů jako jsou kompozity s krátkými vlákny nebo zrnité struktury. V návaznosti na tyto modely pak simulací různých fyzikálních jevů v těchto strukturách, např. elektrické vodivosti z pohledu teorie perkolace nebo šíření trhlin.

Od roku 1989 se věnuje i výuce. Nejprve v roce 1989/1990 v laboratořích základního kursu fyziky na fakultě přírodovědecké UJEP v Brně. Od roku 1990 vedl cvičení a od roku 1992 i přednáší v základním kursu fyziky na technologické fakultě. Od roku 1993 učil kurs „Fyzika pevných látek“ a zároveň je i spoluautorem učebních textů pro tento předmět z roku 1995. V roce 1994 zavedl předmět „Počítače v inženýrské praxi“. V současné době přednáší předměty „Fyzika I“, „Fyzika II“ a „Fyzika III“ ze základního kursu a přednáší i cvičí předmět „Struktura a vlastnosti pevných látek“. Je vedoucím asi 15 úspěšných diplomových prací.

Petr Ponižil je autorem a spoluautorem 11 článků v mezinárodních časopisech, 1 učebního textu, 1 kapitoly v monografii, 32 příspěvků ve sbornících mezinárodních konferencí a 33 příspěvků v domácích časopisech, ve sbornících národních konferencí a výzkumných zpráv

# 1 ÚVOD

Obsahem předložené habilitační práce jsou počítačové simulace prostorových a rovinných teselací. Hlavním výsledkem prací započatých v roce 1994 je vytvoření veřejně přístupné interaktivní Internetové databáze, obsahující výběr statistických charakteristik širokého souboru simulovaných teselací a jejich grafická zpracování. Souběžně byly publikovány práce obsahující získané výsledky a rozpracované možnosti jejich aplikací v několika oborech.

## 1.1 ZÁKLADNÍ POZNATKY O TESELACÍCH

Problém rozdělení prostoru na nepřekrývající se omezené oblasti úplně vyplňující prostor a mající společné nejvýše své hranice je velmi aktuální v řadě oblastí. Dělení tohoto typu nazýváme *teselací* (v rovině také *mozaikou*), jeho složky pak celami či buňkami.

Jako první s myšlenkou takového dělení prostoru přišel v roce 1644 Descartes v práci „Le Monde de Mr Descartes, ou Le Traité de la Lumière“, ve které se zabýval uspořádáním hmoty ve Sluneční soustavě. Dirichlet (1850) na ni narazil znovu a důkladněji ji rozpracoval ve dvou- a trojrozměrném případě při studiu pozitivně definitních kvadratických ploch. Pro  $d$ -rozměrný případ ji zobecnil Voronoi (1908). Nejjednodušší přirozené dělení je založeno na vzdálenostech bodů prostoru od center. Vnitřek buňky je tvořen těmi body okolního prostoru, které mají k danému centru blíže než k centrům jiným; hranice buňky jsou tvořeny body, které jsou stejně vzdáleny od více center. Eukleidovské vzdálenosti nad bodovými centry generují (obyčejnou) *Voronoiovu teselaci*, nazývanou též *Dirichletova mozaika* či *Voronoiův diagram*.

Dělení prostoru popsaného typu nalézá uplatnění např. v následujících oblastech vědy a praktického života: studium struktury vesmíru v astronomii, optimalizace rozložení center správy a obsluhy v oblastech (města, okresy, státy), zjišťování organizace výživy živočišných a rostlinných tkání, rozpoznávání a ovlivňování mikrostruktury v živé a neživé přírodě, studium rozložení živočišných revírů, sídlišť a ekologických nik atd. Z povahy center vyplývá, že vzdálenosti nemusí nutně být eukleidovské (např. při popisu obslužnosti v sídlišti s pravouhlym systémem ulic) a ani centra nemusí být bodová (jádra buněk, mraveniště různé velikosti na louce), výsledkem odpovídajícího dělení jsou pak *zobecněné teselace* či *diagramy*.

Voronoiovy teselace našly brzo použití v krystalografii (Niggli, 1927), ve fyzikální chemii (Wigner a Seitz (1933) - odtud termín *Wignerovy-Seitzovy buňky* používaný ve fyzice) i v meteorologii a geografii (Thiessen (1911) - odtud termín *Thiessenovy polygony*). Voronoiovy teselace tak byly nezávisle „objeveny“ mnohokrát a vyskytují se i další názvy; např. *potenciálně využitelná plocha* zavedený Brownem (1965) pro přirozenou oblast výživy stromů nebo *kapilární doména*, kterou zavedl Hoofd aj., (1985) při studiu rozložení kapilár v řezu tkáně zásobované krví a konečně *oblast vlivu* v automatické obrazové analýze při zavádění exoskeletu (Serra, 1982).

Ve druhé polovině 20. století našly Voronoiovy teselace uplatnění i v sociálních a ekonomických vědách, iniciované Hotellingovou prací (1929) z konce dvacátých let. Od sedmdesátých let minulého století je možné sledovat stále širší použití Voronoiových mozaik v počítačové grafice a zároveň rozsáhlé studium jejich vlastností počítačovými simulacemi. V poslední době se objevují i práce využívající teselací při popisu sférolitů v polymerech (Huang aj., 1998). Publikovány byly již speciální monografie věnované teselacím (Okabe aj., 1992; Møller, 1994), případně jsou jim věnovány samostatné kapitoly v knihách věnovaných konvexní geometrii (Gruber a Wills, 1993), stochastické geometrii (Stoyan aj., 1995; Mecke aj., 1990; Saxl aj., 1995) a obrazové analýze (Serra, 1982).

Živá i neživá příroda je plná reálných teselací, tedy dobře definovaných a pozorovatelných cel oddělených skutečnými hranicemi. Přitom teselace tvořené buňkami živých tkání jsou zřetelně optimalizované - mají velmi podobné tvary i rozměry a jejich prostorové uspořádání je pravidelné. Naproti tomu zrna polykrystalických materiálů, která jsou produkty fázových přechodů

uskutečňujících se růstovou aktivitou nukleačních center, mají značnou tvarovou i rozměrovou variabilitu, která odráží nepravidelné prostorové rozmístění zárodků i možnou lokální variaci růstových podmínek.

Výchozí charakteristikou modelů teselací v přírodních i umělých materiálech je prostorové rozložení jejich center, jehož různé varianty jsou výchozím bodem pro obecné studium variability teselací. Matematické modely bodových systémů v prostoru se nazývají *bodové procesy*. Centra mohou být rozmístěna homogenně - v matematické terminologii to znamená *navzájem nezávisle* v „prázdném“ eukleidovském prostoru a *Poissonův bodový proces* (PBP) je odpovídajícím modelem. Heterogenní prostorové rozmístění bodů - center - může být jednak důsledkem vzájemné interakce center (přitažlivé a proto vytvářející shluky - *shluková pole* - nebo odpudivé a proto zdola omezující vzdálenost sousedních center – *modely s pevným jádrem*), interakce center s prostorovými jevy odlišného charakteru (povrch, fázová rozhraní) nebo důsledkem proměnlivého vnějšího pole (teplotní či koncentrační gradienty). Ideální bodová rozmístění a tedy i jim odpovídající teselace prostoru jsou pravidelné - body tvoří translační mřížku a všechny cely jsou stejně velké a stejně orientovány. V reálných situacích se tento případ sice nikdy nevyskytuje, často je však žádoucí se mu co nejvíce přiblížit (např. rozložením zpevňující fáze v kompozitech). Má tedy smysl studovat i bodové mřížky či systémy jim blízké (*Booksteinův model* a jím generovaná teselace).

Zejména v materiálové oblasti jsou konstruovány růstové modely teselací, jejichž cely postupně nukleované rostou, interagují a posléze zcela vyplní prostor. Jejich jednotlivá růstová stadia (*neúplné teselace*) jsou využitelná i pro popis růstových stadií ve všech typech materiálů (sférolitické domény v tenkých polymerních vrstvách – Huang aj., 1998). Široce aplikovatelné jsou i pro popis kovových polykrystalů. Vzhledem k úzké souvislosti teselací se sférickou kontaktní vzdáleností jich lze využít i ke zjednodušení modelů transportních podmínek v kompozitních materiálech. Např. Pelikán aj. (1995a,b) nahrazují náhodné rozmístění vláken *pravidelnou* mřížkou vhodně modifikovaných vláken (viz též Ponížil, 1997).

Další využití teselací je v charakterizaci resp. klasifikaci reálných bodových systémů, např. referenčních bodů charakteristických prvků mikrostrukturních obrazů pořízených optickou či elektronovou mikroskopií, jako jsou profily či projekce zpevňujících disperzních částic, dislokační leptové důlky, důlky na snímcích lomových ploch atd. Vedle klasických postupů prostorové statistiky, jako je metoda čtverců, a metod stochastické geometrie (Stoyan aj., 1995; Saxl aj., 1995) poskytuje tato *polygonální metoda* rovněž spolehlivé a snadno interpretovatelné výsledky. Při jejím použití je studovaný bodový systém nahrazen jím generovanou teselací (obvykle Voronoiovou) a na základě jejích vlastností je provedena jeho klasifikace (viz např. Besterci aj., 1998).

Extrakce cel reálných trojrozměrných (3D) teselací je velmi obtížná resp. většinou nemožná a při jejich pozorování jsme odkázáni na dvourozměrné (2D) řezy – profily. Výhodou počítačových simulací je, že spolu s originální 3D teselací mohou být konstruovány i její 2D a 1D řezy, tj. teselace jí indukované v prostorech nižší dimenze. Nalezené souvislosti mezi původní a indukovanými teselacemi pak lze využít jako modely při hledání charakteristik neznámé reálné 3D struktury z experimentálně stanovených dat v 2D a 1D strukturách jí indukovaných.

## 1.2 PŘEHLED USKUTEČNĚNÉHO VÝZKUMU

Program studia Voronoiových teselací generovaných bodovými procesy byl ve spolupráci s Matematickým ústavem AV ČR zahájen v roce 1994 a probíhal v následujících etapách:

- A. V letech 1994-1996 byly vytvořeny základní počítačové programy pro generaci náhodných prostorových (3D) bodových procesů, pro konstrukci 3D teselací těmito procesy generovanými (s použitím jednoduchého inkrementálního algoritmu - viz Ponížil, 1998) a konečně programy pro konstrukci 1D a 2D teselací indukovaných originální 3D teselací v rovinách a na přímkách.

Poté byly připraveny programy pro měření vlastností jednotlivých cel 3D i indukovaných 2D a 1D teselací a rozsáhle testovány pro Poissonovu-Voronioiovu teselaci, jejíž charakteristiky lze odvodit teoreticky. Statistické zpracování těchto údajů bylo prováděno pro tzv. simulace středního rozsahu, tj. s počtem cel řádově  $10^6$  (tohoto počtu je dosaženo kombinací jednotlivých realizací s počtem cel kolem  $10^3$ , což se jevílo jako optimální skladba).

