



H L R I S

Institut für  
Höchstleistungsrechnen

**FORSCHUNGS- UND ENTWICKLUNGSBERICHTE**

*ANALYSE KONTINUUMSMECHANISCHER,  
ANISOTROPER MATERIALPARAMETER  
MIKROSTRUKTURIERTER VOLUMINA MIT HILFE  
DIREKTER MECHANISCHER SIMULATION*

Ralf Schneider



Höchstleistungsrechenzentrum  
Universität Stuttgart  
Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. Dr. h.c. M. Resch  
Nobelstrasse 19 - 70569 Stuttgart  
Institut für Höchstleistungsrechnen

*ANALYSE KONTINUUMSMECHANISCHER,  
ANISOTROPER MATERIALPARAMETER  
MIKROSTRUKTURIERTER VOLUMINA MIT HILFE  
DIREKTER MECHANISCHER SIMULATION*

von der Fakultät Energie-, Verfahrens- und Biotechnik  
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines  
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

**Ralf Schneider**

aus Freiburg i. B.

Hauptberichter:	Prof. Dr.- Ing. Dr. h.c. Dr. h.c. Prof. E.h. Michael M. Resch
Mitberichter:	Prof. Oliver Röhrle, PhD
Tag der Einreichung:	15. April 2015
Tag der mündlichen Prüfung:	14. Dezember 2015
CR-Klassifikation:	I.3.2, I.6.6

D93

ISSN 0941 - 4665

Januar 2016

HLRS-14

---

Für Pauline, Marie und David

---

---

# Danksagung

An erster Stelle danke ich meinen Eltern und meiner Schwester, die mir das Studium der Luft- und Raumfahrttechnik und damit diese Arbeit ermöglichten und mich während meiner Ausbildung und Arbeit in jeder erdenklichen Art unterstützten.

An zweiter Stelle möchte ich Herrn Dipl.-Math. Uwe Küster danken, der mir während der Anfertigung dieser Arbeit und meiner gesamten Beschäftigungszeit am Bundeshochleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) ein hervorragender „Chef“ war, mich ebenfalls in jeder erdenklichen Art unterstützte, all meinen Ideen stets aufgeschlossen gegenüberstand und mir die wissenschaftliche Freiheit ermöglichte, die zu den vorliegenden Ergebnissen führte.

Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. Dr. h.c. Hon.-Prof. Michael M. Resch, der mir durch die Anstellung am HLRS zunächst als Stipendiat und später als wissenschaftlicher Mitarbeiter die Möglichkeit und Freiheit eröffnete mich dem von mir gewählten und nun in dieser Arbeit dargestellten Forschungsbereich zu widmen.

Ebenso danke ich Herrn Dr.-Ing. Ulrich Hindenlang, der mich darin bestärkte, die in meiner Studienarbeit begonnenen Forschungen an menschlichem Knochenmaterial weiter zu verfolgen, mich an Herrn Prof. Resch und das HLRS empfahl und mich in vielen Fragen der strukturmechanischen numerischen Simulation unterstützte.

Herrn Prof. Dr. med. Peter Helwig danke ich insbesondere für die Idee menschliche Femurköpfe als Probenmaterial zu verwenden, wodurch diese Arbeit in der vorliegenden Form erst möglich wurde sowie für die Beratung in allen medizinischen Fragestellungen dieser Arbeit.

Dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Institut für Bauweisen und Strukturtechnologie in Stuttgart möchte ich für die Anfertigung des Mikrofokus-Computertomographiedatensatzes eines von Herrn Prof. Helwig, im Rahmen der Implantation einer Totalhüftendoprothese, entnommenen menschlichen Femurkopfes danken. Dieser Datensatz bildet die Basis für alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Betrachtungen und Analysen.

Herrn Dr.-Ing. Hans Wüstenberg und der LASSO Ingenieurgesellschaft mbH danke ich für die lizenzfreie Überlassung des Finite Method Programming System (FMPS), ohne dessen Hilfe die Ausführung der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten numerischen Simulationen auf den High Performance Computing Systemen des HLRS nicht möglich gewesen wären.

Zum Schluss möchte ich auch Frau Dr. Maria Haase für das Korrekturlesen des mathematisch-/ theoretischen Teiles dieser Arbeit danken.

Ralf Schneider

Kornwestheim im April 2015



---

# Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>v</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>ix</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>xiii</b>
<b>Nomenklatur</b>	<b>xv</b>
<b>Abkürzungen</b>	<b>xxi</b>
<b>Zusammenfassung</b>	<b>xxiii</b>
<b>Abstract</b>	<b>xxv</b>
<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Motivation . . . . .	1
1.2. Stand der Technik . . . . .	3
1.3. Ziele . . . . .	5
<b>2. Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1. Grundlagen der Elastizitätstheorie . . . . .	8
2.1.1. Bewegung des Kontinuums . . . . .	8
2.1.2. Der Dehnungstensor . . . . .	9
2.1.3. Kompatibilitätsbedingungen . . . . .	11
2.1.4. Der Spannungstensor . . . . .	11
2.1.5. Gleichgewichtsbedingungen am linear elastischen Volumen . .	13
2.1.6. Linearelastisches Materialgesetz . . . . .	14
2.1.7. Matrizennotation des linearelastischen Materialgesetzes . . . .	17
2.1.8. Materialsymmetrie . . . . .	18
2.1.9. Transformation der Materialmatrix . . . . .	21
2.1.10. Optimierung der Materialmatrix . . . . .	23
2.2. Methode der Finiten Elemente . . . . .	27
2.2.1. Das Prinzip der Virtuellen Verschiebungen . . . . .	27
2.2.2. Gleichgewicht eines Finiten Elements . . . . .	29
2.2.3. Aufstellen der Elementsteifigkeit . . . . .	30
2.2.4. Aufstellen der kinematisch konsistenten Lastmatrix . . . . .	32
2.2.5. Integration der Steifigkeitsmatrix im Parameterraum . . . . .	35
2.2.6. Ermittlung der Dehnungen und Spannungen im Element . . . .	37
2.2.7. Ansatz für lineare Elemente . . . . .	38

---

2.2.8.	Assemblierung der Systemmatrizen . . . . .	40
2.3.	Datengewinnung und -Verarbeitung . . . . .	42
2.3.1.	Computertomographie . . . . .	43
2.3.2.	Mikrofokus Computertomographie . . . . .	43
2.3.3.	Klinische Computertomographie . . . . .	44
2.3.4.	Gebietszerlegung . . . . .	45
2.4.	Grundlagen der Multivariaten Statistik . . . . .	50
2.4.1.	Parametrisierung von Mischverteilungen . . . . .	50
2.4.2.	Diskriminanzanalyse . . . . .	54
2.4.3.	Hauptkomponentenanalyse . . . . .	55
<b>3.</b>	<b>Direkter mechanischer Ansatz</b>	<b>59</b>
3.1.	Das mikrostrukturierte Volumenelement . . . . .	59
3.2.	Mittlere Eigenschaften des mikrostrukturierten Volumenelements . . . . .	61
3.2.1.	Mittlerer Spannungstensor . . . . .	61
3.2.2.	Mittlerer Dehnungstensor . . . . .	64
3.2.3.	Der lokale Strukturtensor . . . . .	65
3.2.4.	Mittlerer Steifigkeitstensor . . . . .	66
3.3.	Probleme der analytischen Methode . . . . .	68
3.3.1.	Verschiebungsrandbedingungen . . . . .	69
3.3.2.	Spannungsrandbedingungen . . . . .	77
3.3.3.	Vergleich der Randbedingungen . . . . .	80
3.4.	Direkte Approximation der MVE Steifigkeit . . . . .	80
3.5.	Applikation des direkten mechanischen Ansatzes . . . . .	84
3.5.1.	Das homogene Einheitselement . . . . .	85
<b>4.</b>	<b>Gewebeproben und Datensätze</b>	<b>91</b>
4.1.	Gewebeproben . . . . .	92
4.2.	$k$ -CT-Aufnahmen . . . . .	92
4.3.	$\mu$ -CT-Aufnahme . . . . .	97
4.3.1.	Ausgezeichnete Volumina der $\mu$ -CT . . . . .	98
4.3.2.	Gebietszerlegung der $\mu$ -CT . . . . .	101
4.3.3.	Bestimmung der Phasengrenze . . . . .	101
4.4.	Koordinatenursprung und Datensatztransformationen . . . . .	104
<b>5.</b>	<b>Implementierung</b>	<b>107</b>
5.1.	Übersicht . . . . .	107
5.1.1.	Bearbeitung eines MVE . . . . .	108
5.1.2.	Prozesssteuerung . . . . .	109
5.1.3.	Ressourcenabschätzung . . . . .	111
5.2.	Datenübergabe und Datenspeicherung . . . . .	116
5.2.1.	Das Datenformat <i>PureDat</i> . . . . .	116
5.2.2.	Datenstrukturierung mit <i>PureDat</i> . . . . .	118
5.2.3.	Applikation von <i>PureDat</i> . . . . .	121
5.3.	Bearbeitung eines MVE . . . . .	131
5.3.1.	Modellerstellung . . . . .	132
5.3.2.	Statische Simulationen . . . . .	138



5.3.3.	Berechnung der effektiven Materialparameter . . . . .	150
5.4.	Prozesssteuerung . . . . .	153
5.4.1.	Script Implementierung . . . . .	154
5.4.2.	MPI Implementierung . . . . .	160
5.5.	Datenarchivierung . . . . .	162
<b>6.</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>167</b>
6.1.	Strukturbeschreibende Parameter . . . . .	167
6.1.1.	Relative Dichte der ausgezeichneten Volumina . . . . .	168
6.1.2.	Statistische Verteilung der relativen Dichte in den Gesamtzerlegungen . . . . .	174
6.2.	Kontinuumsmechanische Materialparameter . . . . .	179
6.2.1.	Spektralnorm und Symmetrieabweichung der effektiven Steifigkeit . . . . .	179
6.2.2.	Statistische Verteilungen der Komponenten der effektiven Steifigkeit . . . . .	184
6.2.3.	Korrelationen zwischen den Komponenten der effektiven Steifigkeit . . . . .	189
6.3.	Kontinuumsmechanische Simulationen . . . . .	222
6.3.1.	Korrelation zwischen mikromechanischen und kontinuumsmechanischen Berechnungen . . . . .	222
6.3.2.	Makromechanische Auswertung des mikromechanischen Modells	225
6.3.3.	Korrelationen der statistischen Spannungsverteilungen . . . . .	229
6.3.4.	Korrelationen der Spannungsverteilungen im makromechanischen Modell . . . . .	234
<b>7.</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>237</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>243</b>
<b>A.</b>	<b>Mathematische Grundlagen</b>	<b>251</b>
A.1.	Differential- und Integralrechnung . . . . .	251
A.2.	Matrizen- und Vektorrechnung . . . . .	252
A.3.	Begriffe der multivariaten Statistik . . . . .	254
A.4.	Grundlagen der Tensorrechnung . . . . .	255
A.4.1.	Notation und Summationskonvention . . . . .	256
A.4.2.	Duale Basen und Metrikensoren . . . . .	257
A.4.3.	Verknüpfung von Tensoren . . . . .	258
<b>B.</b>	<b>Explizite Elementsteifigkeit - HEXE-8</b>	<b>263</b>
<b>C.</b>	<b>Elementare Verschiebungsmoden</b>	<b>267</b>
<b>D.</b>	<b>Antragsschreiben Ethikkommission</b>	<b>273</b>
<b>E.</b>	<b>Multivariate Statistik mit R</b>	<b>275</b>
E.1.	Grundlegende Befehle . . . . .	275
E.2.	Scatterplotmatrizen . . . . .	276

---

E.3. Cluster- und Diskriminanzanalyse mit mclust . . . . .	278
<b>F. Mittlere Steifigkeitsmatrizen der Gesamtzerlegungen</b>	<b>281</b>
F.1. Mittlere Steifigkeitsmatrizen - 0,6 <i>mm</i> . . . . .	281
F.2. Mittlere Steifigkeitsmatrizen - 1,2 <i>mm</i> . . . . .	281
F.3. Mittlere Steifigkeitsmatrizen - 2,4 <i>mm</i> . . . . .	282
<b>G. Scatterplots</b>	<b>283</b>
G.1. Zerlegungsgröße 0,6 <i>mm</i> . . . . .	283
G.2. Zerlegungsgröße 1,2 <i>mm</i> . . . . .	286
G.3. Zerlegungsgröße 2,4 <i>mm</i> . . . . .	289

---

# Abbildungsverzeichnis

1.1.	Beispiele für die Stabilisierung einer Oberschenkelhalsfraktur . . . . .	2
1.2.	Beispiel für Implantatversagen . . . . .	2
2.1.	Zusammenhang von Konfiguration und Verschiebung . . . . .	8
2.2.	Momentengleichgewicht am Volumenelement . . . . .	12
2.3.	Impulssatz am Volumenelement . . . . .	13
2.4.	Arbeit am Volumenelement in 11-Richtung . . . . .	15
2.5.	Verlauf der Kriterien $cr_1$ und $cr_2$ . . . . .	24
2.6.	Minima der Kriterien $cr_1$ und $cr_2$ . . . . .	26
2.7.	Ansatzfunktionen für eine kinematisch konsistente Lastmatrix . . . . .	33
2.8.	Beschreibung des linearen Makroelementes . . . . .	39
2.9.	Tragwerk aus vier Elementen . . . . .	41
2.10.	Prinzip der Computertomographie und zweidimensionale Projektion . . . . .	43
2.11.	Strahlensatz bei der Projektion in einer $\mu$ -CT-Anlage . . . . .	44
2.12.	Links: $k$ -CT-Anlage, Rechts: Komponenten einer $k$ -CT-Anlage . . . . .	45
2.13.	Gebietszerlegung . . . . .	48
2.14.	Demonstration einer Hauptkomponentenanalyse in zwei Dimensionen . . . . .	56
2.15.	Parameterreduktion mit Hilfe einer 2D-Hauptkomponentenanalyse . . . . .	58
3.1.	Definitionen der Phasen und Phasenoberflächen am Volumenelement . . . . .	60
3.2.	Definition der Normalenvektoren auf den Phasenoberflächen . . . . .	61
3.3.	Zweidimensionales Testelement . . . . .	70
3.4.	11-Spannungslösung des zweidimensionalen Testelements . . . . .	75
3.5.	22- und 12-Spannungslösung des zweidimensionalen Testelements . . . . .	75
3.6.	Deformationsmoden am Testelement . . . . .	79
3.7.	Diskrete Zerlegung von $V$ . . . . .	81
3.8.	Diskretisierungsstufen des Einheitselementes . . . . .	85
3.9.	Prinzipielle Verschiebungsmoden . . . . .	86
3.10.	Konvergenz der Steifigkeitsmatrix des homogenen Einheitselements . . . . .	87
3.11.	Durch den Lastfall 7 induzierte Verschiebungen . . . . .	88
3.12.	Durch Lastfall 7 hervorgerufene Knotenkräfte . . . . .	89
4.1.	Femurköpfe $FK_1$ und $FK_2$ . . . . .	93
4.2.	Segmentierung einer Aderwand . . . . .	94
4.3.	Radiale 1D-Dichteprofile einer Nierenarterie . . . . .	95
4.4.	Vergleich der Rekonstruktionen mit unterschiedlichen Faltungskernen . . . . .	96
4.5.	Übersicht des Datenvolumens der $\mu$ -CT . . . . .	99
4.6.	Beschnittene Knochenstruktur ohne kortikale Randbereiche . . . . .	100
4.7.	Lage und Zerlegungsstufen der zentralen Gruppe . . . . .	100

---

4.8.	Dichteverteilungen der Grauwerte in der zentralen Gruppe . . . . .	102
4.9.	Strukturveränderung bei Variation des Schwellwerts . . . . .	103
4.10.	$L^2$ Normen von effektiver und effektiver numerischer Steifigkeit . . . . .	104
5.1.	Übersicht der Abarbeitung eines einzelnen MVE . . . . .	109
5.2.	Zeitgleich arbeitende Prozesse . . . . .	111
5.3.	Mit Spongiosa gefüllte relevante Gelenkbereiche . . . . .	112
5.4.	<i>PureDat</i> Strukturdatentypen mit ihren Attributen . . . . .	118
5.5.	<i>PureDat</i> Strukturbaum zur Speicherung eines Berechnungsgitters . . . . .	123
5.6.	<i>PureDat</i> -Projekte, die zusammengeführt werden sollen . . . . .	128
5.7.	Zusammengeführte <i>PureDat</i> - Projekte . . . . .	130
5.8.	Schematischer Programmablauf der Bearbeitung eines MVE . . . . .	131
5.9.	Differenzen der Spektralnomen der effektiven num. Steifigkeiten . . . . .	133
5.10.	Netz in CT-Auflösung und verfeinertes Netz . . . . .	134
5.11.	Ablaufplan zur Kolorierung unverbundener Gebiete . . . . .	135
5.12.	Möglich Verbindungen von Volumenelementen . . . . .	137
5.13.	Beispiele für statisch bestimmt gelagerte Volumenstrukturen . . . . .	137
5.14.	Laufzeiten der seriellen FMPS Implementierung . . . . .	139
5.15.	Theoretisch mögliche Beschleunigung von FMPS . . . . .	140
5.16.	Einbinden von MPI parallelen Routinen in eine serielle Applikation . . . . .	142
5.17.	Interaktion von FMPS und PETSc . . . . .	144
5.18.	Laufzeiten von FMPS mit seriellen und parallelem Löser . . . . .	147
5.19.	Maximal erzielte Beschleunigung von FMPS . . . . .	149
5.20.	Maximal erzielte Effizienz von FMPS mit parallelem Löser . . . . .	149
5.21.	Übersicht Scriptimplementierung Szenario 1 . . . . .	155
5.22.	Szenario 1: Ablauf des Masterprozess . . . . .	156
5.23.	Übersicht Scriptimplementierung Szenario 2 . . . . .	157
5.24.	Szenario 2: Ablauf der Masterprozesse . . . . .	158
5.25.	Ablaufdiagramm der MPI-Prozesssteuerung . . . . .	161
5.26.	Ablaufdiagramm des Archivierungsalgorithmus . . . . .	164
6.1.	Vergleich von Grauwertistogrammen . . . . .	170
6.2.	Normierte Häufigkeitsverteilungen der relativen Dichte im SV . . . . .	172
6.3.	Unterschreiten der spongiösen Porengröße durch die Zerlegungsgröße . . . . .	174
6.4.	Verteilungen der MVEs mit $V_S < 0,01 V_M$ . . . . .	176
6.5.	Normierte Häufigkeitsverteilungen der relativen Dichte im UV . . . . .	177
6.6.	MVEs der Kortikalis . . . . .	178
6.7.	Ausreißer in der Abhängigkeit der Spektralnorm . . . . .	180
6.8.	Aktivierung einer freien Starrkörperrotation . . . . .	180
6.9.	Abhängigkeiten der Spektralnorm von der relativen Dichte . . . . .	182
6.10.	Statistische Parameter der Komponenten der effektiven Steifigkeit . . . . .	185
6.11.	Mittelwerte der Komponenten der optimierten effektiven Steifigkeit . . . . .	187
6.12.	Verteilungen der Komponenten der optimierten effektiven Steifigkeit . . . . .	188
6.13.	Abhängigkeiten der Komponenten der orthotropen Gruppe . . . . .	191
6.14.	Abhängigkeit der Korrelationen von MVE-Größe und der Optimierung . . . . .	192
6.15.	Korrelationen zwischen $C_{12}$ und $C_{13}$ . . . . .	193
6.16.	Ergebnisse der automatischen Partitionierung einer Stichprobe . . . . .	195

---

6.17.	Ergebnisse der automatischen Partitionierung mit mclust . . . . .	197
6.18.	Vergleich der BIC-Diagramme von 5 Stichproben . . . . .	198
6.19.	Reduktion der Clusteranzahl von 6 auf 4 Gruppen . . . . .	199
6.20.	Gruppe G2 des Klassifikationsergebnis für die Zerlegungsstufe 0,6 mm .	202
6.21.	Klassifikation der betrachteten Datensätze . . . . .	203
6.22.	Visualisierung der Gruppenzugehörigkeit im $\mathbb{R}^3$ . . . . .	204
6.23.	Anteile der Hauptkomponenten an der Gesamtvarianz . . . . .	207
6.24.	Korrelationen mit projizierten Hauptrichtungen . . . . .	210
6.25.	Entwicklung der Originaldaten durch Transformation . . . . .	211
6.26.	Entwicklung der rangtransformierten Daten durch Transformation . . .	213
6.27.	Kumulierter Anteil der Gesamtvarianz bei Gruppierung . . . . .	214
6.28.	Änderungen der Ladungen der Eigenvektoren durch Gruppierung . . . .	216
6.29.	Repräsentative MVEs der einzelnen Gruppen . . . . .	218
6.30.	Komponenten der repräsentativen MVEs . . . . .	219
6.31.	Änderungen der Ladungen der Eigenvektoren durch Gruppierung . . . .	221
6.32.	Mikromechanisches Modell und makromechanische Modelle . . . . .	223
6.33.	Spannungsverteilungen im mikromechanischen Modell . . . . .	224
6.34.	Arithmetischen Mittelwertes bei Gebietszerlegung . . . . .	227
6.35.	Entwicklung der Anzahl von Elementen ohne Inhalt . . . . .	228
6.36.	Arithmetische Mittelwerte der ersten Invariante . . . . .	230
6.37.	Vergleich der statistischen Verteilungen der ersten Invariante . . . . .	231
6.38.	Qualitativer Vergleich der Verteilung der ersten Invariante im Modell .	232
6.39.	Skalierte statistische Verteilungen der ersten Invariante . . . . .	233
6.40.	Korrelation der ersten Invariante im makromechanischen Modell . . . .	234
6.41.	Vergleich der ersten Invariante auf makromechanischer Ebene . . . . .	235
C.1.	Definitionen am HEXE-8 Element . . . . .	267
G.1.	Korelationen der Komponenten für die Zerlegungsstufe 0,6 mm . . . . .	283
G.2.	Gruppe G1 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 0,6 mm . . . . .	284
G.3.	Gruppe G2 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 0,6 mm . . . . .	284
G.4.	Gruppe G3 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 0,6 mm . . . . .	285
G.5.	Gruppe G4 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 0,6 mm . . . . .	285
G.6.	Korelationen der Komponenten für die Zerlegungsstufe 1,2 mm . . . . .	286
G.7.	Gruppe G1 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 1,2 mm . . . . .	287
G.8.	Gruppe G2 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 1,2 mm . . . . .	287
G.9.	Gruppe G3 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 1,2 mm . . . . .	288
G.10.	Gruppe G4 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 1,2 mm . . . . .	288
G.11.	Korelationen der Komponenten für die Zerlegungsstufe 2,4 mm . . . . .	289
G.12.	Gruppe G1 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 2,4 mm . . . . .	290
G.13.	Gruppe G2 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 2,4 mm . . . . .	290
G.14.	Gruppe G3 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 2,4 mm . . . . .	291
G.15.	Gruppe G4 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 2,4 mm . . . . .	291



---

# Tabellenverzeichnis

3.1.	Differenzen der Knotenreaktionskräfte von HEXE-8M und HEXE-8 . . . .	90
4.1.	Spezifikationen der $k$ -CT-Datensätze . . . . .	93
4.2.	Spezifikation des $\mu$ -CT-Datensatzes - Femurkopf $FK_1$ . . . . .	97
4.3.	Parameter der einzelnen MVEs . . . . .	101
4.4.	Parameter der Gesamtzerlegungen der $\mu$ -CT . . . . .	101
4.5.	Physikalische Ursprünge der Koordinatensysteme . . . . .	104
4.6.	Ursprünge und physikalische Koordinaten der zentralen Gruppe . . . . .	105
5.1.	Extrapolation von MVE-Anzahl und resultierenden FE-Simulationen . .	112
5.2.	Serielle Rechenzeiten bei der Abarbeitung eines einzelnen MVE . . . . .	113
5.3.	Anzahl benötigter Dateien pro Prozessschritt für ein MVE . . . . .	114
5.4.	Laufzeitdifferenzen zwischen Intel und AMD Architektur . . . . .	147
5.5.	Messung der Archivierungszeiten für die zentrale Gruppe . . . . .	162
5.6.	Kennzahlen von parallelen Archivierungen . . . . .	165
6.1.	Lage und Höhe der phasenmarkierenden Maxima . . . . .	171
6.2.	Parameter der Normalverteilungen der relativen Dichte im SV . . . . .	173
6.3.	Anzahlen und Anteile der MVEs mit einem Strukturvolumen $V_S \geq 1\%$ .	175
6.4.	Parameter der Normalverteilungen der relativen Dichte im UV . . . . .	177
6.5.	In der statistischen Auswertung berücksichtigte Elemente . . . . .	182
6.6.	Koeffizienten der Ausgleichskurven $\ C\ _2(\rho_{rel})_{L_{\mathcal{M}}}$ . . . . .	183
6.7.	Verhältnisse der Koeffizienten der Ausgleichskurven für $\ C\ _2(\rho_{rel})_{L_{\mathcal{M}}}$ .	183
6.8.	Modellparameter des Klassifikationsmodells . . . . .	201
6.9.	Erste Eigenvektoren bei 0,6 mm MVE Kantenlänge . . . . .	209
6.10.	Parameter des Mikromechanischen FE-Modells . . . . .	224
6.11.	Statistische Kennwerte des mikromechanischen Modells . . . . .	225
6.12.	Statistische Kennwerte der Spannungen in den Zerlegungen . . . . .	226





---

# Nomenklatur

## Schreibweisen:

$a, A$	Skalare
$\mathbf{a}, \mathbf{A}$	Tensoren
$\underline{a}, \underline{A}$	Matrizen

## Präfixe und Akzente:

$\delta$	Virtuelle Größe
$\hat{\phantom{a}}$	Diskrete / Auf Knoten eines Elements wirkende Größe
$\bar{\phantom{a}}$	Mittlere / Effektive Größe

## Bezeichner in der Reihenfolge ihrer Verwendung:

$\mathbf{F}$	Kraft
$\mathbf{e}_i ; \mathbf{E}_i$	Basis bzw. Basisvektoren
$\delta_{ij}$	Kronecker-Delta
$g_{ij}$	Metriktensor
$\otimes$	Tensorielles Produkt
$V$	Volumen / Gebiet des $\mathbb{R}^3$ in physikalischen Koordinaten
$\mathcal{I}^{(i)}$	Einheitstensor der Stufe $i$
$\mathbf{0}^{(i)}$	Nulltensor der Stufe $i$
$\nabla$	Nablaoperator
$\mathbf{X}, \mathbf{x}$	Ortsvektor / Koordinaten im physikalischen Raum
$T$	Zeit
$P$	Raumpunkt
$\mathbf{u}$	Verschiebung
$\mathcal{C}^i$	Konfiguration
$\mathcal{F}$	Deformationsgradient
$L$	Länge / Ausgangslänge
$l$	momentane Länge
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Greenscher Verzerrungstensor

---

$\varepsilon$	Linearer Dehnungstensor
$dV$	Volumenelement
$\Delta A, dA$	Flächenelement
$t$	Kraftflussvektor
$\sigma$	Cauchy Spannungstensor
$n$	Normierter Vektor (Normalenvektor, Rotationsachse)
$\mathcal{T}$	Moment
$\partial V$	Oberfläche
$C$	Elastizitätstensor
$D$	Nachgiebigkeitstensor
$dW$	Arbeit
$dw$	Volumenspezifische Arbeit
$U$	spezifische Formänderungsenergie
$\nu$	Querkontraktions- / Poissonzahl
$E$	Elastizitätsmodul
$G$	Schubmodul
$\underline{C}$	Elastizitätsmatrix
$\underline{D}$	Nachgiebigkeitsmatrix
$\underline{\sigma}$	Spannungsvektor
$\underline{\varepsilon}$	Dehnungsvektor
$a$	Lineartransformation des $\mathbb{R}^3$
$\underline{A}$	Lineare Abbildung
$r$	Rotationstensor der Stufe 2 bzw. Rotationsmatrix des $\mathbb{R}^3$
$\underline{D}$	Äquivalente Abbildung
$\underline{B}$	Orthogonale Transformationsmatrix des $\mathbb{R}^6$
$\alpha, \phi, \eta$	Winkel
$cr_1$	Monotropes Optimierungskriterium
$cr_2$	Orthotropes Optimierungskriterium
$\chi_i$	Suchumgebung
$\delta u$	virtuelle Verschiebung
$\delta \varepsilon$	virtuelle Dehnung
$\delta W$	Virtuelle Arbeit
$\underline{\phi}$	Vektor der Ansatzfunktionen
$\mathcal{N}_e$	Knotenanzahl eines FE

---

$\hat{\underline{u}}$	Matrix der Knotenverschiebungen
$\hat{\underline{P}}_{int}$	Knotenvektor des integrierten Kraftflusses
$\hat{\underline{P}}_{ext}$	Knotenvektor der eingprägten Kräfte
$\delta\hat{\underline{u}}$	Matrix der virtuellen Knotenverschiebungen
$\hat{\underline{f}}$	Matrix der Knotenkräfte
$\underline{\mathbf{K}}$	Steifigkeitsmatrix
$\xi$	Dimensionslose Koordinate
$\underline{\mathbf{J}}$	Jacobimatrix
$\Omega$	Parameterraum
$\partial\Omega$	Oberfläche des Parameterraums
$g_i(\xi_i)$	Basisfunktion
$\underline{\mathbf{A}}$	Koinzidenzmatrix
$\mathcal{N}_T$	Elementanzahl im Tragwerk
$d\mathbf{x} ; dx$	Bildpunktegröße (Pixel, Voxel)
$\mathcal{V}$	Diskretes Volumen
$\mathbf{I} ; I_i$	Anzahl von Voxeln pro Koordinatenachse
$\mathcal{M}$	Teilgebiet / Mikrostrukturiertes Volumenelement
$\mathcal{N}_{\mathcal{M}}$	Gesamtanzahl von Teilgebieten
$\mathcal{N}_i$	Anzahl von Teilgebieten pro Koordinatenachse
$r_i$	Anzahl von Randvoxeln bzw. Geisterzellen
$\mathcal{N}_{Voxel, \mathcal{M}}$	Anzahl von Voxeln in einem Teilgebiet
$\kappa$	Nr. eines Teilgebietes bei linearer Nummerierung
$\kappa_i$	Pos. eines Teilgebietes bei kartesischer Nummerierung
$l_a$	Anfangspunkt eines Teilgebietes in Voxelkoordinaten
$l_e$	Endpunkt eines Teilgebietes in Voxelkoordinaten
$l_{a_{ext}}$	Anfangspunkt eines erweiterten Teilgebietes in Voxelkoordinaten
$l_{e_{ext}}$	Endpunkt eines erweiterten Teilgebietes in Voxelkoordinaten
$x_{a,i}$	Anfangspunkt eines Teilgebietes in physikalischen Koordinaten
$x_{e,i}$	Endpunkt eines Teilgebietes in physikalischen Koordinaten

---

$x_{a_{ext},i}$	Anfangspunkt eines erweiterten Teilgebietes in physikalischen Koordinaten
$x_{e_{ext},i}$	Endpunkt eines erweiterten Teilgebietes in physikalischen Koordinaten
$\underline{\mathbf{Z}}$	Multivariate Zufallsvariable
$\underline{\mathbf{z}}$	Ausprägungen / Beobachtungen einer multivariaten Zufallsvariablen
$\Psi$	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer Mischverteilung
$\psi$	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (einer Komponente)
$\mathcal{N}_G$	Anzahl von Komponenten / Gruppen einer Mischverteilung
$\underline{\boldsymbol{\theta}}$	Vektor bzw. Matrix der Dichtefunktionsparameter
$p$	Wahrscheinlichkeit
$\mathcal{N}_B$	Anzahl von Beobachtungen
$\mathcal{L}$	Likelihood
$\gamma_i$	Vektor der Komponentenindizes
$\underline{\boldsymbol{\Sigma}}$	Kovarianzmatrix
$\underline{\boldsymbol{\mu}}$	Vektor der Mittelwerte
$\underline{\boldsymbol{\mathcal{E}}}$	Vektor der Beobachtungsindizes einer Gruppe
$\bar{\mathbf{z}}$	Mittelwert der Stichprobe
$\mathcal{L}$	Log-Likelihood
$\underline{\mathbf{W}}$	Sample-Cross-Product Matrix
$\lambda$	Eigenwert
$\underline{\boldsymbol{\Lambda}}$	Diagonalmatrix der Eigenwerte
$\underline{\boldsymbol{\mathcal{R}}}$	Matrix der Eigenvektoren
$\beta$	Gestaltparameter
$\underline{\boldsymbol{\mathcal{B}}}$	Diagonalmatrix der Gestaltparameter
$s_{mv}^2$	Gesamtvarianz eines multivariaten Datensatzes
$s_{frac}^2$	Anteil an der Gesamtvarianz eines multivariaten Datensatzes
$\hat{\underline{\mathbf{X}}}$	Datenreihe
$\hat{\underline{\boldsymbol{\mathcal{X}}}}$	Projizierte Datenreihe
$S$	Strukturphase
$\partial S$	Oberfläche der Mikrostruktur
$n_S$	Oberflächennormalenvektor der Strukturphase

---

$K$	Kavität
$\partial K$	Oberfläche der Kavität
$n_K$	Oberflächennormalenvektor der Kavität
$n_V$	Oberflächennormalenvektor des Gesamtvolumens
$\mathbf{M}$	Lokaler Strukturtensor
$\mathcal{N}_\varepsilon$	Anzahl der benötigten Dehnungszustände
$\mathcal{N}_{mic}$	Anzahl der Freiheitsgrade des mikromechanischen Modells
$\mathcal{N}_{in}$	Anzahl der inneren Freiheitsgrade des mikromechanischen Modells
$\mathcal{N}_{out}$	Anzahl der äußeren Freiheitsgrade des mikromechanischen Modells
$\hat{\mathbf{U}}$	Matrix der makroskopischen Verschiebungsmoden
$\hat{\mathbf{F}}$	Matrix der makroskopischen Knotenkräfte
$\overline{\mathbf{K}}_{num}$	Effektive numerische Steifigkeitsmatrix
$\mathcal{G}$	Grauwert
$\Delta \mathfrak{R}$	Umgebung
$k_\varepsilon$	Konstante $\ll 0$
$\mathfrak{S}$	Speedup
$T_{ges}$	Laufzeit der seriellen Gesamtapplikation
$T_{par}$	Laufzeit des parallelen Applikationsteils
$\mathfrak{E}$	Effizienz
$T_{seriell}$	Laufzeit des nicht parallelisierten Applikationsteils
$m$	Masse
$\rho_{app}$	Scheinbare Dichte
$\rho_{true}$	Wahre Dichte
$\rho_{rel}$	Relative Dichte
$s$	Standardabweichung
$\mathcal{N}_{red}$	Anzahl von MVEs mit einem Kochenstrukturvolumen $V_S \geq 0,01 V_M$
$\mathcal{N}_0$	Anzahl von MVEs mit einem Kochenstrukturvolumen $V_S = 0$

---

$\mathcal{G}$	Menge
$\mathcal{G}_{Ct}$	Menge der MVEs in der Kortikalis
$\mathcal{G}_{Cn}$	Menge der MVEs in der Spongiosa
$sd$	Symmetrieabweichung einer Matrix
$\tau$	Korrelationskoeffizient nach Kendall
$\mathfrak{J}$	Invariante

---

# Abkürzungen

$\mu$ -CT	Mikrofokus Computertomographie
1D	eindimensional
ALPS	Application Level Placement Scheduler
antis.	antisymmetrisch
BIC	Bayesian Information Criterion
bzw.	Beziehungsweise
CAE	Computer Aided Engineering
CG	Central Group ( Zentral Gruppe )
CT	Computertomographie
d.h.	Das heißt
DA	Diskriminanzanalyse
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt
Dtk	Detektor
EM	Expectation Maximisation
FE	Finite Element
FEM	Finite Element Methode
HPC	High Performance Computing
iso	isotrop
$k$ -CT	Klinische Computertomographie
MOM	Batch System Management Node
mono	monotrop
MPI	Message-Passing-Interface
MVE	mikrostrukturiertes Volumenelement
Nr.	Nummer
Obj	Objekt
ortho	orthotrop
Pos.	Position
SSH	Secure-Shell
SV	Spongiöses Volumen
THP	Totalhüftendoprothese
tr-iso	transversal-isotrop





---

# Zusammenfassung

In Kapitel 1, Einleitung der folgenden Abhandlung, werden zunächst die Motivation für die durchgeführten Untersuchungen, der Stand der Technik auf dem Gebiet der kontinuumsmechanischen Materialdatenermittlung von mikrostrukturiertem bzw. im hier bearbeiteten, speziellen Fall von spongiösem Knochenmaterial sowie die Ziele der Arbeit dargelegt.

Im folgenden Kapitel 2, Grundlagen, werden die mathematischen und technischen Prinzipien erläutert, die als Basis für die im Rahmen der Arbeit erfolgten Entwicklungen dienten. Hierzu zählen Grundlagen der Elastizitätstheorie, der Methode der Finiten Elemente (FEM), der multivariaten Statistik sowie die Erläuterung der Prinzipien der Computertomographie (CT).

In Kapitel 3, Direkter mechanischer Ansatz zur Berechnung von elastischen Eigenschaften mikrostrukturierter Volumina, wird die Theorie der direkten mechanischen Simulation zur Bestimmung effektiver Materialparameter mikrostrukturierter Volumina auf Kontinuumsebene dargelegt. Da die von Hill entwickelte [1], klassische bzw. im folgenden als analytische Methode bezeichnete Vorgehensweise aus Sicht des Verfassers die Schwäche aufweist, dass die mit ihrer Hilfe berechneten Materialdaten von der Wahl der Randbedingungen abhängen, wird im gleichen Kapitel eine Erweiterung der Methode vorgeschlagen, die zur Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit mikrostrukturierter Volumina führt. Die effektive numerische Steifigkeit wird mit Hilfe der FEM abgeleitet, wodurch die entstehenden effektiven Steifigkeitseigenschaften direkt zum Einsatz mit dieser Methode geeignet sind.

In Kapitel 4, Gewebeproben und Datensätze, werden die Parameter der mit Hilfe von Mikrofokus Computertomographien ( $\mu$ -CT) und klinischer Computertomographie ( $k$ -CT) erhobenen Volumendatensätze angegeben. Als Basisdatensatz für die Entwicklung und erste Analyse der Implementierung sowie der, dieser Arbeit zu Grunde liegenden, Konzepte wird der  $\mu$ -CT-Volumendatensatz eines menschlichen Femurkopfes verwendet. Der Femurkopf wurde im Rahmen der Implantation einer Totalhüftendoprothese in der Klinik für Unfallchirurgie und Orthopädie des Universitätsklinikum Freiburg entnommen. Der Volumendatensatz wurde nach der Entnahme durch das Institut für Bauweisen und Strukturtechnologie des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) Stuttgart erstellt. In diesem Kapitel werden des

---

weiteren ausgezeichnete Bereiche des  $\mu$ -CT-Datensatzes beschrieben, die im Verlauf der Arbeit zu Analysen herangezogen werden.

In Kapitel 5, Implementierung, wird eine Prozesskette beschrieben, welche es ermöglicht, aus  $\mu$ -CT-Datensätzen ganzer Knochenbereiche mit Hilfe direkter, mechanischer Simulation das Feld der linear elastischen Materialeigenschaften sowie das Feld der numerischen effektiven Steifigkeitsmatrizen auf Kontinuumszebene zu berechnen. Ein durch  $\mu$ -CT gewonnener Datensatz kann in virtuelle Proben beliebiger Größe und Form zerlegt werden. Durch das Vorgehen ist es somit möglich, die Auflösung kontinuumsmechanischer Materialdaten entsprechend der Auflösung des verwendeten kontinuumsmechanischen Berechnungsgitters anzupassen.

Als zentrales Glied der Prozesskette wird das Finite Elemente Programmsystem FMPS [2] verwendet. Die vorgelagerten Programme wie Gebietszerlegung und Geometrieextraktion sowie die nachfolgenden Berechnungen der effektiven Materialparameter wurden durch eigene Implementierungen realisiert. Im Hinblick auf die reibungslose Ausführung der Prozesskette auf den Ressourcen des High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS) wurde ein für alle Teile der Kette gemeinsames Datenformat entwickelt, welches auch in FMPS integriert wurde. Das Datenformat zeichnet sich im wesentlichen durch die einfache Benutzbarkeit im Zusammenhang mit paralleler Ein- und Ausgabe (E/A), durch einen von den eigentlichen Daten unabhängigen Index sowie seine allgemeine Benutzbarkeit aus. In diesem Kapitel wird des weiteren die Kopplung zwischen FMPS, einem monolithischen Fortran 77 Softwarepaket mit tiefer Aufrufstruktur und der C++ Löserbibliothek PETSc [3] erläutert. Diese Entwicklung war notwendig, um auch Auflösungen der effektiven Materialparameter mit Gitterzellen größer als  $2,4\text{ mm}$  effektiv berechnen zu können.

In Kapitel 6, Ergebnisse, werden die Analysen der auf unterschiedlichen Auflösungsstufen berechneten Datenfelder der effektiven Steifigkeit und deren Zusammenhang mit strukturbeschreibenden Parametern auf kontinuumsmechanischer Ebene diskutiert. Die erzeugten Felder der effektiven Steifigkeit werden mit Hilfe multivariater Methoden analysiert, und es wird gezeigt, dass eine wesentliche Reduktion deren 21-dimensionalen Parameterraumes möglich ist. Abschließend werden erste Vergleiche zwischen kontinuumsmechanischen Berechnungsergebnissen, die mit Hilfe der berechneten effektiven Steifigkeitsmatrizen erzeugt wurden, und Ergebnissen aus mikromechanischen Simulationen größerer Knochenbereiche, dargestellt und erläutert.

Es wird gezeigt, dass es Zusammenhänge zwischen den Ergebnissen dieser beiden Skalen gibt und dass diese Zusammenhänge in Abhängigkeit der Porengröße der Spongiosa nichtlineares Verhalten annehmen.

---

# Abstract

In chapter 1, Einleitung of the following essay the motivation, the state of the art in the field of continuum mechanical material data determination for micro structured materials as well as the targets of the presented work are stated.

The next chapter presents the basics of the mathematical and technical principles forming the foundation of the developments and derivations done in this thesis. This includes the basics of elasticity theory, the basics of the Finite Element Method (FEM), multivariate statistics as well as the basics of computed tomography (CT).

In chapter 3, Direkter mechanischer Ansatz zur Berechnung von elastischen Eigenschaften mikrostrukturierter Volumina, the theory of the direct mechanics approach to determine effective material parameters of micro-structured volumes on the continuum mechanical scale is introduced. Since the classical method developed by Hill [1] has, in the opinion of the author, the drawback, that the material data calculated with this method depend upon the chosen boundary conditions, a method is presented in the same chapter, that leads to what we call the effective numerical stiffness. The effective numerical stiffness is derived based on the principles of FEM which makes the resulting effective parameters directly applicable to this method.

In chapter 4, Gewebeproben und Datensätze, the parameters of the volume data sets recorded by micro-focus computed tomography ( $\mu$ -CT) and clinical computed tomography ( $k$ -CT) are written down. The basis for all development and analyses done in this thesis is the  $\mu$ -CT volume dataset of a human femoral head. The femoral head was extracted in the Klinik für Unfallchirurgie und Orthopädie of the University of Freiburg Medical Centre during a total hip replacement surgery. The volume dataset was recorded at the Institut für Bauweisen und Strukturtechnologie of the Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Stuttgart. In this chapter the special regions of the femoral head, used for analyses in the results section, are described.

In the following chapter 5, Implementierung a simulation process chain is described, which enables the calculation of the effective material parameters as well as the field of the effective numerical stiffness matrices with arbitrary resolution for complete bone structures on the basis of  $\mu$ -CT volume datasets . A  $\mu$ -CT data set can be decomposed in virtual specimens of arbitrary size and shape. By this approach it

---

becomes possible to fit the resolution of the continuum mechanical material field to the one of the used simulation mesh.

A central link of the process chain is the FEM software package FMPS [2]. The preceding chain links domain decomposition, geometry extraction as well as the trailing calculation of the effective material parameters are realized by custom implementations. With the focus of the implementations done in this thesis laying on the efficient execution of the process chain on the resources of the High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS) a data format was developed which is common for all links of the process chain and that was also integrated into FMPS. The data format is essentially characterized by its easy application in connection with parallel input and output operations, its index which is independent from the data and its common usability. In this chapter it is also shown, how the coupling of FMPS, a monolithic Fortran 77 code package with deep calling stack to the C++ solver library PETSc [3] was done. This coupling was necessary to efficiently carry out the calculations of the effective material parameters on resolutions bigger than 2.4mm edge length.

In the final chapter 6, Ergebnisse, the analyses carried out with the data fields of the effective stiffness, calculated on various resolutions along with their connection to the descriptive parameters on the continuum mechanical scale, are discussed. The calculated fields are analysed by means of multivariate statistical methods and it is shown, that an essential reduction of their 21-dimensional parameter space is possible. After that some first comparisons between simulation results, calculated on the continuum mechanical scale by means of the derived effective material parameters and micro-mechanical simulation results of larger regions of cancellous bone, are presented and discussed.

---

# 1. Einleitung

Diese Arbeit befasst sich mit einem Problem der Biomechanik, genauer der Materialdatenermittlung für ein biologisches Material – den Knochen. Bei dieser Problemstellung wird eine klassische Ingenieuraufgabe, Elastizitätsparameter für ein Material zu ermitteln, um es kontinuumsmechanischen Berechnungen mit Hilfe der Finiten-Elemente-Methode (FEM) zugänglich zu machen, durch eine Fragestellung aus der Medizin motiviert.

Es handelt sich um die Frage, ob es möglich ist, die internen Vorgänge in Knochenstrukturen sowie Knochen-Implantat-Systemen unter patientenspezifischen Gesichtspunkten detailliert zu quantifizieren. Daraus ergibt sich ein interdisziplinäres Thema, welches den Bereich der Ingenieurwissenschaften mit der Medizin verknüpft. Um dem Leser einen Überblick über den Kontext zu geben, aus dem die Fragestellung resultiert, wird in diesem Kapitel zunächst die Motivation zur Lösung des Problems aus medizinischer sowie ingenieurtechnischer Sicht erläutert.

## 1.1. Motivation

In der unfallchirurgischen und orthopädischen Routine werden Implantate zur Stabilisierung von Frakturen oder als Gelenkersatz unter anderem aufgrund von empirischen Erkenntnissen und der individuellen Erfahrung des behandelnden Mediziners ausgewählt und verwendet. Die Platzierung der Implantate wird ebenfalls aufgrund empirischer Erkenntnisse und elementarer biomechanischer Beurteilungen des speziellen Falles durch den behandelnden Orthopäden / Unfallchirurgen durchgeführt. Beispiele für die Stabilisierung einer Oberschenkelhalsfraktur sind in Abb. 1.1 dargestellt.

Bei der Verwendung solcher Implantate treten immer wieder Komplikationen auf. Bei Fraktur stabilisierenden Implantaten kann es beispielsweise zu Heilungsverzögerungen kommen. Festsitzende Implantate können durch den intakten Knochen, schlimmstenfalls auch durch den Gelenkknorpel, hindurch schneiden [5, 6, 7, 8]. Ein Beispiel für das Versagen eines intramedullären Implantats, eingesetzt bei einer 81 Jahre alten Patientin zur Stabilisierung einer Oberschenkelhalsfraktur, ist in Abb. 1.2 zu sehen.

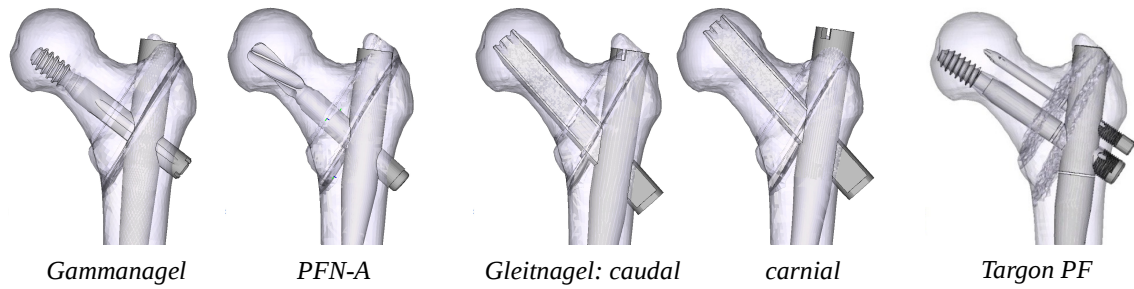


Abb. 1.1: Beispiele für die Stabilisierung einer instabilen Oberschenkelhalsfraktur mit Hilfe verschiedener intramedullärer Implantate in unterschiedlichen Einbaupositionen. Die dargestellten Einbaupositionen der unterschiedlichen Implantate sind [4] entnommen.

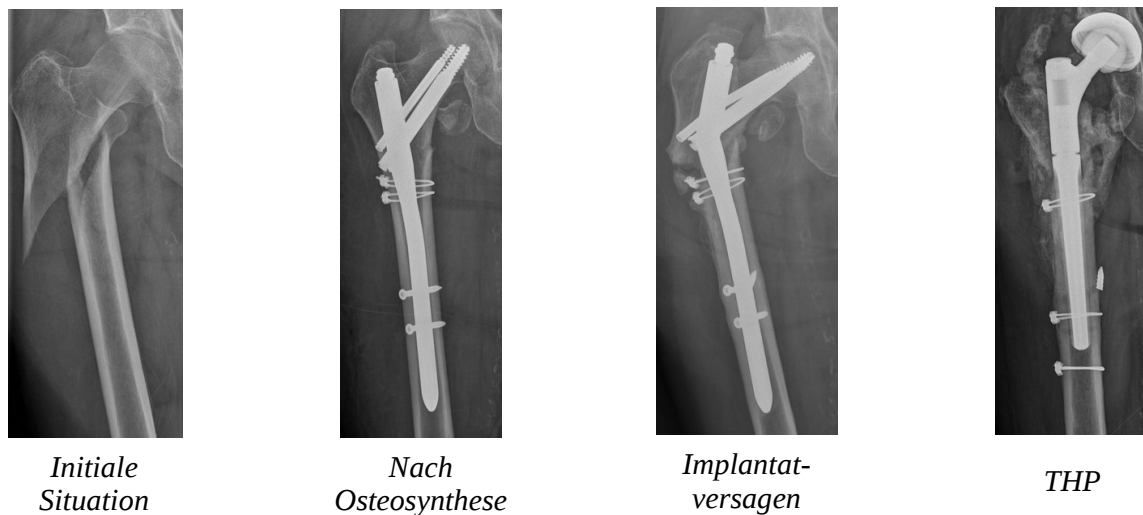


Abb. 1.2: Beispiel für das Versagen eines intramedullären Implantats bei einer 81 Jahre alten Patientin.

Das gezeigte Implantatversagen erfolgte bereits sechs Wochen nach der initialen Operation. Wie sich herausstellte, war die Patientin aufgrund ihres fortgeschrittenen Alters nicht fähig, das Bein mit Hilfe von Krücken genügend zu entlasten. Dadurch konnte das Implantat seine Funktion der Fraktur stabilisierung nicht korrekt erfüllen. Durch die starke Relativbewegung der Knochenfragmente erfolgte kein Knochenaufbau wodurch das Implantat für die Dauer von sechs Wochen die gesamte Belastung tragen musste. Dies führte letztendlich zum vollständigen Versagen des Implantats und zu einer erneuten Operation, bei welcher der Patientin eine Totalhüftendoprothese (THP) eingesetzt werden musste<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Bilder und Fallbeschreibung: Prof. Dr. med. Jürgen Degreif - Klinik für Unfallchirurgie und Orthopädie - Klinikum Esslingen

Bei Gelenkendoprothesen, die beispielsweise als Ersatz eines erkrankten Hüftgelenks dienen, kann es ebenfalls, trotz des Einsetzens von empirisch langfristig bewährten Implantaten, zu unvorhergesehenen Effekten wie intraoperativen Femurfrakturen oder zu Lockerungen kommen.

Eine patientenspezifische Abschätzung, unter welchen Belastungsumständen solche Komplikationen auftreten können, ist für den behandelnden Chirurg derzeit nicht möglich. Aus diesem Grunde ist es äußerst wünschenswert, ein System zur Verfügung zu haben, mit Hilfe dessen die Wahrscheinlichkeit postoperativer, mechanischer Komplikationen unterschiedlicher Implantate unter patientenspezifischen Gesichtspunkten vor dem Eingriff evaluiert werden kann [9, 10, 11].

Ein solches System würde die Chancen wesentlich erhöhen, die Stabilität und Langlebigkeit des Implantateinsatzes im Patienten zu verbessern und das Auftreten von Komplikationen zu minimieren, die mit Schmerzen sowie Funktionsbeeinträchtigungen einhergehen. Im besten Fall können aufwändige und für die Patienten schwerwiegende Folgeoperationen vermieden und dadurch auch Kosten im Gesundheitswesen reduziert werden. Es würde somit die Methodik der Simulation von Knochen-Implantat-Systemen aus der Phase purer akademischer Untersuchungen in ein Stadium gebracht, in dem die dabei angewendeten Technologien das Patientenwohl verbessern und dabei volkswirtschaftlicher Nutzen generiert würde.

## 1.2. Stand der Technik

Mit der kontinuumsmechanischen Simulation von Knochen-Implantat-Systemen, als einem wesentlichen Teil eines Verfahrens zur Folgeabschätzung von Implantationen, versucht man heute realistische Belastungsszenarien zu quantifizieren und Vorhersagen über relative Wahrscheinlichkeiten des Auftretens der oben genannten Komplikationen zu machen [4, 12]. Um solche Simulationen patientenspezifisch durchzuführen, müssen drei Voraussetzungen gegeben sein:

- Die patientenspezifische Geometrie der beteiligten anatomischen Strukturen
- Die patientenspezifische Belastung des Systems inklusive des Körpergewichts und der an den Knochenstrukturen angreifenden Muskelkräfte
- Die patientenspezifische Materialverteilung innerhalb der Knochenstrukturen

Zur patientenspezifischen dreidimensionalen Rekonstruktion der beteiligten anatomischen Strukturen wie Knochen, Knorpel und Muskeln aus computertomographischen Daten existiert eine Vielzahl von Methoden und interaktiven sowie automatischen

Werkzeugen, welche diesen Prozess unterstützen [13, 14, 15, 16]. Ebenso ist die Bestimmung sowie Modellierung von realistischen, patientenspezifischen Belastungsszenarien Gegenstand aktueller Forschung [17, 18, 19].

Die kontinuumsmechanische Modellierung von Knochenmaterial war Gegenstand intensiver Forschung der vergangenen Jahre [20, 21, 22, 23]. Vergleicht man jedoch den Stand aktueller Modellierungen von Knochen-Implantat-Systemen und im Speziellen deren Gitterauflösungen mit den Auflösungen der veröffentlichten Materialmodelle bzw. der Probengröße, mit Hilfe derer die linear elastischen Materialparameter von Knochenmaterial ermittelt wurden, so stellt man eine Diskrepanz fest. Beispielsweise berichten [24] und [25] von Diskretisierungen des Femurs mit ca. 300000 bzw. über 500000 Elementen. Bei einem angenommenen mittleren Femurvolumen von  $3,4 \cdot 10^6 \text{mm}^3$  würde dies ein mittleres Elementvolumen zwischen  $6,8 \text{mm}^3$  und  $11,3 \text{mm}^3$  ergeben. Die veröffentlichten Probengrößen zur experimentellen Bestimmung von Materialparametern liegen im Bereich von  $500 \text{mm}^3$  bis  $1000 \text{mm}^3$ . In diesen Veröffentlichungen werden für spongiöses Knochenmaterial orthotrope Materialeigenschaften und für kortikales Knochenmaterial transversal isotrope bzw. orthotrope Eigenschaften gefunden [26, 27, 28]. Bisher wird davon ausgegangen, dass die experimentell ermittelten Beziehungen zwischen Knochendichte und elastischen Eigenschaften von den Versuchen direkt auf die kontinuumsmechanischen Modelle übertragbar sind.

Die Frage die sich jedoch stellt ist, ob die mit Hilfe einer Elementkantenlänge von ca.  $10 \text{mm}$  bestimmten Materialeigenschaften und Materialparameter für Dehnungs- und Spannungsanalysen im Millimeterbereich geeignet bzw. gültig sind. Mit anderen Worten, ist es möglich, die für Knochenumbaumodelle, welche den lebenslangen Umbau von Knochen unter Belastung oder das Einwachsen eines Implantates modellieren sollen, benötigten lokalen Feldgrößen wie Dehnung und Spannung genügend exakt zu ermitteln, wenn die Auflösung des verwendeten Materialmodells eine Größenordnung über den zu betrachtenden Strukturgrößen wie beispielsweise dem Durchmesser eines Antirotationsnagels eines intramedullären Femurnagels liegt?

Die Beantwortung dieser Frage mit Hilfe von Versuchen ist nur bedingt möglich, da Probengrößen mit wenigen Millimetern Kantenlänge Druckversuchen zur Bestimmung der Elastizitätsmoduli nur noch schwer und Scherversuchen zur Bestimmung der Schubmoduli so gut wie nicht mehr zugänglich sind. Ebenso ist der Einsatz von Ultraschallmethoden zur Bestimmung der elastischen Konstanten bei dieser Probengröße nicht mehr möglich, da insbesondere spongiöser Knochen in diesem Größenbereich keine genügend homogenen Proben mehr liefert.



Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung des Materialverhaltens sowie der zugehörigen elastischen Konstanten ist die direkte mechanische Simulation. Hierbei wird die trabekuläre Mikrostruktur der Spongiosa direkt diskretisiert, so dass die benötigten Lastfälle mit Hilfe der Finiten-Elemente Methode simuliert werden können. Dass die Ermittlung kontinuumsmechanischer Eigenschaften von Knochen durch dieses Vorgehen möglich ist, wurde erstmals von Rietbergen gezeigt [29]. Die theoretischen Grundlagen wurden bereits 1963 von Hill [1] gelegt.

Das Verfahren der direkten mechanischen Simulation wurde in den folgenden Jahren weiter untersucht und die verschiedenen Einflüsse auf seine Ergebnisse analysiert [30, 31]. Der Brückenschlag zwischen diesem Verfahren zur Materialdatenermittlung für einzelne Proben und den kontinuumsmechanischen Simulationen ganzer Knochen-Implantat-Systeme wurde bis zum jetzigen Zeitpunkt jedoch noch nicht durchgeführt.

### 1.3. Ziele

Das primäre Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung der Möglichkeit, die soeben erwähnte fehlende Verbindung zwischen der Applikation inhomogener, isotroper oder auch orthotroper, kontinuumsmechanischer Materialbeschreibungen bei der kontinuumsmechanischen Berechnung von Knochenstrukturen bzw. Knochen-Implantat-Systemen und der Bestimmung dieser Materialbeschreibungen herzustellen.

Der Brückenschlag soll mit Hilfe der direkten mechanischen Simulation ganzer Knochenbereiche erfolgen. Das Ziel ist dabei, weg von der durch Regressionsfunktionen gemittelten Beschreibung der lokalen Materialparameter auf Basis einiger weniger untersuchter Bereiche der Knochenstruktur, hin zu einer quasi kontinuierlichen Feldbeschreibung der Materialdaten zu gelangen, um so patientenspezifische, lokal präzise, quantitative Aussagen über die in der Knochenstruktur herrschenden Dehnungen treffen zu können.

Besondere Beachtung soll dabei der aktuell vorhandenen Auflösungslücke zwischen den eingesetzten kontinuumsmechanischen Simulationsgittern und den Proben- bzw. Betrachtungsgrößen zur Bestimmung der kontinuumsmechanischen Materialparameter geschenkt werden. Mit anderen Worten ist ein weiteres Ziel der in der Arbeit durchgeführten Untersuchungen eventuelle Probleme in der Übertragbarkeit der aktuell vorhandenen Materialmodellierungen von spongiösem Knochenmaterial auf die aktuell verwendeten Berechnungsgitter zur Simulation von Knochen-Implantat-Systemen aufzudecken.

Durch das Erreichen dieser Ziele würde ein weiterer Schritt in Richtung des über-

geordneten Ziels der Simulation von Knochenstrukturen und Knochen-Implantat-Systemen getan, nämlich der patientenspezifischen, transienten Simulation von Knochenwachstum aufgrund lokaler mechanischer Reize, d.h. der Vorhersage von Heilungsprozessen und dem Knochenumbau durch geänderte Belastungsumstände wie z.B. Implantation.

Da im Vorfeld dieser Arbeit durchgeführte Untersuchungen sowie grundlegende Abschätzungen zeigten, dass die gesteckten Ziele der materialtheoretischen Betrachtungen den massiven, parallelen Einsatz von Rechnerressourcen bedingen sowie nicht unerhebliche Datenmengen erzeugen würde, ist ein weiteres Ziel dieser Arbeit, die softwaretechnische Auslegung der benötigten Simulationsprozesskette so zu gestalten, dass deren Ausführung auf High Performance Computing (HPC) Ressourcen möglichst effizient möglich wird. Dieses Ziel gewinnt insbesondere im Hinblick auf die Untersuchung von Patientenkollektiven an Wichtigkeit wie im Verlauf der Arbeit gezeigt werden wird.

---

## 2. Grundlagen

In diesem Kapitel werden zunächst die Grundlagen der Elastizitätstheorie beschrieben, auf Basis derer im folgenden Kapitel der Übergang von der mikroskopischen zur makroskopischen Ebene der Materialbeschreibung mit Hilfe des direkten mechanischen Ansatzes vollzogen wird. Um dem Leser das Nachvollziehen der ebenfalls in Kapitel 3 ausgearbeiteten Erweiterung des direkten mechanischen Ansatzes zu erleichtern, werden auch die Grundlagen der Finiten-Elemente-Methode (FEM) beschrieben.

Die prinzipiellen mathematischen Gleichungen, sowie eine sehr kurz gehaltene Einführung in die Tensorrechnung, soweit diese im Verlauf der angegebenen Ableitungen Verwendung fanden, sind im Anhang A zu finden und werden an entsprechender Stelle referenziert.

Da sich diese Arbeit nicht nur mit der theoretischen Erarbeitung des Themas befasst, sondern ein wesentlicher Teil in der Anwendung der vorgestellten Methode liegt, werden die Grundlagen der Datengewinnung mit Hilfe der  $k$ -CT und der  $\mu$ -CT erläutert.

Zum Abschluss dieses Kapitels werden einige Grundlagen und Methoden der multivariaten Statistik erläutert, um dem Leser das Verständnis der in Kapitel 6 dargestellten Ergebnisse zu erleichtern.

Die für die Ableitungen und Formulierungen dieser Arbeit verwendete Notation ist an [32] angelehnt, wobei zwischen Skalaren, Tensoren und Matrizen unterschieden wird.

- Skalare werden dünn, kursiv geschrieben :  $a$
- Tensoren werden fett, kursiv geschrieben :  $\mathbf{a}$
- Matrizen werden fett, kursiv, mit Unterstrich geschrieben :  $\underline{\mathbf{a}}$

Als Matrizen gelten hierbei alle Größen der Gestalt  $n \times 1$ ,  $1 \times n$  und  $m \times n$  mit  $n, m \neq 3$ . Dies bedeutet, dass Vektoren und Matrizen des  $\mathbb{R}^3$  bzw. des  $\mathbb{R}^{3 \times 3}$  als Tensoren erster bzw. zweiter Stufe bezeichnet werden.

## 2.1. Grundlagen der Elastizitätstheorie

In diesem Abschnitt werden die zur Ableitung der direkten mechanischen Analyse sowie die zur Formulierung der FEM-Methode benötigten Grundlagen der linearen Elastizitätstheorie dargestellt.

### 2.1.1. Bewegung des Kontinuums

Bewegt sich ein Kontinuum im Raum, so kann diese Bewegung durch die stetig differenzierbare nichtlineare Abbildung

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, T) \quad (2.1)$$

beschrieben werden. Durch sie wird der Ortsvektor  $\mathbf{X}$  des Materialpunktes  $\mathbf{P}_0$  auf den Ortsvektor  $\mathbf{x}$  des Raumpunktes  $\mathbf{P}_T$ , welchen der Materialpunkt  $\mathbf{P}_0$  zum momentanen Zeitpunkt  $T$  belegt, abgebildet. Man sagt auch, die Ausgangskonfiguration  $\mathcal{C}_0$  wird in die Momentankonfiguration  $\mathcal{C}_T$  abgebildet.

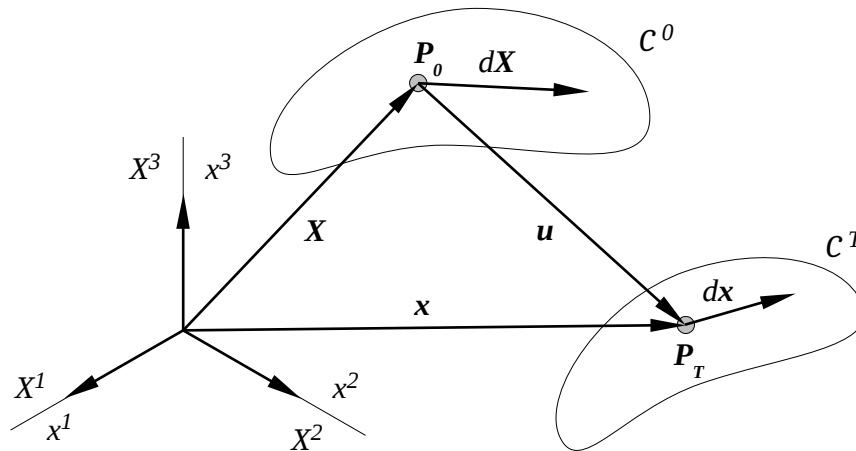


Abb. 2.1: Zusammenhang von Konfiguration und Verschiebung

Wie in Abb. 2.1 zu erkennen ist, gilt der Zusammenhang

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X} , \quad (2.2)$$

mit dem Verschiebungsvektor  $\mathbf{u}$ .

Eine elementare Größe bei der Beschreibung von Kontinuumsbewegungen ist der

sogenannte Deformationsgradient

$$\mathcal{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}. \quad (2.3)$$

Mit seiner Hilfe wird das materielle Linienelement  $d\mathbf{X}$  der Ausgangskonfiguration, welches die Lage der Materialpunkte des Kontinuums zueinander beschreibt, in die Momentankonfiguration abgebildet. Die Abbildungsvorschrift lautet

$$d\mathbf{x} = \mathcal{F}d\mathbf{X}, \quad (2.4)$$

mit dem Linienelement der Momentankonfiguration  $d\mathbf{x}$ .

Setzt man Gl. (2.2) in Gl. (2.3) ein so ergibt sich

$$\mathcal{F} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} = \mathcal{I}^{(2)} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}}, \quad (2.5)$$

mit  $\mathcal{I}^{(2)}$  dem Einheitstensor zweiter Stufe und  $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}}$  dem Verschiebungsgradienten, der die Änderung des Verschiebungsfeldes auf der Ausgangskonfiguration beschreibt. Diese Größe stellt die klassische Definition der linearen Dehnung dar.

### 2.1.2. Der Dehnungstensor

Um beliebig große Deformationen eines Kontinuums objektiv, d.h. frei von jeglicher Starrkörperbewegung anzugeben, kann die Differenz der quadratischen Längen des materiellen Linienelements als Verzerrungsmaß herangezogen werden<sup>1</sup>.

$$\begin{aligned} l^2 - L^2 &= d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} \\ &= dx_i \mathbf{e}^i dx_j \mathbf{e}^j - dX_K \mathbf{e}^K dX_L \mathbf{e}^L \\ &= dx_i dx_j g^{ij} - dX_K dX_L G^{KL} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Ersetzt man  $d\mathbf{x}$  in oben stehender Gleichung mit Hilfe von Gl. (2.4) und geht von orthonormalen Basissystemen der Tensoren aus, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} l^2 - L^2 &= \mathcal{F}_i^K dX_K \mathcal{F}_j^L dX_L g^{ij} - dX_K dX_L G^{KL} \\ &= 2 dX_K \cdot \frac{1}{2} (\mathcal{F}_i^K \mathcal{F}_j^L g^{ij} - G^{KL}) dX_L \\ &= 2 d\mathbf{X}^T \cdot \frac{1}{2} (\mathcal{F}^T \mathcal{F} - \mathcal{I}^{(2)}) d\mathbf{X} \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Für eine detaillierte Beschreibung der Beweggründe und der Ableitung dieser Definition sei auf [32] verwiesen.

$$l^2 - L^2 = 2 d\mathbf{X}^T \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot d\mathbf{X} \quad (2.7)$$

Dies stellt die Definitionsgleichung des Green'schen Verzerrungstensors  $\boldsymbol{\varepsilon}$  dar.

Teilt man  $\mathcal{F}$  nun entsprechend Gl. (2.5) in den Einheitstensor und den Verschiebungsgradienten auf, folgt:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{2} \left( \mathcal{F}^T \mathcal{F} - \mathcal{I}^{(2)} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left[ \left( \mathcal{I}^{(2)T} + \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right)^T \right) \left( \mathcal{I}^{(2)} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right) - \mathcal{I}^{(2)} \right] \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \underbrace{\frac{1}{2} \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} + \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right)^T \right]}_{\boldsymbol{\varepsilon}_{lin}=\boldsymbol{\varepsilon}} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right)^T}_{\boldsymbol{\varepsilon}_{nlin}} \end{aligned} \quad (2.8)$$

womit der Verzerrungstensor in zwei symmetrische Anteile aufgespalten wurde. Wertet man den ersten Anteil entsprechend der Summationskonvention aus, so erkennt man, wie in Gl. (2.9b) dargestellt, den aus der linearen Elastizitätstheorie bekannten Dehnungstensor, welcher in dieser Arbeit in der angeschriebenen Form verwendet wird. Hierbei ist zu beachten, dass die Ingenieurdehnungen der linearen Theorie üblicherweise ohne den Faktor  $\frac{1}{2}$  definiert sind.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial X_1} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial X^2} + \frac{\partial u_2}{\partial X^1} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial X^3} + \frac{\partial u_3}{\partial X^1} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_2}{\partial X^1} + \frac{\partial u_1}{\partial X^2} \right) & \frac{\partial u_2}{\partial X_2} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_2}{\partial X^3} + \frac{\partial u_3}{\partial X^2} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_3}{\partial X^1} + \frac{\partial u_1}{\partial X^3} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_3}{\partial X^2} + \frac{\partial u_2}{\partial X^3} \right) & \frac{\partial u_3}{\partial X_3} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.9a)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial X^j} + \frac{\partial u_j}{\partial X^i} \right) \quad (2.9b)$$

Der zweite Anteil, welcher aus den Quadraten der Verschiebungsgradienten gebildet wird, ist ein nichtlinearer Term zweiter Ordnung, der im Falle kleiner Verschiebungen gegenüber dem linearen ersten Term zu vernachlässigen ist.

In allen weiteren Betrachtungen der Elastizitätstheorie wird im Rahmen dieser Arbeit nun von der linearen Theorie kleiner Verschiebungen ausgegangen. Dies bedeutet, die bisher getroffene Unterscheidung zwischen den mit Großbuchstaben bezeichneten Größen der Ausgangskonfiguration und den mit Kleinbuchstaben bezeichneten Größen der Momentankonfiguration ist im folgenden nicht mehr nötig. Mit ande-

ren Worten sind in der linearen Theorie der Ortsvektor der Ausgangskonfiguration  $\mathbf{X}$  und der Ortsvektor der Momentankonfiguration  $\mathbf{x}$  gleich und eine entsprechende Unterscheidung wird nicht mehr fortgeführt.

### 2.1.3. Kompatibilitätsbedingungen

Sollen aus einem gegebenen Verzerrungszustand die entsprechenden Verschiebungen bestimmt werden, so ist das Problem überbestimmt, da 6 Gleichungen für 3 Verschiebungskomponenten zur Verfügung stehen. Dies bedeutet, es sind weitere Gleichungen zur eindeutigen Bestimmung der Verschiebungskomponenten nötig. Die weiteren Gleichungen ergeben sich durch Abhängigkeit der Dehnungskomponenten untereinander. Der Zusammenhang kann nach [33] folgendermaßen sichtbar gemacht werden. Zweimalige Differentiation von Gl. (2.9b) mit  $i = 1$  und  $j = 2$  liefert:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{12}}{\partial x^1 \partial x^2} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^3 u_1}{\partial x^2 \partial x^1 \partial x^2} + \frac{\partial^3 u_2}{\partial x^1 \partial x^1 \partial x^2} \right). \quad (2.10)$$

Vertauschen der Differentiationsreihenfolge und erneutes Einsetzen von Gl. (2.9b) ergibt:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{12}}{\partial x^1 \partial x^2} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^3 u_1}{\partial x^1 \partial x^2 \partial x^2} + \frac{\partial^3 u_2}{\partial x^2 \partial x^1 \partial x^1} \right) \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{12}}{\partial x^1 \partial x^2} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \varepsilon_{11}}{\partial x^2 \partial x^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{22}}{\partial x^1 \partial x^1} \right) \quad (2.12)$$

Woraus durch zyklisches Vertauschen der Indizes die drei sogenannten Kompatibilitätsbedingungen folgen:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{ij}}{\partial x^i \partial x^j} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \varepsilon_{ii}}{\partial x^j \partial x^j} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{jj}}{\partial x^i \partial x^i} \right). \quad (2.13)$$

### 2.1.4. Der Spannungstensor

Es sei  $dV \subseteq \mathbb{R}^3$  ein homogenes Volumenelement im statischen Gleichgewicht, in dem durch auf seiner Oberfläche eingeprägte Flächenlasten ein Spannungsfeld  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  erzeugt wird.

Für die auf ein Flächenelement  $\Delta A$  einer gedachten Schnittfläche durch  $dV$  wirkenden Schnittkräfte  $\Delta \mathbf{F}_S$  existiert dann nach Cauchy der Grenzwert

$$\mathbf{t} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}_S}{\Delta A} = \frac{d\mathbf{F}_S}{dA}. \quad (2.14)$$

Mit  $\mathbf{t}$ , dem sogenannten Kraftflussvektor<sup>2</sup>, welcher die Richtung der resultierenden Schnittkraft hat, jedoch nicht notwendigerweise mit der Normalen  $\mathbf{n}$  von  $\Delta A$  zusammenfallen muss.

Nach dem Theorem von Cauchy sind die Kraftflussvektoren der drei kartesischen Koordinatenebenen ausreichend, um einen beliebigen weiteren Kraftflussvektor in einer Schnittebene mit Normalenvektor  $\mathbf{n}$  zu bestimmen [34]. Die jeweils drei Koordinaten der drei Kraftflussvektoren, projiziert auf die drei Koordinatenebenen, bilden dann die 9 Koordinaten des sog. Cauchy Spannungstensors.

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Das Theorem von Cauchy lautet somit in Koordinatenschreibweise

$$t_i = \sigma_{ij}n^j . \quad (2.16)$$

Eine wichtige Eigenschaft des Spannungstensors ist seine Symmetrie, die aus dem Momentengleichgewicht am Volumenelement, wie in Abb. 2.2 für die 23-Koordinatenebene dargestellt, abgeleitet werden kann.

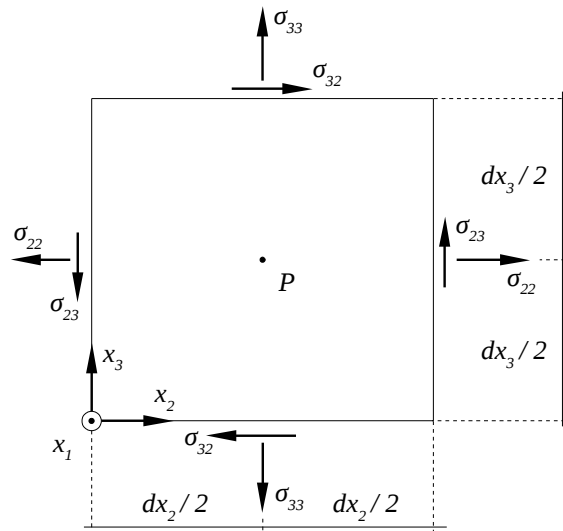


Abb. 2.2: Momentengleichgewicht am Volumenelement

Wird das Momentengleichgewicht um eine Achse parallel zur  $x_1$ -Achse durch den

<sup>2</sup>Die Benennung erfolgt wie in [32] um eine Verwechslung mit den in Form eines  $6 \times 1$  Vektors angeordneten und als Spannungsvektor bezeichneten Komponenten des Spannungstensors zu vermeiden



Punkt  $P$  gebildet, so müssen die Schubspannungen mit den Flächenelementen multipliziert werden, um die resultierenden Kräfte zu erhalten. Es ergibt sich:

$$\hat{\mathcal{T}} : 2\frac{dx_2}{2}(\sigma_{23}dx_1dx_3) - 2\frac{dx_3}{2}(\sigma_{32}dx_1dx_2) = 0$$

woraus

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (2.17)$$

folgt.

### 2.1.5. Gleichgewichtsbedingungen am linear elastischen Volumen

Wir betrachten ein homogenes Volumen  $V \subseteq \mathbb{R}^3$ . Soll sich  $V$  im statischen Gleichgewicht befinden, so muss sowohl das Gleichgewicht der Kraftflüsse im Inneren als auch das Gleichgewicht der Kraftflüsse auf seiner Oberfläche erfüllt sein.

Das Gleichgewicht im Inneren kann wie in Abb. 2.3 dargestellt durch die Impulserhaltung an einem Volumenelement  $dV$  abgeleitet werden.

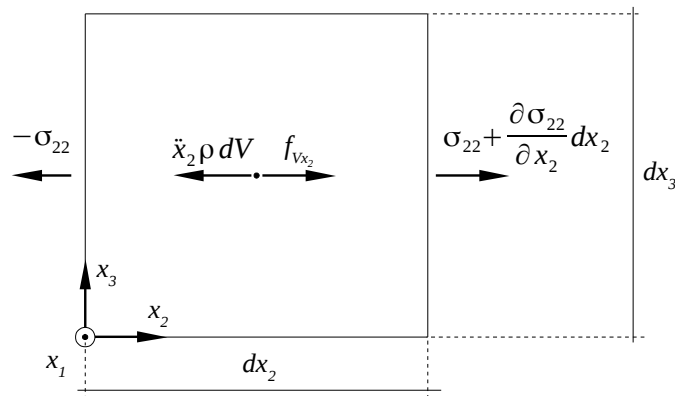


Abb. 2.3: Impulssatz am Volumenelement

Der vollständige Impulssatz in  $x_2$ -Richtung für das dargestellte Volumenelement würde demnach lauten:

$$\ddot{x}_2 \rho dV = -\sigma_{22} + \sigma_{22} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial x_2} dx_2 + f_{Vx_2} .$$

Da es sich in dieser Arbeit um statische Betrachtungen handelt, treten keine Massenträgheiten auf. Des weiteren werden die nachfolgenden Betrachtungen ohne Be-

rücksichtigung eingepprägter Volumenkräfte durchgeföhrt. Es folgt somit für  $V$ :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}^{(1)} . \quad (2.18)$$

Da sich  $V$  im statischen Gleichgewicht befindet, muss das Kraftflussfeld  $\mathbf{t}^0 = \mathbf{t}^0(\mathbf{x})$  auf seiner Oberfläche  $\partial V$  die Spannungsrandbedingung der Elastostatik erfüllen, die direkt aus Gl. (2.16) folgt.

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{\partial V} = \mathbf{t}^0(\mathbf{x}) , \quad (2.19)$$

mit  $\mathbf{n}_{\partial V}$  dem nach außen gerichteten Einheitsnormalenvektor auf  $\partial V$ .

Verschwundet für den Kraftflussvektor  $\mathbf{t}^0$  die resultierende Kraft sowie das durch ihn induzierte Moment um einen festen Punkt,

$$\mathbf{F}_{res} = \oint_{\partial V} \mathbf{t}^0 dS = \mathbf{0}^{(1)} \quad (2.20)$$

$$\hat{\mathcal{T}}_{res, \mathbf{t}^0} = \oint_{\partial V} \mathbf{x} \times \mathbf{t}^0 dS = \mathbf{0}^{(1)} \quad (2.21)$$

so nennen wir diesen Kraftflussvektor bzw. diese Spannungsrandbedingung statisch ausgeglichen. In der englischsprachigen Literatur wird von self-equilibrating boundary conditions gesprochen.

Neben der Spannungsrandbedingung können auch Verschiebungsrandbedingungen

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^0(\mathbf{x}) \quad (2.22)$$

auf  $\partial V$  auftreten.

