

Научная статья

УДК 553.062/.067, 553.251, 553.21/.24, 515.14

doi:10.37614/2949-1215.2025.16.1.047

ПОЛУЧЕНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ ТРЕХМЕРНЫХ СТРУКТУР С ПОМОЩЬЮ ФУНКЦИОНАЛОВ МИНКОВСКОГО И ЧИСЕЛ БЕТТИ НА ПРИМЕРЕ МИКРОТОМОГРАФИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

**Евгений Александрович Грачев¹, Василий Витальевич Тимошенко²,
Диана Владимировна Мануковская³, Михаил Валерьевич Чернявский⁴,
Андрей Олегович Калашников^{5, 6}**

^{1, 2, 4}Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

³Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья имени И. В. Тананаева Кольского научного центра Российской академии наук, Апатиты, Россия

⁵Геологический институт Кольского научного центра Российской академии наук, Апатиты, Россия

⁶Инженерная школа, Апатитский филиал Мурманского арктического университета, Апатиты, Россия

¹grachevea@gmail.com

²timvasv2gg@gmail.com, <http://orcid.org/0009-0008-5916-8867>

³d.manukovskaia@ksc.ru, <http://orcid.org/0000-0002-9139-3502>

⁴chernjavskiy.mv15@physics.msu.ru, <http://orcid.org/0009-0009-6996-141X>

⁵a.kalashnikov@ksc.ru, <http://orcid.org/0000-0001-6766-7174>

Аннотация

Показано, как работа с функционалами Минковского (M_0 — объем, M_1 — площадь поверхности, M_2 — средняя интегральная кривизна, M_3 — характеристика Эйлера — Пуанкаре и набор чисел Бетти) выявляет связи между разными видами объектов (фазами), размещенными в одном объеме. Наша работа показывает возможности использования инструментария функционалов Минковского и чисел Бетти для описания внутренней структуры сложных материалов на примере минералов реального геологического образца (меймечит, Контозерский комплекс). Большая ценность представленного подхода заключается в количественной характеристике топологических и морфологических особенностей фаз. Изображение для анализа методами алгебраической топологии и интегральной геометрии было получено с помощью рентгеновской компьютерной микротомографии (X-μCT).

Ключевые слова:

функционалы Минковского, объем, площадь, площадь поверхности, характеристика Эйлера — Пуанкаре, числа Бетти, меймечит, Контозеро

Благодарности:

статья выполнена при поддержке федерального бюджета по теме государственного задания Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья имени И. В. Тананаева Кольского научного центра Российской академии наук № FMEZ-2025-0055; Геологического института Кольского научного центра Российской академии наук № FMEZ-2024-0008; Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

Финансирование:

государственное задание по теме НИР № FMEZ-2025-0055; № FMEZ-2024-0008; МГУ.

Для цитирования:

Получение количественной оценки топологических особенностей трехмерных структур с помощью функционалов Минковского и чисел Бетти на примере микротомографических изображений / Е. А. Грачев [и др.] // Труды Кольского научного центра РАН. Серия: Технические науки. 2025. Т. 16, № 1. С. 268–273. doi:10.37614/2949-1215.2025.16.1.047.

Original article

OBTAINING A NUMERICAL ESTIMATE OF TOPOLOGICAL FEATURES OF A 3D STRUCTURE USING MINKOWSKI FUNCTIONALS USING X-μCT IMAGES

**Evgeniy A. Grachyov¹, Vasiliy V. Timoshenko², Diana V. Manukovskaya³, Mikhail V. Chernyavskiy⁴,
Andrey O. Kalashnikov^{5, 6}**

^{1, 2, 4}Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

³Tananaev Institute of Chemistry—Subdivision of the Federal Research Centre “Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences”, Apatity, Russia

⁵*Geological Institute—Subdivision of the Federal Research Centre “Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences”, Apatity, Russia*

⁶*Engineering School of the Apatity branch of the Murmansk Arctic University, Apatity, Russia*