- B. Vlastní výzkum byl zahájen na teselacích generovaných Neymanovými-Scottovými shlukovými poli, u nichž byl především zkoumán vliv prostorového uspořádání bodů ve shluku a velikosti shluku. První rozsáhlejší výsledky byly publikovány v práci Saxl a Ponížil (1997), další v letech následujících.
- C. V roce 1999 byla pozornost zaměřena na teselace vytvořené stochasticky porušenými mřížkami (s náhodně posunutými body) a na teselace generované bodovými procesy s pevným jádrem. V roce 1999 byla v souvislosti s konferencí o stochastické geometrii v Calgary (Saxl a Ponížil, 1999b) uvedena do provozu první verze Internetové databáze, která byla v následujících letech postupně doplňována.
- D. Velmi podnětná byla spolupráce s ÚMV SAV v Košicích na problematice hodnocení velikosti primárního austenitického zrna nízkolegovaných ocelí po různém tepelném zpracování. Bylo zjištěno, že disperze rozměrů reálného primárního zrna po některých tepelných zpracováních výrazně převyšuje rozměrovou disperzi cel generovaných dosud zpracoványi typy shlukových polí. Proto byl vypracován nový *model Bernoulliových shlukových polí*, jimiž generovaná teselace má rozměrovou disperzi prakticky neomezenou.
- E. Do roku 2000 tak bylo získáno mimořádně široké spektrum teselací a přirozeně se nabídla možnost pokusit se o jejich klasifikaci. Byla založena na očekávaných hodnotách střední šířky cely  $E_w$  a povrchu cely  $E_s$  (při očekávaném jednotkovém objemu  $E_v=1$ ), tj na veličinách určujících základní vlastnosti obou teselací indukovaných. Klasifikačním nástrojem se stalo grafické vyjádření libovolné teselace jako bodu v kartézských souřadnicích  $\{E_w, E_s\}$  se třemi znaky –  $CV_v$ ,  $CV_{v'}$ ,  $CV_{v''}$  – charakterizujícími disperzi obsahu původních a indukovaných cel. Toto zobrazení teselací jako značený rovinný bodový proces bylo nazváno  $w - s$  diagram (Saxl a Ponížil, 1997).
- F. Rozšíření databáze o řadu nových typů teselací a jejich znázorňování ve  $w - s$  diagramech si vynutilo její kompletní přestavbu, která byla provedena na sklonku roku 2002.
- G. Po celou dobu rozvíjení tohoto programu byly jeho výsledky soustavně uplatňovány při řešení konkrétních úloh. Velká pozornost byla soustavně věnována problematice odhadu velikosti zrna kovových materiálů, jejíž řešení probíhalo systematickým porovnáváním postupů doporučených technickými normami se získanými výsledky, jejich interpretací a kritikou z hlediska stereologie, v neposlední řadě také aplikacemi na reálné materiály.
- H. Další aplikace zahrnovaly studium interkrystalického lomu, včetně interkrystalického dutinového porušování za zvýšených teplot, popisu makrostruktury polymerních materiálů a metodické práce v oblasti stereologických postupů pro odhad anizotropie vláknových 2d i 3D procesů.

### 1.3 CHARAKTERISTIKY VORONIOIVÝCH TESELACÍ

Formální definice cely  $V_i$  obyčejné Voronoioivy teselace generované konečným či spočetným bodovým systémem  $P=\{x_1, \dots, x_n\}$   $d$ -rozměrného eukleidovského prostoru,  $2 \leq n < \infty$ ,  $x_i \neq x_j$ ,  $i \neq j$ ,  $1 \leq i, j \leq n$  je

$$V_i = \left\{ x \in \mathbf{R}^d, \|x - x_i\| \leq \|x - x_j\|, \text{ pro } j \neq i \right\},$$

kde  $\|x\|$  je eukleidovská norma. Sjednocení všech cel  $V_i$  je obyčejná Voronoioiva teselace a  $P$  je množina generátorů. Takto definovaná Voronoioiva cely je uzavřená konvexní množina; její vnitřek je definován stejnou rovnicí s ostrým znaménkem nerovnosti a obsahuje tedy ty body prostoru, které jsou blíže ke generatoru cely než k libovolnému jinému generátoru.

Nejjednoduššími Voronoiovými teselacemi jsou teselace pravidelné, jejichž všechny cely jsou translačně ekvivalentní (např. teselace generované translačními bodovými mřížkami).

Prakticky důležitým způsobem generace Voronoiovy teselace z daného bodového systému je tzv. růstový model: předpokládejme, že v čase  $t = 0$  začnou ze zárodků  $x_i$  růst zrna konstantní izotropní rychlostí  $v$ . Při tom růst zrna se lokálně zastaví v každém bodě, v němž se sousední zrna dotknou. Takto vzniklá zrna opět vytvoří Voronoiovu teselaci; v případě, že rychlost růstu není izotropní, jedná se o zobecněnou Voronoiovu teselaci.

Růstový model lze zobecnit předpokladem, že okamžikem začátku růstu cel je Poissonův bodový proces na kladné časové poloose – teselace vzniklá za platnosti doplňující podmínky, že zárodek obsažený v nějakém již rostoucím zrně růst nezačne, se nazývá homogenní Johnsonův-Mehlův model (Møller, 1992, 1995). Její nehomogenní variantu dostaneme, když rychlost nukleace je nějakou funkcí (rozumí se klesající) času.

Informace obsažená v teselaci je velmi bohatá, i když řada jejích charakteristik spolu souvisí. Složky hranice cel se podle své dimenze  $s = 0, \dots, d$  nazývají  $s$ -fasety, (např. 0-faseta je vrchol, 1-faseta je hrana a  $d$ -faseta je cela samotná). Když průnik dvou sousedních  $s$ -faset je  $s'$ -faseta dimenze  $s' \leq s$ , nazývá se *teselace regulární*. Jestliže každá  $s$ -faseta je společná ( $d-s+1$ ) celám, je *teselace normální*. V normální trojrozměrné teselaci se ve vrcholu setkávají čtyři cely, v hraně tři cely a ve stěně cely dvě.

Studované teselace jsou vesměs konvexní, tj. jsou tvořeny konvexními polytopy (úsečky, mnohoúhelníky, mnohostěny...) omezenými výše zavedenými  $s$ -fasetami. Ty jsou uzavřenými náhodnými množinami, jejichž distribuce  $P(\bullet_s)$  danou teselaci plně charakterizují. Řada charakteristik mezi sebou navzájem souvisí, a to buď přímo nebo mezi nimi existuje vysoká korelace. Značný praktický význam má výše zmíněná nekonvexní teselace - Johnsonův-Mehlův model, především pro její význam pro popis růstu krystalů a také s ohledem na předpoklady začleněné v normách pro hodnocení velikosti zrna (viz Horálek, 1990).

Pro regulární normální teselace se ustálil soubor charakteristik popisujících vlastnosti jednotlivých cel (Lorz a Hahn, 1993; Okabe aj., 1992); lze je rozdělit do tří skupin:

- 1) *rozměrové* – objem  $v$ , povrch  $s$ , obvod (celková délka hran)  $p$ , střední šířka (střední Feretův průměr)  $w$  v 3D; plocha  $v'$  a obvod  $s'$  (2D střední šířka  $w' = s'/\pi$  pro všechny konvexní obrazce); délka  $v''$  v 1D (obsah hranice  $s''=2$  - počet koncových bodů úsečky). Zde i jinde používáme konvenci podle níž jsou analogické veličiny charakterizující fasety, tj. ty pro něž  $k=d-s$  je stejné, značeny stejným jádrovým písmenem – např.  $v$  označuje vždy obsah cely. Počet čárek rovný  $3-d$ ,  $1 \leq d \leq 3$  charakterizuje dimenzi prostoru teselace. Podle dimenze  $s$ -faset, ke kterým se vztahují, jsou homogenními funkcemi stupně  $-s/d$  měřítkových charakteristik, například intenzity generujícího procesu  $\lambda$ . S ohledem na jejich homogenitu jsou proto jejich rozměrové charakteristiky obvykle uváděny pro jednotkovou intenzitu  $\lambda$  generujícího procesu anebo, což je totéž, pro střední objem  $E v = 1$ . Rozměrovým charakteristikám simulovaných teselací je věnována většina výše citovaných prací a jsou zachyceny v Internetové databázi.
- 2) *tvarové* – počty vrcholů, hran, ..., stěn. U 3D regulárních normálních teselací se obvykle uvádí pouze počet stěn  $n_f$ , protože počet vrcholů  $n_v = 2(n_f - 2)$  a počet hran  $n_e = 3(n_f - 2)$ . V 2D teselacích je  $n'_e = n'_v$  a samozřejmě  $n''_v = 2$  v 1D. Další charakteristiky jsou diedrální úhly, a to náhodný diedrální úhel  $\theta$  (v každé cele, resp. typické cele - Stoyan aj., (1995) - zvolíme rovnoměrně náhodně jeden úhel) a průměrný diedrální úhel cely  $\Theta$ . Střední hodnoty  $E\theta$ ,  $E\Theta$  jsou velmi blízké hodnotě  $2\pi/3$ , jejich distribuce však mohou být zcela rozdílné. V 2D teselacích je  $\theta'$  náhodný úhel sevřený hranami (opět v každé cele volíme rovnoměrně náhodně jeden úhel). Konečně do této skupiny patří izoperimetrické tvarové faktory (Lorz a Hahn, 1993)



$$f = \frac{6v}{\pi w^3}, \quad g = 6\sqrt{\pi} \frac{v}{s^{3/2}}, \quad f' = \frac{4\pi v'}{(s')^2}.$$

Tvarové faktory dosahují maximální hodnoty 1 pro kouli a kruh a klesají k nule pro tenké desky i dlouhé tyčinky. Rovněž tvarové charakteristiky simulovaných teselací jsou zaznamenány v Internetové databázi a speciálně jim jsou věnovány práce Saxl a Ponížil (1998c, 2000c).

- 3) *ostatní charakteristiky* – k nim patří zejména podmíněné střední hodnoty typu  $\mathbf{E}(\bullet|n_f=N)$ , pravděpodobnosti  $P(n_f=N)$  atd. Velká pozornost byla věnována *charakteristikám sousedství*, jež byly původně empiricky ověřeny pro některé přírodní náhodné rovinné teselace. Podle *Lewisova zákona* (Lewis, 1928, 1943) jsou střední plochy cel s daným počtem hran úměrné tomuto počtu a jeho 3D verze je  $\mathbf{E}(v|n_f=N) \propto N$ . *Zákon Aboavův-Weaireův* (Aboav, 1970; Weaire, 1974) vyjadřuje poznatek, že čím má cela větší počet stěn, tím nižší počet stěn mají v průměru její sousedé:  $m_N \propto 1/N$ , kde  $m_N$  je střední počet stěn (v 2D hran) polytopů sousedících s polytopem majícím  $N$  stěn (hran). Podrobnou analýzu těchto zákonů podal Chiu (1994, 1995); v ní dokázal zákon Aboavův-Weaireův a dospěl k závěru, že Lewisův zákon nemá žádný teoretický podklad. Neplatnost Lewisova zákona pro studované teselace je dokumentována v Saxl a Ponížil (1998c).

## 2 INTERNETOVÁ DATABÁZE PROSTOROVÝCH A JIMI INDUKOVANÝCH ROVINNÝCH A ČÁROVÝCH TESELACÍ

### 2.1 POPIS DATABÁZE

Na adrese <http://fyzika.ft.utb.cz/voronoi/base/form.php> je na Internetu přístupná databáze výsledků počítačových simulací. Pro více než 1000 prostorových teselací generovaných různými bodovými procesy bylo spočítáno celkem 9 charakteristik výběrového souboru cel (zpravidla  $10^6$  cel z 1000 nezávislých realizací obsahujících vždy přibližně 1000 cel) a dále pak 6 charakteristik cel teselací indukovaných v izotropních rovnoměrně náhodných (IRN) rovinách a na IRN přímkách. Pro každou charakteristiku  $Y$  byl do databáze uložen počet cel, počet realizací, minimální a maximální hodnota  $Y$  ve výběrovém souboru, její střední hodnota  $EY$ , variance  $\text{var } Y$  a dále její 3. i 4. centrální moment. Navíc byly uloženy hodnoty kvantilů  $q_\alpha(Y)$ ,  $\alpha = 0,0001; 0,001; 0,01; 0,05; 0,10; 0,15, \dots, 0,85; 0,90; 0,95; 0,99; 0,999$  a  $0,9999$ . Internetová databáze nabízí možnost zvolit parametry bodového procesu generujícího teselaci a zobrazit sledovanou charakteristiku vybraných teselací. Výběr bodových procesů se provádí v interaktivním formuláři, nabízejícím parametry odpovídající typu zvoleného bodového procesu (obr. 1). Lze zobrazit jak tabulku momentů, tak i tabulku kvantilů doplněnou grafem zobrazujícím buď distribuční funkci nebo funkci hustoty pravděpodobnosti podle volby uživatele. Do grafů je možné přidávat příp. z nich ubírat křivky odpovídající jednotlivým teselacím. Pro zvolené parametry teselací je také možné sestrojít  $w - s$  diagram zobrazující polohu jednotlivých teselací v rovině  $w - s$ .