### 2.1.6. Linearelastisches Materialgesetz

Der lineare Zusammenhang zwischen dem Tensorfeld der Cauchy-Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  und dem daraus resultierenden Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  bzw. dem Feld des linearen Dehnungstensors  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$  wird durch das verallgemeinerte Hooke'sche Gesetz beschrieben [33]. Es gilt:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{D} : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \quad (2.23a)$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon^{kl} \quad \Leftrightarrow \quad \varepsilon_{ij} = D_{ijkl} \sigma^{kl} \quad (2.23b)$$

mit  $\mathbf{C}$  dem Elastizitätstensor und  $\mathbf{D} = \mathbf{C}^{-1}$  dem Nachgiebigkeitstensor, bei denen es sich um Tensoren der Stufe 4 mit  $3 \times 3 \times 3 \times 3 = 81$  Koordinaten handelt. Wird Gl.

(2.23b) im Falle vorgegebener Dehnungen ausgeschrieben, so ergibt sich ein lineares Gleichungssystem mit 9 Gleichungen für die 9 unbekanntenen Komponenten von  $\boldsymbol{\sigma}$ .

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & C_{ij11} \varepsilon^{11} + C_{ij21} \varepsilon^{21} + C_{ij31} \varepsilon^{31} \\ & + C_{ij12} \varepsilon^{12} + C_{ij22} \varepsilon^{22} + C_{ij32} \varepsilon^{32} + C_{ij13} \varepsilon^{13} + C_{ij23} \varepsilon^{23} + C_{ij33} \varepsilon^{33} \end{aligned}$$

Daraus folgt aufgrund der Symmetrie von  $\boldsymbol{\varepsilon}$ :

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & C_{ij11} \varepsilon^{11} + C_{ij22} \varepsilon^{22} + C_{ij33} \varepsilon^{33} \\ & + (C_{ij21} + C_{ij12}) \varepsilon^{12} + (C_{ij31} + C_{ij13}) \varepsilon^{13} + (C_{ij32} + C_{ij23}) \varepsilon^{23}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Aufgrund der Symmetrie von  $\boldsymbol{\sigma}$  sind von diesen 9 Gleichungen jedoch nur 6 linear unabhängig. Es ergeben sich somit die folgenden Symmetrien des Elastizitätstensors innerhalb seines ersten und zweiten Indexpaares.

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{jilk} = C_{ijlk} \quad (2.25)$$

Symmetrien zwischen erstem und zweitem Indexpaar können aus den oben stehenden Überlegungen zunächst nicht abgeleitet werden. Um auch diese Symmetrie zu zeigen, wollen wir nun die durch ein Spannungsfeld, d.h. durch die inneren Kräfte an einem Volumen geleistete Arbeit betrachten.

Die Arbeit, die ein Spannungsfeld an einem Volumen  $V \subseteq \mathbb{R}^3$  verrichtet, lässt sich ebenfalls am infinitesimalen Volumenelement  $dV$  ableiten.

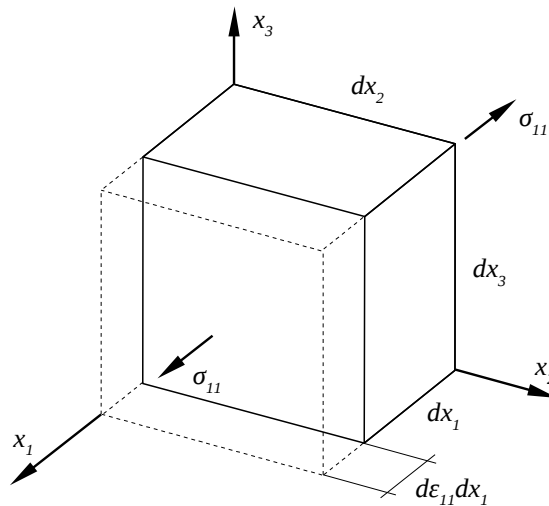


Abb. 2.4: Arbeit am Volumenelement in 11-Richtung

Betrachtet man die in Abb. 2.4 dargestellte Deformation von  $dV$  durch  $\sigma_{11}$ , so beträgt die Verlängerung durch die Dehnung  $d\varepsilon^{11}$  des Volumenelements  $\Delta dx^1 = d\varepsilon^{11} dx_1$ . Dies bedeutet durch einen allgemeinen Spannungszustand  $\sigma_{ij}$  wird die Arbeit

$$dW = \sigma_{ij} dA \Delta dx^i = \sigma_{ij} d\varepsilon^{ij} dx_1 dx_2 dx_3 = \sigma_{ij} d\varepsilon^{ij} dV$$

bzw. die auf das Volumen  $dV$  bezogene Arbeit

$$dw = \sigma_{ij} d\varepsilon^{ij} \quad (2.26)$$

geleistet. Die gesamte auf das Volumen bezogene Arbeit, die bei der Deformation von  $V$  aus einem verzerrungsfreien Zustand bis zur Dehnung  $\varepsilon^{ij}$  geleistet wird, ergibt sich durch Integration nach  $d\varepsilon^{ij}$

$$w = \int_0^{\varepsilon^{ij}} \sigma_{ij} d\varepsilon^{ij} \quad (2.27)$$

und wird spezifische Formänderungsarbeit genannt. Wobei es zu beachten gilt, dass es sich bei dem Ausdruck  $\sigma_{ij} d\varepsilon^{ij}$  um ein zweifach Verjüngendes Produkt der beteiligten Tensoren handelt. Eine wesentliche Forderung der linearen Elastizitätstheorie ist, dass die an einem Volumen  $V$  geleistete Arbeit allein vom aktuellen Verzerrungszustand nicht aber von der Belastungshistorie abhängig ist. Diese Forderung ist mit Gl. (2.27), nach [33] jedoch nur zu erfüllen, wenn  $\sigma_{ij} d\varepsilon^{ij} = dU$  ein vollständiges Differential ist und es gilt:

$$w = \int_0^{\varepsilon^{ij}} \sigma_{ij} d\varepsilon^{ij} = \int_0^{\varepsilon^{ij}} dU = U(\varepsilon^{ij}), \quad (2.28)$$

bzw.

$$\sigma_{ij} d\varepsilon^{ij} = dU = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon^{ij}} d\varepsilon^{ij} \quad (2.29)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon^{ij}} \quad (2.30)$$

wobei  $U(\varepsilon^{ij})$  als spezifische Formänderungsenergie oder spezifisches elastisches Potential bezeichnet wird.

Bildet man nun die zweite Ableitung der Formänderungsenergie, so folgt aus Gl. (2.30) mit Gl. (2.23b) aufgrund des Satzes von Schwarz, dass der Elastizitätstensor auch Symmetrie zwischen erstem und zweitem Indexpaar aufweist.

$$C_{ijkl} = \frac{\partial C_{ijkl} \varepsilon^{kl}}{\partial \varepsilon^{kl}} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon^{kl}} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon^{ij} \partial \varepsilon^{kl}} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon^{kl} \partial \varepsilon^{ij}} = \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial \varepsilon^{ij}} = \frac{\partial C_{klij} \varepsilon^{ij}}{\partial \varepsilon^{ij}} = C_{klij} \quad (2.31)$$

Das heißt es gilt:

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{jilk} = C_{ijlk} = C_{klij} = C_{lki j} = C_{lkji} = C_{lki j} . \quad (2.32)$$

Zum Schluss dieses Abschnitts sei nochmals explizit auf den Zusammenhang zwischen einem aufgeprägten Verschiebungsfeld und dem daraus resultierendem Spannungsfeld hingewiesen. Mit Gl. (2.9b) eingesetzt in Gl. (2.23b) folgt:

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x^j} + \frac{\partial u^j}{\partial x^i} \right) = D_{ijkl} \sigma^{kl} . \quad (2.33)$$

Nimmt man über  $V$  nun ein lineares Verschiebungsfeld der Form:

$$u_i(\mathbf{x}) = a_{ij} \cdot x^j + b_i , \quad (2.34)$$

mit  $a_{ij} = \text{const}$  an, so folgt aus Gl. (2.33)

$$a_{ij} = \varepsilon_{ij} = \text{const} = D_{ijkl} \sigma^{kl} . \quad (2.35)$$

Woraus mit  $D_{ijkl} = \text{const}$  ein ebenso konstantes Spannungsfeld folgt. Genauso gilt bei homogener Materialverteilung der umgekehrte Fall, dass aus einem konstanten Spannungsfeld in  $V$  ein maximal lineares Verschiebungsfeld folgen kann.

### 2.1.7. Matrizennotation des linearelastischen Materialgesetzes

Im vorangegangenen Abschnitt wurde gezeigt, dass der Steifigkeitstensor Symmetrien innerhalb des ersten und zweiten Indexpaares sowie zwischen erstem und zweitem Indexpaar aufweist (vgl. Gl. (2.32)). Daraus ergibt sich die Möglichkeit von der Tensordarstellung auf eine Matrizendarstellung des Hooke'schen Gesetzes überzugehen. Diese Darstellung bringt insbesondere bei Materialien, die innere Symmetrien zu mehr als einer Ebene besitzen, Vorteile, da die Komponenten der Nachgiebigkeitsmatrix in diesen Fällen durch einfache Beziehungen zwischen den sogenannten Ingenieurkonstanten E-Modul, Poissonzahl und Schubmodul dargestellt werden können.

Werden die in Gl. (2.36) angegebenen Indexübergänge verwendet, welche in dieser Arbeit für alle Übergänge von Tensor nach Matrizenformulierung gelten sollen, so

folgt mit Gl. (2.32) die Darstellung des Steifigkeits- bzw. Nachgiebigkeitstensors in Form einer  $6 \times 6$  Matrix und die Darstellung von Spannungs- und Dehnungstensor in Form von  $6 \times 1$  Spaltenvektoren

$$11 = 1, 22 = 2, 33 = 3, 12 = 4, 13 = 5, 23 = 6 \quad (2.36)$$

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 2 C_{1112} & 2 C_{1113} & 2 C_{1123} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & 2 C_{2212} & 2 C_{2213} & 2 C_{2223} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & 2 C_{3312} & 2 C_{3313} & 2 C_{3323} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & 2 C_{1212} & 2 C_{1213} & 2 C_{1223} \\ C_{1311} & C_{1322} & C_{1333} & 2 C_{1312} & 2 C_{1313} & 2 C_{1323} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & 2 C_{2312} & 2 C_{2313} & 2 C_{2323} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{23} \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

### 2.1.8. Materialsymmetrie

Im Folgenden sind Elastizitäts- bzw. Nachgiebigkeitsmatrizen für die verschiedenen Arten der Materialsymmetrie notiert, die im Verlauf der Arbeit Verwendung finden. Für eine ausführliche Diskussion von Materialsymmetrien und deren Auswirkungen auf die Komponenten der Steifigkeits- und Nachgiebigkeitsmatrizen sowie deren Beziehungen untereinander siehe [35] und die dort angegebenen Quellen.

Es gilt hierbei anzumerken, dass die angegebenen Formen der Elastizitäts- und Nachgiebigkeitsmatrizen nur in den Koordinaten der entsprechenden Materialsymmetrien gelten. Dies bedeutet, dass alle Matrizen außer der rotationsinvarianten isotropen Matrix durch Rotation des Koordinatensystems die dargestellten Notationen verlieren und alle Komponenten ungleich Null werden, wodurch Materialsymmetrien nicht mehr direkt abgelesen werden können.

Unabhängig von der Form der Materialsymmetrie müssen deren beschreibende Elastizitäts- bzw. Nachgiebigkeitsmatrizen die Bedingungen der Drucker Materialstabilität erfüllen [36]. Diese bedeuten für die hier vorgestellten linear elastischen Materialsymmetrien, dass die Elastizitäts- bzw. Nachgiebigkeitsmatrix positiv definit sein muss. In allen vorgestellten Fällen mit Ausnahme der Anisotropie bedeutet dies, dass die folgenden Beziehungen zwischen den von Null verschiedenen Komponenten der Nachgiebigkeitsmatrix erfüllt sein müssen [37].

$$0 < D_{ii} \quad \text{mit } i \in [1, 2, \dots, 6] \quad (2.38)$$

$$D_{ij}^2 < D_{ii} D_{jj} \quad \text{mit } i \in [1, 2]; j \in [2, 3] \wedge i \neq j \quad (2.39)$$

$$0 < \det(\underline{\mathbf{D}}) \quad (2.40)$$

Im Falle der Anisotropie sind die Beziehungen nicht mehr anwendbar, da dann alle Komponenten der Elastizitäts- bzw. Nachgiebigkeitsmatrix ungleich null sind. In diesem Falle müssen alle Eigenwerte von  $\underline{\mathbf{D}}$  größer Null sein, um die Materialstabilität zu gewährleisten.

### 2.1.8.1. Isotropie

Im isotropen Fall besteht Materialsymmetrie unabhängig von ausgezeichneten Richtungen. Das Materialverhalten wird durch nur zwei unabhängige Konstanten beschrieben, den Elastizitätsmodul  $E$  und die Poissonzahl  $\nu$ . Es wird hier die Nachgiebigkeitsmatrix angegeben, da sich deren Komponenten besonders einfach durch die beiden Konstanten ausdrücken lassen.

$$\underline{\mathbf{D}}_{iso} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

### 2.1.8.2. Transversale Isotropie

Im transversal isotropen Fall besteht Materialsymmetrie zu einer Ebene. Dies bedeutet, dass sich die Materialeigenschaften bei Rotation des Materialkoordinatensystems um die Normale der Symmetrieebene nicht ändern. Dieses Materialverhalten wird durch fünf unabhängige Konstanten beschrieben.

$$\underline{\mathbf{D}}_{tr-iso} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_1} & -\frac{\nu_{12}}{E_1} & -\frac{\nu_{13}}{\sqrt{E_1 E_3}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_1} & \frac{1}{E_1} & -\frac{\nu_{13}}{\sqrt{E_1 E_3}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{13}}{\sqrt{E_1 E_3}} & -\frac{\nu_{13}}{\sqrt{E_1 E_3}} & \frac{1}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu_{12})}{E_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} \end{bmatrix} \quad (2.42)$$

Im Falle der Symmetrie zur  $x$ - $y$ -Ebene sind dies der Elastizitätsmodul in Richtung der Normalen  $E_3$ , der Elastizitätsmodul tangential zur Symmetrieebene  $E_1$ , die Querkontraktionszahlen für Dehnung in Normalenrichtung  $\nu_{13}$  und in tangentialer Richtung der Symmetrieebene  $\nu_{12}$ . Des weiteren existiert nun ein von den übrigen Materialkonstanten unabhängiger Schubmodul bei Schubdeformation in Normalenrichtung der Symmetrieebene  $G_{13}$ . Es wird wiederum die Nachgiebigkeitsmatrix angegeben,

da sich auch hier deren Komponenten besonders einfach durch die fünf Materialkonstanten beschreiben lassen.

### 2.1.8.3. Orthotropie

Da ein Materialverhalten mit zwei aufeinander senkrecht stehenden Symmetrieebenen auch die Materialsymmetrie zu einer weiteren auf den beiden anderen senkrecht stehenden Ebene impliziert [35], ist das nächst kompliziertere Materialverhalten nach der transversalen Isotropie die Orthotropie, welche sich durch drei aufeinander senkrecht stehende Ebenen der Materialsymmetrie auszeichnet. Zur Beschreibung von orthotropem Verhalten sind neun unabhängige Materialkonstanten notwendig:

- Die drei Elastizitätsmoduli bei Belastung normal zu einer der Symmetrieebenen  $E_1$ ,  $E_2$  und  $E_3$
- Drei unabhängige Querkontraktionszahlen  $\nu_{12}, \nu_{13}$  und  $\nu_{23}$
- Drei in diesem Fall unabhängige Schubmoduli  $G_{12}$ ,  $G_{13}$  und  $G_{23}$ .

$$\underline{\mathbf{D}}_{ortho} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_1} & -\frac{\nu_{21}}{E_2} & -\frac{\nu_{31}}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_1} & \frac{1}{E_2} & -\frac{\nu_{32}}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{13}}{E_1} & -\frac{\nu_{23}}{E_2} & \frac{1}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} \end{bmatrix} \quad (2.43)$$

### 2.1.8.4. Monotropie

Zur Beschreibung von monotropem oder auch monoklinem Materialverhalten sind 13 unabhängige Materialkonstanten notwendig, für die sich keine einfache Formulierung in den sogenannten Ingenieurkonstanten E-Modul, Poissonzahl und Schubmodul finden lässt. Material mit diesem Verhalten zeigt Symmetrie zu einer Ebene. Die Elastizitätsmatrix nimmt bei Transformation der  $x_3$ -Richtung parallel zur Normalen der Symmetrieebene die folgende Form an:

$$\underline{\mathbf{C}}_{mono} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & 0 & 0 \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & C_{56} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{56} & C_{66} \end{bmatrix} \quad (2.44)$$



### 2.1.8.5. Anisotropie

Im Falle der Anisotropie bestehen für das betrachtete Material keinerlei Material-symmetrien mehr. Es ist somit das am kompliziertesten zu beschreibende Material-verhalten. Es lässt sich keine Darstellung der Steifigkeits- oder Nachgiebigkeitsmatrix in den sogenannten Ingenieurkonstanten E-Modul, Poissonzahl und Schubmodul fin-den, sondern es müssen alle 21 unabhängigen Komponenten der Steifigkeits- bzw. Nachgiebigkeitsmatrix angegeben werden.

### 2.1.9. Transformation der Materialmatrix

Es sei  $\mathbf{a}$  eine Lineartransformation im  $\mathbb{R}^3$ , mit der die beiden Koordinatensysteme des Spannungstensors transformiert werden. Mit Gl. (A.35) ergibt sich:

$$\hat{\sigma}_{kl} = \sigma^{ij} a_{ki} a_{lj} . \quad (2.45)$$

Das entstehende Gleichungssystem für die neun Komponenten von  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  hat aufgrund der Symmetrie von  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  sechs unabhängige Gleichungen und kann mit Gl. (2.36) als Matrixgleichung geschrieben werden, die eine lineare Abbildung des Spannungsvek-tors im  $\mathbb{R}^6$  beschreibt.

$$\underline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) \underline{\boldsymbol{\sigma}} \quad (2.46)$$

Bzw. explizit ausgeschrieben:

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_3 \\ \hat{\sigma}_4 \\ \hat{\sigma}_5 \\ \hat{\sigma}_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}^2 & a_{12}^2 & a_{13}^2 & 2 a_{11} a_{12} & 2 a_{11} a_{13} & 2 a_{12} a_{13} \\ a_{21}^2 & a_{22}^2 & a_{23}^2 & 2 a_{21} a_{22} & 2 a_{21} a_{23} & 2 a_{22} a_{23} \\ a_{31}^2 & a_{32}^2 & a_{33}^2 & 2 a_{31} a_{32} & 2 a_{31} a_{33} & 2 a_{32} a_{33} \\ a_{11} a_{21} & a_{12} a_{22} & a_{13} a_{23} & a_{12} a_{21} + a_{11} a_{22} & a_{13} a_{21} + a_{11} a_{23} & a_{13} a_{22} + a_{12} a_{23} \\ a_{11} a_{31} & a_{12} a_{32} & a_{13} a_{33} & a_{12} a_{31} + a_{11} a_{32} & a_{13} a_{31} + a_{11} a_{33} & a_{13} a_{32} + a_{12} a_{33} \\ a_{21} a_{31} & a_{22} a_{32} & a_{23} a_{33} & a_{22} a_{31} + a_{21} a_{32} & a_{23} a_{31} + a_{21} a_{33} & a_{23} a_{32} + a_{22} a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad (2.47)$$

Um die Materialmatrix mit der gleichen linearen Abbildung wie den Spannungsvektor zu transformieren, muss diese eine orthogonale Abbildung darstellen, da die folgende Umformung nur für  $\underline{\mathbf{A}}^T(\mathbf{a}) \underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) = \underline{\mathbf{E}}$  gilt:

$$\begin{aligned} \underline{\boldsymbol{\sigma}} &= \underline{\mathbf{C}} \underline{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) \underline{\boldsymbol{\sigma}} &= \underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) \underline{\mathbf{C}} \underline{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) \underline{\boldsymbol{\sigma}} &= \underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{A}}^T(\mathbf{a}) \underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) \underline{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \underline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}} &= \underline{\hat{\mathbf{C}}} \underline{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}} \end{aligned}$$

Dies bedeutet für den Fall, dass  $\underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a})$  eine orthogonale Matrix ist, ergibt sich für die Transformation der Elastizitätsmatrix im  $\mathbb{R}^6$ :

$$\hat{\underline{\mathbf{C}}} = \underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{A}}^T(\mathbf{a}). \quad (2.48)$$

Ist nun  $\mathbf{a} = \mathbf{r}(\mathbf{n}, \alpha)$  ein Tensor zweiter Stufe, welcher eine allgemeine Drehung im  $\mathbb{R}^3$  um den Winkel  $\alpha$  mit dem normierten Vektor  $\mathbf{n}$  als Rotationsachse beschreibt,

$$\mathbf{r}(\mathbf{n}, \alpha) = \begin{bmatrix} \cos \alpha + n_1^2 (1 - \cos \alpha) & n_1 n_2 (1 - \cos \alpha) - n_3 \sin \alpha & n_2 \sin \alpha + n_1 n_3 (1 - \cos \alpha) \\ n_3 \sin \alpha + n_1 n_2 (1 - \cos \alpha) & \cos \alpha + n_2^2 (1 - \cos \alpha) & n_2 n_3 (1 - \cos \alpha) - n_1 \sin \alpha \\ n_1 n_3 (1 - \cos \alpha) - n_2 \sin \alpha & n_1 \sin \alpha + n_2 n_3 (1 - \cos \alpha) & \cos \alpha + n_3^2 (1 - \cos \alpha) \end{bmatrix} \quad (2.49)$$

so ist  $\underline{\mathbf{A}}(\mathbf{r}(\mathbf{n}, \alpha))$  im Allgemeinen nicht orthogonal, wie die folgende explizite Überprüfung des Skalarprodukts der ersten beiden Eigenvektoren für willkürlich gewähltes  $\mathbf{n}$  und  $\alpha$  zeigt.

$$\sum_{i=1}^6 \underline{\mathbf{A}} \left( \mathbf{r} \left( \left[ \frac{1}{\sqrt{14}} \quad \frac{2}{\sqrt{14}} \quad \frac{3}{\sqrt{14}} \right], \frac{\pi}{2} \right) \right)_{1,i} \underline{\mathbf{A}} \left( \mathbf{r} \left( \left[ \frac{1}{\sqrt{14}} \quad \frac{2}{\sqrt{14}} \quad \frac{3}{\sqrt{14}} \right], \frac{\pi}{2} \right) \right)_{i,2} = \frac{4}{49} \quad (2.50)$$

Das heißt,  $\underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a})$  muss zu einer orthogonalen Matrix umgeformt werden, was mit Hilfe der unten stehenden äquivalenten Abbildung gelingt.

$$\underline{\mathbf{B}}(\mathbf{a}) = \underline{\mathbf{D}} \underline{\mathbf{A}}(\mathbf{a}) \underline{\mathbf{D}}^{-1} \quad (2.51)$$

mit

$$\underline{\mathbf{D}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

Es ergibt sich die folgende explizite Form der Abbildungsmatrix für eine allgemeine Drehung der Elastizitätsmatrix im  $\mathbb{R}^6$ :

$$\underline{\mathbf{B}}(\mathbf{a}) = \begin{bmatrix} a_{11}^2 & a_{12}^2 & a_{13}^2 & \sqrt{2} a_{11} a_{12} & \sqrt{2} a_{11} a_{13} & \sqrt{2} a_{12} a_{13} \\ a_{21}^2 & a_{22}^2 & a_{23}^2 & \sqrt{2} a_{21} a_{22} & \sqrt{2} a_{21} a_{23} & \sqrt{2} a_{22} a_{23} \\ a_{31}^2 & a_{32}^2 & a_{33}^2 & \sqrt{2} a_{31} a_{32} & \sqrt{2} a_{31} a_{33} & \sqrt{2} a_{32} a_{33} \\ \sqrt{2} a_{11} a_{21} & \sqrt{2} a_{12} a_{22} & \sqrt{2} a_{13} a_{23} & a_{12} a_{21} + a_{11} a_{22} & a_{13} a_{21} + a_{11} a_{23} & a_{13} a_{22} + a_{12} a_{23} \\ \sqrt{2} a_{11} a_{31} & \sqrt{2} a_{12} a_{32} & \sqrt{2} a_{13} a_{33} & a_{12} a_{31} + a_{11} a_{32} & a_{13} a_{31} + a_{11} a_{33} & a_{13} a_{32} + a_{12} a_{33} \\ \sqrt{2} a_{21} a_{31} & \sqrt{2} a_{22} a_{32} & \sqrt{2} a_{23} a_{33} & a_{22} a_{31} + a_{21} a_{32} & a_{23} a_{31} + a_{21} a_{33} & a_{23} a_{32} + a_{22} a_{33} \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

mit  $\mathbf{a} = \mathbf{r}(\mathbf{n}, \alpha)$  nach Gl. (2.49). Wird  $\mathbf{n}$  in Polarkoordinaten ausgedrückt,

$$\mathbf{n}(\phi, \eta) = [\cos \phi \sin \eta, \sin \phi \sin \eta, \cos \eta]^T \quad \phi \in [0, 2\pi] \quad , \quad \eta \in [0, \pi] \quad (2.54)$$

so gilt für die transformierte Materialmatrix insgesamt:

$$\hat{\underline{\mathbf{C}}}(\alpha, \phi, \eta) = \underline{\mathbf{B}}(\mathbf{a}(\mathbf{n}(\phi, \eta), \alpha)) \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{B}}(\mathbf{a}(\mathbf{n}(\phi, \eta), \alpha))^T \quad (2.55)$$

### 2.1.10. Optimierung der Materialmatrix

Für spongiöses Knochenmaterial wird in der Literatur mit Hilfe mechanischer Untersuchungsmethoden orthotropes Materialverhalten gefunden [27]. Diese Untersuchungen wurden jedoch an Proben durchgeführt, deren Abmessungen in etwa Proben, mit dem in dieser Arbeit größten betrachteten Volumen, entsprechen. Die im Rahmen dieser Arbeit erfolgten Voruntersuchungen [38] gaben Grund zu der Annahme, dass bei Verkleinerung des untersuchten Volumens der Grad der Anisotropie des effektiven Materialverhaltens ansteigt.

Das in dieser Arbeit beschriebene Verfahren zur Bestimmung von Materialmatrizen bzw. Steifigkeitstensoren ermittelt diese in einem beliebigen Koordinatensystem. Dies bedeutet, die berechneten Matrizen sind symmetrisch und im allgemeinen Fall voll besetzt. Da etwaige Materialsymmetrien die Anzahl der unabhängigen Parameter zur Beschreibung des Materialverhaltens signifikant reduzieren, ist es erstrebenswert, diese angeben zu können, bzw. die Ausrichtung der Materialparameter zu kennen, in der diese maximale Werte annehmen.

Zum Auffinden der Transformationsrichtung, welche die größtmögliche Materialsymmetrie enthüllt, wurde das im Folgenden beschriebene Optimierungsverfahren auf Basis einer Parameterraumabdeckung entwickelt.

Es wird zunächst eine vollständige Parameterraumabdeckung mit einem Raster in Schritten von  $\chi_0 = 1^\circ$  nach Gl. (2.55) berechnet wobei gilt:

$$\alpha = i \frac{\pi}{180} \quad , \quad \phi = j \frac{\pi}{180} \quad , \quad \eta = k \frac{\pi}{180} \quad , \quad (2.56)$$

mit  $i, j \in [0, 1, \dots, 360]$  ,  $k \in [0, 1, \dots, 180]$ .

In jedem Transformationsschritt werden die folgenden Kriterien für die in Abschnitt 2.1.8 angegebenen Materialsymmetrien ausgewertet.

- Monotropie:

$$cr_1(\alpha, \phi, \eta) = \sum_{i=1}^4 \hat{C}_{i,5}^2 + \hat{C}_{i,6}^2 \quad (2.57)$$

- Orthotropie, transversale und vollständige Isotropie

$$cr_2(\alpha, \phi, \eta) = \left[ \sum_{i=1}^3 \sum_{j=4}^6 \hat{C}_{i,j}^2 \right] + \hat{C}_{4,5}^2 + \hat{C}_{4,6}^2 + \hat{C}_{5,6}^2 \quad (2.58)$$

Wie in Abb. 2.5 zu erkennen, werden beide Funktionen durch die 1°-Rasterung genügend genau aufgelöst um ihren glatten Verlauf insbesondere im Bereich der Minima abzubilden.

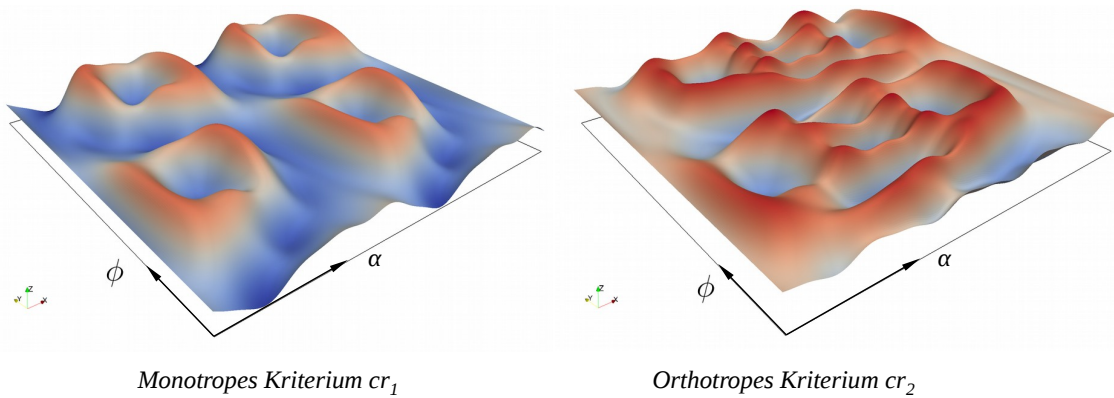


Abb. 2.5: Verlauf der Kriterien  $cr_1$  und  $cr_2$  im Parameterbereich  $\alpha, \phi \in [0, 2\pi]$ ,  $\eta = \frac{\pi}{2}$

Im nächsten Schritt wird das globale Minimum des durch die Rasterung erzeugten Gitters lokalisiert und in einer Umgebung von  $\pm\chi_0$  für alle Parameter nach dem lokalen Minimum gesucht. Die Schrittweite ist dabei  $\chi_0 \cdot 10^{-1}$ .

Dieser Verfeinerungsschritt wird so oft wiederholt, bis sich das lokale Minimum innerhalb der gewünschten Genauigkeit nicht mehr ändert. Allgemein wird im Verfeinerungsschritt  $k$  in der Umgebung  $\pm\chi_{k-1}$  mit der Schrittweite  $\chi_k = \chi_{k-1} \cdot 10^{-1}$  gesucht.

Das einfache Verfahren konvergiert sehr rasch und weist im Vergleich zu den übrigen Teilen der Prozesskette vernachlässigbare Laufzeiten auf. Aus diesem Grund wurden keine weiteren Anstrengungen unternommen, fortgeschrittene Optimierungsalgorithmen auf das Problem anzuwenden. Es wurde jedoch untersucht, inwiefern sich Symmetrien oder andere Eigenschaften der beiden Zielfunktionen  $cr_1$  und  $cr_2$  zur Einschränkung des Parameterraumes ausnutzen lassen.

Bei der Anwendung von Gl. (2.55) auf eine allgemeine symmetrische  $6 \times 6$ -Matrix

fällt auf, dass eine Permutation der Parameter in Schritten von  $\frac{\pi}{2}$ , wie in folgendem Beispiel angegeben, eine Permutation der Matrixkomponenten und deren Vorzeichen nach sich zieht.

$$\hat{\underline{C}}(\alpha, \phi, \eta) = \underline{\mathbf{B}}(\mathbf{a}(\mathbf{n}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}))) \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{B}}(\mathbf{a}(\mathbf{n}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})))^T$$

$$\hat{\underline{C}}(\alpha, \phi, \eta) = \begin{bmatrix} C_{33} & C_{23} & C_{13} & C_{36} & -C_{35} & -C_{34} \\ C_{23} & C_{22} & C_{12} & C_{26} & -C_{25} & -C_{24} \\ C_{13} & C_{12} & C_{11} & C_{16} & -C_{15} & -C_{14} \\ C_{36} & C_{26} & C_{16} & C_{66} & -C_{56} & -C_{46} \\ -C_{35} & -C_{25} & -C_{15} & -C_{56} & C_{55} & C_{45} \\ -C_{34} & -C_{24} & -C_{14} & -C_{46} & C_{45} & C_{44} \end{bmatrix}$$

Aus dieser Tatsache ergibt sich Grund zu der Annahme, dass die Zielfunktionen  $cr_1$  und  $cr_2$  gewisse Symmetrien aufweisen, die aus der analytischen Darstellung nicht direkt erkennbar sind. Auf Grund dessen wurden die Werte der Zielfunktionen für die folgenden drei prototypischen Matrizen genauer untersucht.

$$\underline{\mathbf{C}}_{ortho} = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{2}{5} & -\frac{1}{10} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{5} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{10} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}^{-1} \quad (2.59)$$

$\underline{\mathbf{C}}_{ortho}$  stellt eine Matrix dar, die alle Kriterien für orthotropes Materialverhalten erfüllt. D.h. sie ist symmetrisch, positiv definit und durch die Verhältnisse ihrer Koeffizienten untereinander erfüllt sie das Drucker Stabilitätskriterium.

$$\underline{\mathbf{C}}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.60)$$

$\underline{C}_1$  stellt eine willkürlich gewählte Matrix dar, die zwar symmetrisch jedoch nicht positiv definit ist.

$$\underline{C}_{2,4} = \begin{bmatrix} 1489,1 & 440,2 & 354,1 & 229,7 & 202,8 & 83,4 \\ 441,0 & 1039,8 & 340,5 & 199,7 & 63,1 & 167,7 \\ 355,3 & 340,9 & 961,5 & 50,2 & 151,1 & 153,4 \\ 228,3 & 198,3 & 48,8 & 466,8 & 91,5 & 83,1 \\ 201,7 & 61,8 & 149,9 & 91,5 & 400,8 & 87,4 \\ 82,2 & 166,5 & 152,3 & 83,2 & 87,5 & 362,2 \end{bmatrix} \quad (2.61)$$

$\underline{C}_{2,4}$  ist eine mit Hilfe des in dieser Arbeit entwickelten Prozesses, auf Grundlage des Testdatensatzes Femurkopf, berechnete Materialmatrix für ein Volumenelement der Kantenlänge  $2,4 \text{ mm}$ .

Betrachtet man die Werte der Zielfunktionen im Parameterbereich  $\alpha, \phi \in [0, 2\pi]$ ,  $\eta \in [0, \pi]$  für die drei angegebenen Matrizen und stellt deren Minima wie in Abb. 2.6 gezeigt dar, so erkennt man, dass die Kriterien für die orthotrope Matrix Rotationssymmetrie um die  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Achse besitzen. Ebenso zeigt  $cr_1$  für den Fall der berechneten Steifigkeitsmatrix  $\underline{C}_{2,4}$  annähernd Rotationssymmetrie um die  $z$ -Achse. In den Fällen  $cr_2(\underline{C}_{2,4})$ ,  $cr_1(\underline{C}_1)$  und  $cr_2(\underline{C}_1)$  ist dagegen keine Symmetrie der Funktionswerte ermittelbar.

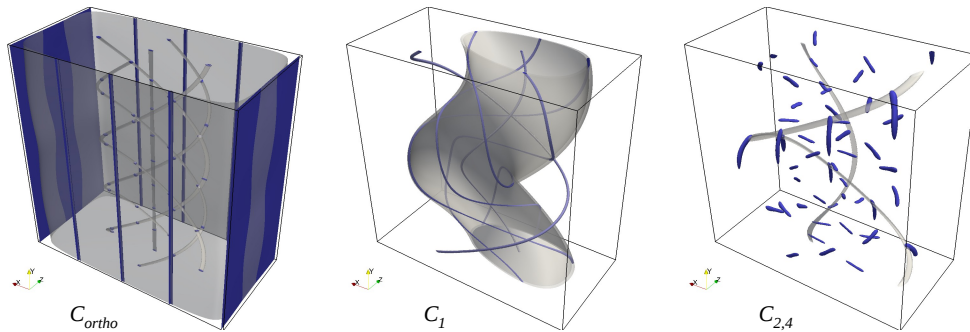


Abb. 2.6: Minima der Kriterien  $cr_1$  und  $cr_2$  im Parameterbereich  $\alpha, \phi \in [0, 2\pi]$ ,  $\eta \in [0, \pi]$

Es ist jedoch zu erkennen, dass beide Kriterien für die drei prototypischen Matrizen globale Minima zeigen, die sich teils zusammenhängend über den gesamten Parameterraum verteilen. In allen drei Fällen können Bereiche mit minimalen Funktionswerten in allen 8 Quadranten des Parameterbereiches gefunden werden. Daraus wurde der Schluss gezogen, dass es ausreicht, nur einen Quadranten des Parameterbereiches in der initialen Parameterraumabdeckung zu betrachten, um die globalen Minima der Zielfunktionen zu finden.

## 2.2. Methode der Finiten Elemente

Um das System der gekoppelten Differentialgleichungen der Kontinuumsmechanik in ein System aus algebraischen Gleichungen zu überführen, bedienen wir uns in dieser Arbeit des Prinzips der virtuellen Verschiebungen. Hierbei wird die von den virtuellen Verschiebungen an den festgehaltenen Spannungen geleistete innere Arbeit der von den virtuellen Verschiebungen an den äußeren Lasten geleisteten äußeren Arbeit gleich gesetzt.

### 2.2.1. Das Prinzip der Virtuellen Verschiebungen

Ausgehend von der starken Formulierung des Gleichgewichts im Inneren eines Volumenelements Gl. (2.18)

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}^{(1)} \quad (2.62)$$

wird bei der FEM das Gleichgewicht am Volumenelement, mittels des Prinzips der virtuellen Verschiebungen, in der sog. schwachen Form formuliert. Hierzu wird ein Funktional  $\mathcal{G}$  gebildet, welches die einfache Verjüngung der Spannungen mit einem virtuellen Verschiebungsfeld  $\delta \mathbf{u}(\mathbf{x})$  über das Volumen integriert.

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}, \delta \mathbf{u}(\mathbf{x})) := \int_V (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \cdot \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) dV \quad (2.63)$$

Das Gleichgewicht im Inneren ist genau dann erfüllt, wenn für beliebige Testfunktionen  $\delta \mathbf{u}(\mathbf{x})$  das Integral zu Null wird, d.h. wenn gilt:

$$\int_V (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \cdot \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) dV = 0 . \quad (2.64)$$

Dies bedeutet, dass das Gleichgewicht bzw. der Impulssatz nicht mehr in jedem Punkt des Feldes, sondern nur noch an diskreten Punkten erfüllt wird. Durch das Skalarprodukt mit der Testfunktion  $\delta \mathbf{u}(\mathbf{x})$  wird das zwischen den diskreten Punkten entstehende Residuum gewichtet, so dass für den Fall, dass das Funktional insgesamt verschwindet, das Gleichgewicht in schwacher Form erfüllt ist.

Nach der Produktregel der Differentiation gilt:

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \delta \mathbf{u}(\mathbf{x})) = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \cdot \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \nabla \otimes \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) . \quad (2.65a)$$

Bzw. in Indexschreibweise:

$$\nabla^i (\sigma_{ij} \delta u^j) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} \delta u^j + \sigma_{ij} \frac{\partial \delta u^j}{\partial x_i},$$

woraus folgt:

$$(\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \nabla \otimes \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}(\mathbf{x})), \quad (2.65b)$$

womit sich Gl. (2.64) weiter umformen lässt. Es folgt:

$$\int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \nabla \otimes \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) dV = \int_V \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}(\mathbf{x})) dV. \quad (2.66)$$

Mit dem Satz von Gauß und Gl. (2.19) kann die Rechtshandseite der obigen Gleichung in ein Oberflächenintegral über den eingepprägten Kraftfluss umgeformt werden:

$$\begin{aligned} \int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \nabla \otimes \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) dV &= \oint_{\partial V} \mathbf{n} (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}(\mathbf{x})) dA \\ \int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \nabla \otimes \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) dV &= \oint_{\partial V} \mathbf{t}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) dA \end{aligned} \quad (2.67a)$$

$$\underbrace{\int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) : \delta \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) dV}_{\delta W_{int}} = \underbrace{\oint_{\partial V} \mathbf{t}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) dA}_{\delta W_{ext}} \quad (2.67b)$$

bzw. in Koordinatenschreibweise:

$$\int_V \sigma_{ij} \nabla^i \delta u^j dV = \int_{\partial V} t_i \delta u^i dA \quad (2.67c)$$

$$\underbrace{\int_V \sigma_{ij} \delta \varepsilon^{ij} dV}_{\delta W_{int}} = \underbrace{\int_{\partial V} t_i \delta u^i dA}_{\delta W_{ext}} \quad (2.67d)$$

Die Beziehungen aus Gl. (2.67a)-Gl. (2.67d) stellen das Gleichgewicht der von den festgehaltenen Spannungen zusammen mit den virtuellen Dehnungen am Volumen verrichteten inneren Arbeit  $\delta A_{int}$  und der vom eingepprägten Kraftfluss an der Oberfläche des Volumens zusammen mit den virtuellen Verschiebungen verrichteten äußeren Arbeit  $\delta A_{ext}$  dar.

Da in obigen Gleichungen nicht direkt eine Rechtfertigung für die Umformung von



$\nabla^i \delta u^j$  in  $\delta \bar{\varepsilon}_{ij}$  zu erkennen ist, folgt zunächst eine Erläuterung zur Äquivalenz der Ausdrücke in Gl. (2.67a) und Gl. (2.67b) bzw. Gl. (2.67c) und Gl. (2.67d) für die intern am Volumen geleistete virtuelle Arbeit.

Dazu zerlegen wir zunächst  $\nabla^i \delta u^j$  in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Teil mit Nullen auf der Diagonalen.

$$\nabla^i \delta u^j = \frac{1}{2} \underbrace{[\nabla^i \delta u^j + \nabla^j \delta u^i]}_{\text{sym.}} + \frac{1}{2} \underbrace{[\nabla^i \delta u^j - \nabla^j \delta u^i]}_{\text{antis.}}$$

Diese Zerlegung setzen wir in die linke Seite von Gl. (2.67c) ein

$$\int_V \sigma_{ij} \nabla^i \delta u^j dV = \int_V \sigma_{ij} \underbrace{\frac{1}{2} [\nabla^i \delta u^j + \nabla^j \delta u^i]}_{\varepsilon_{ij}} dV + \int_V \sigma_{ij} \underbrace{\frac{1}{2} [\nabla^i \delta u^j - \nabla^j \delta u^i]}_0 dV ,$$

woraus direkt die Äquivalenz der Arbeitsterme folgt, da die doppelte Verjüngung des symmetrischen Spannungstensors mit dem antisymmetrischen Teil der Zerlegung verschwindet.

### 2.2.2. Gleichgewicht eines Finiten Elements

Nachfolgend wird ausgehend vom Gleichgewicht der inneren und äußeren Arbeit in seiner schwachen Form, welches aus dem Prinzip der virtuellen Verschiebungen resultierte, das Gleichgewicht an einem Finiten Element (FE) formuliert. Hierbei wird die unendliche Anzahl von Freiheitsgraden des kontinuierlichen Volumens mit Hilfe von Ansatzfunktionen auf eine endliche Anzahl von Freiheitsgraden an den Knotenpunkten eines FEs reduziert.

Zur Darstellung des Verschiebungsfeldes  $\mathbf{u}$  innerhalb eines FEs mit  $\mathcal{N}_e$  Knoten wird die Summe aus den Ansatzfunktionen multipliziert mit den Knotenverschiebungen verwendet. Somit ergibt sich:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} [\underline{\phi}^{\mathcal{N}}(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{u}}_{\mathcal{N}}]^T . \quad (2.68)$$

$${}^3 \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} = \left[ 1 \left[ \xrightarrow{\mathcal{N}_e} \right] \cdot \mathcal{N}_e \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} \right]^T$$

Hierbei ist  $\underline{\phi}(\mathbf{x})$  der  $1 \times \mathcal{N}_e$  Vektor der Ansatzfunktionen und  $\hat{\mathbf{u}}$  die  $\mathcal{N}_e \times 3$  Matrix der Verschiebungsvektoren an den Knoten. Im Folgenden wird aus Gründen der Übersichtlichkeit das Argument des Vektors der Ansatzfunktionen nicht mehr explizit mit angegeben. D.h. es gilt:  $\underline{\phi}(\mathbf{x}) = \underline{\phi}$ .

Eingesetzt in Gl. (2.67c) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \int_V \sigma_{ij} \nabla^i \delta u^j dV &= \int_{\partial V} t_i \delta u^i dA \\ \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \underbrace{\int_V \sigma_{ij} \nabla^i \phi^{\mathcal{N}} dV}_{\underline{\mathbf{P}}_{int}^{\mathcal{N}}} \delta \hat{u}_{\mathcal{N}}^j &= \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \underbrace{\int_{\partial V} t_i \phi^{\mathcal{N}} dA}_{\underline{\mathbf{P}}_{ext}^{\mathcal{N}}} \delta \hat{u}_{\mathcal{N}}^i \quad (2.69) \\ \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \underline{\mathbf{P}}_{int}^{\mathcal{N}} \delta \hat{\mathbf{u}}_{\mathcal{N}} &= \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \underline{\mathbf{P}}_{ext}^{\mathcal{N}} \delta \hat{\mathbf{u}}_{\mathcal{N}} \\ \underline{\mathbf{P}}_{int}^{\mathcal{N}} &= \underline{\mathbf{P}}_{ext}^{\mathcal{N}} \quad \forall \mathcal{N} \quad (2.70) \end{aligned}$$

wobei  $\underline{\mathbf{P}}_{int}^{\mathcal{N}}$  der Knotenvektor des integrierten Kraftflusses und  $\underline{\mathbf{P}}_{ext}^{\mathcal{N}}$  der Knotenvektor der eingepprägten Kräfte genannt wird. Gl. (2.70) stellt unter den getroffenen Voraussetzungen ein lineares Gleichungssystem für das Gleichgewicht eines FEs im dreidimensionalen Raum dar. Bei vorgegebener Belastung des Elementes muss das Gleichungssystem somit nach den gesuchten Knotenverschiebungen aufgelöst werden. Es sei hierbei angemerkt, dass dies nur im Fall linearer Annahmen direkt möglich ist, da die Knotenverschiebungen andernfalls z.B. durch Verwendung eines vollständigen Verzerrungstensors nichtlinear in die Beziehung eingehen würden.

### 2.2.3. Aufstellen der Elementsteifigkeit

Aus Gl. (2.69) folgt mit Gl. (2.23b):

$$\sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} [\delta \hat{u}_{\mathcal{N}}^j]^T \left( \int_V [\nabla^i (\phi^{\mathcal{N}})]^T C_{ijkl} \varepsilon^{kl} dV - \int_{\partial V} t_j [\phi^{\mathcal{N}}]^T dA \right) = 0. \quad (2.71)$$

Da die Variation der Knotenverschiebungen beliebig sein können, muss der geklammerte Term in obiger Gleichung gleich Null sein, woraus folgt:

$$\int_V [\nabla^i (\phi^{\mathcal{N}})]^T C_{ijkl} \varepsilon^{kl} dV = \int_{\partial V} t_j [\phi^{\mathcal{N}}]^T dA. \quad (2.72)$$

Nun ist nur noch das Feld des linearen Dehnungstensors aus der Gleichung zu eliminieren und durch die diskreten Knotenverschiebungen zu ersetzen. Wird ein isoparametrischer Verschiebungsansatz gewählt<sup>3</sup>, so wird für die Diskretisierung von  $\varepsilon^{kl}$  der gleiche Ansatz wie für das virtuelle Verschiebungsfeld nach Gl. (2.68) gewählt.

Wie in Abschnitt 2.1.6 ausgeführt, besitzt der Materialtensor Symmetrie innerhalb des ersten und zweiten Indexpaares. Es ist somit wieder möglich,  $C_{ijkl}\varepsilon^{kl}$  durch

$$C_{ijkl}\bar{\varepsilon}^{kl} = C_{ijkl}\nabla^k u^l = C_{ijkl}\frac{\partial u^l}{\partial x_k}$$

zu ersetzen. Eingesetzt in Gl. (2.72) folgt unter Verwendung von Gl. (2.68):

$$\sum_{\mathcal{M}=1}^{\mathcal{N}_e} \sum_{l=1}^3 \int_V \sum_{i=1}^3 \sum_{k=1}^3 [\nabla^i(\phi^{\mathcal{N}})]^T C_{ijkl} \nabla^k(\phi^{\mathcal{M}}) dV \hat{u}_{\mathcal{M}}^l = \int_{\partial V} [t_j \phi^{\mathcal{N}}]^T dA, \quad (2.73)$$

wobei zur Verdeutlichung die Summensymbole der Tensorindizes vollständig ausgeschreiben wurden.

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathcal{M}=1}^{\mathcal{N}_e} \sum_{l=1}^3 \int_V \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \nabla^i \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{ccc} C_{1j11} & C_{1j21} & C_{1j31} \\ C_{2j11} & C_{2j21} & C_{2j31} \\ C_{3j11} & C_{3j21} & C_{3j31} \end{array} \right]}_{C_{ijkl}} \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \nabla^k \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \hat{u}_{\mathcal{M}}^l \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{c} t_j \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e}^T \\ & \sum_{\mathcal{M}=1}^{\mathcal{N}_e} \sum_{l=1}^3 \int_V \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \mathcal{N}_e \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{ccc} C_{1j11} & C_{1j21} & C_{1j31} \\ C_{2j11} & C_{2j21} & C_{2j31} \\ C_{3j11} & C_{3j21} & C_{3j31} \end{array} \right]}_{C_{ijkl}} \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \mathcal{N}_e \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} dV \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \mathcal{N}_e \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} = \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \mathcal{N}_e \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} \\ & \sum_{\mathcal{M}=1}^{\mathcal{N}_e} \sum_{l=1}^3 \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \mathcal{N}_e \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \mathcal{N}_e \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} = \underbrace{\left[ \begin{array}{c} \mathcal{N}_e \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right]}_{\mathcal{N}_e} \end{aligned}$$

Um die oben stehende Gleichung in die Form einer gültigen Matrixgleichung zu bringen, wird die Matrix der Knotenverschiebungen  $\hat{u}_{\mathcal{M}}^l$  nun nicht mehr als  $\mathcal{N}_e \times 3$

<sup>3</sup>Eine ausführliche Erläuterung der Vor- und Nachteile subparametrischer, isoparametrischer und superparametrischer Verschiebungsansätze ist beispielsweise in [39] zu finden.

Matrix, sondern als  $3\mathcal{N}_e \times 1$  Spaltenmatrix geschrieben.

$$\sum_{\mathcal{M}=1}^{\mathcal{N}_e} \sum_{l=1}^3 [K_{\mathcal{N}\mathcal{M}}]_{jl} [\hat{u}_{\mathcal{M}}]_l = [\hat{f}_{\mathcal{N}}]_j \quad (2.74)$$

$$\begin{array}{c} \sum_{\mathcal{M}=1}^{\mathcal{N}_e} \sum_{l=1}^3 \left[ \begin{array}{c} \mathcal{N}_e \\ \mathcal{N}_e \\ \boxed{j,l} \end{array} \right] \cdot \left[ \begin{array}{c} l=1,2,3 \\ \mathcal{N}_e \\ \left[ \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right] \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} j=1,2,3 \\ \mathcal{N}_e \\ \left[ \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right] \end{array} \right] \\ \hline \left[ \begin{array}{c} \mathcal{N}_e \\ \mathcal{N}_e \\ \mathcal{N}_e \\ \left[ \begin{array}{ccc} \boxed{j,l=1,1} & \boxed{j,l=1,2} & \boxed{j,l=1,3} \\ \boxed{j,l=2,1} & \boxed{j,l=2,2} & \boxed{j,l=2,3} \\ \boxed{j,l=3,1} & \boxed{j,l=3,2} & \boxed{j,l=3,3} \end{array} \right] \end{array} \right] \cdot \left[ \begin{array}{c} l=1 \\ \mathcal{N}_e \\ \left[ \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \end{array} \right] \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} j=1 \\ \mathcal{N}_e \\ \left[ \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \end{array} \right] \end{array} \right] \\ \cdot \left[ \begin{array}{c} l=2 \\ \mathcal{N}_e \\ \left[ \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \end{array} \right] \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} j=2 \\ \mathcal{N}_e \\ \left[ \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \end{array} \right] \end{array} \right] \\ \cdot \left[ \begin{array}{c} l=3 \\ \mathcal{N}_e \\ \left[ \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \end{array} \right] \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} j=3 \\ \mathcal{N}_e \\ \left[ \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \end{array} \right] \end{array} \right] \\ \hline \underline{\mathbf{K}} \quad \underline{\hat{\mathbf{u}}} = \underline{\hat{\mathbf{f}}} \quad (2.75) \end{array}$$

mit  $\underline{\mathbf{K}}$  der Elementsteifigkeitsmatrix, welche die Dimension  $3\mathcal{N}_e \times 3\mathcal{N}_e$  hat,  $\underline{\hat{\mathbf{u}}}$  dem Vektor der Elementknotenverschiebungen und  $\underline{\hat{\mathbf{f}}}$  der Elementlastmatrix, die beide die Dimension  $3\mathcal{N}_e \times 1$  haben.

Mit Gl. (2.75) ist nun das Gleichgewicht eines Finiten Elementes formuliert, aus dem sich bei bekanntem Materialverhalten und gegebener Lastverteilung auf den Elementknoten durch Invertieren der Elementsteifigkeitsmatrix die Knotenverschiebungen berechnen lassen.

### 2.2.4. Aufstellen der kinematisch konsistenten Lastmatrix

Die Elementlastmatrix  $\underline{\hat{\mathbf{f}}}$  in Gleichung Gl. (2.75) verteilt den auf  $\partial V$  aufgeprägten, kontinuierlichen Kraftflussvektor kinematisch konsistent auf die Knoten des FEs. Dies bedeutet, dass der Kraftflussvektor zusammen mit dem virtuellen Verschiebungsfeld die gleiche äußere virtuelle Arbeit erzeugt wie die diskreten Knotenkräfte mit den virtuellen Knotenverschiebungen.

Würde man den Kraftflussvektor einfach statisch äquivalent d.h. beispielsweise nach

der Beziehung

$$\sum_{N=1}^{\mathcal{N}_e} \frac{\hat{f}^N}{\mathcal{N}_e} = \mathbf{t} \quad \text{mit} \quad \hat{f}^N = \mathbf{t}$$

auf die Knoten des FE's verteilen, so würde die geleistete externe Arbeit des diskreten Systems verändert.

Dieser Sachverhalt soll nachfolgend am Beispiel einer an einem FE wirkenden Einzellast verdeutlicht werden. Die Last wirke auf eine Kante des FE's, auf der, wie in Abb. 2.7 dargestellt, 3 Randknoten angeordnet seien. Die Ansatzfunktionen für die Verschiebungen in die  $x_1$  Richtung seien Polynome zweiten Grades, welche auf der Elementkante in der dimensionslosen Koordinate  $-1 \leq \xi \leq 1$  definiert sind.

$$\begin{aligned} \phi_1(\xi) &= \frac{1}{2}\xi(\xi - 1) \\ \phi_2(\xi) &= (1 - \xi)(1 + \xi) \\ \phi_3(\xi) &= \frac{1}{2}\xi(\xi + 1) \end{aligned}$$

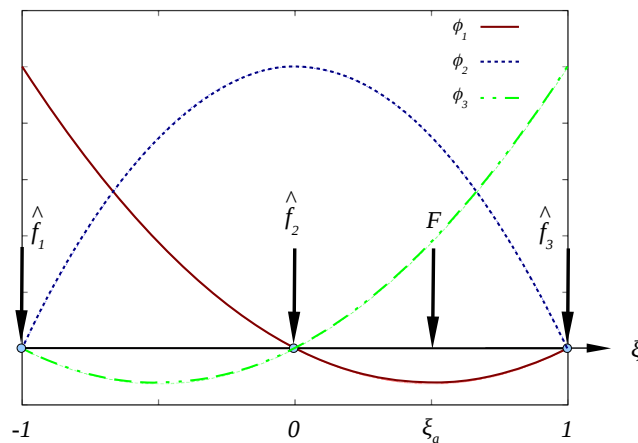


Abb. 2.7: Ansatzfunktionen zur Bestimmung einer kinematisch konsistenten Lastmatrix

Nach Gl. (2.67d) und Gl. (2.69) gilt:

$$\delta W_{ext} = \int_{\partial V} t_i \delta u^i dA = \sum_{N=1}^{\mathcal{N}_e} \int_{\partial V} t_i \phi^N dA \delta \hat{u}_N^i. \quad (2.76)$$

Durch die Annahme einer Einzellast verschwindet das Flächenintegral  $\int t_i dA$ , da  $t_i dA = F_i$  gilt. Die virtuelle, externe Arbeit ergibt sich somit aus der Summe der Einzellast multipliziert mit den Verschiebungswerten der Ansatzfunktionen am Kraft-

angriffspunkt.

$$\delta W_{ext} = \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} F_i \phi^{\mathcal{N}}(\xi_a) \delta \hat{u}_{\mathcal{N}}^i \quad (2.77)$$

Um kinematische Konsistenz zu erhalten, muss der Arbeitsausdruck in obiger Gleichung nun gleich dem Skalarprodukt aus den diskreten Knotenlasten  $\hat{f}_i^{\mathcal{N}}$  und den virtuellen Knotenverschiebungen sein.

$$\delta W_{ext} = \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \hat{f}_i^{\mathcal{N}} \delta \hat{u}_{\mathcal{N}}^i \quad (2.78)$$

Das Gleichsetzen der beiden Ausdrücke für die virtuelle, externe Arbeit ergibt:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \hat{f}_i^{\mathcal{N}} \delta \hat{u}_{\mathcal{N}}^i &= \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} F_i \phi^{\mathcal{N}}(\xi_a) \delta \hat{u}_{\mathcal{N}}^i \\ \hat{f}_i^{\mathcal{N}} &= F_i \phi^{\mathcal{N}}(\xi_a) \end{aligned} \quad (2.79)$$

Beispielhaft ausgewertet für den Fall  $\mathbf{F} = [-F_1 \ 0 \ 0]^T$  ergibt sich aus Gl. (2.77):

$$\begin{aligned} \delta W_{ext} &= -F_1 \left[ \frac{1}{2} \xi_a (\xi_a - 1) \quad (1 - \xi_a) (1 + \xi_a) \quad \frac{1}{2} \xi_a (\xi_a + 1) \right] [\hat{u}_1^1 \ \hat{u}_2^1 \ \hat{u}_3^1]^T \\ \delta W_{ext} &= -F_1 \frac{1}{2} \xi_a (\xi_a - 1) \hat{u}_1^1 - F_1 (1 - \xi_a) (1 + \xi_a) \hat{u}_2^1 - F_1 \frac{1}{2} \xi_a (\xi_a + 1) \hat{u}_3^1 \end{aligned}$$

Aus einem Koeffizientenvergleich mit Gl. (2.78) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \delta W_{ext} &= -F_1 \frac{1}{2} \xi_a (\xi_a - 1) \hat{u}_1^1 - F_1 (1 - \xi_a) (1 + \xi_a) \hat{u}_2^1 - F_1 \frac{1}{2} \xi_a (\xi_a + 1) \hat{u}_3^1 \\ \delta W_{ext} &= \hat{f}_1^1 \hat{u}_1^1 + \hat{f}_2^1 \hat{u}_2^1 + \hat{f}_3^1 \hat{u}_3^1 \\ &\Rightarrow \\ \hat{f}_1^1 &= -\frac{F_1}{2} \xi_a (\xi_a - 1) \\ \hat{f}_2^1 &= -F_1 (1 - \xi_a) (1 + \xi_a) \\ \hat{f}_3^1 &= -\frac{F_1}{2} \xi_a (\xi_a + 1) \end{aligned}$$

Würde die Einzellast wie in Abb. 2.7 eingezeichnet bei  $\xi_a = \frac{1}{2}$  angreifen, so ergäben sich die kinematisch konsistenten und auch statisch äquivalenten Knotenkräfte zu

$$\hat{f}_1^1 = \frac{1}{8} F_1, \quad \hat{f}_2^1 = -\frac{3}{4} F_1, \quad \hat{f}_3^1 = -\frac{3}{8} F_1,$$

im Gegensatz zur einfachen statisch äquivalenten Verteilung

$$\hat{f}_1^1 = -\frac{1}{3}F_1, \quad \hat{f}_2^1 = -\frac{1}{3}F_1, \quad \hat{f}_3^1 = -\frac{1}{3}F_1, \quad ,$$

woraus wie zu Anfang des Abschnitts angeführt eine veränderte virtuelle Arbeit des Systems resultieren würde.

### 2.2.5. Integration der Steifigkeitsmatrix im Parameterraum

Bis jetzt wurde die Integration der Elementsteifigkeit in Gl. (2.75) im Geometrieräum d.h. nach  $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ x_3]^T$  formuliert.

$$\nabla^i (\phi^{\mathcal{N}}) = \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}}{\partial x_i} \quad (2.80)$$

Die Ansatzfunktionen sind jedoch in den dimensionslosen Koordinaten  $\boldsymbol{\xi} = [\xi_1 \ \xi_2 \ \xi_3]^T$  definiert. Es ist somit nötig, die Differentiation der Ansatzfunktionen vom Geometrie- in den sogenannten Parameterraum zu transformieren.

Es gilt:

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{T}(\mathbf{x}) . \quad (2.81)$$

Die Ableitung von  $\phi$  im Geometrieräum ergibt unter Einsatz der oben stehenden Transformation und unter Anwendung der Kettenregel:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}(\mathbf{T}(\mathbf{x}))}{\partial \mathbf{x}} &= \frac{\partial \mathbf{T}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \\ \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}}{\partial x_i} &= \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}}{\partial \xi_j} \\ \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}}{\partial x_i} &= J_{ij} \cdot \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}}{\partial \xi_j} \end{aligned} \quad (2.82)$$

bzw. in Matrixnotation für  $\mathcal{N} \in [1, \dots, \mathcal{N}_e]$

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}}{\partial x_i} \right] &= [J_{ij}] \cdot \left[ \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}}{\partial \xi_j} \right] \quad (2.83) \\ 3 \left[ \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] &= 3 \left[ \begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{array} \right] \cdot 3 \left[ \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \end{aligned}$$

mit  $\underline{\mathbf{J}}$  der Jacobi- oder auch Funktionalmatrix, welche die Ableitungen der Parameterkoordinaten nach den Geometriekoordinaten enthält.

Da hier ein Element nach der isoparametrischen Methode formuliert wird, werden für das Verschiebungsfeld sowie den Ortsvektor die gleichen Ansatzfunktionen verwendet, woraus für den Ortsvektor des Geometrieraumes  $\mathbf{x}$  folgt:

$$\mathbf{x} = \mathbf{S}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} [\underline{\phi}^{\mathcal{N}} \hat{\mathbf{x}}_{,\mathcal{N}}]^T, \quad (2.84)$$

mit  $\hat{\mathbf{x}}_{,\mathcal{N}}$  der  $\mathcal{N}_e \times 3$  Matrix der Knotenkoordinaten im Geometrieraum und  $\mathbf{S}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{T}^{-1}(\boldsymbol{\xi})$  der zur Transformation aus Gl. (2.82) inversen Abbildung der Parameterkoordinaten in den Geometrieraum. Es gilt somit:

$$\underline{\mathbf{J}}^{-1} = \frac{\partial \mathbf{S}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j}. \quad (2.85)$$

Mit Gl. (2.84) folgt für die Jacobi-Matrix:

$$\underline{\mathbf{J}} = \left[ \frac{\partial \mathbf{S}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right]^{-1} = \left[ \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \right]^{-1} \quad (2.86)$$

$$\underline{\mathbf{J}} = \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \left[ [\hat{x}_{,\mathcal{N}i}]^T \frac{[\underline{\phi}^{\mathcal{N}}]^T}{\partial \xi_j} \right]^{-1} \quad (2.87)$$

Für die Integration der Elementsteifigkeit sowie des Lastvektors im Geometrieraum ergibt sich nach Einsetzen von Gl. (2.82) in Gl. (2.75)

$$\sum_{\mathcal{M}=1}^{\mathcal{N}_e} \int_V \left[ \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}}{\partial \xi_m} \right]^T [J_{im}]^T C_{ijkl} J_{kn} \frac{\partial \phi^{\mathcal{M}}}{\partial \xi_n} dV \hat{u}_{\mathcal{M}}^l = \int_{\partial V} [t_j \phi^{\mathcal{N}}]^T dS. \quad (2.88)$$

Es gilt hierbei zu beachten, dass es sich bei den partiellen Ableitungen der Ansatzfunktionen weiterhin um Funktionen in den dimensionslosen Koordinaten  $\boldsymbol{\xi}$  handelt. Eine Integration nach den Geometriekoordinaten  $\mathbf{x}$  ist somit nicht möglich. Dies bedeutet die Integration der Elementsteifigkeit muss vom Geometrie- in den Parameterraum transformiert werden.

Unter Anwendung von Gl. (A.6) zur Transformation der Volumenintegration aus dem Geometrieraum  $V \subseteq \mathbb{R}^3$  in den Parameterraum  $\Omega : \xi_1 \in [-1, 1] \times \xi_2 \in [-1, 1] \times \xi_3 \in [-1, 1]$  sowie Gl. (A.5) zur Transformation der Oberflächenintegration des Lastvektors über die Oberfläche des Geometrieraumes  $\partial V$  in die Oberflächenintegration



über die Oberfläche des Parameterraumes  $\partial\Omega$  ergibt sich:

$$\sum_{\mathcal{M}=1}^{\mathcal{N}_e} \int_{\Omega} \left[ \frac{\partial \phi^{\mathcal{N}}}{\partial \xi_m} \right]^T [J_{im}]^T C_{ijkl} J_{kn} \frac{\partial \phi^{\mathcal{M}}}{\partial \xi_n} |\det \underline{\mathbf{J}}^{-1}| d\Omega \hat{u}_{\mathcal{M}}^l = \int_{\partial\Omega} [t_j \phi^{\mathcal{N}}]^T |\det \mathbf{j}^{-1}| d\omega, \quad (2.89)$$

mit  $|\det \mathbf{j}^{-1}|$  der Funktionaldeterminante, die sich aus der Transformation der Parameterlinien an  $\partial V$  in die Parameterlinien an  $\partial\Omega$  ergibt.

## 2.2.6. Ermittlung der Dehnungen und Spannungen im Element

Nachdem die Steifigkeit des Elementes integriert wurde, können aus vorgegebenen Knotenkräften die Verschiebungen der Elementknoten bzw. die Elementfreiwerte durch Multiplikation der invertierten Elementsteifigkeit mit dem Elementlastvektor berechnet werden.

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{K}^{-1} \hat{\mathbf{f}} \quad (2.90)$$

Sind an einigen oder allen Knoten des Elementes nicht Kräfte, sondern die Knotenfreiwerte (Verschiebungskomponenten) vorgeschrieben, so muss das Gleichungssystem für  $\hat{\mathbf{u}}$  vor dem Invertieren von  $\mathbf{K}$  zunächst auf folgende Weise reduziert werden:

$$\left[ \begin{array}{ccc|ccc} K_{1,1} & \cdots & K_{1,n} & K_{1,n+1} & \cdots & K_{1,\mathcal{N}_e} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{n,1} & \cdots & K_{n,n} & K_{n,n+1} & \cdots & K_{n,\mathcal{N}_e} \\ \hline K_{n+1,1} & \cdots & K_{n+1,n} & K_{n+1,n+1} & \cdots & K_{n+1,\mathcal{N}_e} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{\mathcal{N}_e,1} & \cdots & K_{\mathcal{N}_e,n} & K_{\mathcal{N}_e,n+1} & \cdots & K_{\mathcal{N}_e,\mathcal{N}_e} \end{array} \right] \begin{bmatrix} \hat{u}_1 \\ \vdots \\ \hat{u}_n \\ \hat{u}_{n+1} \\ \vdots \\ \hat{u}_{\mathcal{N}_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{f}_1 \\ \vdots \\ \hat{f}_n \\ \hat{f}_{n+1} \\ \vdots \\ \hat{f}_{\mathcal{N}_e} \end{bmatrix}$$

$$\left[ \begin{array}{c|c} K_{I,I} & K_{I,II} \\ \hline K_{II,I} & K_{II,II} \end{array} \right] \begin{bmatrix} \hat{u}_I \\ \hat{u}_{II} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{f}_I \\ \hat{f}_{II} \end{bmatrix}$$

$$K_{I,I}^{-1} [\hat{f}_I - K_{I,II} \hat{u}_{II}] = \hat{u}_I \quad (2.91a)$$

$$K_{II,I} K_{I,I}^{-1} [\hat{f}_I - K_{I,II} \hat{u}_{II}] + K_{II,II} \hat{u}_{II} = \hat{f}_{II} \quad (2.91b)$$

mit  $\hat{u}_{II} = [\hat{u}_{n+1} \dots \hat{u}_{\mathcal{N}_e}]^T$  den vorgeschriebenen Verschiebungskomponenten und  $\hat{f}_I = [\hat{f}_1 \dots \hat{f}_n]^T$  den eingprägten Komponenten der Knotenkräfte.

Sind nun alle Komponenten der Knotenverschiebungen und eingprägten Kräfte bekannt, so können der Dehnungs- und Spannungstensor für das Element bestimmt

werden.

Nach Gl. (2.9b) und Gl. (2.68) gilt:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial u_i}{\partial x^j} + \frac{\partial u_j}{\partial x^i} \right] = \frac{1}{2} \left[ \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \frac{\partial [\Phi^{\mathcal{N}} \hat{u}_{\mathcal{N}i}]^T}{\partial x^j} + \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \frac{\partial [\Phi^{\mathcal{N}} \hat{u}_{\mathcal{N}j}]^T}{\partial x^i} \right], \quad (2.92)$$

mit Gl. (2.82) folgt:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left[ [J_{nj}]^T \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \frac{\partial [\Phi^{\mathcal{N}} \hat{u}_{\mathcal{N}i}]^T}{\partial \xi_n} + J_{im} \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} \frac{\partial [\Phi^{\mathcal{N}} \hat{u}_{\mathcal{N}j}]^T}{\partial \xi_m} \right].$$

Nachdem  $\varepsilon$  berechnet ist, können daraus mit dem verallgemeinerten Hooke'schen Gesetz Gl. (2.23b) direkt die Elementspannungen  $\sigma$  berechnet werden.

$$\sigma = C : \varepsilon \quad (2.93)$$

### 2.2.7. Ansatz für lineare Elemente

Nachfolgend wird die Steifigkeitsmatrix für ein isoparametrisches Element mit linearem Verschiebungsansatz explizit angegeben, da diese im weiteren Verlauf der Arbeit Verwendung findet.

Die Ansatzfunktionen werden auf der Idealform eines Hexaeders mit der Kantenlänge 2 in den dimensionslosen Elementkoordinaten

$$\xi = [\xi_1 \ \xi_2 \ \xi_3]^T \quad \text{mit} \quad \xi_i \in [-1, 1] \quad (2.94)$$

formuliert. Die Basisfunktionen pro Dimension seien lineare Polynome.

$$g_1(\xi_i) = \frac{1}{2} (1 - \xi_i) \quad (2.95a)$$

$$g_2(\xi_i) = \frac{1}{2} (1 + \xi_i) \quad (2.95b)$$

Die für ein Hexaederelement mit  $\mathcal{N}_e = 8$  Knoten benötigten Ansatzfunktionen ergeben sich durch Multiplikation der zu den entsprechenden Elementknoten gehörenden Basisfunktionen. So entstehen die folgenden acht Verschiebungsfelder, welche in jeweils einem Knoten den Wert 1 und in den anderen 7 Knoten den Wert 0 besitzen.

$$\phi_1(\boldsymbol{\xi}) = g_1(\xi_1)g_1(\xi_2)g_1(\xi_3) = \frac{1}{8}(1 - \xi_1)(1 - \xi_2)(1 - \xi_3) \quad (2.96a)$$

$$\phi_2(\boldsymbol{\xi}) = g_2(\xi_1)g_1(\xi_2)g_1(\xi_3) = \frac{1}{8}(1 + \xi_1)(1 - \xi_2)(1 - \xi_3) \quad (2.96b)$$

$$\phi_3(\boldsymbol{\xi}) = g_2(\xi_1)g_2(\xi_2)g_1(\xi_3) = \frac{1}{8}(1 + \xi_1)(1 + \xi_2)(1 - \xi_3) \quad (2.96c)$$

$$\phi_4(\boldsymbol{\xi}) = g_1(\xi_1)g_2(\xi_2)g_1(\xi_3) = \frac{1}{8}(1 - \xi_1)(1 + \xi_2)(1 - \xi_3) \quad (2.96d)$$

$$\phi_5(\boldsymbol{\xi}) = g_1(\xi_1)g_1(\xi_2)g_2(\xi_3) = \frac{1}{8}(1 - \xi_1)(1 - \xi_2)(1 + \xi_3) \quad (2.96e)$$

$$\phi_6(\boldsymbol{\xi}) = g_2(\xi_1)g_1(\xi_2)g_2(\xi_3) = \frac{1}{8}(1 + \xi_1)(1 - \xi_2)(1 + \xi_3) \quad (2.96f)$$

$$\phi_7(\boldsymbol{\xi}) = g_2(\xi_1)g_2(\xi_2)g_2(\xi_3) = \frac{1}{8}(1 + \xi_1)(1 + \xi_2)(1 + \xi_3) \quad (2.96g)$$

$$\phi_8(\boldsymbol{\xi}) = g_1(\xi_1)g_2(\xi_2)g_2(\xi_3) = \frac{1}{8}(1 - \xi_1)(1 + \xi_2)(1 + \xi_3) \quad (2.96h)$$

Mit Hilfe der in Gl. (2.96) angegebenen Ansatzfunktionen wird ein klassisches FE vom Typ HEXE-8 gebildet (vgl. [39]).

Die Form des Elementes, dessen Knotennummerierung sowie die Basisfunktionen beispielhaft auf einer Elementkante, sind in Abbildung Abb. 2.8 dargestellt und werden im weiteren Verlauf der Arbeit durchgehend so verwendet.

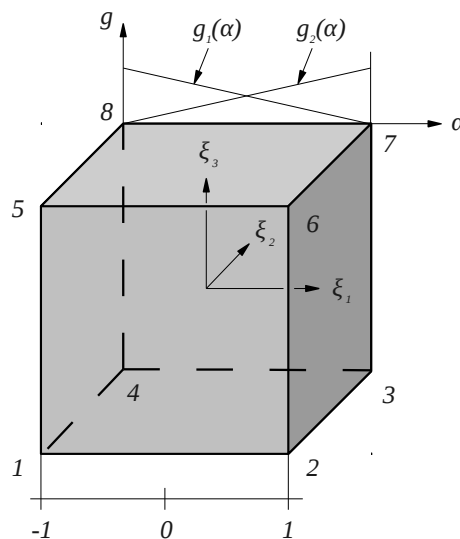


Abb. 2.8: Form, Knotennummerierung und Basisfunktionen des linearen Makroelementes

Wird nun ein würfelförmiges Element der Kantenlänge  $a$  betrachtet, so ergibt sich die

Koordinatentransformation zwischen physikalischem und Parameterraum Gl. (2.81) zu:

$$\xi_i = \frac{2}{a}x_i - 1. \quad (2.97)$$

Daraus folgt nach Gl. (2.83) die Jacobi-Matrix:

$$\underline{\mathbf{J}} = \begin{bmatrix} \frac{2}{a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{a} \end{bmatrix} \quad (2.98)$$

Mit der Jacobi-Determinante:

$$\det \underline{\mathbf{J}} = \frac{8}{a^3}.$$

Dies bedeutet, die Jacobi-Determinante stellt bei einem Element mit idealer Gestalt im physikalischen Raum den Skalierungsfaktor dar, der das Volumen des Elementes vom physikalischen in den Parameterraum überträgt.

Mit den von Null verschiedenen, symmetrischen Koordinaten des isotropen Materialensors,

$$\begin{aligned} C_{1111} &= \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & ; & & C_{1122} &= \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} & ; & & C_{1212} &= \frac{E}{2(1+\nu)} & ; \\ C_{2222} &= \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & ; & & C_{1133} &= \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} & ; & & C_{1313} &= \frac{E}{2(1+\nu)} & ; \\ C_{3333} &= \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} & ; & & C_{2233} &= \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} & ; & & C_{2323} &= \frac{E}{2(1+\nu)} \end{aligned} \quad (2.99)$$

ergibt sich aus Gl. (2.89) die Elementsteifigkeit des linearen, homogenen und isotropen Hexaederelementes:

$$\underline{\mathbf{K}}_{HEXE-8} = \frac{E}{3a(\nu+1)(1-2\nu)} \underline{\mathbf{K}}(\nu). \quad (2.100)$$

Diese besitzt die Dimension  $3\mathcal{N}_e \times 3\mathcal{N}_e = 24$  und ist in Anhang B explizit ausgeschrieben zu finden. So können in dieser Arbeit folgenden Untersuchungen vergleichende Analysen sowie statistische Auswertungen, der mit Hilfe der in Kapitel 3.4 beschriebenen Methode berechneten effektiven numerischen Steifigkeiten, gegenüber  $\underline{\mathbf{K}}_{HEXE-8}$  durchgeführt werden.

### 2.2.8. Assemblierung der Systemmatrizen

Wird aus  $\mathcal{N}_T$  Finiten Elementen ein Tragwerk gebildet, so spricht man von der Assemblierung der Elemente. Man macht sich dabei die Tatsache zunutze, dass es

sich bei Gl. (2.70) um eine lineare Gleichung handelt und somit die Summe der an den einzelnen Elementen geleisteten virtuellen Arbeiten gleich der am gesamten Tragwerk geleisteten virtuellen Arbeit ist [40].

Dies bedeutet, aus Gl. (2.70) ergibt sich für das Tragwerk:

$$\sum_{e=1}^{\mathcal{N}_T} \underline{\mathbf{P}}_{int,e}^{\mathcal{N}} = \sum_{e=1}^{\mathcal{N}_T} \underline{\mathbf{P}}_{ext,e}^{\mathcal{N}} . \quad (2.101)$$

Um die Summation korrekt durchführen zu können, müssen alle Elementmatrizen die gleichen Bezugssysteme verwenden. Ist diese Voraussetzung erfüllt, d.h. sind die jeweils geteilten Knoten der Elemente in gleiche Koordinatensysteme transformiert, so müssen die Freiheitsgrade der Elemente auf die Freiheitsgrade des Tragwerks abgebildet werden. Dies geschieht mit Hilfe der sog. Koinzidenzmatrix  $\underline{\mathbf{A}}$ , welche die Dimension  $3\mathcal{N}_e \times 3\mathcal{N}_T$  besitzt und als Elemente die Werte Eins oder Null enthält.

$$\underline{\hat{\mathbf{u}}} = \underline{\mathbf{A}} \underline{\hat{\mathbf{u}}}_T \quad (2.102)$$

Mit  $\underline{\hat{\mathbf{u}}}_T$  dem Vektor der Tragwerksknotenverschiebungen. D.h. aus Gl. (2.69) bzw. Gl. (2.75) ergibt sich für das Gleichgewicht von interner und externer virtueller Arbeit eines einzelnen Elements in den Freiheitsgraden des Tragwerks:

$$\delta \underline{\hat{\mathbf{u}}}_T^T \underline{\mathbf{A}}^T \underline{\mathbf{K}} \underline{\mathbf{A}} \underline{\hat{\mathbf{u}}}_T = \delta \underline{\hat{\mathbf{u}}}_T^T \underline{\mathbf{A}} \underline{\hat{\mathbf{f}}}. \quad (2.103)$$

D.h. aus Gl. (2.101) folgt:

$$\sum_{e=1}^{\mathcal{N}_T} \underline{\mathbf{A}}_e^T \underline{\mathbf{K}}_e \underline{\mathbf{A}}_e \underline{\hat{\mathbf{u}}}_T = \underline{\mathbf{K}}_T \underline{\hat{\mathbf{u}}}_T = \underline{\hat{\mathbf{f}}}_T = \sum_{e=1}^{\mathcal{N}_T} \underline{\mathbf{A}}_e \underline{\hat{\mathbf{f}}}_e . \quad (2.104)$$

Mit  $\underline{\mathbf{K}}_T$  der Tragwerkssteifigkeit und  $\underline{\hat{\mathbf{f}}}_T$  dem Vektor der eingepprägten Knotenkräfte des Tragwerks.