¹*grachevea@gmail.com*

²*timvasv2gg@gmail.com, <http://orcid.org/0009-0008-5916-8867>*

³*d.manukovskaia@ksc.ru, <http://orcid.org/0000-0002-9139-3502>*

⁴*chernjavskiy.mv15@physics.msu.ru, <http://orcid.org/0009-0009-6996-141X>*

⁵*a.kalashnikov@ksc.ru, <http://orcid.org/0000-0001-6766-7174>*

Abstract

This study demonstrates how the application of Minkowski functionals (M_0 — volume, M_1 — surface area, M_2 — mean integral curvature, M_3 — Euler-Poincaré characteristic) along with Betti numbers can reveal relationships between different object types (phases) within a shared volume. We showcase the use of Minkowski functionals and Betti numbers for characterizing the internal structure of complex materials, exemplified by minerals from a natural geological sample (meimechite, Kontozero Complex). The significant advantage of the presented approach is its ability to provide quantitative characterization of the topological and morphological properties of the phases. The image used for analysis via algebraic topology and integral geometry was acquired using X-ray computed microtomography (X-ray μ CT).

Keywords:

Minkowski functionals, volume, area, Euler-Poincaré characteristic, Betti numbers, meimechite, Kontozero

Acknowledgements:

The article was supported by the federal budget on the topic of the state assignment of the Tananaev Institute of Chemistry—Subdivision of the Federal Research Centre “Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences” No. FMEZ-2025-0055; Geological Institute—Subdivision of the Federal Research Centre “Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences” No. FMEZ-2024-0008; Lomonosov Moscow State University.

Funding:

The federal budget on the topics FMEZ-2025-0055, FMEZ-2024-0008, MSU.

For citation:

Obtaining a numerical estimate of topological features of a 3d structure using minkowski functionals using X- μ CT images / E. A. Grachyov [et al.] // Transactions of the Kola Science Centre of RAS. Series: Engineering Sciences. 2025. Vol. 16, No. 1. P. 268–273. doi:10.37614/2949-1215.2025.16.1.047.

Введение

На данный момент в науке есть две большие задачи. Во-первых, научное знание благодаря технологии томографирования (X-CT) получает возможность видеть структуры геологических, биологических, материаловедческих образцов в 3D. И для этого раздела важно иметь инструменты обработки информации. В частности, нужны способы выделения типов распределенных в объеме фаз, численной оценки взаимодействия между ними. Без этого инструментария 3D-технологии не более чем красивая иллюстрация знаний, которые можно легко получить и в 2D. Во-вторых, науки о земле на данный момент озабочены поиском таких универсальных характеристик, которые могли бы однозначно описывать формы частиц, минералов, пород и даже месторождений. Вводятся сложные — и часто без понятной физической подоплеки — понятия типа elongation index, roundness index и roughness index (были введены почти сто лет назад) [1]. С тех пор эти показатели и их моделирование только усложняются [2]. Например, в работах [3; 4] введены родственные, но иные понятия — conventional particle shape indicators. Работа [5] посвящена поиску связи между этими индексами. Некоторые геологические атрибуты могут описывать более чем один аспект (например, Phase Specific Interfacial Area (PSIA) может указывать на переплетение зерен [6; 7]). В [5; 8] введены Fourier descriptors, которые тоже формализуют форму частиц, однако эти термины использует зачастую только узкая научная группа. Иногда влияние формы элементов системы на ее различные физические свойства исследуется от противного. Например, в [9] придали пенокерамике конкретную структуру, а потом исследовали прочность. В целом, очевидно, что формализация морфологических особенностей различных структур, в том числе полученных целенаправленно, — весьма актуальная задача. Функционалы Минковского — это M_0 — объем, M_1 — площадь поверхности, M_2 — средняя интегральная кривизна и M_3 — характеристика Эйлера — Пуанкаре, равная знакопеременной сумме чисел Бетти. Числа Бетти — это топологические инварианты, в трехмерном пространстве b_0 — количество объектов фазы, b_1 — количество сквозных