**Form for selection of characteristics in tessellations of required type**

**Type of generating point process:** Displaced point lattices  
Displaced point lattice: any point is given an independent shift the distribution of which is  $N(0, \Sigma^2)$ ,  $\Sigma^2 = \alpha^2 I$ , where  $I$  is the unit matrix and  $\alpha$  is the standard deviation of the shift distribution in the units of the nearest neighbour distance  $E\rho$  ("shift size").

**characteristic:** mean breadth (3D)  
**point process of germs:** monoclinic lattice  
**shift size:** 0.005  
**shape factor:** (for monoclinic lattices only) all

Show mask Show moments Show que Show w-s diagram Reset

Obr. 1: Příklad výběru parametrů teselace z formuláře Internetové databáze.

## 2.2 PŘEHLED GENERUJÍCÍCH BODOVÝCH PROCESŮ

Bylo použito několik typů generujících bodových procesů, které umožnily dosáhnout co nejširšího spektra studovaných teselací. Výchozím bodovým procesem je ve většině případů Poissonův bodový proces (PBP), z nějž jsou další procesy odvozovány ztenčováním (*thinning*) a implantací bodových shluků. V některých případech byla výchozím procesem translační bodová mřížka, na kterou byla aplikována operace nezávislého náhodného posunutí jejích bodů (*posunutá mřížka, oscilující mřížka* resp. *Booksteinův model na mřížce* jsou ekvivalentní termíny). Další možnou operací na bodové mřížce byla opět implantace bodových shluků. Speciálním typem bodových systémů jsou Gibbsovy procesy, u nichž je předepsán typ bodové interakce, a procesy generované postupným přidáváním bodů podle zvoleného pravidla. Obecnou citací je Stoyan a Stoyan (1994) a Stoyan aj. (1995), speciální citace jsou uvedeny níže u jednotlivých typů.

### 2.2.1 Procesy s pevným jádrem a Gibbsovy bodové procesy

Matérnovy procesy jsou generovány z PBP závislým ztenčováním: v *Matérnově procesu I* je odstraněna každá dvojice bodů výchozího PBP, jejichž vzdálenost je menší než velikost pevného jádra  $D$ , v *Matérnově procesu II* je každému bodu výchozího PBP  $x$  nezávisle rovnoměrně z intervalu  $[0,1]$  přiřazen znak  $m(x)$  – „čas vzniku“; bod  $x$  není odstraněn pouze když všechny body  $y$  ležící ve vzdálenosti menší než  $D$  jsou „mladší“, t.j.  $m(y) > m(x)$ .

V procesu *prostého postupného zamítání* jsou body postupně generovány ve zvolené oblasti a přijaty jsou pouze ty, jejichž vzdálenost od všech dříve přijatých bodů není menší než  $D$ .

Pro procesy s pevným jádrem je jediným parametrem bezrozměrná veličina  $\delta = \lambda^{1/3} * D$ , kde  $\lambda$  je intenzita výsledného bodového procesu nebo ekvivalentně zaplnění (objemový podíl)  $f = \pi\delta^3/6$  koulemi o poloměru  $\delta$ .

Konečně *Straussův proces* je speciální případ Gibbsova bodového procesu s párovým potenciálem  $\theta(r) = -\ln(\gamma)$  pro  $0 < r \leq R$  a  $\theta(0) = \infty$ ,  $\theta(r) = 0$  pro  $r > R$ . Parametr odpuzování  $0 < \gamma < 1$  a poloměr interakce  $R$  je normalizován na jednotkovou intenzitu procesu (podrobněji viz Bodlák aj., 2000, Saxl a Ponížil, 1999a).

### 2.2.2 Translační a posunuté mřížky

Každému bodu translační bodové mřížky je přiřazeno posunutí s distribucí  $N(0, \Sigma^2)$ ,  $\Sigma^2 = a^2 I$ , kde  $I$  je jednotková matice a  $a$  je směrodatná odchylka distribuce posunutí v jednotkách vzdálenosti k nejbližším sousedům  $E_p$  v původní mřížce. Parametry jsou typ mřížky, uspořádání bodů,  $q$ ,  $a$ . Podrobněji viz Saxl a Ponížil (1999a), Ponížil a Saxl (1999). Použity byly následující typy bodových mřížek: *kubická prostá* (protocely jsou krychle), *kubická prostorově centrovaná* (protocely jsou pravidelné čtrnáctistěny), *kubická plošně centrovaná* (protocely jsou pravidelné rombické dvanáctistěny) a *monoklinická prostá* s úhlem v základně  $\alpha = \pi/3$  (protocely jsou pravidelné šestiboké hranoly se základnou o straně  $a^*$  a výšce  $c^*$ ,  $q = c^*/a^*$ ).

### 2.2.3 Shluková bodová pole

V databázi jsou použity tři jednoduché typy shlukových bodových polí. Výchozí model je *Bernoulliovo shlukové pole*: do bodů rodičovského procesu jsou s pravděpodobností  $0 \leq p \leq 1$  implantovány konečné omezené bodové shluky kardinality  $N_Z$ . Jeho speciální případy jsou *Neymanovo-Scottovo shlukové pole*:  $p=1$ , rodičovský proces je Poissonův bodový proces, *Neymanovo-Scottovo mřížkové shlukové pole*: rodičovský proces je translační bodová mřížka.

Parametry procesu jsou tedy typ a velikost  $c$  ( $c_L$ ) shluku, distribuce  $N_Z$ , střední kardinalita shluku  $N=EN_Z$  a pravděpodobnost vložení  $p$ .

Implantovány byly následující typy shluků lišící se prostorovým rozložením bodů: *globulární* (body jsou rozmístěny nezávisle rovnoměrně náhodně v kouli zvoleného průměru  $D$ ), *sférické* (body jsou rozmístěny nezávisle rovnoměrně náhodně na sféře zvoleného průměru  $D$ ), *pravidelné* (dvojice bodů ve vzdálenosti  $D$ , vrcholy čtverce s úhlopříčkou  $D$ , vrcholy krychle, pravidelného dvacetistěnu a pentagonálního dvanáctistěnu s opsanou sférou zvoleného průměru  $D$ ). Průměr  $D$  je normován vzdáleností nejbližších sousedů rodičovského procesu  $\rho_{min}$ , takže normovaný rozměr shluku je  $c=D/\rho_{min}$  a pro procesy na bodových mřížkách značen  $c_L$ . Podrobněji o shlukových polích viz Rataj a Saxl (1997), Saxl a Ponižil (2002a).

Kromě těchto shlukových polí byl jako generující proces teselace sledován *Bernoulliův kombinovaný bodový proces*, u nějž je nejprve vytvořena teselace generovaná rodičovským procesem intenzity  $\lambda_{par}$  s celami  $C_{par}$ . Poté jsou nezávisle generovány realizace procesů dcer  $\Phi_m$  intenzity  $\lambda_m \gg \lambda_{par}$  a ty jsou implantovány s pravděpodobností  $0 \leq p \leq 1$  do cel  $C_{par}$  rodičovského procesu; generátor rodičovského procesu není odstraněn pouze v případě, že se vložení neuskuteční. Výsledkem je směs nezávislých průniků  $(\Phi_m)_i \cap (C_{par})_i$  a neodstraněných bodů rodičovského procesu. Pro tento bodový proces jsou parametry typu rodičovského a vloženého procesu, poměr  $\lambda_m/\lambda_{par}$  a pravděpodobnost vložení  $p$ .

### 2.3 HLAVNÍ CHARAKTERISTIKY GENEROVANÝCH TESELACÍ

Jednotková Poissonova-Voronoiova teselace (PVT) je základním typem teselace s teoreticky odvoditelnými rozměrovými charakteristikami  $E_w=1.458$  a  $E_s=5.821$  s poměrně rovnoosými celami a objemovou disperzí popsanou koeficientem variace  $CV_v = 0.423$ . Ostatní typy teselací je vhodné popisovat srovnáním s PVT. Procesy s pevným jádrem vznikají postupným uspořádáním Poissonova bodového procesu a v důsledku toho postupně mizejí hodně velké i hodně malé cely PVT: rozměrové charakteristiky se proto mění málo, koeficient variace však výrazně klesá. Teselace generované translačními a posunutými mřížkami s rostoucí směrodatnou odchylkou posunutí  $a$  představují případ opačný. Při  $a=0$  jsou jejich cely translačně ekvivalentní s různými konstantními hodnotami  $w$  a  $s$  (málo odlišnými od PVT u mřížek kubického typu a neomezeně rostoucími hodnotami u monoklinických mřížek s extrémními hodnotami  $q$ , které generují protocely ve tvaru dlouhých tyčí a tenkých rozměrných desek) a nulovou disperzí. S rostoucí hodnotou směrodatné odchylky  $a$  se objevují malé i velké cely,  $w$  a  $s$  jsou náhodné veličiny a jejich disperze i objemová disperze cel rostou: isoedrální teselace postupně přechází v PVT.

**Tab. 1 Mezní hodnoty vybraných charakteristik simulovaných teselací**

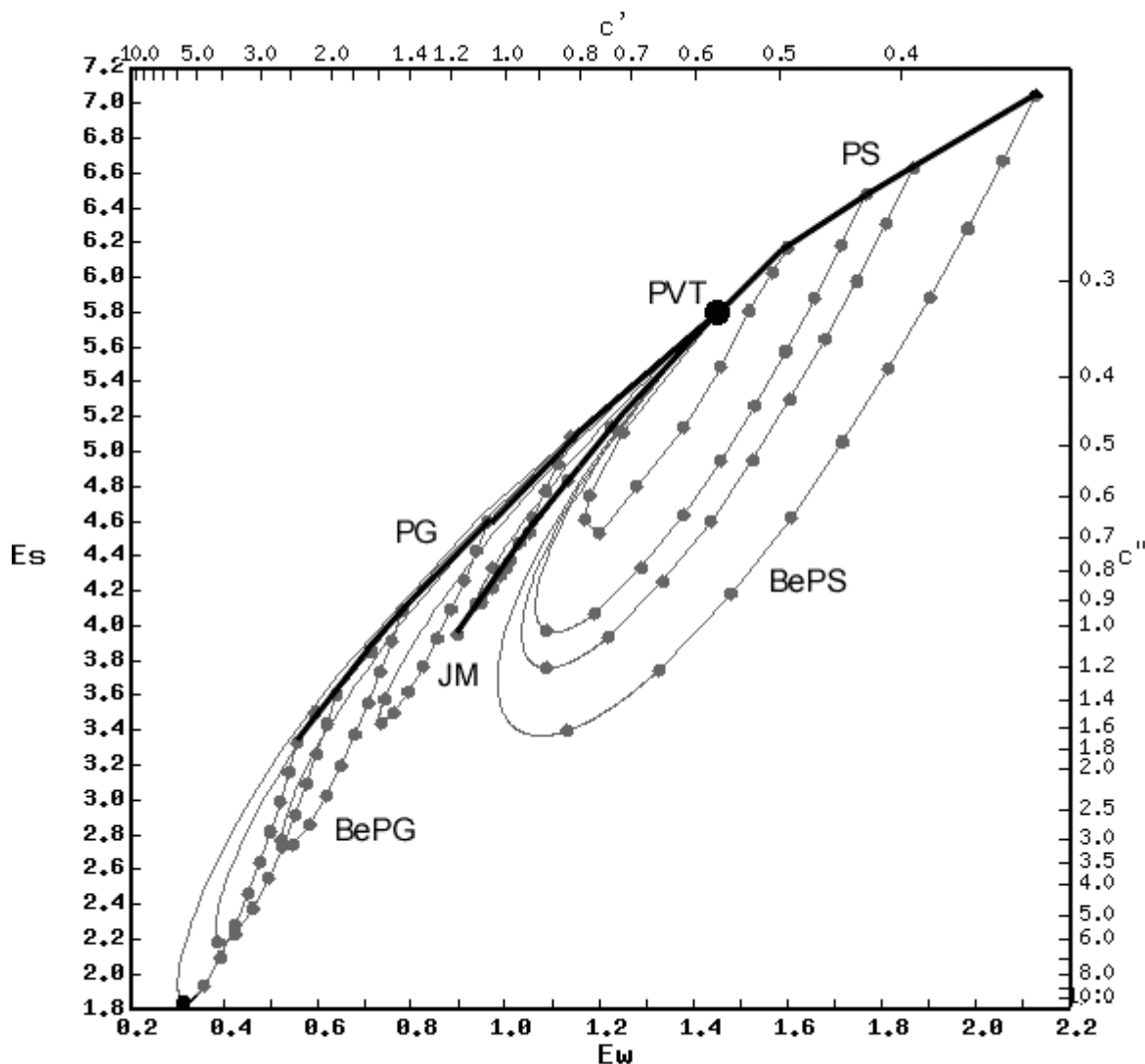
generující proces	$E_w$	$E_s$	$CV_v$	$CV_v'$	$CV_v''$
procesy s pevným jádrem	1.40 - <b>1.46</b>	5.58 - <b>5.82</b>	0.14 - <b>0.42</b>	0.58 - <b>0.69</b>	? - <b>0.58</b>
posunuté bodové mřížky	1.34 - 1.99	5.31 - 9.89	0 - <b>0.42</b>	0.53 - <b>0.69</b>	0.56 - 0.80
Neymanova-Scottova shluková pole $N=1-999$	0.56 - 2.13	3.33 - 7.05	1.1 - 4.5	1.1 - 1.55	0.78 - 1.5
Bernouliova shluková pole	0.3 - 1.15	1.8 - 4.5	3.0 - 17.0	1.7 - 4.3	0.9 - 1.5
Bernouliova kombinovaná bodová pole	1.25 - 1.06	5.03 - 4.25	1.56 - 2.94	1.23 - 1.78	0.73 - 0.89

Tučná kursiva označuje hodnoty odpovídající PVT.