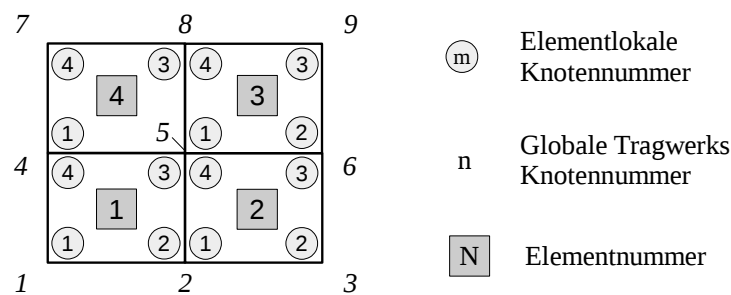


Abb. 2.9: Tragwerk aus vier Elementen



### 2.3.1. Computertomographie

Bei der CT handelt es sich um ein Verfahren, bei dem ein Objekt zwischen einer Röntgenquelle und einem Detektor platziert und die Abschwächung der Strahlintensität durch das Objekt in Form eines projizierten Intensitätsspektrums erfasst wird. Im Falle eines Fächerstrahls handelt es sich dabei um ein Linienspektrum, im Falle eines Kegelstrahles um eine zweidimensionale Projektion des Objektes. Der schematische Aufbau ist zusammen mit einem Flächenspektrum in Abb. 2.10 dargestellt.

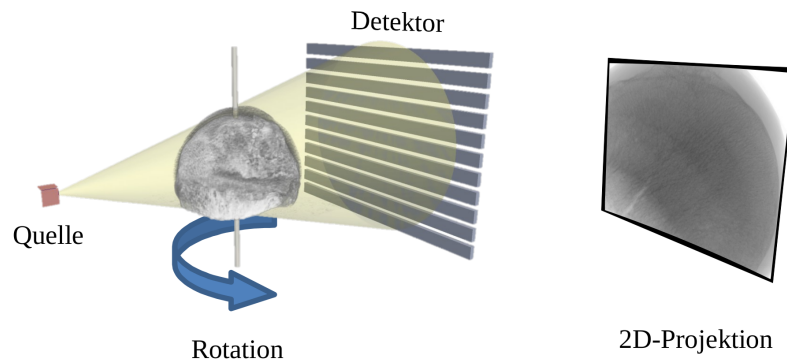


Abb. 2.10: Prinzip der Computertomographie und zweidimensionale Projektion

Wird die Anordnung um das Objekt oder das Objekt in der Anordnung gedreht, so kann eine große Anzahl von Projektionen aus unterschiedlichen Richtungen aufgenommen werden. Mit Hilfe des durch Feldkamp in [41] beschriebenen Algorithmus ist es möglich, auf Basis der Radontransformation aus den zweidimensionalen Projektionen das dreidimensionale Dichtefeld des durchstrahlten Objektes zu rekonstruieren.

### 2.3.2. Mikrofokus Computertomographie

Bei der Mikrofokus-Computertomographie sind die einzelnen Komponenten wie in Abb. 2.10 dargestellt angeordnet. Dies bedeutet, bei diesem Verfahren wird das zu vermessende Objekt rotiert, wohingegen Quelle und Detektor fest stehen.

Die erzielbare Volumenaufösung bestimmt sich im Falle von spongiösem Knochen maßgeblich durch die gewünschte Probengröße. Geht man beispielsweise von der zur Aufnahme des Basisdatensatz verwendeten  $\mu$ -CT-Anlage v|tome|x L 450 des Herstellers phoenix|x-ray<sup>4</sup> aus, so verfügt diese über einen quadratischen Flachdetektor mit  $i_{Dtk} = 2048$  Bildpunkten pro Kante. Geht man weiter von einer gewünschten Auflösung, d.h. einer isotropen Voxelgröße von  $dx = 0,02 \text{ mm}$  aus, so kann über den

<sup>4</sup><http://www.ge-mcs.com/de/phoenix-xray.html>

Strahlensatz die maximale Probengröße ermittelt werden, die in einer einzelnen Aufnahme erfasst werden kann.

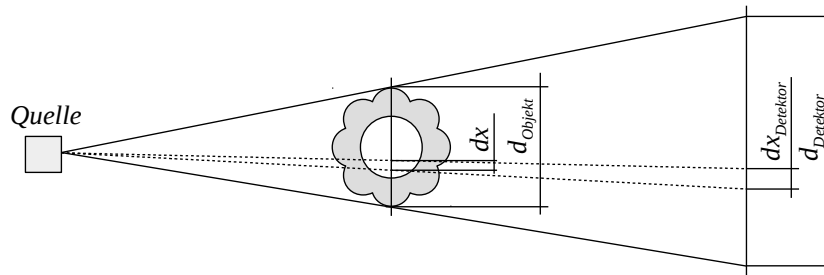


Abb. 2.11: Strahlensatz bei der Projektion in einer  $\mu$ -CT-Anlage

Wie aus Abb. 2.11 zu erkennen ist, ergeben sich bei gegebenem, quadratischem Detektor mit

$$i_{Dtk} = \frac{L_{Dtk}}{dx_{Dtk}} , \quad (2.106)$$

wobei  $i_{Dtk}$  die Anzahl der Bildpunkte in einer Richtung des Detektors,  $dx_{Dtk}$ , der Abstand der Bildpunkte und  $L_{Dtk}$  die Länge einer Seite des Detektors seien, die Verhältnisse

$$\frac{L_{Obj}}{dx} = \frac{L_{Dtk}}{dx_{Dtk}} = i_{Dtk} . \quad (2.107)$$

Daraus folgt die maximale Größe eines zu vermessenden Objektes zu

$$L_{Obj} = i_{Dtk} dx . \quad (2.108)$$

Es gilt anzumerken, dass diese Gleichung nur bedingt gilt, da im Prinzip natürlich auch noch andere Parameter der  $\mu$ -CT-Anlage wie z.B. der Mindestabstand zwischen Quelle und Objekt beachtet werden müssen, die Einfluss auf das Auflösungsvermögen einer  $\mu$ -CT-Anlage besitzen.

### 2.3.3. Klinische Computertomographie

Bei einem modernen klinischen Computertomographen wird der Patient, wie in Abb. 2.12 links<sup>5</sup> zu erkennen auf einer Liege mit konstanter Geschwindigkeit in Körperlängsrichtung durch eine, in Abb. 2.12 rechts<sup>6</sup> zu sehende, rotierende Anordnung

<sup>5</sup>[http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/2/29/Computertomograph\\_Sensation16.JPG/1024px-Computertomograph\\_Sensation16.JPG](http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/2/29/Computertomograph_Sensation16.JPG/1024px-Computertomograph_Sensation16.JPG)

<sup>6</sup>„Ct-internals“. Lizenziert unter Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 über Wikimedia Commons - <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Ct-internals.jpg#mediaviewer/Datei:Ct-internals.jpg>



aus Strahlenquelle und Detektorbogen geschoben. Die Strahlenquelle erzeugt einen kegelförmigen Strahl. Der Detektorbogen kann bis zu 64 sog. Zeilen gleichzeitig erfassen, die jeweils zwischen 600-1300 Datenpunkten enthalten [42].

Bei neueren sog. Dual-Source Geräten werden zwei Anordnungen aus Quelle und Detektorbogen verwendet, die jeweils zwischen 800 und 1500 Projektionen pro Umdrehung erfassen [42], wobei die beiden Quellen mit unterschiedlicher Strahlintensität betrieben werden. Durch dieses Vorgehen kann die Bildqualität gegenüber den Geräten mit nur einer Quelle bei geringerer Strahlendosis erheblich verbessert werden.

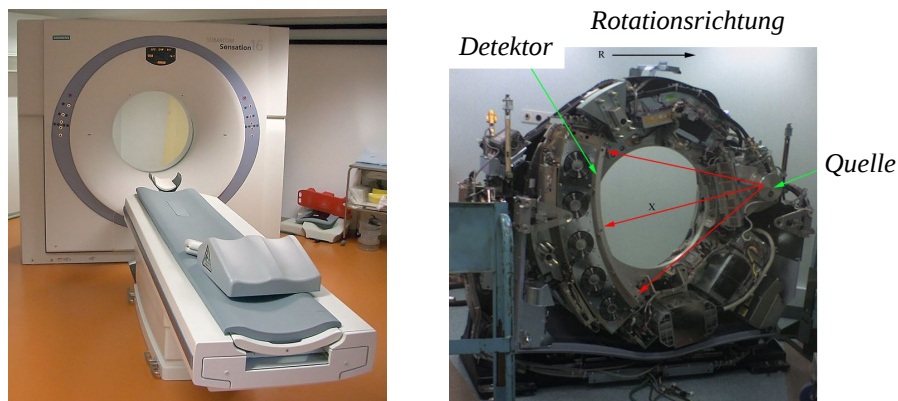


Abb. 2.12: Links:  $k$ -CT-Anlage, Rechts: Komponenten einer  $k$ -CT-Anlage

Da bei der  $k$ -CT die Bildrekonstruktion schichtweise erfolgt, wird durch die Überlagerung der Rotationsbewegung von Quelle und Detektor sowie der Translationsbewegung des Patienten die korrekte Zuordnung und Interpolation der aufgenommenen Daten in die zu rekonstruierende Bildebene wesentlich komplizierter und wichtiger, als bei der  $\mu$ -CT. Eine ausführliche Beschreibung dieses und aller weiteren bei der  $k$ -CT wesentlichen Aspekte ist in [42] zu finden.

Wesentlich zu erwähnen ist an dieser Stelle, dass aus den oben angegebenen Parametern, 800-1500 Projektionen pro Umdrehung und 600-1300 Datenpunkte pro Projektion ein Auflösungsvermögen von ca.  $0,3\text{ mm}$  isotroper Voxelgröße von modernen Dual-Source-Spiral- $k$ -CT-Geräten erreicht werden kann.

#### 2.3.4. Gebietszerlegung

Im weiteren Verlauf der theoretischen Ausführungen sowie der Erläuterung der während der Arbeit durchgeführten Implementierungen wird die Zerlegung eines betrachteten 3-dimensionalen Gebietes bzw. eines Datensatzes in Teilgebiete eine wesentliche Rolle spielen. Da die in dieser Arbeit betrachteten Gebiete aufgrund ihrer

Erzeugung mit Hilfe von CT-Scannern als quaderförmige Datenvolumina mit rechtwinkligen äquidistanten Gittern vorliegen und auch die zu bestimmenden Subvolumina quaderförmig sein sollen, wird auch die Gebietszerlegung (GZ) auf der Basis regulärer Gitter durchgeführt. Die verwendeten Konventionen bei der Knoten-, Elementnummerierung und der Teilgebietenbenennung sowie die Lage der verwendeten Koordinatensysteme wird nachfolgend beschrieben.

Bei den betrachteten Gebieten handelt es sich um diskrete Volumendatensätze auf Voxelbasis. Aus diesem Grunde werden die nachfolgenden Betrachtungen hauptsächlich im Bereich der natürlichen Zahlen durchgeführt, wobei  $\mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\}$  und  $\mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$  gilt.

Das Gesamtvolumen eines diskreten Volumens  $\mathcal{V} \in \mathbb{N}^3$ , welches aus  $I_{\mathcal{V},i} \in \mathbb{N}$  Voxeln pro Koordinatenachse besteht, soll in  $\mathcal{N}_{\mathcal{M}}$  gleich große Teilgebiete  $\mathcal{M} \in \mathbb{N}^3$  mit der physikalischen Zielkantenlänge  $\tilde{L}_{\mathcal{M},i} \in \mathbb{R}$  zerlegt werden. Es gilt:

$$\mathcal{N}_i = \left\lfloor \frac{(I_{\mathcal{V},i} - 2r_i) dx_i}{\tilde{L}_{\mathcal{M},i}} \right\rfloor \quad i \in \{1, 2, 3\}, \quad (2.109)$$

mit  $\lfloor \cdot \rfloor$  der Gaußklammer (Abrundungsfunktion),  $\mathcal{N}_i \in \mathbb{N}$  der Anzahl von Teilungen der jeweiligen Koordinatenachse,  $dx_i$  deren Voxeldimension und  $r_i \in \mathbb{N}$  der Anzahl der Randvoxel bzw. der halben Anzahl der Voxel der Teilgebietenüberschneidungen.

Für die Anzahl der Voxel auf den Kanten von  $\mathcal{M}$  gilt:

$$I_{\mathcal{M},i} = \left\lfloor \frac{\tilde{L}_{\mathcal{M},i}}{dx_i} \right\rfloor. \quad (2.110)$$

Die Anzahl der Randvoxel  $r_i$  wird in Gl. (2.109) explizit mitbetrachtet, da sie z.B. bei der Betrachtung indirekter Randbedingungen oder der Applikation von Algorithmen, welche mit Voxelumgebungen arbeiten, von wesentlicher Bedeutung ist und nur so eine lückenlose Betrachtung von  $\mathcal{V}$  möglich ist.

Es gilt zu beachten, dass, sobald  $I_{\mathcal{M},i}$  aus oben stehender Beziehung mit Hilfe der Zielkantenlänge  $\tilde{L}_{\mathcal{M},i}$  bestimmt wird, vor weiteren Berechnungen zunächst die wahre physikalische Kantenlänge

$$L_{\mathcal{M},i} = I_{\mathcal{M},i} dx_i \quad (2.111)$$

bestimmt werden muss, da aufgrund der Abrundungsfunktion im Allgemeinen  $\tilde{L}_{\mathcal{M},i} \neq I_{\mathcal{M},i} dx_i$  gilt.

Die Gesamtanzahl von Voxeln in einem Teilgebiet ergibt sich zu:

$$\mathcal{N}_{\text{Voxel}, \mathcal{M}} = \prod_{i=1}^3 I_{\mathcal{M}, i}. \quad (2.112)$$

Werden die Teilgebiete linear nummeriert, so gilt für die Position eines Teilgebietes  $\kappa \in \mathbb{N}_0$  in dieser Nummerierung:

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 \cdot \mathcal{N}_1 + \kappa_3 \cdot \mathcal{N}_1 \cdot \mathcal{N}_2 \quad \kappa_i \in [0, 1, \dots, \mathcal{N}_i - 1] , \quad (2.113)$$

mit  $\kappa_i$  der Position des Teilgebiets auf der entsprechenden Koordinatenachse (siehe Abb. 2.13). Die inverse Beziehung zu Gl. (2.113), d.h. die Berechnung der  $\kappa_i$  aus  $\kappa$  bei bekannten  $\mathcal{N}_i$ , ist mit Hilfe der drei folgenden Beziehungen möglich, wobei diese in der angegebenen Reihenfolge auszuwerten sind.

$$\kappa_3 = \left\lfloor \frac{\kappa}{\mathcal{N}_1 \mathcal{N}_2} \right\rfloor \quad (2.114)$$

$$\kappa_2 = \left\lfloor \frac{\kappa - \mathcal{N}_1 \mathcal{N}_2 \kappa_3}{\mathcal{N}_1} \right\rfloor \quad (2.115)$$

$$\kappa_1 = \lfloor \kappa - \mathcal{N}_1 \mathcal{N}_2 \kappa_3 - \mathcal{N}_1 \kappa_2 \rfloor \quad (2.116)$$

Für die Start- und Endpunkte  $\iota_{a,i}, \iota_{e,i} \in [1, 2, \dots, I_{V,i}]$  eines Teilgebiets auf der jeweiligen Koordinatenachse gilt:

$$\iota_{a,i} = I_{\mathcal{M}, i} \kappa_i + r_i + 1 \quad (2.117)$$

$$\iota_{e,i} = I_{\mathcal{M}, i} (\kappa_i + 1) + r_i \quad (2.118)$$

Für die Start- und Endpunkte  $\iota_{a_{ext}, i}, \iota_{e_{ext}, i} \in [1, 2, \dots, I_{V,i}]$  eines erweiterten Teilgebiets, d.h. mit Überschneidung, gilt:

$$\iota_{a_{ext}, i} = \iota_{a,i} - r_i = I_{\mathcal{M}, i} \kappa_i \quad (2.119)$$

$$\iota_{e_{ext}, i} = \iota_{e,i} + r_i = I_{\mathcal{M}, i} (\kappa_i + 1) + 2r_i \quad (2.120)$$

Aus Gl. (2.118) bis Gl. (2.120) ergeben sich die Eckpunkte eines Teilgebietes mit minimalen und maximalen physikalischen Koordinaten:

$$x_{a,i} = \left( \kappa_i I_{\mathcal{M},i} + \frac{r_i}{2} \right) dx_i + x_i^0 \quad (2.121)$$

$$x_{e,i} = \left( (\kappa_i + 1) I_{\mathcal{M},i} + \frac{r_i}{2} \right) dx_i + x_i^0 \quad (2.122)$$

$$x_{a_{ext},i} = \left( \kappa_i I_{\mathcal{M},i} - \frac{r_i}{2} \right) dx_i + x_i^0 \quad (2.123)$$

$$x_{e_{ext},i} = \left( (\kappa_i + 1) I_{\mathcal{M},i} + \frac{3r_i}{2} \right) dx_i + x_i^0 \quad (2.124)$$

mit  $\boldsymbol{x}^0$  dem Ortsvektor des in Abb. 2.13 dargestellten Voxelkoordinatenursprungs von  $\mathcal{V}$ , der in der vorliegenden Arbeit mit  $\mathbf{0}$  zusammenfällt.

Die soeben erläuterten Verhältnisse und eingeführten Bezeichnungen sind für den Fall einer beliebigen Koordinatenebene in Abb. 2.13 zusammengestellt.

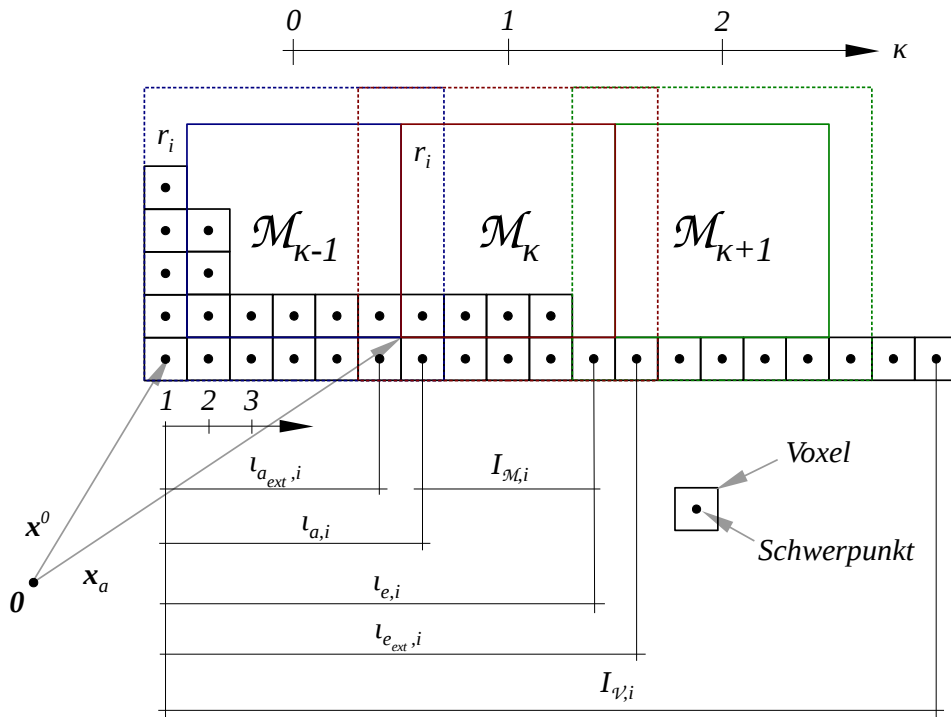


Abb. 2.13: Gebietszerlegung

Es sei angemerkt, dass die z.B. durch Divisionen mit Rest auftretenden Ränder an den oberen Grenzen des Gesamtgebiets vernachlässigt werden können, da es ohne weiteres möglich ist, diese Gebiete bei realen Datensätzen frei von zu betrachtenden Strukturen zu halten.

Im Hinblick auf das in Abschnitt 5.2.1 beschriebene Datenformat wird es des weiteren nötig sein, den zum Teilgebiet  $\kappa$  gehörenden Datenabschnitt mit Start- und Endpunkt innerhalb eines linearisierten Feldes mit Index  $m \in \mathbb{N}$  zu ermitteln. Hierfür gilt:

$$m_a = [\kappa - 1] \cdot \prod_{i=1}^3 I_{\mathcal{M},i} + 1 \quad (2.125)$$

$$m_e = [\kappa] \cdot \prod_{i=1}^3 I_{\mathcal{M},i} \quad (2.126)$$

Die soeben definierten Parameter lassen sich in zwei Gruppen einteilen. Zur ersten Gruppe gehören diejenigen Parameter, welche für alle Teilgebiete gleich sind und nur ein einziges Mal berechnet werden müssen. Diese Parameter werden im folgenden in der so genannten allgemeinen Zerlegung zusammengefasst. Diese enthält:

- die maximale Anzahl von Teilgebieten :  $\mathcal{N}_{\mathcal{M}} \in \mathbb{N}_0$
- die Anzahl von Voxeln pro Achse des zerlegten Gesamtvolumens :  $I_{\mathcal{V},i}$
- die Anzahl von Voxeln in einem Teilgebiet :  $\mathcal{N}_{\text{Voxel},\mathcal{M}}$
- die Anzahl von Voxeln pro Achse eines Teilgebiets :  $I_{\mathcal{M},i}$
- die physikalische Kantenlänge eines Teilgebiets :  $L_{\mathcal{M},i}$
- die Anzahl von Teilgebieten pro Achse des Gesamtvolumens :  $\mathcal{N}_i$
- die Größe eines Voxels :  $dx_i$
- die Anzahl der Randpunkte eines Teilgebiets pro Achse :  $r_i$

Zur zweiten Gruppe gehören die für jedes Teilgebiet unterschiedlichen Parameter. Diese müssen für jedes Teilgebiet speziell bestimmt werden und werden im folgenden in der sogenannten speziellen Zerlegung zusammengefasst. Diese enthält:

- die Nummer des Teilgebiets in der globalen Zählung :  $\kappa$
- die Position des Teilgebiets im Koordinatensystem der globalen Zählung :  $\kappa_i$
- die Startpunkte eines Teilgebiets in Voxelkoordinaten :  $\iota_{a,i}, \iota_{a_{ext},i}$
- die Startpunkte eines Teilgebiets in physikalischen Koordinaten :  
 $x_{a,i}, x_{a_{ext},i}$
- die Endpunkte eines Teilgebiets in Voxelkoordinaten :  $\iota_{e,i}, \iota_{e_{ext},i}$

- die Endpunkte eines Teilgebiets in physikalischen Koordinaten :

$$x_{e,i}, x_{ext,i}$$

Mit der soeben angegebenen Parametergruppierung sind alle im folgenden benötigten Grundlagen der Datengewinnung und Datenverarbeitung angegeben. Zum Abschluss dieses Kapitels werden im nächsten Abschnitt die Grundlagen der multivariaten Statistik angegeben, die im zur Darstellung der Ergebnisse in Kapitel 6 verwendet werden.

## 2.4. Grundlagen der Multivariaten Statistik

Die wesentliche Aufgabe dieser Arbeit ist die Berechnung von kontinuumsmechanischen anisotropen Materialdaten für eine große Anzahl von Proben. Um die so erzeugten Materialverteilungen, welche stückweise konstante Funktionen des  $\mathbb{R}^3$  mit bis zu 21 Variablen darstellen, einer Analyse zugänglich zu machen, sind visuelle Methoden nicht ausreichend.

Zur Aufdeckung von Abhängigkeiten der einzelnen Variablen untereinander sowie von strukturbeschreibenden Parametern werden Methoden der multivariaten Statistik verwendet, deren Grundlagen in diesem Abschnitt dargestellt werden. Insbesondere wird auf die Parametrisierung Gauß'scher Mischverteilungen, das strukturgebende Verfahren der Diskriminanzanalyse sowie das dimensionsreduzierende Verfahren der Hauptkomponentenanalyse eingegangen.

### 2.4.1. Parametrisierung von Mischverteilungen

Ist  $\underline{Z} \in \mathbb{R}^q$  eine stetige  $q$ -dimensionale Zufallsvariable, die in ihren Ausprägungen  $\underline{z}$  der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$\Psi(\underline{z} | \underline{\theta}) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_G} p_k \psi_k(\underline{z} | \underline{\theta}) \quad (2.127)$$

folgt, und gilt für die Komponentenwahrscheinlichkeiten  $p_k > 0$  sowie  $\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_G} p_k = 1$  und für die Komponentendichtefunktionen  $\psi_k(\cdot) \geq 0$  sowie  $\int_{\mathbb{R}} \psi_k(\underline{z} | \underline{\theta}) dz = 1$ , mit  $\underline{\theta}$  dem Vektor bzw. der Matrix der Parameter der Dichtefunktionen, so sagt man  $\underline{Z}$  folgt einer Mischverteilung aus  $\mathcal{N}_G$  Komponenten [43]. Bildlich gesprochen formen die Komponenten Gruppen bzw. Cluster im  $q$ -dimensionalen Raum der Zufallsvariablen. Diese Gruppen können sich dabei teilweise überdecken oder aber auch disjunkt sein.

Seien nun  $\underline{z} = (\underline{z}_1, \dots, \underline{z}_{\mathcal{N}_B})$   $\mathcal{N}_B$  Beobachtungen, die jeweils einer der  $\mathcal{N}_G$  Komponenten entstammen, so gibt

$$\mathcal{L}(\underline{\theta} | \underline{\gamma}) = \prod_{i=1}^{\mathcal{N}_B} \psi_{\gamma_i}(\underline{z}_i | \underline{\theta}) \quad (2.128)$$

die Likelihood  $\mathcal{L}$  an, mit der die  $\mathcal{N}_B$  Beobachtungen durch die Mischverteilung  $\Psi(\underline{z} | \underline{\theta})$  klassifiziert werden. Dabei ist  $\underline{\gamma} = (\gamma_1, \dots, \gamma_{\mathcal{N}_B})^T$  der Vektor der Indizes, welcher den Wert  $\gamma_i = k$  annimmt, falls  $\underline{z}_i$  der  $k$ -ten Komponente angehört.

Folgen die Komponenten nun multivariaten Normalverteilungen, d.h. es gilt:

$$\underline{\theta} = (\underline{\mu}, \underline{\Sigma}) \quad (2.129)$$

bzw.

$$\psi(\underline{z} | \underline{\mu}, \underline{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{q}{2}} \det(\underline{\Sigma})^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{1}{2}(\underline{z}-\underline{\mu})^T \underline{\Sigma}^{-1}(\underline{z}-\underline{\mu})} \quad (2.130)$$

wobei  $\underline{\Sigma}$  die positiv definite Kovarianzmatrix,  $\underline{\mu}$  der Vektor der Mittelwerte und  $q$  die Dimension der Zufallsvariablen ist, so nimmt Gl. (2.128) die folgende Form an:

$$\mathcal{L}(\underline{\theta} | \underline{\gamma}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{q}{2}}} \prod_{k=1}^{\mathcal{N}_G} \prod_{i \in \mathfrak{E}_k} \frac{1}{\det(\underline{\Sigma}_k)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\underline{z}_i - \underline{\mu}_k)^T \underline{\Sigma}_k^{-1}(\underline{z}_i - \underline{\mu}_k)\right) \quad (2.131)$$

mit  $\mathfrak{E}_k = \{i : \gamma_i = k\}$ . D.h. die  $\mathfrak{E}_k$  sind Vektoren der Länge  $\mathcal{N}_{B,k}$ , die alle  $i$  enthalten für die gilt  $\gamma_i = k$ , mit  $\mathcal{N}_{B,k}$  der Anzahl von Elementen in Gruppe  $k$ . Mit anderen Worten enthalten die  $\mathfrak{E}_k$  jeweils die Indizes der Beobachtungen, die der Gruppe  $k$  entstammen.

Dies bedeutet, die  $\mathcal{N}_G$  Komponenten stellen nun Gruppen bzw. Cluster im  $q$ -dimensionalen Raum dar, deren Schwerpunkte durch die Mittelwerte  $\underline{\mu}_k$  angegeben werden und deren Isovarianzflächen durch Ellipsoide beschrieben werden [44]. Die Gestalt, d.h. die Verhältnisse der Halbachsen, das Volumen, welches durch die Längen der Halbachsen bestimmt wird, sowie die Ausrichtung der Halbachsen dieser Ellipsoide, wird dabei durch die Kovarianzmatrizen  $\underline{\Sigma}_k$  der einzelnen Komponenten beschrieben.

Ersetzt man nun den Mittelwert  $\mu_k$  durch den Mittelwert der Stichprobe, d.h. den Schätzer, der die Likelihood maximiert

$$\bar{\underline{z}}_k = \frac{1}{\mathcal{N}_{B,k}} \sum_{i \in \mathfrak{E}_k} \underline{z}_i \quad (2.132)$$

so folgt:

$$\mathcal{L}(\underline{\boldsymbol{\theta}}|\underline{\boldsymbol{\gamma}}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{q}{2}}} \prod_{k=1}^{\mathcal{N}_G} \prod_{i \in \mathfrak{E}_k} \frac{1}{\det(\underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)^T \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k^{-1} (\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)\right). \quad (2.133)$$

Aus oben stehender Gleichung ergibt sich die log-Likelihood zu:

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}(\underline{\boldsymbol{\theta}}|\underline{\boldsymbol{\gamma}}) &= -\frac{q}{2} \log(2\pi) + \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_G} \sum_{i \in \mathfrak{E}_k} \log\left(\frac{1}{\det(\underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k)^{\frac{1}{2}}}\right) + \left(-\frac{1}{2}(\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)^T \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k^{-1} (\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)\right) \\ \mathfrak{L}(\underline{\boldsymbol{\theta}}|\underline{\boldsymbol{\gamma}}) &= -\frac{q}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_G} \mathcal{N}_B \log(\det(\underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k)) + \sum_{i \in \mathfrak{E}_k} (\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)^T \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k^{-1} (\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k) \end{aligned} \quad (2.134)$$

mit  $\mathfrak{L}(\underline{\boldsymbol{\theta}}|\underline{\boldsymbol{\gamma}}) = \log(\mathcal{L}(\underline{\boldsymbol{\theta}}|\underline{\boldsymbol{\gamma}}))$ .

Mit der Substitution

$$\underline{\mathbf{c}}_{ik}^T = (\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)^T \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k^{-1}, \quad (2.135)$$

wobei es zu beachten gilt, dass  $\underline{\mathbf{c}}_{ik}$  einen Vektor des  $\mathbb{R}^q$  darstellt, ergibt sich für die innere Summe in Gl. (2.134):

$$\mathfrak{L}(\underline{\boldsymbol{\theta}}|\underline{\boldsymbol{\gamma}}) = -\frac{q}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_G} \mathcal{N}_B \log(\det(\underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k)) + \sum_{i \in \mathfrak{E}_k} \underline{\mathbf{c}}_{ik}^T (\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k).$$

Mit der Identität Gl. (A.11) folgt:

$$\mathfrak{L}(\underline{\boldsymbol{\theta}}|\underline{\boldsymbol{\gamma}}) = -\frac{q}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_G} \mathcal{N}_B \log(\det(\underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k)) + \sum_{i \in \mathfrak{E}_k} \text{Sp}\left((\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k) \underline{\mathbf{c}}_{ik}^T\right).$$

Rücksubstitution von Gl. (2.135) liefert schließlich:

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}(\underline{\boldsymbol{\theta}}|\underline{\boldsymbol{\gamma}}) &= -\frac{q}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_G} \mathcal{N}_B \log(\det(\underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k)) \\ &\quad + \text{Sp}\left(\sum_{i \in \mathfrak{E}_k} ((\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)(\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)^T) \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k^{-1}\right). \end{aligned}$$

Bzw.:

$$\mathfrak{L}(\underline{\boldsymbol{\theta}}|\underline{\boldsymbol{\gamma}}) = -\frac{q}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_G} \mathcal{N}_B \log(\det(\underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k)) + \text{Sp}(\underline{\mathbf{W}}_k \underline{\boldsymbol{\Sigma}}_k^{-1}), \quad (2.136)$$



mit

$$\mathbf{W}_k = \sum_{i \in E_k} ((\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)(\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}}_k)^T) , \quad (2.137)$$

der sogenannten „Sample Cross-Product Matrix“ einer Gruppe.

In Gl. (2.136) ist jetzt zu erkennen, dass die Likelihood, mit der die zu Beginn des Abschnitts vorausgesetzten  $\mathcal{N}_B$  Beobachtungen durch eine Gauß'sche Mischverteilung beschrieben werden, im wesentlichen durch die Sample Cross-Product Matrizen  $\mathbf{W}_k$  und die Kovarianzmatrizen  $\underline{\Sigma}_k$  der beteiligten Gruppen beeinflusst wird.

Da sich die  $\mathbf{W}_k$  durch die Beobachtungen bestimmen, kann die Maximierung der Likelihood in Gl. (2.136) nur durch die statistische Modellierung, d.h. die Größe, Lage und Gestalt der Komponenten, d.h. durch die Modifikation von  $\underline{\Sigma}_k$  durchgeführt werden. In zahlreichen Arbeiten werden aus diesem Grunde unterschiedliche Vorschläge gemacht, um die Kovarianzmatrizen der einzelnen Komponenten auf unterschiedliche Weise zu parametrisieren bzw. aneinander zu koppeln und so Kriterien für die Maximierung der Likelihood abzuleiten. Eine Übersicht über diese Arbeiten und die in ihnen enthaltenen Ansätze geben Farley und Raftery in [44] und [45]. In diesen Arbeiten beschreiben sie außerdem den aus Sicht des Autors wesentlichen Schritt, die unterschiedlichen Ansätze zu verallgemeinern und so die hier dargestellte Vorgehensweise abzuleiten.

Um eine allgemeine Parametrisierung der Kovarianzmatrizen zu erreichen, wird zunächst eine Eigenwertzerlegung von  $\underline{\Sigma}_k$  durchgeführt, so dass die Kovarianzmatrix die folgende Form annimmt:

$$\underline{\Sigma}_k = \mathbf{R}_k \mathbf{\Lambda}_k \mathbf{R}_k^T , \quad (2.138)$$

mit  $\mathbf{\Lambda}_k$  einer Diagonalmatrix, welche die Eigenwerte von  $\underline{\Sigma}_k$  in der Größe nach absteigender Reihenfolge enthält und  $\mathbf{R}_k$  der Matrix der zu den Eigenwerten gehörenden Eigenvektoren von  $\underline{\Sigma}_k$ .

In dieser Darstellung beschreibt  $\mathbf{R}_k$  die Hauptrichtungen bzw. die Ausrichtung der einzelnen Gruppen, und  $\mathbf{\Lambda}_k$  bestimmt deren Ausdehnung entlang der Hauptrichtungen. Die Beschreibung der Ausdehnung lässt sich weiter parametrisieren, indem  $\mathbf{\Lambda}_k$  folgendermaßen aufgespalten wird:

$$\mathbf{\Lambda}_k = \lambda_k \left( \frac{1}{\lambda_k} \mathbf{\Lambda}_k \right) = \lambda_k \mathbf{B}_k , \quad (2.139)$$

mit  $\lambda_k$  dem größten Eigenwert von  $\underline{\Sigma}_k$  und  $\mathbf{B}_k = \text{diag}(\beta_{1k}, \dots, \beta_{pk})$  einer Diagonalmatrix, für deren Einträge gilt  $1 \geq \beta_{2k} \geq \dots \geq \beta_{pk}$ . Insgesamt ergibt sich für die

Parametrisierung von  $\underline{\Sigma}_k$ :

$$\underline{\Sigma}_k = \lambda_k \underline{\mathcal{R}}_k \underline{\mathcal{B}}_k \underline{\mathcal{R}}_k^T. \quad (2.140)$$

In dieser Darstellung beschreibt  $\underline{\mathcal{R}}_k$  weiterhin die Ausrichtung der Gruppe,  $\underline{\mathcal{B}}_k$  deren Gestalt, d.h. die Längenverhältnisse der Hauptachsen, und  $\lambda_k$  beschreibt das Volumen der Gruppe im  $p$ -dimensionalen Raum.

Ausgehend von dieser allgemeinsten Parametrisierung der Gruppen, die in [46] als „VVV“ bezeichnet wird<sup>7</sup>, können nun Vereinfachungen durchgeführt werden, indem einer oder mehrere der Parameter Ausrichtung, Gestalt und Volumen für alle Gruppen konstant gehalten werden oder wahlweise  $\underline{\mathcal{B}}_k$  oder  $\underline{\mathcal{R}}_k$  gleich der Einheitsmatrix gesetzt werden.

Eine ausführliche Beschreibung der möglichen Kombinationen der angegebenen Maßnahmen zu Parametrisierungen von  $\underline{\Sigma}_k$  sowie der Kriterien, die sich daraus für die Maximierung der Likelihood ergeben, ist wiederum in den bereits oben erwähnten Arbeiten von Farley und Raftery zu finden. An dieser Stelle wird nur die in [46] als „EEV“ bezeichnete Parametrisierung explizit angegeben, da sie in dieser Arbeit Anwendung findet.

Die Bezeichnung der Parametrisierung leitet sich von „**E**qual Volume, **E**qual Shape and **V**arying Orientation“ ab und zeigt an, dass die modellierten Komponenten jeweils gleiches Volumen und gleiche Gestalt besitzen, jedoch unterschiedlich orientiert sein können. Explizit ausgedrückt hängen somit  $\lambda$  und  $\underline{\mathcal{B}}$  nicht mehr von  $k$  ab, und es ergibt sich

$$\underline{\Sigma}_k = \lambda \underline{\mathcal{R}}_k \underline{\mathcal{B}} \underline{\mathcal{R}}_k^T \quad (2.141)$$

für die Parametrisierung von  $\underline{\Sigma}_k$

## 2.4.2. Diskriminanzanalyse

Die Diskriminanzanalyse ist ein multivariates Analyseverfahren, das in dieser Arbeit zur sog. „supervised classification“ eingesetzt wird. Dies bedeutet, dass mit Hilfe einer gewissen Anzahl von Beobachtungen mit bekannter Gruppierung ein statistisches Modell, das sog. Diskriminanzkriterium, erstellt wird, welches es erlaubt, den Gruppen weitere Beobachtungen zuzuordnen.

Zur Berechnung des Diskriminanzkriteriums existiert eine Vielzahl von Methoden. In dieser Arbeit wird die Diskriminanzanalyse mit Hilfe des R-Pakets `mclust`[46] durchgeführt. In diesem Softwarepaket sind die von [45] vorgeschlagenen und in [44] in Bezug auf Anwendung und Implementierung beschriebenen Techniken zur Model-

---

<sup>7</sup>VVV: Varying Volume, Varying Shape and Varying Orientation

lierung der Gruppen mit Hilfe Gauß'scher Mischverteilungen implementiert.

Dies bedeutet, die Gruppen eines multivariaten Datensatzes werden aufgrund von Beobachtungen mit bekannter Klassifizierung durch eine Gauß'schen Mischverteilung nach dem im vorangegangenen Abschnitt erläuterten Ansatz modelliert, und anschließend werden neu hinzukommende Beobachtungen den Gruppen mit Hilfe der ermittelten statistischen Modellierung zugeordnet.

### 2.4.3. Hauptkomponentenanalyse

Bei der Hauptkomponentenanalyse handelt es sich um ein Verfahren, das zur Dimensionsreduktion eines multivariaten Datensatzes verwendet werden kann.

Dabei wird durch eine Hauptachsentransformation in ein Koordinatensystem gewechselt, in dem die Streuungen bzw. Varianzen der transformierten Merkmale von den anderen, entlang der Hauptrichtungen, entkoppelt sind. Es kann so analysiert werden, welche der Hauptrichtungen zu den Varianzen welcher Merkmale einen wesentlichen Beitrag leisten bzw. welche Merkmale mit welchen im Originalsystem wie stark korrelieren. Zusätzlich kann festgestellt werden, wie viel der Gesamtvarianz des Datensatzes durch welche Hauptrichtung beschrieben wird, wobei die Gesamtvarianz eines multivariaten Datensatzes  $s_{mv}^2$  durch

$$s_{mv}^2 = \text{sp}(\underline{\Sigma}) \quad (2.142)$$

d.h. durch die Spur der Kovarianzmatrix ermittelt wird.

Die wesentlichen Gleichungen und Schritte des Verfahrens werden im folgenden anhand eines einfachen zweidimensionalen Beispiels erläutert. Für eine weiterführende Beschreibung sei auf [47] verwiesen.

Gegeben ist eine Datenreihe, deren  $m$  Beobachtungen jeweils  $n$  Merkmale aufweisen oder mit anderen Worten eine Punktwolke bestehend aus  $m$  Vektoren des  $\mathbb{R}^n$ . Wird von diesen nach Gl. (A.18) die Kovarianzmatrix  $\underline{\Sigma}$  berechnet so gilt:

$$\underline{\Sigma} \underline{\mathbf{R}} = \underline{\mathbf{R}} \underline{\mathbf{\Lambda}}, \quad (2.143)$$

mit  $\underline{\mathbf{\Lambda}} = \text{diag}(\lambda_i)$  der Diagonalmatrix der Eigenwerte von  $\underline{\Sigma}$ , wobei  $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$  gelte, und  $\underline{\mathbf{R}}$  der orthogonalen Matrix der zu den  $\lambda_i$  gehörenden normierten Eigenvektoren von  $\underline{\Sigma}$ .

Die Kovarianzmatrix beschreibt die Varianz bzw. Streuung der Daten entlang der  $n$  Koordinatenachsen. Dies bedeutet,  $\underline{\mathbf{R}}$  beschreibt eine Drehung des Koordinaten-

systems in der Art, dass nach Ordnung der Eigenwerte und Eigenvektoren die erste Richtung des gedrehten Koordinatensystems mit der Richtung der maximalen Varianz bzw. Streuung der Daten zusammenfällt. Der Sachverhalt ist in Abb. 2.14 für zwei Dimensionen exemplarisch dargestellt.

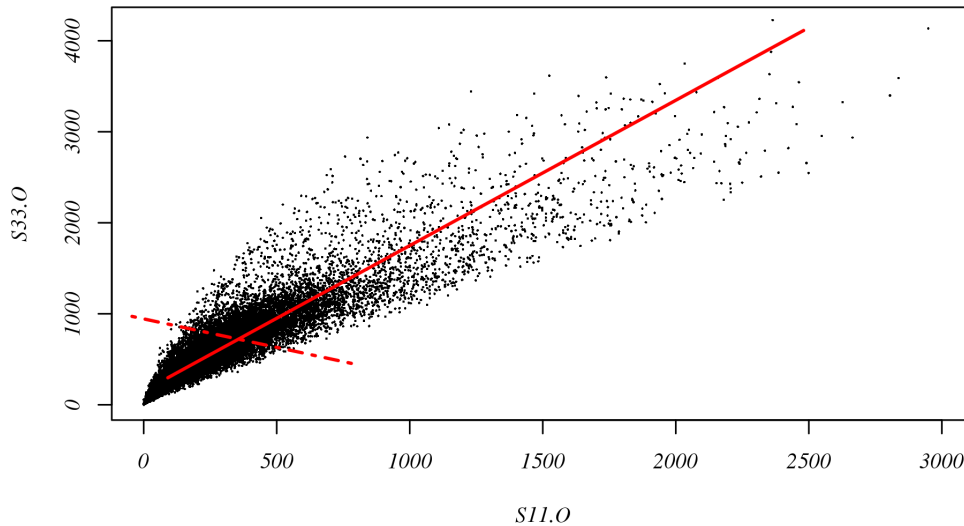


Abb. 2.14: Demonstration einer Hauptkomponentenanalyse in zwei Dimensionen. Der Schnittpunkt der beiden Hauptachsen stellt den Schwerpunkt der Punktwolke dar, wobei die durchgezogene Linie die erste und die gestrichelte Linie die zweite Hauptrichtung markiert. Die Hauptrichtungen stehen in der Darstellung aufgrund der unterschiedlichen Skalierungen der Koordinatenachsen nicht senkrecht aufeinander.

Es ist zu erkennen, dass die Varianz der Daten entlang der als durchgezogene Linie dargestellten ersten Hauptrichtung wesentlich größer ist als entlang der zweiten Hauptrichtung. Berechnet man für den dargestellten Datensatz die Kovarianzmatrix, so ergibt sich:

$$\underline{\Sigma}_{Demo_{2D}} = \begin{bmatrix} 97008,71 & 134151,4 \\ 134151,36 & 227395,3 \end{bmatrix}.$$

Mit der Matrix der Eigenwerte  $\underline{\Lambda}_{Demo_{2D}}$  und der Matrix der Eigenvektoren  $\underline{\mathcal{R}}_{Demo_{2D}}$

$$\underline{\Lambda}_{Demo_{2D}} = \begin{bmatrix} 311374,17 & 0 \\ 0 & 13049,32 \end{bmatrix} ; \quad \underline{\mathcal{R}}_{Demo_{2D}} = \begin{bmatrix} 0,5305240 & -0,8476699 \\ 0,8476699 & 0,5305240 \end{bmatrix}.$$

Aus Matrix  $\underline{\mathcal{R}}_{Demo_{2D}}$  ist abzulesen, dass die erste Hauptrichtung das erste Merkmal

um ca. 50% stärker beeinflusst als das zweite Merkmal. Weiter ist abzulesen, dass entlang der zweiten Hauptrichtung eine negative Korrelation zwischen den beiden Merkmalen besteht.

Anhand der Eigenwerte kann nun der Anteil der einzelnen Hauptkomponenten an der Gesamtvarianz des Datensatzes berechnet werden. Es ergibt sich :

$$s_{frac,i}^2 = \frac{\lambda_i}{\text{sp}(\underline{\Sigma})}. \quad (2.144)$$

Mit  $\lambda_i$  den Diagonalwerten von  $\underline{\Lambda}$  bzw. den Eigenwerten der Kovarianzmatrix. Im Falle des vorgestellten Beispiels ergibt sich:

$$s_{frac,1}^2 = 0,9598 \quad s_{frac,2}^2 = 0,04002. \quad (2.145)$$

Dies bedeutet, dass sich mit Hilfe der ersten Hauptkomponente bereits 95,98% der Gesamtvarianz des Datensatzes wiedergeben lassen.

Die Dimensionsreduktion des Verfahrens erfolgt nach der vorangegangenen Analyse der Anteile der Gesamtvarianz durch die Projektion der Originaldaten auf die ersten  $k$  Hauptrichtungen, die in Summe den größten Anteil der Gesamtvarianz beschreiben. Wie viel Prozent der Varianz den größten Anteil der Gesamtvarianz ausmacht, liegt im Ermessen des Betrachters, jedoch gibt [48] 90% als übliche Daumenregel an.

$$\hat{X}_{mn} \mathcal{R}_{nk} = \hat{\mathcal{X}}_{mk} \quad (2.146)$$

Mit  $\hat{X}_{mn}$  der Datenreihe mit  $m$  Beobachtungen und  $n$  Merkmalen,  $\mathcal{R}_{nk}$  der  $n \times k$  Matrix der  $k$  ersten Eigenvektoren sowie  $\hat{\mathcal{X}}_{mk}$  der auf den Unterraum der  $k$  ersten Eigenvektoren projizierten Datenreihe. Deren Beobachtungen werden nun nicht mehr durch  $n$  Merkmale, sondern durch  $k$  sogenannte Komponenten beschrieben.

Will man wieder zurück in den Raum der  $n$  Merkmale wechseln, so muss die projizierte Datenreihe  $\hat{\mathcal{X}}_{mk}$  mit der transponierten Matrix der  $k$  ersten Eigenvektoren nachmultipliziert werden.

$$\hat{\mathcal{X}}_{mk} \mathcal{R}_{nk}^T = \hat{X}_{mn,red} \quad (2.147)$$

Man erhält so wieder eine Datenreihe mit  $n$  Merkmalen, die jedoch nicht mehr der Originaldatenreihe entspricht, sondern um die Gesamtvarianz reduziert ist, welche die vernachlässigten Hauptkomponenten repräsentieren. Dies ist für das angegebene Beispiel in Abb. 2.15 dargestellt.

Es ist zu erkennen, dass der in schwarz dargestellte, reduzierte Datensatz keine Streu-

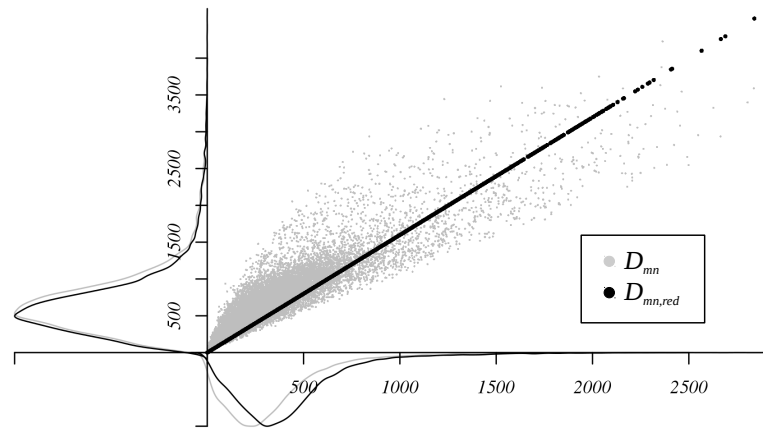


Abb. 2.15: Parameterreduktion mit Hilfe einer Hauptkomponentenanalyse in zwei Dimensionen. Unter der x-Achse und links neben der y-Achse sind die Kerndichteplots der Originaldaten in grau und der reduzierten Daten in schwarz, jeweils projiziert auf die entsprechende Achse, dargestellt.

ung mehr in Richtung der zweiten, vernachlässigten Hauptkomponente aufweist. Dagegen bleibt die Varianz der Daten bezüglich des originalen ersten und zweiten Merkmals nach der Rücktransformation, d.h. der Reduktion des Datensatzes, nahezu unverändert. Dies verdeutlichen die unterhalb der x-Achse und links neben der y-Achse dargestellten Kerndichteplots. Es lassen sich nur geringfügige Verschiebungen erkennen, wobei diese bezüglich des auf der x-Achse dargestellten Merkmals größer ausfallen, als bezüglich des auf der y-Achse dargestellten Merkmals. Diese Dominanz des auf der y-Achse dargestellten Merkmals ist durch seinen höheren Wertebereich sowie durch seine gegenüber dem auf der x-Achse dargestellten Merkmal, wesentlich größere Varianz zu erklären.

Um diese Dominanz eines Merkmals zu vermeiden, ist es nötig, die Daten zu normieren, so dass alle Merkmale möglichst gut eine Normalverteilung approximieren. Dies wird durch die Verwendung der Korrelationsmatrix anstelle der Kovarianzmatrix erreicht. Die Bildung der Korrelationsmatrix mit Hilfe von Pearson's oder Kendall's Korrelationskoeffizienten ist dabei äquivalent. Inwiefern sich die Verwendung der Korrelationsmatrix im Gegensatz zur Kovarianzmatrix auf die Hauptkomponentenanalysen und die damit erzielten Ergebnisse dieser Arbeit auswirkt, wird in Abschnitt 6.2.3.3 detailliert betrachtet.

---

### 3. Direkter mechanischer Ansatz zur Berechnung von elastischen Eigenschaften mikrostrukturierter Volumina

In diesem Abschnitt wird das Vorgehen zur Bestimmung der sogenannten effektiven Steifigkeit eines mikrostrukturierten Volumenelementes (MVE) beschrieben. Der Ansatz des Vorgehens wird ohne Beschränkung der Allgemeinheit in Bezug auf die Gestalt und innere Struktur des betrachteten Volumens formuliert, um der durch das biologische Wachstum individuell entstehenden und absolut beliebig geformten inneren Struktur von trabekulärem Knochenmaterial Rechnung zu tragen.

#### 3.1. Das mikrostrukturierte Volumenelement

Es sei  $V \subseteq \mathbb{R}^3$  ein Volumen, welches in seinem Inneren eine beliebig geformte und verteilte Mikrostruktur (auch Material- oder Strukturphase genannt)

$$S \equiv \bigcup_{i=1}^n S_i, \quad (3.1)$$

sowie durch  $S$  gebildete und somit ebenfalls beliebig geformte und verteilte Einschlüsse (auch Kavitäten genannt)

$$K \equiv \bigcup_{j=1}^m K_j, \quad (3.2)$$

wie in Abb. 3.1 dargestellt, aufweist.

Alle Größen, welche die Materialphase innerhalb des Volumens betreffen, werden nachfolgend mit dem Index  $S$  versehen, während alle Größen, welche die Einschlüsse betreffen, mit dem Index  $K$  versehen werden.

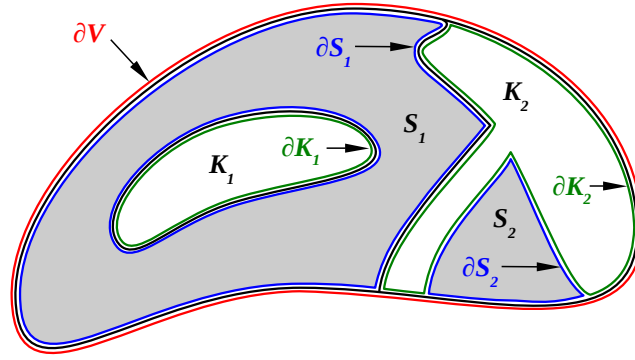


Abb. 3.1: Definitionen der Phasen und Phasenoberflächen am Volumenelement

Zwischen den Volumen  $V$ ,  $S$  und  $K$  besteht der Zusammenhang:

$$V = S \cup K . \quad (3.3)$$

Zwischen der äußeren Oberfläche des Volumens  $\partial V$ , der Oberfläche der Struktur

$$\partial S \equiv \bigcup_{i=1}^n \partial S_i , \quad (3.4)$$

sowie der Oberfläche der Einschlüsse

$$\partial K \equiv \bigcup_{j=1}^m \partial K_j \quad (3.5)$$

gilt der Zusammenhang:

$$\partial S = \partial V + \begin{cases} \partial K : & \partial K \neq \partial V \\ 0 : & \partial K = \partial V \end{cases} . \quad (3.6)$$

Um Zusammenhänge zwischen den Integralen über die soeben definierten Oberflächen herstellen zu können, werden die zugehörigen Normalenvektoren, wie in Abb. 3.2 dargestellt, definiert.

Der Normalenvektor  $\mathbf{n}_S$  der Oberfläche der Materialphase  $\partial S$  wird vom Inneren der Materialphase in Richtung der Einschlüsse positiv gezählt. Der Normalenvektor der Oberfläche der Einschlüsse  $\partial K$  wird vom Inneren der Kavitäten zur Materialphase positiv gezählt und ist dementsprechend  $-\mathbf{n}_S$ .

Weiter ist zu erkennen, dass der Normalenvektor von  $\partial V$  immer nach außen gerichtet ist, egal ob die Berandung von  $V$  durch die Oberfläche der Materialphase oder die (gedachte) Oberfläche der Einschlüsse gebildet wird. Der Normalenvektor von  $\partial V$



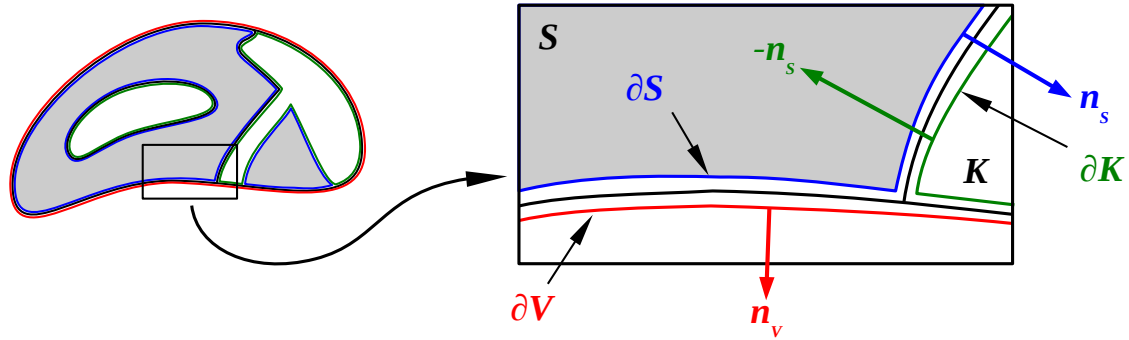


Abb. 3.2: Definition der Normalenvektoren auf den Phasenoberflächen

wird im weiteren Verlauf mit  $\mathbf{n}_V$  bezeichnet, um die Oberfläche des Gesamtvolumens als Ganzes behandeln zu können.

## 3.2. Mittlere Eigenschaften des mikrostrukturierten Volumenelements

Im folgenden Abschnitt werden die wesentlichen, an einem MVE angreifenden und zur Bestimmung der mittleren Eigenschaften des MVE benötigten Größen angegeben.

### 3.2.1. Mittlerer Spannungstensor

Ist  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  das über  $V$  Riemann-integrierbare Tensorfeld des lokalen Spannungstensors, so nennen wir

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) dV \quad (3.7)$$

den mittleren Spannungstensor über dem Volumen  $V$ . Eine wichtige Eigenschaft des mittleren Spannungstensor ist, wie im folgenden nach [49] gezeigt wird, dass er vollständig durch das Feld der aufgeprägten Randspannungen bestimmt ist.

Für das Feld des lokalen Spannungstensors kann man durch Einsetzen von Gl. (A.25), der Identität zwischen dem Einheitstensor und dem Gradienten des Ortsvektors, schreiben:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{I}^{(2)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= (\nabla \otimes \mathbf{x})^T \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{aligned} \quad (3.8)$$

In Koordinatenschreibweise folgt:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{il} &= (\nabla_j x_i \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j) \cdot \sigma_{kl} \mathbf{e}^k \otimes \mathbf{e}^l \\
 &= \nabla_j x_i \sigma_{kl} g^{jk} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^l \\
 &= x_i \nabla_j \sigma_l^j \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^l .
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Nach Gl. (A.31) ist die Verjüngung von einem Tensor erster Stufe mit einem Tensor zweiter Stufe kommutativ, falls der Tensor zweiter Stufe symmetrisch ist. Gleiches gilt für zwei symmetrische Tensoren zweiter Stufe. Mit Gl. (2.17) folgt aus Gl. (3.8) somit:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \otimes \mathbf{x}) .$$

Bzw. in Koordinatenschreibweise

$$\begin{aligned}
 \sigma_{il} &= \sigma_{ij} \nabla_k x_l g^{jk} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^l \\
 &= \sigma_i^k \nabla_k x_l \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^l
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Wiederum mit Gl. (A.31) folgt:

$$\boldsymbol{\sigma} = \nabla_k \sigma_i^k x_l \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^l \tag{3.11a}$$

$$= \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{x}) \tag{3.11b}$$

Mit der erneuten Ausnutzung der Symmetrie von  $\boldsymbol{\sigma}$  Gl. (2.17) folgt aus Gl. (3.11a):

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\sigma} &= \{\nabla_k \sigma_i^k x_l \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^l\}^T \\
 &= x_i \nabla_k \sigma_l^k \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^l .
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

Im Vergleich mit Gl. (3.9) folgt insgesamt:

$$\boldsymbol{\sigma} = (\nabla \otimes \mathbf{x})^T \cdot \boldsymbol{\sigma} = \{\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{x})\}^T , \tag{3.13}$$

womit im integralen Falle der Satz von Gauß Anwendung finden kann:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) dV &= \frac{1}{|V|} \int_V \{\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{x})\}^T dV \\
 \bar{\boldsymbol{\sigma}} &= \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} \{\mathbf{n}_V \cdot (\boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{x})\}^T dS
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Mit Gl. (2.19) folgt die Abhängigkeit des mittleren Spannungstensors vom aufgeprägten Kraftflussvektor:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} \mathbf{x} \otimes \mathbf{t}^0 dS, \quad (3.15)$$

und

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} x_i t_j^0 dS. \quad (3.16)$$

Zerlegt man  $x_i t_j^0$  nun in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{|V|} \int_{\partial V} \underbrace{\frac{1}{2} [x_i t_j^0 + x_j t_i^0]}_{sym.} + \underbrace{\frac{1}{2} [x_i t_j^0 - x_j t_i^0]}_{antisym.} dS, \quad (3.17)$$

und betrachtet den antisymmetrischen Anteil, so lässt sich dieser mit Hilfe der Levi-Civita Symbole in die Form

$$\frac{1}{2|V|} \int_{\partial V} x_i t_j^0 - x_j t_i^0 dS = \frac{1}{2|V|} \int_{\partial V} e_{ijk} e^{klm} x_l t_m^0 dS \quad (3.18)$$

bringen. Hierbei ist im Vergleich mit Gl. (2.21) zu erkennen, dass es sich beim Ausdruck  $e^{klm} x_l t_m^0$  um das durch  $t_m^0$  erzeugte Moment um den Ursprung handelt. Man kann somit weiter vereinfachen und erhält:

$$\frac{1}{2|V|} \int_{\partial V} x_i t_j^0 - x_j t_i^0 dS = \frac{1}{2|V|} e_{ijk} \int_{\partial V} e^{klm} x_l t_m^0 dS = \frac{1}{2|V|} e_{ijk} M_{res,t^0}^k. \quad (3.19)$$

Dies bedeutet im Falle eines statisch ausgeglichenen Kraftflussvektors auf  $\partial V$  gilt  $\bar{\sigma}_{ij} = \bar{\sigma}_{ji}$ , da in einem solchen Fall das resultierende Moment  $\mathcal{T}_{res,t^0} = \mathbf{0}$  verschwindet und somit der antisymmetrische Anteil der Zerlegung von  $\bar{\sigma}_{ij}$  in Gl. (3.17) verschwindet.

### 3.2.2. Mittlerer Dehnungstensor

Ist  $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$  das über  $V$  Riemann-integrierbare Tensorfeld des lokalen Dehnungstensors, so nennen wir

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) dV \quad (3.20)$$

den mittleren Dehnungstensor über dem Volumen  $V$ . Eine wichtige Eigenschaft des mittleren Dehnungstensors, analog zum Falle des mittleren Spannungstensors aus dem vorangegangenen Abschnitt, ist, wie im folgenden ebenfalls nach [49] gezeigt wird, dass er vollständig durch das Feld der aufgeprägten Randverschiebungen bestimmt ist.

Ersetzt man den lokalen Dehnungstensor nun durch den linearen Anteil aus Gl. (2.8)

$$\frac{1}{|V|} \int_V \varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) dV = \frac{1}{2|V|} \int_V \frac{\partial u_i}{\partial X^j} + \frac{\partial u_j}{\partial X^i} dV ,$$

so lässt sich dies mit Hilfe des Satzes von Gauß in ein Oberflächenintegral überführen

$$\frac{1}{2|V|} \int_V \frac{\partial u_i}{\partial X^j} + \frac{\partial u_j}{\partial X^i} dV = \frac{1}{2|V|} \int_{\partial V} u_i n_j + u_j n_i dS ,$$

mit  $\mathbf{n}$  dem nach außen gerichteten Einheitsnormalenvektor auf der Oberfläche von  $V$ . Insgesamt folgt

$$\frac{1}{|V|} \int_V \varepsilon_{ij} dV = \frac{1}{2|V|} \int_S u_i n_j + u_j n_i dS = \bar{\varepsilon}_{ij} . \quad (3.21)$$

Da die Anwendung des Satzes von Gauß bei dieser Ableitung nicht auf Anhieb gerechtfertigt erscheint, wird dieser Punkt zunächst an einem Beispiel noch genauer ausgeführt.

Für  $i = 1$  und  $j = 2$  folgt aus Gl. (2.8):

$$\varepsilon_{12} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial u_1}{\partial X^2} + \frac{\partial u_2}{\partial X^1} \right] .$$

Durch Einführung von  $\mathbf{v} = v^i = [u_2 \ u_1 \ 0]^t$  ergibt sich:

$$\varepsilon_{12} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial v^1}{\partial X^1} + \frac{\partial v^2}{\partial X^2} + \frac{\partial v^3}{\partial X^3} \right] ,$$

bzw.

$$\varepsilon_{12} = \frac{1}{2} [\nabla_i \cdot v^i] .$$

Bildet man den integralen Mittelwert und wendet den Satz von Gauß an, folgt aus dem Einsetzen der Koordinaten von  $\mathbf{v}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2|V|} \int_V \nabla_i \cdot v^i dV &= \frac{1}{2|V|} \int_{\partial V} n_i \cdot v^i dS \\ \frac{1}{2|V|} \int_V \frac{\partial u_2}{\partial X^1} + \frac{\partial u_1}{\partial X^2} + \frac{\partial 0}{\partial X^3} dV &= \frac{1}{2|V|} \int_{\partial V} n_1 u_2 + n_2 u_1 + n_3 0 dS \\ \int_V \frac{\partial u_2}{\partial X^1} + \frac{\partial u_1}{\partial X^2} dV &= \int_{\partial V} n_1 u_2 + n_2 u_1 dS \end{aligned} \quad (3.22)$$

Mit der soeben demonstrierten Technik lassen sich alle Koordinaten des Dehnungstensors nachweisen. Im Falle der Normaldehnungen werden einfach zwei Komponenten von  $\mathbf{v}$  zu null gesetzt, um zum gewünschten Ergebnis zu gelangen.

### 3.2.3. Der lokale Strukturtensor

Um den mittleren Dehnungstensor wieder zurück in das Feld der lokalen Dehnungstensenoren zu überführen, wird der sogenannte „lokale Strukturtensor“ [50] oder auch „strain localization tensor“ [51] eingeführt. Es handelt sich hierbei um ein Tensorfeld der Stufe 4, welches ebenfalls die Anforderung der Riemann-Integrierbarkeit in  $V$  erfüllen soll:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j &= M_{ijkl} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \mathbf{e}^k \otimes \mathbf{e}^l : \bar{\varepsilon}^{mn} \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n \\ &= M_{ijkl} \bar{\varepsilon}^{mn} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j (\mathbf{e}^k \cdot \mathbf{e}_m) (\mathbf{e}^l \cdot \mathbf{e}_n) \\ &= M_{ijkl} \bar{\varepsilon}^{mn} g_m^k g_n^l \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \\ \varepsilon_{ij} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j &= M_{ijkl} \bar{\varepsilon}^{kl} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \\ \varepsilon_{ij} &= M_{ijkl} \bar{\varepsilon}^{kl} \end{aligned}$$

und

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} . \quad (3.23)$$

Eine wichtige Eigenschaft des lokalen Strukturensors ist die untergeordnete Symmetrie innerhalb des ersten und zweiten Indexpaares, welche die Anzahl seiner unabhängigen Koordinaten von 81 auf 36 reduziert.

$$M_{ijkl} = M_{jikl} = M_{jilk} = M_{ijlk} \quad (3.24)$$

Diese Symmetrie lässt sich direkt aus der Definitionsgleichung Gl. (3.23) unter Berücksichtigung der Symmetrie der beteiligten Dehnungstensoren ableiten. Übergeordnete Symmetrie, die eine Vertauschung des ersten und zweiten Indexpaares zulassen würde, kann jedoch im allgemeinen nicht angenommen werden.

### 3.2.4. Mittlerer Steifigkeitstensor

Zur Ableitung des mittleren Steifigkeitstensors eines MVE beginnen wir nach [50] mit dem verallgemeinerten Hooke'schen Gesetz auf der Mikrostrukturebene

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.25)$$

und bilden auf beiden Seiten von Gl. (3.25) den integralen Mittelwert.

$$\frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) dV = \frac{1}{|V|} \int_V \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) dV \quad (3.26)$$

Einsetzen von Gl. (3.23) und Gl. (3.7) liefert:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) dV &= \frac{1}{|V|} \int_V \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \mathbf{M}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} dV \\ \bar{\boldsymbol{\sigma}} &= \frac{1}{|V|} \int_V \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \mathbf{M}(\mathbf{x}) dV : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{\bar{\mathbf{C}}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (3.28)$$

woraus

$$\bar{\mathbf{C}} = \frac{1}{|V|} \int_V \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \mathbf{M}(\mathbf{x}) dV \quad (3.29)$$

zu erkennen ist. Die oben stehende Gleichung stellt die Definitionsgleichung für den effektiven Steifigkeitstensor eines MVE dar, aus der dieser direkt berechnet werden kann, falls die lokalen Steifigkeitsverhältnisse sowie das Feld des lokalen Struktur-tensors bekannt sind.

Im vorangegangenen Abschnitt wurde die untergeordnete Symmetrie des lokalen Struktur-tensors innerhalb des ersten und zweiten Indexpaares angesprochen. Wird diese ausgenutzt, so lässt sich Gl. (3.23) als Matrixgleichung folgender Form anschrei-

ben:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{1111} & M_{1122} & M_{1133} & 2M_{1112} & 2M_{1113} & 2M_{1123} \\ M_{2211} & M_{2222} & M_{2233} & 2M_{2212} & 2M_{2213} & 2M_{2223} \\ M_{3311} & M_{3322} & M_{3333} & 2M_{3312} & 2M_{3313} & 2M_{3323} \\ M_{1211} & M_{1222} & M_{1233} & 2M_{1212} & 2M_{1213} & 2M_{1223} \\ M_{1311} & M_{1322} & M_{1333} & 2M_{1312} & 2M_{1313} & 2M_{1323} \\ M_{2311} & M_{2322} & M_{2333} & 2M_{2312} & 2M_{2313} & 2M_{2323} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\varepsilon}_{11} \\ \bar{\varepsilon}_{22} \\ \bar{\varepsilon}_{33} \\ \bar{\varepsilon}_{12} \\ \bar{\varepsilon}_{13} \\ \bar{\varepsilon}_{23} \end{bmatrix}. \quad (3.30)$$

Mit den hier nochmals angeschriebenen Indexübergängen aus Gl. (2.36)

$$11 = 1, \quad 22 = 2, \quad 33 = 3, \quad 12 = 4, \quad 13 = 5, \quad 23 = 6$$

ergibt sich:

$$\varepsilon_I = \sum_{J=1}^6 M_{IJ} \bar{\varepsilon}_J \quad I = [1, \dots, 6]. \quad (3.31)$$

Wird ein MVE nun  $k = 6$  linear unabhängigen Dehnungszuständen unterworfen, so lässt sich Gl. (3.31) folgendermaßen erweitern:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{111} & \varepsilon_{112} & \varepsilon_{113} & \varepsilon_{114} & \varepsilon_{115} & \varepsilon_{116} \\ \varepsilon_{221} & \varepsilon_{222} & \varepsilon_{223} & \varepsilon_{224} & \varepsilon_{225} & \varepsilon_{226} \\ \varepsilon_{331} & \varepsilon_{332} & \varepsilon_{333} & \varepsilon_{334} & \varepsilon_{335} & \varepsilon_{336} \\ \varepsilon_{121} & \varepsilon_{122} & \varepsilon_{123} & \varepsilon_{124} & \varepsilon_{125} & \varepsilon_{126} \\ \varepsilon_{131} & \varepsilon_{132} & \varepsilon_{133} & \varepsilon_{134} & \varepsilon_{135} & \varepsilon_{136} \\ \varepsilon_{231} & \varepsilon_{232} & \varepsilon_{233} & \varepsilon_{234} & \varepsilon_{235} & \varepsilon_{236} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{1111} & M_{1122} & M_{1133} & 2M_{1112} & 2M_{1113} & 2M_{1123} \\ M_{2211} & M_{2222} & M_{2233} & 2M_{2212} & 2M_{2213} & 2M_{2223} \\ M_{3311} & M_{3322} & M_{3333} & 2M_{3312} & 2M_{3313} & 2M_{3323} \\ M_{1211} & M_{1222} & M_{1233} & 2M_{1212} & 2M_{1213} & 2M_{1223} \\ M_{1311} & M_{1322} & M_{1333} & 2M_{1312} & 2M_{1313} & 2M_{1323} \\ M_{2311} & M_{2322} & M_{2333} & 2M_{2312} & 2M_{2313} & 2M_{2323} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\varepsilon}_{111} & \bar{\varepsilon}_{112} & \bar{\varepsilon}_{113} & \bar{\varepsilon}_{114} & \bar{\varepsilon}_{115} & \bar{\varepsilon}_{116} \\ \bar{\varepsilon}_{221} & \bar{\varepsilon}_{222} & \bar{\varepsilon}_{223} & \bar{\varepsilon}_{224} & \bar{\varepsilon}_{225} & \bar{\varepsilon}_{226} \\ \bar{\varepsilon}_{331} & \bar{\varepsilon}_{332} & \bar{\varepsilon}_{333} & \bar{\varepsilon}_{334} & \bar{\varepsilon}_{335} & \bar{\varepsilon}_{336} \\ \bar{\varepsilon}_{121} & \bar{\varepsilon}_{122} & \bar{\varepsilon}_{123} & \bar{\varepsilon}_{124} & \bar{\varepsilon}_{125} & \bar{\varepsilon}_{126} \\ \bar{\varepsilon}_{131} & \bar{\varepsilon}_{132} & \bar{\varepsilon}_{133} & \bar{\varepsilon}_{134} & \bar{\varepsilon}_{135} & \bar{\varepsilon}_{136} \\ \bar{\varepsilon}_{231} & \bar{\varepsilon}_{232} & \bar{\varepsilon}_{233} & \bar{\varepsilon}_{234} & \bar{\varepsilon}_{235} & \bar{\varepsilon}_{236} \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

bzw. in Indexnotation:

$$\varepsilon_{ik} = \sum_{j=1}^6 M_{ij} \bar{\varepsilon}_{jk} \quad i, k = [1, \dots, 6], \quad (3.33)$$

mit  $\bar{\varepsilon}_{jk}$  der Matrix der aufgeprägten Dehnungszustände.

Ebenso lässt sich Gl. (3.29) durch Ausnutzung der Symmetrien von Elastizitätstensor und lokalem Strukturtensor in Matrizenform anschreiben:

$$\bar{C}_{ik} = \frac{1}{|V|} \int_V \sum_{j=1}^6 C_{ij} M_{jk} dV \quad i, k = [1, \dots, 6], \quad (3.34)$$

woraus sich durch Einsetzen von Gl. (3.33) die effektive Steifigkeitsmatrix  $\bar{C}$  bzw. der effektive Steifigkeitstensor  $\bar{C}$  in Abhängigkeit des lokalen Dehnungsfeldes sowie der aufgeprägten mittleren Dehnung über dem MVE berechnen lässt. Es folgt:

$$\bar{C}_{ik} = \frac{1}{|V|} \sum_{l=1}^6 \left[ \int_V \sum_{j=1}^6 [C_{ij} \varepsilon_{jl}] dV \bar{\varepsilon}_{lk}^{-1} \right] \quad i, k = [1, \dots, 6], \quad (3.35)$$

mit  $\bar{\varepsilon}_{lk}^{-1}$  der inversen Matrix der aufgeprägten Dehnungszustände.

### 3.3. Probleme der analytischen Methode

Aus Gl. (3.35) ist zu erkennen, dass der effektive Steifigkeitstensor des MVE von den aufgeprägten Dehnungszuständen  $\bar{\varepsilon}^{-1}$  abhängt, was bei näherer Betrachtung unbefriedigend ist.

Wie Hill in seiner Arbeit [1] ausführt, kann nicht nur die effektive Steifigkeit aus vorgegebenen mittleren Dehnungszuständen berechnet werden, sondern es kann auch eine effektive Nachgiebigkeitsmatrix aus aufgeprägten mittleren Spannungszuständen ermittelt werden. Eine sehr ausführliche Betrachtung der Abhängigkeit der effektiven Materialkonstanten von den auf das MVE aufgeprägten Randbedingungen, aus welchen sie berechnet wurden, findet man in [49].

Da die erzeugten Materialdaten zur kontinuumsmechanischen Beschreibung beliebiger Volumendeformationen herangezogen werden sollen, ist eine solche Abhängigkeit entweder nur näherungsweise zu erfüllen oder würde aber in einem iterativen Verfahren enden, bei welchem die Materialdaten zunächst näherungsweise vorgeschrieben würden und dann für die jeweiligen Dehnungszustände der einzelnen Volumenelemente berechnet werden müssten.



Ein weiteres Problem ist, dass nur spezielle Kombinationen von linear unabhängigen Dehnungszuständen einen symmetrischen Materialtensor erzeugen würden, da im allgemeinen Fall nicht sicher gestellt werden kann, dass das Matrizenprodukt in Gl. (3.35)

$$\begin{aligned}\bar{C}_{ik} &= \frac{1}{|V|} \sum_{l=1}^6 \left[ \int_V \sum_{j=1}^6 [C_{ij}\varepsilon_{jl}] dV \bar{\varepsilon}_{lk}^{-1} \right] \\ \bar{C}_{ik} &= \sum_{l=1}^6 \tilde{\sigma}_{il} \bar{\varepsilon}_{lk}^{-1}\end{aligned}\quad (3.36)$$

ein symmetrisches Ergebnis  $A_{ik} = A_{ki}$  produzieren würde.

Zur Demonstration der erwähnten Problematiken wird das in Abb. 3.3 dargestellte quadratische Testelement der Kantenlänge 1, welches zur Hälfte mit der isotropen, homogenen Materialphase  $S$  und zur anderen Hälfte mit der Kavität  $K$  gefüllt sei, analysiert.

Um die Ausführungen zu vereinfachen, werden die Betrachtungen nur in 2 Dimensionen, d.h. am ebenen Spannungszustand durchgeführt. Dies bedeutet, dass von den in Gl. (2.18) angegebenen Gleichgewichtsbedingungen im Inneren eines Volumenelementes nur die zwei für die  $xy$ -Ebene relevanten Beziehungen verwendet werden.

$$\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_1} = 0 \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial x_2} = 0 \quad (3.38)$$

Das lineare Elastizitätsgesetz Gl. (2.23b) nimmt im zweidimensionalen Fall folgende Form an

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{12} \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

und von den kinematischen Beziehungen sind ebenfalls nur noch drei relevant:

$$\varepsilon_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \quad ; \quad \varepsilon_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \quad ; \quad \varepsilon_{12} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) . \quad (3.40)$$

### 3.3.1. Verschiebungsrandbedingungen

Zur Berechnung der effektiven zweidimensionalen Steifigkeitsmatrix wird das Element den drei in Abb. 3.3 dargestellten, elementaren Dehnungszuständen

- Normaldehnung in 11-Richtung
- Normaldehnung in 22-Richtung
- Schubdehnung in 12-Richtung

unterworfen.

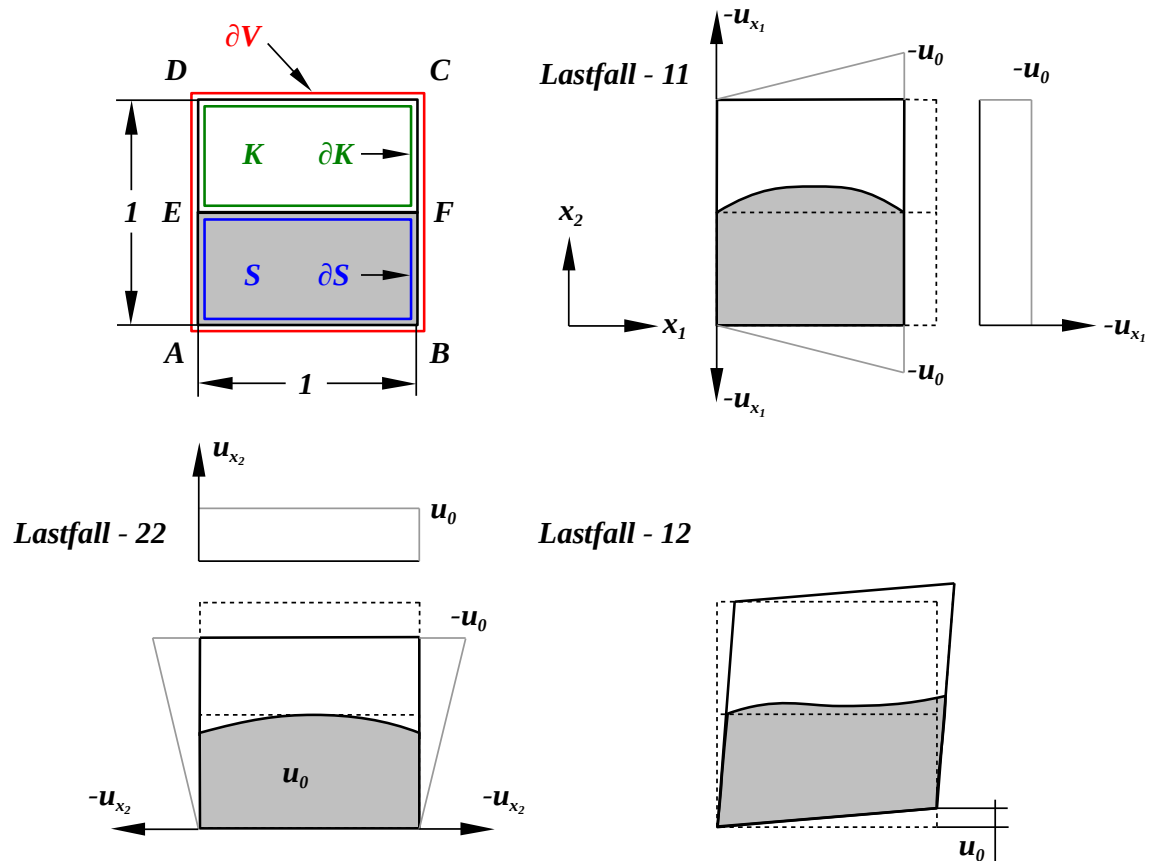


Abb. 3.3: Zweidimensionales Testelement. Mit durchgehenden schwarzen Linien sind die aus den Lastfällen resultierenden Deformationsmoden eingezeichnet. Die Ausgangskonfiguration ist mit schwarzen gestrichelten Linien eingezeichnet. Die grauen Linien zeigen den Verlauf der angeschriebenen Verschiebung über der jeweiligen Kante an.