отверстий, b_2 — количество замкнутых пор. Во-первых, если взять все объекты одного типа в объеме (то есть все объекты одной фазы) и поставить для каждого точку в трехмерном пространстве с осями M_0 – M_2 , то, если все объекты образуют плоскость или хотя бы ложатся в облако, это значит, что все эти объекты формировались в одинаковых физических условиях. Таким образом, анализ функционалов Минковского численно покажет, насколько похожими были условия образования объектов. Во-вторых, числа Бетти тоже могут численно показать топологические особенности выделенных фаз: сколько в каждой фазе частиц (b_0), каналов (b_1), есть ли закрытые поры (b_2). Но особенно ценным анализ чисел Бетти является при сравнении фаз попарно, по тройкам и т. д. Например, если количество частиц одной фазы $b_0^{(1)} = 100$, другой фазы $b_0^{(2)} = 100$, то $b_0^{(1)} + b_0^{(2)} = 200$. Если сложить эти фазы в одну и рассмотреть как единое целое, то разные варианты $b_0^{(12)}$ дадут нам различные способы численной оценки топологических особенностей. Анализ для всех возможных сочетаний всех чисел Бетти дает мощный численный инструмент для оценки взаимодействия частиц разных фаз, занимающих один объем. При этом такие показатели просты, понятны и легко вычисляются современными методами. Мы показали применимость этого анализа на примере реального геологического образца меймечита из Контозерского комплекса.

Экспериментальная часть

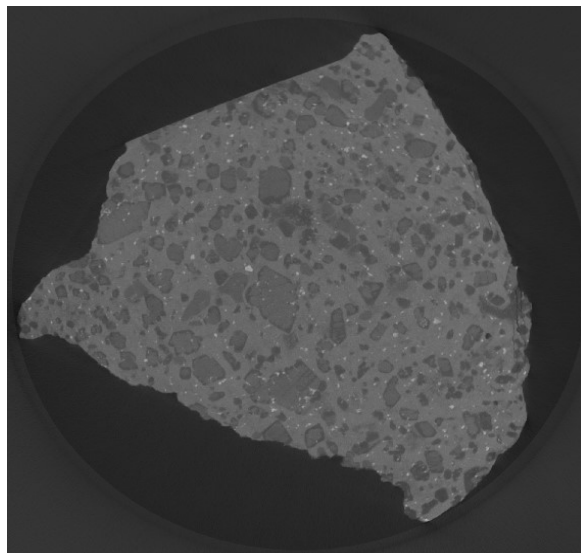
Изученный образец — меймечит из Контозерского вулcano-плутонического комплекса (Кольский полуостров, Северо-Запад России). Структура породы порфировая. В мелкозернистой основной массе встречаются относительно крупные вкрапленники оливина. Основная масса сложена микролитами диопсида, флогопита, шпинелидами и раскристаллизованным вулканическим стеклом. Декристаллизованное вулканическое стекло представляет собой тонкозернистый агрегат гидробиотита и серпентина. Основная мелкозернистая масса содержит глобулы, образования округлой (до 2 мм в диаметре), реже неправильной формы, без какой-либо внутренней структуры. Для получения информации о 3D-структуре образца использовалась высокоразрешающая микрофокусная компьютерная томография (X-μCT) на базе рентгеновской системы компьютерной томографии v|tome|x L240 (GE Sensing & Inspection Technologies GmbH, Германия, Берлин). Настройки исследования: увеличение изображения — 17,76 крат; размер вокселя — 51 мкм; тип сканирования — спиральное; количество проекций — 2024; размер изображения проекции — 2024 × 2024; экспозиция — 500 мс; количество изображений одной проекции при усреднении — 3; ускоряющее напряжение рентгеновской трубки — 100 кВ; ток излучателя — 185 мкА. Каждый воксель составил 51 мкм. Линейные размеры образца составляли приблизительно 2 × 2 × 3 см, что соответствует 436 томографическим срезам. Для анализа 3D-изображения использовались программные продукты Avizo Fire, GeoDict, ImageJ/Fiji и др. Вычисление функционалов Минковского и чисел Бетти на цифровых изображениях выполнялось с использованием библиотеки quantimpy на языке Python в среде Jupyter. Для вокселей изображения при вычислении использовалась 26-связность. Регрессионный анализ был выполнен для метрических характеристик M_0 – M_2 ; информация о топологических инвариантах (числах Бетти) рассматривается отдельно.