Procesy s pevným jádrem můžeme chápat jako proces uspořádání Poissonova bodového procesu, naopak ve shlukových procesech dochází ke ztrátě jeho lokální homogenity. Při neomezeném poloměru shluku je shlukový proces shodný s Poissonovým bodovým procesem. Jakmile tento poloměr začne klesat, odpovídající počty bodů  $N_Z$  se lokálně shlukují v postupně se

zmenšujících oblastech a zbývající prostor se vyprazdňuje. Přitom s rostoucí hodnotou  $N$  v podstatě neomezeně klesají hodnoty  $E_w$ ,  $E_s$  (i když střední objem  $E_v=1$  zůstává zachován) a jejich disperze stejně jako disperze objemu cel rostou.

Neymanova-Scottova shluková pole na pravidelné bodové mřížce se od stejných polí na PVT liší především výrazně nižšími hodnotami všech koeficientů variace a poněkud vyššími hodnotami rozměrových charakteristik. Oba tyto jevy jsou důsledkem shodnosti cel původního rodičovského procesu a jejich pravidelnějšího dělení celami dceřinými (střed shluku je vždy uprostřed rodičovské cely).



Obr. 2: Křivky popisující ve  $w - s$  diagramu teselace generované Bernoulliiovými sférickými shlukovými poli ( $N=30, 70, 99, 200, c=0.01$ ) – BePS; globulárními shlukovými poli ( $N=30, 70, 200, 500, 999, c=0.01$ ) – BePG; sférickými Neymanovými-Scottovými shlukovými poli – PS; globulárními Neymanovými-Scottovými shlukovými poli – PG; Johnsonův-Mehlův model – JM. Bod označený PVT odpovídá Poissonově-Voroniově teselaci.

Teselace generované Bernoulliiovými shlukovými poli při nízkých hodnotách průměru shluků kombinují mírně změněné cely generované Neymanovým-Scottovým shlukovým polem a jistým rodičovským procesem s opět jen mírně změněnými celami tohoto rodičovského procesu.

Z unimodální teselace generované shluky sférickými tak vzniká teselace bimodální, z bimodální teselace globulárního shluku teselace trimodální. Přibližná teorie (Saxl a Ponižil, 2002a) vychází z této představy a byla s dobrým výsledkem potvrzena simulacemi. Teselace generované Bernoulliiovými kombinovanými bodovými poli spojují část původní cely rodičovského procesu s jeho celami fragmentovanými bodovým procesem podstatně větší intenzity. I u nich lze dosáhnout poměrně vysokých hodnot koeficientů variace, i když nemají tak výrazný shlukový charakter. Mezní dosažené hodnoty nejdůležitějších charakteristik jsou uvedeny v tabulce 1 (velikosti shluku v rozmezí  $0.005 \leq c \leq 0.05$ ).

Popsané vlastnosti teselací generovaných shlukovými poli lze dobře demonstrovat na  $w$ - $s$  diagramu (obr. 2). Teselace generované Neymanovými-Scottovými shlukovými poli s pevnou hodnotou velikosti shluku  $c$  leží přibližně na diagonále  $w$  -  $s$  diagramu. Teselace sférických shluků jsou v její horní části, vyšší hodnoty  $E_w$ ,  $E_s$  odpovídají nerovnoosým celám. Teselace globulárních shluků leží v její dolní části (nižší hodnoty  $E_w$ ,  $E_s$ ). Křivky spojující jednotlivé teselace jsou parametrizovány hodnotou  $N_Z$  a scházejí se v bodě  $N_Z=1$ .

Zobrazení teselací generovaných Bernoulliiovými shlukovými poli ve  $w$ - $s$  diagramu je složitější, protože přistupuje další parametr - pravděpodobnost implantace  $p$ . Teselace odpovídající shlukům stejného typu a zvolené hodnotě  $N$  i  $c$  leží na křivkách parametrizovaných hodnotou pravděpodobnosti vložení  $p$ . Pro všechny hodnoty  $N$  začínají v bodě  $p=1$  popisujícím odpovídající Neymanovu-Scottovu teselaci se stejným  $N$  a společně (bez ohledu na hodnotu  $N$  a typ shluku) končí v jediném bodě  $p=0$  popisujícím rodičovský proces (pokud je stejný Křivky charakterizující globulární Bernoulliiovy teselace ve  $w$  -  $s$  diagramu se samy protínají a vyplňují klínovitou část shora omezenou křivkou teselací Neymanových-Scottových (proměnné  $N$  při pevném  $c$ ,  $p=1$ ) a zdola alespoň zčásti Johnsonovým-Mehlovým modelem. Křivky sférických Bernoulliiových teselací zaplňují pravou část diagramu s vyššími hodnotami  $E_w$ , což odpovídá převážně nerovnoosému (klínovitému) tvaru cel.

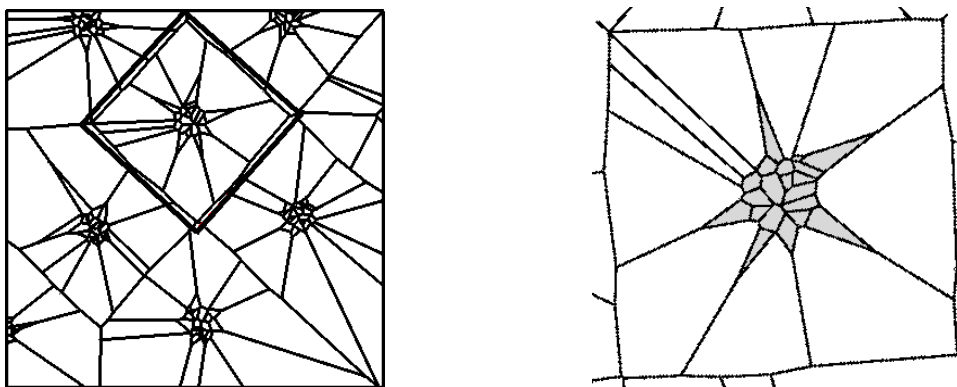
### 3 PŘEHLED ZÍSKANÝCH POZNATKŮ

Úplný přehled získaných poznatků obsahuje 14 prací tvořících součást předložené habilitační práce; jejich rozšířené anotace jsou zde přiloženy ve 4. kapitole. Následující přehled je uspořádán tématicky.

#### 3.1 ZÁKLADNÍ VLASTNOSTI A KLASIFIKACE TESELACÍ

##### 3.1.1 Teselace generované Nemanovými-Scottovými shlukovými poli

Podstatný rozdíl mezi shluky sférickými (včetně pravidelných, které jsou jejich speciálním případem) a globulárními spočívá v prostorovém rozložení bodů shluku. První z nich zachovávají unimodalitu rozdělení rozměrových vlastností cel rodičovského procesu a zvyšování střední kardinality shluků  $N$  se projeví především změnou tvaru cel - od rovnoosého (PVT) k převažujícímu dvouosému (tenké vrstvy, klíny) a jednoosému (tyčinky), což se projeví bimodalitou tvarového faktoru  $f$ . Rozrůznění cel při náhodné poloze jejich generátorů na sféře je největší při nízkých hodnotách  $N$  a poté při hodnotách vysokých; proto rozměrové charakteristiky  $E_s$ ,  $E_w$  a také koeficienty variace rozměrových charakteristik mají maximum při nízkých hodnotách  $N$ , poté jsou téměř konstantní a mírně vzrůstají při  $N > 20$ . V teselacích generovaných shluky globulárními se počínaje  $N=5$  stává určujícím faktorem přítomnost malých - tzv. *vnitřních* - cel v okolí středu shluku (viz obr. 3, zachycující část dvourozměrné teselace generované kruhovými shluky). Ta je příčinou rostoucí bimodality rozměrových charakteristik cel, a protože jejich číselný podíl  $\kappa$  malých cel neustále roste (při  $N=999$  dosahuje 0.8), střední hodnoty  $E_s$ ,  $E_w$  klesají a koeficienty variace rostou. Vnitřní cely představují implantát malé oblasti PVT s vysokou intenzitou  $\lambda$  do středu sférického shluku s kardinalitou  $(1-\kappa)N_z$ . Přibližné vztahy popisující závislost rozměrových charakteristik na střední kardinalitě  $N$  a podílu  $\kappa$  byly publikovány v sérii prací z roku 1998 (Saxl a Ponížil, 1998a,b,c). S rostoucí velikostí shluku shlukové procesy konvergují k náhodnému vzájemně nezávislému rozložení bodů, tj. k Poissonovu bodovému procesu a jimi generovaná teselace se blíží PVT.



Obr. 3: Výřez z 2D teselace generované globulárními shluky ( $N = 30$ ) implantovanými do bodů čtvercové mřížky a detail jedné původní cely rozdělené celami bodů implantovaného (vloženého) shluku s rozlišenými vnitřními (vybarvenými) a vnějšími celami.

##### 3.1.2 Teselace generované úplně nebo částečně uspořádanými bodovými procesy

Tyto teselace představují ve srovnání s PVT případ opačný, než teselace generované procesy shlukovými. Vyznačují se nízkou disperzí rozměrových i tvarových vlastností cel. Jako základ byly vybrány bodové procesy s pseudopevným jádrem, tj. stochasticky porušené translační bodové mřížky (jejich body jsou nezávisle náhodně posunuty se střední hodnotou posunutí rovnou nule). Zvolené typy - tři mřížky kubické a jedna monoklinická - pokrývají zhruba celou oblast základních krystalografických struktur, tj. od teselací extrémních objemově (kubická plošně centrovaná)

a povrchově (kubická prostorově centrovaná) k volným uspořádáním teselací krychlových a prizmatických hexagonálních (s mezními případy tenkých desek a dlouhých tyčí). S rostoucí směrodatnou odchylkou  $a$  náhodných posunutí všechny tyto bodové systémy přecházejí v PBP, teselace jimi vytvořené v PVT, a reprezentují tak proces *rozuspořádání* pravidelných struktur. Souběžně byly sledovány i procesy opačného typu, tj. *uspořádávání* systémů náhodných: klasické Matérnovy procesy s pevným jádrem, proces postupného zamítání a konečně i jeden z procesů Gibbsových se zadaným jednoduchým párovým potenciálem (Straussův proces). Výsledkem tohoto paralelního sledování jsou následující poznatky: Počáteční stadium uspořádávání i konečné stadium rozuspořádání systémů extrémálního typu jsou z hlediska teselací velmi blízké a prakticky obtížně rozlišitelné. Tato podobnost přetrvává i ve středním stadiu těchto procesů - tj. u zaplnění menších než 0.3 (vyšší nebyla sledována). U teselací generovaných ostatními posunutými mřížkami je střední i závěrečné stadium rozuspořádání komplexní a především u krychlové teselace výrazně nemonotonní. Podrobné výsledky vztahující se k této problematice jsou shrnuty v pracích Ponížil, a Saxl (1996, 1999), Saxl a Ponížil, (1999a,b) a Bodlák aj. (2000).