Nach Gl. (3.20) berechnet sich der mittlere Dehnungstensor bzw. der mittlere Dehnungsvektor als integraler Mittelwert der lokalen Größen über  $V$ . D.h. es gilt:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{|V|} \int_V \varepsilon(\mathbf{x}) dV = \frac{1}{|V|} \left[ \int_S \varepsilon(\mathbf{x}) dS + \int_K \varepsilon(\mathbf{x}) dK \right], \quad (3.41)$$

wobei im zweidimensionalen Fall für die Indizes  $i, j = 1, 2$  gilt. Nach Einsetzen von Gl. (3.21) folgt:

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2|V|} \left[ \int_{\partial S} u_i n_j + u_j n_i dA - \int_{\partial K} u_i n_j + u_j n_i dA \right]. \quad (3.42)$$

Für die Berandungen von  $S$  und  $K$  gilt:

$$\partial S = \overline{AB} + \overline{BF} + \overline{FE} + \overline{EA} \quad (3.43a)$$

$$\partial K = \overline{EF} + \overline{FC} + \overline{CD} + \overline{DE} \quad (3.43b)$$

Die Integration über die Ränder kann mit der Abkürzung  $u_i \nu_j + u_j \nu_i = \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu}$  somit wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{2|V|} \left[ \int_A^B \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_B^F \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_F^E \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_E^A \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \right. \\ &\quad \left. \int_E^F \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_F^C \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_C^D \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_D^E \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA \right] \\ &= \frac{1}{2|V|} \left[ \int_A^B \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_B^F \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_F^C \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \right. \\ &\quad \left. \int_C^D \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_D^E \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA + \int_E^A \mathbf{u} \odot \boldsymbol{\nu} dA \right] \\ \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{2|V|} \left[ \int_{\partial V} \mathbf{u} \odot \mathbf{n} dA \right] \end{aligned}$$

Werden nun die  $\mathcal{N}_\varepsilon = 3$ , zur Bestimmung der effektiven zweidimensionalen Steifigkeit des Testvolumens, benötigten mittleren Dehnungszustände als homogene Dehnungszustände der Form

$$\mathbf{u}_1(\mathbf{x}) = [u_0 x_1, 0]^T \quad ; \quad \mathbf{u}_2(\mathbf{x}) = [0, u_0 x_2]^T \quad ; \quad \mathbf{u}_3(\mathbf{x}) = [u_0 x_2, u_0 x_1]^T \quad (3.44)$$

gewählt, so ergeben sich daraus folgende Randbedingungen und Normalenvektoren auf den Abschnitten von  $\partial V$ :

$$\overline{AB} : \begin{bmatrix} u_1(x_1, 0) \\ u_2(x_1, 0) \end{bmatrix}_i = \begin{bmatrix} u_0 x_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_0 x_1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{n} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (3.45a)$$

$$\overline{BC} : \begin{bmatrix} u_1(1, x_2) \\ u_2(1, x_2) \end{bmatrix}_i = \begin{bmatrix} u_0 & 0 & u_0 x_2 \\ 0 & u_0 x_2 & u_0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{n} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.45b)$$

$$\overline{CD} : \begin{bmatrix} u_1(x_1, 1) \\ u_2(x_1, 1) \end{bmatrix}_i = \begin{bmatrix} u_0 x_1 & 0 & u_0 \\ 0 & u_0 & u_0 x_1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{n} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.45c)$$

$$\overline{DA} : \begin{bmatrix} u_1(0, x_2) \\ u_2(0, x_2) \end{bmatrix}_i = \begin{bmatrix} 0 & 0 & u_0 x_2 \\ 0 & u_0 x_2 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{n} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.45d)$$

wobei  $i \in [1, 2, 3]$  den Index der Dehnungszustände angibt. Mit der abschnittswisen Integration der Randbedingungen kann Gl. (3.21) explizit über der Umfangskoordinate  $x$ , ausgewertet werden.

Es ergibt sich für  $i = 1$ :

$$\bar{\varepsilon}_{11} = \frac{1}{2|V|} \left[ \int_0^1 u_0 + u_0 dx \right] = \frac{u_0}{|V|}$$

$$\bar{\varepsilon}_{22} = 0$$

$$\bar{\varepsilon}_{12} = \frac{1}{2|V|} \left[ \int_0^1 -u_0 x_1 dx + \int_0^1 u_0 x_1 dx \right] = 0$$

$i = 2$ :

$$\bar{\varepsilon}_{11} = 0$$

$$\bar{\varepsilon}_{22} = \frac{1}{2|V|} \left[ \int_0^1 u_0 + u_0 dx \right] = \frac{u_0}{|V|}$$

$$\bar{\varepsilon}_{12} = \frac{1}{2|V|} \left[ \int_0^1 u_0 x_2 dx + \int_0^1 -u_0 x_2 dx \right] = 0$$

$i = 3$ :

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}_{11} &= \frac{1}{2|V|} \left[ \int_0^1 u_0 x_2 dx + \int_0^1 -u_0 x_2 dx \right] = 0 \\ \bar{\varepsilon}_{22} &= \frac{1}{2|V|} \left[ \int_0^1 -u_0 x_1 dx + \int_0^1 u_0 x_1 dx \right] = 0 \\ \bar{\varepsilon}_{12} &= \frac{1}{2|V|} \left[ \int_0^1 u_0 dx + \int_0^1 u_0 dx \right] = \frac{u_0}{|V|}\end{aligned}$$

Dies bedeutet, es ergibt sich, mit den als Spaltenvektoren geschriebenen zweidimensionalen Dehnungstensoren, die Matrix der mittleren Dehnungszustände über  $V$ :

$$\bar{\underline{\varepsilon}}_{2D} = \frac{u_0}{|V|} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.46)$$

Wird nun die Matrix der entsprechenden Spannungszustände ermittelt, kann die effektive Steifigkeit von  $V$  berechnet werden. Im Falle eines homogenen Elementes, welches nur aus einem Material besteht, würde sich die folgende Matrix der mittleren Spannungszustände ergeben:

$$\bar{\underline{\sigma}}_{2D, hom} = \underline{\mathbf{C}}_{2D} \bar{\underline{\varepsilon}}_{2D, hom} \quad (3.47)$$

$$\bar{\underline{\sigma}}_{2D, hom} = \frac{u_0 E}{|V| (1 - \nu^2)} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

Für das inhomogene Element folgt aus Gl. (3.7) mit Gl. (2.23b):

$$\bar{\underline{\sigma}} = \int_S \underline{\sigma} dV + \int_K \underline{\sigma} dV \quad (3.49)$$

$$= \int_S \underline{\sigma} dV + \int_K \mathbf{C}_K \underline{\varepsilon}_K dV \quad (3.50)$$

$$= \int_S \underline{\sigma} dV + \int_K \mathbf{0} \underline{\varepsilon}_K dV \quad (3.51)$$

$$\bar{\underline{\sigma}} = \int_S \underline{\sigma} dV = \bar{\underline{\sigma}}_S \quad (3.52)$$

Um das Spannungsfeld über  $S$  zu ermitteln, stehen mit den Gleichgewichtsbedingungen im zweidimensionalen Fall 2 Gleichungen für 3 Spannungskomponenten zur Verfügung. Die dritte Gleichung kann durch Einsetzen des Elastizitätsgesetzes Gl. (3.39) in die Kompatibilitätsbedingung Gl. (2.13) gewonnen werden. Es folgt:

$$2(1 + \nu) \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \sigma_{11}}{\partial x_2^2} - \nu \frac{\partial^2 \sigma_{22}}{\partial x_2^2} - \nu \frac{\partial^2 \sigma_{11}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{22}}{\partial x_1^2} \right). \quad (3.53)$$

Die Gleichung kann weiter vereinfacht werden, indem man die Gleichgewichtsbedingungen in  $x$ - und  $y$ -Richtung entsprechend differenziert

$$\frac{\partial^2 \sigma_{11}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{12}}{\partial x_1^2} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial^2 \sigma_{22}}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{12}}{\partial x_2^2} = 0, \quad (3.54)$$

addiert

$$2 \frac{\partial^2 \sigma_{12}}{\partial x_1^2} = - \frac{\partial^2 \sigma_{11}}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \sigma_{22}}{\partial x_2^2} \quad (3.55)$$

und in Gl. (3.53) eingesetzt werden. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \sigma_{11}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{11}}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{22}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{22}}{\partial x_2^2} &= 0 \\ \Delta (\sigma_{11} + \sigma_{22}) &= 0 \end{aligned} \quad (3.56)$$

mit  $\Delta = \left( \frac{\partial}{\partial x_1^2} + \frac{\partial}{\partial x_2^2} \right)$  dem ebenen Laplace Operator, womit für die drei Spannungskomponenten des zweidimensionalen Systems drei Gleichungen zur Verfügung stehen. Nachdem die Lösung dieses gekoppelten Differentialgleichungssystems nur in einigen wenigen speziellen Fällen analytisch möglich ist (vgl. [33]), wird das angegebene Beispiel numerisch mit Hilfe der FEM behandelt. Als maximale Verschiebung wurde  $u_0 = 10^{-3}$  gewählt und es wurde ausschliesslich die Materialphase modelliert.

Es ergeben sich die in Abb. 3.4 und Abb. 3.5 gezeigten von Mises Vergleichsspannungen. Diese sind auf die jeweiligen Ergebnisse des homogenen Problems (Gl. (3.48)) normiert. Dies bedeutet, in der Abbildung sind die prozentualen Abweichungen der von Mises Vergleichsspannung gegenüber dem homogenen Problem dargestellt.

Es ist zu erkennen, dass der über  $V$  homogene Dehnungszustand in  $S$  durch die freie Berandung gegenüber der Kavität  $K$  nun keinen homogenen Spannungszustand mehr induziert. Die fehlende Zwängung der oberen Berandung  $\overline{EF}$  der Materialphase hat bei den Normaldehnungslastfällen zur Folge, dass das Material eher entlastet wird, was sich durch die fast durchgehend geringere Vergleichsspannung äußert. Der umgekehrte Effekt ist beim Schublastfall zu beobachten, bei dem die fehlende Zwängung

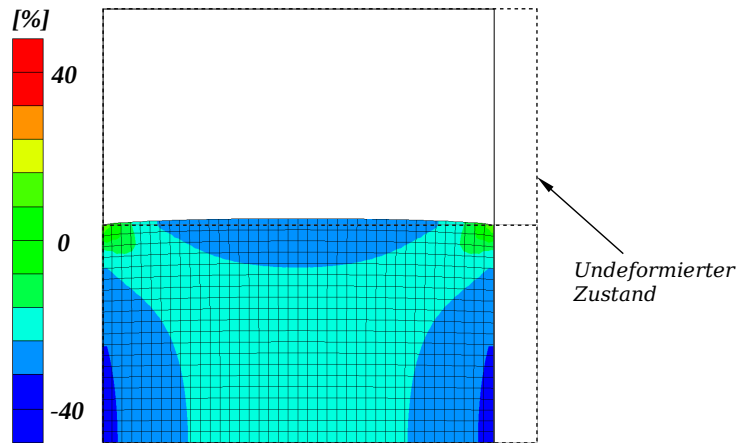


Abb. 3.4: 11-Spannungslösung des zweidimensionalen Testelements

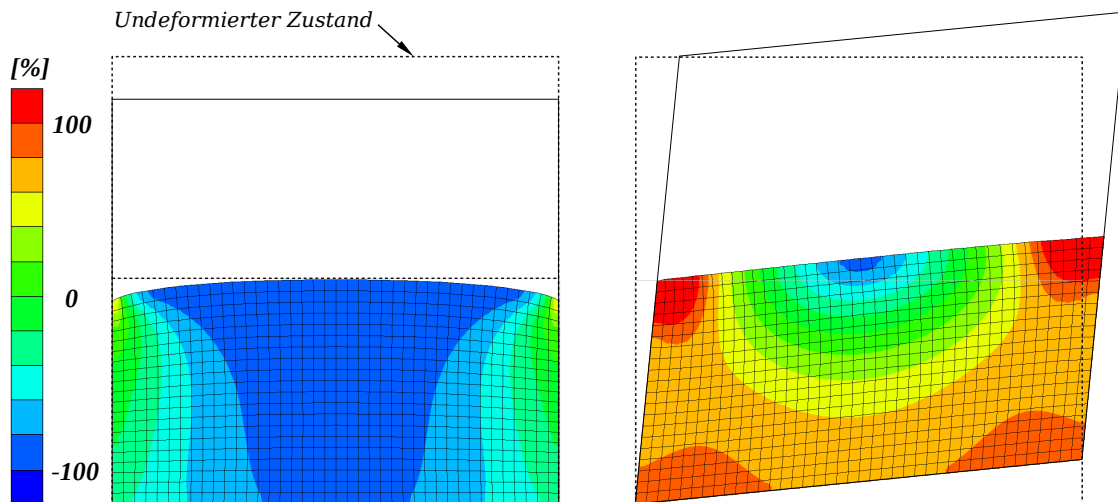


Abb. 3.5: 22- und 12-Spannungslösung des zweidimensionalen Testelements

offensichtlich eine erhöhte Belastung im größeren Teil der Materialphase hervorruft.

Die errechnete Matrix der mittleren Dehnungszustände für die Materialphase zeigt mit zunehmender Verfeinerung der FEM-Diskretisierung Konvergenz gegen die Lösung:

$$\bar{\bar{\epsilon}}_{2D,S} = \frac{u_0}{|V|} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{9} & -\frac{2}{15} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} \end{bmatrix}. \quad (3.57)$$

Die Matrix der mittleren Spannungszustände für die Materialphase konvergiert gegen die Lösung:

$$\bar{\underline{\sigma}}_{2D,S} = \frac{E u_0}{(1 - \nu^2) |V|} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} + \frac{\nu}{9} & \frac{-2\nu}{15} & 0 \\ -\frac{\nu}{2} + \frac{1}{9} & -\frac{2}{15} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{(1-\nu)}{3} \end{bmatrix}. \quad (3.58)$$

Mit der Inversen Matrix der mittleren Dehnungszustände

$$\bar{\underline{\epsilon}}_{2D,S}^{-1} = \frac{|V|}{u_0} \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ -\frac{5}{3} & -\frac{15}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{bmatrix} \quad (3.59)$$

folgt die mittlere effektive Steifigkeit der Materialphase exakt zur isotropen zwei-dimensionalen Steifigkeit, womit sich wieder die zu Beginn des Abschnitts gestellte Voraussetzung ergibt:

$$\bar{\underline{C}}_{2D,S} = \bar{\underline{\sigma}}_{2D,S} \bar{\underline{\epsilon}}_{2D,S}^{-1} = \frac{E}{1 - \nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix}. \quad (3.60)$$

Aus Gl. (3.52) und Gl. (3.46) folgt mit der errechneten Matrix der mittleren Spannungszustände  $\bar{\underline{\sigma}}_{2D,S}$  über  $S$  die effektive Steifigkeit des Testelements:

$$\bar{\underline{C}}_{2D,\partial\epsilon} = \bar{\underline{\sigma}}_{2D,S} \bar{\underline{\epsilon}}_{2D}^{-1} = \frac{E}{1 - \nu^2} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} - \frac{\nu}{9} & \frac{2\nu}{15} & 0 \\ \frac{\nu}{2} - \frac{1}{9} & \frac{2}{15} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-\nu)}{3} \end{bmatrix}. \quad (3.61)$$

An dieser fällt zunächst auf, dass sie nur für  $\nu = \frac{10}{33}$  symmetrisch ist. Dies bedeutet, dass die angebrachten Randbedingungen für die Berechnung einer effektiven Steifigkeit der vorgestellten Struktur für Aluminium oder unlegierten Stahl nicht geeignet sind.

Des weiteren ist aus dem Ergebnis abzulesen, dass der Einfluss der fehlenden Zwängung am freien Rand der Materialphase auf das Materialverhalten in 1-Richtung von der Querkontraktionszahl abhängt, während in 22-Richtung keine Abhängigkeit des Materialverhaltens von der Querkontraktionszahl auftritt. Beide Beobachtungen sind plausibel, da bei Belastung in 11-Richtung die Querdehnung am freien Rand der Materialphase von einer Änderung der Querkontraktionszahl beeinflusst werden wird. Bei der Belastung des Testelements in der 22-Richtung dagegen ist die Querdehnung



in 11-Richtung durch die äußeren Randbedingungen behindert.

### 3.3.2. Spannungsrandbedingungen

Zur Berechnung der effektiven zweidimensionalen Nachgiebigkeitsmatrix wird das Element nun den drei elementaren Lastfällen

- Normalbelastung in 1-Richtung
- Normalbelastung in 2-Richtung
- Schubbelastung in der 12-Ebene

unterworfen.

Wie auch im Falle der Verschiebungsrandbedingungen kann nach Gl. (3.15) die Ermittlung des mittleren Spannungstensors vom Inneren des Gebietes auf eine Integration über dessen Rand verlagert werden.

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{|V|} \left[ \int_{\partial S} x_i t_j^0 dA + \int_{\partial K} x_i t_j^0 dA \right] \quad (3.62)$$

Hierbei gilt es zu beachten, dass die mittlere Spannung in der Kavität  $K$  immer gleich Null ist, da  $K$  durch seine Null-Steifigkeit keinerlei Last im Inneren oder auf seiner Berandung aufnehmen kann und sich vollständig kraftfrei deformiert. D.h. es folgt wie auch schon im vorhergehenden Abschnitt, dass die mittlere Spannung über  $V$  nur von den Lastverhältnissen an und in der Materialphase abhängt.

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{|V|} \int_{\partial S} x_i t_j^0 dA \quad (3.63)$$

Überträgt man nun die Krafrandbedingungen, mit denen sich in einem homogenen Testelement ein homogener Spannungszustand erzeugen ließe, auf das betrachtete Testelement, so ergeben sich für  $S$  die folgenden abschnittswisen Randbedingungen:

$$\overline{AB} : \begin{bmatrix} t_1(x_1, 0) \\ t_2(x_1, 0) \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.64a)$$

$$\overline{BF} : \begin{bmatrix} u_1(1, x_2) \\ u_2(1, x_2) \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} 0 & 0 & t_0(x_2 - \frac{1}{2}) \\ -t_0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.64b)$$

$$\overline{EA} : \begin{bmatrix} u_1(0, x_2) \\ u_2(0, x_2) \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} 0 & 0 & t_0(x_2 - \frac{1}{2}) \\ t_0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.64c)$$

Unterzieht man diese einer näheren Betrachtung und wertet für sie die Gleichgewichtsbedingungen Gl. (2.20) und Gl. (2.21) aus, so stellt man fest, dass für den Lastfall in 2-Richtung das statische Gleichgewicht und für den Schublastfall das Momentengleichgewicht nicht erfüllt ist.

Nachdem die Strecke  $\overline{FE}$  für  $S$  als Krafrand nicht zur Verfügung steht, da sie nicht mit dem Rand von  $V$  zusammenfällt, lässt sich das Kräftegleichgewicht in 2-Richtung für den Normallastfall in 2-Richtung nur erfüllen, wenn an den Stecken  $\overline{BF}$  und  $\overline{EA}$  Kräfte in negativer 2-Richtung angebracht werden oder aber  $t_0 = 0$  gesetzt wird. Letztere Möglichkeit wird zunächst nicht in Betracht gezogen, da sie zu einer Null-StEIFigkeit des Testelementes in 2-Richtung führen würde.

Um im Schublastfall ein homogenes Schubfeld in  $S$  bei gleichzeitiger Erfüllung der Gleichgewichtsbedingungen zu erhalten, werden die Randbedingungen insgesamt wie folgt geändert:

$$\overline{AB} : \begin{bmatrix} t_1(x_1, 0) \\ t_2(x_1, 0) \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.65a)$$

$$\overline{BF} : \begin{bmatrix} u_1(1, x_2) \\ u_2(1, x_2) \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} -t_0 & 0 & t_0(x_2 - \frac{1}{4}) \\ 0 & \frac{-t_0}{2} & 0 \end{bmatrix} \quad (3.65b)$$

$$\overline{EA} : \begin{bmatrix} u_1(0, x_2) \\ u_2(0, x_2) \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} t_0 & 0 & t_0(x_2 - \frac{1}{4}) \\ 0 & \frac{-t_0}{2} & 0 \end{bmatrix} \quad (3.65c)$$

Aus diesen Randbedingungen ergeben sich die in Abb. 3.6 dargestellten Deformationsmoden. Der Normallastfall in 2-Richtung wurde wieder mit Hilfe der FEM behandelt, da sich auch hier das Auffinden einer analytischen Lösung schwierig gestaltet hätte. Um die Lösbarkeit des Problems herzustellen, wurden die drei, bei der Lösung des zweidimensionalen Problems auftretenden, Starrkörpermoden mit Hilfe zwangungsfreier Dreipunktlagerung unterdrückt. Wie bei der Applikation der FEM im Falle der Verschiebungsrandbedingungen wurde auch hier nur die Materialphase modelliert.

An der Darstellung der von Mises Vergleichsspannungen im 22-Lastfall ist wie bereits erwähnt zu erkennen, dass sich durch die Änderung der Randbedingungen kein homogener Spannungszustand mehr einstellt. Auch hier ist das Spannungsergebnis wieder auf die Vergleichsspannung des homogenen Elements normiert. Auf die Darstellung der Spannungsergebnisse für den 11- und 12-Lastfall wurde verzichtet, da sich hier homogene Spannungszustände einstellen, deren Spannungswerte analytisch ermittelt werden können. Am Ergebnis des 22-Lastfalls ist zu sehen, dass durch die

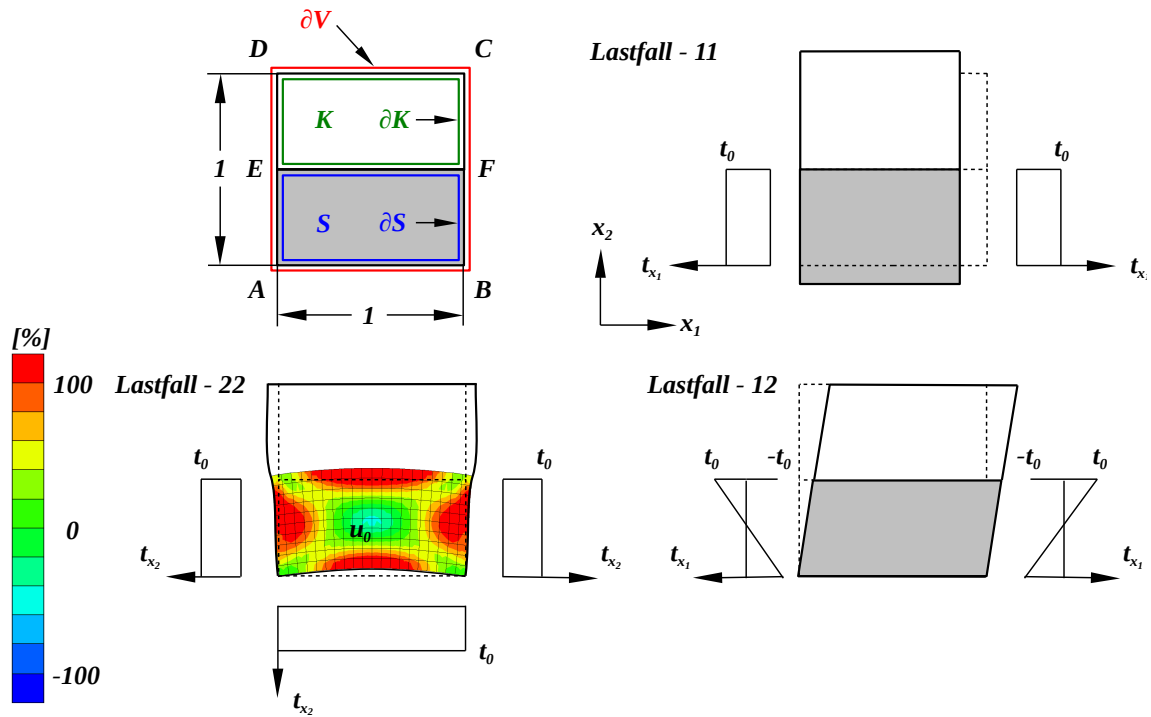


Abb. 3.6: Durch Spannungsrandbedingungen erzeugte Deformationsmoden am Testelement

zusätzliche Kräfte an den zur 2-Achse parallelen Rändern des Testelementes die Belastung der Materialphase an allen Rändern deutlich steigt und so ein Biegezustand entsteht.

Die Matrix der mittleren Spannungszustände für die Materialphase konvergiert gegen die Lösung:

$$\bar{\sigma}_{2D,S} = \frac{t_0}{|V|} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.66)$$

Die Matrix der mittleren Dehnungszustände für die Materialphase konvergiert gegen die Lösung:

$$\bar{\epsilon}_{2D,S} = \frac{t_0}{E |V|} \begin{bmatrix} 2 & -\nu & 0 \\ -2\nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2(1 + \nu) \end{bmatrix}. \quad (3.67)$$

Mit der inversen Matrix der mittleren Dehnungszustände ergäbe sich auch hier wieder die per Voraussetzung eingegebene isotrope Elastizitätsmatrix der Materialphase.

Geht man nun davon aus, dass die Deformation der Kavität  $K$  an den Phasenübergängen  $C_1$ -Stetigkeit erhält und sich in  $K$  eine dem Betrag nach gleiche mittlere

Dehnung wie in  $S$  einstellt, d.h. es gelte  $\bar{\underline{\epsilon}}_{2D,K} = \bar{\underline{\epsilon}}_{2D,S}$ , so ergibt sich nach Gl. (3.41) die Matrix der mittleren Dehnungszustände zu:

$$\bar{\underline{\epsilon}}_{2D,V} = 2\bar{\underline{\epsilon}}_{2D,S}, \quad (3.68)$$

woraus die effektive Steifigkeitsmatrix für den Fall der vorgegebenen Randspannungen folgt:

$$\bar{\underline{\mathbf{C}}}_{2D,\partial\sigma} = \frac{1}{2} \underline{\mathbf{C}}_{2D} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\nu}{2} & 0 \\ \frac{\nu}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{4} \end{bmatrix}. \quad (3.69)$$

### 3.3.3. Vergleich von Verschiebungs- und Spannungsrandbedingungen

Der Vergleich der beiden errechneten, effektiven Steifigkeitsmatrizen  $\bar{\underline{\mathbf{C}}}_{2D,\partial\epsilon}$  und  $\bar{\underline{\mathbf{C}}}_{2D,\partial\sigma}$  zeigt wie zu Anfang des Abschnittes behauptet, dass unterschiedliche Randbedingungen zu signifikant unterschiedlichen Steifigkeiten führen. Des Weiteren wurde gezeigt, dass die vorgestellte Methode bei der Verwendung beliebiger Randbedingungen nicht zwangsläufig auf eine symmetrische Steifigkeitsmatrix führt.

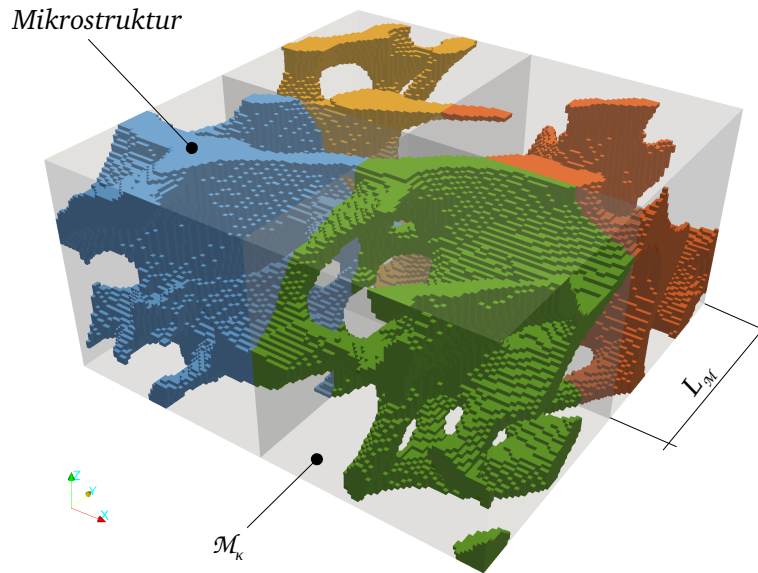
## 3.4. Direkte Approximation der MVE Steifigkeit

Um die im vorangegangenen Abschnitt angeführten Nachteile, welche der direkte mechanische Ansatz zur Bestimmung der effektiven Steifigkeit eines MVE mit sich bringt, zu vermeiden, wird dieser nun erweitert. Es wird nachfolgend eine Methode vorgestellt, die es erlaubt, die Elastizität eines MVE für ganze Klassen von Dehnungszuständen einheitlich und symmetrisch zu beschreiben.

Wir betrachten ein Volumen  $V \subseteq \mathbb{R}^3$ , welches durch ein diskretes Gitter in  $\mathcal{N}_{\mathcal{M}}$  Elemente  $\mathcal{M}_{\kappa} \subseteq \mathbb{R}^3$  zerlegt wird, so dass gilt:

$$\sum_{\kappa=1}^{\mathcal{N}_{\mathcal{M}}} \mathcal{M}_{\kappa} = V. \quad (3.70)$$

Jedes Element enthalte in seinem Inneren eine Mikrostruktur der in Abschnitt 3.1 definierten Form. Die äußere Gestalt der Elemente sei nun jedoch nicht mehr beliebig sondern weise die Form von Polyedern auf, d.h. die Kanten der Elemente seien stückweise linear. In Abb. 3.7 ist die beschriebene Situation für ein quaderförmiges Volumen  $V$ , welches in 4 würfelförmige Elemente zerlegt wird dargestellt.


 Abb. 3.7: Diskrete Zerlegung von  $V$ 

Das Volumen der Materialphase (Mikrostruktur) werde nun mit Hilfe der FEM diskretisiert, wobei jedes Voxel des Volumendatensatzes in ein Finites Element überführt wird. Dies bedeutet Gl. (2.104) führt auf ein lineares Gleichungssystem mit  $\mathcal{N}_{mic}$  Freiheitsgraden.

$$\underline{\mathbf{K}}_{mic} \hat{\underline{\mathbf{u}}}_{mic} = \hat{\underline{\mathbf{f}}}_{mic} \quad (3.71)$$

Durch elementare Zeilen- und Spaltenoperationen lassen sich die Freiheitsgrade des Systems nach inneren und äußeren Freiheitsgraden sortieren.

Innere Freiheitsgrade gehören hierbei zu innerhalb von  $\mathcal{M}$  liegenden Knoten der Struktur, die keine Randbedingungen tragen können. D.h. die Verschiebungen dieser Freiheitsgrade sind immer unbekannt und die Rechthandseite ist immer gleich Null. Äußere Freiheitsgrade gehören zu den in den Außenflächen von  $\mathcal{M}$  liegenden Knoten, auf die Randbedingungen aufgeprägt werden können. Es ergibt sich bei  $\mathcal{N}_{in}$  internen Freiheitsgraden und  $\mathcal{N}_{out} = \mathcal{N}_{mic} - \mathcal{N}_{in}$  äußeren Freiheitsgraden das folgende Schema:

$$\begin{bmatrix} K_{1,1} & \cdots & K_{1,\mathcal{N}_{in}} & K_{1,\mathcal{N}_{in}+1} & \cdots & K_{1,\mathcal{N}_{mic}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{\mathcal{N}_{in},1} & \cdots & K_{\mathcal{N}_{in},\mathcal{N}_{in}} & K_{\mathcal{N}_{in},\mathcal{N}_{in}+1} & \cdots & K_{\mathcal{N}_{in},\mathcal{N}_{mic}} \\ \hline K_{\mathcal{N}_{in}+1,1} & \cdots & K_{\mathcal{N}_{in}+1,\mathcal{N}_{in}} & K_{\mathcal{N}_{in}+1,\mathcal{N}_{in}+1} & \cdots & K_{\mathcal{N}_{in}+1,\mathcal{N}_{mic}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{\mathcal{N}_{mic},1} & \cdots & K_{\mathcal{N}_{mic},\mathcal{N}_{in}} & K_{\mathcal{N}_{mic},\mathcal{N}_{in}+1} & \cdots & K_{\mathcal{N}_{mic},\mathcal{N}_{mic}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_1 \\ \vdots \\ \hat{u}_{\mathcal{N}_{in}} \\ \hat{u}_{\mathcal{N}_{in}+1} \\ \vdots \\ \hat{u}_{\mathcal{N}_{mic}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \hat{f}_{\mathcal{N}_{in}+1} \\ \vdots \\ \hat{f}_{\mathcal{N}_{mic}} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{K}}_{in} & \underline{\mathbf{K}}_{in,out} \\ \underline{\mathbf{K}}_{in,out}^T & \underline{\mathbf{K}}_{out} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\underline{\mathbf{u}}}_{in} \\ \hat{\underline{\mathbf{u}}}_{out} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{0}} \\ \hat{\underline{\mathbf{f}}}_{out} \end{bmatrix}$$

Das Schema lässt sich nach dem Prinzip des Schurkomplements umformen. Es folgt mit blockweiser Matrizenmultiplikation:

$$\underline{\mathbf{K}}_{in} \hat{\mathbf{u}}_{in} + \underline{\mathbf{K}}_{in,out} \hat{\mathbf{u}}_{out} = \mathbf{0} \quad (3.72a)$$

$$\underline{\mathbf{K}}_{in,out}^T \hat{\mathbf{u}}_{in} + \underline{\mathbf{K}}_{out} \hat{\mathbf{u}}_{out} = \hat{\mathbf{f}}_{out} \quad (3.72b)$$

Auflösen von Gl. (3.72a) nach den inneren Freiheitsgraden  $\hat{\mathbf{u}}_{in}$  liefert:

$$\hat{\mathbf{u}}_{in} = -\underline{\mathbf{K}}_{in}^{-1} \underline{\mathbf{K}}_{in,out} \hat{\mathbf{u}}_{out} . \quad (3.73)$$

Eingesetzt in Gl. (3.72b) ergibt sich:

$$[\underline{\mathbf{K}}_{out} - \underline{\mathbf{K}}_{in,out}^T \underline{\mathbf{K}}_{in}^{-1} \underline{\mathbf{K}}_{in,out}] \hat{\mathbf{u}}_{out} = \underline{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{u}}_{out} = \hat{\mathbf{f}}_{out} . \quad (3.74)$$

Es ist zu erkennen, dass ein  $\mathcal{N}_{out} \times \mathcal{N}_{out}$  System entsteht, dass nur noch die äußeren Freiheitsgrade als Unbekannte enthält, dessen Koeffizientenmatrix jedoch auch von der inneren Steifigkeit des Ausgangssystems abhängt. Anders gesprochen, ergibt sich ein Gleichungssystem, welches mit Hilfe des Schurkomplements die Belastung der Außenflächen von  $\mathcal{M}_i$  in deren Deformation überführt. Die Information über die innere Struktur von  $\mathcal{M}_i$  wird hierbei durch die Inverse des inneren Steifigkeitsanteils  $\underline{\mathbf{K}}_{in}^{-1}$  und dessen Kopplung an die Außenflächen  $\underline{\mathbf{K}}_{in,out}$  in der Koeffizientenmatrix des reduzierten Systems repräsentiert.

Je nach Anzahl der Freiheitsgrade auf den Außenflächen von  $\mathcal{M}_i$ , d.h. der Feinheit der Diskretisierung der Materialphase, kann auch das reduzierte System noch beliebig viele Freiheitsgrade enthalten. So können beliebige Deformationen von  $\mathcal{M}_i$  beschrieben werden. Um die möglichen Deformationsmoden zu beschränken, wird über  $\mathcal{M}_i$  der Verschiebungsansatz nach Gl. (2.68) gewählt.

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} [\phi^{\mathcal{N}} \hat{\mathbf{u}}_{\mathcal{N}}]^T$$

Unter Berücksichtigung der lokalen Richtungen der Freiheitsgrade des reduzierten Systems, kann der Verschiebungsansatz direkt auf diese übertragen werden. Die Sortierung der Freiheitsgrade des reduzierten Systems sei wie in Abschnitt 2.2.3 bei der Ableitung von Gl. (2.75) angegeben. Mit Gl. (2.81)

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{T}(\mathbf{x}) \quad (3.75)$$

folgt für die äußeren Freiheitsgrade der diskretisierten Materialphase:

$$\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{out,i} = \left[ \sum_{N=1}^{N_e} \phi^N \left( \mathbf{T}(\mathbf{x}_{\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{out,i}}) \right) \hat{u}_{Mc,N,i} \right]_{out,i}. \quad (3.76)$$

Hierbei bedeutet  $\phi^N \left( \mathbf{T}(\mathbf{x}_{\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{out,i}}) \right)$  die Auswertung der Ansatzfunktionen an den Orten der Knoten, zu denen die Freiheitsgrade  $\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{out,i}$  gehören. Die Indizierung von  $\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{out,i}$  und  $\hat{u}_{Mc,N,i}$  mit dem Index  $i$  zeigt hierbei an, dass die Verschiebungsrichtung der Freiheitsgrade mit den entsprechenden Verschiebungskomponenten des makroskopischen FE-Ansatzes korrespondieren müssen. Die Indizierung der diskreten Knotengrößen mit dem Index  $Mc$  gibt an, dass diese zum makroskopischen Ansatz gehören.

Nach Einsetzen von Gl. (3.76) in Gl. (3.74) ergibt sich das folgende Blockschema:

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{S}}_{11} & \underline{\mathbf{S}}_{12} & \underline{\mathbf{S}}_{13} \\ \underline{\mathbf{S}}_{21} & \underline{\mathbf{S}}_{22} & \underline{\mathbf{S}}_{23} \\ \underline{\mathbf{S}}_{31} & \underline{\mathbf{S}}_{32} & \underline{\mathbf{S}}_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left[ \sum_{N=1}^{N_e} \phi^N \left( \mathbf{T}(\mathbf{x}_{\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{out,1}}) \right) \hat{u}_{Mc,N,1} \right]_{out,1} \\ \left[ \sum_{N=1}^{N_e} \phi^N \left( \mathbf{T}(\mathbf{x}_{\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{out,2}}) \right) \hat{u}_{Mc,N,2} \right]_{out,2} \\ \left[ \sum_{N=1}^{N_e} \phi^N \left( \mathbf{T}(\mathbf{x}_{\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{out,3}}) \right) \hat{u}_{Mc,N,3} \right]_{out,3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\underline{\mathbf{f}}}_{out,1} \\ \hat{\underline{\mathbf{f}}}_{out,2} \\ \hat{\underline{\mathbf{f}}}_{out,3} \end{bmatrix}. \quad (3.77)$$

Mit dem oben stehenden Schema lässt sich also nach Wahl eines Verschiebungsansatzes über  $\mathcal{M}_i$  aus dem Schurkomplement der direkten Diskretisierung der Materphase die diskrete Lastverteilung auf den Außenflächen von  $\mathcal{M}_i$  ermitteln.

Unter Verwendung von Gl. (2.79) und Summation über die äußeren Freiheitsgrade  $out$  lässt sich aus der errechneten diskreten Lastverteilung die zum über  $\mathcal{M}_i$  gewählten Verschiebungsansatz konsistente Lastmatrix  $\hat{\underline{\mathbf{f}}}_{Mc}$  erzeugen.

$$\hat{\underline{\mathbf{f}}}_{Mc} = \sum_{out} \hat{\underline{\mathbf{f}}}_{out} \left[ \underline{\phi}^N \right]^T \quad (3.78)$$

Dies bedeutet, das Schurkomplement der direkten Diskretisierung  $\underline{\mathbf{S}}$  in Kombination mit dem Verschiebungsansatz  $\underline{\phi}$  formen eine lineare Abbildung zwischen dem Vektorraum der Verschiebungsfreiheitsgrade  $\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{Mc}$  des gewählten Ansatzes und dem Vektorraum der konsistenten Lastvektoren  $\hat{\underline{\mathbf{f}}}_{Mc}$ .

$$\underline{\mathbf{A}}(\underline{\mathbf{S}}, \underline{\phi}) \hat{\underline{\mathbf{u}}}_{Mc} = \hat{\underline{\mathbf{f}}}_{Mc} \quad (3.79)$$

Im Vergleich mit Gl. (2.75) ist zu erkennen, dass es sich bei der Transformationsmatrix  $\underline{\mathbf{A}}(\underline{\mathcal{S}}, \underline{\phi})$  letztendlich um die Steifigkeitsmatrix  $K$  eines Finiten Elements handelt.

Werden nun aus  $3\mathcal{N}_e$  vorgegebenen Verschiebungsmoden über  $\mathcal{M}_i$  mit Hilfe des vorgestellten Vorgehens die entsprechenden  $3\mathcal{N}_e$  Lastvektoren ermittelt, so kann die oben stehende Gleichung wie folgt erweitert werden:

$$\underline{\mathbf{A}}(\underline{\mathcal{S}}, \underline{\phi}) \hat{\underline{\mathbf{U}}} = \hat{\underline{\mathbf{F}}} \quad (3.80)$$

Mit  $\hat{\underline{\mathbf{U}}}$  der Matrix der makroskopischen Knotenverschiebungen und  $\hat{\underline{\mathbf{F}}}$  der Matrix der makroskopischen Knotenkräfte, die beide die Dimension  $3\mathcal{N}_e \times 3\mathcal{N}_e$  besitzen. Werden die Verschiebungsmoden von  $\mathcal{M}_i$  gerade so gewählt, dass sich aus ihnen  $3\mathcal{N}_e$  linear unabhängige Vektoren  $\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{Mc}$  ergeben, so ist  $\hat{\underline{\mathbf{U}}}$  invertierbar und die Abbildungsmatrix (Steifigkeitsmatrix)  $\underline{\mathbf{A}}(\underline{\mathcal{S}}, \underline{\phi})$  lässt sich direkt bestimmen:

$$\underline{\mathbf{A}}(\underline{\mathcal{S}}, \underline{\phi}) = \overline{\mathbf{K}}_{num} = \hat{\underline{\mathbf{F}}} \hat{\underline{\mathbf{U}}}^{-1} \quad (3.81)$$

Im Gegensatz zu Gl. (3.35) zur Berechnung der effektiven Elastizitätsmatrix ist in oben stehender Gleichung die Symmetrie der effektiven numerischen Steifigkeit per Definition nach Gl. (2.75) und aufgrund der erfolgten Ableitungen direkt enthalten.

Es wurde somit eine Methode gefunden, mit der sich für ganze Klassen von Verschiebungsfeldern das effektive Materialverhalten von mikrostrukturierten Volumenelementen in einer Weise angeben lässt, die für die weitere kontinuumsmechanische Betrachtung der übergeordneten Strukturen geeignet ist. Welche Auswirkungen die vorgestellte Methode auf die effektiven Steifigkeitsmatrizen im Vergleich zum klassischen Vorgehen, Berechnung der effektiven Steifigkeit und anschließender Aufbau der effektiven numerischen Steifigkeit mit FE-Ansätzen, hat, wird im nächsten Abschnitt anhand eines elementaren Beispiels demonstriert.

### 3.5. Applikation des direkten mechanischen Ansatzes

In diesem Abschnitt wird die Applikation des direkten mechanischen Ansatzes an Testvolumina durchgeführt, um die Konvergenz der Methode sowie ihre Eigenschaften zu diskutieren. Die Elementform der makroskopischen Ebene wird hierbei immer die eines Würfels sein.





dehnungszuständen folgt.

Bei den übrigen vier Verschiebungsmoden handelt es sich um Dehnungen, die durch Verschiebung von jeweils 2 Knoten des makroskopischen Elementes erzeugt werden.

Die vier prinzipiellen Verschiebungsmoden mit den aus ihnen resultierenden von Mises Vergleichsspannungen sind in Abb. 3.9 dargestellt. Eine graphische Darstellung aller Lastfälle ist in Anhang C zu finden.

Die in Gl. (3.82) vorgestellte Matrix der Knotenverschiebungen  $\hat{U}$  besitzt die Determinante  $\det \hat{U} = -24$  und ist somit invertierbar. Bestimmt man für die angegebenen

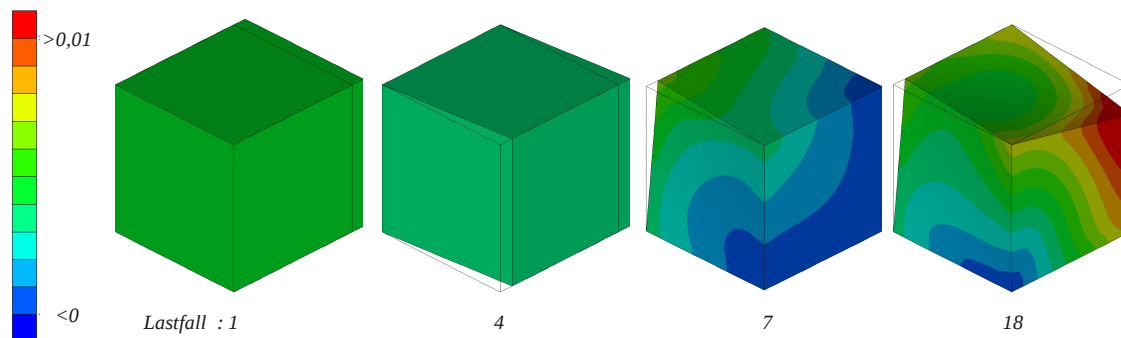


Abb. 3.9: Prinzipielle Verschiebungsmoden

Diskretisierungsstufen jeweils die diskrete Steifigkeitsmatrix nach Gl. (3.81), so ergibt sich die in Abb. 3.10 dargestellte Konvergenz der  $L_2$ -Norm der Differenzmatrizen gegen die höchste Diskretisierungsstufe.

$$\|K_n - K_{32}\|_{L_2} = \max \lambda (K_n - K_{32}) \quad (3.83)$$

Es zeigt sich somit, dass sich eine diskrete Elastizitätsmatrix finden lässt, welche die Klasse der linearen Verschiebungsfelder nach Gl. (2.96) exakt und ohne Einfluss der Randbedingungen abbilden kann.

Stellt man nun die Frage, warum das Verfahren überhaupt gegen eine andere Lösung als die des linearen Hexaederelementes strebt, obwohl dieses die aufgeprägten Verschiebungsfelder, nach Gl. (2.9b) und den Ausführungen am Ende von Abschnitt 2.1.6, exakt abbilden können sollte, so ist die Antwort darauf in der Reaktion des homogenen Elementes auf die Verschiebungsmoden, welche ein nicht konstantes Dehnungsfeld induzieren wie z.B.  $\hat{U}_{N7}$ , zu finden.

Nach Gl. (2.68) ergibt sich das durch die Knotenverschiebungen im Inneren des Elementes induzierte Verschiebungsfeld aus der Verknüpfung des Vektors der Ansatzfunktionen mit der Matrix der Knotenverschiebungen. Mit Gl. (2.96) und  $\hat{U}_{N7}$

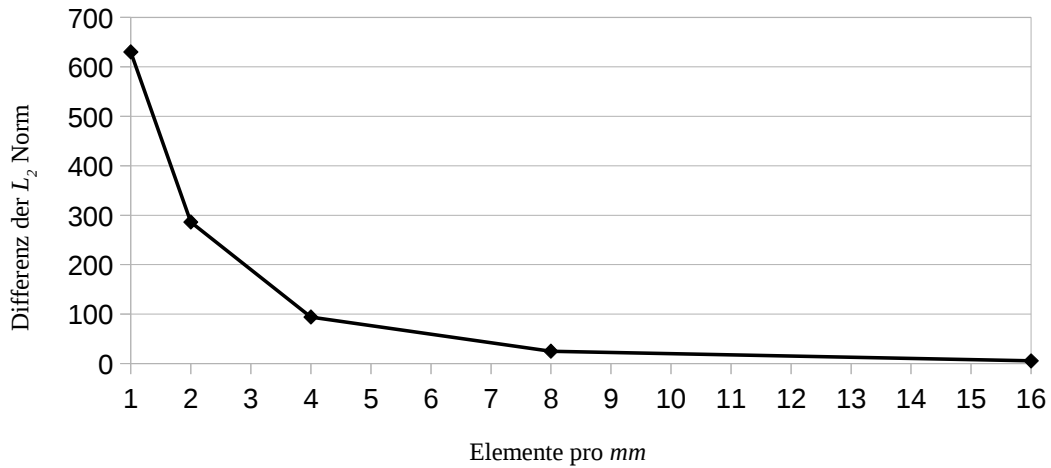


Abb. 3.10: Konvergenz der Steifigkeitsmatrix des homogenen Einheitslements

geschrieben als Matrix der Knotenverschiebungen,

$$\hat{\underline{\mathbf{u}}}_{\mathcal{N}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T \quad (3.84)$$

folgt das theoretische Verschiebungsfeld für das homogene Volumenelement:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} [\underline{\boldsymbol{\phi}}^{\mathcal{N}} \hat{\underline{\mathbf{u}}}_{\mathcal{N}}]^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{8}(1 - \xi_1)(1 + \xi_2)(1 + \xi_3) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.85)$$

Es ist zu erkennen, dass ausgehend von der linearen Elastizitätstheorie durch den gewählten Ansatz ein in  $x_1$ -Richtung lineares Verschiebungsfeld erzeugt wird. In  $x_2$ - und  $x_3$ -Richtung dagegen induziert der Ansatz keine Verschiebungen.

Wertet man, wie in Abb. 3.11 für  $\hat{U}_{N7}$  dargestellt, das Verschiebungsfeld im Inneren des fein diskretisierten homogenen Volumenelementes aus, so ist zu erkennen, dass die durch  $U_{N7} - \hat{U}_{N24}$  auf das Volumen aufgeprägten Verschiebungsfelder keineswegs wie theoretisch angenommen ein lineares Verschiebungsfeld im Inneren des homogenen Elementes erzeugen. Es ist eindeutig ein durch die asymmetrische Belastung hervorgerufener mikromechanischer Effekt zu erkennen. Durch die Kompression der Materialbereiche zwischen Knoten 7 und 8 wird in diesen Bereichen die Querdehnung aktiviert. Aufgrund der aufgeprägten Randbedingungen kann diese jedoch nur in die Würfelmitte erfolgen, woraus ein „Ausweichen“ des Materials aus den stark komprimierten Bereichen resultiert.

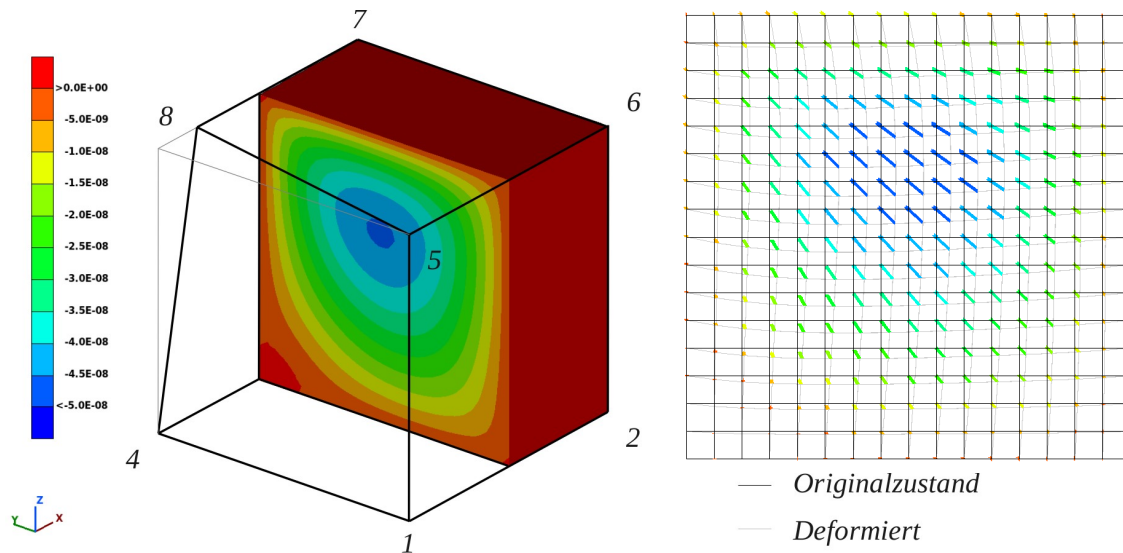


Abb. 3.11: Durch den Lastfall 7 induzierte Verschiebungen im Inneren des homogenen Elementes. In der linken Darstellung ist die Auswertung der  $x_2$ -Verschiebungen zu sehen während rechts die  $x_2$ - und  $x_3$ -Verschiebungen in der links gezeigten Schnittebene vektoriell als Gitterdeformation dargestellt sind.

In Abbildung Abb. 3.11 ist ein Effekt zu erkennen, den die Anhebung der Kontinuums Ebene mit sich bringt. Dies bedeutet, will man detaillierte Betrachtungen auf einer Ebene durchführen, auf der man bereits die einzelnen Elemente des kontinuumsmechanischen Ansatzes erkennen kann, ist man gezwungen, die Auflösung der Modellierung so lange zu erhöhen, bis die Elemente der betrachteten Ebene ihrerseits wieder durch die kontinuumsmechanischen Annahmen beschrieben werden. Dieser Vorgang wird bei den hier durchgeführten Betrachtungen durch die immer feinere Diskretisierung des Volumenelementes abgebildet.

Vergleicht man die Knotenkräfte, die sich aus der diskreten Steifigkeit eines mit isotropen Materialdaten belegten klassischen HEXE-8 Elementes  $K_{HEXE-8}$  ergeben, mit den Knotenkräften, die sich aus der errechneten effektiven numerischen Steifigkeit  $K_{Hexe-8M}$  ergeben, so stellt man fest, dass eine Umverteilung der Knotenkräfte erfolgt. Betrachtet man die Unterschiede der in Abb. 3.12 links dargestellten Reaktionskräfte des klassischen HEXE-8 Elementes und des berechneten HEXE-8M zusammen mit dem in Abb. 3.11 dargestellten Effekt des „Ausweichens“ des Materials, so stellt man folgende Zusammenhänge fest:

An den Knoten 3, 6, 7 und 8 verringern sich die Knotenkräfte, während sich an Knoten 1, 2, 4 und 5 die Knotenkräfte erhöhen. Diese Umverteilung resultiert aus dem in Abb. 3.11 dargestellten „Ausweichen“ des Materials aus dem stark kompri-

mierten Bereich zwischen den Knoten 7 und 8 durch positive Querkontraktion. Die

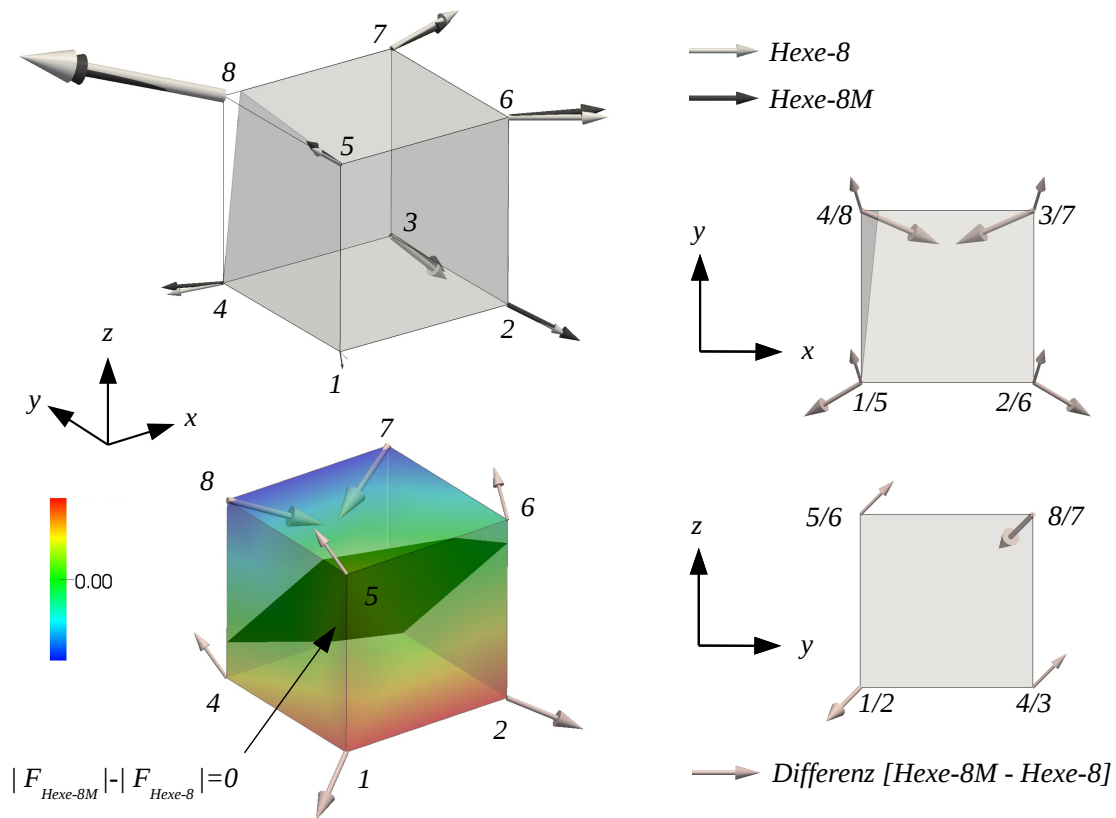


Abb. 3.12: Durch den Lastfall 7 hervorgerufene Knotenkräfte am klassischen HEXE-8 Element und am HEXE-8M Element sowie deren Differenzen in vektorieller Darstellung. Der Skalierungsfaktor der Vektorpfeile unterscheidet sich zwischen der Darstellung der Absolutkräfte links oben und der Darstellung der Differenz links unten und in den beiden Teilabbildungen rechts.

Verschiebung der Reaktionskräfte ist auch aus der in Abb. 3.12 dargestellten Iso-Fläche  $|F_{Hexe-8M}| - |F_{Hexe-8}| = 0$  zu erkennen, deren Normalenvektor ebenfalls mit der Richtung der Verschiebung übereinstimmt. Man stellt also fest, dass der gezeigte mikromechanische Effekt durch die berechnete numerische Steifigkeit abgebildet wird.

Wie in Tab. 3.1 angegeben und in Abb. 3.12 rechts zu sehen, zeigen die Differenzen der Knotenkräfte zwischen dem HEXE-8M und dem HEXE-8 Element einige interessante Eigenschaften. Zunächst ist zu erkennen, dass die Differenzvektoren an den Knoten 1 und 2, 7 und 8 sowie den Knoten 3 bis 6 den gleichen Betrag haben. Des Weiteren sind die dargestellten Vektoren bis auf das Vorzeichen der  $x_1$ -Komponente paarweise gleich, woraus sich der Betrag ihrer Resultierenden zu Null ergibt. Dies bedeutet, im Verbund verhält sich ein FE mit der errechneten effektiven numerischen Steifigkeit prinzipiell wie ein klassisches HEXE-8 Element. Es sind jedoch

<b>Knoten Nr.</b>	$F_{x_1}$	$F_{x_2}$	$F_{x_3}$	$ F $
1	-0,732	-0,433	-0,433	0,954
2	0,732	-0,433	-0,433	0,954
3	0,134	0,433	0,433	0,627
4	-0,134	0,433	0,433	0,627
5	-0,134	0,433	0,433	0,627
6	0,134	0,433	0,433	0,627
7	-1,000	-0,433	-0,433	1,173
8	1,000	-0,433	-0,433	1,173
Summe	0,000	0,000	0,000	0,000

Tab. 3.1: Differenzen der Knotenreaktionskräfte zwischen HEXE-8M und HEXE-8 normiert auf den Betrag der größten Komponente

die Steifigkeitsverhältnisse bzw. die Kopplungen zwischen den Elementknoten modifiziert, wodurch der beobachtete mikromechanische Effekt auch ohne die eigentlich benötigte Auflösung des Kontinuums erfassbar wird.

---

## 4. Gewebeproben und Datensätze

Da die in den vorangegangenen Kapiteln beschriebene Methode erst im Verlauf der Arbeit entwickelt wurde, war nicht von Anfang an klar, ob diese Entwicklung auch einen Erfolg bringen würde. Aus diesem Grunde sollte zunächst nicht übermäßig viel Aufwand und Budget in die Akquisition eines geeigneten Testdatensatzes zur Erprobung und Untersuchung der Methode investiert werden.

Zwar war zu Beginn der Arbeit eine präparierte, aus dem distalen Ende eines Femurs stammende Knochenprobe, von der auch ein  $\mu$ -CT-Datensatz existierte, vorhanden. Es wurde jedoch schnell klar, dass diese nicht ausreichen würde die Methode von der theoretischen als auch der implementierungstechnischen Seite in der notwendigen Tiefe zu überprüfen. Dies hatte zum einen den Grund, dass die Ausdehnung der Probe mit ca. 10 mm Kantenlänge und 885 mm<sup>3</sup> verwendbaren Volumen der  $\mu$ -CT-Aufnahme nicht umfangreich genug war, um die Auswirkungen der Bearbeitung eines vollständigen Knochens auf HPC-Systeme absehen zu können. Zum anderen stammte die Probe aus der distalen Epiphyse eines Femurs, d.h. dem Kniegelenk. Durch die geringe Ausdehnung der Probe enthielt diese eine nur wenig abwechslungsreiche trabekuläre Struktur. Dies rührt daher, dass in diesem Bereich des Femurs, durch die ausgeprägte unidirektionale Belastung des Kniegelenks in Richtung der Beinlängsachse, die Ausrichtung der trabekulären Haupttrajektorien fast ausschließlich in dieser Richtung erfolgt und ihre Ausrichtung lokal nur wenig variiert.

Es wurde zunächst erwogen mit Rinderknochen, welche in beliebigem Umfang bei jeder Schlachtereier zur Verfügung stehen, zu arbeiten. Dies wurde jedoch zugunsten des Vorschlages von Prof. Dr. med. Peter Helwig, beschäftigt an der Klinik für Orthopädie und Unfallchirurgie des Universitätsklinikums Freiburg<sup>1</sup>, verworfen, der anregte mit menschlichen Femurköpfen zu arbeiten. Diese werden bei der Implantation von Totalhüftendoprothesen im Normalfall der Entsorgung zugeführt und können durch die Genehmigung einer Ethikkommission zur weiteren Verwendung in der Forschung freigegeben werden. Durch Herrn Prof. Helwig wurde ein entsprechender Antrag gestellt, dem stattgegeben wurde und dessen Text in Anhang D zu finden ist. Herr Prof. Helwig entnahm daraufhin zwei Femurköpfe, welche die Basis der in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen bilden.

---

<sup>1</sup><http://www.uniklinik-freiburg.de/unfallchirurgie.html>

Von beiden Femurköpfen wurden in der Abteilung für Radiologie der Universitätsklinik Freiburg  $k$ -CT-Aufnahmen angefertigt. Von einem der Femurköpfe wurde des weiteren ein  $\mu$ -CT-Datensatz durch das Institut für Bauweisen und Konstruktionsforschung des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt erstellt, der wiederum die Basis für die in dieser Arbeit durchgeführten mikromechanischen Betrachtungen an menschlichem Knochengewebe bildet. Die Beschreibung der entnommenen Proben, der aus ihnen erzeugten Datensätze sowie die Lokation von Bereichen genauerer Betrachtungen, welche in nachfolgenden Abschnitten dieser Arbeit verwendet werden, ist Gegenstand dieses Kapitels.

## 4.1. Gewebeproben

Die beiden in Abb. 4.1 dargestellten Femurköpfe wurden in der Klinik für Orthopädie und Unfallchirurgie des Universitätsklinikums Freiburg bei der Implantation von Totalhüftendoprothesen entnommen. Die Implantationen erfolgten beide aufgrund von irreparablen Schädigungen des Knorpels zwischen Hüftknochen und Femurkopf, woraus sich jedoch keine Anomalien im Bezug auf die Beschaffenheit des Knochengewebes im Inneren der Femurköpfe ergab.

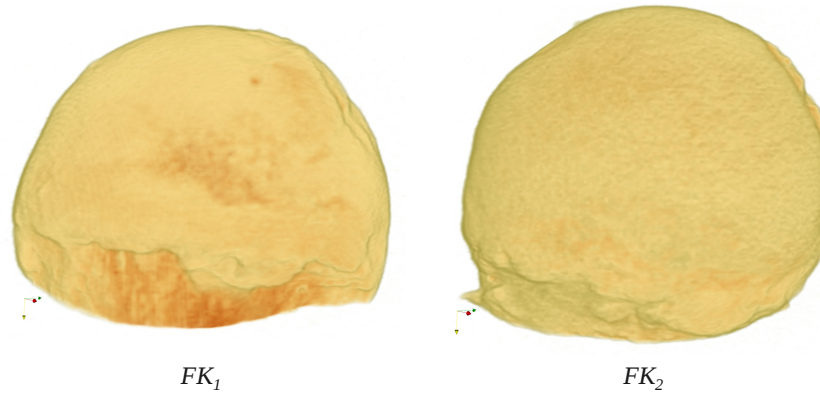
Der im weiteren Verlauf mit  $FK_1$  bezeichnete Femurkopf stammt von einem männlichen Patienten, der mit  $FK_2$  bezeichnete von einer weiblichen Patientin. Das Alter der beiden Patienten ist unbekannt, woraus sich zur Erprobung und Untersuchung der entwickelten Methode keine Nachteile ergeben. Um die Methode zu einem späteren Zeitpunkt statistisch evaluieren zu können, ist eine Untersuchung mehrerer Femurköpfe mit der exakten Klassifizierung nach Alter und Geschlecht allerdings zwingend erforderlich, um eventuelle Abhängigkeiten zwischen den errechneten Materialdaten und diesen Parametern zu klären.

Die Femurköpfe wurden direkt nach der Entnahme tiefgefroren. Sowohl für die  $k$ -CT-Aufnahmen als auch die  $\mu$ -CT-Aufnahme wurden beide Proben jeweils einen Tag zuvor im Kühlschrank bei ca.  $6^\circ\text{C}$  gelagert und direkt nach den Aufnahmen wieder tiefgefroren.

## 4.2. $k$ -CT-Aufnahmen

In der Abteilung für Radiologie des Universitätsklinikums Freiburg wurden von beiden Femurköpfen Computertomographien mit einem Dual Source Computertomographen der Firma Siemens vom Typ Somatom Definition angefertigt. Jeder Kopf



Abb. 4.1: Femurköpfe  $FK_1$  und  $FK_2$ 

wurde zwei mal gescannt, einmal in Luft und ein weiteres Mal in Salzlösung, um Aufhärungsartefakte beim Übergang Luft-Knochen zu minimieren. Bei der Rekonstruktion der Bilddaten kamen sogenannte Innenohr Algorithmen zum Einsatz, die zu diesem Zeitpunkt die maximal mögliche Auflösung der rekonstruierten Bilder in Schichtrichtung ermöglichten. So konnte eine fast isotrope Auflösung des erzeugten Voxelgitters erreicht werden. Jede der vier Aufnahmen wurde drei mal mit unterschiedlichen Faltungskernen rekonstruiert. Es ergaben sich so die in Tab. 4.1 zusammengestellten Parameter der Datensätze.

Nr.	Dicom-Serie Name	Voxelanzahl			Voxelabstand			Faltungskern	Medium
		Spalten	Zeilen	Schnitt					
2	HK 1 0.4 U80u	512	512	142	0,269531	0,269531	0,4	U80u	Luft
3	HK 1 0.4 U90u	512	512	142	0,269531	0,269531	0,4	U90u	Luft
4	HK 1 0.4 U75u	512	512	142	0,269531	0,269531	0,4	U75u	Luft
5	HK 1 W 0.4 U80u	512	512	142	0,26953	0,269531	0,4	U80u	Wasser
6	HK 1 0.4 U90u	512	512	142	0,269531	0,269531	0,4	U90u	Wasser
7	HK 1 0.4 U75u	512	512	142	0,269531	0,269531	0,4	U75u	Wasser
8	HK 2 W 0.4 U80u	512	512	174	0,269531	0,269531	0,4	U80u	Wasser
9	HK 1 0.4 U90u	512	512	174	0,269531	0,269531	0,4	U90u	Wasser
10	HK 1 0.4 U75u	512	512	174	0,269531	0,269531	0,4	U75u	Wasser
11	HK 2 0.4 U80u	512	512	173	0,269531	0,269531	0,4	U80u	Luft
12	HK 1 0.4 U90u	512	512	173	0,269531	0,269531	0,4	U90u	Luft
13	HK 1 0.4 U75u	512	512	173	0,269531	0,269531	0,4	U75u	Luft

Tab. 4.1: Spezifikationen der *k*-CT-Datensätze

Es wurden zusätzlich zu den Rekonstruktionen auch die CT-Rohdaten gesichert, um zu einem späteren Zeitpunkt weitere eventuell nötige Rekonstruktionen vornehmen zu können. Dieses Vorgehen ist bei der Verwendung von *k*-CT-Daten als Basis für Simulationen unbedingt zu empfehlen, da die Rohdaten meist wesentlich mehr Informationen als die rekonstruierten Bilddaten enthalten. Wie [52] zeigt, ist es beispielsweise möglich, dass neue mathematische Methoden oder einfach die Verfügbarkeit

erhöhter Rechenleistung zu einer wesentlichen Verbesserung der Bildqualität führen. Ein weiteres Beispiel für die bessere Ausnutzung der CT-Rohdaten ist die doppelte Rekonstruktion der Rohdaten einer heute üblichen Spiral-CT mit verschiedenen Ansatzpunkten. Das Verfahren zur Erhöhung der Auflösung in Schichtrichtung, wurde am HLRS bereits für mehrere Basisdatensätze von Strömungssimulationen in der abdominalen Aorta erfolgreich angewendet [53].

Weitere während dieser Arbeit durchgeführte Untersuchung am CT-Datensatz einer abdominalen Aorta haben gezeigt, dass die Analyse mehrerer Rekonstruktionen einer CT-Aufnahme mit verschiedenen Faltungskernen unterschiedlicher Kontrastverstärkung sinnvoll erscheint. So tritt beispielsweise bei der Segmentierung von Weichgeweben wie Arterienwandungen, Knorpel oder auch Muskelsträngen immer wieder das in Abb. 4.2 dargestellte Problem auf.

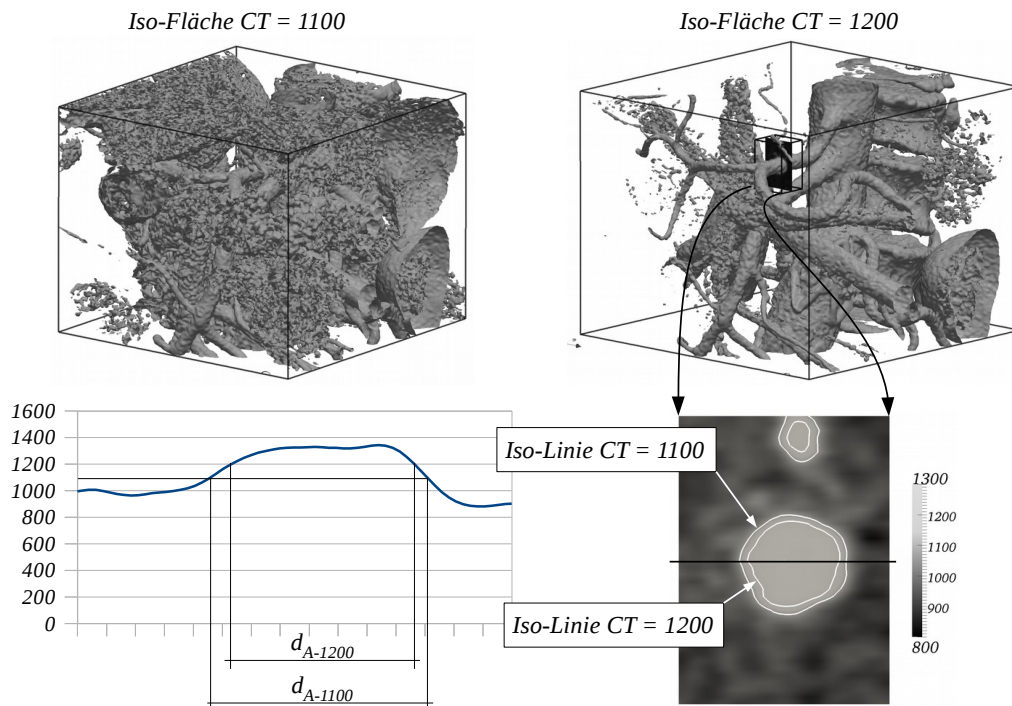


Abb. 4.2: Segmentierung einer Aderwand mit Hilfe eines kontrastarmen, zur Darstellung von Weichgeweben bestimmten Faltungskerns. Die mit  $d_{A-1100}$  und  $d_{A-1200}$  gekennzeichneten Abmessung zeigen im Beispiel eine Durchmesserergrößerung des durchströmten Lumens von ca.  $1\text{mm}$  an.

Die Verwendung eines zur Abbildung von Weichgeweben bestimmten stark glättenden Faltungskerns erleichtert durch die Wahl eines gewissen Schwellwerts, im Beispiel  $CT = 1200$ , zwar die Freilegung der gewünschten Strukturen, jedoch ist in der de-

taillierten Analyse der Daten zu erkennen, dass die im Beispiel angestrebte Segmentierung der Aderwandung mit diesen Daten nicht ohne weiteres möglich ist. Wie das in Abb. 4.2 dargestellte radiale Dichteprofil zeigt, geht die Aderwandung vollständig im geglätteten Übergang von kontrastmitteldurchströmten Lumen zu umliegendem Weichgewebe unter. Dies bedeutet der Schwellwert zur Darstellung der gewünschten Strukturen kann nur geschätzt werden. Verringert man den Schwellwert beispielsweise wie dargestellt um 100 Grauwerte nach unten, so werden die Adern umgebende Strukturen ebenfalls mit segmentiert, woraus eine aufwändige manuelle Nachbearbeitung der Geometrie folgt.

Analysiert man dagegen die kontrastarmen Daten in der Überlagerung mit Rekonstruktionen derselben Aufnahme mit kontrastverstärkenden Faltungskernen, wie in Abb. 4.3 dargestellt, so stellt man fest, dass diese wie vom Gibb'schen Phänomen bekannt am Ort des größten Gradienten des zugrundeliegenden Skalarfeldes gleiche Werte besitzen.

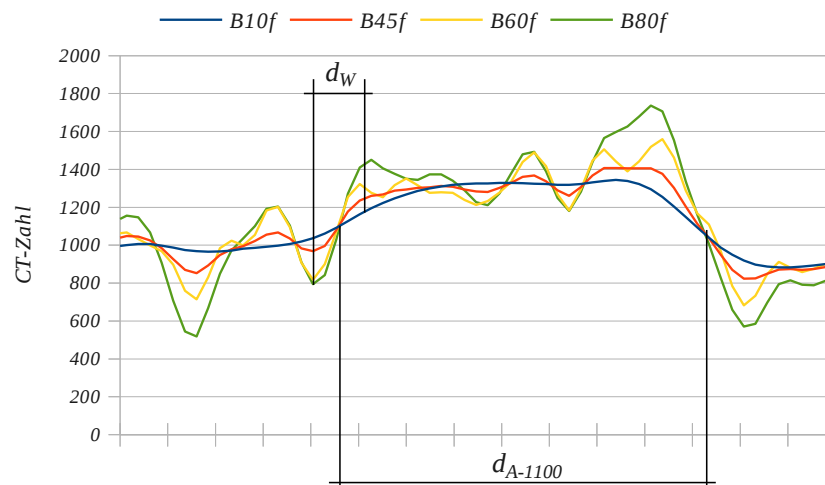


Abb. 4.3: Radiale 1D-Dichteprofile einer Nierenarterie bei Verwendung verschiedener Faltungskerne. Möglicherweise lässt sich aus den, den Schnittpunkten aller Rekonstruktionen nächstgelegenen, Maxima der kontrastverstärkenden Faltungskerne die Dicke der Aderwandung  $d_w$  ableiten.

Es bestünde somit die Möglichkeit, zur Geometriesegmentierung die Orte der geringsten Varianz der unterschiedlichen Rekonstruktionen zu ermitteln und dann die kontrastverstärkten Daten in einer gewissen Umgebung dazu nach Amplitudenspitzen zu analysieren.

Da von den zu untersuchenden Femurköpfen jedoch nur Rekonstruktionen mit stark

kontrastverstärkenden Faltungskernen und keine geglätteten Daten vorlagen, bestand während der Durchführung dieser Arbeit nicht mehr die Möglichkeit der detaillierten Untersuchung des soeben dargestellten Sachverhaltes.

In Abb. 4.4 sind die Rekonstruktionsergebnisse für den Faltungskern mit dem geringsten Kontrast  $U75u$  und den Faltungskern mit dem höchsten Kontrast  $U90u$  zu sehen. Es ist zu erkennen, dass beide Faltungskerne stark kontrastverstärkend wirken. D.h. die lokalen Schwingungen des Skalarfeldes werden ähnlich dem Gibbs'schen Phänomen bei der Annäherung des Rechteckimpulses durch eine Fourierreihe verstärkt. Im unteren Teil von Abb. 4.4 sind die Dichteprofile beider Rekonstruktionen einer einzelnen Zeile eines Schnittbildes überlagert dargestellt.

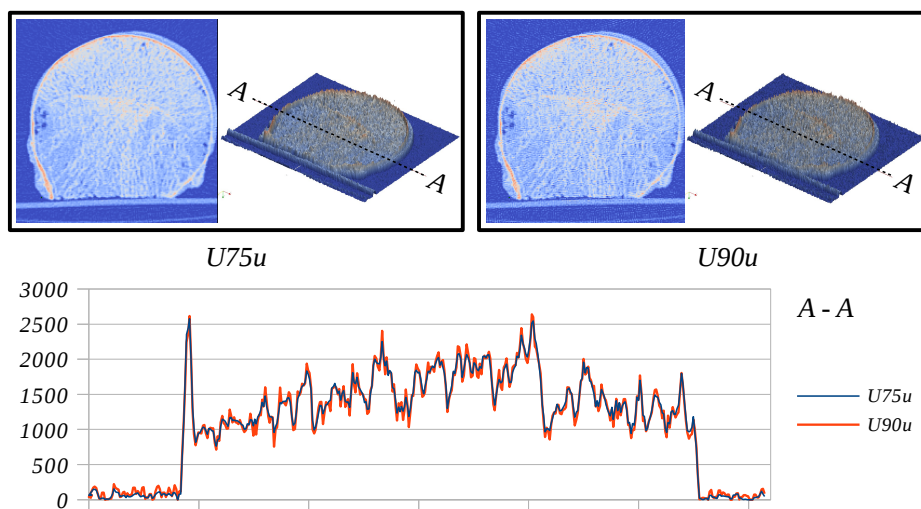


Abb. 4.4: Vergleich der Rekonstruktionen mit unterschiedlichen Faltungskernen für  $FK_2$ . Teilabbildung links oben: Rekonstruktion mit  $U75u$ . Teilabbildung rechts oben: Rekonstruktion mit  $U90u$

Es ist deutlich zu erkennen, was in der Darstellung der Schnitte bereits zu erahnen ist. Der kontrastreichste Faltungskern führt zu so starkem Bildrauschen, dass diese Rekonstruktion zum Auffinden einer Transferfunktion zwischen klinischem CT-Dichtefeld und dem Feld der anisotropen Materialverteilung wohl nicht mehr zu verwenden ist. Inwieweit der Faltungskern  $U75u$  zur Entwicklung einer Transferfunktion zwischen klinischen CT-Daten und dem Feld der errechneten anisotropen Materialdaten geeignet ist, ist in dieser Arbeit folgenden Untersuchungen zu klären. Es scheint jedoch notwendig, weitere Rekonstruktionen der CT-Aufnahme mit weniger kontrastverstärkenden Faltungskernen durchzuführen und, wie oben beschrieben, Überlagerungen der verschiedenen Rekonstruktionen zu analysieren.