Результаты

На рисунке представлен срез номер 348 образца из Контозера. Рисунок показывает разделенное изображение среза, полученное в X-μCT (см. рис.), и выделенные по методу мульти-Оцу и связанных компонент 4 фазы. Мы пронумеровали фазы по оттенкам серого: фаза 1 является самой темной и наименее рентгеноплотной, фаза 4 — наиболее светлой и наиболее рентгеноплотной.

Фаза 2 представляет собой округлые, слабо ограненные цельные зерна и соответствует оливину и кальциту, фаза 1 образует оболочки зеленых зерен и соответствует серпентиновым каймам, а самая светлая фракция (фаза 4) — это мелкие отдельные точки, разбросанные по серому полю, соответствует оксишпинелям (магнетиту). Фаза 3 соответствует вмещающей породе и включает все зерна, которые невозможно выделить в силу измерительного ограничения (>51 мкм/воксель). Мы выделили все объекты каждой фазы, для каждого объекта измерили функционалы M_0 – M_2 и в пространстве этих функционалов поместили каждый объект. При построении линейной регрессии выяснилось, что объекты каждой фазы образуют плоскость. Коэффициент детерминации R^2 для фаз составил: фаза 1 — 0,98; фаза 2 — 0,96; фаза 3 — 0,99; фаза 4 — 0,98. Следовательно, результаты регрессионного

анализа обладают статистической значимостью и облако точек для каждой фазы может быть аппроксимировано плоскостью с высокой точностью. Облака точек, построенные для объектов из разных фаз, лежат в разных плоскостях в пространстве координат метрических характеристик M_0 – M_2 .



Срез номер 348 образца из Контозера. Изображение среза, полученное в X-мСТ, и 4 фазы, выделенные по методу мульти-Оцу и связанных компонент

Наиболее интересные результаты были получены при анализе чисел Бетти. Фаза 1 (серпентин). Таких объектов довольно много. Не более половины из них имеют сквозные отверстия, но практически нет закрытых пор. То есть это такие панели, в которые другие фазы впаяны, но насквозь, то есть другие фазы выходят за пределы фазы 1 как минимум с двух сторон. При этом как минимум половина объектов фазы 1, как правило, сплошные. Например, в сечениях, обсуждаемых в работе [10], не совсем ясно, полностью ли серпентин обволакивает зерна оливина. Наши исследования показывают, что фаза 1 не полностью покрывает зерна фазы 2, но закрывает сквозные каналы в них. Фаза 2 (оливин, кальцит). Это множество отдельных зерен с высокоразвитой поверхностью, сквозными отверстиями и закрытыми порами. В среднем на объект приходится 1,35 канала, а закрытые поры — в среднем на каждые 15 зерен. Эта информация дополняет и расширяет известные данные об оливине в лампрофирах Контозерского месторождения. Например, двумерные изображения показывают, что зерно оливина распадается на несколько более мелких и хорошо ограненных в [10]. Наши данные подтверждают, что в объеме эти зерна представляют собой единый массив с большим количеством сквозных туннелей. Парный анализ показал, что часть из них заполнена фазой 1, а часть — агрегированными мелкими частицами фаз 3 и 4. Фаза 3 (вмещающая масса). Каркас, в который встроены другие фазы. Фаза 3 имеет значительно меньше объектов, чем фазы 1 и 2. Согласно морфологии этой фазы, все другие фазы или несколько больших по объему связанных областей встроены в один большой кусок вмещающей породы и все каналы и закрытые поры встроены в них. Остальная часть количества — это небольшие включения этой фазы во всех остальных. Все зерна фаз 1, 2, 4 совместно занимают все закрытые поры фазы 3, и некоторое количество зерен (~10 тыс.) выходит на поверхность образца. Фаза 4 (магнетит). Это ряд цельных мелких зерен. Скорее всего, они внедрены в другие фазы и заполняют в них каналы и поры. Зерна магнетита часто ассоциируют с минералами матрицы-хозяина и вместе с ними заполняют каналы и поры в оливине и серпентине. Прослеживается прямая связь между изменениями чисел Бетти при объединении различных фаз и взаимным пространственным расположением минералов. Оливин (фаза 2) разбит сетью каналов. Зерна оливина естественным образом преобразованы в серпентин (фаза 1) по краям и трещинам. Магнетит (фаза 4) и мелкозернистые минералы матрицы (фаза 3) заполняют каналы в оливине и серпентине. Это подтверждает