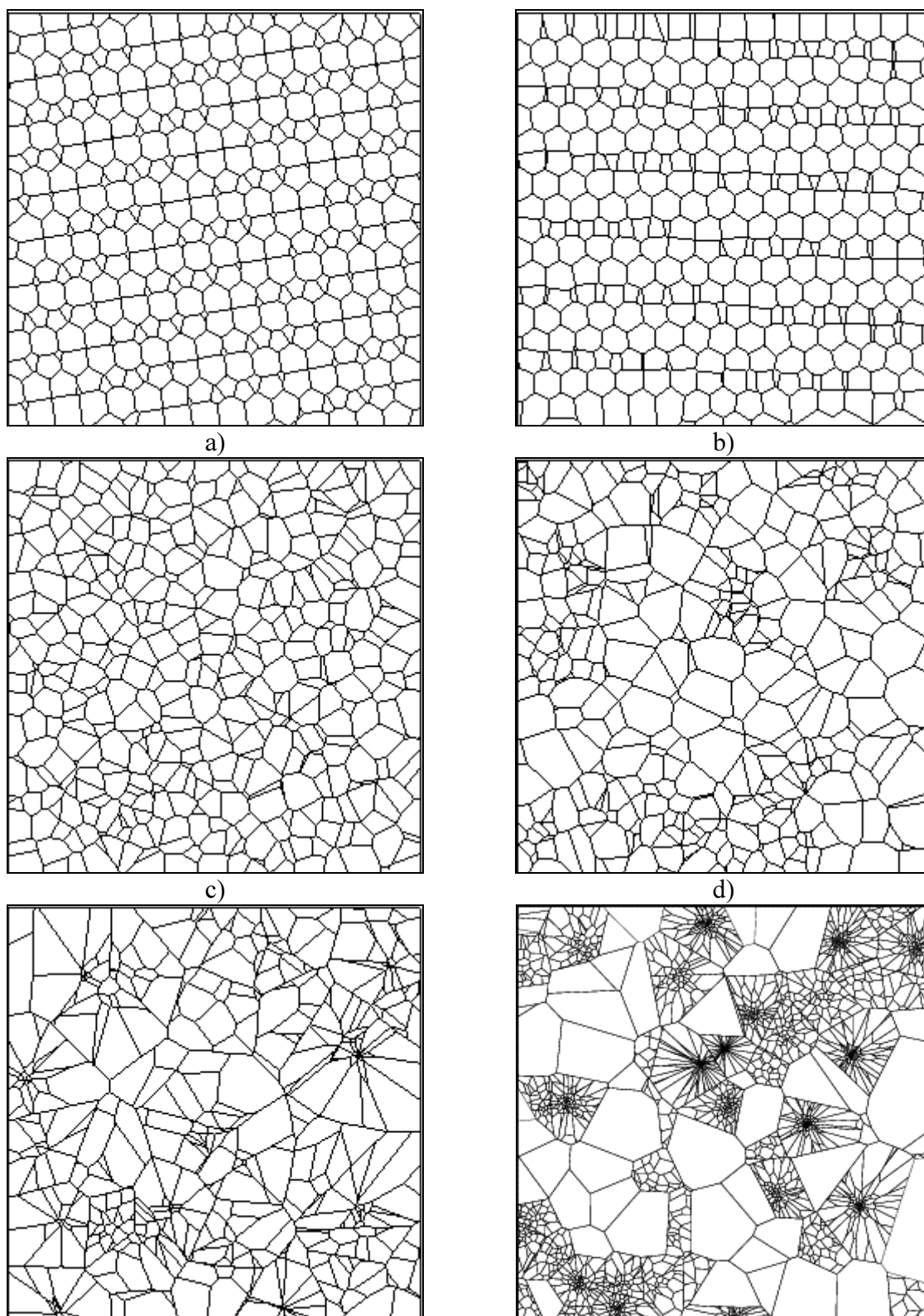
### 3.1.3 Teselace generované Bernoulliiovými shlukovými poli

Model těchto teselací byl inspirován přechodovými stavy primárního austenitického zrna nízkolegovaných ocelí s velkou rozměrovou disperzí cel. Zásadní rozdíl mezi globulárními a sférickými shluky zde přetrvává. Teselace globulárních polí jsou většinou trimodální. Při dostatečně vysoké kardinalitě shluku jsou početně převládající složkou s nízkým objemovým podílem malé rovnoosé vnitřní cely, početně zanedbatelnou složkou s vysokým objemovým podílem rovnoosé cely rodičovského procesu a zbytek tvoří vnější cely, jejichž podíly objemový a číselný jsou proměnlivé, nikdy však zanedbatelné. Rozměrová disperze cel generovaných Bernoulliiovými shlukovými poli je prakticky neomezená (Saxl a Ponížil, 2000a, 2002a). Soubor modelů byl ještě rozšířen i o tzv. smíšené Bernoulliiovy teselace, v nichž do cel předem vytvořené pomocné teselace jsou se zadanou pravděpodobností nezávisle implantovány různé bodové procesy a teprve tento smíšený bodový proces generuje výslednou teselaci.

### 3.1.4 Indukované teselace

Představu o celém spektru teselací zahrnutých v databázi alespoň částečně ilustruje obr. 4, ukazující 2D řezy jejich nejdůležitějšími typy. Cely jsou rovinou řezu vybírány s pravděpodobností úměrnou jejich střední šířce  $w$  a intenzita indukované teselace je  $\lambda' = \lambda Ew$ . To znamená, že čím je hodnota  $Ew$  nižší při konstantní intenzitě výchozí 3D teselace, tím méně profilů se v řezu objeví a profily malých cel se vyskytují méně často než odpovídá jejich relativnímu zastoupení. Skutečná variabilita 3D teselace je tedy mnohem vyšší než řezy zachycují. Výjimkou jsou ovšem teselace mřížkové, u nichž 3D cely jsou translačně invariantní, ale jejich profily jsou variabilní v závislosti na vzájemné poloze roviny řezu a cely.





Obr. 4: Ukázky 2D řezů jednotkovou krychlí s 3D teselacemi a) teselace rombickými dvanáctistěny, b) též teselace po 3D normálním  $N(0, a^2I)$  posunutí bodů k.pl.c. mřížky;  $a=0.05$ , c) Poissonova-Voronoiova teselace, d) teselace generovaná kombinovaným Bernoulliovým bodovým polem;  $\lambda_m/\lambda_{par} = 30$ ,  $p=0.1$ , e) teselace generovaná Neymanovými-Scottovými sférickými shluky;  $N=30$  a  $c=0.5$ , f) teselace generovaná Bernoulliovým globulárním shlukovým polem;  $N=200$  a  $c=0.05$ ,  $p=0.5$ .

### 3.1.5 Klasifikace teselací

Šíře a rozmanitost prostudovaných teselací vybízí k pokusu o jejich soubornou klasifikaci. Těch bylo bylo v minulosti již několik, např. Hermann aj. (1989) a Saxl a Kohútek (1997) na základě parametrického přístupu k rozložení plochy cel, Lorz (1990) s využitím hodnot koeficientu variace plochy cel resp. vztahu mezi kvantily  $q_\alpha$  a  $q_{1-\alpha}$  pro 2D řezy 3D teselací, Saxl a Ponížil (1999b) na závislosti rozměrových a tvarových charakteristik na koeficientu variace obsahu cel. Z důvodů rozebraných v práci nebzl žádný z těchto přístupů plně úspěšný. Zcela nový přístup byl zvolen u již zmíněného  $w - s$  diagramu. Ten je založen právě na těch vlastnostech teselace, které určují intenzity teselací indukovaných a hodnoty všech tří koeficientů variace obsahu cel (tj. původní 3D i obou indukovaných) teselací jsou znaky bodu klasifikujícího jednotkovou teselaci v rovině  $\{\mathbf{E}w, \mathbf{E}s\}$ . Soubor teselací generovaných bodovými poli stejného typu  $\Phi(t, u, \dots)$  s parametry  $t, u, \dots$  je reprezentován parametrickými křivkami  $\{\mathbf{E}w_{\{t, u, \dots\}}(t), \mathbf{E}s_{\{t, u, \dots\}}(t)\}$ , kde  $t$  je vybraný proměnný parametr (např. střední kardinalita shluku  $N$ ) a zbývající parametry (např. rozměr shluku  $c$ ) jsou konstantní. Tato reprezentace teselací byla postupně rozvíjena a doplňována (Ponížil a Saxl, 2000; Saxl a Ponížil, 2001, 2002b,c).

## 3.2 PŘEHLED REALIZOVANÝCH APLIKACÍ

### 3.2.1 Odhad velikosti zrna polykrystalů

Nejdůležitější praktické aplikace se vztahovaly k odhadům velikosti zrna 3D polykrystalických materiálů. Základním nedostatkem postupů předepsaných normami je předpoklad ekvivalence lineární Heynovy (intenzita 1D indukované teselace  $\lambda'$ ) a plošné Jeffriesovy metody (intenzita 2D indukované teselace  $\lambda$ ), což je podrobně rozebráno a také demonstrováno na simulovaných teselacích i na reálných strukturách. Tento předpoklad je vyjádřen vztahem  $\lambda' = c(\lambda)^2$  s konstantní hodnotou  $c=0.7937$ . Ve skutečnosti je však  $c$  funkcí typu teselace a pro simulované teselace nabývá hodnot v rozmezí 0.5 až 1.5. Chybný je také předpoklad konstantní relace mezi intenzitami  $\lambda$  a  $\lambda'$  resp.  $\lambda''$ , konkrétně  $\lambda = c'(\lambda')^{3/2}$  a  $\lambda = c''(\lambda'')^3$ . Konstanty  $c'$  a  $c''$  jsou však opět funkce dané teselace:  $c' = \lambda^{-1/2} (\mathbf{E}w)^{-3/2}$  a  $c'' = \lambda^{-2} (\mathbf{E}s/4)^{-3}$  (v normě ASTM E 112 jsou pro  $c'$  a  $c''$  předpokládány hodnoty 0.8 a 0.57). Přitom  $c'$  nabývá mezních hodnot 0.2 až 0.5 a  $c''$  hodnot 0.02 až 10. Rozdíl mezi odhadem a skutečností tedy může být značný. V řadě prací (Saxl a Ponížil, 1997, 2001, Ponížil aj., 1998, Ponížil a Saxl, 2000, Saxl aj., 2000, 2001) bylo provedeno systematické porovnání postupů doporučených technickými normami, provedena jejich kritika z hlediska stereologie a navrženy korekce pomocí výsledků získaných počítačovými simulacemi. Doporučený postup byl pak aplikován na reálné materiály včetně již zmíněných nízkolegovaných ocelí (Velgosová aj., 2001, 2002, Ševčík aj., 2002).

### 3.2.2 Zákonitosti šíření a hodnocení interkrystalického lomu

Trojrozměrné teselace byly použity i pro studium procesu interkrystalického lomu. Vyvinuté simulační procedury umožňují realizaci fyzikálního modelu šíření interkrystalické trhliny (Šandera aj., 1996; Šandera aj., 1997), přičemž podávají lokální informaci o výběru faset při postupu trhliny, o vývoji profilu a o vlivu struktury zrna na tyto procesy. Jejich další přínos je metodologický, neboť umožňuje testování vesměs empirických relací mezi charakteristikami lomové plochy a lomových čar (drsnostmi apod.). Detailnější studie lomu jsou v Ponížil (1999) a v Saxl aj. (2000), Pokluda aj. (2000) a Ponížil a Saxl (2001). Simulováno bylo také interkrystalické dutinové porušování za zvýšených teplot (Saxl aj., 2003).

### **3.2.3 Kinetika růstu polykrystalů**

Růstové modely teselací, konkrétně obecný model Johnsonův-Mehlův, umožňují popsat kinetiku růstu polymerů. Byla studována jednak krystalizace polypropylénu v tenké vrstvě (Čermák a Ponížil, 2000), jednak 3D sférolitická struktura polypropylénu rekonstruovaná ze série tenkých rovinných řezů (Spáčil aj., 2002).