### 4.3. $\mu$ -CT-Aufnahme

Um eine direkte Modellierung der Mikrostruktur von spongiösem Knochenmaterial zu ermöglichen, ist eine  $k$ -CT nicht ausreichend. Um Trabekel mit der durchschnittlichen Dicke von  $0,1\text{ mm}$  exakt erfassen zu können, ist eine CT-Auflösung von ca.  $0,02\text{ mm}$  erforderlich [54]. Ein Datensatz dieser Qualität wurde im Rahmen dieser Arbeit durch das Institut für Bauweisen und Konstruktionsforschung des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt in Stuttgart mit einem Mikrofokus Computertomographen der Firma phoenix|x-ray vom Typ v|tome|x L 450<sup>2</sup> angefertigt. Es ergaben sich die in Tab. 4.2 angegebenen Parameter des von  $FK_1$  erzeugten Datensatzes.

Der Datensatz war zunächst mit 2 Byte pro Voxel als nicht vorzeichenbehaftete Ganzzahl abgespeichert. Zur einfacheren Verwendung der Daten in Fortran intrinsischen Datentypen, welche generell vorzeichenbehaftet sind, wurde der Datensatz in vorzeichenbehaftete Ganzzahlen mit 4 Byte Speicherbedarf pro Voxel mit gleichbleibendem Wertebereich von  $[0 : 65535]$  umgesetzt und im für diese Arbeit entwickelten PureDat Datenformat (siehe Abschnitt 5.2.1) abgelegt. Es ergibt sich so ein gesamtes Datenvolumen von  $19,08\text{ GB}$ .

Bei der  $\mu$ -CT limitieren hauptsächlich die Größe des verwendeten Flachdetektors sowie die gewünschte Auflösung des gescannten Objektes das Volumen der zu scannenden Probe. Die verwendete v|tome|x Anlage des DLR verfügt über einen Flachdetektor mit  $2048 \times 2048$  Bildpunkten. Mit der gewünschten Auflösung des Femurkopfes von  $0,02\text{ mm}$  folgt der maximale Durchmesser eines zu scannenden kugelförmigen Objektes von ca.  $41\text{ mm}$ . Dies bedeutete, dass nicht der gesamte Femurkopf  $FK_1$  mit ca.  $45\text{ mm}$  Durchmesser in den Scanbereich passte. Eine Übersicht des  $\mu$ -CT Datensatzes mit der enthaltenen Femurstruktur ist in Abb. 4.5 dargestellt. Die Spezifikation des Voxelkoordinatensystems ist in Tab. 4.2 gegeben.

	$x_1$	$x_2$	$x_3$
Voxelanzahl	1680	1740	1752
Voxelgröße [mm]	0,01936174	0,01936174	0,01936174
Dimension [mm]	32,5277232	33,6894276	33,92176848

Tab. 4.2: Spezifikation des  $\mu$ -CT-Datensatzes - Femurkopf  $FK_1$

<sup>2</sup><http://www.ge-mcs.com/de/radiography-x-ray/ct-computed-tomography/vtomex-l-450.html>

### 4.3.1. Ausgezeichnete Volumina der $\mu$ -CT

Die Analysen in den nachfolgenden Abschnitten beziehen sich aus unterschiedlichen Gründen nicht immer auf das gesamte  $\mu$ -CT-Volumen. Deshalb werden in diesem Abschnitt die drei wesentlichen Volumina, die als Bezüge für Analysen verwendet werden, dargestellt.

#### 4.3.1.1. Umgebendes Volumen

Bei genauerer Betrachtung von Abb. 4.5 ist zu erkennen, dass durch die Abbildung eines kugelförmigen Gegenstandes mit Hilfe eines quaderförmigen Volumens, neben der eigentlichen Knochenstruktur, auch Luft im  $\mu$ -CT-Volumen enthalten ist. Um zu vermeiden, dass diese luftgefüllten Bereiche die Berechnung der globalen strukturellen Parameter des Femurkopfes verfälschen, wurde das umgebende Volumen der Knochenstruktur nach der folgenden Methode bestimmt.

1. Berechnung der Iso-Fläche mit dem ermittelten Schwellwert von 14250 (siehe Abschnitt 4.3.3).
2. Bereinigung und Reduktion der Elementanzahl der Iso-Fläche.
3. Delauney Vernetzung [55] des umgebenden Volumens der Iso-Fläche.
4. Extraktion der, das umgebende Volumen einschließenden, Fläche. Siehe Abb. 4.5 rechts.
5. Rekonstruktion des Flächennetzes und Tetraeder-Volumenvernetzung

Die Schritte 1-4 wurden mit Hilfe der Visualisierungssoftware ParaView<sup>3</sup> durchgeführt. Für die Volumenbestimmung in Schritt 5 wurde der CAE-Präprozessor ANSA<sup>4</sup> verwendet. Das so ermittelte Volumen beträgt

$$V_{UV} = 21400,5 \text{ mm}^3 \quad (4.1)$$

und ist in Abb. 4.5 rechts dargestellt. Dies entspricht 57,57% des gesamten  $\mu$ -CT-Volumens. Größen, welche sich auf das umgebende Volumen beziehen, werden im folgenden mit dem Fußzeiger  $UV$  versehen.

---

<sup>3</sup><http://www.paraview.org>

<sup>4</sup><http://www.beta-cae.gr>

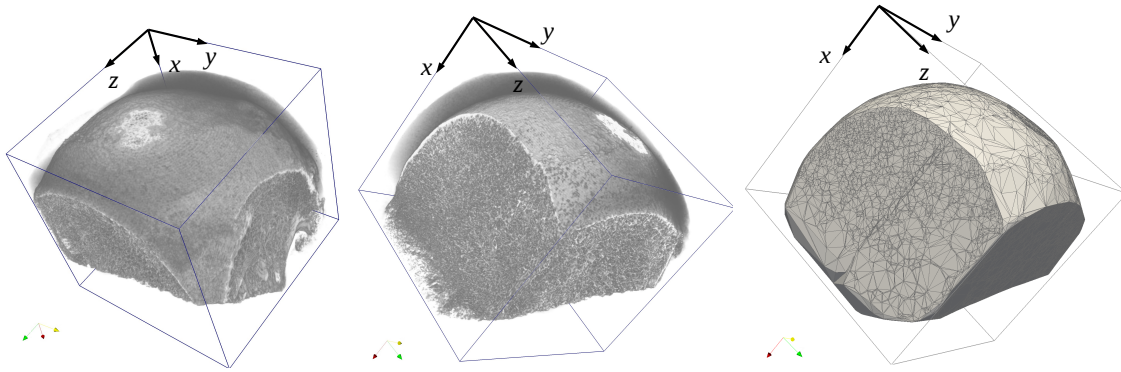


Abb. 4.5: Links und Mitte: Übersicht des Datenvolumens der  $\mu$ -CT; Rechts: Umgebendes Volumen - Ergebnis der Delauney Vernetzung

#### 4.3.1.2. Spongiöses Volumen

Um die unregelmäßigen Randbereiche des Femurkopfes, d.h den Übergang von Spongiosa in die umgebende kortikale Schicht, von den durchgeführten Analysen auszuschließen, wird das umgebende Volumen der Knochenstruktur ein weiteres Mal beschnitten. So können zunächst nur die Eigenschaften der Spongiosa detailliert betrachtet werden. In einem weiteren Schritt lässt sich dann feststellen, welchen Effekt der Ausschluss der kortikalen Schicht auf statistische Auswertungen der Daten hat. Der Bereich setzt sich im Falle des  $\mu$ -CT-Volumens aus allen Voxeln bzw. im Falle der Gebietszerlegungen aus allen MVEs zusammen, die vollständig, d.h. mit allen acht Eckpunkten, innerhalb folgender Schnittmenge liegen:

$$(x_1 - 19,75)^2 + (x_2 - 15,75)^2 + (x_3 - 20,0)^2 - 18,5^2 \leq 0 \quad \cap \quad (4.2)$$

$$\begin{bmatrix} -0,708 \\ -0,172 \\ -0,685 \end{bmatrix}^T \cdot (\mathbf{x} - \begin{bmatrix} 28,68 \\ 20,31 \\ 24,63 \end{bmatrix}) > 0 \quad (4.3)$$

mit  $\mathbf{x}$  dem Ortsvektor des betrachteten Eckpunktes. Eine Übersicht über das spongiöse Volumen ist in Abb. 4.6 dargestellt. Sein Inhalt beträgt:

$$V_{SV} = 20973.4mm^3 \quad (4.4)$$

Dies entspricht 98% des umgebenden Volumens. Größen, welche sich auf diesen Bereich beziehen werden im Folgenden mit dem Fußzeiger  $SV$  versehen.

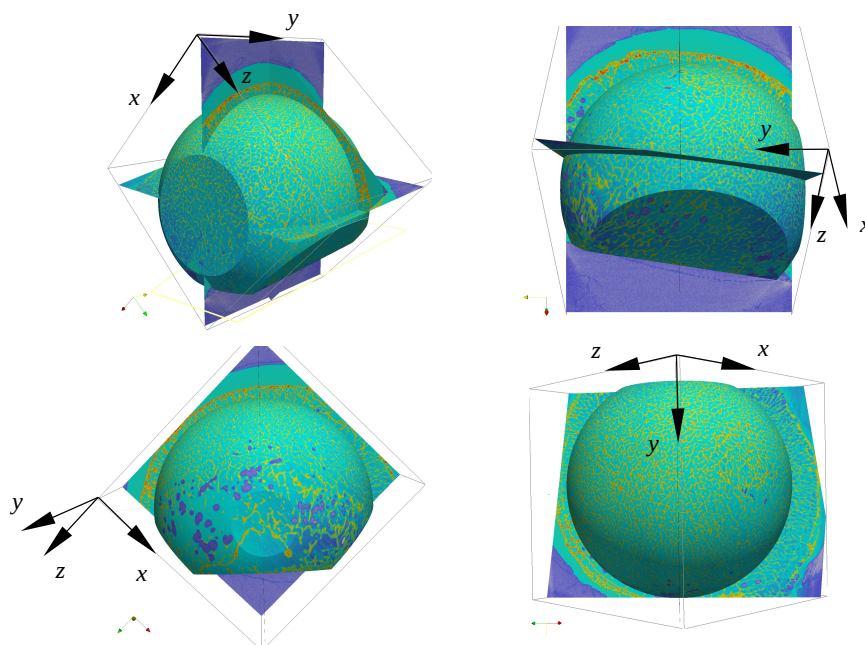


Abb. 4.6: Beschnittene Knochenstruktur ohne kortikale Randbereiche

#### 4.3.1.3. Zentrale Gruppe

Um die Methode der effektiven numerischen Steifigkeit sowie deren Implementierung zu evaluieren, wurde ein Bereich des Datensatzes verwendet, der im folgenden „zentrale Gruppe“ genannt wird. Hierbei handelt es sich um den in Abb. 4.7 darge-

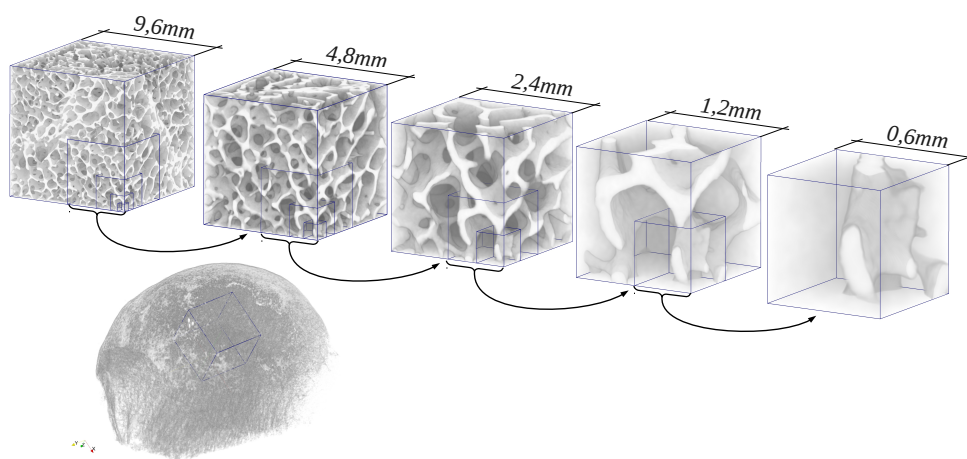


Abb. 4.7: Lage und Zerlegungsstufen der zentralen Gruppe

stellten Bereich, der dem zentralen Element einer Zerlegung des  $\mu$ -CT-Datensatzes in Teilgebiete mit  $9,6\text{ mm}$  Kantenlänge entspricht. Der Bereich wurde gewählt, da er



ausschließlich mit Knochenstruktur sowie Knochenmark gefüllt ist und keine Randbereiche einschließt. Größen, welche sich auf diesen Bereich beziehen, werden im folgenden mit dem Fußzeiger  $CG$  versehen.

### 4.3.2. Gebietszerlegung der $\mu$ -CT

Ziel dieser Arbeit ist die Berechnung anisotroper Materialparameter nach der im vorangegangenen Kapitel vorgestellten Methode. Hierzu wird der Datensatz basierend auf den in Abschnitt 2.3.4 getroffenen Definitionen in Teilgebiete zerlegt, welche die zu analysierenden MVEs bilden. Die Größe der Teilgebiete wurde zwischen  $0,6\text{ mm}$  und  $9,6\text{ mm}$  variiert, woraus sich die in Tabelle Tab. 4.3 angegebenen Zerlegungsparameter für die einzelnen MVEs ergeben. Die Parameter der Zerlegungen, welche nicht die einzelnen MVEs sondern die Zerlegungen als Ganzes betreffen, sind in Tab. 4.4 angegeben.

Zerlegung	0,6	1,2	2,4	4,8	9,6
Kantenlänge: $L_{\mathcal{M},i}$ [mm]	0,600214	1,200428	2,400856	4,801712	9,603423
Voxel pro Kante: $I_{\mathcal{M},i}$ [#]	31	62	124	248	496
Voxel im MVE $\mathcal{N}_{Voxel,\mathcal{M},i}$ [#]	29791	238328	1906624	15252992	122023936

Tab. 4.3: Parameter der einzelnen MVEs für die Zerlegungsgrößen der  $\mu$ -CT zwischen  $0,6\text{ mm}$  bis  $9,6\text{ mm}$

Zerlegung	0,6	1,2	2,4	4,8	9,6
MVEs pro Richtung : $\mathcal{N}_i$ [#]	[54 , 56 , 56]	[27 , 28 , 28]	[13,14,14]	[6,7,7]	[3,3,3]
MVE Anzahl: $\mathcal{N}$ [#]	169344	21168	2548	294	27

Tab. 4.4: Parameter der Gesamtzerlegungen der  $\mu$ -CT

### 4.3.3. Bestimmung der Phasengrenze

Um die Knochenstruktur vom Markbereich zu trennen, wird in dieser Arbeit der in Abschnitt 5.3.1.1 erläuterte Schwellwertalgorithmus verwendet, der alle Voxel mit einem Grauwert größer als der festgelegte Schwellwert in Finite Elemente umformt. Um einen geeigneten Schwellwert, d.h. die Phasengrenze zwischen Markraum und Knochenstruktur zu bestimmen wurden repräsentative Häufigkeitsverteilungen der Grauwerte (Histogramme) für die verschiedenen Zerlegungsgrößen der zentralen Gruppe ausgewertet.

Die in Abb. 4.8 dargestellten Histogramme zeigen auf allen Zerlegungsstufen deutlich zwei ausgeprägte Maxima. Das stark ausgeprägte Maximum um den Grauwert 12000 repräsentiert das Knochenmark während das zweite Maximum um den Grauwert 16300 die Knochenstruktur darstellt. Das Ziel ist nun den Grauwert zu ermitteln, der bei leichter Änderung eine ebenfalls nur geringe Änderung der Knochenstruktur zur Folge hat.

Zur Erstellung der Histogramme wurden der Grauwertebereich in jeweils 256 Klassen gleicher Breite  $\Delta_G$  eingeteilt. Dies bedeutet man kann das Volumen der Knochenstruktur  $V_S$  in Abhängigkeit des gewählten Schwellwerts zur Trennung von Markraum und Knochenstruktur  $\mathcal{G}_S$  durch das Integral

$$V_S(\mathcal{G}_S) = \int_{\mathcal{G}_S}^{\mathcal{G}_{max}} \mathcal{G}(\Delta_G) d\Delta_G \quad (4.5)$$

berechnen, wobei  $\mathcal{G}_{max}$  der im Datensatz maximal vorkommende Grauwert ist. Wird diese Funktion nun zweimal differenziert so erhält man die ebenfalls in Abb. 4.8 auf der rechten Koordinatenachse aufgetragene Ableitung der Häufigkeitsverteilung  $\frac{d\mathcal{G}_{9,6}(\Delta_G)}{\Delta_G}$ .

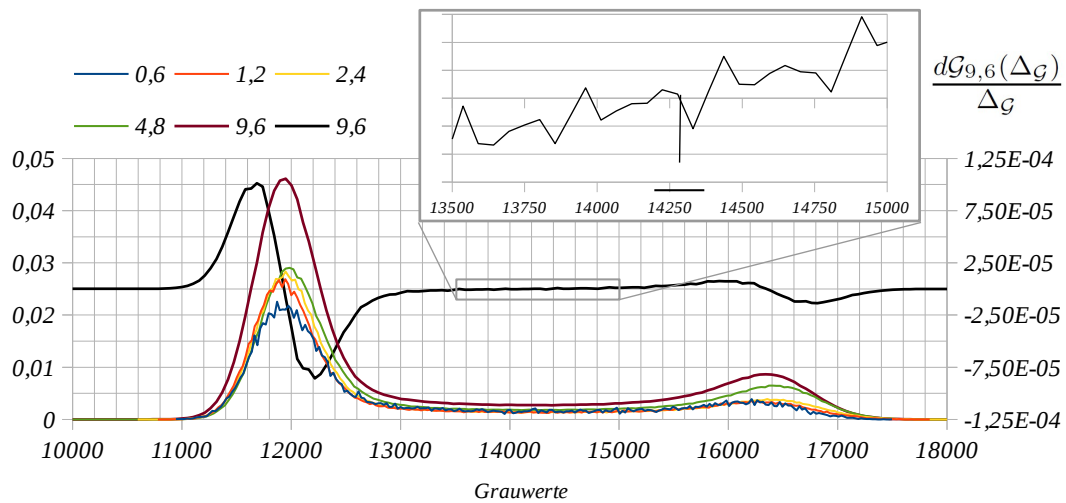


Abb. 4.8: Dichteverteilungen der Grauwerte in der zentralen Gruppe bei verschiedenen Zerlegungsgrößen (linke Koordinatenachse) sowie die Ableitung der Dichteverteilung für das MVE mit 9,6 mm Kantenlänge (rechte Koordinatenachse)

In der Ausschnittvergrößerung ist der Nulldurchgang der Ableitungsfunktion zwischen den beiden Maxima von Markraum und Knochenstruktur bei einem Grauwert von ca. 14250 zu erkennen, womit der Wert gefunden ist, dessen Änderung die ge-

ringste Änderung des Strukturvolumens nach sich zieht. Dies ist auch in Abb. 4.9 zu erkennen. Dargestellt ist hier ein Dichteverlauf durch ein einzelnes Trabekel der Mikrostruktur. Eingetragen sind die Isolinien für die Grauwerte 13500 bis 15000 in Schritten von 250 Grauwerten. Es ist abzulesen, dass im gewählten Wertebereich eine Änderung des ermittelten Schwellwerts um 250 Grauwerte von 14250 auf 14000 eine Aufdickung der Knochenstruktur um  $0,0107\text{ mm}$  bewirkt, was in der dargestellten Schnittrichtung einer relativen Änderung von  $4,51\%$  entspricht.

Um die Auswirkungen der Änderung des Strukturvolumens durch Änderung des Grauwertes auf die berechneten Materialparameter zu überprüfen, wurde an dem in Abb. 4.7 dargestellten MVE mit  $1,2\text{ mm}$  Kantenlänge eine Parameterstudie durchgeführt. Der Schwellwert zur Trennung von Knochenstruktur und Markraum wurde

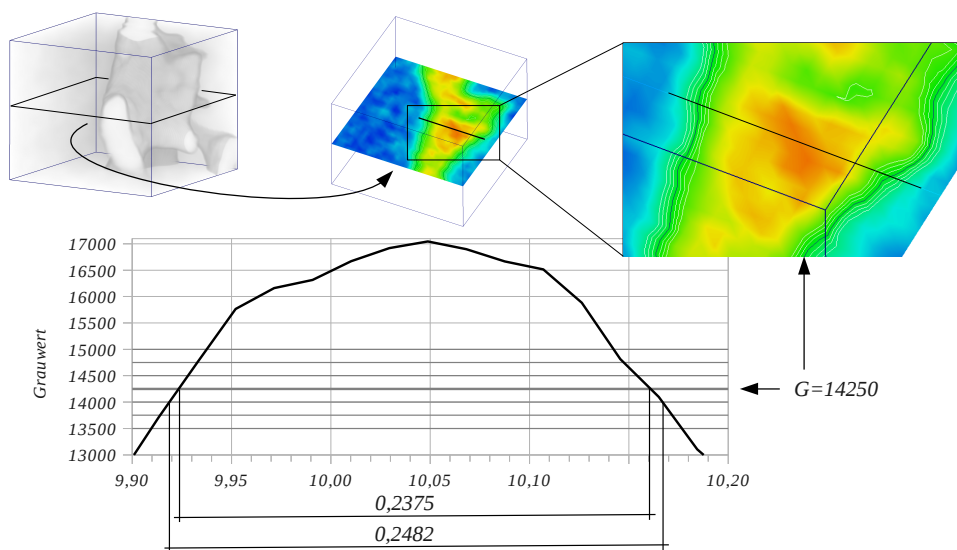


Abb. 4.9: Strukturveränderung bei Variation des Schwellwerts zur Trennung von Markraum und Knochenstruktur

im Bereich von 13500 bis 15000 in Schritten von 250 Grauwerten variiert, und es wurde für alle Schritte sowohl die effektive als auch die effektive numerische Steifigkeit berechnet. Trägt man wie in Abb. 4.10 dargestellt die  $L^2$ -Normen der beiden Steifigkeiten über der Grauwertänderung bzw. der durch die Grauwertänderung hervorgerufenen Volumenänderung auf, so stellt man in beiden Fällen zwischen einem Grauwert von 13500 und 15000 einen annähernd linearen Zusammenhang fest. Die Benutzung von Grauwert oder Volumenänderung spielt hierbei keine Rolle, da auch der Zusammenhang zwischen diesen beiden Größen im betrachteten Bereich linear ist. Dies bedeutet, dass in einer dieser Arbeit folgenden Validierung ein Fehler bei der Schwellwertbestimmung in gewissen Grenzen durch eine lineare Skalierung der Ergebnisse ausgeglichen werden kann.

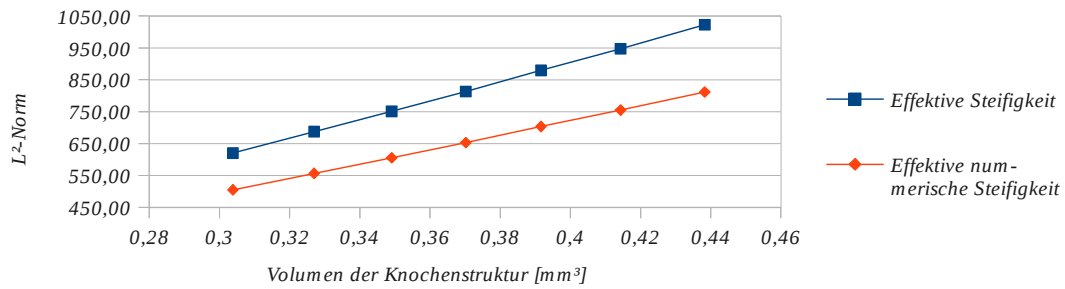


Abb. 4.10:  $L^2$ -Normen von effektiver und effektiver numerischer Steifigkeit aufgetragen über dem Volumen der Knochenstruktur

Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass die hier durchgeführten Betrachtungen wie beschrieben ausschließlich auf der Analyse des  $\mu$ -CT-Datensatzes basieren. Die durchgeführten Untersuchungen müssen zu einer endgültigen Validierung der errechneten Materialparameter messtechnisch überprüft werden. Eine Möglichkeit wäre die mikroskopische Vermessung von entnommenen Proben an Stellen, welche im Datensatz exakt lokalisierbar sind, um die gleichen Stellen in der Modellierung vermessen zu können.

## 4.4. Koordinatenursprung und Datensatztransformationen

Als physikalischer Koordinatenursprung ist in dieser Arbeit der Ursprung des Voxelkoordinatensystems des  $\mu$ -CT Datensatzes festgelegt. Da die Zerlegungen wie in Abschnitt 2.3.4 beschrieben so berechnet werden, dass die minimalen physikalischen Koordinaten immer gleich bleiben, ergeben sich die in Tab. 4.5 aufgeführten Ursprünge der Zerlegungskoordinatensysteme  $x_{Dec,i}^0$ . Diese werden im folgenden benötigt, wenn die Ergebnisfelder der unterschiedlichen Zerlegungen in orthogonalen regulären Gittern aufgetragen und zur Deckung gebracht werden sollen.

Zerlegung	0,6	1,2	2,4	4,8	9,6
$x_{Dec,i}^0$	0,309792	0,609903	1,210125	2,410569	4,811457

Tab. 4.5: Physikalische Ursprünge der Zerlegungskoordinatensysteme der Gesamtzerlegungen

Die Koordinatenursprünge der Voxel- und Zerlegungskoordinatensysteme sowie die minimalen physikalischen Koordinaten der zentralen Gruppe sind in Tab. 4.6 zusammengefasst. In den beiden Tabellen, sind pro Zerlegung und Merkmal jeweils nur ein-

Zerlegung	0,6	1,2	2,4	4,8	9,6
$l_{a,CG,i}^0$	498	498	498	498	498
$\kappa_{CG,i}^0$	16	8	4	2	1
$x_{CG,i}^0$	9,913344	10,213455	10,813677	12,014121	14,415009

Tab. 4.6: Ursprünge der Voxel- und Zerlegungskoordinatensysteme sowie minimale physikalische Koordinaten für die zentrale Gruppe

zelne Werte angegeben da, aufgrund der in der vorliegenden Arbeit durchgeführten Zerlegungen in würfelförmige Teilgebiete, alle Vektorkomponenten der angegebenen Merkmale gleich sind.



---

## 5. Implementierung

In diesem Abschnitt wird die Implementierung der in den vorhergegangenen Kapiteln vorgestellten Methode beschrieben. Die programmiertechnische Umsetzung der Methode erfolgte in Form einer Prozesskette, woraus sich einige Besonderheiten in Bezug auf die verwendeten HPC Ressourcen ergaben. Diese Besonderheiten werden ebenfalls in diesem Abschnitt diskutiert. Zunächst wird jedoch eine Übersicht über die einzelnen Glieder der Prozesskette, deren Interaktionen sowie die parallele Ablaufsteuerung bei der Abarbeitung vieler MVEs gegeben.

### 5.1. Übersicht

Der implementierte Prozess zur Bearbeitung eines einzelnen MVEs gliedert sich in folgende Teile, die jeweils ein eigenständiges Programm darstellen:

- Aufbau der FE-Modelle aus den Volumendaten
- FE-Simulation der benötigten Lastfälle
- Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit

Die Implementierung der einzelnen Prozessglieder wurde in Fortran 2003 vorgenommen. Eine Ausnahme bildet das verwendete FE-Programmpaket, dessen Implementierung von Herrn Dr. Hans Wüstenberg und der LASSO Ingenieurgesellschaft mbH zur Verfügung gestellt wurde. Im Rahmen der Arbeit wurde FMPS durch eine ebenfalls in Fortran 2003 implementierte Ausgabeschnittstelle erweitert.

Die Verkettung der einzelnen Prozessglieder zur Bearbeitung eines MVE wurde mit Hilfe eines Bash-Shellscripts realisiert. Die globale Steuerung des Prozesses, welche die Bearbeitung vieler MVEs regelt, erfolgte in der Basisimplementierung ebenfalls mit Hilfe von Bash-Shell-Scripten. Diese Methode erwies sich jedoch als ineffizient für große MVE Anzahlen, und so wurde eine Prozesssteuerung auf Basis von MPI implementiert.

### 5.1.1. Bearbeitung eines MVE

Ausgang der Bearbeitung eines einzelnen MVE sind  $\mu$ -CT-Volumendaten, welche die zu diskretisierende Geometrie enthalten. Die Geometrieextraktion wird direkt auf den Voxeln der Volumendaten ausgeführt. Dies bedeutet, dass jedes Voxel betrachtet wird und aufgrund seines Grauwertes direkt in ein Finites Element umgeformt oder verworfen wird.

Zu Beginn der Arbeit wurde mit Geometrieextraktion auf Basis eines Advancing-Fronts Algorithmus [56] experimentiert, um glatte Geometrieoberflächen zu erhalten. Die direkte Implementierung des Algorithmus auf einem diskreten Skalarfeld mit Hilfe differentialgeometrischer Größen erwies sich jedoch als enorm aufwändig. Des weiteren wird in [57] gezeigt, dass bei Problemen der vorliegenden Art die Lösung von unstrukturierten Tetraedergittern durch den Einsatz von Hexaedergittern mit wesentlich weniger Freiheitsgraden, d.h. mit wesentlich geringerem Rechenaufwand, erreicht werden kann. Aus diesen Gründen wurde der Ansatz der glatten Geometrieoberflächen verworfen.

Nach der Geometrieextraktion werden im gleichen Programm auch die für die Randbedingungen benötigten Verschiebungsfelder berechnet und an den entsprechenden Knoten des erzeugten FE-Volumenmodells angebracht. Die Ausgabe des Arbeitsschrittes erfolgt ASCII formatiert in einem von FMPS direkt importierbaren Eingabeformat. Es wird eine Modelldatei mit Knoten und Topologieinformationen sowie die benötigte Anzahl von Parameterdateien erzeugt. Die Parameterdateien enthalten neben Steuerparametern für FMPS die Verschiebungsrandbedingungen für jeweils einen Lastfall und eine Importanweisung für die Modelldatei.

Pro Parameterdatei wird eine FE-Simulation durchgeführt. Durch die erwähnte Ausgabeerweiterung von FMPS werden die Ergebnisse aller Simulationen in einem binären Datensatz zusammengefasst.

Aus den Ergebnissen der FE-Simulationen werden im dritten Schritt die effektive numerische Steifigkeit sowie die effektive Elastizitätsmatrix des betrachteten MVEs berechnet. Da sich die Menge der Ausgabedaten des letzten Prozessschrittes in überschaubaren Grenzen hält, erfolgt die Ausgabe sowohl binär als auch ASCII formatiert. In diesem Prozessschritt wird nach der Berechnung der effektiven Elastizitätsmatrix auch noch deren, in Abschnitt 2.1.10 beschriebene, Optimierung durchgeführt, um anschließend etwaige Symmetrien in den Materialeigenschaften erkennen zu können.

Der Ablauf der Bearbeitung eines einzelnen MVE mit den Ausgangs- und Enddaten der drei Prozessschritte ist in Abb. 5.1 dargestellt.



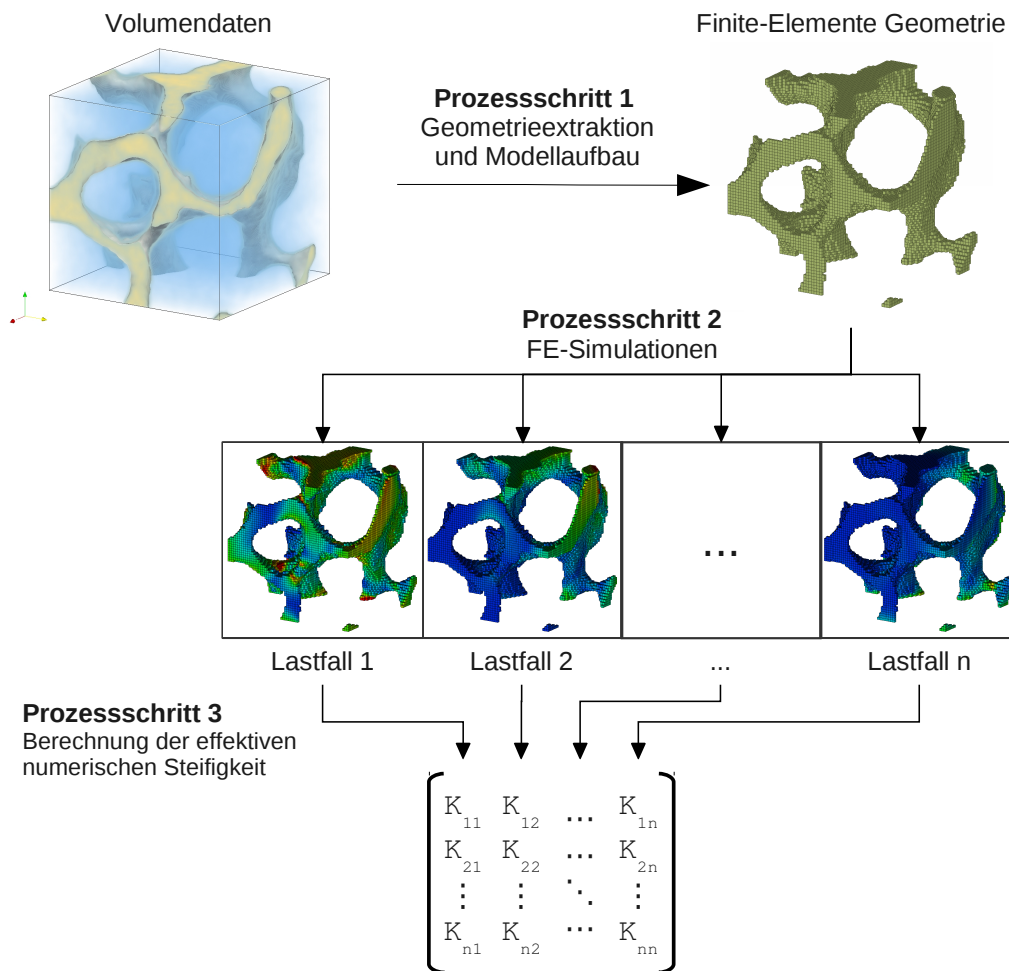


Abb. 5.1: Übersicht der Abarbeitung eines einzelnen MVE

### 5.1.2. Prozesssteuerung

Die Analyse eines einzelnen MVE mit  $0,6\text{ mm}$  Kantenlänge dauerte mit Hilfe der initialen Implementierung ca.  $40\text{ min}$ . Diese Zeit beinhaltet die Geometrieerstellung, 24 FE-Simulationen sowie die Berechnung und Optimierung der effektiven Steifigkeitsmatrix. Da keines der beteiligten Programme intern parallelisiert war, wurde von der Analyse mehrerer MVEs ein linearer Anstieg der Rechenzeit mit der Anzahl der MVEs erwartet. Im konkreten Fall des in dieser Arbeit verwendeten Datensatzes (vgl. Abschnitt 4.3) bedeutet dies, dass 169344 MVEs mit einer Kantenlänge von  $0,6\text{ mm}$  zu einer gesamten Bearbeitungszeit von ca. 8 Jahren auf einem einzelnen Rechenkern führen würden. Eine detailliertere Auswertung dieser Problematik auf ein ganzes Femur extrapoliert ist in Abschnitt 5.1.3.1 zu finden.

Als Lösung des Rechenzeitproblems wurde zunächst nicht die interne Parallelisierung der beteiligten Programme gewählt, da bedingt durch die kurze Laufzeit der 26

Prozessschritte von durchschnittlich 1,5 *min*, in dieser Möglichkeit kein wesentliches Verbesserungspotential gesehen wurde. Dagegen wurde die parallele Bearbeitung vieler MVEs implementiert.

Die Implementierung basiert auf einem Master-Worker Schema, bei dem ein Startprozess einen oder mehrere autonome Masterprozesse startet. Ein einzelner Masterprozess startete auf dem von ihm zu überwachenden Rechenknoten wiederum mehrere Workerprozesse. Wie viele Rechenknoten und wie viele Rechenkerne pro Knoten verwendet werden ist durch den Benutzer festzulegen. Im Falle von mehreren Masterprozessen findet die Arbeitsverteilung unter diesen auf passivem Wege über das Dateisystem statt. Hierbei traversieren alle Masterprozesse einen durch den Startprozess angelegten, binären Verzeichnisbaum. Der am schnellsten in einem Verzeichnis bzw. an einem Arbeitspaket angelangte Masterprozess sperrt dieses mit Hilfe einer atomaren Operation<sup>1</sup> für die anderen Masterprozesse und startet einen Workerprozess. Die Rückmeldung der Workerprozesse an ihren entsprechenden Masterprozess erfolgt ebenfalls über das Dateisystem, indem der Masterprozess das Vorhandensein gewisser Dateien, die von den Workerprozessen verschoben werden, überprüft.

Das Vorgehen erwies sich für den Testdatensatz als praktikabel und konnte auf dem CRAY-XE6-System des HLRS auf mehr als 900 Rechenkerne skaliert werden, wodurch ca. 20000 MVEs des Testdatensatzes in weniger als 12 *Std* bearbeitet werden konnten. Eine weitere Skalierung war jedoch nicht möglich, da mehr als 900 Prozesse der beschriebenen Art das Dateisystem so stark belasteten, dass die Kommunikation der Master- und Workerprozesse nicht mehr schnell genug erfolgen konnte. Dies bedeutet es beendeten mehr Workerprozesse ihre Arbeitspakete, als die Masterprozesse neue Arbeitspakete verteilen konnten, da die Traversierung des Verzeichnisbaumes durch die hohe Belastung des Dateisystems zu langsam erfolgte. Der Effekt ist in Abb. 5.2 zu erkennen, in der die Anzahl der gleichzeitig arbeitenden Workerprozesse über der Prozesszeit aufgetragen ist. Es ist zu erkennen, dass die Sättigung des Systems bei der Verwendung von 3200 Rechenkernen bereits bei etwa 1300 zeitgleich arbeitenden Workerprozessen erreicht war. Bei der Verwendung von nur 1600 Rechenkernen konnten dagegen alle Prozesse mit Arbeit versorgt werden.

Eine mögliche Erklärung für den beobachteten Effekt ist, dass die Beanspruchung der Metadatenserver des angeschlossenen Lustre-Dateisystems durch die Anfragen der Worker und auch der Masterprozesse im Falle von 3200 Rechenkernen so stark steigt, dass die Anzahl der aktiven Prozesse fällt. Es gilt allerdings zu beachten, dass

---

<sup>1</sup>Mit atomaren Operationen sind Operationen gemeint, die nur durch einen Prozess erfolgreich ausgeführt werden können

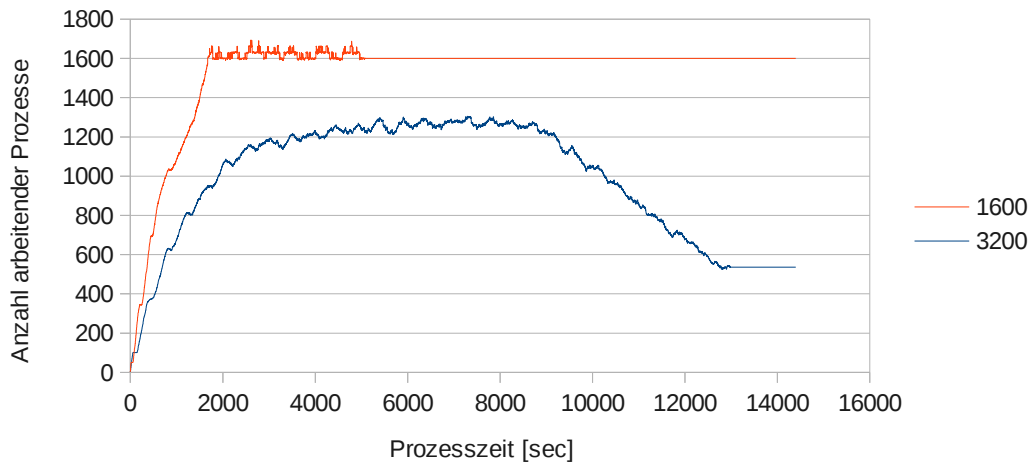


Abb. 5.2: Zeitgleich arbeitende Prozesse bei der Verwendung von 50 Knoten (1600 Rechenkern) und 100 Knoten (3200 Rechenkern) des HLRS CRAY-XE6-Systems

zur Zeit der dargestellten Versuche die Belastung des Dateisystems durch andere Benutzer nicht ermittelt werden konnte, wodurch ebenfalls ein Rückgang der maximal aktiven Prozesse gegenüber 1600 Rechenkern möglich wäre.

Um das Problem der verlangsamten Prozesssteuerung durch hohe Belastung der Metadatenserver zu umgehen, wurde die Prozesssteuerung mit Hilfe des Message-Passing-Interface (MPI) als Fortran Programm reimplementiert.

Ein Nachteil der MPI-parallelen Prozesssteuerung ist jedoch, dass die einzelnen Programme der Prozesskette nicht mehr intern mittels MPI parallelisiert werden können, da aktuell keine MPI-Implementierung verschachtelte Aufrufe von `mpirun` unterstützt. Gleiches gilt für das ALPS System, welches die Bearbeitung paralleler Programme auf den HLRS CRAY Systemen übernimmt [58].

Abhilfe für diesen Zwiespalt würde die vollständige Integration der Prozesssteuerung und der Bearbeitung eines einzelnen MVE bringen. Diese Möglichkeit wurde in dieser Arbeit aus Zeitgründen allerdings nicht mehr realisiert. Stattdessen wurde die MPI-Implementierung der Prozesssteuerung auf dem HLRS CRAY-XE6 System für die MVE Größen  $0,6\text{ mm}$  und  $1,2\text{ mm}$  verwendet und die Prozesssteuerung via Dateisystem, mit PETSc als MPI-parallelem Löser innerhalb von FMPS, diente der Bearbeitung der MVE Größe  $2,4\text{ mm}$  auf dem HLRS NEC-PC-Cluster System.

### 5.1.3. Ressourcenabschätzung

Zu Beginn der Arbeit stand zunächst ein Testdatensatz zur Verfügung, der ein verwendbares Datenvolumen von  $885\text{ mm}^3$  enthielt, welches sich in 512 MVEs der Kan-

tenlänge  $1,2\text{ mm}$  zerlegen ließ. Die erste serielle Implementierung der Prozesskette zeigte bei der Bearbeitung dieses Datensatzes gute Ergebnisse.

Nachdem durch Institut für Bauweisen- und Konstruktionsforschung des DLR in Stuttgart der in Abschnitt 4.3 beschriebene Datensatz eines ganzen Femurkopfes zur Verfügung gestellt wurde, stellte sich jedoch die Frage, ob die vorhandene Implementierung auf den neuen, wesentlich größeren Datensatz bzw. auch auf einen ganzen Knochen übertragbar sei.

Zur Klärung dieser Frage wurde die nachfolgend vorgestellte Ressourcenabschätzung in Bezug auf Rechenzeit und Beanspruchung der verwendeten HPC-Systeme für den Datensatz „Femurkopf“ sowie für eine Extrapolation auf die in Abb. 5.3 dargestellten relevanten Bereiche eines ganzen Femurs vorgenommen.

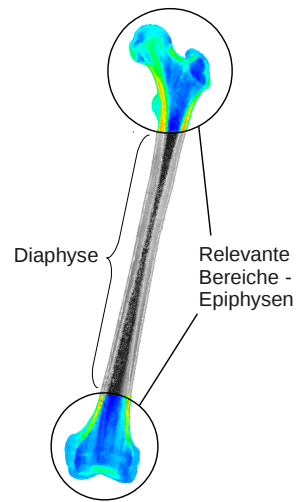


Abb. 5.3: Mit Spongiosa gefüllte relevante Gelenkbereiche eines menschlichen Femurs

Bei einer MVE Kantenlänge von  $0,6\text{ mm}$  ergeben sich bei den beiden Volumina die in Tab. 5.1 angegebenen Verhältnisse.

	<b>Femurkopf</b>	<b>Epiphysen</b>
Kantenlänge MVE [ $mm$ ]	0,6	0,6
Volumen MVE [ $mm$ ]	0,216	0,216
Datenvolumen [ $mm^3$ ]	36578,304	321110
Anzahl von MVEs	169344	1486620
Anzahl von FE-Simulationen zur Berechnung der effektiven Steifigkeit	1016064	8919720
Anzahl von FE-Simulationen zur Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit	4064256	35678880

Tab. 5.1: Maximale bzw. geschätzte Anzahl von MVEs und daraus resultierenden FE-Simulationen für den Datensatz „Femurkopf“ und den Datenbereich „Epiphysen“

### 5.1.3.1. Rechenzeit

Die durchschnittlich benötigte Bearbeitungszeit eines MVE mit  $0,6\text{ mm}$  Kantenlänge auf einem Rechenkern des HLRS-CRAY-XE6 Systems betrug ca.  $25\text{ min}$ . Dabei entfielen die in Tabelle Tab. 5.2 angegebenen Anteile auf die entsprechenden Prozessschritte. Daraus ergibt sich für die Analyse des gesamten Datensatzes „Femurkopf“ die angestrebte Bearbeitungszeit von ca.  $12\text{h}$  bei einer Parallelisierung des Prozesses mit 5880 Rechenkernen. Für den Datenbereich „Epiphysen“ würde sich bei der vollständigen Verwendung des HLRS-CRAY-XE6 Systems mit 113664 Rechenkernen eine Bearbeitungszeit von ca.  $130\text{ Std}$  ergeben.

Prozessteil	Rechenzeit [sec]
Geometrieextraktion und Modellaufbau	$\approx 10$
FE-Simulationen	$\approx 1480$
Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit	$\approx 10$

Tab. 5.2: Serielle Rechenzeiten bei der Abarbeitung eines einzelnen MVE

### 5.1.3.2. Ein-/ Ausgabesysteme

Durch die Implementierung in Form einer Prozesskette und nicht in Form eines integrierten Programms muss die Datenübergabe zwischen den einzelnen Prozessteilen über das Dateisystem erfolgen. Betrachtet man zunächst die Dateianzahl, die bei der Bearbeitung eines einzelnen MVE entsteht, so kommt man auf die in Tab. 5.3 dargestellten Verhältnisse. Hier ist zunächst die ursprüngliche FMPS Implementierung sowie die minimale zur Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit notwendige Anzahl von 24 FE-Simulationen zu Grunde gelegt. Hierbei sei erwähnt, dass die ursprüngliche Implementierung von FMPS in Bezug auf die erzeugte Anzahl von Dateien während einer Simulation mit anderen Standard FE-Paketen äquivalent ist bzw. eher weniger Dateien generiert.

Insgesamt wurden bei der ersten Implementierung zur Bearbeitung eines MVE 174 Dateien angelegt und 54 Dateien eingelesen. Multipliziert man diese Zahlen mit der in Tab. 5.1 angegebenen Anzahl von MVEs so stellt man fest, dass die Bearbeitung des Datensatzes „Femurkopf“ maximal ca. 29,466 Millionen Dateien erzeugen würde. Die Berechnung anisotroper Materialdaten für die gesamten Epiphysenbereiche eines Femurs mit einer Auflösung von  $0,6\text{ mm}$  würde über 258 Millionen Dateien generieren.

Diese Zahlen sind aus der Sicht von High-Performance Ein- Ausgabesystem (E/A-System) zwar nicht mehr zu vernachlässigen, jedoch überfordert die pure Anzahl

Prozessteil	# Eingabedateien	# Ausgabedateien
Geometrieextraktion und Modellaufbau	3	26
FE-Simulationen	26	144
Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit	25	1

Tab. 5.3: Anzahl benötigter Dateien pro Prozessschritt während der Bearbeitung eines MVE

moderne Cluster-Dateisysteme wie beispielsweise Lustre oder GPFS nicht [59, 60].

Ein Problem, welches durch die pure Anzahl von Dateien verursacht wird, tritt bei deren Archivierung auf. Müssen die Daten beispielsweise zum Transfer zu einem Archiv gepackt werden, so kann dies nicht mehr mit dem aus der Unix/Linux Umgebung bekannten Befehl `tar` geschehen, da dieser von nur einem Rechenkern aus operiert. Obwohl moderne High-Performance E/A-Systeme mühelos mehrere zehntausend Dateioperationen pro Sekunde durchführen können, ist diese Leistung nur mit paralleler E/A von vielen Rechenkernen gleichzeitig zu erzielen. Im Verlauf der Arbeit durchgeführte Versuche ergaben, dass ein einzelner Rechenkern des HLRS CRAY-XE6 Systems pro Sekunde ca. 30 Dateien der erzeugten Ergebnisdaten in ein `tar` Archiv verschieben kann. Dividiert man die Anzahl generierter Dateien durch die Anzahl der möglichen Archivierungen pro Sekunde, so erhält man die zum Archivieren der gesamten Ergebnisdaten mit Hilfe von `tar` benötigte Zeit von ca. 11 Tagen für den Datensatz „Femurkopf“. Die Schätzung für den Datenbereich „Epiphysen“ beläuft sich auf ca. 100 Tage.

Aus diesen Zahlen wird klar, dass die Anzahl der durch die ursprüngliche Implementierung generierten Dateien pro MVE signifikant reduziert werden musste. Dies gelang durch die Verwendung des im Rahmen der Arbeit implementierten und in Abschnitt 5.2.1 beschriebenen Datenformates *PureDat* innerhalb von FMPS. Durch die Möglichkeit, die Ergebnisse mehrerer unabhängiger FE-Simulationen in der selben Datenstruktur d.h. den selben Dateien abzuspeichern, werden in der aktuellen Implementierung nur noch 38 Dateien generiert. Die so auf ein Fünftel reduzierte Anzahl von Dateien des Testdatensatzes „Femurkopf“ ließ sich mit dem im Rahmen der Arbeit entwickelten, parallelen Archivierungsalgorithmus (vgl. Abschnitt 5.5) in weniger als 3 *Std* mit Hilfe von 128 Rechenkernen in eine *PureDat* Datenstruktur archivieren.

Eine weitere Größe, der es Beachtung zu schenken gilt, ist die geschätzte Größe der Ausgabedaten, die nach Bearbeitung eines Datenvolumens dauerhaft auf den Ein-

Ausgabesystemen gespeichert werden soll. Der durchschnittliche Wert der ersten Implementierung betrug ca.  $0,58\text{ GB}$ . Daraus ergibt sich für den Datensatz „Femurkopf“ ein maximaler Speicherbedarf auf den E/A-Systemen von ca.  $98\text{ TB}$ . Für die Epiphysenbereiche eines Femurs müssten geschätzte  $860\text{ TB}$  Daten gespeichert werden. Da diese beiden Werte ebenfalls keine zu vernachlässigenden Größen mehr darstellen, wurde im Verlauf der Arbeit auch die Menge der dauerhaft abzuspeichernden Daten optimiert, so dass das abgespeicherte Datenvolumen einer Analyse des Testdatensatzes „Femurkopf“ aktuell ca.  $6,4\text{ TB}$  beträgt. Hierbei gilt es anzumerken, dass diese Datenmenge von der Zerlegungsgröße unabhängig ist, da die Menge der Struktur und damit die Menge der FEs im analysierten Datensatz konstant, d.h. ebenfalls unabhängig von der Zerlegungsgröße ist.

### 5.1.3.3. Datenraten

Kombiniert man die Schätzungen der beiden vorangegangenen Abschnitte so kann man die entstehende Belastung der E/A-Systeme und des Netzwerkes in Bezug auf die auftretenden Datenraten abschätzen.

Ausgangspunkt ist hierbei die Anforderung, den betrachteten Datensatz in  $12\text{ Std}$  bearbeiten zu können. Um diese Anforderung zu erfüllen, müsste der „Femurkopf“ mit  $5880$  Rechenkernen parallel bearbeitet werden.

Die mittlere, durch die Bearbeitung eines einzelnen MVE generierte Datenrate ist  $\approx 0,054\frac{\text{MB}}{\text{sec}}$ . Dieser Wert ergibt sich aus den erzeugten Daten von  $\approx 41\text{ MB}$  sowie die im Verlauf des Prozesses wieder eingelesenen Daten von  $\approx 40\text{ MB}$  dividiert durch die mittlere Bearbeitungszeit eines MVE von ca.  $25\text{ min}$ . Geht man von einer Rechenknotenkonfiguration wie der des HLRS CRAY-XE6-Systems mit  $32$  Rechenkernen aus, so erzeugt ein Rechenknoten einen Datenstrom von durchschnittlich  $\approx 1,73\frac{\text{MB}}{\text{sec}}$ . Dieser Wert stellt nur einen Bruchteil der maximal möglichen Datenübertragungsrates eines CRAY Gemini Netzwerkes dar, woraus zu folgern ist, dass aus Sicht des Netzwerkes mit der aktuellen Implementierung keine Ressourcenprobleme zu erwarten sind.

Akkumuliert über den gesamten parallelen Prozess ergeben sich die benötigten E/A-Transferraten von  $\approx 318\frac{\text{MB}}{\text{sec}}$  für den „Femurkopf“ und  $\approx 6138\frac{\text{MB}}{\text{sec}}$  für die Epiphysenbereiche eines menschlichen Femurs. Geht man von der Dateisystemkonfiguration des HLRS-CRAY-XE6 Systems aus, deren E/A-Performance mit  $\approx 150\frac{\text{GB}}{\text{sec}}$  angegeben wird, so sind mit der aktuellen Implementierung auch aus dieser Richtung keine Probleme zu erwarten.

Es sei hier jedoch nochmals erwähnt, dass wie bereits in Abschnitt 5.1.2 ausgeführt

und durch Abb. 5.2 gezeigt, nicht die pure Datenübertragungsrage in und aus dem Dateisystem der limitierende Faktor in der möglichen Parallelisierbarkeit der hier vorgestellten Art von Prozessen ist. Viel eher wird die massiv parallele Bearbeitung vieler eigenständiger Programme aufgrund der Überlastung der Metadatenserver durch die enorme Anzahl von benötigten Dateizugriffen pro Sekunde behindert.

## 5.2. Datenübergabe und Datenspeicherung

Wie die im vorangegangenen Abschnitt erfolgte Ressourcenabschätzung deutlich gemacht hat, führte die ursprüngliche Implementierung der Prozesskette zu einer nicht unerheblichen Belastung der E/A-Systeme. Versuche auf dem HLRS PC-Cluster System ergaben, dass die Implementierung im Produktionsbetrieb auf nicht mehr als 128 Rechenkerne skaliert werden konnte. Die Verwendung von mehr Rechenkernen belastete die Metadatenserver des angeschlossenen Lustre Dateisystems so stark, dass dies die E/A des gesamten Systems massiv störte. Auf dem moderneren CRAY-XE6 System des HLRS trat das Problem wie oben beschrieben erst bei größeren Rechenkernanzahlen, jedoch in gleicher Form auf.

Aufgrund der durchgeführten Abschätzungen und der Ergebnisse der, mit der ursprünglichen Implementierung durchgeführten, Testläufe wurde ein einfaches binäres Datenformat entwickelt, welches es ermöglicht die Ergebnisdaten der Prozesskette in platzsparender und neutraler Form auf einem Dateisystem abzulegen und auch wieder von diesem zu lesen. Insbesondere kann durch die Verwendung des Formates die Anzahl von erzeugten Dateien minimiert und die benötigte Anzahl von programminternen Schreib- und Leseoperationen reduziert werden.

Die detaillierte Beschreibung des Datenformates sowie die Beschreibung der Datenkommunikation zwischen den an der Bearbeitung eines MVEs beteiligten Programmen ist Gegenstand dieses Abschnittes.

### 5.2.1. Das Datenformat *PureDat*

Der Grundgedanke bei der Entwicklung des Datenformates war, die Trennung der einzelnen Datentypen im Speicher, beim Ablegen der Daten auf Speichermedien bzw. bei der Kommunikation der Daten, beizubehalten und so die Anzahl der zum Lesen und Schreiben bzw. zum Versenden benötigten Betriebssystem- und Bibliotheksaufrufe möglichst zu minimieren. Des weiteren war das Ziel die Datenblöcke nicht durch Metadaten zu unterbrechen, die deren Art und Lokation angeben. Hierbei ist ein weiterer Grundsatz, das Wissen um die Größe zu verwaltender Datenblöcke vollständig



auszunutzen und dieses Wissen dem verwendenden Programm unabhängig von den eigentlichen Daten, d.h. unabhängig von den E/A-Operationen auf die eigentlichen Daten, verfügbar zu machen.

Der erste Grundgedanke wird durch die Verwendung von gegenwärtig 6 Datentypen realisiert, welche sich durch die Verwendung von *PureDat* bei der Entwicklung und Implementierung der beschriebenen Prozesskette ergaben. Das Konzept ist jedoch auch auf die Verwendung weiterer Datentypen erweiterbar.

1. Vorzeichenbehaftete Ganzzahlen der Länge 1 Byte
2. Vorzeichenbehaftete Ganzzahlen der Länge 2 Byte
3. Vorzeichenbehaftete Ganzzahlen der Länge 4 Byte
4. Vorzeichenbehaftete Ganzzahlen der Länge 8 Byte
5. Gleitkommazahlen der Länge 8 Byte
6. ASCII Daten der Länge 1 Byte

Dies bedeutet, dass Daten auf einem Datenträger in 6 Dateien entsprechend ihres Typs und nicht wie allgemein üblich entsprechend ihrer Art gespeichert werden. Das Ziel bei diesem Vorgehen ist, alle Daten entsprechend ihrer natürlichen Organisation innerhalb von Datenfeldern auf den Datenträgern abzulegen und ein Mischen von Datentypen zu vermeiden. Dateien, die alle Datenblöcke eines Datentyps enthalten wollen wir im folgenden Streams nennen.

Ein Beispiel ist die Abspeicherung einer Knotenliste bestehend aus Knotennummern und Knotenkoordinaten. Hierfür sind im günstigsten Fall 3 Schreiboperationen nötig, eine für die Liste der externen Knotennummern, eine für die Liste der Knotenkoordinaten und eine für die Anzahl der Knoten. Die dritte Schreiboperation kann entfallen, wenn die Anzahl der Listenelemente in der Datenbeschreibung explizit mitgeführt wird.

Im Gegensatz zu diesem Vorgehen werden in den meisten Datenformaten im Wechsel die Knotennummer als Ganzzahl und direkt anschließend die Knotenkoordinaten als Gleitkommazahlen abgelegt. Beim Einlesen oder Schreiben einer solchen Speicherung müssen zwangsläufig, wiederum im Wechsel, kleine Datenblöcke aus Ganzzahlen und Gleitkommazahlen gelesen werden, wofür je nach Länge der Liste mehrere Hunderttausend bis Millionen von Betriebssystemaufrufen benötigt werden.

## 5.2.2. Datenstrukturierung mit *PureDat*

Um die Position einzelner Datenblöcke innerhalb der Streams zu verwalten und eine Strukturierung der Daten zu ermöglichen, werden zwei Strukturdatentypen verwendet, aus welchen ein gewurzelter, allgemeiner Baum gebildet werden kann, der an unterschiedlichen Stellen Daten aufnehmen kann. Die Beschreibung der Datenlokation wird sowohl im Speicher als auch auf dem Dateisystem separat von den eigentlichen Daten gehalten.

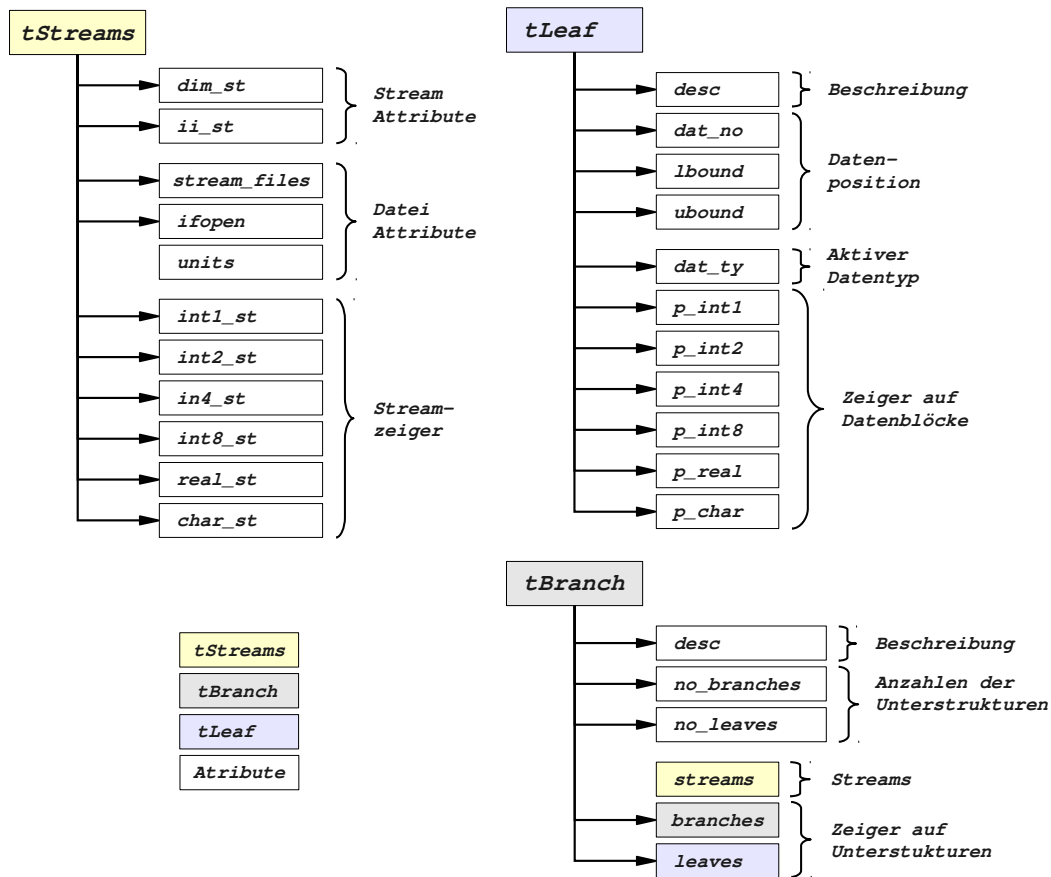


Abb. 5.4: *PureDat* Strukturdatentypen mit ihren Attributen

### 5.2.2.1. tBranch

Der rekursive Typ `tBranch` bildet Wurzel und Zweige des *PureDat* Strukturbaumes. Als Attribute enthält er in `desc` eine Beschreibung seines Inhaltes, die Anzahlen der untergeordneten Zweige und Blätter in `no_branches` und `no_leaves` sowie die Zeiger `branches` und `leaves` der Dimension `no_branches` bzw. `no_leaves` auf die ihm untergeordneten Baumstrukturen. Hierbei müssen nicht notwendigerweise beide Strukturen vorhanden sein.

Da ein Ziel bei der Implementierung des Datenformates war, falls nötig die Anzahl der benötigten E/A-Systemaufrufe zu minimieren, enthält `tBranch` das allozierbare Attribut `streams` vom Typ `tStreams`, welches beim Zurücklesen des Datenformates von einem E/A-System in den Speicher die eigentlichen Daten aufnehmen kann.

#### 5.2.2.2. `tStreams`

Der Typ `tStreams` enthält die zur Datenspeicherung verwendeten Felder

- `Integer(kind=1), dimension(:), pointer int1_st`
- `Integer(kind=2), dimension(:), pointer int2_st`
- `Integer(kind=4), dimension(:), pointer int4_st`
- `Integer(kind=8), dimension(:), pointer int8_st`
- `Real(kind=8)     , dimension(:), pointer real8_st`
- `Character         , dimension(:), pointer char_st`

sowie deren aktuelle Größe im Attribut `dim_st`. Werden die Streams im Dateisystem abgelegt bzw. sollen davon gelesen werden, so werden die benötigten Informationen darüber in folgenden Attributen von `tStreams` gespeichert:

- `stream_files`: Dateinamen der Streamdateien
- `ifopen`: Marker ob Streamdateien geöffnet sind oder nicht
- `units`: Fortran Unit Nummern der Streamdateien

Ein weiteres Attribut der Streams, welches in `tStreams` mitgeführt wird, ist `ii_st`. Es kann als Indexzeiger für die einzelnen Streams verwendet werden.

#### 5.2.2.3. `tLeaf`

Um die Position der Datenabschnitte innerhalb der Streams zu beschreiben, wird der nicht rekursive Datentyp `tLeaf` verwendet. Er dient der Speicherung der tatsächlichen Position eines Datenblocks innerhalb des seinem Datentyp entsprechenden Streams. Er besitzt wie auch die beiden anderen Strukturdatentypen das Attribut `desc` zur Beschreibung seines Inhaltes. Die tatsächliche Position des Datenblocks wird eindeutig durch die Attribute

- `dat_no` : Anzahl der Datenelemente

- `lbound` : unterere Stream-Indexgrenze

beschrieben. Das zusätzliche Attribut `ubound`, welches die obere Indexgrenze innerhalb des entsprechenden Streams angibt, wird mitgeführt, um wiederholte Berechnungen bei der dynamischen Speicherreservierung und der Angabe von Schleifenindizes zu vermeiden.

Der Typ `tLeaf` verfügt wie in Abb. 5.4 zu sehen über die gleiche Anzahl von Streamzeigern wie Streams in `tStreams` vorhanden sind. Da pro Blatt jedoch nur die Position eines Datenblocks innerhalb seines Streams abgespeichert wird, ist das Attribut `dat_ty` vorhanden, welches den jeweils aktiven Datentyp und Streamzeiger für das Blatt, entsprechend der in Abschnitt 5.2.1 angegebenen Nummerierung der Streams, markiert.

#### 5.2.2.4. Mögliche Operationen mit *PureDat*

Innerhalb einer Prozesskette, in der Daten zwischen einzelnen Applikationen mit Hilfe des Dateisystems übertragen werden, gibt es zahlreiche denkbare Möglichkeiten die Daten mit Hilfe eines Datenformates zu behandeln. So ist zunächst beim Anlegen des Datenformates bzw. dem Abspeichern der Daten auf einem E/A-System eine Strukturierung wünschenswert, welche die Benutzung der Daten in den zu verbindenden Applikationen im Ganzen oder auch nur teilweise ermöglicht.

Die Strukturierung der Daten erfolgt bei *PureDat* mit Hilfe eines Strukturbaumes. Um diesen aufzubauen sind die folgenden Strukturoperationen vorhanden:

- Baum initialisieren - `raise_tree`
- Zweig initialisieren - `raise_branch`
- Blätter eines Zweigs initialisieren - `raise_leaves`
- Blatt zu Zweig hinzufügen - `add_leaf_to_Branch`
- Zweig zu Zweig hinzufügen - `add_branch_to_Branch`
- Blattzeiger mit Streams verbinden - `connect_pointers`

Um die zum Strukturbaum gehörenden Streamdateien zu öffnen bzw. zu schließen, sind die folgenden Dateioperationen vorhanden:

- Öffnen der Stream Dateien - `open_stream_files`
- Schließen der Stream Dateien - `close_stream_files`

Um Daten entsprechend der aufgebauten Struktur auf einem E/A-System abzulegen, ist eine Speicheroperation vorhanden:

- Speichern eines Datenfeldes auf einem E/A-System und mitführen der entsprechenden Blattattribute - `pd_store`

Da wie bereits erwähnt, die Datenbeschreibung vollständig getrennt von den eigentlichen Daten gehalten wird, ist neben der Speicheroperation für Daten auch eine Speicheroperation für die Datenbeschreibung vorhanden.

- Speichern der Datenbeschreibung auf einem E/A-System - `write_tree`

Soll eine Applikation auf Daten, die in *PureDat*-Beschreibung auf einem E/A-System abgelegt sind, zugreifen, so sind die folgenden Leseoperationen zum Laden von Daten von einem E-/A-System vorhanden:

- Lesen eines ganzen Strukturbaumes - `read_tree`
- Lesen der Streamdateien eines Zweigs - `read_streams`
- Lesen von Daten eines einzelnen Blattes - `pd_load_leaf`, `pd_read_leaf`

Wird eine *PureDat* Datenbeschreibung vollständig verwendet, d.h. es werden sowohl der Strukturbaum als auch die vollständigen Streamdateien vom E/A-System geladen, so kann es bei der Entwicklung einer Applikation hilfreich sein, wenn eine Operation zum kopieren von Daten aus der Datenbeschreibung auf Datenfelder intrinsischer Datentypen zur Verfügung steht.

- Kopieren von Daten eines einzelnen Blattes aus dem Arbeitsspeicher - `pd_get`

Es sind somit drei Methoden für den Zugriff auf Daten eines einzelnen Blattes implementiert. Inwiefern sich diese unterscheiden bzw. wie sie bei typischen Anwendungsfällen innerhalb einer Simulationsprozesskette zum Einsatz kommen, wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

### 5.2.3. Applikation von *PureDat*

In diesem Abschnitt wird die Applikation von *PureDat* an Hand von Szenarien erläutert, die bei der Implementierung der Prozesskette auftraten. Die Szenarien sind jedoch nicht für die Prozesskette spezifisch zu sehen sondern prototypisch für viele CAE und Simulationsprozesse. Hierbei sind insbesondere solche Prozesse gemeint, welche die vielfache<sup>2</sup>,parallele Ausführung von Simulationen oder Applikationen mit geringem Ressourcenbedarf der einzelnen Applikation nötig machen. Ein

---

<sup>2</sup>vielfache Ausführung bedeutet in diesem Zusammenhang mehrere zehntausend- bis millionenfache Ausführung

weiterer Anwendungsfall neben der implementierten Prozesskette wäre beispielsweise die hochdimensionale Optimierung mit Hilfe genetischer Algorithmen.

### 5.2.3.1. Abspeichern von Daten auf einem E/A-System in *PureDat* Formatierung Beispiel: FEM Simulation

Im Verlauf der Arbeit wurde das verwendete FEM Paket FMPS durch ein *PureDat*-Ausgabemodul erweitert. Die Ausgabe der Simulationsergebnisse soll hier als Beispiel für den Aufbau eines *PureDat*-Strukturbaumes bzw. die Abspeicherung von Daten im *PureDat*-Format dienen. Der Datenbaum beschreibt in diesem Falle die Position der Daten auf dem E/A-System ohne selbst Daten zu speichern. Dieses Vorgehen ist bei der Erweiterung eines bestehenden Programms sinnvoll, da hier zum Zeitpunkt der Ausgabe bereits alle Daten im Speicher angelegt sind und die Benutzung der Streams lediglich zu unnützer Datenvervielfachung durch Speicherkopien führen würde.

Die Ausgangssituation sei das Szenario einer statischen, nichtlinearen FEM Berechnung einer Volumenstruktur bestehend aus zwei Elementtypen. Die Eingabedaten seien vollständig geladen, und die Ausgabeanweisung beinhalte das Berechnungsgitter.

Um einen *PureDat*-Strukturbaum anzulegen, muss nun zunächst dessen Wurzel mit Hilfe der folgenden Subroutine initialisiert werden.

```
subroutine puredat::raise_tree (  
    Character(len=*), intent(in)    desc,  
    Type(tBranch)    , intent(out)  tree  
)
```

Dies geschieht auf Basis der globalen Variablen `pro_path` und `pro_name`, durch die ohne vorhandenen Strukturbaum die Pfade zu den Streamdateien festgelegt werden. Die beiden Variablen sind im Fortran Module `puredat_globals`, welches vom Module `puredat` eingebunden wird, enthalten und sind so bei Benutzung von *PureDat* global verfügbar.

Nach der Initialisierung der Wurzel des Baums müssen die strukturbildenden Zweige angelegt werden. Zu diesem Zweck ist die Subroutine `raise_branch` vorgesehen.

```
subroutine puredat::raise_branch (  
    Character(Len=*)    , intent(in)    desc    ,  
    Integer(Kind=pd_ik), intent(in)    no_branches ,  
    Integer(Kind=pd_ik), intent(in)    no_leaves ,
```

```

    Type(tBranch)      , intent(inout)  branch
)

```

In der hier betrachteten Situation ist die Elementdefinition ein Beispiel für einen Zweig mit Subzweigen und Blättern. Die Elementgruppen werden dabei in Subzweigen abgelegt, während die Informationen über die Gruppen in Blättern der Elementdefinition gespeichert werden.

Die Struktur besteht aus 2 Elementtypen, Hexaedern und Pentaedern. Dies bedeutet es werden 2 Zweige zur Speicherung der Elementgruppen und ein Blatt zur Speicherung von deren Elementtypen verwendet. Zur Speicherung der Elementgruppen werden Zweige verwendet, da die Beschreibung einer Gruppe aus der externen Elementnummernliste sowie der Liste der Elementkonnektivität besteht und so eine weitere Strukturierung sinnvoll ist.

Um die beschriebene Struktur zu erzeugen, würde die Funktion `raise_branch` in folgender Weise auf den für die Elementdefinition vorgesehenen Zweig angewandt:

```

Call raise_branch("Elementdefinition", 2, 1, Type(tBranch) branch_eldef)
Call raise_branch("Gruppe 1", 0, 2, branch_eldef%branches(1))
Call raise_branch("Gruppe 2", 0, 2, branch_eldef%branches(2))

```

Woraus sich die in Abb. 5.5 gezeigte Struktur ergeben würde:

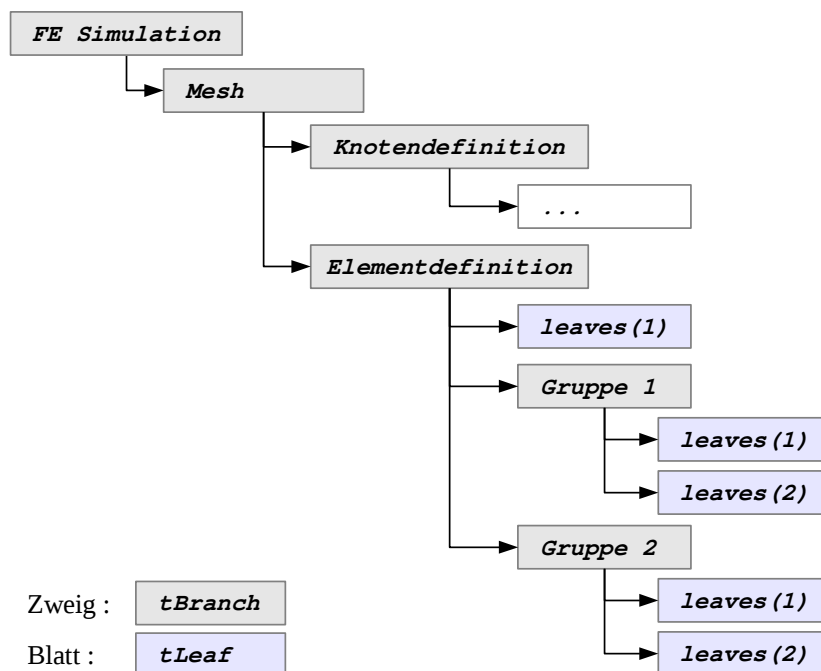


Abb. 5.5: *PureDat* Strukturbaum zur Speicherung eines einfachen FE-Berechnungsgitters

Vor dem Speichern der Daten müssen nun die entsprechenden Blätter des Baumes initialisiert werden. Dies geschieht mit Hilfe der Subroutine `raise_leaves`

```
subroutine puredat::raise_leaves (
    Integer,                                intent(in)    no_leaves ,
    Character(Len=*),    dimension(no_leaves), intent(in)    desc      ,
    Integer(Kind=1),    dimension(no_leaves), intent(in)    dat_ty   ,
    Integer(Kind=pd_ik), dimension(no_leaves), intent(in)    dat_no   ,
    Integer(Kind=pd_ik), dimension(no_leaves), intent(in)    , &
                                                optional    lb      ,
    Integer(Kind=pd_ik), dimension(no_leaves), intent(in)    , &
                                                optional    ub      ,
    Type(tBranch),                                intent(inout) branch  )
```

Wie zu erkennen ist, sind die beiden Parameter `ub` und `lb` optional und brauchen im Normalfall bei der Initialisierung der Blätter nicht explizit angegeben zu werden, da die Indexgrenzen der Datenabschnitte bei Verwendung der Subroutine `pd_store` automatisch gesetzt werden.

```
subroutine puredat::pd_store (
    Type(tStreams)                                intent(inout)    streams,
    Type(tBranch),                                intent(inout)    branch,
    Character(Len=*),                                intent(in)        desc,
    PD_STREAM_TYPE , dimension(*), intent(in),    target    values
)
)
```

Bei `pd_store` handelt es sich um eine überladene Subroutine, die für `PD_STREAM_TYPE` einen der in Abschnitt 5.2.1 angegebenen Datentypen aufnehmen kann. Dies bedeutet, dass neben dem Setzen der Indexgrenzen auch die entsprechende Stream Datei, in die der Datenabschnitt geschrieben wird, aufgrund des übergebenen Datentyps gewählt wird. Es sei hierbei angemerkt, dass das an `pd_store` übergebene Feld mit einer einzigen E/A-Anweisung geschrieben wird.

Nachdem die Eingabedaten geladen sind und das Gitter gespeichert ist, wird der lineare Berechnungsschritt ausgeführt. Die Ausgabeanweisung enthalte die Verschiebungen als Knotenergebnisse und den vollständigen Dehnungs- und Spannungstensor als Elementergebnis. Für diesen Fall sind die Subroutinen `add_branch_to_branch` und `add_leaf_to_branch` vorhanden.

```
subroutine puredat::add_leaf_to_branch (
    Type(tBranch), intent(inout)    t_b
)
)
```



```

subroutine puredat::add_branch_to_branch (
  Type(tBranch), intent(inout)  t_b
)

```

Wie an den Namen zu erkennen, können mit Hilfe der beiden Subroutinen Zweige und Blätter in eine vorhandenen Struktur eingefügt werden. Wollte man im vorgestellten Beispiel die Ergebnisse in einem Zweig, getrennt vom Berechnungsgitter, abspeichern, so würde man zunächst die Routine `add_branch_to_branch` auf die Wurzel des Baumes anwenden, um dann wieder die Sequenz `raise_branch`, `raise_leaves`, und `pd_store` zu rufen.

### 5.2.3.2. Verwenden des Datenformates in einer Applikation

Das zweite denkbare Szenario bei der Ein- und Ausgabe von Simulationsergebnissen ist die Verwendung der durch eine Applikation abgelegten Daten durch eine weitere Applikation, die zum Beispiel einen Postprocessing-Schritt durchführt. Wie oben erwähnt, war ein Grundgedanke die Information über Größe und Art der Daten dem verwendenden Programm, unabhängig von den eigentlichen Daten, zur Verfügung zu stellen. Dies kann mit Hilfe der Funktion `read_tree` geschehen.

```

Type(tTree) function puredat::read_tree ( )

```

Wie zu erkennen ist, benötigt die Funktion keine Parameter. Die zu lesende Datenbeschreibung wird wiederum durch die globalen Variablen `pro_path` und `pro_name` des Moduls `puredat_globals` selektiert. Nun sind der verwendenden Applikation die Lage und Art aller Daten bekannt, und es können wahlweise die gesamten Stream Dateien oder nur einzelne benötigte Datenblöcke gelesen werden. Um bei stark verzweigten Datenstrukturen einfachen Zugriff auf einzelne Zweige und Blätter zu erhalten, stehen die Subroutinen `search_branch` und `search_leaf` zur Verfügung, die `tBranch` Strukturen durch vollen lexikalischen Vergleich der Attribute `desc` nach `tBranch` bzw. `tLeaf` Strukturen durchsuchen.

```

recursive subroutine puredat::Search_branch (
  Character(len=*), intent(in)          descr,
  Type(tBranch),   intent(in)  , target branch,
  Type(tBranch),   intent(out) , pointer out_branch,
  Logical,         intent(inout)      success
)

```

```

recursive subroutine puredat::Search_leaf (
  Character(len=*), intent(in)          descr,

```

```

    Type(tBranch),      intent(in)   , target   branch,
    Type(tleaf),        intent(out)  , pointer  out_leaf,
    Logical,            intent(inout)                success
)

```

Beide Subroutinen liefern Zeiger auf eine gefundene `tBranch` bzw. `tLeaf` Struktur zurück, die das einfache Ansprechen eines Datenblockes innerhalb der Applikation erlauben. Für den Fall, dass Blätter mehrfach in einer Datenstruktur auftauchen, sind die Subroutinen `get_leaf_num` und `get_leaf_list` vorhanden.

```

recursive subroutine puredat::get_leaf_num (
    Character(len=*),      intent(in)      descr,
    Type(tBranch)         , intent(in)      branch,
    Integer(kind=pd_ik),   intent(inout)    num
)

```

`get_leaf_num` gibt dabei die Anzahl von gefundenen Blättern zurück, bei welchen das Attribut `desc` mit dem gesuchten übereinstimmt.

```

recursive subroutine puredat::get_leaf_list (
    Character(len=*),      intent(in)      descr,
    Type(tBranch),        intent(in)      branch,
    Integer(kind=pd_ik),   intent(in)      leaf_num,
    Integer(kind=pd_ik),   intent(inout)   leaf_count,
    Type(tLeaf),          dimension(leaf_num), intent(inout) leaf_list
)

```

`get_leaf_list` liefert eine Liste vom Typ `tLeaf` zurück, die alle Blätter enthält, bei welchen das Attribut `desc` mit dem gesuchten übereinstimmt. Ein solcher Fall tritt beispielsweise auf, wenn im Verlauf einer transienten oder nichtlinearen Berechnung im Ergebniszweig mehrere Zeit- bzw. Lastschritte gespeichert werden, die alle jeweils ein Blatt mit Verschiebungen enthalten und diese Blätter alle das gleiche Attribut `desc` besitzen.