происхождение наблюдаемой ассоциации: сначала образуется ранний оливин, затем он замещается серпентином. Мелкозернистые минералы матрицы, которые не разрешаются рентгеновской микротомографией, образуются несколько позже оливина. Магнетит входит в состав мелкозернистой массы и тесно сростается с минералами матрицы.

Выводы

Функционалы Минковского и числа Бетти позволяют эффективно количественно характеризовать морфологию реального геологического образца меймечита из Контозера. Такой метод в перспективе можно применять для количественной характеристики морфологии любых объектов, в том числе синтезированных. Особенно интересно будет применить его к объектам, в которых больше 2 фаз.

Список источников

1. Wadell H. Volume, shape, and roundness of rock particles // *The Journal of Geology*. 1932. V. 40. P. 443–451. DOI: <https://doi.org/10.1086/623964>. 548.
2. Gadelmawla E. S., Koura M. M., Maksoud T. M. A., Elewa I. M., Soliman H. H. Roughness parameters // *Journal of Materials Processing Technology*. 2002. V. 123. P. 133–145. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0924-0136\(02\)00060-2](https://doi.org/10.1016/S0924-0136(02)00060-2).
3. Mollon G., Zhao J. 3D generation of realistic granular samples based on random fields theory and Fourier shape descriptors // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2014. V. 279. P. 46–65. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2014.06.022>. 559.
4. Su D., Yan W. M. Quantification of angularity of general-shape particles by using Fourier series and a gradient-based approach // *Construction and Building Materials*. 2018. V. 161. P. 547–554.
5. Wang X., Liang Z., Nie Z., Gong J. Stochastic numerical model of stone-based materials with realistic stone inclusion features // *Construction and Building Materials*. 2019. V. 197. P. 830–848. doi: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.10.062>.
6. Navarra A., Grammatikopoulos T., Waters K. Incorporation of geometallurgical modelling into long-term production planning // *Minerals Engineering*, 2018. V. 120. P. 118–126. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2018.02.010>.
7. Little L., Mainza A. N., Becker M., Wiese J. G. Using mineralogical and particle shape analysis to investigate enhanced mineral liberation through phase boundary fracture // *Powder Technology*. 2016. V. 301. P. 794–804. doi: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.06.052>.
8. Li R.-D., He Sh.-H., Jiang H., Xu Ch., Yang M. Morphology-Controlled Single Rock Particle Breakage: An FDEM Study with Fractal Dimension Analysis // *Fractal Fract*. 2025. V. 9, Iss. 9. Art. 562. DOI: <https://doi.org/10.3390/fractalfract9090562>.
9. Xu Y., Gao Y., Yang X., Tian Ch., Yang Zh., Zhang J. Relationship between topological structures and mechanical properties of artificially architected SiC cellular ceramics: Experimental and numerical study // *Journal of European Ceramic Society*. 2023. V. 43, Iss. 10. P. 4263–4276. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2023.03.067>.
10. Забавчик Н. И., Базай А. В. Карбонатные минералы Контозерского палеовулканического комплекса // Труды Ферсмановской научной сессии ГИ КНЦ РАН. 2022. Т. 19. С. 107–111. doi: <https://doi.org/10.31241/FNS.2022.19.020>.