### **3.2.4 Stereologické metody odhadu anizotropie**

Odhad anizotropie vláknových procesů patří k nejobtížnějším stereologickým úlohám, jejichž metodika ještě není dostatečně zvládnuta. Speciálním případem takových procesů jsou procesy hran cel 3D i 2D teselací mohou proto být využity k testování měřících i výpočetních postupů. Pro řešení této problematiky byly připraveny speciální programy využívající 3D polyedrálních sond různého typu. První výsledky publikovány v Hlawiczková aj. (2001), Saxl aj. (2002) a Beneš a Saxl (2003).

### **3.2.5 Klasifikace generujícího bodového procesu**

Charakteristiky teselace souvisí s charakteristikami generujícího bodového procesu a proto mohou být využity k jeho klasifikaci. V současné době probíhají pokusy s využitím teselací pro popis rozložení plniva v polymerní matrici (Trefilková aj., 2003) a v biologické oblasti k nalezení prostorových i časových zákonitostí rozložení mravenišť různých druhů mravenců na horské louce. Protože pomocí teselace lze dobře definovat sousedství bodů bodového procesu, byly teselace využity i k testování hypotéz o interakci mravenišť (Ponížil aj., 2003).

Uvedené aplikace zdaleka nevystihují využitelnost Internetové databáze. Spíše vypovídají o časových možnostech a osobních zájmech členů kolektivu, který se na její tvorbě podílel. Rozpracovány jsou další aplikace v oblasti nukleární biologie a ekosystémů. Naléhavě se rýsuje potřeba ekvivalentní databáze 2D procesů a analogického návrhu jejich klasifikace.

## 4 PŘEHLED PRACÍ TVOŘÍCÍCH ZÁKLAD HABILITAČNÍ PRÁCE

*Saxl I., Ponížil P.*

### **3D Voronoi Tessellations of Cluster Fields.**

*Acta Stereologica* **17** (1998), 237-246.

Je zkoumána závislost charakteristik 3D Voronoiovy teselace generované bodovým shlukovým polem i rovinné teselace jí indukované na parametrech shlukového pole. Primárním parametrem je velikost shluku. Pokud je značně vyšší než střední vzdálenost sousedů rodičovského bodového procesu, vzniklá teselace přechází v Poissonovu-Voronoiovu teselaci bez ohledu na počet dcer nebo jejich uspořádání ve shluku. Pokud je velikost shluku malá ve srovnání se střední vzdáleností sousedů rodičovského bodového procesu, ovlivňuje jen slabě většinu vlastností teselace a hlavním parametrem určujícím parametry teselace se stává počet dcer ve shluku.

Hlavním znakem většiny zkoumaných distribucí vlastností cel je jejich bimodalita. Charakteristiky velikosti cel jsou bimodální, protože pro větší počty dcer se teselace skládá jednak malých z vnitřních cel, které sousedí jen s celami stejného shluku, jednak z větších radiálně protažených vnějších cel na okraji shluku.

Extrémní blízkost dcer generujících vnější cely dává vzniknout důležitému sekundárnímu modu náhodných dihedrálních úhlů  $\theta$ ,  $\theta'$ . Ploché vnitřní cely způsobují sekundární modus tvarového faktoru  $f$ .

Komplexní chování distribuce počtu stěn souvisí s přítomností vnitřních cel. Nevysvětlena zůstává bimodalita tvarového faktoru  $f'$  indukované 2D teselace pozorovatelná i u PVT.

Předběžným výsledkem kvalitativní analýzy vlastností distribučních funkcí je zjištění, že vliv velikosti shluků a počtu dcer na momenty vlastností nejsou monotónní. Naštěstí jsou variance rozměrových parametrů teselace monotónní a zřetelně závislé na velikosti shluku a počtu dcer. Zvláště variance ploch rovinných řezů teselací rostou s rostoucím počtem dcer a klesají s rostoucí velikostí shluku.

*Saxl I., Ponížil P.*

### **3D Voronoi Tessellations Generated by Poisson and Lattice Cluster Fields**

*Acta Stereologica* **17** (1998), 247-252.

V práci jsou studovány Voronoiovy teselace generované shlukovými poli. Bylo zjištěno, že při počtu dcer v globulárním shluku  $N \geq 5$  se v teselaci objevují vnitřní cely. Dále bylo prokázáno, že jak pro globulární, tak i sférické shluky platí, že střední hodnoty rozměrových charakteristik pro teselace, jejichž rodičovský proces je mřížka, jsou větší nebo rovny středním hodnotám rozměrových charakteristik pro teselace, jejichž rodičovský proces je Poissonův bodový proces.

Z hlediska velikosti shluků mohou být definovány tři oblasti. Pro  $c < 0,5$  je překrývání shluků zanedbatelné a vlastnosti teselace závisejí především na počtu dcer. Naopak pro  $c > 4$  dochází k překrývání shluků a vlastnosti teselace se blíží vlastnostem PVT.

Dále bylo zjištěno, že vhodným parametrem pro rozpoznání teselací generovaných shlukovými poli je sekundární modus náhodného dihedrálního úhlu indukované teselace.

*Ponížil P., Saxl I.*

**Properties of 3D Poisson Hard-core and Pseudo-hard-core fields II. Voronoi Tessellations.** In: V. Beneš, J. Janáček, I. Saxl (eds.) *Proceedings S<sup>4</sup>G, Int. Conf. on Stereology, Spatial Statistics and Stochastic Geometry*. JČMF, Praha 1999, 227-233.

V práci jsou studovány teselace generované bodovými procesy s pevným jádrem a posunutými mřížkami. Střední hodnoty rozměrových charakteristik teselace, stejně jako jejich variance klesají s rostoucím uspořádáním (s rostoucí velikostí pevného jádra  $\delta$ ). Střední hodnoty tvarových charakteristik jsou monotónními rostoucími funkcemi  $\delta$ . Byla ověřena lineární závislost CV v na  $\ln(CV v')$  pro teselace generované bodovými procesy s pevným jádrem.

Střední hodnoty a variance indukovaných teselací  $E_V$ ,  $E_f$  a  $E_\theta$  rostou s rostoucím  $\delta$ ; ostatní střední hodnoty i variance klesají.

*Saxl I., Ponížil P.*

#### **Grain Size Estimation: $w$ - $s$ Diagram.**

*Materials Characterization* **46** (2001), 113 – 118.

Základní charakteristikou prostorové teselace je střední velikost cely, pro indukovanou planární teselaci je to střední plocha profilu a pro indukovanou lineární teselaci je to střední délka tětiny. Místo středních hodnot se často zavádí intenzity  $\lambda$  (počet cel v jednotce objemu),  $\lambda'$  (počet profilů na jednotce plochy řezu) a  $\lambda''$  (počet tětin na jednotku délky). Základní stereologická rovnice pro konvexní 3D teselace vyjadřuje vztahy mezi těmito veličinami:

$\lambda = \lambda' / E_w = \lambda'' / E(s/4)$  a může být přepsána do tvaru  $\lambda = c'(T)\lambda'^{3/2} = c''(T)\lambda''^3$  a  $\lambda' = c(T)\lambda''^2$ .  $c$ ,  $c'$  a  $c''$  jsou bezrozměrné parametry závislé pouze na  $E_w$  a  $E_s$ . To znamená, že  $E_w$  a  $E_s$  pro danou teselaci jednoznačně definují vztah mezi  $\lambda$ ,  $\lambda'$  a  $\lambda''$ . Pro pochopení problémů spojených s odhadem velikosti zrna slouží  $w$ - $s$  diagram, ve kterém je na vodorovné ose vyneseno  $E_w$  a na svislé ose  $E_s$ . Na horní vodorovné ose pak jsou hodnoty  $c'$  a na pravé svislé ose  $c''$ . Hodnoty  $c$  definují ve  $w$ - $s$  diagramu křivky. Ve  $w$ - $s$  diagramu, přísluší každé teselaci bod, proto může kromě odhadu velikosti zrna sloužit i ke klasifikaci teselací.

*Saxl I., Ponížil P.*

#### **Bernoulli Cluster Field: Voronoi Tessellations.**

*Appl. Math.* **47** (2002), 157-167.

V materiálovém výzkumu se setkáváme s teselacemi s velmi vysokou disperzí velikostí. Například koeficient variace ploch profilů primárního austenitického zrna tepelně zpracované oceli dosahuje hodnot blízkých se 3. V práci je navržen nový bodový proces nazvaný Bernoulliovo shlukové pole, který může generovat teselace s prakticky neomezeně vysokými koeficienty variace. Proces je založen na Neymanově-Scottově shlukovém poli, shluky jsou však do bodů rodičovského procesu vkládány s pravděpodobností  $p$  ( $0 \leq p \leq 1$ ). Teselace generované Bernoulliovým shlukovým polem (globulární shluky;  $N=99$ ;  $p=0,5$ ) mají variační koeficienty  $CV v > 5$ ;  $CV v' \approx 2,2$  a  $CV v'' \approx 1,1$ . Stejně sférické shluky umožňují dosáhnout hodnot  $CV v' > 3$ . Ve  $w$ - $s$  diagramu se body odpovídající teselacím generovaným Bernoulliovými shlukovými poli vyskytují v pravé dolní části.

*Pelikán K., Saxl I., Ponížil P.*

#### **Germ-grain Model of Short Fibre Composites.**

*Acta Stereologica* **14** (1995), 75-82.

Metoda prostého postupného zamítání byla použita k simulaci kompozitu s krátkými vlákny. Vlákna byla aproximována válci. Počítačová simulace byla porovnána s Booleovým a mřížkovým modelem pro válce a koule. Bylo zjištěno, že Booleův model s překrývajícími se částicemi může sloužit jako dobrá aproximace kompozitu s krátkými vlákny.

*Ponížil P.*

#### **Počítačové modely vláknových kompozitů.**

*Kovové materiály* (Metallic Materials) **34** (1996), 125 – 129.

Krátká vlákna v kompozitu byla nahrazena válci umístěnými do prostoru metodou postupného prostého zamítání. Bylo sledováno perkolační chování struktury při zvětšování objemového podílu vláken. Uvedený model je dobře použitelný pro studium perkolačního chování kompozitů s krátkými vlákny. Jako indikátor perkolační prahu byl navržen podíl počtu částic ve

druhém největším shluku dělený počtem částic v největším shluku. Tato veličina nabývá v místě perkolačního prahu maxima.

*Saxl I., Ponížil P., Sülleiová K.*

### **Stereology and Simulation of Heterogeneous Crystalline Media.**

*Int. Journal of Materials and Product Technology* **18** (2003), No. 1-3, 1-25.

Hlavním výsledkem simulací prostorové struktury je vytvoření modelů použitelných pro velmi složité a lokálně nehomogenní struktury reálných materiálů. V reálných materiálech jsou 3D vlastnosti odhadovány z metalografických snímků a je nemožné odhadnout vychýlení odhadu způsobené např. konečnou šířkou hranic zrn. Na simulovaných strukturách lze uskutečnit postupy manuální i automatické obrazové analýzy a jejich výsledky srovnat se přesnými vlastnostmi struktur. Bylo zjištěno, že prostorové rozložení zkoumaných vlastností má silný vliv na přesnost odhadu. Dále bylo ukázáno, že ztráta malých profilů přehlédnutých díky malé rozlišovací schopnosti má nezanedbatelný vliv na jakoukoliv analýzu a v praxi by měla být věnována této skutečnosti maximální pozornost.

*Ponížil P., Saxl I., Druckmüller M., Pokluda J.*

### **Comparison of Real and Simulated Grain Structures.**

*Kovové Materiály (Metallic Materials)* **36** (1998), 409-418

Na rovinných řezech simulovaných teselací a reálných materiálů byla ověřena možnost odhadu velikosti a rozložení zrn pomocí přibližných vztahů založených na vlastnostech různých 3D teselací. Byly srovnány odhady středního objemu zrn získané ze střední plochy profilů (rovinných řezů) zrn a střední délky tětív profilů. Tyto odhady byly dále zpřesněny použitím rozptylů plochprofilů. Bylo zjištěno, že obecně užívaná hodnota  $c' = 0,7$  zajišťuje pro široké spektrum reálných struktur přesnost odhadu do 30%. Z rozptylu ploch profilů je možné odhadnout rozptyl velikostí zrn, dále lze určit z délek tětív a ploch profilů parametr  $c$ . Parametry teselace, která nejlépe odpovídá takto změřeným hodnotám pak lze dále použít ke zpřesnění odhadu.