Zusammengefasst sind für den Zugriff auf Daten eines Blattes innerhalb einer verwendenden Applikation die folgenden Operationen vorgesehen:

- Leaf load : Dies bedeutet ein Feld intrinsischen Datentyps wird in der korrekten Größe alloziert, und die Daten werden von einem E/A-System gelesen. Das Blatt wird hierbei über lexikalischen Vergleich des Attributes `desc` selektiert.

```

Intrinsic Type, Dimension(:), Allocatable :: data
Type(tBranch)                               :: root

```

```

...
tree = read_tree()
call open_stream_files(tree,"read","old")
call pd_load_leaf(tree%streams,tree,"description",data)
call close_stream_files(tree)

```

- Leaf read : Dies bedeutet, dass die Daten von einem E/A-System auf ein bereits alloziertes Feld intrinsischen Datentyps gelesen werden. Der Zugriff auf das Leaf erfolgt hierbei direkt. Die Suchroutinen `search_leaf` erlauben jedoch indirekt auch hier den benannten Zugriff. Eine mögliche Aufrufsequenz sieht wie folgt aus:

```

Basic Type, Dimension(:), Allocatable :: data
Type(tBranch)                        :: root
Type(tLeaf), Pointer                 :: lp
Logical                              :: found
...
tree = read_tree()
call open_stream_files(tree,"read","old")
call search_leaf("description",tree,lp,found)
call pd_read_leaf(lp,data)
call close_stream_files(tree)

```

- Leaf get : Diese bedeutet, dass die durch ein Blatt beschriebenen Daten aus dem in den Speicher geladenen Stream auf ein Feld intrinsischen Datentyps kopiert werden. Diese Zugriffsart ist insbesondere für kleine Datenabschnitte gedacht, bei denen die Speicherkopie sowie der zusätzliche Speicherverbrauch nicht ins Gewicht fallen.

```

Basic Type, Dimension(:), Allocatable :: data
Type(tBranch)                        :: root
...
tree = read_tree()
call open_stream_files(tree,"read","old")
call read_streams(tree%streams,tree)
call connect_pointers(tree%streams, tree)
call pd_get(tree,"description",data)
call close_stream_files(tree)

```

### 5.2.3.3. Zusammenführen von Bäumen und Zweigen am Beispiel Datensammeln

Eine Anwendung des vorgestellten Datenformates, die hier am Beispiel des Datensammelns erläutert werden soll, ist das Zusammenführen von mehreren *PureDat*-Projekten in ein einzelnes Projekt. Dies kann prinzipiell auf mehrere Arten geschehen, da durch die Verwendung von Zeigern innerhalb der Baumstrukturen diese nicht zwangsläufig kopiert werden müssen, um sie zu kombinieren.

Die in dieser Arbeit realisierte Methode beruht auf der vollständigen Kopie der Daten eines Projektes auf dem E/A-System sowie Zeigerzuweisungen innerhalb der in den Speicher geladenen Baumstrukturen. Auf dieser Basis wurde auch der in [61] beschriebene Archivierungsalgorithmus für die durch die Prozesskette erzeugten Daten implementiert. Ziel des Archivierungsalgorithmus ist, die erzeugten Daten, welche aus mehreren 1000 bis Millionen Dateien bestehen, mit Hilfe von paralleler E/A in einige wenige Dateien zu kopieren. Wie nachfolgend an einem Beispiel erläutert wird, bietet sich hierfür die Kombination aus kopieren der Stream Dateien und Zeigerzuweisungen innerhalb der Baumstrukturen an, da hierdurch unnötige Speicherkopien sowie E/A-Operationen vermieden werden.

Es seien die beiden in Abb. 5.6 dargestellten *PureDat*-Projekte auf einem E/A-Medium abgelegt. Im folgenden soll das Projekt *Local\_ddc* als neuer Zweig in das Projekt *Global\_ddc* eingefügt werden. Es werden dazu die folgenden Schritte durch-

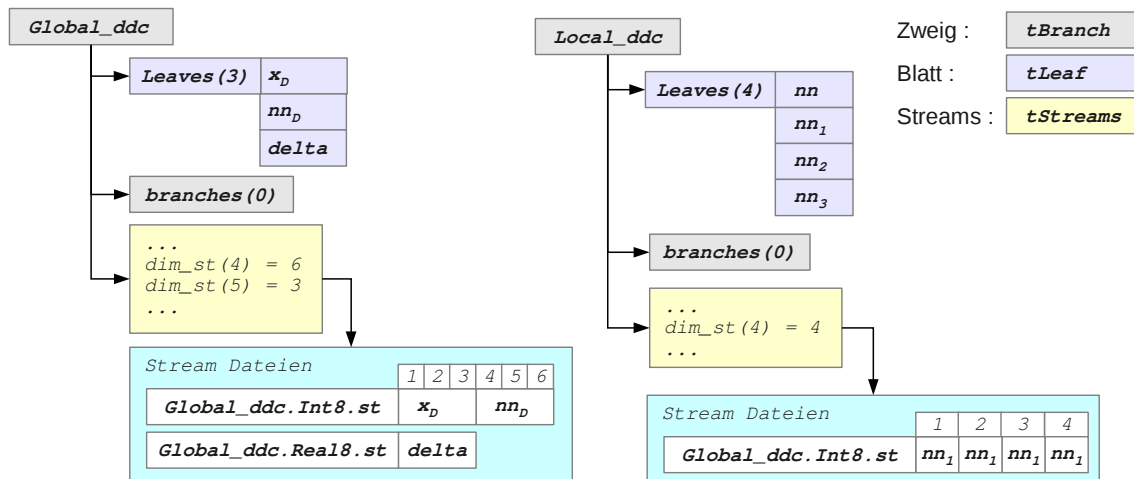


Abb. 5.6: *PureDat*-Projekte, die zusammengeführt werden sollen

geführt:

1. Laden der Strukturbäume von *Global\_ddc* und *Local\_ddc*

```

Setze pro_name und pro_path für Global_ddc
global_ddc=read_tree()
Setze pro_name und pro_path für Local_ddc
local_ddc=read_tree()

```

2. Einfügen eines neuen Zweiges in Global\_ddc und kopieren der skalaren Eigenschaften von Local\_ddc

```
call add_branch_to_branch(global_ddc)
```

```

global_ddc%branches(global_ddc%no_branches)%no_branches = &
  local_ddc%no_branches
global_ddc%branches(global_ddc%no_branches)%no_leaves = &
  local_ddc%no_leaves

```

3. Verbinden der Blätter und Zweige von Local\_ddc mit Hilfe von Zeigerzuweisungen

```

global_ddc%branches(global_ddc%no_branches)%branches => &
  local_ddc%branches
global_ddc%branches(global_ddc%no_branches)%leaves => &
  local_ddc%leaves

```

4. Kopieren der Streams von Local\_ddc hinter die Streams von Global\_ddc
5. Rekursives Durchlaufen des neuen Zweiges von Global\_ddc und Addition der ursprünglichen Stream Länge zu den Blatteigenschaften lbound und ubound
6. Abspeichern des erweiterten Global\_ddc Strukturbaumes auf dem E/A-System.

Bei dieser Methode der Strukturzuweisung ist zu beachten, dass die ursprüngliche Datenstruktur Local\_ddc erhalten bleibt. Durch die Verschiebung der Blatteigenschaften kann mit ihr jedoch nicht mehr auf die ursprünglichen Streamdateien operiert werden. Ist dies gewünscht bzw. notwendig, so muss die Datenstruktur erneut vom E/A-System geladen werden. In diesem Falle wäre eine vollständige rekursive Kopie der Datenstruktur wohl die effizientere Methode.

In der *PureDat*-Routine `include_branch_into_branch` sind die oben erläuterten Schritte zwei bis sechs realisiert.

```

Subroutine include_branch_into_branch(
  Type(tBranch) , Intent(inout)           s_b
  Type(tBranch) , Intent(inout)           t_b
  Type(tStreams), Intent(inout), Allocatable, Optional s_streams

```

```

Type(tStreams), Intent(inout), Allocatable, Optional t_streams
Logical      , Intent(in)                , Optional clean_target_files
Logical      , intent(in)                 , Optional blind
)

```

Wie zu sehen ist, können optionale Parameter an die Routine übergeben werden, welche eine weitere Funktionalität neben der soeben beschriebenen zur Verfügung stellen. So können mit Hilfe der Routine nicht nur Zweigstrukturen, die Wurzeln von Strukturbäumen darstellen, ineinander integriert werden, sondern es können auch Substrukturen übergeben werden, die selbst nicht über eine allozierte `Streams` Komponente verfügen. Da der erwähnte Archivierungsalgorithmus diese Funktionalität jedoch nicht benötigt, wird auf eine detaillierte Beschreibung an dieser Stelle verzichtet und auf die Codedokumentation der *PureDat*-Bibliothek verwiesen.

Unter Verwendung der vorgestellten Routine lautet die endgültige Aufrufsequenz für das angegebene Beispiel:

```

Setze pro_name und pro_path für Global_ddc
global_ddc=read_tree()

```

```

Setze pro_name und pro_path für Local_ddc
local_ddc=read_tree()

```

```

call include_branch_into_branch(s_b=local_ddc, t_b=global_ddc)

```

Nach der Integration der beiden Zweige ergibt sich die in Abb. 5.7 dargestellte Struktur.

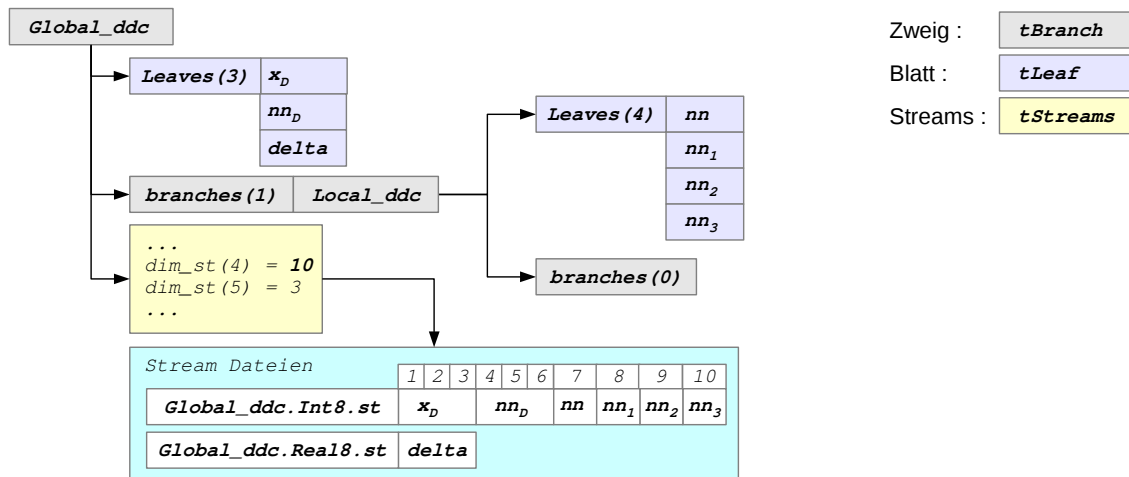


Abb. 5.7: Zusammengeführte *PureDat*- Projekte

## 5.3. Bearbeitung eines MVE

Wie bereits erwähnt, geschieht die Bearbeitung eines einzelnen MVE sequenziell in drei Schritten. Die drei entsprechenden Applikationen werden dabei durch ein Bash-Shell-Script aufgerufen, dessen Ablauf in Abb. 5.8 dargestellt ist. Elementar ist hierbei das Log- und Nachrichtensystem der Applikationen sowie des Skriptes zu vereinheitlichen, damit nach Ablauf der Prozesskette eine automatische Auswertung ihres Laufzeitverhaltens erfolgen kann.

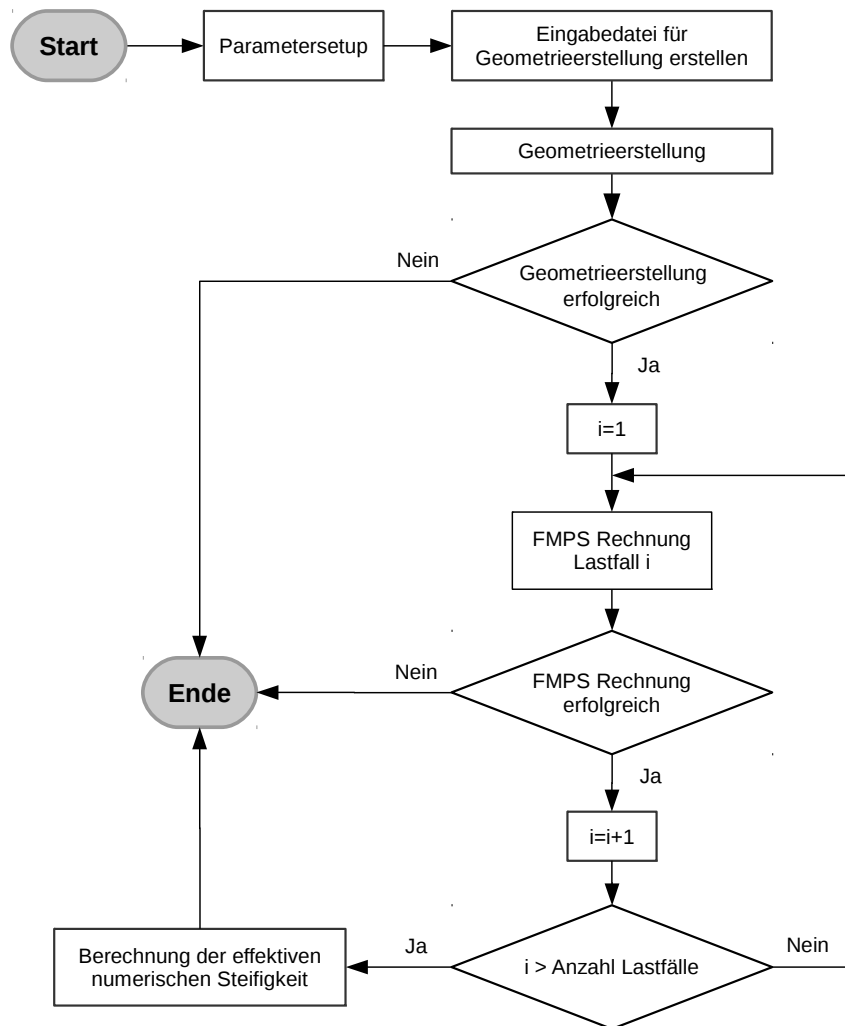


Abb. 5.8: Schematischer Programmablauf des Bash-Shell-Skriptes zur Bearbeitung eines MVE

Der erste Ansatz war, alle parallel ablaufenden Prozesse in eine einzelne globale Monitordatei schreiben zu lassen. Dabei ergab sich zum einen das Problem, dass relativ schnell, für eine ASCII formatierte Datei, unhandliche Größen von mehre-

ren GB erreicht wurden und zum anderen, dass bei parallelem Zugriff, auf eine für sequenziellen Schreibzugriff geöffnete Datei, nicht gewährleistet werden kann, dass zusammengehörende Informationen auch zusammenhängend geschrieben werden. Dies erschwert die automatische Verarbeitung der Datei bzw. macht diese ohne aufwändigen Parser unmöglich. Der verwendete Ansatz war aus diesen Gründen für jeden Prozess eine eigene Monitor- und eine eigene Log-Datei anzulegen. Da die Anzahl von verwendeten Dateien bei der Bearbeitung eines MVE durch die Verwendung des Datenformates *PureDat* von 174 auf 38 reduziert werden konnte, wurde das zusätzliche Anlegen von zwei Dateien nicht mehr als Problem angesehen.

### 5.3.1. Modellerstellung

Zu Beginn der Modellerstellung werden die Parameter der allgemeinen Gebietszerlegung geladen und aus diesen sowie der ebenfalls im *PureDat*-Format vorliegenden Beschreibung des globalen Datenvolumens die speziellen Parameter der Gebietszerlegung für das selektierte MVE berechnet. Sind diese bekannt, so wird zunächst der dem MVE entsprechende Bereich des globalen Datenvolumens  $\mathcal{V}$  geladen. Der Zugriff erfolgt mit Hilfe des mit Fortran 2003 standardisierten Stream-Access. Da die Positionierung innerhalb der Datei bei dieser Zugriffsmethode auf Basis der kleinsten Dateizugriffseinheit erfolgt, ergibt sich die Positionierung der Leseoperation für den Bereich  $i \in [\iota_{a,1}, \iota_{e,1}]$ ,  $j, k$ , d.h. einer Zeile in  $x$ -Richtung, aus den speziellen Parametern der Gebietszerlegung zu

$$pos = [I_{\mathcal{V},1}I_{\mathcal{V},2}(jj - 1) + I_{\mathcal{V},1}(ii - 1) + \iota_{a,1} - 1 + lb_{Phi} - 1] bs_{Phi} + 1 \quad (5.1)$$

mit  $lb_{Phi}$  der unteren Grenze des globalen Datenfeldes in der *PureDat*-Formatierung und  $bs_{Phi}$  der Speichergröße, für ein Element des globalen Datenfeldes, in Byte.

#### 5.3.1.1. Gittergenerierung

Nach dem Laden des Datenbereiches erfolgt die Gittergenerierung. Hierbei werden die Voxel des betrachteten Skalarfeldes, welche einen Grauwert größer oder gleich dem gewählten Grenzwert besitzen, direkt in hexaederförmige Finite-Elemente mit wahlweise linearem (8-Knoten) oder quadratischem (20-Knoten) Ansatz überführt. Um das Netzkonvergenzverhalten bei unterschiedlichen MVE-Größen beurteilen zu können, wurden die in Abb. 4.7 dargestellten würfelförmigen MVEs der Kantenlängen  $L_{0.6} = 0,60021394 \text{ mm}$ ,  $L_{1.2} = 1,20042788 \text{ mm}$ ,  $L_{2.4} = 2,40085576 \text{ mm}$  und  $L_{4.8} = 4,80171152 \text{ mm}$  untersucht.

Es wurde für alle Kantenlängen jeweils die Spektralnorm der effektiven numerischen



Steifigkeit unter Verwendung von linearen und quadratischen Elementen berechnet. Der Vergleich der Ergebnisse ergab das in Abb. 5.9 dargestellte Verhalten. Es ist zu erkennen, dass keine Abhängigkeit zwischen Konvergenzverhalten und MVE Kantenlänge besteht. Dies ist plausibel, da der Durchmesser der einzelnen Trabekel im Mittel immer gleich bleibt, unabhängig davon wie viel Mikrostruktur in einem MVE enthalten ist. Dies bedeutet, dass das Konvergenzverhalten der Gesamtstruktur durch die lokale Elementauflösung der Mikrostruktur beeinflusst wird, die wiederum, durch die direkte Umformung von Voxeln in Finite Elemente, unabhängig von der Größe der Gesamtstruktur ist.

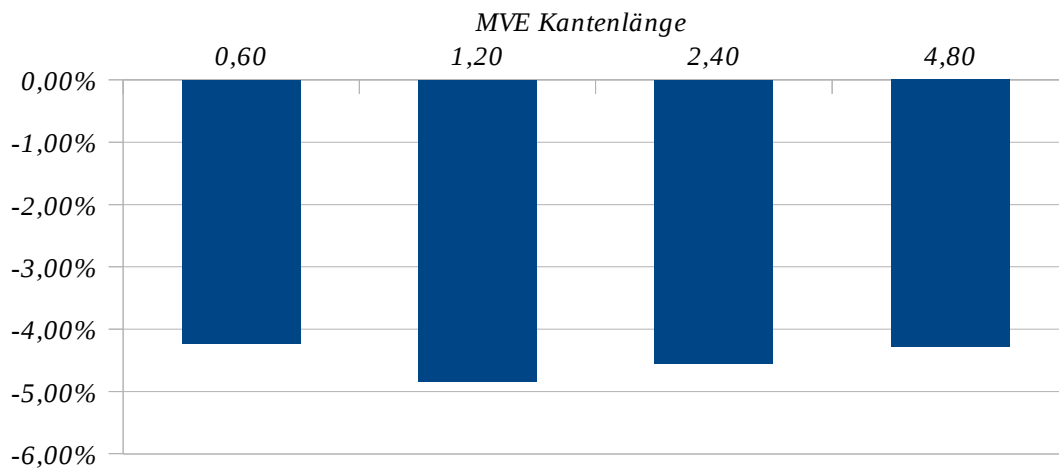


Abb. 5.9: Differenzen der Spektralnomen der effektiven numerischen Steifigkeiten zwischen Berechnungen der in Abb. 4.7 dargestellten MVEs mit linearen und quadratischen Hexaderelementen.

Nachdem gezeigt werden konnte, dass das Netzkonvergenzverhalten unabhängig von der MVE Kantenlänge ist, wurde untersucht ob sich die Ergebnisse bei weiterer Gitterverfeinerung noch signifikant ändern. Diese Untersuchungen wurden an dem in Abb. 4.7 dargestellten MVE mit der Kantenlänge  $0,6\text{ mm}$  durchgeführt. Um eine weitere Gitterverfeinerung mit der vorhandenen Implementierung erreichen zu können, wurde das MVE aus dem Gesamtvolumen extrahiert, und jedes Voxel wurde in acht Subvoxel zerlegt, die alle den Grauwert des original Voxels zugewiesen bekamen. Aus dem so verfeinerten Gitter wurden wiederum die Spektralnomen der effektiven numerischen Steifigkeit mit linearen und quadratischen Hexaedern berechnet. Das Netz, welches direkt aus den CT-Voxeln generiert wurde, sowie das verfeinerte Netz sind in Abb. 5.10 dargestellt.

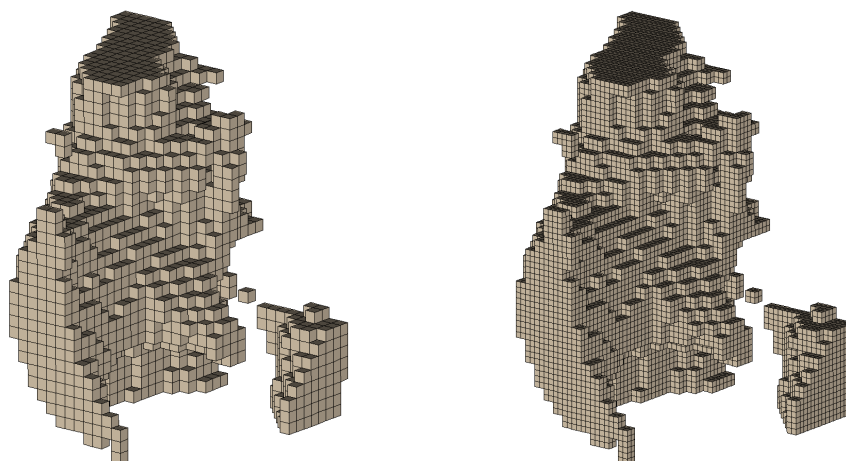


Abb. 5.10: Netz in CT-Auflösung und verfeinertes Netz

Für das verfeinerte Netz stellt die auf dem Ausgangsnetz erzeugte Lösung mit 20-Knoten Hexaederelementen die Referenzlösung dar, zu deren Erzeugung 75957 Freiheitsgrade verwendet wurden. Auf dem verfeinerten Netz konnte demgegenüber mit 8-Knoten Hexaederelementen trotz der fast doppelten Anzahl von Freiheitsgraden keine Verbesserung erzielt werden. Dies ist plausibel, da es sich um klassische Hexe-08 Elemente handelte und hier das langsame Konvergenzverhalten der h-FEM sichtbar wird.

Die Lösung des verfeinerten Netz mit 20-Knoten Hexaederelementen zeigte eine Verbesserung von 1,25% gegenüber der Referenzlösung, wobei jedoch 561006 d.h. fast 7,4 mal mehr Freiheitsgrade verwendet wurden, was den Rechenaufwand insbesondere bei den größeren MVE-Kantenlängen erheblich steigert.

Um eine weitere Verbesserung der Ergebnisse bei gleichbleibendem oder sogar verringertem Rechenaufwand zu erzielen, scheint das in [57] vorgeschlagene Verfahren eine geeignete Methode zu sein. Es wird gezeigt, dass durch die Finite Cell Methode, welche auf reguläre Gitter mit Elementen hoher Ordnung setzt, mit nur 3% der in einem unstrukturierten Gitter verwendeten Freiheitsgrade äquivalente Ergebnisse erzeugt werden können. Da kommerzielle bzw. frei verwendbare Implementierungen der Methode zum Zeitpunkt der Arbeit jedoch nicht zur Verfügung standen, ist das Verfahren der direkten Umformung von CT-Voxeln in 20-Knoten Hexaederelemente die Methode der Wahl.

## 5.3.1.2. Reduktion von Null-Eigenwerten

Durch das einfache Vorgehen bei der Gittergenerierung ergibt sich das Problem, dass Strukturbereiche im Inneren des MVE entstehen können, die keine Verbindung zu einer der Facetten des MVE oder zur restlichen Struktur des MVE besitzen. Diese Bereiche erzeugen in einer statischen FE-Simulation Singularitäten in der Steifigkeitsmatrix, da sie alle sechs Starrkörperbewegungen ausführen können. Um diese Bereiche zu detektieren, wurde das von U.Küster vorgeschlagene[62] und in Abb. 5.11 dargestellte iterative Kolorierungsschema implementiert.

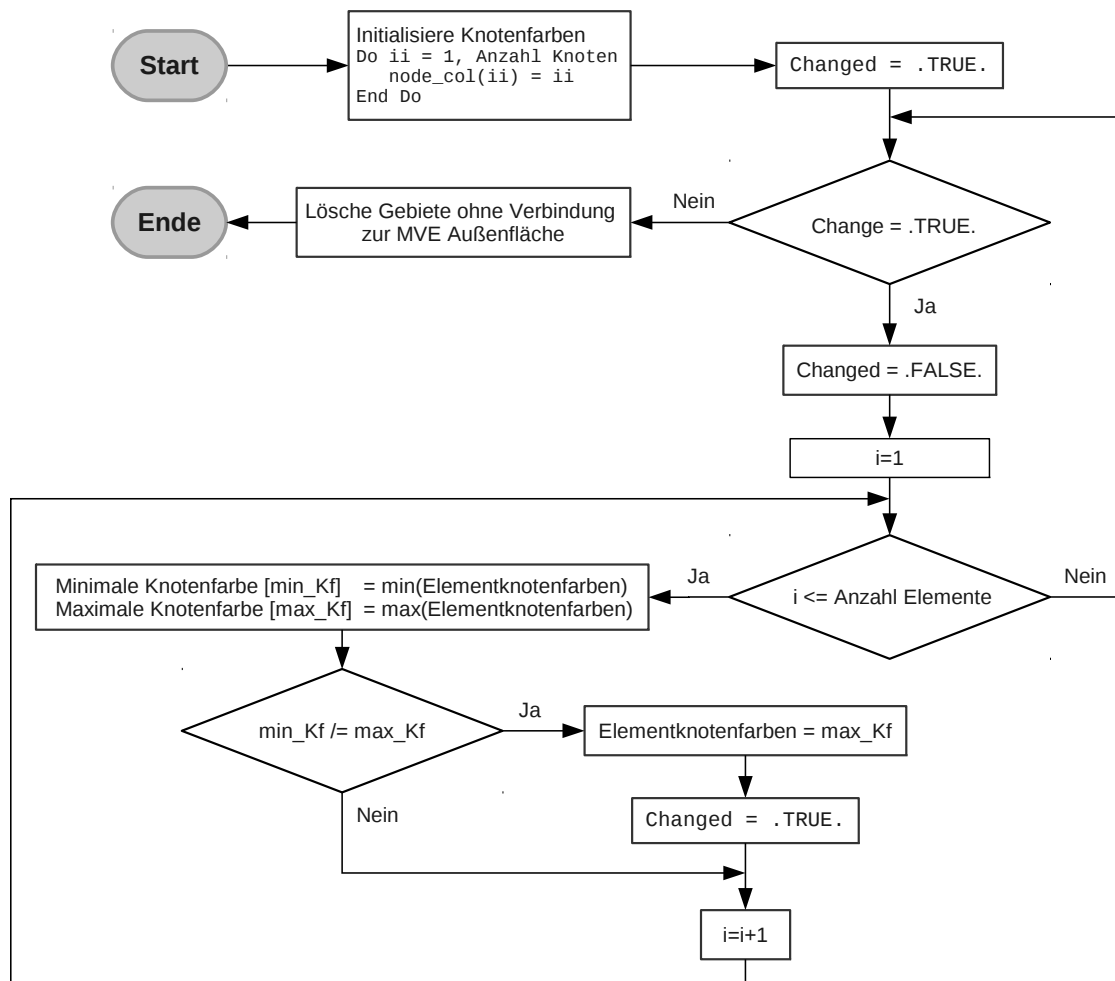


Abb. 5.11: Ablaufplan zur Kolorierung unverbundener Gebiete auf Basis einer Knotenliste und Element- bzw. Konnektivitätsliste

Bei diesem Vorgehen wird zunächst allen Knoten ihre eigene Farbe zugewiesen, d.h. sie werden nummeriert. Nun wird anhand der Elementliste, welche die Konnektivität

tät zwischen den Knoten angibt, überprüft ob alle zu einem Element gehörenden Knoten die gleiche Farbe besitzen. Ist dies nicht der Fall, werden alle Knoten des Elements mit der maximalen Knotenfarbe versehen, und der Farbwechsel wird festgehalten (`Changed = .TRUE.`). Besitzen bereits alle Knoten die gleiche Farbe wird direkt zum nächsten Element weitergegangen. Dieses Vorgehen wird für alle Elemente einmal durchgeführt. Ist danach ein Farbwechsel registriert worden, werden alle Element nochmals auf die gleiche Weise behandelt. Dies geschieht so lange, bis kein Farbwechsel mehr registriert wird. Auf diese Weise kann sich die maximale Knotenfarbe auf alle Elemente ausbreiten, falls nur ein zusammenhängendes Gebiet vorhanden ist. Sind mehrere Gebiete ohne Konnektivität vorhanden, so gibt es in der Knotenfarbliste nach Ablauf des Algorithmus so viele verschiedene Farben wie nicht zusammenhängende Gebiete im MVE enthalten sind.

Die gefundenen Gebiete können anschließend auf ihre Verbindung zur MVE Außenfläche, d.h. auf statisch bestimmte Lagerung, überprüft werden. Besitzt ein Gebiet keine Verbindung zur MVE Außenfläche, so wird es in der nachfolgenden Strukturberechnung nicht berücksichtigt.

Ein weiteres Problem, welches durch die Behandlung mit dem soeben beschriebenen Algorithmus nicht behoben wird, sind Bereiche, die zwar mit der übrigen Struktur oder der Oberfläche des MVE verbunden sind, jedoch noch rotatorische Starrkörperbewegungen ausführen können. Dazu kann es bei der Verwendung von Volumenelementen mit klassischen Ansätzen von erster oder zweiter Ordnung kommen, da diese Elemente nur Verschiebungsfreiheitsgrade auf den Elementknoten besitzen. Elementnachbarschaften, welche zu diesem Problem führen können, sind in Abb. 5.12 dargestellt.

Im Verlauf der Arbeit angestellte Untersuchungen zeigten, dass die Detektion der in Abb. 5.12.C und Abb. 5.12.D dargestellten, potentiell problematischen Stellen mit akzeptablem Aufwand möglich ist. Das tatsächliche Problem besteht jedoch darin, dass ein Volumenbereich durch mehrere statisch unbestimmte Kopplungen insgesamt wieder statisch bestimmt gelagert sein kann. Die Analyse dieser Problematik mit Hilfe eines geschlossenen Algorithmus erweist sich als enorm rechenaufwändig, da wie in Abb. 5.13 schematisch dargestellt, die zur statisch bestimmten Lagerung führenden Kopplungen nicht unbedingt in direkter Nachbarschaft auftreten müssen. Eine weniger rechenaufwändige Lösung hätte dagegen, aufgrund der Vielzahl möglicher Fälle, einen nicht unerheblichen Implementierungsaufwand nach sich gezogen.

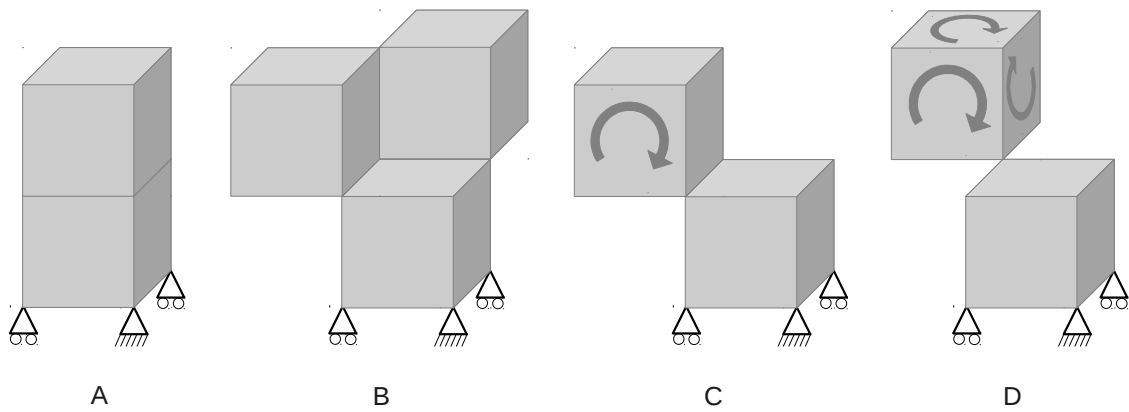


Abb. 5.12: Volumenverbindungen mit und ohne Beschränkung der rotatorischen Freiheitsgrade. Statisch bestimmte Lagerungen von angrenzenden Elementen über doppelte Kanten sind in den Teilabbildungen A und B zu sehen. Teilabbildung C zeigt eine Elementverbindung mit einem freien rotatorischen Freiheitsgrad. In Teilabbildung D sind alle drei rotatorischen Freiheitsgrade unbeschränkt

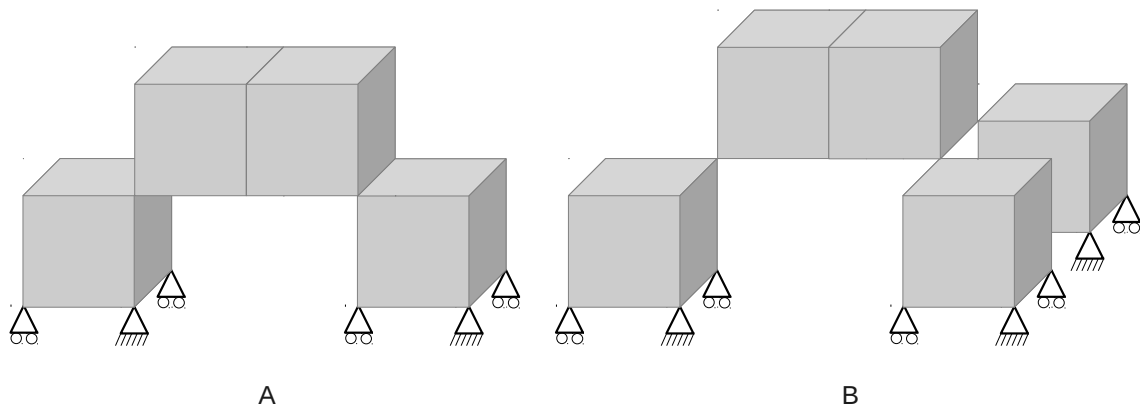


Abb. 5.13: Zwei Beispiele für, durch mehrere statisch unbestimmte Verbindungen, statisch bestimmt gelagerte Volumenstrukturen

Nachdem bei der Bearbeitung des Datensatzes Femurkopf jedoch nur bei einer sehr geringen Anzahl von MVEs Schwierigkeiten durch das beschriebene Problem hervorgerufen wurden, wurde dessen Lösung bis zur Verfügbarkeit eines größeren Datensatzes, der den Implementierungsaufwand rechtfertigt, zunächst zurückgestellt.

Nachdem das erzeugte Gitter von vollständig unverbundenen Strukturbereichen befreit ist, wird eine Modelldatei sowie die benötigten Lastfalldateien, welche die Modelldatei einbinden, erzeugt. Die Applikation der Randbedingungen erfolgt hierbei

mit der in Abschnitt 2.2.2 angegebenen Beziehung Gl. (2.68).

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathcal{N}=1}^{\mathcal{N}_e} [\underline{\phi}^{\mathcal{N}} \hat{\mathbf{u}}_{\mathcal{N}}]^T$$

Die oben stehende Beziehung wird dabei auf alle Knoten des erzeugten Gitters angewandt, die in einer Umgebung von

$$\Delta \mathfrak{R} = k_{\varepsilon} L_{\mathcal{M}} \quad (5.2)$$

um die Oberfläche des MVE liegen. Da in dieser Arbeit ausschließlich würfelförmige MVEs mit stückweise ebenen Außenflächen betrachtet wurden, konnte  $k_{\varepsilon} = 10^{-9}$  gesetzt werden.

### 5.3.2. Statische Simulationen

Die modellierten Lastfälle für das MVE werden im Anschluss an die Modellerstellung mit dem FE-Paket FMPS berechnet. Als Elementergebnisse werden der Dehnungs- und Spannungsvektor, die von Mises Vergleichsdehnung und -spannungen sowie die im Element gespeicherte Dehnungsenergie ausgegeben. Als Knotenergebnis wird der Verschiebungsvektor aller Gitterknoten sowie der Reaktionskraftvektor der mit vorgegebenen Verschiebungen beaufschlagten Knoten im *PureDat*-Format ausgegeben. Um die Anzahl der angelegten Dateien zu minimieren, wurde die Möglichkeit des *PureDat*-Formates genutzt, die Datenstrukturbeschreibung zu erweitern und die Ergebnisse aller Lastfallberechnungen in bereits bestehenden Streamdateien abzulegen.

Als linearer Löser kommt bei FMPS in der ursprünglichen Implementierung ein Konjuguierte-Gradienten-Verfahren (CG-Verfahren) ohne oder mit Vorkonditionierung zum Einsatz. Die Analyse der Laufzeit für Modellgrößen zwischen 100000 und ca. 30 Millionen Freiheitsgraden ergab, dass sich 24 Lastfälle bei einer Domaingröße von 2,4 mm Kantenlänge mit Hilfe des CG-Verfahrens nicht mehr innerhalb von 24 Std. berechnen lassen. Bei einer Domaingröße von 4,8 mm reichten 24h Laufzeit nicht mehr aus, um einen einzelnen Lastfall zu berechnen.

Die Laufzeitanalyse der seriellen Implementierung zeigte weiter, dass für MVE Größen mit Kantenlängen über 2,4 mm der lineare Löser, wie in Abb. 5.14 dargestellt, über 90% der Laufzeit beansprucht. Dieser Anteil nimmt bei den in dieser Arbeit zu lösenden Problemen mit zunehmender Anzahl von Freiheitsgraden weiter zu, da die Laufzeit des CG-Verfahrens nicht nur linear von der Anzahl der Freiheitsgrade son-

dern auch von der Anzahl der zur Konvergenz des Verfahrens benötigten Iterationen abhängt, die mit zunehmender Problemgröße ebenfalls ansteigt.

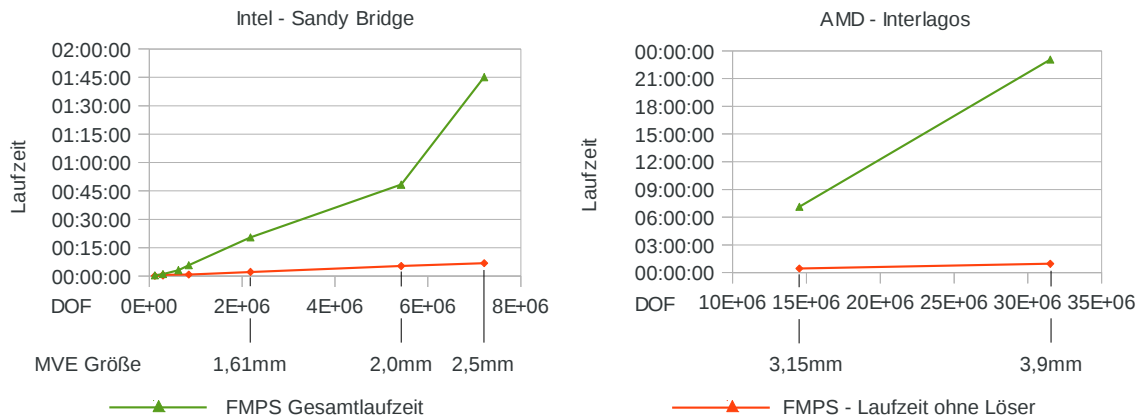


Abb. 5.14: Gesamtlaufzeit sowie Laufzeit exklusive der des linearen Löser von FMPS in der ursprünglichen, seriellen Implementierung. Ab einer MVE Größe von 3,15 mm Kantenlänge musste auf AMD Interlagos basierte Rechenknoten gewechselt werden, da zum Zeitpunkt der Arbeit keine Intel Sandy Bridge basierte Rechenknoten mit mehr als 32GB Arbeitsspeicher verfügbar waren.

Die ermittelten Laufzeiten waren für einen sinnvollen Einsatz der Prozesskette auf dem zur Verfügung stehenden Testdatensatz bei MVE Kantenlängen  $L_M > 1,2 \text{ mm}$  bereits nicht mehr tolerierbar. Um dieses Problem zu lösen, wurden die Möglichkeiten einer internen Parallelisierung von FMPS analysiert.

Die theoretisch mögliche Beschleunigung einer seriellen Applikation durch Parallelisierung einzelner Teilbereiche ist nach Amdahl gegeben durch:

$$\mathfrak{S} \leq \frac{1}{1 - \frac{T_{par}}{T_{ges}}} \quad (5.3)$$

Mit  $\mathfrak{S}$  dem sogenannten Speedup,  $T_{ges}$  der Laufzeit der Gesamtapplikation bei serieller Ausführung und  $T_{par}$  der Laufzeit des parallelen Applikationsteils bei serieller Ausführung. Es gilt anzumerken, dass für die Gleichheit in Gl. (5.3) eine perfekte parallele Effizienz vorausgesetzt wird. D.h. es muss bei Einsatz von  $n$  Rechenkernen gelten:

$$T_{par,n} = \frac{T_{par}}{n} \quad (5.4)$$

Da diese Beziehung in der Praxis, bedingt durch die notwendige Kommunikation der parallelen Prozesse, so gut wie nie Gültigkeit besitzt, folgt, dass Gl. (5.3) bei Gleichheit die obere Schranke für die mögliche Beschleunigung der seriellen Applikation

durch interne Parallelisierung angibt.

Prinzipiell gibt es bei einer statischen FE-Simulation, der in dieser Arbeit durchgeführten Art, aus Sicht des Laufzeitverhaltens zwei wesentliche Teile: die Assemblierung der Gesamtsteifigkeitsmatrix und das Lösen des linearen Systems. Die theoretisch mögliche Beschleunigung von FMPS durch Parallelisierung eines bzw. beider Teile wurde auf Basis der seriellen Laufzeitanalysen für die unterschiedlichen MVE Größen ermittelt und ist in Abb. 5.15 dargestellt.

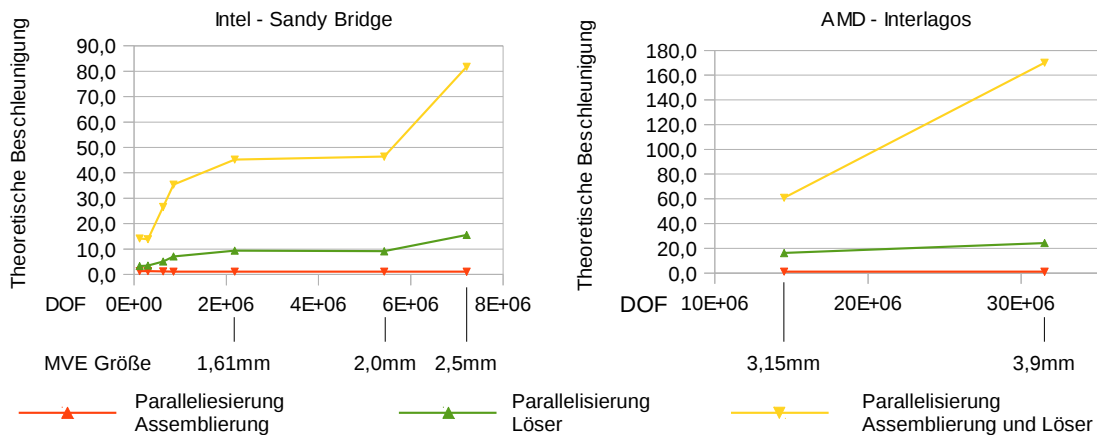


Abb. 5.15: Theoretisch mögliche Beschleunigung von FMPS bei Parallelisierung von Löser und/oder Assemblierung

Die Analyse ergab, dass der lineare Löser, wie in Abb. 5.15 zu erkennen, das deutlich größere Beschleunigungspotential durch interne Parallelisierung bietet. Aus diesem Grund wurde entschieden zunächst die MPI-parallele Löserbibliothek PETSc<sup>3</sup> in FMPS zu integrieren.

Welche Probleme diese Integration aufwarf und wie diese von der implementierungstechnischen Seite gelöst wurden, ist Gegenstand der folgenden Abschnitte.

### 5.3.2.1. Integration von MPI-parallelen Routinen in sequenziellen Programmcode

Soll ein Teil eines seriellen Programmpakets wie FMPS mit Hilfe von MPI parallelisiert werden, stehen unter anderem die folgenden Methoden zur Auswahl.

Man lässt die seriellen Programmteile von allen Prozessen ausführen bis die Stelle erreicht ist, an der die tatsächlich parallele Implementierung mit Arbeitsteilung unter den Prozessen beginnt. Diese Methode hat jedoch den Nachteil, dass alle Prozesse

<sup>3</sup><http://www.mcs.anl.gov/petsc/>



die gleichen Daten generieren. Der benötigte Arbeitsspeicher der Gesamtapplikation multipliziert sich bei diesem Vorgehen somit mit der Anzahl der parallelen Prozesse. Aus diesem Grund ist das Vorgehen für speicherintensive Algorithmen nur bedingt bzw. nicht anwendbar.

Die zweite Möglichkeit ist die Durchsetzung der Applikation mit Bedingungen zur Zuordnung von Codeteilen zu den einzelnen MPI Prozessen. Diese Methode bedingt jedoch, dass die Applikation ohne vorhandene MPI Bibliothek nicht mehr übersetzt werden kann. Des weiteren zieht sie bei Applikationen, die tief verzweigte und komplizierte Aufrufsequenzen aufweisen, einen nicht unerheblichen Implementierungsaufwand nach sich.

Um diesen zu umgehen und die Codebasis weiterhin seriell übersetzbar und lauffähig zu halten, wurde ein Schema entwickelt, welches die Einbindung von MPI-parallelen Routinen in eine serielle Applikation erlaubt. Das Vorgehen wurde von Herrn Dmitry Khabi vorgeschlagen [63] und von ihm im Rahmen des Projektes CRESTA [64] auf Dateibasis und I/O-Forwarding [65] implementiert. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Methode auf die in Abb. 5.16 dargestellte prinzipielle Form gebracht, so dass die Interaktion zwischen serieller Applikation und MPI-parallelen Routinen vollständig im Speicher ablaufen kann.

Bei der entwickelten Methode wird zusätzlich zu den für die parallelen Routinen benötigten Prozessen ein weiterer generiert, der direkt nach Programmstart zwei OpenMP Threads erzeugt. Von diesen wird der eine für die Ausführung des seriellen Applikationsteils verwendet. Implementierungstechnisch muss das ursprüngliche Hauptprogramm hierfür lediglich in eine Routine ohne Parameter umgewandelt werden. Der andere Thread übernimmt die Rolle des Vermittlers zwischen der seriellen Applikation und der einzubindenden MPI-parallelen Routine. Hierbei wird die Fähigkeit des Vermittlerthreads ausgenutzt, sowohl über shared Memory mit seinem Partnerthread zu interagieren, als auch über MPI mit den übrigen Prozessen kommunizieren zu können.

Die Koordination des Vermittlers und seines Partners wird über die globalen Variablen `Solver_State` und `Solver_Finished` gesteuert. Im Falle einer Fortran Implementierung handelt es sich dabei um Variablen eines Moduls, die mit dem Attribut `SAVE` versehen sind, um zu verhindern, dass die Variablen ihre Speicherposition verändern, während von unterschiedlichen Threads auf sie zugegriffen wird. Bei der Verwendung der Variablen gilt es darauf zu achten, dass sowohl das Auslesen als auch das Zuweisen der Variablen innerhalb eines `OMP CRITICAL` Blockes geschehen,

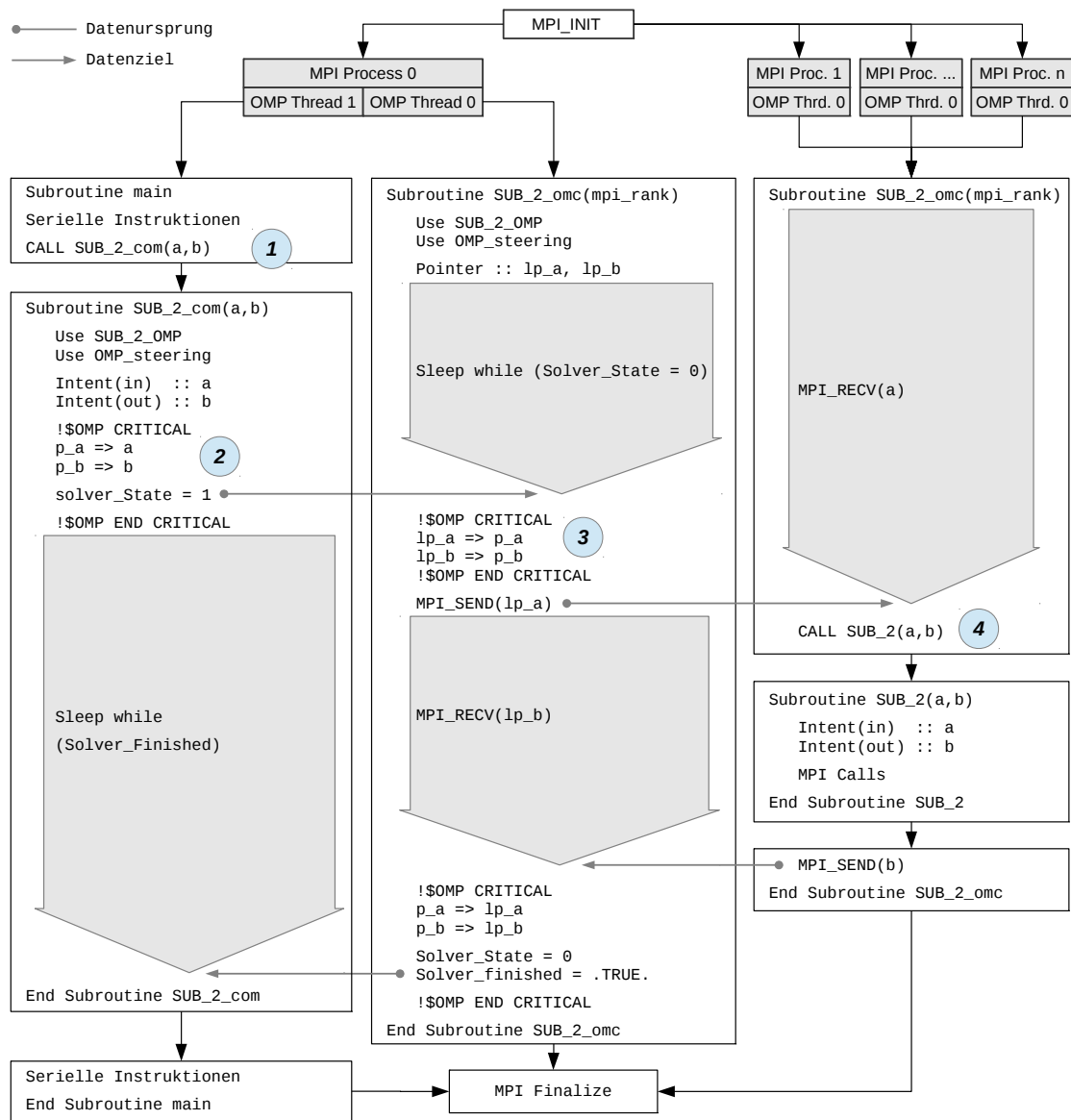


Abb. 5.16: Einbinden von MPI parallelen Routinen in eine serielle Applikation mit Hilfe von shared Memory Kommunikation

um die Zugriffe auf die Variablen thread-sicher<sup>4</sup> zu machen. Andernfalls können Probleme durch zeitgleichen Zugriff beider Threads auf die Variablen entstehen. Wie in Abb. 5.16 zu erkennen ist, arbeiten die beiden Threads im vorgeschlagenen Schema in der zeitlichen Abfolge immer abwechselnd, wobei jeweils ein Thread auf die Änderung einer globalen Variablen durch seinen Partner wartet.

Die Auskopplung der Subroutine, die MPI parallelen Code enthalten soll, kann in Fortran im allgemeinen durch folgendes Vorgehen implementiert werden. Zunächst

<sup>4</sup>Thread-sicher bedeutet, dass Schreib- und Lesezugriffe der einzelnen Threads nicht zeitgleich ablaufen können und so keine Information zerstört werden kann

wird ein Modul erstellt, welches alle Dummy Parameter der zu ersetzenden Routine als Zeiger, d.h. als Variablen mit dem Pointer Attribut enthält. Anschließend wird der Aufruf der Routine im ursprünglichen Hauptprogramm durch den Aufruf einer shared Memory Kommunikationsroutine ersetzt, siehe Punkt (1) in Abb. 5.16. Diese Routine besitzt exakt das gleiche Interface wie die ursprüngliche Routine. In der shared Memory Kommunikationsroutine werden die Zeigervariablen des angelegten Moduls mit den Aktualparametern der Subroutine verbunden, siehe Punkt (2) in Abb. 5.16. Auch hier gilt es darauf zu achten, dass die Referenzierung der Modulzeiger innerhalb eines OMP CRITICAL Blockes geschieht.

Mit der Referenzierung der Modulzeiger wird die Lokation der Aktualparameter dem Vermittlerthread bekannt gemacht. Dieser kann durch die Referenzierung der Modulzeiger auf die von der seriellen Applikation erzeugten Daten zugreifen, siehe Punkt (3) in Abb. 5.16. Die Daten können dann an die übrigen MPI-Prozesse versandt und so die parallele Bearbeitung der ausgelagerten Routine initiiert werden, siehe Punkt (4) in Abb. 5.16. Ist die MPI parallele Bearbeitung der ausgelagerten Subroutine abgeschlossen, und sind die parallel verteilten Daten zurück an den Vermittlerthread kommuniziert, kann dies der seriellen Applikation mittels shared Memory mitgeteilt werden, und diese kann wie in der ursprünglichen Implementierung vorgesehen weiter ausgeführt werden.

Um den Einfluss des entwickelten Prinzips auf das Laufzeitverhalten der Gesamtapplikation zu untersuchen, wurde die Assemblierungsroutine von FMPS mit Hilfe des soeben beschriebenen Vorgehens in ihrer ursprünglichen seriellen Implementierung aus der Applikation ausgegliedert. Die Ausführung der Routine wurde danach vom Vermittlerthread übernommen. Dies bedeutet, dass der ursprüngliche Instruktionsfluss der Applikation nur durch die Interaktion der beiden Threads über shared Memory erweitert wurde.

Es wurde ermittelt, dass die Interaktion der beiden Threads bezogen auf die Ausführungszeit der Assemblierungsroutine zwischen 0,5% und 1% Laufzeitverlängerung pro Aufruf der Routine bewirkt. Für die in dieser Arbeit vorliegenden Probleme ergibt sich daraus eine Verlängerung der Gesamtlaufzeit der seriellen FMPS Implementierung von weniger als 0,5%.

### **5.3.2.2. Integration von FMPS und PETSc**

Wie in Abb. 5.14 dargestellt, zeigten Laufzeitanalysen der seriellen FMPS Implementierung, dass bei größeren Problemen über 90% der benötigten Laufzeit in der Lösungsroutine des linearen Problems verbraucht wurden. Da es sich bei FMPS um

einen hoch integrierten, seriellen Code auf Basis von erweitertem Fortran 77 bzw. Fortran 2003 mit einer eigenen Datenverwaltung handelt, und eines der primären Ziele war diesen auch ohne externe Bibliotheken lauffähig zu halten, bot sich das im vorangegangenen Abschnitt in allgemeiner Art vorgeschlagene Vorgehen zur Einkopplung MPI-paralleler Routinen in seriellen Code an.

Wie in Abb. 5.17 dargestellt, wurde das Verfahren in leicht modifizierter Form auf die Lösungsroutine für den linearen Schritt des Newton Verfahrens angewendet.

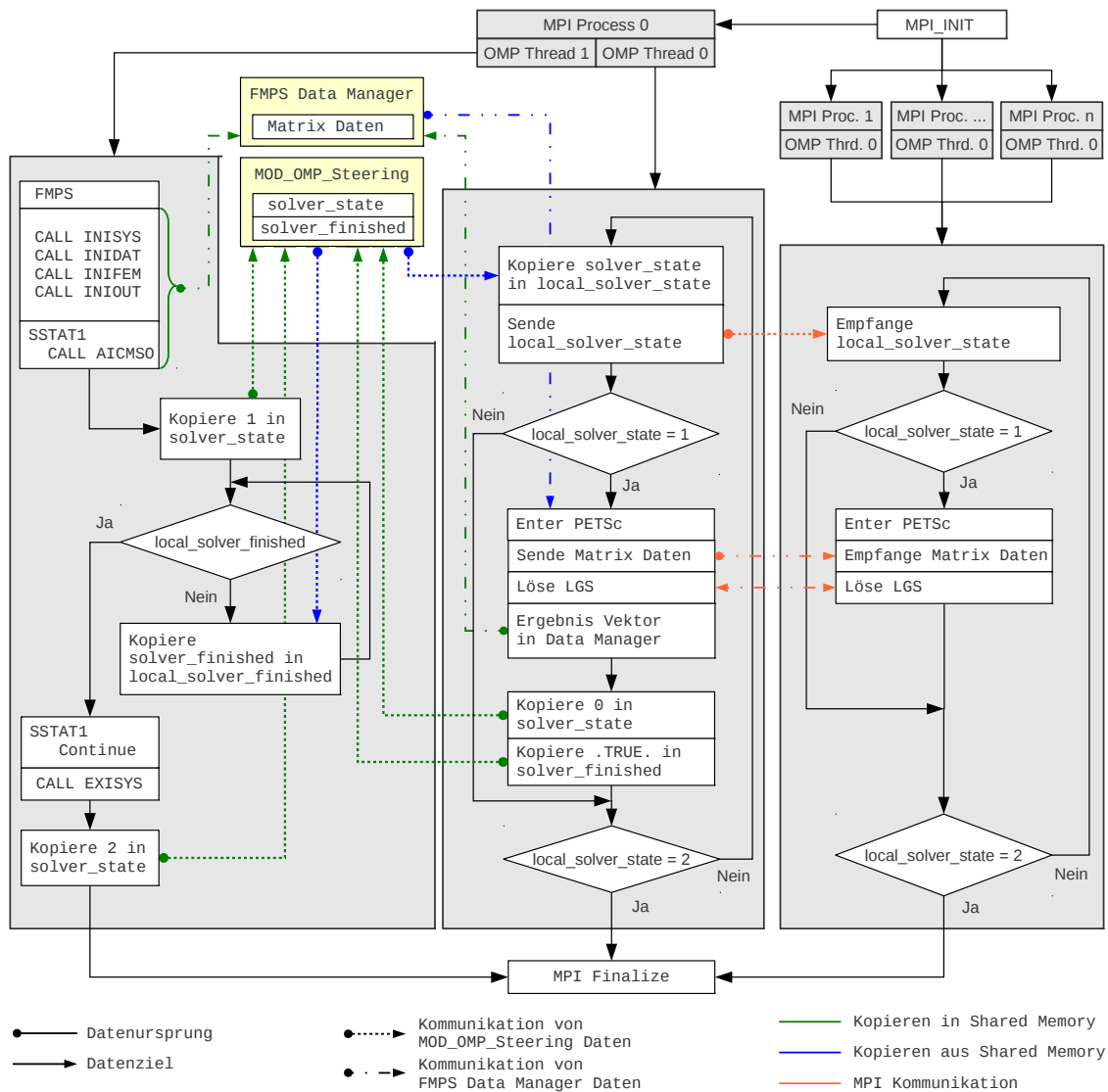


Abb. 5.17: Interaktion der an FMPS und PETSc beteiligten Prozesse und Threads

Nach dem Programmstart und der MPI-Initialisierung wird zunächst FMPS so lange ausgeführt, bis die Systemsteifigkeitsmatrix assembliert ist. Die globale Variable `solver_state` hat so lange den Wert 0 und `solver_finished` den Wert `.FALSE.`.

Der Vermittlerthread wartet in dieser Zeit auf den Wechsel von `solver_state` auf den Wert 1 oder 2. Die anderen MPI Prozesse warten ihrerseits darauf, dass sie vom ersten Prozess den Wert von `solver_state` übermittelt bekommen.

Die Daten der Systemsteifigkeitsmatrix werden von FMPS in einer eigenen Datenverwaltung, dem sog. Data Management System abgelegt, welches auf einem Fortran Common Block basiert. Da der Vermittler Thread ebenfalls Zugriff auf das Data Management System hat, ist es möglich auf das Anlegen des im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Moduls zu verzichten, welches die Dummy-Parameter der zu ersetzenden Subroutine als globale Zeiger enthält.

Sind alle Daten vorhanden betritt der Thread, welcher FMPS ausführt, die Subroutine `AICMS0` (`AICOMUNICATION SOLVER`). Hier wird zunächst `solver_state` auf den Wert 1 gesetzt. Anschließend betritt der Thread eine Schleife, die im Wechsel eine `sleep` Anweisung und eine Kontrolle des Wertes von `solver_finished` ausführt. Die Schleife kann nur verlassen werden, wenn `solver_finished` den Wert `.TRUE.` annimmt.

Nachdem `solver_state` den Wert 1 angenommen und der Vermittler-Thread dies festgestellt hat, informiert er per MPI-Kommunikation die restlichen MPI-Prozesse davon. Die MPI-Prozesse betreten daraufhin alle die PETSc Löseroutine. Hier werden zunächst die im FMPS Data Management System abgelegten Daten des zu lösenden LGS vom Vermittler-Thread geladen und partitioniert an die übrigen MPI-Prozesse versandt, welche daraufhin die Lösung des Systems mit Hilfe eines Krylov-Unterraum- Verfahrens durchführen. Der Vermittler-Thread des ersten MPI-Prozesses ist an der Lösung des Systems nicht beteiligt und wartet in einer MPI-Barrier auf seine Partner. Ist die Lösung des Systems erledigt, wird der nun verteilt vorliegende Lösungsvektor vom Vermittler-Thread eingesammelt und in das FMPS Data Management System kopiert. Ist dieser Vorgang abgeschlossen, wird `solver_state` auf den Wert 0 und `solver_finished` auf den Wert `.TRUE.` gesetzt, wodurch der Vermittler-Thread des ersten und alle weiteren MPI-Prozesse wieder in Wartestellung versetzt werden.

Nachdem `solver_finished` den Wert `.TRUE.` angenommen hat kann der FMPS Thread des ersten MPI-Prozess die oben beschriebene Schleife verlassen und die Nachlaufrechnung auf Basis des ermittelten Lösungsvektors durchführen. Ist bei einer nichtlinearen Rechnung ein weiterer Lösungsschritt erforderlich beginnt die soeben beschriebene Interaktion der beiden Prozessteile von neuem. Ergibt die Nachlaufrechnung dagegen, dass die gesuchte Lösung mit genügender Genauigkeit vorliegt, so wird FMPS bis zum Programmende ausgeführt. Danach setzt der FMPS Thread

`solver_state` auf den Wert 2 und wird beendet.

Wird vom Vermittler-Thread der Wert 2 in `solver_state` vorgefunden, so kommuniziert er dies per MPI seinen Partnern. Daraufhin werden alle verbleibenden Prozesse beendet.

### 5.3.2.3. Beurteilung der Effizienz der parallelen Implementierung von FMPS

Die Beurteilung der Effizienz der parallelen Implementierung von FMPS wurde auf dem HLRS NEC-Nehalem System durchgeführt. Zum Einsatz kamen Rechenknoten mit Intel Sandy Bridge Architektur und 32GB Hauptspeicher sowie AMD Interlagos basierte Rechenknoten, die über 256GB Hauptspeicher verfügten. Solange es die Größe des benötigten Speichers zuließ wurde auf den Intel basierten Knoten gearbeitet. Ab einer MVE Kantenlänge von  $3,15\text{ mm}$  war dies jedoch nicht mehr möglich, da der Speicherbedarf des seriellen Applikationsteils dann 32GB überschritt. Aus diesem Grund wurde für die Modelle mit MVE Kantenlängen  $\geq 3,15\text{ mm}$  der erste MPI-Prozess mit seinen beiden Threads, die Zugriff auf die Gesamtdaten benötigen, auf einem AMD Knoten und die für den Löser zuständigen MPI-Prozesse, welche nur mit Teildaten arbeiten, weiterhin auf Intel basierten Knoten ausgeführt.

Für die folgenden Ausführungen bedeutet dies, dass Nennungen von AMD Systemen in Diagrammen und Tabellen immer nur die Ausführung des seriellen Applikationsteils auf diesen Systemen bezeichnen. Der MPI-parallele PETSc Löser wurde bei den durchgeführten Untersuchungen immer auf Intel basierten Rechenknoten ausgeführt.

Es gilt zum besseren Verständnis der folgenden Betrachtungen anzumerken, dass die Intel basierten Rechenknoten gegenüber den AMD Systemen die etwa doppelte Single-Core Performance aufweisen. Die Konsequenz daraus für die Laufzeit einzelner Applikationsteile sowie der Gesamtapplikation ist beispielhaft für die Bearbeitung eines MVE mit  $2,5\text{ mm}$  Kantenlänge in Tab. 5.4 dargestellt.

Es ist zu erkennen, dass sich die Laufzeit des parallelen Löser auf den Intel basierten Rechenknoten nur minimal ändert, während die Bearbeitung der seriellen Applikationsteile auf den AMD Knoten ca. die doppelte Laufzeit benötigt. Dieses Ergebnis ist unabhängig von der MVE Größe. Es ist darauf zurückzuführen, dass der serielle Applikationsteil an der linearen Lösung nur beim Versenden der Gesamtsteifigkeitsmatrix und des Lastvektors sowie beim Sammeln des Lösungsvektors beteiligt ist.

Bei einer MVE Größe von  $2,5\text{ mm}$  musste aufgrund der Speicheranforderung des seriellen Applikationsteils von der Bearbeitung desselben von Intel Systemen auf

Architektur	Laufzeit [min:sec]			
	Gesamt	Löser	Serieller Applikationsteil	Assemblierung
AMD	24:45	11:52	12:53	10:17
Intel	18:24	11:49	06:33	05:15
Differenz [%]	34,5	0,4	96,7	95,9

Tab. 5.4: Laufzeitdifferenzen zwischen Intel und AMD Architektur für einzelne FMPS Applikationsteile bei der Bearbeitung eines MVE der Kantenlänge  $2,5\text{ mm}$  mit 33 MPI-Prozessen. Verwendet wurden 2 Intel Sandy Bridge Knoten mit jeweils 16 Prozessen + 1 Prozess auf Intel Sandy Bridge bzw. AMD Interlagos.

AMD Systeme übergegangen werden. Aus diesem Grund sind wegen des Performance Nachteils der AMD Systeme in den nachfolgend dargestellten Diagrammen ab einer MVE Kantenlänge von  $2,5\text{ mm}$  Sprünge zu erkennen.

In Abb. 5.18 ist die erreichte minimale Laufzeit der Gesamtapplikation gegenüber der seriellen Laufzeit aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass das primäre Ziel, die Bearbeitungszeit von MVEs mit Kantenlängen  $> 1,2\text{ mm}$  auf erträgliche Zeiten zu verkürzen, erreicht wurde. So können 24 Lastfälle der MVE Größen  $2,4\text{ mm}$  und  $4,8\text{ mm}$  nun in unter 8 Std. bzw. in etwas mehr als 48 Std bearbeitet werden.

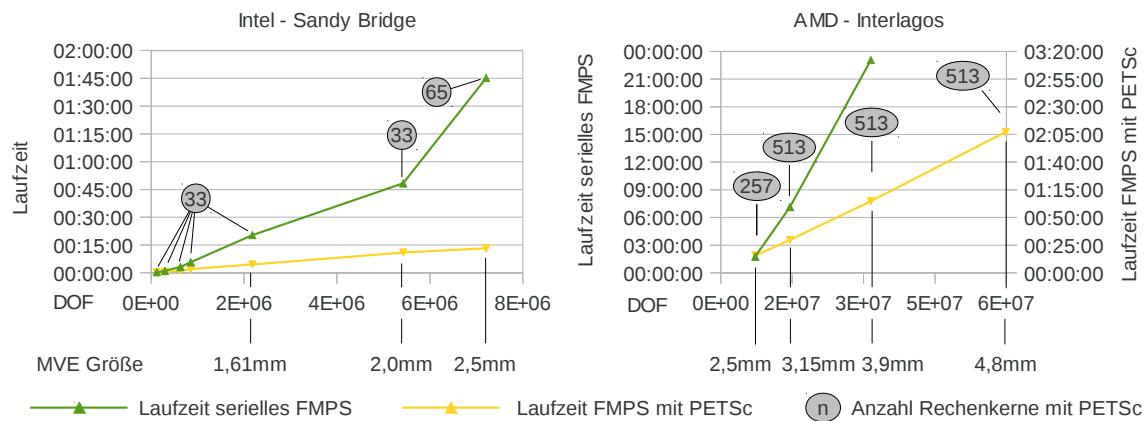


Abb. 5.18: Laufzeiten von FMPS mit seriellm und parallelem Löser. Laufzeiten mit parallelem Löser im rechten Diagramm auf der sekundären y-Achse.

Von Seiten der Performance- bzw. Effizienzanalyse gilt es bei Abb. 5.18 zu beachten, dass die aufgetragenen Laufzeiten wie angegeben mit unterschiedlicher Anzahl von Rechenkernen erreicht wurden.

Betrachtet man wie in Abb. 5.19 dargestellt die, im Rahmen der durchgeführten Ef-

fizienzanalyse tatsächlich erzielte, maximale Beschleunigung auf den Intel basierten Rechenknoten, so erkennt man, dass diese ab 1 Mio. Freiheitsgraden bei etwa 50% der theoretisch möglichen liegt. Die Effizienz nach Gl. (5.5), d.h. die Ausnutzung einer einzelnen CPU im Vergleich zur seriellen Implementierung  $\mathfrak{E}_{Core}$ , liegt zwischen 2 Mio. und 8 Mio. Freiheitsgraden allerdings nur noch bei etwa 25%.

$$\mathfrak{E}_{Core} = \frac{T_{ges}}{n T_{ges,n}} \quad (5.5)$$

mit  $T_{ges}$  der Laufzeit der seriellen Implementierung,  $n$  der Anzahl von verwendeten Rechenkernen und  $T_{ges,n}$  der tatsächlichen Laufzeit der Gesamtapplikation bei Verwendung von  $n$  Rechenkernen. Für den Fall, dass die gesamte Applikation ideal parallelisiert ist, d.h. es gilt  $T_{ges} = n T_{par,n}$ , wird eine Effizienz von  $1 \hat{=} 100\%$  erreicht. Treten Verluste durch den zur parallelen Bearbeitung notwendigen Datenaustausch unter den Prozessen auf, so sinkt die Effizienz entsprechend ab. Ist die Applikation nicht vollständig parallelisiert, so kann bei paralleler Bearbeitung ebenfalls keine Effizienz von 100% erreicht werden. Geht man von einer nur teilweisen, jedoch idealen Parallelisierung der Applikation aus, so ergibt sich die maximale Effizienz zu

$$\mathfrak{E}_{Core,max} = \frac{T_{ges}}{n (T_{seriell} + \frac{T_{par}}{n})} \quad (5.6)$$

mit  $n$  der Anzahl verwendeter Rechenkerne,  $T_{ges}$  der Laufzeit der Gesamtapplikation bei serieller Ausführung,  $T_{seriell}$  der Laufzeit des nicht parallelisierten Applikationsteils und  $T_{par}$  der Laufzeit des parallelisierten Applikationsteils bei serieller Ausführung.

In Abb. 5.19 ist die maximale, im Rahmen der Effizienzanalyse erzielte Beschleunigung, zusammen mit der dabei erreichten Effizienz aufgetragen. Zum Vergleich wurde auch die theoretisch mögliche Beschleunigung sowie die maximal erreichbare Effizienz aufgetragen. Wie zu erkennen ist, liegt die tatsächlich erzielte Beschleunigung für die kleineren Problemgrößen auf der Intel Architektur bei ca. 50% des maximal möglichen Wertes. Dies ist wie folgt zu erklären. Im Rahmen der Effizienzanalyse durchgeführte Messungen ergaben, dass die parallele Implementierung des CG-Verfahrens gegenüber der in FMPS vorhandenen, seriellen je nach Problemgröße eine zwischen 40% und 80% geringere Performance besitzt. Dieser Verlust ist zum Teil durch einen notwendigen Wechsel des in FMPS verwendeten Matrixformates bedingt, welches die Symmetrie der erzeugten Systemsteifigkeit ausnutzt. Während das in FMPS implementierte CG-Verfahren direkt auf den symmetrisch abgespeicherten Matrixdaten arbeiten kann, müssen diese zur Verwendung in PETSc durch



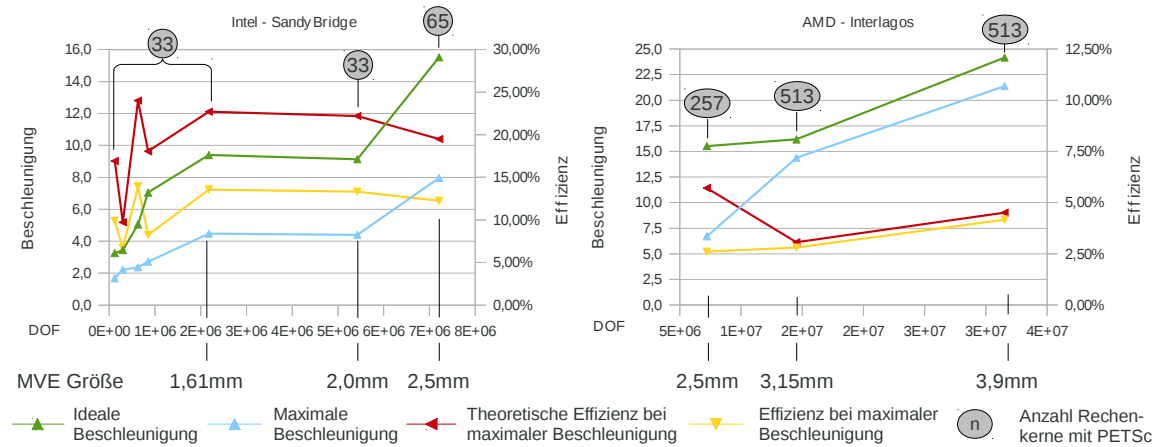


Abb. 5.19: Maximal erzielte Beschleunigung von FMPS mit dabei erreichter Effizienz.

transponieren als vollständige Matrix abgespeichert werden.

Bei den größeren Problemen ab 3,15 mm MVE Kantenlänge, die im seriellen Fall nur noch auf der langsameren AMD Architektur ausgeführt werden können, macht sich dagegen die Auslagerung des Löser auf die schnellere Intel Architektur bemerkbar. Wie in Abb. 5.19 dargestellt, liegen die erreichte maximale Beschleunigung und die dazugehörige Effizienz hier bei fast 90% der theoretisch erreichbaren Werte.

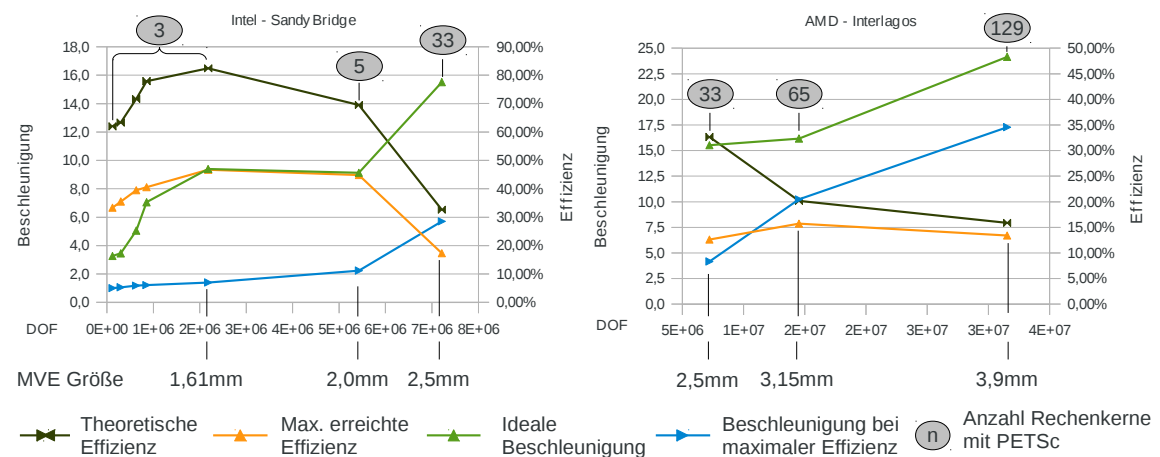


Abb. 5.20: Maximal erzielte Effizienz von FMPS mit parallelem Löser und dabei erreichte Beschleunigung.

Da die Effizienz bei maximalem Speedup auf der Intel Architektur durchgehend unter 15% und auf der AMD Architektur unter 5% fiel, wurde in Abb. 5.20 zum Vergleich die im Rahmen der Effizienzanalyse erzielte maximale Effizienz zusammen mit der

dazugehörenden Beschleunigung aufgetragen. Es zeigt sich, dass die maximale Effizienz von ca. 40% pro Rechenkern für die kleineren Modellgrößen bis 1,16 mm MVE Kantenlänge mit 3 Rechenkernen erreicht wird. Die absolute Zeitersparnis beträgt bei einer MVE Kantenlänge von 1,16 mm ca. 6 min gegenüber der seriellen Implementierung bei einem Speedup von 1,40.

Es ist somit festzustellen, dass die alleinige Parallelisierung des linearen Löser bei Modellgrößen < 2 Millionen DOF im vorliegenden Fall nicht sinnvoll ist, da die Effizienz der parallelen Implementierung zu schnell abfällt. Es ist sinnvoller, die serielle Implementierung zu verwenden bis bei dieser der Speicherbedarf über den Wert von

$$mem_{seriell} > n mem_{core} S \quad (5.7)$$

ansteigt, mit  $mem_{seriell}$  dem Speicherbedarf der seriellen Applikation,  $n$  der Anzahl von verwendeten Rechenkernen bei paralleler Ausführung,  $mem_{core}$  dem pro Rechenkern zur Verfügung stehenden Speicher und  $S$  der durch parallele Ausführung erreichten Beschleunigung. Gilt Gl. (5.7), bedeutet dies, dass die Effizienz der seriellen Implementierung unter die der parallelen abfällt, da diese durch den limitierten Speicher pro Rechenkern in diesem Fall mehr Rechenkerne für andere Aufgaben blockiert als die parallele Anwendung beansprucht. Weiterführende detailliertere Untersuchungen zu diesem Thema sind im Rahmen dieser Arbeit aus Zeitgründen nicht erfolgt, es erscheint jedoch auf jeden Fall sinnvoll FMPS als prototypische FE-Applikation in dieser Richtung weiter zu analysieren, um z.B. Wirtschaftlichkeitsaussagen im Bezug auf verwendete Rechnerumgebungen und Modellgrößen zu erhalten.