References

1. Wadell H. Volume, shape, and roundness of rock particles. *J. Geol.*, 1932, V. 40, pp. 443–451. doi: <https://doi.org/10.1086/623964>. 548.
2. Gadelmawla E. S., Koura M. M., Maksoud T. M. A., Elewa I. M., Soliman H. H. Roughness parameters. *J. Mater. Proc. Techn.*, 2002, V. 123, pp. 133–145. doi: [https://doi.org/10.1016/S0924-0136\(02\)00060-2](https://doi.org/10.1016/S0924-0136(02)00060-2).
3. Mollon G., Zhao J. 3D generation of realistic granular samples based on random fields theory and Fourier shape descriptors. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 2014, V. 279, pp. 46–65. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2014.06.022>. 559.
4. Su D., Yan W. M. Quantification of angularity of general-shape particles by using Fourier series and a gradient-based approach. *Constr. Build. Mater.*, 2018, V. 161, pp. 547–554.
5. Wang X., Liang Z., Nie Z., Gong J. Stochastic numerical model of stone-based materials with realistic stone inclusion features. *Constr. Build. Mater.*, 2019, V. 197, pp. 830–848. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.10.062>.
6. Navarra A., Grammatikopoulos T., Waters K. Incorporation of geometallurgical modelling into long-term production planning. *Min. Eng.*, 2018, V. 120, pp. 118–126. doi: <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2018.02.010>.
7. Little L., Mainza A. N., Becker M., Wiese J. G. Using mineralogical and particle shape analysis to investigate enhanced mineral liberation through phase boundary fracture. *Powd. Techn.*, 2016, V. 301, pp. 794–804. doi: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.06.052>.

8. Li R.-D., He Sh.-H., Jiang H., Xu Ch., Yang M. Morphology-Controlled Single Rock Particle Breakage: An FDEM Study with Fractal Dimension Analysis. *Fractal Fract.*, 2025, V. 9, Iss. 9, Art. 562. doi: <https://doi.org/10.3390/fractalfract9090562>.
9. Xu Y., Gao Y., Yang X., Tian Ch., Yang Zh., Zhang J. Relationship between topological structures and mechanical properties of artificially architected SiC cellular ceramics: Experimental and numerical study. *J. Europ. Ceram. Soc.*, 2023, V. 43, Iss. 10, pp. 4263–4276. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2023.03.067>.
10. Zabavchik N. I., Bazai A. V. Carbonate minerals of the Kontozero palaeovolcanic complex. *Proceedings of the Fersman Scientific Session of the Geological Institute of the Kola Science Center of the Russian Academy of Sciences*, 2022, V. 19, pp. 107–111. doi: <https://doi.org/10.31241/FNS.2022.19.020>. (In Russ.).

Информация об авторах

Е. А. Грачев — кандидат технических наук, доцент;

В. В. Тимошенко — аспирант;

Д. В. Мануковская — младший научный сотрудник;

М. В. Чернявский — аспирант;

А. О. Калашников — кандидат геолого-минералогических наук, ведущий научный сотрудник; директор ИШ АФ МАУ.

Information about the authors

E. A. Grachyov — PhD (Engineering), Associate Professor;

V. V. Timoshenko — Postgraduate Student;

D. V. Manukovskaya — Research Assistant;

M. V. Chernyavskiy — Postgraduate Student;

A. O. Kalashnikov — PhD (Geology), Senior Researcher; Director of ES AB MAU.

Статья поступила в редакцию 14.08.2025; одобрена после рецензирования 28.08.2025; принята к публикации 12.09.2025.
The article was submitted 14.08.2025; approved after reviewing 28.08.2025; accepted for publication 12.09.2025.