*Ponížil P., Saxl I.*

### **Grain Size Estimation II: Other Models, Variances.**

In: Wojnar L., Rozniatowski K. (eds.) *Proceedings of STERMAT 2000*, Sixth Int. Conf. Stereology and Image Analysis in Materials Science, Cracow, Poland, September 20-23, 2000. Polish Society for Stereology, Cracow 2000, 379-384

V práci jsou na simulovaných strukturách testovány metody odhadu velikosti zrn a odpovídajícího rozptylu z obsahů rovinných a lineárních řezů strukturami, navrhované různými autory. Jsou ukázány odchylky těchto odhadů pro různé typy struktur. Tyto odchylky mohou v některých případech vést k odhadům, které se až dvakrát liší od skutečnosti.

*Saxl I., Sülleiová K., Ponížil P.*

### **Simulating Grain Size Estimation.**

*Kovové Materiály (Metallic Materials)* **39** (2001), 396-409.

Prostorové Voronoiovy teselace generované čtyřmi bodovými procesy s výrazně různým rozdělením velikostí cel byly vybrány jako modely zrn v polykrystalu. Počítačově simulované rovinné a lineární řezy pak byly proměřeny jednak manuálně, jednak obrazovou analýzou. Výsledky získané metodami doporučovanými ASTM byly srovnány s hodnotami získanými počítačovými simulacemi středního rozsahu a byly zjištěny odchylky od 20 do 40%. Byla navržena metoda zpřesnění odhadu pomocí  $w-s$  diagramu s využitím znalosti rozptylů ploch profilů a délek jejich tětív.

*Saxl I., Sülleiová K., Ponížil P.*

### **3D Simulations of Intergranular Fracture.**

In: Parilák L. (ed.) *Proceedings of International Conf. FRACTOGRAPHY 2000*, Stará Lesná, October 15-18, 2000, Inst. Mat Res. Slov. Acad. Sci., Košice, Slovak Republic, 94-107.

Byl vytvořen počítačový model šíření interkrystalické trhliny polykrystalickým materiálem. Počítačová simulace šíření interkrystalické trhliny byla aplikována na modely polykrystalické látky reprezentované Voronoiovými teselacemi generovanými pěti různými bodovými procesy s velmi širokým spektrem distribuce velikostí zrn. Na modelech trhlín byly měřeny lomové čáry a jejich vlastnosti srovnávány s vlastnostmi lomových ploch. Jak lomové čáry, tak i lomová plochy byly charakterizovány drsnostmi. Bylo zjištěno, že s výjimkou struktury generované shlukovým polem se sférickými shluky byly rozdíly mezi drsnostmi lomových ploch zanedbatelné. Zároveň byly zkoumány vlastnosti faset zrn, po nichž se šířila trhlina a srovnávány s vlastnostmi souboru všech faset vzorku.

*Ponížil P., Saxl I.*

### **Simulated Intergranular Fracture Characteristics.**

In: Šandera P. (ed.) *Proceedings 3rd International Conference on Materials Structure & Micromechanics of Fracture*. Brno 27. - 29. 6. 2001. Vutium, Brno Univ. of Technology, 2001, CD ROM p. 206-213.

Prostorový model šíření interkrystalické trhliny byl aplikován na model zrnité struktury reprezentované Voronoiovými teselacemi generovanými různými typy bodových procesů, zajišťujícími široký rozsah distribucí velikostí zrna. Byly porovnány různé parametry drsnosti a sledována jejich citlivost k charakteristikám struktury. Kriticky byly testovány modely umožňující odhad drsnosti lomové plochy ze znalosti drsností lomových čar.

*Hlawiczková M., Ponížil P., Saxl I.*

### **Estimating 3D Fibre Process Anisotropy.**

In: Kluev V.V., Mastorakis N.E. (eds.): **Topics in Applied and Theoretical Mathematics and Computer Science**. Series: Mathematics and Computers in Science and Engineering, A Series of Reference Books and Textbooks, WSEAS Press, 2001, 214-219.

Zobecněná metoda Steinerova kompaktu byla použita pro stereologický odhad anizotropie prostorových vláknových procesů z bodových procesů indukovaných na stěnách. Sledovanými vláknovými procesy byly hrany Voronoiových teselací generovaných různými typy translačních a posunutých monoklinických mřížek reprezentujících spojitý přechod od procesů výrazně anizotropních (téměř rovinná, téměř lineární a smíšená anizotropie) k procesům izotropním. Omezená spolehlivost použité metody, především pro procesy odpovídající neporušeným translačním mřížkám, byla podrobně demonstrována ve vytahu k počtu stěn sondy a její orientaci.

## 5 POUŽITÁ LITERATURA

- Aboav, D.A. (1970) The arrangement of grains in a polycrystal. *Metallography*, **3**, 383-390.
- ASTM E 112 (1996) *Standard Methods for Determining Average Grain Size*.
- Beneš, V. a I. Saxl (2003) Stereological estimation of the rose of directions from the rose of intersections. *Sborník konference Int. Conf. IWAP*, Caracas 2002 (v tisku)
- Bodlák, K., P. Ponižil a I. Saxl (2000) Markov point process: 3D Voronoi tessellation generated by Markov process. In: J. Antoch, G. Dohnal (eds.): *Sborník prací 11. Letní školy ROBUST 2000*. JČMF, Praha 2001, s. 1-8.
- Brown, G.S. (1965) Point density in stems per acre. *New Zealand Forestry Service Research Notes*, **38**, 1-11.
- Čermák, R., P. Ponižil a I. Saxl (2000) Modelling spherulite growth by planar tessellations. In: *The Polymer Processing Society Europe/Africa regional meeting 2000 Conference Proceedings, Zlín, Czech Republic, August 16-18, 2000*. Polymer Centre Faculty of Technology in Zlín, Zlín 2000, 245-246.
- ČSN 42 0462 (1983) *Stanovení velikosti zrna oceli a neželezných kovů*.
- Dirichlet, G.L. (1850) Über die Reduction der positiven quadratischen Formen mit drei unbestimmten ganzen Zahlen. *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, **40**, 209-227.
- Gruber, P.M. a J.M. Wills (1993) *Handbook of Convex Geometry*. North-Holland, Amsterdam, London, New York, Tokyo.
- Hermann, H., H. Wendrock a D. Stoyan (1989) Cell-area distribution of planar Voronoi mosaics. *Metallography*, **23**, 189-200.
- Hinde, A.L. a R.E. Miles (1980) Monte Carlo estimates of the distribution of the random polygons of the Voronoi tessellation with respect to a Poisson process. *J. Statist. Comput. Simul.*, **10**, 205-223.
- Hlawiczková, M., P. Ponižil a I. Saxl (2001) Estimating 3D fibre process anisotropy. In: *Topics in Applied and Theoretical Mathematics and Computer Science*. Series: Mathematics and Computers in Science and Engineering - A Series of Reference Books and Textbooks WSEAS Press, 214-219.
- Hoofd, L., Z. Turek, K. Kubat, B.E.M. Ringnalda a S. Kazda (1985) Variability of intercapillary distance estimated on histological sections of rat heart. *Advances in Experimental Medicine and Biology*, **191**, 239-247.
- Horálek, V. (1990) ASTM grain-size model and related random tessellation models. *Materials Characterization*, **25**, 263-284.
- Hotelling, H. (1929) Stability in competition. *Economic Journal*, **39**, 41-57.
- Huang, T., T. Tsuji, A.D. Rey a M.R. Kamal (1998) The development of spherulitic domain in polymer films. *Polymeric Materials Science and Engineering*, **79**, 132-133.
- Chiu, S.N. (1994) Mean-value formulae for the neighbourhood of the typical cell of a random tessellation. *Adv. Appl. Prob.*, **26**, 565-576.
- Chiu, S.N. (1995) Aboav-Weaire's and Lewis' laws. A Review. *Materials Characterization*, **34**, 149-165.



- Lewis, F.T. (1928) The correlation between cell division and the shapes and sizes of prismatic cells in the epidermis of *Cucumis*. *Anatomical Record*, **38**, 341-376.
- Lewis, F.T. (1943) The geometry of growth and cell division in epithelial mosaics. *American Journal of Botany*, **30**, 766-776.
- Lorz, U. (1990) Cell-area distributions of planar sections of spatial Voronoi mosaics. *Materials Characterization*, **25**, 297-309.
- Lorz, U. a U. Hahn (1993) *Geometric Characteristics of Random Spatial Voronoi Tessellations and Planar Sections*. Preprint 93-05. TU Bergakademie Freiberg, Freiberg.
- Mecke, J., R.G. Schneider, D. Stoyan a W.R.R. Weil (1990) *Stochastische Geometrie*. Birkhäuser Verlag, Basel, Boston, Berlin.
- Møller, J. (1992) Random Johnson-Mehl tessellations. *Adv. Appl. Prob.*, **24**, 814-844.
- Møller, J. (1994) *Lectures on Random Voronoi Tessellations*. Lecture Notes in Statistics 87. Springer-Verlag, New York, Berlin, Heidelberg.
- Møller, J. (1995) Generation of Johnson-Mehl crystals and comparative analysis of models for random nucleation. *Adv. Appl. Prob.*, **27**, 367-383.
- Niggli, R. (1927) Die topologische Strukturanalyse. *Zs. f. Kristallographie*, **65**, 391-415.
- Okabe, A., B. Boots a K. Sugihara (1992) *Spatial Tessellations*. J. Wiley & Sons, Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore.
- Pelikán, K., P. Ponížil a I. Saxl (1995a) Stochastic models of short fibre composites. *The Polymer Processing Society, European meeting 1995, Book of abstracts*. Inst. für Kunststofftechnologie, University of Stuttgart, Stuttgart, paper No. 5.31.
- Pelikán, K., I. Saxl a P. Ponížil (1995b) Germ-grain model of short fibre composites. *Acta Stereologica*, **14**, 75-82.
- Pokluda, J., I. Saxl, P. Šandera, P. Ponížil, M. Matoušek, T. Podrábský a J. Horníková (2000) Real-like polycrystal with intergranular crack. In: Miannay D., Costa P., Francois D., Pineau A. (eds.): *Advances in Mechanical Behaviour, Plasticity and Damage, EUROMAT 2000, 7.-9.11.2000, Tours, France*, Elsevier Science Ltd. 449-453.
- Ponížil, P. (1996) Počítačové modely vláknových kompozitů. *Kovové materiály (Metallic Materials)*, **34** No. 2., 125 - 129.
- Ponížil, P. (1998) *Prostorové teselace*, Teze k rigorózní zkoušce Fakulta technologická ve Zlíně, 35 pp.
- Ponížil, P. (1999) *Voronoi tessellations generated by point cluster fields*. PhD Thesis, Faculty of Technology Zlín, TU Brno, 120 pp.
- Ponížil, P. a I. Saxl (1996) Booksteinův model na kubické mřížce a Voronoiova teselace jím generovaná. In: *Proc. Conf. Progress in Physical Metallurgy 1996*. VUT Brno, Brno, 47-50.
- Ponížil, P. a I. Saxl (1999) Properties of 3D Poisson hard-core nad pseudo-hard-core fields II.Voronoi tessellations. In: V. Beneš, J. Janáček, I. Saxl (eds.): *Proceedings S<sup>4</sup>G, Int. Conf. on Stereology, Spatial Statistics and Stochastic Geometry*. JČMF, Praha, 227-233.
- Ponížil, P. a I. Saxl (2000) Grain size estimation II: other models, variances. In: Wojnar L., Rozniatowski K. (eds.): *Proceedings of STERMAT 2000, Sixth Int. Conf. Stereology and Image Analysis in Materials Science, Cracow, Poland, September 20-23, 2000*. Polish Society for Stereology, Cracow 2000, 379-384.