Da es sich bei der Berechnung der vorliegenden Probleme innerhalb der entwickelten Prozesskette um eine Entwicklungsaufgabe handelte, wurde die Anzahl der verwendeten Rechenkerne nicht nach der maximalen Effizienz bestimmt, sondern nach der Bearbeitungszeit. Ziel war es hierbei mit der Berechnung eines Lastfalls im Bereich von ca. 2 Std zu liegen, was für 2,4 mm Kantenlänge mit 33 Rechenkernen und für 4,8 mm Kantenlänge mit 257 Rechenkernen gelang.

### 5.3.3. Berechnung der effektiven Materialparameter

Nachdem die Berechnungen der Lastfälle abgeschlossen sind, werden die effektiven Materialparameter für das selektierte MVE berechnet. Da es sich in dieser Arbeit bei allen effektiven Parametern um integrale Größen handelt, ist das implementierungstechnische Vorgehen bei deren Berechnung prinzipiell immer das gleiche:

- Laden der benötigten Ergebnisse aus den vorangegangenen Lastfallberechnungen.

- Auswerten der Ergebnisse pro Element und Aufsummieren über alle Elemente
- Abspeichern des effektiven bzw. integralen Ergebnisses.

Im folgenden werden die implementierungsspezifischen Besonderheiten der berechneten effektiven Größen beschrieben.

### 5.3.3.1. Die effektive numerische Steifigkeit

Die Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit erfolgt nach Gl. (3.81) wobei zunächst die Spalten von  $\hat{\underline{F}}$  nach Gl. (3.78) ermittelt werden. Hierbei gilt es zu beachten, dass die Berechnung von  $\hat{\underline{f}}$  im  $\xi$ -Raum erfolgt und die Knotenkoordinaten des FE-Gitters zunächst, wie in Gl. (3.76) angegeben, transformiert werden müssen bevor der Verschiebungsansatz  $\underline{\phi}^{\mathcal{N}}$  an der Stelle des Last tragenden äußeren Freiheitsgrades ausgewertet werden kann.

In Pseudocode ergibt sich der folgende Algorithmus zur Berechnung von  $\hat{\underline{F}}$ :

---

```

Do ii = 1, Anzahl von Lastfällen
  Do jj = 1, Anzahl von Randknoten

    xi = Transformiere_in_xi_Raum(Randknoten(jj))
    Do ll = 1, Anzahl von Knoten des Makro Elements
      phi(ll) = berechne_phi(xi)
    End Do

    Do kk = 1,3
      Do ll = 1, Anzahl von Knoten des Makro Elements
        F_Dach( (kk-1)*Anzahl von Knoten des Makro Elements + ll, ii) =
          F_Dach( (kk-1)*Anzahl von Knoten des Makro Elements + ll, ii) +
          Reaktionskraft_am_Randknoten(kk,jj,ii)*phi(ll)
      End Do
    End Do

  End Do
End Do

```

---

Multiplikation von  $\hat{\underline{F}}$  von rechts mit der invertierten Matrix der aufgeprägten Verschiebungsmoden  $\hat{\underline{U}}^{-1}$  ergibt die effektive numerische Steifigkeit  $\overline{\underline{K}}_{num}$ .

### 5.3.3.2. Der effektive Spannungs- und Dehnungstensor über dem MVE

Der effektive Spannungs- und der effektive Dehnungstensor über dem MVE werden direkt aus den Elementergebnissen der jeweiligen Lastfallsimulation nach Gl. (3.7) bzw. Gl. (3.20) berechnet. Dies bedeutet, es wird zunächst über alle Elemente des mikromechanischen Modells summiert und anschließend mit dem Elementvolumen eines einzelnen FEs multipliziert und durch das Gesamtvolumen des betrachteten MVEs dividiert.

Das Ausklammern des FE-Volumens aus der Summe ist in diesem Falle zulässig, da alle Elemente im mikromechanischen Modell durch die direkte Umwandlung von Voxeln in finite Elemente das gleiche Volumen besitzen.

### 5.3.3.3. Die effektive Steifigkeit des MVE

Die effektive Steifigkeit des MVE nach Gl. (3.35) wird aus dem Feld der lokalen Dehnungstensoren sowie der inversen Matrix der aufgeprägten Dehnungszustände  $\bar{\varepsilon}_{LK}^{-1}$  berechnet. Diese ist per Voraussetzung bekannt. In dieser Arbeit werden wie in Gl. (3.82) und Anhang C angegeben die sechs elementaren Dehnungszustände Zug in  $x_1$ -,  $x_2$ - und  $x_3$ -Richtung sowie Schub in den Koordinatenebenen verwendet, woraus sich eine Diagonalmatrix ergibt.

### 5.3.3.4. Die optimierte effektive Steifigkeit des MVE

Die optimierte effektive Steifigkeit wird nach der in Abschnitt 2.1.10 vorgestellten Methode berechnet. Das Vorgehen ist dabei, in der initialen Parameterraumabdeckung alle zu bestimmenden Kriterien zu berechnen und anschließend die Verfeinerungsschritte für jedes Kriterium separat durchzuführen.

Um die optimierten Steifigkeiten aller MVEs im Gitter der Zerlegung miteinander vergleichen zu können, wird nach der Optimierung eine weitere Ausrichtung der effektiven Steifigkeit vorgenommen, um die Komponenten  $C_{11}$ ,  $C_{22}$  und  $C_{33}$  ihrem Betrage nach zu sortieren. Dies kann wie in Abschnitt 2.1.10 durch Permutation der Parameter in Gl. (2.55) um den Faktor  $\frac{\pi}{2}$  erreicht werden.

Praktisch bedeutet dies, zur Umsortierung der Matrixkomponenten muss sukzessive um gewisse Achsen des durch die Optimierung bestimmten Koordinatensystems um jeweils  $\beta = \frac{\pi}{2}$  gedreht werden bis  $\hat{C}_{11}$  die dem Betrage nach kleinste und  $\hat{C}_{33}$  die dem Betrage nach größte Komponente ist.

Sei  $\mathbf{n}$  die aus der Optimierung gewonnene Rotationsachse und  $\alpha$  der zugehörige Winkel zur Bestimmung der Lineartransformation  $\mathbf{a}$ , mit deren Hilfe sich nach Gl. (2.55)

die optimierte effektive Steifigkeit berechnen lässt. Sei weiterhin  $\tilde{\mathbf{a}}$  die Lineartransformation, mit deren Hilfe sich die optimierte Steifigkeit mit sortierten Komponenten  $C_{11}$  bis  $C_{33}$  direkt bestimmen lässt, so wird  $\tilde{\mathbf{a}}$  durch die folgenden fünf Fälle aus  $\mathbf{a}$  bestimmt:

$$1. C_{11} < C_{22}, C_{11} < C_{33}, C_{22} > C_{33}$$

$$\tilde{n}_i = a_{i,1}$$

$$\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{r}(\tilde{\mathbf{n}}, \beta) \otimes \mathbf{a}$$

$$2. C_{11} < C_{22}, C_{11} > C_{33}, C_{22} > C_{33}$$

$$\hat{n}_i = a_{i,2}$$

$$\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{r}(\hat{\mathbf{n}}, \beta) \otimes \mathbf{a}$$

$$\tilde{n}_i = \hat{a}_{i,1}$$

$$\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{r}(\tilde{\mathbf{n}}, \beta) \otimes \hat{\mathbf{a}}$$

$$3. C_{11} > C_{22}, C_{11} < C_{33}, C_{22} < C_{33}$$

$$\tilde{n}_i = a_{i,3}$$

$$\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{r}(\tilde{\mathbf{n}}, \beta) \otimes \mathbf{a}$$

$$4. C_{11} > C_{22}, C_{11} > C_{33}, C_{22} < C_{33}$$

$$\hat{n}_i = a_{i,3}$$

$$\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{r}(\hat{\mathbf{n}}, \beta) \otimes \mathbf{a}$$

$$\tilde{n}_i = \hat{a}_{i,1}$$

$$\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{r}(\tilde{\mathbf{n}}, \beta) \otimes \hat{\mathbf{a}}$$

$$5. C_{11} > C_{22}, C_{11} > C_{33}, C_{22} > C_{33}$$

$$\tilde{n}_i = a_{i,2}$$

$$\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{r}(\tilde{\mathbf{n}}, \beta) \otimes \mathbf{a}$$

## 5.4. Prozesssteuerung

Wie in Abschnitt 5.1.2 bereits erwähnt, existieren zwei Implementierungen der Prozesssteuerung, die sich aus unterschiedlichen Anforderungen bei der Bearbeitung der kleinen Problemgrößen, d.h. MVE Kantenlängen 0,6 mm und 1,2 mm, und der großen Problemgrößen, d.h. MVE Kantenlängen 2,4 mm, 4,8 mm und 9,6 mm, sowie den unterschiedlichen Konfigurationen der verwendeten HPC-Systeme ergaben. Die Implementierungen entstanden im Verlauf der Arbeit, wobei zunächst die Scriptimplementierung erstellt wurde. Nachdem sich zeigte, dass die kleinen Problemgrößen

damit nicht sinnvoll zu bearbeiten sind, wurde die MPI-Implementierung erstellt.

Obwohl beide Implementierungen prinzipiell auf beiden verwendeten HPC-Systemen lauffähig sind, stellte sich im Verlauf der Arbeit heraus, dass die kleinen Problemgrößen am effizientesten auf dem HLRS CRAY-XE6 System mit Hilfe der MPI-Implementierung und die großen Problemgrößen auf dem PC-Cluster System mit Hilfe der Scriptimplementierung zu bearbeiten sind.

Die Beschreibung der beiden Implementierungen ist Gegenstand dieses Abschnitts.

### 5.4.1. Script Implementierung

Die Scriptimplementierung der Prozesssteuerung gliedert sich in drei wesentliche Teile, die in separaten Scripten realisiert sind. Ausgangspunkt ist der Startprozess, von dem eine Instanz ausgeführt wird. Der Startprozess kann mehrere Instanzen des „Masterprozess“ aufrufen, welche ihrerseits jeweils mehrere Instanzen des „Workerprozess“ starten. Dabei existieren mehrere Szenarien, die sich durch die verwendeten HPC-Ressourcen und die gewählte MVE-Kantenlänge, d.h. die Problemgröße ergeben.

Die in dieser Arbeit betrachteten HPC-Ressourcen sind HPC PC-Cluster wie das am HLRS installierte PC-Cluster System und HPC-Systeme der Firma CRAY, wie das am HLRS installierte Cray-XE6 System. Die hier aufgeführten Szenarien entstanden im Verlauf der Arbeit durch die Benutzung der am HLRS installierten Systeme. Sie sind jedoch insofern allgemeingültig bzw. auf andere Systeme dieser Art übertragbar, als dass die Konfiguration des Betriebssystems und der Laufzeitumgebungen, welche ausschlaggebend für das jeweilige Szenario sind, allgemeinen Charakter im HPC Bereich besitzen.

#### 5.4.1.1. Szenario 1 : Kleine Problemgrößen auf PC-Clustern

Das erste Szenario ist die Berechnung der MVE Kantenlängen  $0,6\text{ mm}$  und  $1,2\text{ mm}$  auf einem PC-Cluster. Dieses Szenario repräsentiert die initiale Implementierung und ist von der Problemseite durch die folgenden Parameter charakterisiert:

- DOF pro MVE :  $< 1\text{ Mio.}$
- Benötigter Arbeitsspeicher pro MVE-Prozess :  $< 1\text{ GB}$
- Serielle Bearbeitungszeit für ein einzelnes MVE :  $< 2\text{ Std.}$
- MVE Anzahl im Testvolumen :  $> 20000$

Dies bedeutet, auf allen beteiligten Rechenkernen aller beteiligten Rechenknoten können, aufgrund des geringen Speicherbedarfs und der geringen Laufzeit, MVE Prozesse seriell ausgeführt werden. Da auf einem PC-Cluster der Benutzer direkten Zugang zu den Rechenknoten erhält und diese wie ein eigenständiges PC-System funktionieren, kann in diesem Szenario auf die mehrfache Ausführung des Masterprozesses verzichtet werden. Der einzelne Masterprozess, welcher zusammen mit dem Startprozess auf dem sogenannten „Headnode“, welcher der erste Knoten in der Liste der reservierten Rechenknoten ist, ausgeführt wird, kann die Workerprozesse per Secure-Shell (SSH) direkt auf einem reservierten Knoten starten. Der Workerprozess startet diesem Knoten dann seinerseits die an der Bearbeitung eines MVE beteiligten Programme. Die Verteilung der Workerprozesse auf die Rechenkern des Workerknotens wird dabei nicht festgelegt, sondern dem Betriebssystem-Scheduler des Workerknotens überlassen. Das Szenario ist in Abb. 5.21 dargestellt.

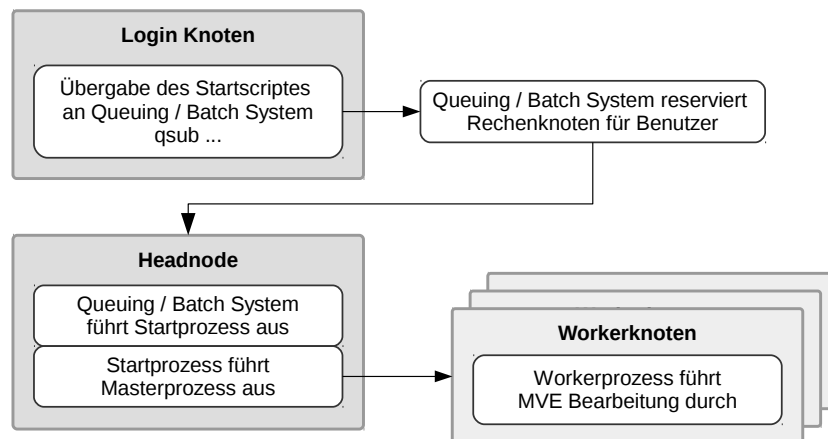


Abb. 5.21: Übersicht Scriptimplementierung Szenario 1: Master-Worker-Schema auf einem PC-Cluster System zur Bearbeitung kleiner Problemgrößen

Da die Workerprozesse völlig autonom als vom Master unabhängige Prozesse auf den Rechenknoten ausgeführt werden, wurde als Kommunikationsmittel für die Rückmeldung der Worker zum Masterprozess das Dateisystem verwendet. Dabei werden vom Startprozess zwei Verzeichnisse initialisiert. Das „Passive-Directory“ und das „Active-Directory“. Im Passive-Directory wird pro sog. „Workplace“ eine Datei angelegt. Dies bedeutet in diesem Szenario eine Datei pro Rechenkern. Startet der Master nun eine MVE Bearbeitung, so verschiebt er zunächst die entsprechende Datei vom Passive- in das Active-Directory und startet dann per SSH einen Workerprozess auf dem zugehörigen Rechenknoten. Dieser Vorgang wird so oft wiederholt, bis das Passive-Directory keine Dateien mehr enthält. Danach überprüft der Masterprozess fortlaufend, ob sich wieder Dateien im Passive-Directory befinden. Ist dies der Fall, hat ein Workerpro-

zess seine Arbeit beendet und als letzte Operation die entsprechende Datei vom Active- in das Passive-Directory zurückverschoben. Der Masterprozess kann also auf dem nun wieder freien Workplace einen Workerprozess mit dem nächsten Arbeitspaket starten. Es ergibt sich der in Abb. 5.22 dargestellte Ablauf.

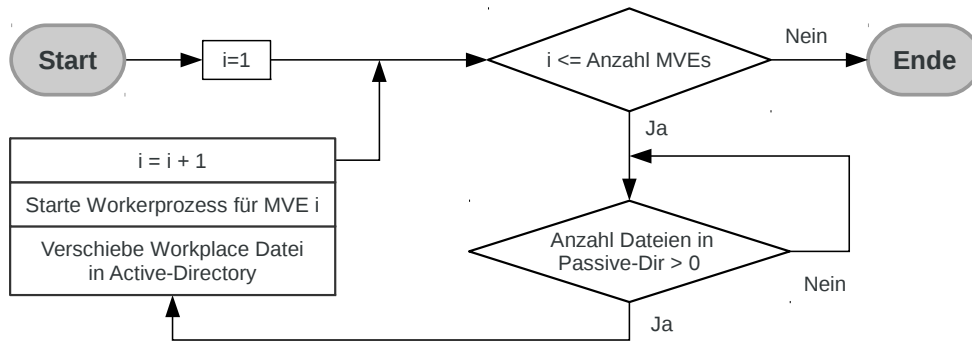


Abb. 5.22: Szenario 1: Ablauf des Masterprozess

Wie in Abschnitt 5.1.2 beschrieben, ergaben Tests, dass die Implementierung auf dem HLRS PC-Cluster System nicht über 128 Rechenkerne skaliert werden durfte ohne die Metadatenserver des angeschlossenen Lustre Dateisystems im Produktionsbetrieb ernsthaft zu überlasten. Aus diesem Grunde wurde die Implementierung auf das zu diesem Zeitpunkt neu installierte CRAY-XE6 System umgezogen, dessen Dateisysteme wesentlich leistungsfähiger waren.

#### 5.4.1.2. Szenario 2 : Kleine Problemgrößen auf CRAY-XE6

Das zweite Szenario ist die Berechnung der MVE Kantenlängen  $0,6\text{ mm}$  und  $1,2\text{ mm}$  auf einem CRAY-XE6 HPC-System. Dieses Szenario ist von der Problemseite durch die gleichen Parameter charakterisiert wie Szenario 1.

Auf einem CRAY System besteht die Besonderheit gegenüber einem PC-Cluster darin, dass der Benutzer keinen direkten Zugang zu den Rechenknoten des sog. „Mainframes“ hat. Die Applikationen der Benutzer werden mit Hilfe des Application Level Placement Schedulers (ALPS) auf die Rechenknoten transferiert. Wird das ALPS System nicht verwendet, wird die Applikation auf einem „Batch System Management Node“ d.h. einem sogenannten MOM-Knoten gestartet. Die MOM-Knoten befinden sich zwar innerhalb des Mainframes, werden jedoch nicht exklusiv an einzelne Benutzer des Systems vergeben, sondern unter vielen Benutzern geteilt. Wird ein solcher Knoten zu stark belastet, zieht dies die laufenden Applikationen aller Benutzer des MOM-Knotens in Mitleidenschaft.



Eine weitere Besonderheit eines CRAY Systems ist, dass das ALPS System Rechenknoten nur applikationsexklusiv vergibt. Dies bedeutet, wird eine Applikation mit Hilfe des ALPS Systems gestartet, so wird diese auf den nächsten freien und für den Benutzer reservierten Rechenknoten transferiert. Es ist nun nicht mehr möglich vom MOM-Knoten aus weitere Applikationen auf den bereits verwendeten Rechenknoten zu transferieren.

Dies bedeutet für die hier vorgestellte Prozesssteuerung, dass der Startprozess, welcher vom Queuing-System auf einem MOM-Knoten gestartet wird, mit Hilfe des ALPS-Systems pro reserviertem Rechenknoten einen Masterprozess starten muss. Der Masterprozess kann danach Workerprozesse auf dem Rechenknoten starten, auf dem er selbst ausgeführt wird. Für eine genauere Darstellung von ALPS und der Konfiguration des HLRS CRAY-XE6-Systems siehe [58, 66].

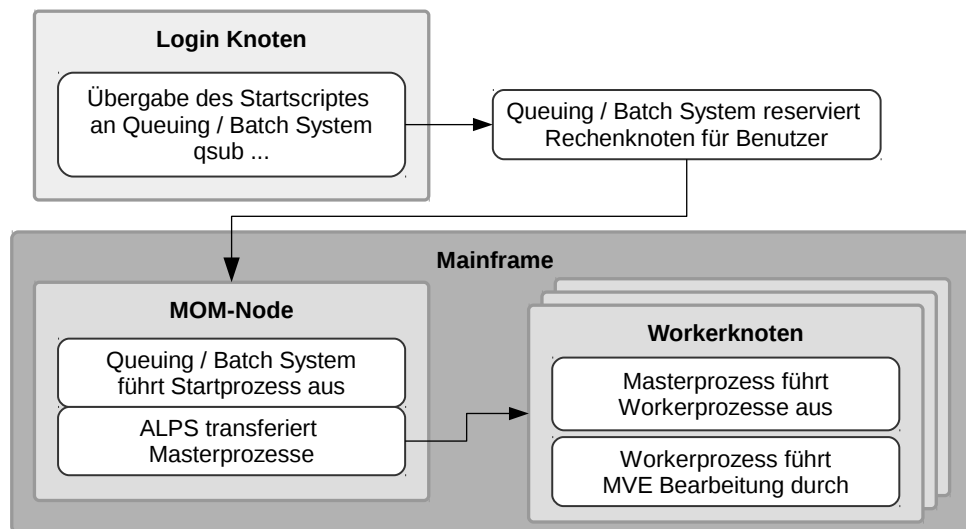


Abb. 5.23: Übersicht Scriptimplementierung Szenario 2: Master-Worker-Schema auf einem CRAY HPC-System zur Bearbeitung kleiner Problemgrößen

Das Problem, welches in diesem Szenario auftritt, ist die Masterprozesse untereinander zu synchronisieren, da diese nun unabhängig voneinander auf physikalisch getrennten Rechenknoten ausgeführt werden. Eine Möglichkeit wäre gewesen, die zu bearbeitenden MVEs gleichmäßig auf die Masterprozesse zu verteilen. Da aus diesem Vorgehen jedoch, aufgrund der stark unterschiedlich langen Laufzeiten der einzelnen MVE Bearbeitungen, eine potentiell schlechte Lastbalancierung resultiert hätte, wurde es verworfen.

Das implementierte Vorgehen besteht darin, alle Masterprozesse den durch den Startprozess erstellten Verzeichnisbaum auf gleiche Art und Weise traversieren zu lassen.

Von den Masterprozessen wird dabei jeweils versucht, ein Verzeichnis im gerade erreichten Verzeichnis des Baumes zu erstellen. Ist dies erfolgreich, so ist dies das Signal, einen Workplace mit dem entsprechenden Arbeitspaket zu belegen. Gelingt das Erstellen des Verzeichnisses dagegen nicht, so ist dies das Signal, dass ein durch einen anderen Masterprozess gestarteter Workerprozess bereits in dem soeben erreichten Verzeichnis des Baumes arbeitet und das Traversieren des Verzeichnisbaumes fortgesetzt werden muss. Die Belegung der einzelnen Workplaces erfolgt dabei wie im vorangegangenen Abschnitt erläutert, durch das Verschieben von Dateien zwischen dem Active- und Passive-Directory, wobei im vorliegenden Fall für jede Master-Worker-Gruppe ein eigenes Active- und Passive-Directory erstellt wird. Der in Abb. 5.22 dargestellte Prozess muss, wie in Abb. 5.24 zu sehen, um die Traversierung des Verzeichnisbaumes erweitert werden.

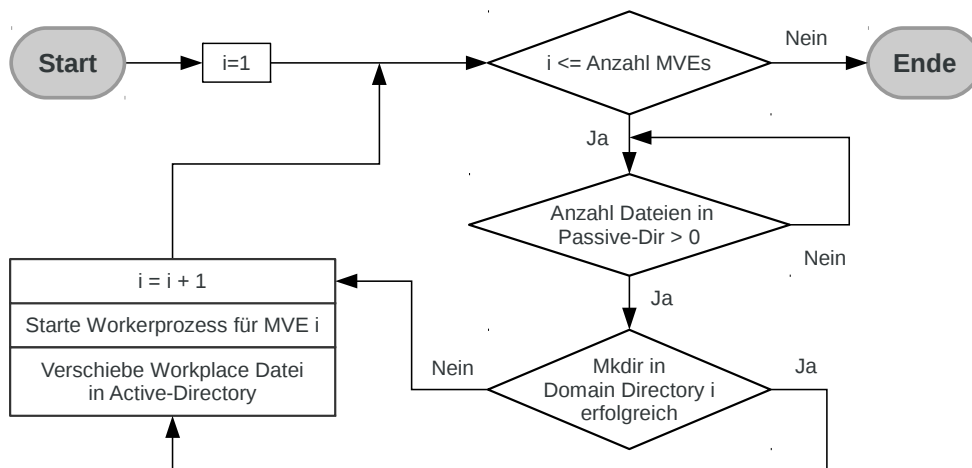


Abb. 5.24: Szenario 2: Ablauf der Masterprozesse

Für das Sperren der einzelnen Verzeichnisse des Baumes wird das Anlegen eines Verzeichnisses verwendet, da es sich hierbei um eine atomare Operation des Lustre-Dateisystems handelt. Während der Entwicklung des Prozesses wurde, wie bei der Synchronisation von Masterprozess und den zugehörigen Workern, mit dem Verschieben von Dateien experimentiert. Es stellte sich jedoch bei Versuchen und durch Recherche in [67] heraus, dass das Verschieben einer einzelnen Datei keine atomare Operation darstellt und von zwei oder mehr Prozessen erfolgreich durchgeführt werden kann.

Beginnend bei den kleinen Problemgrößen wurden die MVE Kantenlängen im Verlauf der Arbeit sukzessive vergrößert, wodurch sich der Speicherbedarf sowie die Rechenzeiten insbesondere der FE-Simulationen ebenfalls vergrößerten. Ab einer MVE

Kantenlänge von  $2,4\text{ mm}$  ist es mit Hilfe der seriellen Implementierungen der MVE Bearbeitung nicht mehr möglich, ein einzelnes MVE innerhalb von 24 Stunden auf einem einzelnen Rechenkern des HLRS CRAY-XE6 System durchzuführen. Ebenso ist es nicht mehr möglich jeweils eine MVE Bearbeitung auf allen Rechenkernen eines Rechenknotens auszuführen, da für diese Problemgröße der pro Rechenkern verfügbare Speicher überschritten wird.

Ein weiteres Speicherlimit, welches die Ausführung des Prozesses für MVE Kantenlängen  $> 2,4\text{ mm}$  auf dem CRAY-XE6 System verhindert ist der insgesamt auf einem Rechenknoten verfügbare Speicher. Zum Zeitpunkt der Arbeit verfügte das System über Knoten mit 32GB und 64GB Speicher. 64GB Speicher sind jedoch nicht ausreichend um MVEs mit einer Kantenlänge von  $4,8\text{ mm}$  zu bearbeiten. Aus diesem Grunde wurde der Prozess für die großen Problemgrößen wieder zurück auf das PC-Cluster System umgezogen.

#### 5.4.1.3. Szenario 3 : Große Problemgrößen auf PC-Cluster

Das dritte Szenario ist die Berechnung der MVE Kantenlängen  $2,4\text{ mm}$  und  $4,8\text{ mm}$  auf einem PC-Cluster. Dieses Szenario ist von der Problemseite durch die folgenden Parameter charakterisiert:

- DOF pro MVE :  $> 4,5\text{ Mio.}$
- Benötigter Arbeitsspeicher pro MVE-Prozess :  $> 8\text{ GB}$
- Serielle Bearbeitungszeit für ein einzelnes MVE :  $> 36\text{ Std.}$
- MVE Anzahl im Testvolumen :  $< 2550$

Wie in Abschnitt 5.3.2.3 beschrieben profitiert insbesondere die FE-Simulation von applikationsinterner Parallelisierung. Weitere Teile der MVE Bearbeitung wurden nicht parallelisiert, da der Implementierungsaufwand den zeitlichen Rahmen der Arbeit zu stark ausgedehnt hätte.

Das Vorgehen ist, mit einem heterogenen Verbund aus Rechenknoten zu arbeiten, der aus SMP-Systemen mit 256GB Speicher und 48 Rechenkernen sowie Standardrechenknoten mit 32GB Speicher und 16 Rechenkernen bestand. Die seriellen Teile der MVE Bearbeitung wurden hierbei von den SMP-Systemen übernommen, während die Standardrechenknoten die MPI-parallele Ausführung der PETSc Löserbibliothek übernahmen. Der Ablauf des Masterprozesses ist hierbei gleich dem in Szenario 1 beschriebenen, wobei vom Benutzer die folgenden Vorgaben zu machen und die dazu passenden Ressourcen zu reservieren sind:

- Anzahl der Headnodes  
Gemeint ist die Anzahl von Knoten, welche die seriellen Anteile der MVE Bearbeitung ausführen.
- Anzahl der MVE Bearbeitungen pro Headnode
- Anzahl der Rechenkerne pro Rechenknoten
- Anzahl der Rechenkerne pro FE-Simulation

Das Vorgehen ermöglicht nun zwar die Bearbeitung eines MVE in weniger als 24 Std., jedoch ist es von einer effizienten Nutzung der beteiligten Ressourcen bei durchgehender Reservierung einigermaßen weit entfernt, da die für die parallele Bearbeitung reservierten Ressourcen die serielle Bearbeitungszeit im Leerlauf zubringen. Diesem Problem kann Abhilfe geschaffen werden, wenn die einzelnen Teile der MVE Bearbeitung in unterschiedlichen Rechenläufen mit unterschiedlichen Ressourcenreservierungen durchgeführt werden. Dies bedeutet es wird zunächst der Geometrieaufbau in serieller Abarbeitung für alle zu bearbeitenden MVEs durchgeführt. Anschließend wird der oben beschriebene heterogene Knotenverbund reserviert und die FE-Simulationen durchgeführt. Danach werden wiederum Ressourcen für eine serielle Bearbeitung reserviert und die Berechnung der effektiven Steifigkeit durchgeführt.

Im Rahmen dieser Arbeit konnte mit dem beschriebenen Vorgehen die vollständige Zerlegung mit  $2,4\text{ mm}$  MVE Kantenlänge bearbeitet werden.

### 5.4.2. MPI Implementierung

Wie bereits erwähnt wurde zusätzlich zur ursprünglichen Implementierung der Prozesssteuerung über Shell-Scripte und das Dateisystem eine MPI Implementierung erstellt, da zum einen die Prozesssteuerung die ohnehin schon hoch belasteten E/A-Systeme noch weiter beansprucht und zum anderen die Prozesssteuerung bei hoher Belastung des E/A-Systems durch andere Benutzer stark beeinträchtigt wird. Die gewählte Server-Client Implementierung ist in Abb. 5.25 dargestellt und entspricht im wesentlichen dem in [68] vorgestellten Beispiel zur sogenannten non-blocking Communication.

Der erste MPI Prozess fungiert hierbei als Master, der die Verteilung der Arbeitspakete an die restlichen MPI Prozesse übernimmt. Ein Arbeitspaket besteht hierbei aus 8 Byte für die Nummer im globalen Nummerierungsschema sowie 256 Byte für den Pfad zum Arbeitsverzeichnis des zu bearbeitenden MVE. Des weiteren müssen 8 Byte für den Workerstatus einmal gesendet und empfangen werden. Insgesamt

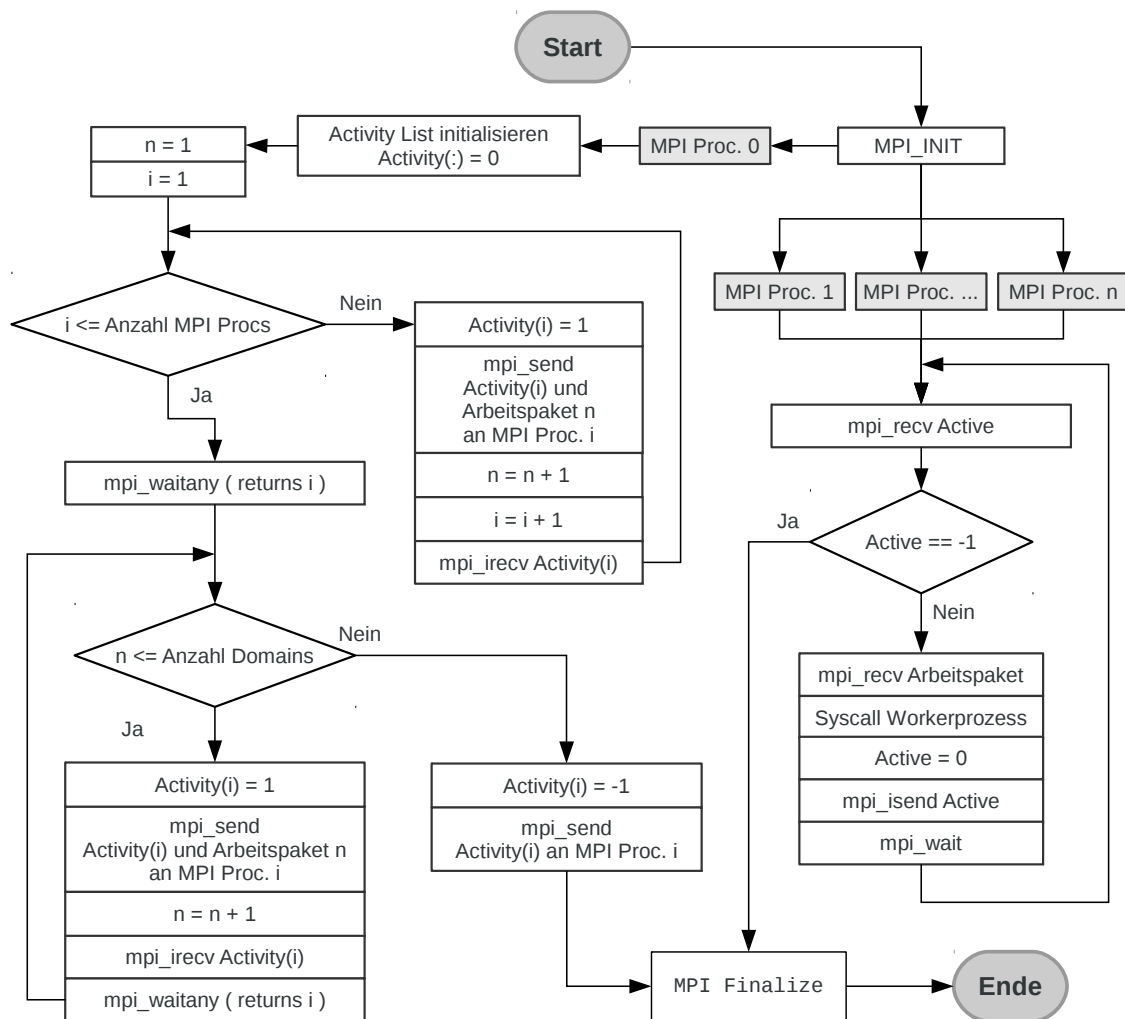


Abb. 5.25: Ablaufdiagramm der MPI-Prozesssteuerung

werden also 280 Byte zur Bearbeitung eines MVEs kommuniziert. Der Ablauf der Kommunikation gestaltet sich wie folgt.

Zunächst wird durch den Masterprozess an alle Workerprozesse jeweils ein Arbeitspaket zusammen mit dem Aktivitätsstatus 1 gesendet sowie ein nicht blockierender Empfang des Aktivitätsstatus initiiert. Nach der initialen Verteilung von einem Arbeitspaket pro Worker wird der Masterprozess durch die Subroutine MPI\_WAITANY aufgehalten bis mindestens ein Workerprozess, nach der Bearbeitung des zugewiesenen Arbeitspaketes, seinen Aktivitätsstatus an den Master zurück gesendet hat. Welcher Worker sein Arbeitspaket zuerst erledigt hat wird dem Masterprozess durch die Subroutine MPI\_WAITANY bekannt gemacht. Der Masterprozess versendet nun wieder ein Arbeitspaket zusammen mit dem Aktivitätsstatus 1 an den freien Worker und initiiert einen nicht blockierenden Empfang des Aktivitätsstatus. Danach wartet der Master, wiederum aufgehalten durch MPI\_WAITANY auf den nächsten freien

Worker.

Dieses Wechselspiel zwischen Master- und Workerprozessen erfolgt so lange bis alle Arbeitspakete bearbeitet sind. Die eigentliche MVE Bearbeitung wird wie in der Scriptimplementierung durch ein sequentielles Shell-Script gesteuert, das durch einen Systemaufruf von den Workerprozessen auf dem jeweiligen Berechnungsknoten ausgeführt wird.

Die Bearbeitung von weniger Arbeitspaketen als Workerprozessen ist in dieser Implementierung nicht vorgesehen und auch nicht sinnvoll.

## 5.5. Datenarchivierung

Ein Problem, das bei der Entwicklung der vorgestellten Prozesskette aufkam und welches charakteristisch für Prozesse mit vielfacher Ausführung einzelner Applikationen ist, ist das Zusammenführen bzw. Packen der erzeugten Daten zum Zwecke der dauerhaften Abspeicherung, des Datentransfers oder auch des Postprocessings.

Wie in Abschnitt 5.1.3.2 erläutert, ist das Bewegen von mehreren Millionen Dateien mit Hilfe serieller Applikationen nur unter hohem Zeitaufwand möglich, da die Anzahl von Dateioperationen pro Sekunde und Rechenkern beschränkt ist. Beispielsweise wird die Anzahl von möglichen Open Operationen eines einzelnen, an das HLRS CRAY-XE6 System angeschlossenen, Lustre-Dateisystems im Bereich von 5000-15000 pro Sekunde angegeben [69]. Diese Zahl wird allerdings nur bei massiver Parallelisierung erzielt. Es zeigt sich durch zwei, im Rahmen der Arbeit an der Zentralen Gruppe des Mikro-CT Datensatzes durchgeführten, Messungen, deren Ergebnisse in Tab. 5.5 angegeben sind, dass ein einzelner Rechenkern ca 2,5 Dateien pro Sekunde zur Archivierung verarbeiten kann. Wie zu sehen ist, hängt die zum Pa-

MVE Kantenlänge [mm]	Datenmenge [GB]	Dateianzahl	Walltime [hh:mm:ss]	Gepackte Dateien pro sec
0,6	265	167952	18:48:52	2,48
1,2	230	20994	02:06:26	2,74

Tab. 5.5: Messung der Archivierungszeiten für die zentrale Gruppe mit Hilfe von tar. Die Messungen erfolgten im laufenden Betrieb des HLRS CRAY-XE6 Systems

cken der Daten benötigte Zeit bei annähernd gleicher Datenmenge maßgeblich von der Anzahl der zu packenden Dateien ab, da die Anzahl der möglichen Operationen pro Sekunde für die analysierten Problemgrößen annähernd konstant ist und bei der

gegebenen Problemstellung den limitierenden Faktor darstellt.

Ein Problem, welches die einfache Parallelisierung einer Archivierung verhindert, ist, dass im Allgemeinen ohne explizite Abfrage nicht einfach festzustellen ist, wie viele Daten in einem Verzeichnis bzw. einer Datei abgelegt sind. Im konkreten Beispiel kann z.B. nicht direkt von der Menge der in einem MVE enthaltenen Struktur auf die Menge der durch die FE-Simulationen erzeugten Daten geschlossen werden, da die Anzahl der inneren Freiheitsgrade des Problems nicht einfach zu ermitteln ist. Parallel arbeitende Prozesse müssten somit ständig untereinander die Informationen austauschen, an welcher Stelle und bis zu welcher Stelle des Archivs der gerade von ihnen bearbeitete Datenabschnitt abgelegt werden soll. Es müsste mit anderen Worten ein sogenanntes Index-Kohärenz-Protokoll geführt werden.

Um dies zu vermeiden, ist der Grundgedanke des implementierten Algorithmus, die Datenindizierung, d.h. die Festlegung an welcher Stelle des Archivs welche Daten abgelegt werden, und das eigentliche Kopieren der Daten getrennt voneinander durchzuführen. Dies bedeutet, dass in Phase 1 (vgl. Abb. 5.26) zunächst alle parallel arbeitenden Prozesse unabhängig voneinander jeweils von einem Teil der abgelegten Daten die Größe der zu archivierenden Datenblöcke bzw. Dateien sowie deren spätere Position innerhalb eines prozesslokalen Index bestimmen. Nach der Indizierung werden in Phase 2 (vgl. Abb. 5.26) die Archivlängen zwischen den Prozessen kommuniziert und mit deren Hilfe die Position der lokalen Archive im globalen Archiv bestimmt. In Phase 3 (vgl. Abb. 5.26) sind allen Prozessen die Positionen der von ihnen zu kopierenden Datenblöcke im globalen Archiv bekannt, und der eigentliche Kopiervorgang kann mittels direkter Adressierung innerhalb des globalen Archivs, wiederum durch alle Prozesse parallel und unabhängig voneinander, erfolgen. Phase 4 (vgl. Abb. 5.26) des Algorithmus stellt aktuell wieder einen Kommunikationsschritt dar, in dem der führende MPI-Prozess von allen anderen Prozessen, deren Indizierungen empfängt, diese zu einem globalen Index kombiniert und abspeichert. Dieser Schritt kann entfallen, falls der Index parallele Abspeicherung erlaubt.

Es zeigt sich, dass die Trennung von Datenstrukturbeschreibung und eigentlichen Daten für den vorgeschlagenen Algorithmus von Vorteil ist. So wird im Indizierungsschritt zunächst von jedem Prozess ein lokales *PureDat*-Projekt angelegt, innerhalb dessen die Struktur der zu archivierenden Datenblöcke beschrieben wird. Im Kommunikationsschritt werden die ermittelten Streamlängen zwischen den Prozessen ausgetauscht und die oberen und unteren Grenzen der Datenblöcke in den Blättern der lokalen *PureDat*-Strukturbäume mit Hilfe der Subroutine `set_bounds_rec` angepasst. Mit Hilfe von MPI-I/O werden anschließend die Daten parallel in die Stream Dateien des globalen *PureDat*-Projektes kopiert. Die globale Indexerstellung

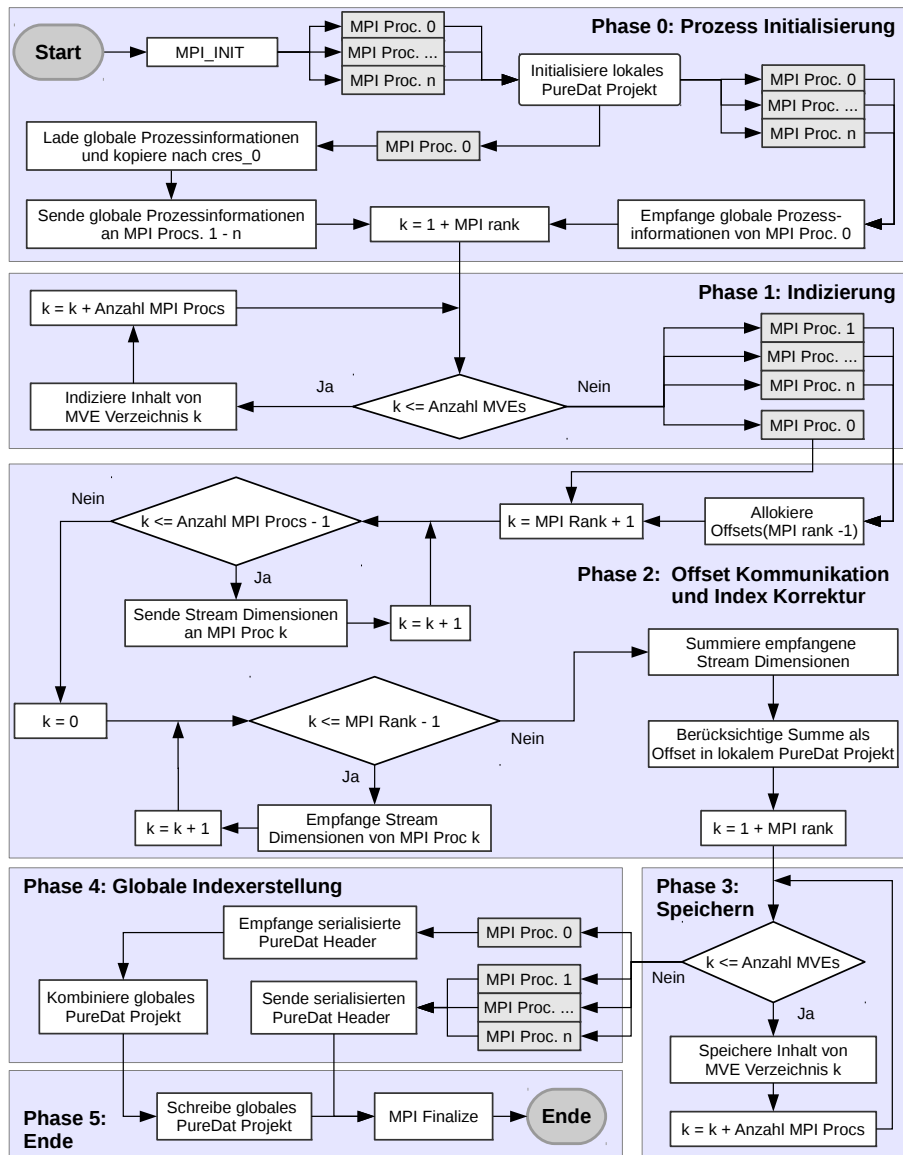


Abb. 5.26: Ablaufdiagramm des Archivierungsalgorithmus

lung erfolgt momentan so, dass der führende MPI-Prozess von allen anderen die *PureDat*-Strukturbaume in serialisierter Form empfängt, diese zu einem globalen *PureDat*-Strukturbaum kombiniert und seriell abspeichert.

Während der Arbeit durchgeführte Tests zeigen, dass eine wesentliche Verbesserung durch die parallele Speicherung des globalen *PureDat*-Strukturbaumes zu erreichen wäre, da so die Kommunikation in Phase 4 vollständig entfallen könnte, da die benötigten Offsets zur Speicherung der Teile des globalen Strukturbaumes bereits in Phase 2 allen MPI-Prozessen bekannt gemacht werden könnten.

Im Verlauf dieser Arbeit wurden mit Hilfe der dargestellten Implementierung die Ergebnisse der Zerlegungsgrößen  $0,6\text{ mm}$  und  $1,2\text{ mm}$  gepackt. Die Kennzahlen der



beiden Archivierungen sind in Tab. 5.6 angegeben.

Zerlegungsgröße	0,6 mm	1,2 mm
MVE Anzahl	169334	21168
Datenmenge [GB]	6503,5	5445,0
Mittlere Datenmenge [GB/MVE]	0,0384	0,257
Dateianzahl	4570470	607650
Mittlere Dateigröße[MB]	1,42	8,96
Walltime [Std:Min:Sek]	02:59:42	02:01:34
Rechenkerne	256	512
Rechenknoten	16	16
Datenrate [Dateien/sek.]	423,9	83,3
Datenrate [GB/sek.]	0,603	0,747

Tab. 5.6: Kennzahlen der parallelen Archivierung der vollständigen Zerlegungen mit MVE Kantenlängen von 0,6 mm und 1,2 mm. Die Zeitmessungen erfolgten im laufenden Betrieb des HLRS CRAY-XE6 Systems

Wie zu erkennen ist, konnten beide Datensätze in unter drei Stunden verarbeitet werden. Der Grund warum für die Archivierung des 0,6 mm-Datensatzes nur 256 Rechenkerne verwendet wurden, ist die momentan noch nicht optimale Implementierung des Kommunikationsschrittes des Strukturbaumes, die in dieser Zerlegungsgröße mehr als die zur Verfügung stehenden 2 GB Speicher pro Rechenkern benötigte.

Detaillierte Betrachtungen der im Laufe der Arbeit entstandenen verallgemeinerten Implementierung des Algorithmus, die auf Dateistrukturen beliebiger Form anwendbar ist, sind in [61] zu finden. Die Entwicklungsversion der verallgemeinerten Implementierung ist unter <https://projects.hlrs.de/projects/ptar> versioniert.



---

## 6. Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die im Rahmen dieser Arbeit gewonnen Erkenntnisse über den Zusammenhang zwischen der Mikrostruktur von spongiösem Knochenmaterial und den daraus abgeleiteten kontinuumsmechanischen Materialparametern dargestellt.

Die betrachteten Auflösungsstufen mit vollständiger Zerlegung des gesamten Testdatensatzes sind  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$  MVE Kantenlänge. Für die Auflösungsstufen  $4,8\text{ mm}$  und  $9,6\text{ mm}$  werden prinzipielle Betrachtungen der strukturbeschreibenden Parameter durchgeführt.

### 6.1. Strukturbeschreibende Parameter

Unabhängig von den berechneten Materialparametern stellt sich die Frage, welche Größen zur Charakterisierung der MVEs und der in ihnen enthaltenen Mikrostruktur herangezogen werden können und wie sich diese Größen auf den betrachteten Zerlegungsstufen verhalten. Auf dem Gebiet der Histomorphometrie von Knochen werden hierfür zahlreiche Kenngrößen definiert [70].

Das letztendliche Ziel der in dieser Arbeit durchgeführten Betrachtungen ist die Ermittlung einer Übertragungsfunktion zwischen dem Feld der berechneten kontinuumsmechanischen Materialparameter und dem Dichtefeld einer  $k$ -CT. Da die  $k$ -CT, wie in Abschnitt 2.3.3 erläutert, die Mikrostruktur des spongiösen Knochen nur räumlich gemittelt d.h. integral erfassen kann, wird zur Charakterisierung der Mikrostruktur zunächst die relative Dichte bzw. das Knochenvolumen (BV) herangezogen.

Das Knochenvolumen wird in [70] als primäres Maß der Histomorphometrie von Knochen angegeben und wird in der Literatur häufig als bestimmender, unabhängiger Parameter für die Materialeigenschaften von spongiösem Knochen identifiziert [28, 26, 27]. In [71] wird allerdings darauf hingewiesen, dass Schwankungen in den Festigkeitseigenschaften von Knochen nur zu 76% durch das Knochenvolumen erklärt werden können. Die Kombination des Parameters Knochenvolumen mit weiteren morphologischen Parametern kann dagegen bis zu 90% der Variabilität der

Festigkeitseigenschaften erklären. Aus diesem Grunde werden in dieser Arbeit folgenden Untersuchungen als weitere Kenngröße der Mikrostruktur die Knochenoberfläche (BS) pro MVE sowie weitere morphologische Parameter auszuwerten sein.

### 6.1.1. Relative Dichte der ausgezeichneten Volumina

Die relative Dichte lässt sich von der scheinbaren Dichte, die ebenfalls als geeignetes Maß zur Charakterisierung der Festigkeitseigenschaften von spongiösem Knochenmaterial gilt, ableiten. Für die scheinbare Dichte gilt:

$$\rho_{app} = \frac{m_{str}}{V_{ges}} \quad (6.1)$$

mit  $m_{str}$  der Masse der Mikrostruktur und  $V_{ges}$  dem Gesamtvolumen des betrachteten Körpers. Im Gegensatz hierzu wird bei Angabe der wahren Dichte  $\rho_{true}$  die Masse nur auf das Volumen der stofflichen Phase bezogen.

$$\rho_{true} = \frac{m_{str}}{V_{str}} \quad (6.2)$$

mit  $V_{str}$  dem Volumen der stofflichen Phase, d.h. im vorliegenden Fall, der Mikrostruktur.

Der Quotient aus scheinbarer und wahrer Dichte wird Relative Dichte genannt und gibt im Endeffekt ein Volumenverhältnis zwischen dem Gesamtvolumen und dem Volumen der darin enthaltenen Mikrostruktur an.

$$\rho_{rel} = \frac{\frac{m_{str}}{V_{ges}}}{\frac{m_{str}}{V_{str}}} = \frac{V_{str}}{V_{ges}} \quad (6.3)$$

Die relative Dichte wird in dieser Arbeit auf Voxelbasis ermittelt. Dies bedeutet, dass Volumen durch die Anzahl in ihnen enthaltener Voxel, multipliziert mit dem Volumen eines einzelnen Voxels, ermittelt werden. Dieses Vorgehen wird ebenfalls in der Histomorphometrie bei der Bestimmung des Knochenvolumens angewandt [72]. Dies bedeutet die in dieser Arbeit verwendete relative Dichte  $\rho_{rel}$  ist dem Knochenvolumen (BV) äquivalent.

Berechnet man die relative Dichte für das gesamte  $\mu$ -CT-Volumen, so ergibt sich ein Wert von  $\rho_{rel,\mu-CT} = 0,14639$ . Dies bedeutet, dass 14,639% des gesamten  $\mu$ -CT-Volumens mit Knochenstruktur gefüllt sind.

Für das umgebende Volumen liegt der Wert der relativen Dichte dagegen bei

$$\rho_{rel,UV} = 19,16\% \quad (6.4)$$

Dieser Wert liegt deutlich höher als der des Gesamtvolumens. Dies ist plausibel, da das Strukturvolumen  $V_{str}$  konstant gehalten wurde, während das Bezugsvolumen  $V_{ges}$  verkleinert wurde.

Es gilt hierbei festzustellen, dass die zur Extraktion des umgebenden Volumens angewendete Methode (siehe Abschnitt 4.3.1) zum einen zeitaufwändig ist und zum anderen je nach Wahl der zugrundeliegenden Parameter relativ stark variierende Ergebnisse liefert. Aus diesen Gründen und weil eine genauere Analyse der Strukturparameter innerhalb des umgebenden Volumens keinen tieferen Erkenntnisgewinn erwarten ließ, wurde die Implementierung einer vertrauenswürdigeren Methode zur Bestimmung des umgebenden Volumens eines mikrostrukturierten Volumens im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt.

Die relative Dichte des spongiösen Volumens, ergibt sich zu:

$$\rho_{rel,SV} = 17,18\% \quad (6.5)$$

Hier zeigt sich im Vergleich zum umgebenden Volumen ein Abfall der relativen Dichte. Auch dieses Ergebnis ist plausibel, da das spongiöse Volumen gegenüber dem umgebenden Volumen um den kortikalen Randbereich reduziert wurde, welcher eine höhere relative Dichte aufweist als die übrige Spongiosa.

Berechnet man die relative Dichte der zentralen Gruppe, so erhält man einen Wert von

$$\rho_{rel,CG} = 25,824\% \quad (6.6)$$

Im Vergleich zum spongiösen Volumen handelt es sich bei diesem Wert um einen Anstieg der relativen Dichte von über 50%. Da es sich bei der zentralen Gruppe um eine Untermenge des spongiösen Volumens handelt, die 4,22% dessen Inhalt einnimmt, legt dies den Schluss nahe, dass die relative Dichte und somit auch die Morphologie der Mikrostruktur der Spongiosa, auf der Auflösungsstufe von 9,6 mm MVE-Kantenlänge, in einem breiten Bereich variiert. Dies würde bedeuten, dass auf kontinuumsmechanischer Ebene die Annahme nur eines mittleren Materialverhaltens innerhalb des Femurkopfes nicht gerechtfertigt ist.

Diese Aussage lässt sich durch die, in Abb. 6.1 dargestellte, detailliertere Auswertung der Grauwertdichten von drei MVEs mit einer Kantenlänge von 9,6 mm, die alle vollständig innerhalb des spongiösen Volumens liegen, bestätigen.

Die drei MVEs wurden ausgewertet, weil sie im Falle von Nr. 13 die größte, positive Abweichung von  $\Delta\rho_{rel,13} = 50,3\%$ , im Falle von Nr. 25 die größte negative Abweichung von  $\Delta\rho_{rel,25} = -17,3\%$  und im Falle von Nr. 22 die geringste Abweichung

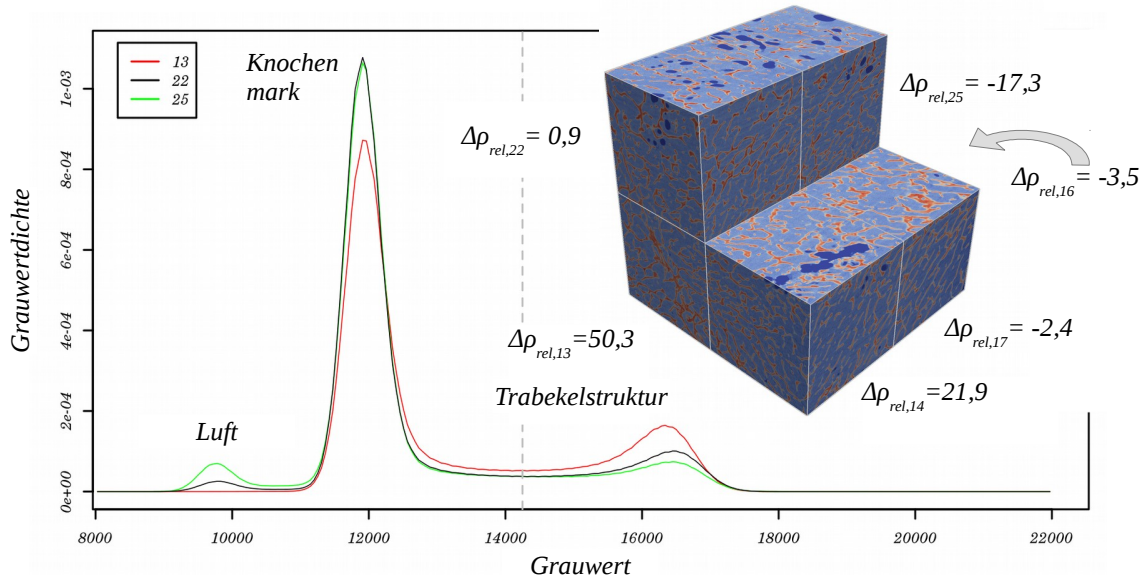


Abb. 6.1: Vergleich der Grauwertdichten von drei MVEs mit 9,6 mm Kantenlänge mit der Grauwertdichte des spongiösen Volumens.

von  $\Delta\rho_{rel,22} = 0,9\%$  gegenüber der relativen Dichte des spongiösen Volumens zeigen. Berücksichtigt wurden dabei die in Abb. 6.1 dargestellten MVEs, die alle fast vollständig, d.h. mit mindestens sieben Eckpunkten, innerhalb des spongiösen Volumens liegen.

Die Grauwertdichten wurden auf Basis von Histogrammen mit 256 Grauwertklassen erstellt und normiert. Die Normierung erfolgte mit der Summe:

$$d(x_i) = h(x_i) \left( \sum_{n=1}^{256} h(x_n) * dx_h \right)^{-1} \quad (6.7)$$

mit  $h(x_i)$  der diskreten Grauwertverteilung und  $dx_h$  der Breite der Grauwertklassen. Die senkrechte grau gestrichelte Linie markiert den Schwellwert von  $\mathcal{G} = 14250$ , der zur Trennung von Knochenstruktur und Markbereich verwendet wurde (siehe Abschnitt 4.3.3).

Es ist zu erkennen, dass sich die drei wesentlichen Maxima, welche die drei im Datensatz enthaltenen Phasen Luft, Knochenmark und Trabekelstruktur markieren, zwischen Nr.22 und Nr.25 in ihrer Lage und Breite nicht unterscheiden. Tatsächlich werden alle drei Maxima in der jeweils gleichen Grauwertklasse ermittelt wie Tab. 6.1 zu entnehmen ist. Der Unterschied der relativen Dichte resultiert bei diesen beiden MVEs nur aus der unterschiedlichen Höhe der Luft und Trabekelstruktur markierenden Maxima. Im Gegensatz dazu ist das die Trabekelstruktur markierende Maxima

bei Nr.13 nicht nur wesentlich höher, sondern auch in Richtung des Schwellwerts  $\mathcal{G} = 14250$  verschoben. Das Maxima, welches das Knochenmark markiert, weist bei Nr.13 im Vergleich zu den anderen MVEs eine ähnliche Breite und Lage auf, liegt jedoch deutlich niedriger.

	MVE Nr.	Luft		Knochenmark		Trabekelstruktur	
Klasse / Höhe	13	-	0,0	11910	$0,8721 \cdot 10^{-3}$	16340	$0,1623 \cdot 10^{-3}$
Klasse / Höhe	22	9777	$0,0256 \cdot 10^{-3}$	11910	$1,0777 \cdot 10^{-3}$	16450	$0,1009 \cdot 10^{-3}$
Klasse / Höhe	25	9777	$0,0701 \cdot 10^{-3}$	11910	$1,0646 \cdot 10^{-3}$	16450	$0,0742 \cdot 10^{-3}$

Tab. 6.1: Lage und Höhe der phasenmarkierenden Maxima in unterschiedlichen MVEs der Kantenlänge  $9,6\text{ mm}$

Es kann somit festgestellt werden, dass MVEs, mit von außen betrachtet ähnlicher Morphologie, qualitativ gleiche Grauwertverteilungen aufweisen. Die detaillierte, quantitative Auswertung der Verteilungen ergibt jedoch, dass bereits auf der Auflösungsstufe von  $9,6\text{ mm}$  MVE Kantenlänge eine starke Varianz der relativen Dichte innerhalb des Femurkopfes besteht. Dies bedeutet, dass die oben aufgestellte Vermutung bestätigt wurde, nach der die Anwendung eines einzelnen mittleren Materialverhaltens innerhalb des Femurkopfes bereits auf dieser Auflösungsstufe nicht gerechtfertigt sei. Geht man beispielsweise von einer linearen Übertragungsfunktion zwischen Materialsteifigkeit und relativer Dichte aus, so würde bei einer linearen, kraftgesteuerten Berechnung und Verwendung eines mittleren Materialverhaltens die Dehnung in MVE Nr.13 um 50% zu gering berechnet werden.

Zusammenfassend kann, ausgehend von den vorangegangenen Ausführungen, bereits jetzt festgestellt werden, dass die Zerlegung eines menschlichen Femurkopfes in MVEs der Kantenlänge  $9,6\text{ mm}$  nicht geeignet ist, um daraus sinnvoll verwendbare Materialparameter für kontinuumsmechanische Simulationen abzuleiten. Durch die im Verhältnis zur Größe der Gesamtstruktur sehr grobe Zerlegung ergeben sich zu wenige MVEs, die zu großen Teilen bzw. vollständig innerhalb des Femurkopfes liegen. Diese wenigen MVEs weisen zusätzlich eine hohe Varianz der relativen Dichte auf. Durch diese Kombination lassen sich keine statistisch relevanten Aussagen über die Verteilung der Festigkeitseigenschaften innerhalb des Femurkopfes treffen.

Dieses Resultat wird auch durch die in [73] durchgeführten Untersuchungen bestätigt. Dort wird festgestellt, dass das Knochenvolumen von Biopsieproben des Becken-

kamms<sup>1</sup>, zwischen rechter und linker Seite des selben Patienten, um 29% schwanken kann. Aufgrund dieses Ergebnisses wird zu äußerster Vorsicht bei der statistischen Interpretation histomorphometrischer Parameter von unterschiedlichen Biopsieproben des selben Patienten geraten.

Umgekehrt erklären die Ausführungen des aktuellen Abschnitts die in [73] erzielten Ergebnisse, da sofort einzusehen ist, dass eine um ca. 10 mm veränderte Position einer Knochenbiopsie zu einem um 30% veränderten Ergebnis führen kann.

Aus den vorgenannten Gründen wird die Zerlegungsstufe 9,6 mm in den nachfolgenden Betrachtungen nur noch der Vollständigkeit wegen mitgeführt.

In diesem Abschnitt werden die Untersuchungen der statistischen Verteilung der relativen Dichte in den Zerlegungsstufen 0,6 mm - 9,6 mm innerhalb des SV dargestellt. Um die spongiöse Struktur zunächst frei von etwaigen Randeinflüssen, d.h. dem Übergang zur Kortikalis analysieren zu können, wurden die in Tab. 6.2 angegebenen Verteilungsparameter sowie die in Abb. 6.2 dargestellten Histogramme verwendet. In die Berechnung der Histogramme gingen, im Falle von 9,6 mm Kantenlänge, die in Abb. 6.1 dargestellten MVEs ein. In allen anderen Fällen gingen in die Berechnung alle MVEs die vollständig, d.h mit allen acht Eckpunkten, innerhalb des spongiösen Volumens liegen, ein.

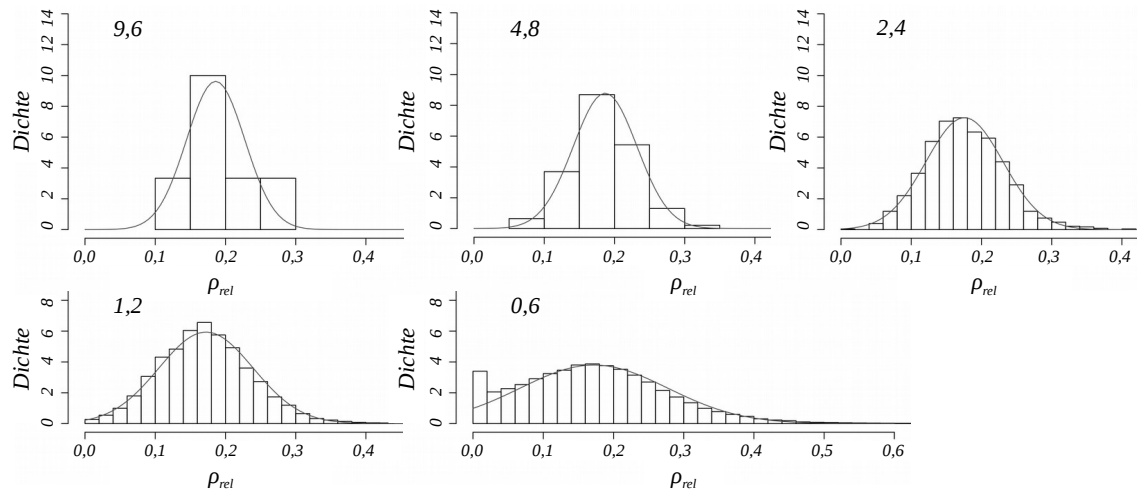


Abb. 6.2: Normierte Häufigkeitsverteilungen der relativen Dichte bei Zerlegung des spongiösen Volumens in MVEs der Kantenlängen 0,6 mm, 1,2 mm, 2,4 mm, 4,8 mm und 9,6 mm.

Wie in Abb. 6.2 zu erkennen ist, lassen sich die Verteilungen der relativen Dichte

<sup>1</sup>Die typische Länge von Biopsieproben des Beckenkammes ist ca. 10 mm vgl.[74].



auf allen Auflösungsstufen sehr gut durch Normalverteilungen approximieren. Die Unsymmetrien in den realen Verteilungen der Zerlegungsgrößen  $9,6\text{ mm}$  und  $4,8\text{ mm}$  sind auf die sehr bzw. relativ geringe Anzahl von MVEs zurück zu führen, die zur Berechnung der Histogramme zur Verfügung standen. Die den Normalverteilungen zu Grunde liegenden Parameter, Mittelwert der relativen Dichte  $\bar{\rho}_{rel}$  und Standardabweichung  $s$ , sind in Tab. 6.2 angegeben.

Zerlegung	$\bar{\rho}_{rel}$	$s$	# MVEs in SV	# MVEs in SV mit $m_{str} = 0$
0,6	0,1722	0,104998	92537	1589
0,6	0,1752	0,103446	90948	0
1,2	0,1724	0,067161	10802	9
2,4	0,1759	0,054918	1137	0
4,8	0,1867	0,045420	96	0
9,6	0,1861	0,041464	6	0

Tab. 6.2: Parameter der Normalverteilungen der relativen Dichte für die Zerlegungsstufen  $0,6\text{ mm}$  -  $9,6\text{ mm}$  des SV

Aus Tab. 6.2 ist abzulesen, dass die relative Dichte bei den Zerlegungsgrößen mit statistisch relevanten MVE Anzahlen innerhalb des SV, d.h.  $0,6\text{ mm}$  bis  $2,4\text{ mm}$ , einen annähernd konstanten Mittelwert besitzt, während sich die Standardabweichung umgekehrt proportional zur Zerlegungsgröße verhält.

Für die Auflösungsstufe  $0,6\text{ mm}$  wird durch die Normalverteilung zwar auch noch eine gute Annäherung erreicht, jedoch ist im Bereich der sehr kleinen relativen Dichten, unterhalb von  $\rho_{rel} = 0,2$ , eine stärkere Abweichung als bei den anderen Zerlegungsstufen zu erkennen. Dies wird auch durch die in Tab. 6.2 angegebene Anzahl von MVEs pro Zerlegungsstufe deutlich, die keine Knochenstruktur in sich einschließen. Dieses gehäufte Auftreten von MVEs mit sehr kleiner relativer Dichte bzw. ganz ohne Inhalt ist bei  $0,6\text{ mm}$  Kantenlänge wie in Abb. 6.3 dargestellt, auf das Unterschreiten der Porengröße der Spongiosa durch die Zerlegungsgröße zurück zu führen.

Wie dargestellt, ist es in der spongiösen Struktur des Femurkopfes zwar möglich, dass ein MVE mit einer Kantenlänge von  $0,6\text{ mm}$  den Querschnitt eines Trabekels vollständig in sich einschließen kann, jedoch wird, bei einer Verschiebung des MVEs in radialer Richtung des Trabekels, das Trabekel durch das MVE nur noch angeschnitten, ohne dass das MVE weitere Struktur in sich aufnimmt. Die relative Dichte des MVE kann so beliebig kleine Werte annehmen bis keine Knochenstruktur mehr in

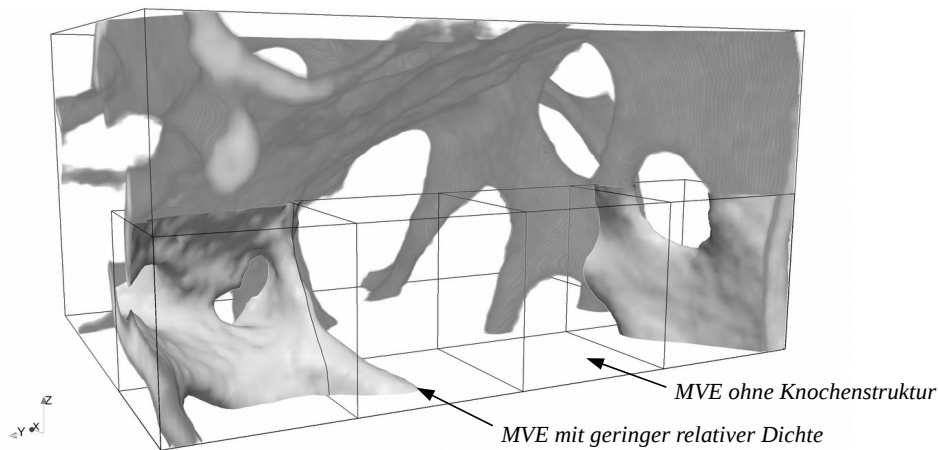


Abb. 6.3: Darstellung des Problems: Unterschreiten der spongiösen Porengröße bei einer Zerlegungsgröße von  $0,6\text{ mm}$

ihm enthalten ist.

Wie in Abb. 6.3 zu erkennen, besitzen die äußersten zwei MVEs eine durchschnittliche relative Dichte, während die anderen beiden nur sehr wenig bzw. gar keine Knochenstruktur enthalten. Es ist weiter zu erkennen, dass das beschriebene Problem, bei einer Zerlegung mit der doppelten Kantenlänge, d.h.  $1,2\text{ mm}$ , nicht auftreten würde. Dies wird auch durch die in Tab. 6.2 angegebenen Anzahlen von MVEs innerhalb des SV, die keine Knochenstruktur enthalten, bestätigt. Da MVEs ohne enthaltene Knochenstruktur keinen Beitrag zum mechanischen Verhalten der Spongiosa liefern, werden diese in den weiteren Betrachtungen des SV vernachlässigt. Daraus ergeben sich die in Zeile 2, Tab. 6.2 angegebenen korrigierten Verteilungsparameter.

Hinsichtlich weiterer, dieser Arbeit folgender, Untersuchungen wäre es sicherlich sinnvoll, ein geeignetes histomorphometrisches Verfahren zu implementieren, welches den Parameter der durchschnittlichen Porengröße sowie weitere Parameter zur Klassifizierung der Beschaffenheit der Spongiosa exakt bestimmt. Dies würde die globale Parametrisierung und Klassifizierung unterschiedlicher Datensätze nach Alter, Geschlecht und Krankheitsbild erlauben.

### 6.1.2. Statistische Verteilung der relativen Dichte in den Gesamtzerlegungen

Um die Gesamtzerlegungen der statistischen Auswertung zugänglich zu machen, mussten die Datensätze zunächst auf das umgebende Volumen reduziert werden. Um die aufwändige geometrische Bestimmung der innerhalb der triangulierten Oberfläche des umgebenden Volumens gelegenen MVEs zu vermeiden, wurde die Reduktion

mit Hilfe eines Schwellwertkriteriums durchgeführt. Vernachlässigt werden dabei alle MVEs mit einer relativen Dichte  $\rho_{rel} < 0,01$ . Daraus ergeben sich die in Tab. 6.3 angegebenen Anzahlen und Anteile der MVEs mit einem Knochenvolumen  $\geq 1\%$  des gesamten MVE Volumens. Die reduzierten Anzahlen werden im Folgenden mit  $\mathcal{N}_{red}$  bezeichnet.

Zerlegung	9,6	4,8	2,4	1,2	0,6
MVE Anzahl: $\mathcal{N}_{\mathcal{M}}$ [#]	27	294	2548	21168	169344
MVEs mit ( $V_S \geq 0,01 V_{\mathcal{M}}$ ): $\mathcal{N}_{red}$ [#]	27	273	2165	17146	126300
[%]	100	92,86	84,97	81,00	74,58
MVEs mit ( $V_S = 0$ ): $\mathcal{N}_0$ [#]	0	11	296	3802	37678
[%]	0	3,74	11,62	17,96	22,25

Tab. 6.3: Anzahlen und Anteile der MVEs mit einem Strukturvolumen  $V_S \geq 1\%$  des gesamten MVE Volumens

Ausgehend von der Zerlegungsgröße von  $9,6 \text{ mm}$  ist in Tab. 6.3 zu erkennen, dass  $\mathcal{N}_{red}$  mit abnehmender MVE Kantenlänge ebenfalls prozentual gegenüber der gesamten Anzahl von MVEs der betreffenden Zerlegung abnimmt. Dies ist plausibel, da es sich beim Gesamtvolumen der durch  $\mathcal{N}_{red}$  bezeichneten MVEs näherungsweise um das umgebende Volumen handelt, welches durch die immer kleinere Zerlegungsgröße, ähnlich dem Vorgehen bei der Bildung einer Obersumme, immer besser approximiert wird.

Betrachtet man die in Abb. 6.4 dargestellten Verteilungen der MVEs, bei welchen das Knochenstrukturvolumen  $V_S < 1\%$  des gesamten MVE Volumens ist, so ist, wie auch schon bei der Analyse des SV, zu erkennen, dass für die Zerlegungsgröße  $0,6 \text{ mm}$  zum ersten Mal MVEs mit dieser Eigenschaft in großer Anzahl auch innerhalb des umgebenden Volumens auftauchen.

Der Schwellwert von  $\rho_{rel} < 0,01$  wurde gewählt, da sich bei der Berechnung der kontinuumsmechanischen Materialparameter verstärkt Unregelmäßigkeiten unterhalb dieser Grenze zeigten. Inwiefern die Vernachlässigung der MVEs mit  $\rho_{rel} < 0,01$  einen Einfluss auf die Ermittlung kontinuumsmechanischer Materialparameter bzw. auf die mit deren Hilfe erzeugten Simulationsergebnisse hat, muss in dieser Arbeit folgenden Untersuchungen detaillierter diskutiert werden. Dies gilt insbesondere für die

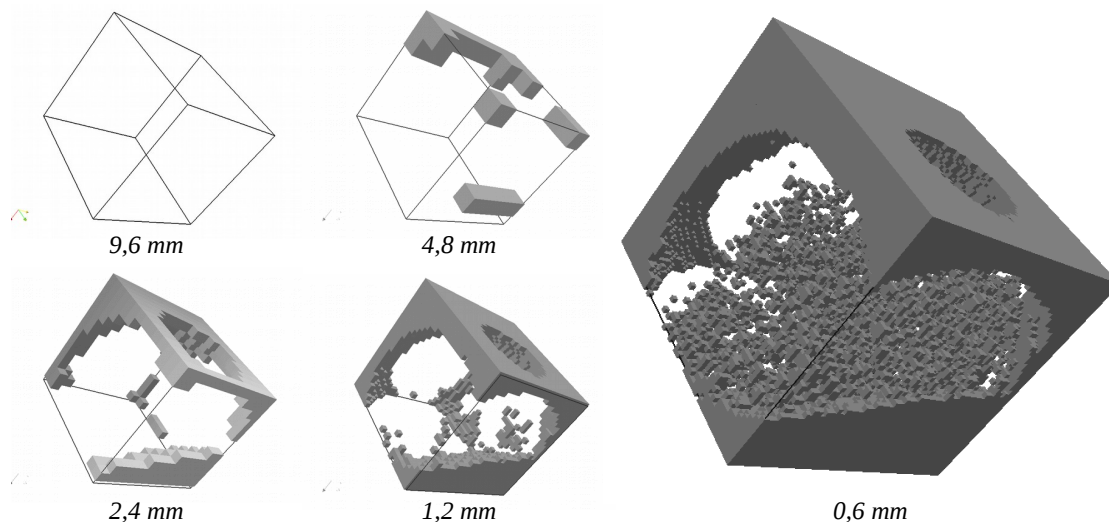


Abb. 6.4: Verteilungen der MVEs mit einem Knochenstrukturvolumen  $V_S < 0,01 V_M$  bei den betrachteten Auflösungsstufen

kleineren Zerlegungsgrößen mit  $L_M \leq 0,6 \text{ mm}$ , bei denen diese MVEs in relevanter Anzahl auch innerhalb der zu analysierenden Knochenbereiche auftreten. Es besteht die Möglichkeit, dass so in Summe ein nicht zu vernachlässigender Anteil an Knochenstruktur in den angestellten Betrachtungen unberücksichtigt bleibt.

Basierend auf den in Tab. 6.3 angegebenen  $\mathcal{N}_{red}$  wurden die in Abb. 6.5 dargestellten Histogramme und Normalverteilungen der relativen Dichte für die Gesamtzerlegungen berechnet.

Im Vergleich zu den innerhalb des SV ermittelten Normalverteilungen ist bei den Verteilungen der relativen Dichte in den Gesamtzerlegungen eine deutliche Abweichung der analytischen Normalverteilungen gegenüber den realen Verteilungen zu erkennen. Dies gilt insbesondere für die Zerlegungsstufen  $0,6 \text{ mm}$  und  $1,2 \text{ mm}$ . Hier ist eine deutliche Verschiebung der analytischen Funktionen zu höheren Werten erkennbar.

Dies wird auch durch die in Tab. 6.4 angegebenen quantitativen Auswertung der Verteilungen von  $\rho_{rel}$  deutlich. Im Gegensatz zum SV, bei dem ein annähernd konstanter Mittelwert der statistisch relevanten Verteilungen,  $0,6 \text{ mm}$ ,  $1,2 \text{ mm}$  und  $2,4 \text{ mm}$  beobachtet werden konnte, verhält sich der Mittelwert  $\bar{\rho}_{rel}$  ebenso wie die Standardabweichung  $s$  bei den Gesamtzerlegungen umgekehrt proportional zur Zerlegungsgröße.

Da sich die Menge der MVEs pro Gesamtzerlegungen in Kombination mit dem

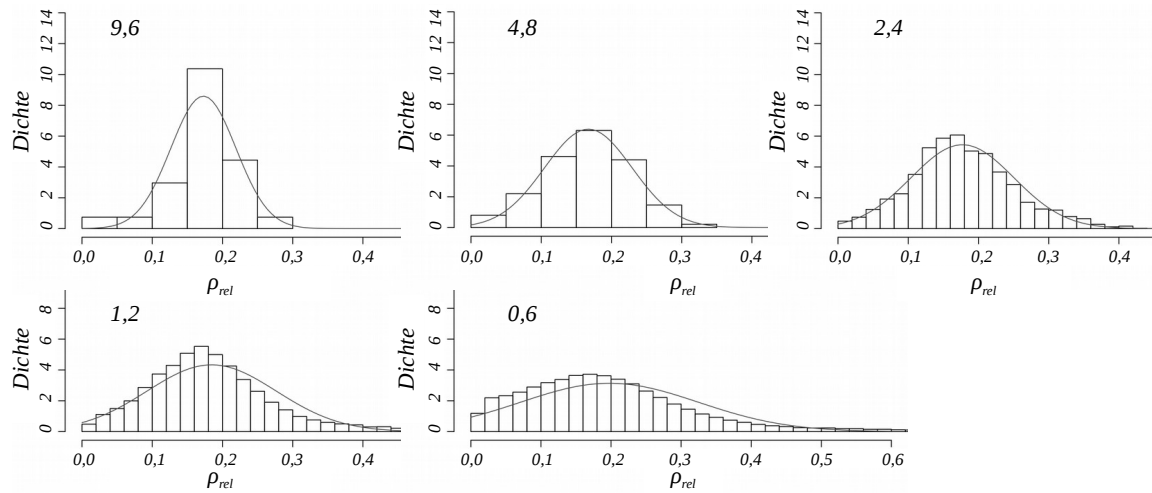


Abb. 6.5: Normierte Häufigkeitsverteilungen der relativen Dichte bei Zerlegung des Gesamtdatensatzes in MVEs der Kantenlängen 0,6 mm - 9,6 mm. Vernachlässigt sind alle MVEs für die  $\rho_{rel} < 0,01$  gilt.