- Ponížil, P. a I. Saxl (2001) Simulated Intergranular Fracture Characteristics. In.: P. Šandera (ed.) *Proc. 3rd International Conference on Materials Structure & Micromechanics of Fracture. Brno 27. - 29. 6. 2001.* Vutium, Brno University of Technology, 2001, CD ROM p. 206 – 213.
- Ponížil, P., I. Saxl, M. Druckmüller a J. Pokluda (1998) Comparison of Real and Simulated Grain Structures. *Kovové Materiály (Metallic Materials)* **36**, 409-418.
- Ponížil, P., J. Sidorenková, M. Kovářová, P. Kovář, T. Herben, I. Saxl (2003) Spatial pattern of anthill locations. In: *12. International Workshop on Stochastic Geometry, Stereology and Image Analysis*, Praha 24.-29.8.2003
- Rataj, J. and I. Saxl (1997) Boolean cluster models: mean cluster dilations and spherical contact distances. *Math. Bohem.*, **122**, 21-36.
- Saxl, I. a I. Kohútek (1997) Voronoi tessellations generated by Boolean cluster fields. In: Wojnar L, Roźniatowski, K., Kurzydłowski K.J. (eds.): *Proc. Int. Conf. on The Quantitative Description of Materials Microstructure*. Warsaw, 481-488.
- Saxl, I. a P. Ponížil (1997) Estimation of Properties of Polycrystalline Grain Structures. In: L. Parilák (ed.): *Fractography '97, Proc. Int. Conf. Stará Lesná*, 26.-29. 10. 1997. Inst. Mater. Res. SAV, Košice 1997, 132-143.
- Saxl, I. a P. Ponížil (1998a) 3D Voronoi Tessellation of Cluster Fields. *Acta Stereologica* **17**, 237-246.
- Saxl, I. a P. Ponížil (1998b) 3D Voronoi Tessellation Generated by Poisson and Lattice Cluster Fields. *Acta Stereologica* **17**, 247-252.
- Saxl, I. and P. Ponížil (1998c) Shapes of Voronoi polytopes. In: M. Hušková, P. Lachout, J.A. Víšek (eds.): *Prague Stochastics 98. Proc. 6th Prague Symposium on Asymptotic Statistics & 13th Prague Conference on Information Theory, Statistical Decision Functions and Random Processes*. JČMF, Praha 1998, 505-509.
- Saxl, I. a Ponížil P. (1999a) Properties of 3D Poisson hard-core nad pseudo-hard-core fields I. Distances. In: V. Beneš, J. Janáček, I. Saxl (eds.): *Proceedings S<sup>A</sup>G, Int. Conf. on Stereology, Spatial Statistics and Stochastic Geometry*. JČMF, Praha, 241-248.
- Saxl, I. a P. Ponížil (1999b) Spatial Voronoi tessellations generated by non-Poisson point fields. *10th International Conference and Workshop on Stochastic Geometry, Stereology and Image Analysis*, 24-28.8.1999. University of Calgary, Calgary, 25-26. (available on <http://fyzika.ft.utb.cz/voronoi/Paper/paper0.htm>)
- Saxl, I. a P. Ponížil (2000a) Random tessellations: Stochastic simulations and applications. In: *Programy a algoritmy numerické matematiky 10. Libverda 2000*, Matematický ústav AV ČR, Praha 2000, 150-161.
- Saxl, I. a P. Ponížil (2000b) Grain size estimation I: stochastic simulations and ASTM method. In: Wojnar L., Roźniatowski K. (eds.): *Proceedings of STERMAT 2000, Sixth Int. Conf. Stereology and Image Analysis in Materials Science, Cracow, Poland, September 20-23, 2000*. Polish Society for Stereology, Cracow 2000, 373-378.
- Saxl, I. a P. Ponížil (2000c) Shapes of Random Closed Sets. In: J. Antoch, G. Dohnal (eds.): *Sborník prací 11. Letní školy ROBUST 2000*. JČMF, Praha 2001, s. 284-297.
- Saxl, I. a P. Ponížil (2001) Grain size estimation: w - s diagram. *Materials Characterization* **46**, 113 - 118.

- Saxl, I. a P. Ponižil (2002a) Bernoulli cluster field: Voronoi tessellations. *Applications of Mathematics* **47**, 157-167.
- Saxl, I. a P. Ponižil (2002b) Spatial Voronoi tessellations: Report on extensive database. *Book of abstracts of EMS 2002 (Joint Session of 24th European Meeting of Statisticians & 14th Prague Conference on Information theory, Statistical Decision Functions and Random Processes)*. Prague, August 19-23, 2002. Inst. of Information Theory and Automation, Prague, p. 317.
- Saxl, I. a P. Ponižil (2002c) Classification of 3D tessellations. In: J. Antoch, G. Dohnal (eds.): *Sborník prací 12. Letní školy ROBUST 2002* (v tisku)
- Saxl, I., M. Hlawiczková a P. Ponižil (2002) Estimation of fibre process anisotropy in  $\mathbf{R}^2$  and  $\mathbf{R}^3$ . *Sborník semináře „Programy a algoritmy numerické matematiky 11*. Maxov 2002, Matematický ústav AV ČR (v tisku).
- Saxl, I., K. Pelikán, J. Rataj a M. Besterci (1995) *Quantification and Modelling of Heterogeneous Systems*. Cambridge Int. Science Publishing, Cambridge.
- Saxl, I., P. Ponižil a K. Sülleiová (2003) Stereology and simulation of heterogeneous crystalline media. *Int. Journal of Materials and Product Technology*. **18**, 1-25.
- Saxl, I., K. Sülleiová a P. Ponižil (2000) 3D simulations of intergranular fracture. In: Parilák L. (ed.) *Proceedings of the International conference FRACTOGRAPHY 2000, Stará Lesná, October 15-18, 2000*, Inst. Mat Res. Slov. Acad. Sci., Košice, Slovak Republic, 94-107.
- Saxl, I., K. Sülleiová a P. Ponižil (2001) Simulating grain size estimation. *Kovové Materiály (Metallic Materials)* **39**, 396 - 409.
- Serra, J.P. (1982) *Image Analysis and Mathematical Morphology*. Academic Press, London.
- Spáčil, O., P. Olšan, R. Čermák a P. Ponižil (2002) Modelling spherulite growth by spatial tessellations. In: *Sborník konference DIDMATTECH 2002, Nitra 27.-28.9. 2002*. Pedagogická fakulta Univerzity Konštantína Filozofa, Nitra (v tisku).
- Stoyan, D., W.S. Kendall a J. Mecke (1995) *Stochastic Geometry and its Applications*. J. Wiley & Sons, New York.
- Stoyan, D. a H. Stoyan (1994) *Fractals, Random Shapes and Point Fields*. J. Wiley & Sons, Chichester.
- Šandera, P., P. Ponižil a J. Pokluda (1996) Modelling Intergranular Crack Growth in 2D and 3D Voronoi Cells. In: *Mechanism and Mechanics of Damage and Failure (ECF 11)*, Vol I, EMAS 1996, France, 491
- Šandera, P., P. Ponižil a J. Pokluda (1997) Three dimensional model of intergranular crack development in the process zone. In: L. Parilák (ed.): *FRACTOGRAPHY 97, Proc. Int. Conf. Stará Lesná 26.-29.10.1997*. Inst. Mater. Res. SAV, Košice 1997, 151-155
- Ševčík, A., K. Sülleiová, M. Besterci, I. Kohútek a I. Saxl (2002) Grain size estimation in steels. *Kovové Materiály (Metallic Materials)* **40**, 85 - 98
- Trefilková B., P. Ponižil, R. Čermák, I. Saxl: Space distribution of filler in polymeric material. JUNIORMAT '03, Brno 23. – 24. září 2003
- Velgosová, O., I. Saxl a M. Besterci (2001) Microstructural Characteristics of Dispersion Strengthened Cu-based System. In: P. Šandera (ed.) *Proc. 3rd International Conference on Materials Structure & Micromechanics of Fracture*. Vutium, Brno University of Technology, CD ROM p. 223 - 231.

- Velgosová, O., I. Saxl a M. Besterci (2002) Size estimation of uniform grain: Dispersion strengthened Cu-based system. *Engineering Mechanics* **10**, 181-190
- Voronoi, G. (1908) Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques, deuxième mémoire, recherches sur les paralléloèdres primitifs. *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, **134**, 198-287.
- Weaire, D. (1974) Some remarks on the arrangement of grains in a polycrystal. *Metallography*, **7**, 157-160.

## ABSTRACT

The database was founded in 1999 and completely rebuilt in 2003 with the aim to collect the data obtained by computer simulations for generating processes covering a very wide range of patterns. Patterns more regular than the stationary Poisson point process are represented by regular lattices of different type (simple, face centred and body centred cubic, monoclinic), by the corresponding displaced lattices (using the Bookstein model), hard-core models (Matérn I, II, simple sequential inhibition) and by Strauss model. Less regular cluster processes use as the parent process either Poisson point process or simple cubic lattice. Cluster fields are of the generalized Neymann-Scott type with a variable probability  $p$  of the cluster implantation into the parent point (they are called the Bernoulli cluster fields; the parent process is reproduced if  $p=0$ , simple Neymann-Scott cluster field results if  $p=1$  and a mixture of the both processes is locally obtained otherwise). The last examined point field is the Bernoulli mixture process. Pieces of a point process  $\Phi_m$  of intensity  $\lambda_m$  are implanted with a probability  $p$  into the interior of pre-cells generated by the parent process of intensity  $\lambda_p \ll \lambda_m$ . The resulting process is the union of these pieces and of the parent points of the void pre-cells.

The generated tessellations then range from regular to multimodal tessellations with the cell volume ratio  $1:10^9$  and a very pronounced inhomogeneity produced by locally connected huge cells encircled by areas of small cells etc. In order to create tessellations with variable shapes, three types of clusters have been introduced: Matérn globular clusters generate mainly equiaxial cells, spherical clusters produce plate-like, rod-like and wedge like cells, regular clusters produce pyramid-like cells. The number of examined cells (after the edge correction) in one realization is typically  $10^3$  ( $10^2$  in the locally inhomogeneous cases) and usually about  $10^3$  independent realization was produced. Together with the original 3D tessellations, also the tessellations induced by them in isotropic planes and lines are examined.

The range of the simulated unit tessellations can be seen at best from the achieved extent (shown in the parentheses, the number in italics is the corresponding value of the Poisson-Voronoi tessellation) of the main cell characteristics: the expected cell mean width  $Ew$  (0.3 - 2, {*1.458*}), the expected surface area  $Es$  (1.8 - 10, {*5.82*}), the cell volume variance  $var v$  (0 - 300, {*0.178*}). The database contains data on the following characteristics of the original 3D tessellations and of the induced planar and line tessellations:

characteristic of 3D cells: volume  $v$ , surface area  $s$ , mean width  $w$ , perimeter  $p$ , two shape factors  $g$  and  $f$ , number of faces  $n$ , random dihedral angle (one randomly selected dihedral angle per cell), average cell dihedral angle,

characteristics of 2D profiles: area  $v'$ , perimeter  $s'$ , shape factor  $f'$ , random edge angle,

characteristics of 1D chords: chord lengths  $v''$ .

The following sample features and parameters describing the distribution of each cell, profile and chord characteristic are exposed and can be downloaded:

1. Number of examined cells and realizations, minimum and maximum values from all realizations, four population moments.
2. Quantiles  $q_\alpha$ ,  $\alpha = 0.0001, 0.001, 0.01, 0.05, 0.10, 0.015, \dots, 0.95, 0.99, 0.999, 0.9999$  in the tabular form and graphs of the distribution and probability distribution functions constructed from them.
3. The  $w$ - $s$  diagram was proposed as a graphical tool for classification of 3D tessellations. In this diagram is any unit tessellation characterized by its mean cell characteristics  $Ew$ ,  $Es$  in the  $\{w,s\}$  plane. Tessellations generated by point fields of the same type differing in some parameter  $u$  are then represented by curves parameterised by  $u$ . Coefficients of variation of cell volume, profile area and chord length can be plotted as marks. The main applications of the database are grain size estimation, fractography, anisotropy testing and crystal growth.