Zerlegung	$\bar{\rho}_{rel}$	$s$
0,6	0,1977250	0,12717338
1,2	0,1846317	0,09205919
2,4	0,1772508	0,07331385
4,8	0,1670779	0,06245330
9,6	0,1728745	0,04641221

Tab. 6.4: Parameter der Normalverteilungen der relativen Dichte für die Zerlegungsstufen 0,6 mm - 9,6 mm der Gesamtzerlegungen. Vernachlässigt sind alle MVEs für die  $\rho_{rel} < 0,01$  gilt.

Schwellwert  $\rho_{rel} < 0,01$  im Wesentlichen durch die Kortikalis vom SV unterscheidet, folgt direkt der Schluss, dass die Elemente der Kortikalis für die Verschiebung der Normalverteilungen verantwortlich sind. Offensichtlich entstehen bei der Zerlegung der kompakten Kortikalis in MVEs der Kantenlängen 0,6 mm - 2,4 mm Elemente, deren Morphologie sich wesentlich von der Struktur der Elemente der Spongiosa unterscheidet. Dies bestätigt sich, wenn man die Elemente der Gesamtzerlegungen betrachtet, die oberhalb des 95% Konfidenzintervalls der, mit Hilfe des SV ermittelten, Normalverteilung der entsprechenden Auflösungsstufe liegen. D.h. alle MVEs, für die gilt:

$$\mathfrak{G}_{L,M} : \rho_{rel} - \bar{\rho}_{rel,L,M,SV} - 2 s_{L,M,SV} > 0 \quad (6.8)$$

Mit  $\mathfrak{G}_{L_{\mathcal{M}}}$  der Menge aller MVEs der Zerlegungsgröße  $L_{\mathcal{M}}$ , für die das oben genannte Kriterium gilt,  $\rho_{rel}$  deren relativer Dichte und  $\bar{\rho}_{rel,L_{\mathcal{M}},SV}$  sowie  $s_{L_{\mathcal{M}},SV}$  dem Mittelwert und der Standardabweichung der im SV ermittelten Normalverteilung der entsprechenden Zerlegungsgröße. In Abb. 6.6 sind die ermittelten Mengen für die Zerlegungsstufen  $1,2\text{ mm} - 4,8\text{ mm}$  dargestellt.

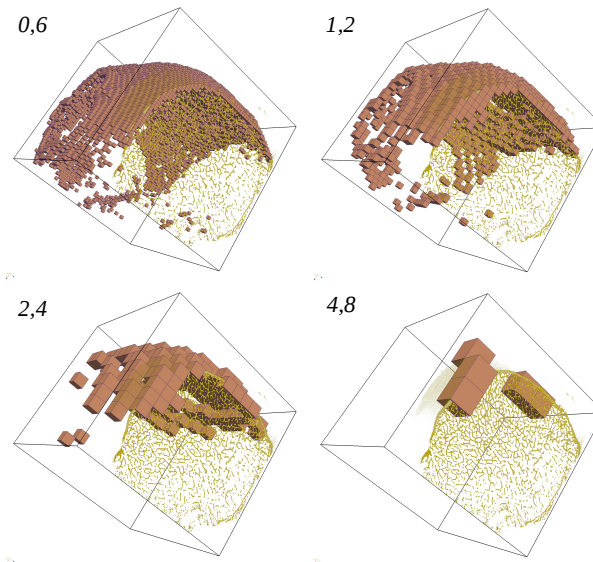


Abb. 6.6: MVEs der Kortikalis. Dargestellt sind die MVEs der Gesamtzerlegungen, die oberhalb des 95% Konfidenzintervalls, der mit Hilfe des SV ermittelten Normalverteilung der entsprechenden Zerlegungsstufe, liegen.

Es ist zu erkennen, dass die Mengen der Zerlegungsgrößen  $L_{\mathcal{M}} = 0,6\text{ mm}$  und  $L_{\mathcal{M}} = 1,2\text{ mm}$  die Kortikalis darstellen. Dies bedeutet, dass die Kortikalis durch die Modellierung der relativen Dichte in der Spongiosa ausgeschlossen wird. Bei der Zerlegungsgröße  $L_{\mathcal{M}} = 2,4\text{ mm}$  ist bereits ein deutlicher Verlust an kortikaler Struktur zu erkennen, und bei der Auflösungsstufe  $L_{\mathcal{M}} = 4,8\text{ mm}$  wird die Kortikalis fast vollständig von der Modellierung der relativen Dichte in der Spongiosa erfasst.

Dies bedeutet, dass die Materialmodellierung auf Basis der relativen Dichte für die Auflösungsstufen  $0,6\text{ mm} - 2,4\text{ mm}$  in den zwei Bereichen Spongiosa und Kortikalis getrennt betrachtet werden sollte, da sich die beiden Bereiche bereits durch den einfachsten histomorphometrischen Parameter klar unterscheiden lassen.

Basierend auf diesem Ergebnis werden im Kapitel 6.2 die Bereiche Kortikalis  $\mathfrak{G}_{Ct}$

und Spongiosa  $\mathfrak{G}_{Cn}$  wie folgt definiert:

$$\mathfrak{G}_{Cn,L_M} = \{\mathcal{M} \mid \mathcal{M} \notin SV \wedge \rho_{rel}(\mathcal{M}) - \bar{\rho}_{rel,L_M,SV} - 2 s_{L_M,SV} > 0\} \quad (6.9)$$

$$\mathfrak{G}_{Ct,L_M} = \{\mathcal{M} \mid \mathcal{M} \in SV \vee (\rho_{rel}(\mathcal{M}) \geq 0,01 \wedge \mathcal{M} \notin \mathfrak{G}_{Cn,L_M})\} \quad (6.10)$$

## 6.2. Kontinuumsmechanische Materialparameter

In diesem Abschnitt werden die mit Hilfe des direkten Ansatzes berechneten Elastizitätsmatrizen analysiert. Zunächst werden die Spektralnorm und die Symmetrieabweichung der Matrizen in Abhängigkeit der relativen Dichte ausgewertet. Des Weiteren werden die Kennwerte der statistischen Verteilungen der Komponenten der effektiven Steifigkeit dargestellt und diskutiert. Nach der Auswertung der Kenngrößen für die Gesamtmatrizen werden die Abhängigkeiten der einzelnen Komponenten untereinander dargestellt. Dabei wird gezeigt, dass sich die 21 unabhängigen Parameter zur Beschreibung der anisotropen effektiven Steifigkeitsmatrix mit Hilfe manueller Gruppierung, Klassifizierung durch eine Diskriminanzanalyse sowie einer darauf folgenden Hauptkomponentenanalyse, wesentlich reduzieren lassen.

### 6.2.1. Spektralnorm und Symmetrieabweichung der effektiven Steifigkeit

Wird für alle Elemente der Menge  $\mathfrak{G}_{Cn,L_M}$  die Spektralnorm ihrer effektiven Steifigkeit  $\|\underline{\mathbf{C}}\|_{2,L_M}$  berechnet und gegenüber der relativen Dichte aufgetragen, so erhält man im Falle einer Zerlegungsgröße von  $L_M = 0,6 \text{ mm}$  die in Abb. 6.7 links dargestellte Abhängigkeit. Es ist zu erkennen, dass 6 Elemente sehr hohe Spektralnormen aufweisen. Blendet man diese Elemente aus, so wird wie in Abb. 6.7 rechts dargestellt, eine weitere Gruppe von Elementen sichtbar, die zwar eine nicht verschwindende relative Dichte aufweisen, bei denen jedoch die Spektralnorm der Elastizitätsmatrix gleich Null ist. Zunächst wurde angenommen, es handele sich hierbei um Elemente, bei denen die Lösung einer FE-Berechnung nicht zur Konvergenz gebracht werden konnte. Die Analyse des Problems zeigte jedoch, dass diese Gruppe von Elementen durch einen Logikfehler in der Implementierung der Restartoption der Simulationsprozesskette entstanden ist. Da sich die Anzahl der Elemente in dieser Gruppe in überschaubarem Rahmen hielt und die Menge der statistisch auswertbaren MVEs wie in Tab. 6.5 angegeben auch bei Vernachlässigung der Elemente mit einer Spektralnorm gleich Null genügend groß blieb, wurde die Korrektur der Implementierung auf einen späteren Zeitpunkt verschoben.

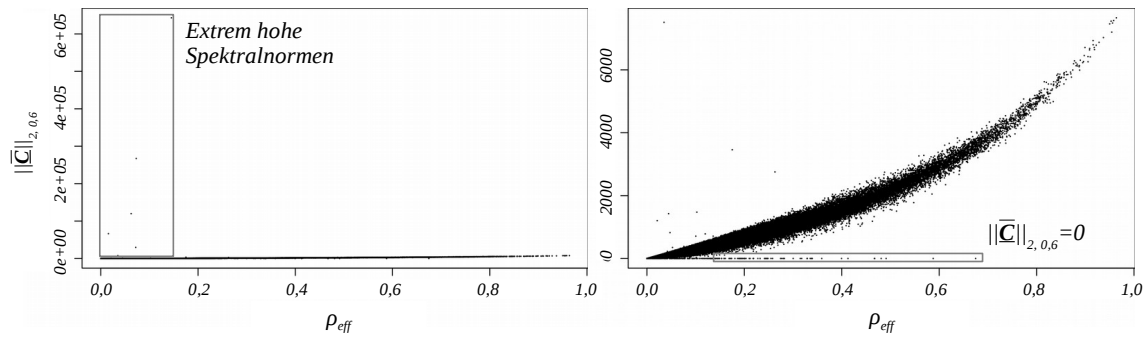


Abb. 6.7: Ausreißer in der Abhängigkeit der Spektralnorm der effektiven Steifigkeit von der relativen Dichte

Analysiert man die in den MVEs mit sehr hohen Spektralnormen enthaltene Struktur detailliert, so wird klar, dass diese hohen Werte durch die in Abschnitt 5.3.1.2 beschriebene Problematik, d.h. durch die Aktivierung von freien Starrkörperrotationen einzelner Elemente oder instabil gelagerter Strukturteile, entstehen. Abb. 6.8 zeigt einen entsprechenden Fall, der bei der Applikation von Lastfall 3 auf MVE Nr.131644 auftrat<sup>2</sup>.

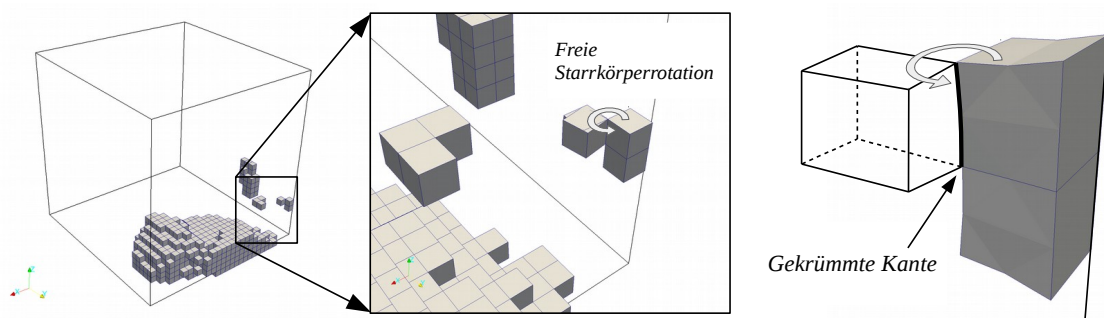


Abb. 6.8: Aktivierung einer freien Starrkörperrotation bei unbestimmter Lagerung von angrenzenden Elementen über doppelte Kanten

Es ist zu erkennen, dass ein Element über nur eine doppelte Kante, die parallel zur globalen x-Achse liegt, mit einem stabil gelagerten Element verbunden ist. Das instabil gelagerte Element kann somit eine kraftfreie Starrkörperrotation um diese zur z-Achse parallele Kante ausführen. Diese Rotation ist in Abb. 6.8 Mitte deutlich zu erkennen. Hier sind die berechneten Verschiebungen um den Faktor 100 skaliert aufgetragen. In Abb. 6.8 rechts sind die berechneten Verschiebungen skaliert um den Faktor  $1 \cdot 10^5$  dargestellt. Hier wird deutlich wie die Starrkörperbewegung im Falle

<sup>2</sup>LF 3 entspricht einer Normaldehnung in globaler z-Richtung. Siehe Anhang C



von Lastfall 3 induziert wird.

Da es sich bei den verwendeten Elementen um Hexaeder mit quadratischen Ansatzfunktionen auf den Elementkanten, d.h. Elemente mit Mittelknoten auf den Kanten, handelt, wird durch die dargestellte Deformation des stabil gelagerten Elementes, eine Krümmung der Verbindungskante zum instabil gelagerten Element hervorgerufen. Diese Krümmung kann zur kraftfreien Rotation des instabil gelagerten Elementes führen. Die daraus resultierenden, unrealistisch hohen Verschiebungen führen bei der nachfolgenden, auf der linearen Theorie basierten, Berechnung der effektiven Steifigkeitsmatrix zu extrem hohen Einträgen, welche die in Abb. 6.7 links zu sehenden extrem überhöhten Werte der Spektralnorm bedingen.

Wie bereits erwähnt, können Starrkörperrotationen nicht nur bei einzelnen Elementen, sondern auch bei ganzen Strukturteilen auftreten. Die sinnvollste Methode diese instabil gelagerte Bereiche der Struktur zu entdecken wäre die Durchführung einer Eigenschwingungsanalyse und die darauf folgende Elimination der nahezu energiefrei anregbaren Strukturbereiche. Da dies jedoch ein eher aufwändiges Verfahren darstellt, wurde die Implementierung bzw. Einbindung eines entsprechenden Algorithmus in die Prozesskette, wie bereits in Abschnitt 5.3.1.2 erwähnt, aufgrund der geringen Anzahl betroffener Elemente nicht durchgeführt.

Neben der Spektralnorm wurde auch die Symmetrieabweichung der berechneten effektiven Steifigkeiten betrachtet, da das oben beschriebene Problem der instabilen Lagerung auch zu effektiven Steifigkeitsmatrizen führte, die zwar eine unauffällige Spektralnorm besaßen, jedoch eine starke Unsymmetrie aufwiesen. Die Symmetrieabweichung wird im Rahmen dieser Arbeit auf Basis der Summe der Abstandskquadrate der Elemente des oberen und unteren Dreiecks der Matrix bestimmt.

$$sd = \sum_{i=1}^5 \sum_{j=i+1}^6 (C_{ij} - C_{ji})^2 \quad (6.11)$$

Die Elemente der drei durch die erläuterten Problematiken entstandenen Gruppen werden in den folgenden Betrachtungen vernachlässigt. Die vernachlässigten sowie die letztendlich in den Mengen  $\mathfrak{G}_{Cn, L_{\mathcal{M}}}$  und  $\mathfrak{G}_{Ct, L_{\mathcal{M}}}$  verbleibenden Elementanzahlen sind in Tab. 6.5 aufgeführt.

Die aus den berücksichtigten Elementen in den Mengen  $\mathfrak{G}_{Cn, L_{\mathcal{M}}}$  und  $\mathfrak{G}_{Ct, L_{\mathcal{M}}}$  resultierenden Abhängigkeiten der Spektralnorm der effektiven Steifigkeit von der relativen Dichte sind in Abb. 6.9 aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass der Wertebereich durch die Vernachlässigung der in Tab. 6.5 identifizierten Elemente, bei den drei betrach-

Zerlegungsgröße [mm]	0,6	1,2	2,4
MVE Gesamtanzahl : $\mathfrak{G}_{Cn,L_M} \cup \mathfrak{G}_{Ct,L_M}$ [#]	130715	16950	2165
Vernachlässigte Elemente aufgrund von $\ \overline{\mathbf{C}}\  > 10000$ : [#]	5	1	0
Vernachlässigte Elemente aufgrund von $\ \overline{\mathbf{C}}\  = 0$ : [#]	1781	319	60
Vernachlässigte Elemente aufgrund von $sd > 40$ : [#]	21	2	12
MVE Anzahl in $\mathfrak{G}_{Cn,L_M}$ : $\mathcal{N}_{Cn,L_M}$ [#]	122282	15522	1949
MVE Anzahl in $\mathfrak{G}_{Ct,L_M}$ : $\mathcal{N}_{Ct,L_M}$ [#]	6626	1106	144

Tab. 6.5: In der statistischen Auswertung der Zerlegungsgrößen 0,6 mm, 1,2 mm und 2,4 mm berücksichtigte Elemente

teten Zerlegungsstufen auf sinnvolle Intervalle beschränkt werden konnte und dass sich keine Ausreißer ober- und unterhalb des kompakten Streubereiches zeigen.

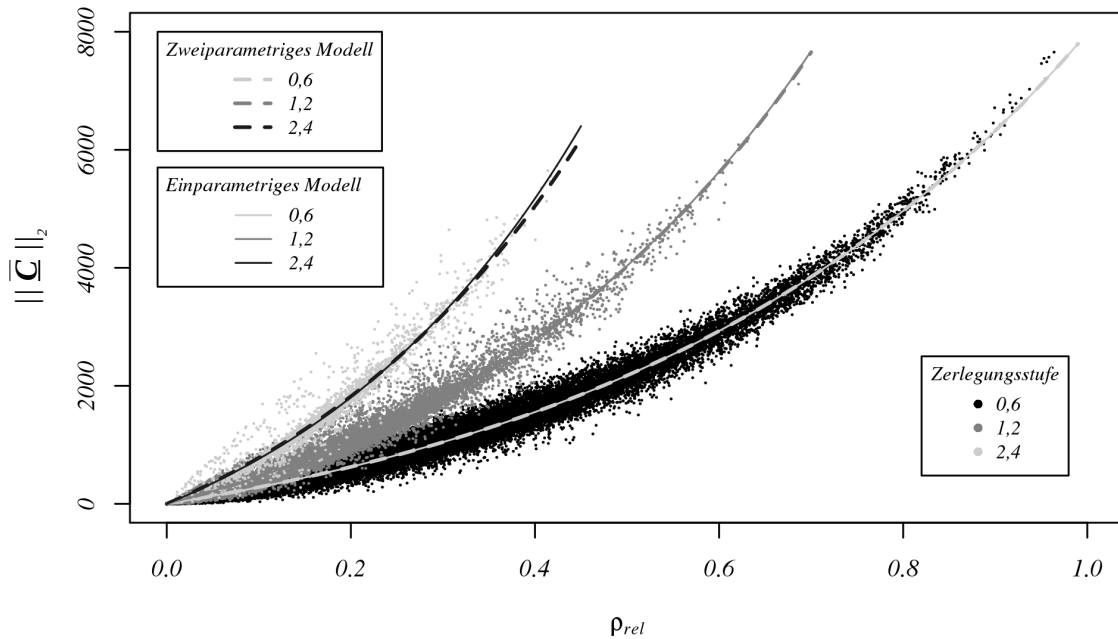


Abb. 6.9: Abhängigkeiten der Spektralnorm der effektiven Steifigkeit von der relativen Dichte auf den Zerlegungsstufen 0,6 , 1,2 und 2,4

Die oberen Schranken für die Spektralnorm  $\|\overline{\mathbf{C}}\|_{2,L_M} < 10000$  und die Symmetrieabweichung  $sd < 40$  wurden empirisch aus den Streudiagrammen der beiden Größen gegenüber der relativen Dichte bestimmt. Ein analytisches Vorgehen wurde nicht entwickelt, da davon auszugehen ist, dass durch die Elimination instabil gelagerter Bereiche sowie die Behebung des Implementierungsfehlers in der Restartoption keine

Ausreißer mehr in den Daten auftauchen werden.

Die in Abb. 6.9 als gestrichelte Linien aufgetragenen Ausgleichskurven wurden mit Hilfe der `R nls` Funktion ermittelt, die nichtlineare least square Regression durchführt [75]. Als Ansatz dienten Exponentialfunktionen der folgenden Form:

$$\|\bar{\underline{C}}\|_2(\rho_{rel})_{L_{\mathcal{M}}} = r_{1,L_{\mathcal{M}}} (e^{r_{2,L_{\mathcal{M}}} \rho_{rel}} - 1) \quad (6.12)$$

Die ermittelten Parameter  $r_{1,L_{\mathcal{M}}}$  und  $r_{2,L_{\mathcal{M}}}$  der Ausgleichskurven sind in Tab. 6.6 zusammen mit dem Parameter  $k_{1,L_{\mathcal{M}}}$ , der in Gl. (6.13) eingeführt wird, angegeben.

Bei den ermittelten Parametern fallen neben ihrem Anstieg mit der Zerlegungsgröße deren Verhältnisse zwischen den Zerlegungsgrößen auf. Insbesondere der Übergang

Zerlegungsstufe $L_{\mathcal{M}}$	$r_{1,L_{\mathcal{M}}}$	$r_{2,L_{\mathcal{M}}}$	$k_{1,L_{\mathcal{M}}}$
0,6	1304,4	1,962	1,000
1,2	1643,0	2,476	1,261
2,4	2362,2	2,858	1,593

Tab. 6.6: Koeffizienten der Ausgleichskurven  $\|C\|_2(\rho_{rel})_{L_{\mathcal{M}}}$

von  $0,6\text{ mm}$  nach  $1,2\text{ mm}$  zeigt wie in Tab. 6.7 angegeben bei beiden Parametern den annähernd gleichen Faktor  $fr_{0,0,6-1,2}$ . Beim Übergang von  $1,2\text{ mm}$  nach  $2,4\text{ mm}$  ergeben sich zwar zwei unterschiedliche Faktoren für  $fr_{1,1,2-2,4}$  und  $fr_{2,1,2-2,4}$ , diese liegen jedoch in einem ähnlichen Wertebereich wie  $fr_{0,0,6-1,2}$ , und ihr Mittelwert ähnelt ebenfalls wieder sehr stark  $fr_{0,0,6-1,2}$ . Gleiches gilt für den Übergang von  $0,6\text{ mm}$  nach  $2,4\text{ mm}$ , wobei der Faktor hier anscheinend im Quadrat auftritt. Aufgrund die-

	$fr_1$	$fr_2$	$fr_0 = \frac{1}{2}(fr_1 + fr_2)$	$fk_1$
$\frac{r_{i,1,2}}{r_{i,0,6}}$	1,260	1,262	1,261	1,261
$\frac{r_{i,2,4}}{r_{i,1,2}}$	1,438	1,154	1,296	1,263
$\sqrt{\frac{r_{i,2,4}}{r_{i,0,6}}}$	1,346	1,207	1,276	1,262

Tab. 6.7: Verhältnisse der Koeffizienten der Ausgleichskurven für  $\|C\|_2(\rho_{rel})_{L_{\mathcal{M}}}$

ser Beobachtungen wurde folgender einparametrigem Ansatz basierend auf den zuvor für die Zerlegungsgröße  $0,6\text{ mm}$  ermittelten Parametern erneut mit Hilfe von `nls` an die Daten angepasst.

$$\|\bar{\underline{C}}\|_2(\rho_{rel})_{L_{\mathcal{M}}} = k_{1,L_{\mathcal{M}}} 1304,4 (e^{k_{1,L_{\mathcal{M}}} 1,962 \rho_{rel}} - 1) \quad (6.13)$$

Die modellierten einparametrischen Abhängigkeiten sind in Abb. 6.9 als durchgezogene Linien dargestellt. Wie zu sehen ist, unterscheiden sich diese nur sehr marginal von den zweiparametrischen Abhängigkeiten. Die zugehörigen Parameter  $k_{1,L\mathcal{M}}$  sind in Tab. 6.6 angegeben. Die Skalierungsparameter  $fr_i$  und  $fk_1$  für die Übergänge zwischen den Zerlegungsstufen sind in Tab. 6.7 eingetragen. Es ist zu erkennen, dass das einparametrische Modell für alle Übergänge annähernd den Faktor des zweiparametrischen Modells für den Übergang von  $0,6\text{ mm}$  nach  $1,2\text{ mm}$  ermittelt.

Diese Ergebnisse legen den Schluss nahe, dass sich die Spektralnormen der mit Hilfe des vorgestellten Verfahrens ermittelten effektiven Steifigkeitsmatrizen wie demonstriert einparametrisch in Abhängigkeit der relativen Dichte modellieren lässt und dass bei Verwendung einer Exponentialfunktion der Modellparameter exponentiell mit der Zerlegungsgröße zunimmt, d.h. einer Regel der Art

$$\|\underline{\bar{C}}\|_2 (\rho_{rel})_{L\mathcal{M}} = k^n A (e^{k^n B \rho_{rel}} - 1) \quad (6.14)$$

gehört. In dieser Arbeit folgenden Untersuchungen gilt es nun zu analysieren, ob sich mit Hilfe dieser Regel auch Zwischengrößen der hier vorgestellten Zerlegungsgrößen modellieren lassen bzw. ob sich die Existenz der Regel auch bei der Analyse anderer Femurköpfe bestätigen lässt. Dies würde wiederum die Möglichkeit bieten, einen globalen histomorphometrischen Parameter für die Beschaffenheit des Knochenmaterials eines Patienten zu gewinnen.

### 6.2.2. Statistische Verteilungen der Komponenten der effektiven Steifigkeit

In Abb. 6.10 sind die elementaren statistischen Parameter, Minimum, Maximum, Mittelwert und Median aller Komponenten der effektiven Steifigkeiten der Zerlegungsgröße  $1,2\text{ mm}$  dargestellt. Es gilt zu beachten, dass die Komponenten im Diagramm nicht nach ihrer Position in der Steifigkeitsmatrix angeordnet sind. Die Darstellung der Komponenten erfolgt hier, ebenso wie in den meisten folgenden Diagrammen, geordnet nach mechanischen Wirkungsgruppen, d.h. die Komponenten sind gruppiert nach ihrer Beeinflussung der wesentlichen mechanischen Merkmale der MVEs.

Ganz links sind zunächst die Diagonalelemente  $C_{11}$ ,  $C_{22}$  und  $C_{33}$  dargestellt, die im wesentlichen die Steifigkeitseigenschaften der MVEs in Richtung der drei Koordinatenachsen, d.h. die Normaldehnungseigenschaften wiedergeben. Als nächstes folgen die Elemente  $C_{12}$ ,  $C_{13}$  und  $C_{23}$ , welche die Kopplungseigenschaften der ersten drei

Komponenten beschreiben. Die drei folgenden Elemente  $C_{44}$ ,  $C_{55}$  und  $C_{66}$  beschreiben das wesentliche Verhalten des MVEs bei Schubbelastung. Da die soeben beschriebenen neun Komponenten der Steifigkeitsmatrix bei isotropem, monotropem und orthotropem Materialverhalten ungleich Null sind und Orthotropie das allgemeinste mit ihnen beschreibbare Materialverhalten darstellt, werden diese neun Komponenten im Folgenden als „orthotrope Gruppe“ bezeichnet.

Die nächsten im Diagramm angegebenen Elemente sind aufgrund ihrer Minima und Maxima innerhalb der Zerlegung ebenfalls als Dreiergruppe zu erkennen. Sie beschreiben die von den Normaldehnungseigenschaften entkoppelten Schub- auf Schubkoppelungseigenschaften. Die letzten neun dargestellten Komponenten können aufgrund ihrer statistischen Basisparameter optisch nicht mehr in einzelne Gruppen getrennt werden. Dies ist plausibel, da die Parameter alle für die Beschreibung des Normal-Schubdehnungsverhaltens der MVEs verantwortlich sind. Die soeben beschriebenen zwölf Komponenten der Steifigkeitsmatrix werden im folgenden als „anisotrope Gruppe“ bezeichnet.

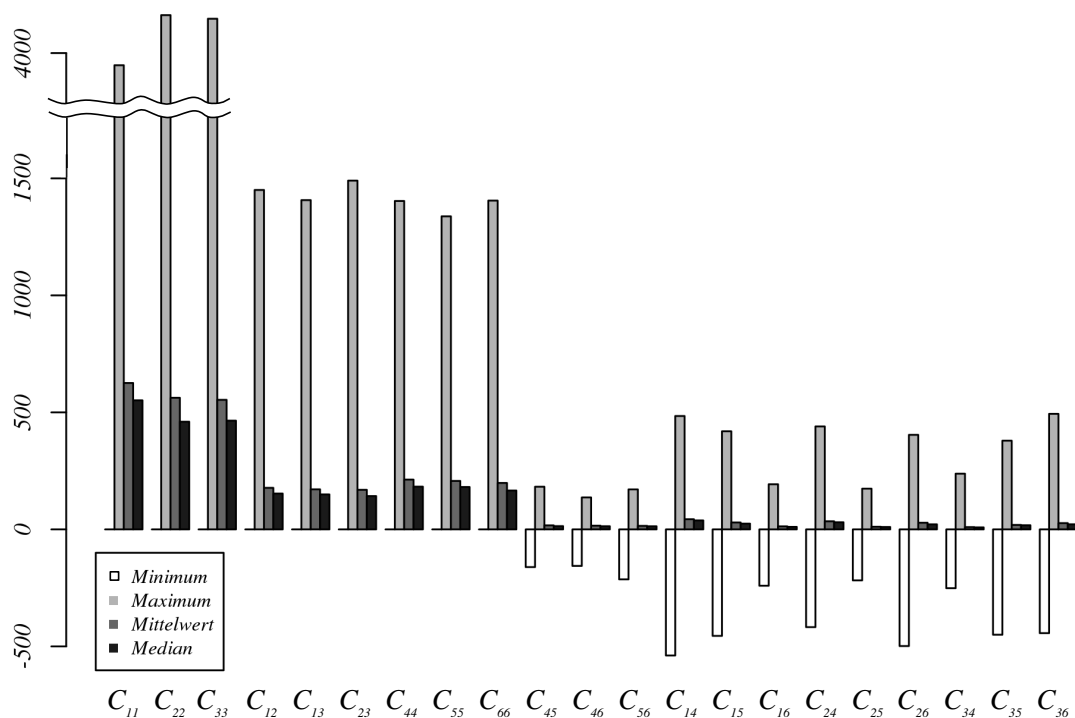


Abb. 6.10: Elementare statistische Parameter der Komponenten der effektiven Steifigkeit für die Zerlegungsgröße  $1,2\text{ mm}$

Für Abb. 6.10 sind die Verteilungen der Komponenten der effektiven Steifigkeit in der Form und Lage ausgewertet worden, in der sie berechnet wurden. Dies bedeutet die effektiven Steifigkeitsmatrizen beschreiben das Verhalten der MVEs in den

Richtungen des globalen Zerlegungskoordinatensystems. Da dieses Koordinatensystem nach dem  $\mu$ -CT Datensatz ausgerichtet ist und die Lage des Femurkopfes in der  $\mu$ -CT willkürlich gewählt war, können wie zu erwarten und in Abschnitt 2.1.10 genauer ausgeführt, innerhalb der oben beschriebenen Gruppen keine ausgezeichneten Tendenzen in den Steifigkeitseigenschaften abgelesen werden.

In Abb. 6.10 ist jedoch zu erkennen, dass sich der arithmetische Mittelwert und der Median bei allen Komponenten nur unwesentlich unterscheiden bzw. ein sehr ähnliches Verhältnis zueinander aufweisen. Da das arithmetische Mittel im Gegensatz zum Median stark von Ausreißern beeinflusst wird zeigt dies, dass die im vorangegangenen Abschnitt auf Basis der Spektralnorm und der Symmetrieabweichung durchgeführte Elimination von Ausreißern für alle Komponenten erfolgreich war. Aus diesem Grund wird im Folgenden der arithmetische Mittelwert zur Beurteilung der durchschnittlichen Eigenschaften der Datensätze verwendet.

Die vorangegangenen Ausführungen gelten in der gleichen Form auch für die beiden anderen Zerlegungsstufen  $0,6\text{ mm}$  und  $1,2\text{ mm}$ , weshalb diese hier nicht explizit dargestellt sind.

Betrachtet man wie in Abb. 6.11 dargestellt, die arithmetischen Mittel der Komponenten, der nach den in Abschnitt 2.1.10 angegebenen Kriterien hinsichtlich Monotropie und Orthotropie optimierten effektiven Steifigkeitsmatrizen, so ist bei diesen innerhalb der jeweiligen Wirkungsgruppe eine deutliche Sortierung der Komponenten nach Ihrer Größe erkennbar. Die Sortierung der Diagonalelemente  $C_{11}$ ,  $C_{22}$  und  $C_{33}$  wurde nach der Optimierung mit Hilfe von  $90^\circ$ -Drehungen erzeugt. Die Sortierung der anderen Komponenten ergab sich daraus wie abgebildet.

Wie zu erkennen ist, ist die Sortierung bei beiden Optimierungskriterien und allen drei Zerlegungsstufen in der gleichen Form vorhanden wobei die absoluten Werte aller Komponenten bei beiden Optimierungskriterien mit der Zerlegungsgröße zunehmen. Auf die Darstellung der Komponenten der anisotropen Gruppe wurde verzichtet, da in dieser Gruppe die Mittelwerte aller Komponenten nahezu Null sind.

Schreibt man pro Zerlegung und Optimierungskriterium die arithmetischen Mittelwerte der Komponenten, wie in Gl. (6.15) beispielhaft für die Zerlegungsstufe  $1,2\text{ mm}$  mit monotoner Optimierung gezeigt, in Form einer Steifigkeitsmatrix an, so ist zu erkennen, dass die Mittelwerte über der Gesamtzerlegung annähernd orthotropes

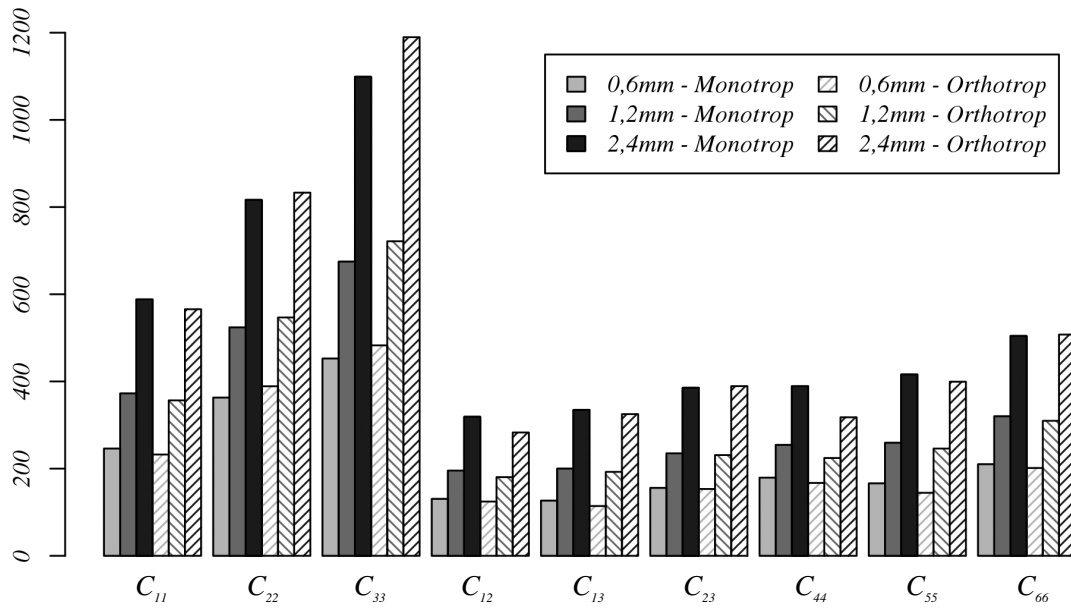


Abb. 6.11: Mittelwerte der Komponenten der orthotropen Gruppe für die Zerlegungsgrößen  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$  in der auf Monotropie und Orthotropie optimierten effektiven Steifigkeit.

Materialverhalten abbilden.

$$\bar{\underline{C}}_{1,2,mono} = \begin{bmatrix} 372,5 & 195,6 & 200,0 & -1,6 & 0,7 & -2,3 \\ 195,1 & 524,0 & 235,1 & 1,5 & 1,4 & 2,0 \\ 199,2 & 234,7 & 674,8 & -0,2 & -0,6 & 1,1 \\ -1,6 & 1,5 & -0,2 & 254,4 & -3,2 & 2,2 \\ 0,7 & 1,4 & -0,6 & -3,2 & 259,3 & -0,6 \\ -2,3 & 2,1 & 1,1 & 2,2 & -0,6 & 320,0 \end{bmatrix} \quad (6.15)$$

Dies bestätigt sich, wenn man für die entstehenden Matrizen die in Abschnitt 2.1.8 angegebenen Kriterien der Drucker Materialstabilität überprüft. Es zeigt sich, dass die entstehenden Matrizen auf allen drei Auflösungsstufen sowohl für monotrope als auch für orthotrope Optimierung alle Kriterien für die Stabilität einer linear elastischen orthotropen Steifigkeitsmatrix erfüllen. Die explizit ausgeschriebenen Matrizen für alle drei Zerlegungsstufen und beide Optimierungskriterien sind in Anhang F zu finden.

Dies bedeutet, dass bei Vernachlässigung der Komponenten der anisotropen Gruppe der untersuchte Femurkopf als Gesamtstruktur unabhängig von der Zerlegungsstufe durch linear elastisches orthotropes Materialverhalten beschrieben werden kann. Ob sich diese Beobachtung generell bestätigen lässt oder ob sich daraus ein weiteres histomorphologisches Kriterium für die Beschaffenheit des gesamten menschlichen

Femurkopfes ableiten lässt, wird in dieser Arbeit folgenden Untersuchungen zu klären sein.

Den Grund für den beobachteten Anstieg der Mittelwerte der Matrixkomponenten mit der Zerlegungsgröße erklärt Abb. 6.12, in der die Verteilungsdichten aller Komponenten in der Zerlegungsgröße  $1,2\text{ mm}$ , sowie für die Komponente  $C_{33}$  in allen Zerlegungsgrößen, abgebildet sind. Auf die Abbildung aller Verteilungsdichten aller Komponenten in allen Zerlegungsgrößen wurde verzichtet da sich hier, wie im Falle der Mittelwerte, die Verhältnisse zwischen den einzelnen Verteilungen wiederholen.

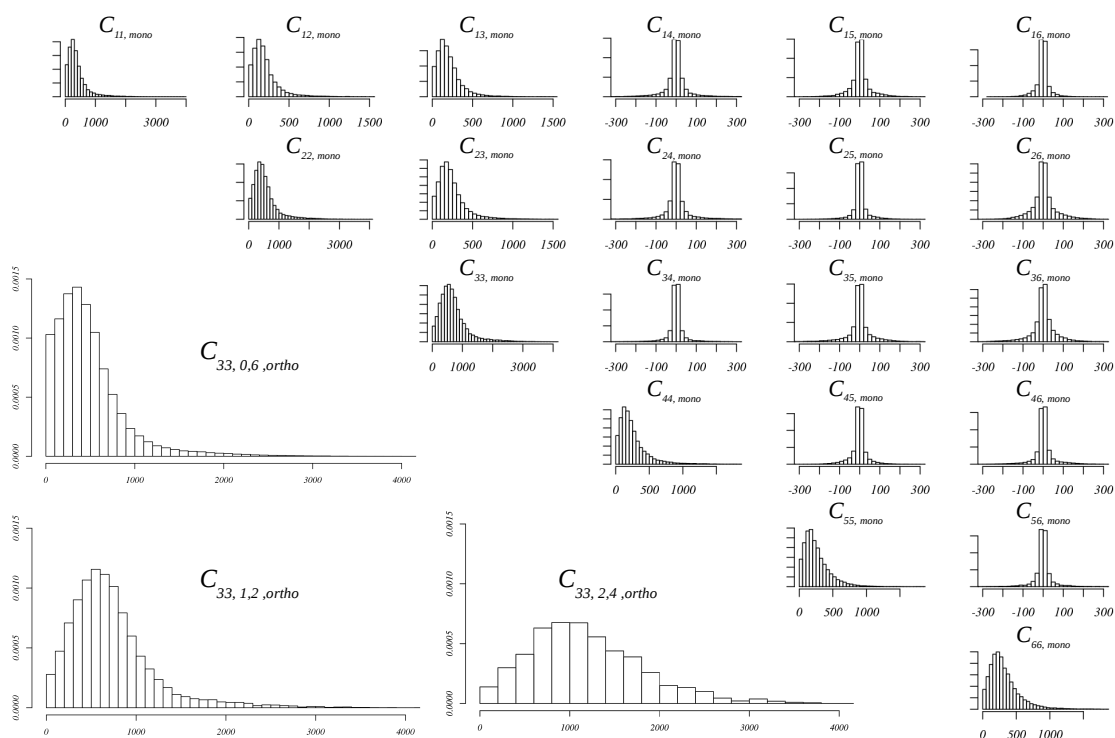


Abb. 6.12: Kleine Diagramme: Verteilungsdichten der Komponenten der auf Monotropie optimierten effektiven Steifigkeit für die Zerlegungsgröße  $1,2\text{ mm}$ . Vergrößerte Diagramme: Verteilungsdichten der Komponente  $C_{33}$  der auf Orthotropie optimierten effektiven Steifigkeit für die Zerlegungsgrößen  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$

Dies bedeutet die prinzipiellen Verläufe der zu sehenden Verteilungsdichten bleiben auf den anderen beiden Zerlegungsstufen gleich. Wie in der Vergrößerung für Komponente  $C_{33}$  zu erkennen ist ändert sich jedoch die Breite woraus die Verschiebung des Maximums und somit auch des Mittelwertes mit zunehmender MVE Kantenlänge in Richtung höherer Werte resultiert. Diese Beobachtung kann man bei allen Komponenten der orthotropen Gruppe machen. Bei den Komponenten der anisotropen Gruppe ist ebenfalls eine weitere Spreizung der Verteilungsdichte erkennbar,



jedoch werden die Maxima bzw. Mittelwerte aufgrund der symmetrischen Verteilungen davon nicht beeinflusst wodurch sich im Mittel wie bereits erwähnt orthotrope Matrizen ergeben.

Es sei an dieser Stelle noch darauf hingewiesen, dass der Mittelungsprozess nur für die Komponenten der effektiven Steifigkeit und nicht deren Ausrichtung gegenüber dem globalen Koordinatensystem durchgeführt wurde da eine komponentenweise Mittelung von Koordinatensystemen nicht sinnvoll ist.

### 6.2.3. Korrelationen zwischen den Komponenten der effektiven Steifigkeit

Nachdem im vorangegangenen Abschnitt gezeigt wurde, dass die optimierten Materialparameter auf den unterschiedlichen Auflösungsstufen im Mittel eine orthotrope Gesamtstruktur beschreiben ist die nächste Frage die sich stellt ob und wenn ja wie die Komponenten der effektiven Steifigkeit voneinander abhängen. D.h. gehören z.B. dem Betrage nach große Komponenten der anisotropen Gruppe auch zu betragsmäßig großen Komponenten der orthotropen Gruppe?

Um diese Frage zu klären werden in diesem Abschnitt als Darstellungsmethode zum Teil sog. Streudiagrammmatrizen verwendet. Diese in der multivariaten Statistik häufig angewandte Darstellungsform hochdimensionaler Datensätze hat sich im Verlauf der angestellten Untersuchungen als besonders geeignet zur Veranschaulichung der einzelnen Ergebnisse erwiesen.

In Abb. 6.13 ist eine solche Streudiagrammmatrix der Koeffizienten der orthotropen Gruppe bei  $0,6\text{ mm}$  Zerlegungsgröße und orthotroper Optimierung dargestellt. Die Abbildung ist wie folgt zu lesen:

- Auf der Diagonalen ist die Bezeichnung der Komponente angegeben, welche in den von der Diagonalen ausgehenden Spalte auf der x-Achse bzw. in der von der Diagonalen ausgehenden Zeile auf der y-Achse dargestellt wird.
- Die neben bzw. über den Bezeichnungen auf der Diagonalen angegebenen Skalen gelten für die gesamte Zeile bzw. Spalte.
- Die im oberen Dreieck der Matrix dargestellten Streudiagramme zeigen jeweils die Korrelation der beiden Parameter, welche auf der Diagonalen die Zeile bzw. Spalte ausgehend vom entsprechenden Streudiagramm bezeichnen.
- Da die Streudiagramme sehr viele Datenpaare enthalten wurden sie mit Hilfe der R Funktion `smoothScatter` ausgeführt [75]. Die Funktion führt eine

Glättung des zu erstellenden Streudiagramms mit Hilfe einer Kerndichteschätzung durch und stellt die Dichte der Datenpunkte anschließend in Graustufen codiert dar. Die Graustufen variieren dabei zwischen Schwarz für hohe Datendichte und Hellgrau für geringe Datendichte.

- Im unteren Dreieck der Matrix sind die Kendall Koeffizienten der dargestellten Korrelationen angegeben. Diese sind zum oberen Dreieck symmetrisch angegeben. D.h. Streudiagramm und Kendall Koeffizient bilden symmetrische Elemente der Matrix.

Die Abbildungen wurden mit Hilfe von R erstellt. Die dafür verwendete Funktion ist in Anhang E angegeben.

Es sei an dieser Stelle jedoch darauf hingewiesen, dass zur Berechnung der Rangkorrelationskoeffizienten nach Kendall das R Paket `pcaPP` verwendet wurde [76]. Das Paket stellt die Funktion `cor.fk` zur Verfügung welche einen Algorithmus implementiert der den Kendall Koeffizienten mit einer numerischen Komplexität von  $O(n \log(n))$  anstatt von  $O(n^2)$  berechnet. Dies ist insbesondere bei der Zerlegungsgröße von 0,6 mm von Bedeutung bei der mit über 120000 Datenpunkten die Kendall Koeffizienten durch den Standardalgorithmus nicht mehr in vertretbarer Zeit zu berechnen wären.

Der Rangkorrelationskoeffizient nach Kendall wird verwendet, da es sich bei den hier analysierten Daten nicht um normalverteilte Daten bzw. um stark schief verteilte Daten handelt. Pearson's Korrelationskoeffizient wird in diesem Fall stark von den wenigen Daten mit großen Werten beeinflusst was durch die Rangtransformation im Falle von nicht parametrischen Korrelationskoeffizienten vollständig vermieden wird [77].

### 6.2.3.1. Einfluss von Optimierung und Zerlegungsgröße

In Abb. 6.13 ist zu erkennen, dass zwischen den einzelnen Komponenten der optimierten effektiven Steifigkeitsmatrix offensichtlich starke Korrelationen bestehen. Dies zeigt sich auch an den berechneten Kendall Koeffizienten, die sich im Wertebereich zwischen 0,632 und 0,917 bewegen.

An den dargestellten Korrelationen fällt weiter auf, dass diese von unterschiedlicher Gestalt sind und sich zum Teil in mehrere Gruppen aufspalten wobei die Abhängigkeiten innerhalb der Gruppen teils linear teils nichtlinearer Natur sind. Die Analyse der Korrelationen auf den unterschiedlichen Zerlegungsstufen und bei den unterschiedlichen Optimierungen zeigt, dass die Gestalt der Korrelationen stark vom

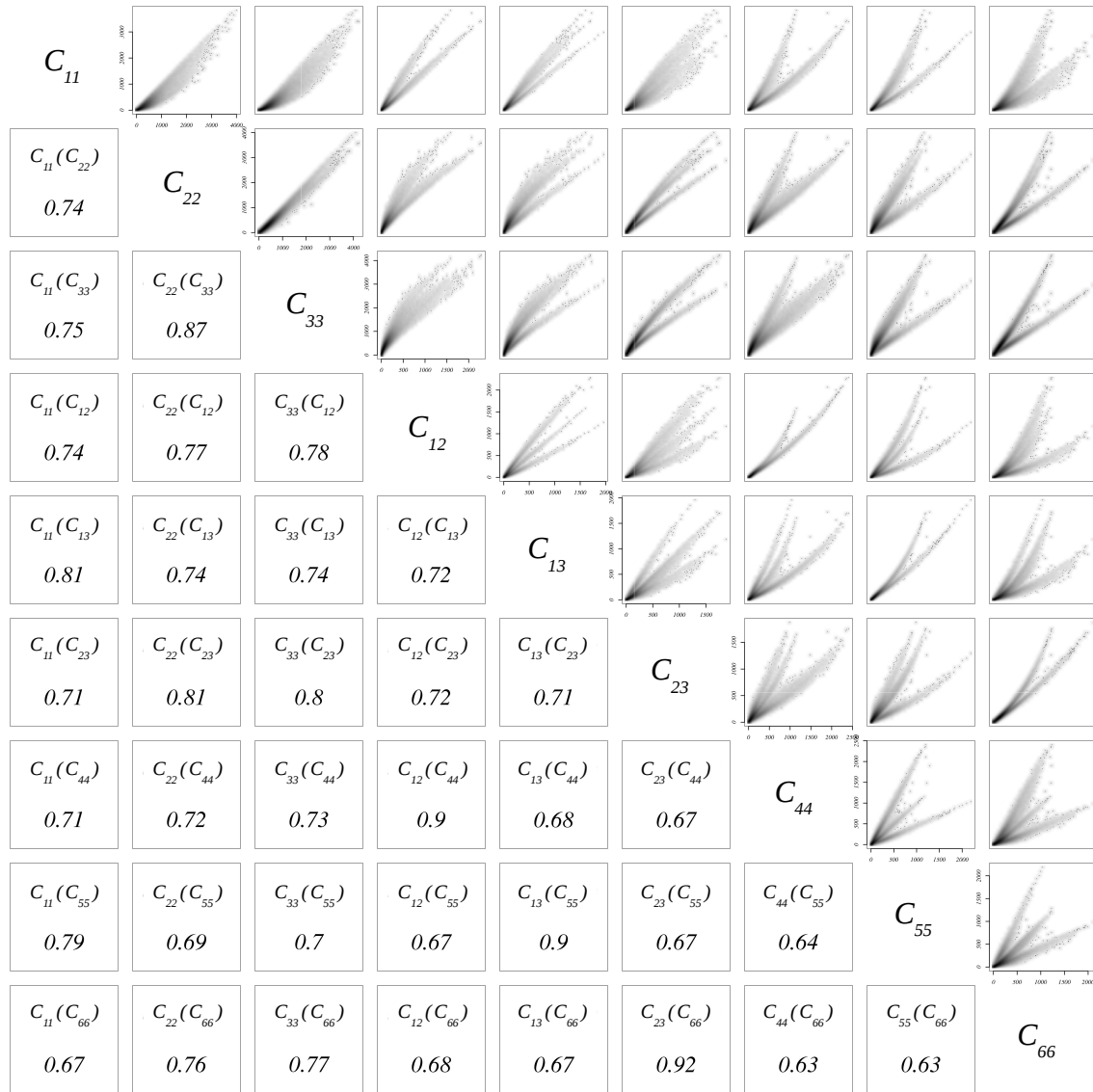


Abb. 6.13: Abhängigkeiten der Komponenten der orthotropen Gruppe bei 0,6 mm Zerlegungsgröße und orthotroper Optimierung. Im unteren Dreieck sind die jeweiligen Kendall Korrelationskoeffizienten angegeben

gewählten Optimierungskriterium aber nur geringfügig von der Zerlegungsgröße abhängt.

In Abb. 6.14 ist die Gestaltänderung der Korrelationen zwischen Komponenten der effektiven Steifigkeitsmatrix exemplarisch für jeweils vier Beziehungen auf den betrachteten Zerlegungsstufen und für die verschiedenen Optimierungskriterien dargestellt. In den Zellen der Tabelle aus Zerlegungsgröße und Optimierungskriterium sind jeweils die Korrelationen,  $C_{22}(C_{33})$  oben links,  $C_{13}(C_{12})$  oben rechts,  $C_{25}(C_{33})$  unten links und  $C_{25}(C_{24})$  unten rechts dargestellt. Diese Beziehungen wurden ausgewählt, weil sie die vier wichtigsten auftretenden Gestalten der Korrelationen repräsentieren.

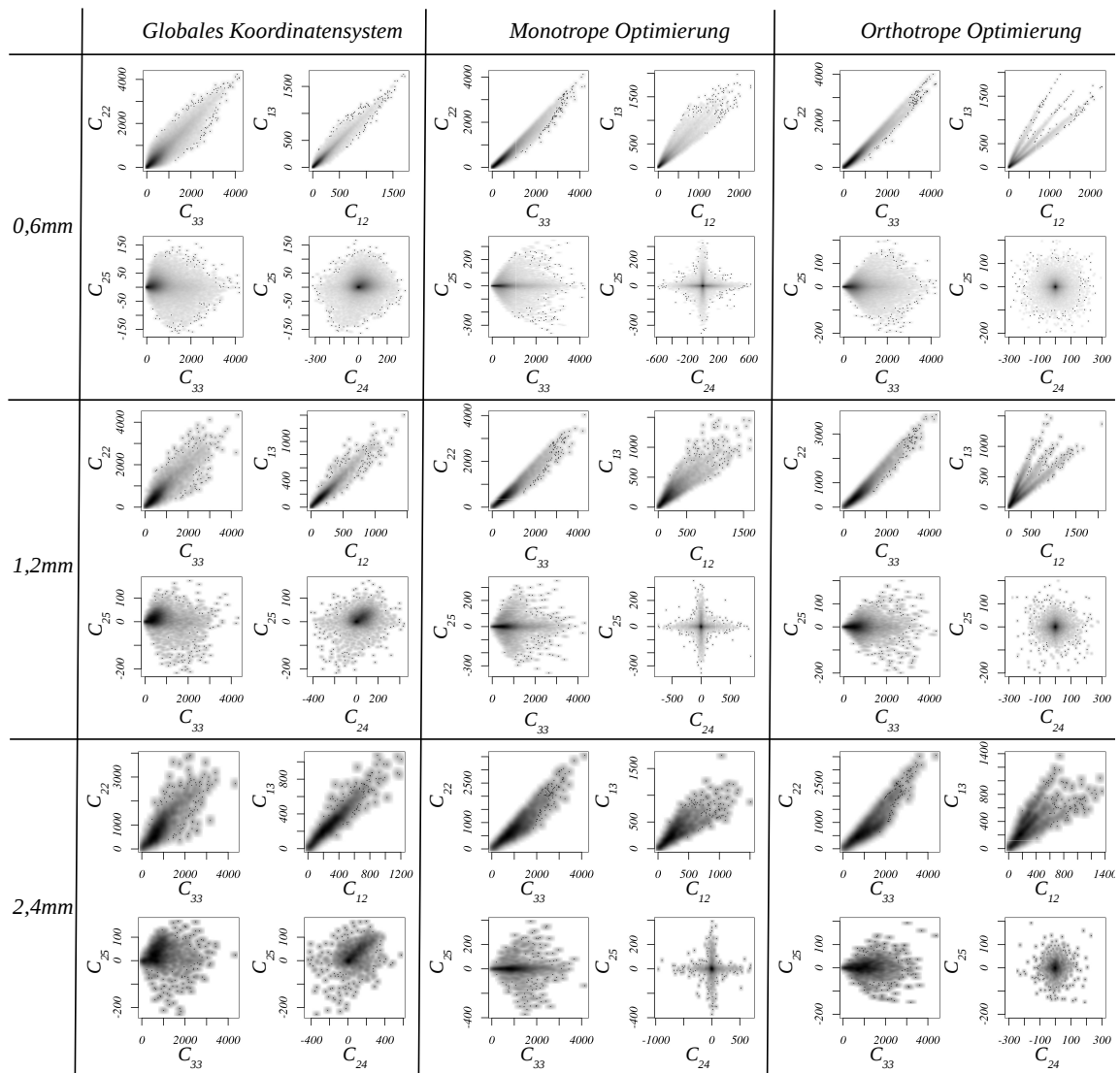


Abb. 6.14: Abhängigkeit der Gestalt der Korrelationen zwischen Komponenten der effektiven Steifigkeitsmatrix von der Zerlegungsgröße und der Optimierung

Es ist zu sehen, dass sich die prinzipielle Gestalt der Korrelationen mit der Zerlegungsgröße, unabhängig von der gewählten Optimierung, nur schwach ändert wobei die Änderung hauptsächlich durch den Anstieg der Streubreite mit zunehmender Zerlegungsgröße bedingt ist. Dies ist auch in Abb. 6.15 zu erkennen, in der die Überlagerung der Korrelation zwischen  $C_{13}$  und  $C_{12}$  auf den drei untersuchten Zerlegungsstufen bei monotroper und orthotroper Optimierung dargestellt ist.

Die Beziehungen zwischen Normaldehnungskomponenten, in Abb. 6.14 exemplarisch durch  $C_{22}(C_{33})$  dargestellt, zeigen alle bereits im unoptimierten Fall, d.h. in der Ausgangslage der berechneten effektiven Steifigkeiten, einen linearen Verlauf, der durch

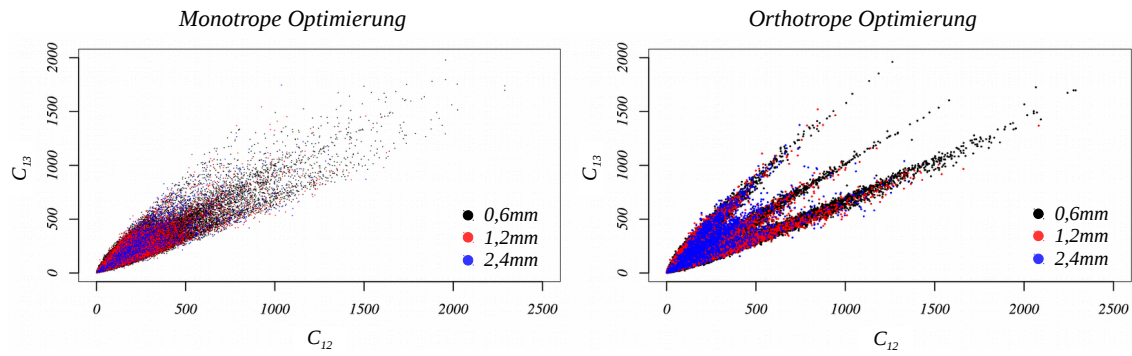


Abb. 6.15: Korrelationen zwischen  $C_{12}$  und  $C_{13}$  auf den drei untersuchten Zerlegungsstufen bei monotroper und orthotroper Optimierung

monotrope bzw. orthotrope Optimierung stark an Streubreite verliert. Durch die Größensortierung der Komponenten der effektiven Steifigkeit nach der Optimierung treten Werte zusätzlich nur noch unterhalb der ersten Winkelhalbierenden auf.

Die Korrelationen, welche ihre Gestalt durch Optimierung signifikant ändern, sind die übrigen Beziehungen zwischen den Komponenten der orthotropen Gruppe, d.h. die Beziehungen zwischen:

- Normaldehnungskomponenten und Normaldehnungskopplungskomponenten
- Normaldehnungskomponenten und Schubdehnungskomponenten
- Normaldehnungskopplungskomponenten und Normaldehnungskopplungskomponenten
- Normaldehnungskopplungskomponenten und Schubdehnungskomponenten
- Schubdehnungskomponenten und Schubdehnungskomponenten

Die Korrelationen dieser Gruppe weisen, wie auch die Beziehungen zwischen den Normaldehnungskomponenten, in unoptimiertem Zustand, bis auf die Streubreite ein sehr ähnliches Aussehen auf. Besonders auffällig ist, dass sich durch die Optimierung zwei bis drei Gruppen ausbilden, die sich im Koordinatenursprung überlagern. Die Gruppen sind bei orthotroper Optimierung wesentlich stärker ausgebildet als bei monotroper Optimierung. Innerhalb der Gruppen zeigt sich zum Teil eine sehr viel geringere Streubreite als bei irgend einer anderen Beziehung zwischen Komponenten der effektiven Steifigkeit.

Dieses Ergebnis wird in den folgenden Abschnitten, wenn die Reduktion der unabhängigen Parameter der effektiven Steifigkeitsmatrix vorgestellt wird von wesentlicher Bedeutung sein. Diese soeben beschriebene Gruppe von Korrelationen wird in

Abb. 6.14 exemplarisch durch die Beziehung  $C_{13}(C_{12})$  dargestellt.

Die dritte Gruppe von Korrelationen bilden die Beziehungen, welche zwischen den Komponenten der orthotropen Gruppe und den Komponenten der anisotropen Gruppe gebildet werden können. Diese Gruppe ist in Abb. 6.14 exemplarisch durch die Beziehung  $C_{25}(C_{33})$  dargestellt. Im Gegensatz zu den bereits beschriebenen beiden Gruppen wird hier die prinzipielle Gestalt durch Optimierung nicht sehr stark verändert und es bilden sich auch keine Gruppen aus. Bei genauerer Betrachtung stellt man jedoch fest, dass die Beziehungen durch die Optimierung Symmetrie zur x-Achse erhalten und der Kernbereich mit hoher Datendichte stärker an die x-Achse rückt, woraus sich ebenfalls eine Streubreitenreduktion durch die Optimierung ergibt. Diese ist jedoch anders als bei den ersten Gruppen im Falle monotoner Optimierung stärker ausgeprägt als bei der Anwendung des orthotropen Optimierungskriteriums.

Die vierte prinzipielle Gestalt von Korrelationen entsteht bei der Auftragung der Beziehungen zwischen den Komponenten der anisotropen Gruppe, in Abb. 6.14 exemplarisch durch  $C_{25}(C_{24})$  dargestellt. Es zeigt sich, dass nahezu alle Beziehungen dieser Gruppe, bis auf einige wenige, nur sehr schwache Korrelation besitzen. So weisen z.B. im Falle orthotroper Optimierung auf der Zerlegungsstufe  $0,6\text{ mm}$  nur 7 der insgesamt 66 möglichen Korrelationen in dieser Gruppe einen Kendall Koeffizienten von  $\tau > 0,25$  auf wohingegen bei den Korrelationen innerhalb der orthotropen Gruppe alle Beziehungen diese Eigenschaft besitzen.

### 6.2.3.2. Klassifikation / Clusteranalyse

Im vorangegangenen Abschnitt wurde gezeigt, dass sich in den Korrelationen der Komponenten der effektiven Steifigkeit durch Optimierung Gruppen bzw. sog. Cluster ausbilden, die im Vergleich zur Korrelation des Gesamten Datensatzes jeweils eine wesentlich reduzierte Streubreite aufweisen.

In diesem Abschnitt wird die Trennung der visuell zu erkennenden Gruppen mit Hilfe automatischer Clusteringverfahren demonstriert. Es wird hierbei von demonstriert gesprochen, da nicht zu erwarten ist, dass anhand des einen, in der Arbeit verwendeten, Trainingsdatensatzes eine allgemeingültige vollautomatische Clusteringstrategie entwickelt werden kann. Ebenso ist nicht klar, ob die hier und im folgenden Abschnitt für einen Femurkopf abgeleiteten Erkenntnisse über die mögliche Einteilung von Knochenmaterial anhand strukturmechanischer Eigenschaften ohne weiteres auf andere Bereiche des Femurs oder auch andere Knochen übertragbar sein werden. Im Hinblick auf die Untersuchung weiterer Datensätze wurde jedoch nach einer Möglichkeit zur Trennung der Gruppen gesucht, die in Zukunft eine Automatisierung

ermöglicht.

Da durch visuelle Untersuchungen der erzeugten Datensätze mit Hilfe der Analyse-Software GGobi<sup>3</sup> [78] festgestellt wurde, dass sich die in Abb. 6.16 zu erkennenden Gruppen nicht nur innerhalb einzelner zweidimensionaler Korrelationen ausbilden, sondern auch im multivariaten Fall eine klare Gruppenstruktur erhalten bleibt, wurde zunächst die Trennung der Gruppen mit Hilfe des in R verfügbaren Standard K-Means Clusteringalgorithmus[75] über die 9 Dimensionen der orthotropen Gruppe versucht. Es zeigte sich allerdings, dass der Algorithmus nicht die erwartete bzw. gewünschte Partitionierung liefern konnte. Als gewünschte Ergebnisse wurden zunächst Partitionierungen erachtet, welche die visuell erkennbaren Gruppen trennen. Ein maßgebliches Problem welches in Abb. 6.16 links zu erkennen ist, ist das Verhalten des K-Means Algorithmus kugelförmige Cluster zu bilden[45]. Es ist deutlich zu erkennen, dass der K-Means Algorithmus die Gruppierung dadurch senkrecht zur erwarteten bzw. gewünschten Partitionierung durchführt. Dieses Verhalten konnte auch durch Dimensionsreduktion bis hin zu zwei verbleibenden Dimensionen nicht verbessert werden.

Weitere Versuche mit dem in R implementierten hierarchischen Clusteringalgorithmus erbrachten ebenfalls keine sinnvollen Ergebnisse. Bei diesem Algorithmus tritt zusätzlich das Problem auf, dass die Laufzeit durch den relativ großen Stichprobenumfang und die numerische Komplexität hierarchischer Clusteringalgorithmen von  $n^2$  enorm anwächst. Eine erweiterte Literaturrecherche zu automatisierten Clus-

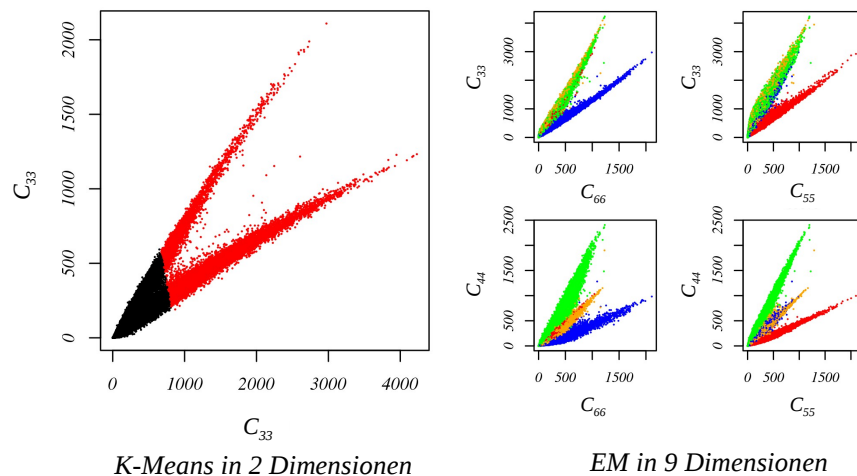


Abb. 6.16: Ergebnisse der automatischen Partitionierung einer Stichprobe mit 12000 Elementen. **Links:** Ergebnis der zweidimensionalen Partitionierung der Korrelation  $C_{66}(C_{33})$  mit Hilfe des K-Means Algorithmus. **Rechts:** Ergebnis der neundimensionalen Partitionierung mit Hilfe des EM Algorithmus

<sup>3</sup><http://www.ggobi.org>

teringmethoden führte letztendlich zur Verwendung des R-Paketes `mclust` welches Clustering mit Hilfe des Expectation Maximisation (EM) Algorithmus auf Basis von parametrisierten Gauss'schen Mischverteilungen implementiert [46]. Wie in Abb. 6.16 rechts beispielhaft dargestellt entsprechen die damit erzielten Partitionierungen über die neun Dimensionen der orthotropen Gruppe sehr viel eher dem erwarteten Ergebnis.

Es gilt hierbei jedoch anzumerken, dass das in Abb. 6.16 angedeutete Ergebnis zunächst nur auf halbautomatischem Wege zu erreichen ist. Der Grund hierfür ist die notwendige manuelle Selektion der Parametrisierung der Kovarianzmatrizen, im folgenden nach [45] Modell genannt, sowie der Anzahl der zu erzeugenden Cluster.

Das `mclust` Paket versucht zwar Modell und ideale Anzahl von Clustern auf Basis des Bayesian Information Criterion (BIC) automatisch zu ermitteln, Versuche haben jedoch gezeigt, dass sich dadurch so gut wie nie die gewünschte Partitionierung ergibt. Das Problem ist in Abb. 6.17 veranschaulicht. Dort ist die Auftragung der BIC-Werte für zwei unterschiedliche Modelle über der Anzahl der erzeugten Gruppen, sowie die Projektionen der Partitionierungen auf die  $C_{11}$ - $C_{12}$ -Koordinatenebene zu sehen. Die beiden dargestellten Modelle beschreiben die ellipsenförmigen Cluster zum Einen mit einheitlichem Volumen, einheitlicher Gestalt sowie variierender Ausrichtung (EEV) und zum Anderen mit variierendem Volumen, einheitlicher Gestalt sowie variierender Ausrichtung (VEV).

Die Projektionen wurden mit Hilfe der durch `mclust` zur Verfügung gestellten Funktion `coordProj` erzeugt. Diese erzeugt pro Cluster nicht nur das nach der Gruppenzugehörigkeit kolorierte Streudiagramm, sondern plottet dazu überlagert auch Ellipsen, deren Mittelpunkte die Schwerpunkte der zugrunde liegenden Cluster markieren. Dies ist bei der visuellen Kontrolle der Partitionierung besonders hilfreich. Liegt das Zentrum eines Clusters zwischen den in der Projektionsebene zu erkennenden Gruppen, so enthält er aller Wahrscheinlichkeit nach Elemente aus beiden Gruppen. Die Halbachsen der Ellipsen sind mit der Wurzel aus den Eigenwerten der ermittelten Kovarianzmatrix des jeweiligen Clusters skaliert und stellen so ein Maß für die Streuung der jeweiligen Clusterdaten entlang der projizierten Hauptachsen dar. An der Einfärbung der Datenpunkte sowie auch an den Clusterzentren, d.h. den Mittelpunkten der dargestellten Ellipsen, ist in Abb. 6.17 zu erkennen, dass nur das EEV Modell mit 7 oder 8 Gruppen in der dargestellten Projektionsebene die gewünschte Partitionierung erzeugt. Bei den beiden Streudiagrammen liegen alle Clusterzentren innerhalb der beiden projizierten Gruppen, was wie erwähnt darauf hinweist, dass die gefundenen Cluster keine Datenpunkte aus der jeweils anderen



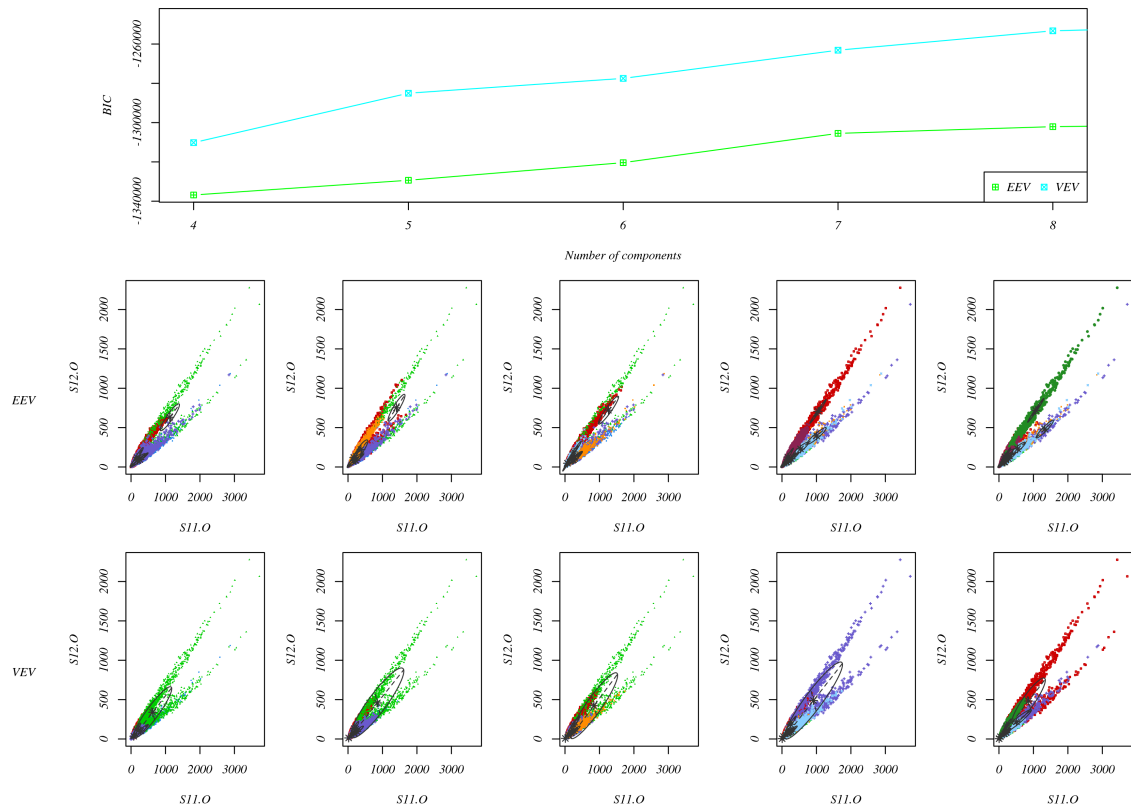


Abb. 6.17: Von mclust berechnete BIC-Werte und ermittelte Partitionierung für die Modelle EEV und VEV für jeweils 4 bis 8 Gruppen bei einer Zerlegungsgröße von  $0,6\text{ mm}$  und einem Stichprobenumfang von 12000 Elementen

Gruppe dieser Projektionsebene enthalten.

Bei der Betrachtung des BIC-Diagramms ist jedoch zu erkennen, dass das EEV Modell bei gleicher Gruppenanzahl insgesamt einen deutlich geringeren BIC-Wert aufweist, als das zum Vergleich dargestellte VEV Modell. Bei der automatischen Selektion von Modell und Clusteranzahl aufgrund des BIC wäre hier die Wahl somit auf das VEV Modell mit acht Clustern gefallen obwohl dieses einen Cluster enthält, der eindeutig Elemente beider in der Projektionsebene zu erkennenden Gruppen enthält.

Dass die aufwändigeren Modelle, d.h. VEV und VVV bessere BIC-Werte besitzen, jedoch nur das EEV Modell die gewünschte Partitionierung erzeugt, war bei allen durchgeführten Versuchen zu beobachten. Vermutlich tritt hier die Tendenz statistischer Modelle zu Tage, dass kompliziertere Modelle aufgrund ihrer höheren Parameteranzahl und Flexibilität meist besser an beliebige Datensätze angepasst werden können. Dabei bleibt jedoch die Frage offen, wie sich die erhöhte Anzahl von Parametern und Gruppen auf die Interpretierbarkeit des Modells auswirkt. Diese Fragen sind anhand des einen analysierten Datensatzes leider nicht zu beantworten und

müssen bis zur Verfügbarkeit weiterer Datensätze zurück gestellt werden.

Wie in der Beschriftung von Abb. 6.17 angegeben, wurde für die Darstellung in der Abbildung eine Stichprobe von 12000 Elementen verwendet. Dies hatte den Grund, dass das `mclust` Paket zur Initialisierung des EM Algorithmus hierarchisches Clustering verwendet [46]. Daraus resultiert wie auch bei den R Standardalgorithmen eine enorme Laufzeitverlängerung bei großen Datensätzen. In [46] wird deshalb die Verwendung von Stichproben zur Initialisierung explizit vorgeschlagen.

Versuche mit verschiedenen Stichprobenumfängen ergaben, dass bei der Verwendung von 12000 Elementen, d.h. etwas mehr als 10% des gesamten Datensatzes der Zerlegungsgröße  $0,6\text{ mm}$ , die gewünschte Partitionierung mit Hilfe des EEV Modells erreicht werden kann. Dies zeigen auch die in Abb. 6.18 dargestellten BIC-Diagramme für fünf mit Hilfe des EEV analysierte Stichproben, welche ab 7 Gruppen alle einen ähnlichen Verlauf zeigen. Bei der Analyse der fünf Stichproben stellt man fest, dass

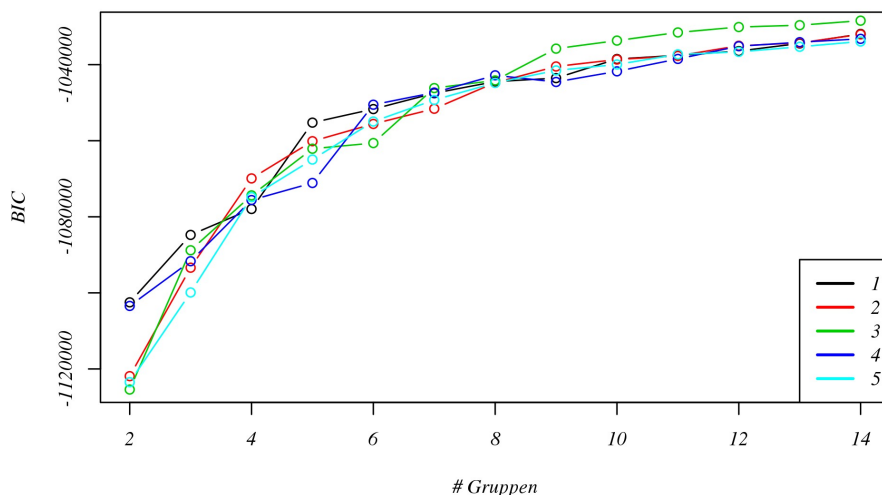


Abb. 6.18: Vergleich der BIC-Diagramme von fünf Stichproben mit einem Umfang von jeweils 12000 Elementen

die gewünschte Partitionierung mit allen erreicht wird. Unterschiede bestehen allerdings in der minimalen Anzahl von Gruppen, die benötigt werden um die in den 36 Projektionsebenen der 9 Dimensionen der orthotropen Gruppe visuell zu erkennenden Gruppen zu trennen. Die im Rahmen der Arbeit durchgeführten Versuche, die mehr als die hier dargestellten fünf Stichproben umfassten, zeigten, dass die minimale Anzahl von benötigten Gruppen zum Erreichen der gewünschten Partitionierung je nach Stichprobe zwischen fünf und sieben schwankt.

Ob die ermittelten Parameter

- Stichprobe von ca. 10% des Gesamtdatensatzes

- Partitionierung über die neun Dimensionen der orthotropen Gruppe
- Modellierung der Cluster mit einheitlichem Volumen, einheitlicher Gestalt und verschiedenen Ausrichtungen (EEV Modell)
- Partitionierung in Fünf bis Sieben Gruppen

bei der Analyse anderer Datensätze zu halten bzw. im Hinblick auf eine Automatisierung der Partitionierung zu präzisieren sind, muss in dieser Arbeit folgenden Untersuchungen geklärt werden.

Da in dieser Arbeit nur die Partitionierung nach den visuell erkennbaren Gruppen vorgenommen wird war der nächste, zunächst manuell zu erledigende Schritt, die Cluster bis auf die vier benötigten zu verschmelzen. In Abb. 6.19 ist das Vorgehen

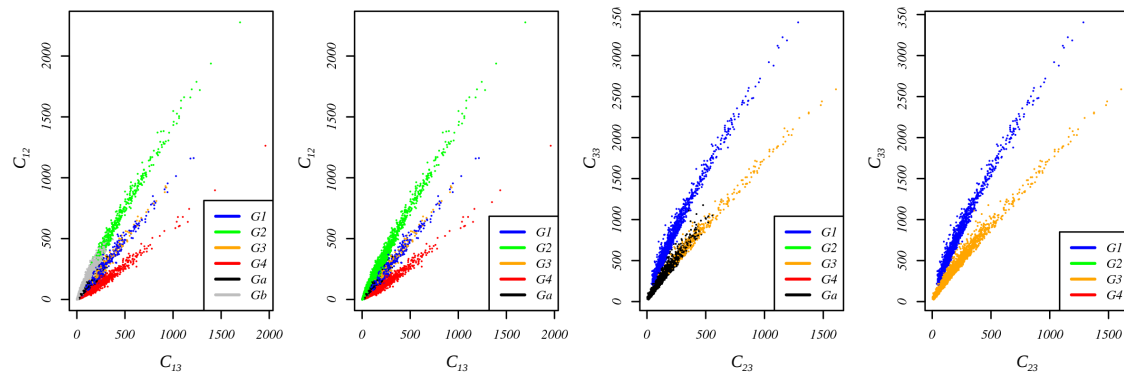


Abb. 6.19: Reduktion der Clusteranzahl von sechs auf vier Gruppen

beispielhaft dargestellt. Ausgegangen wird von einer Partitionierung in sechs Gruppen der in Abb. 6.18 dargestellten vierten (dunkelblau dargestellten) Stichprobe.

Diese Stichprobe wurde ausgewählt, weil der Verlauf Ihres BIC-Diagramms zwischen den Gruppenanzahlen zwei und acht keinen glatten Verlauf aufweist. Ein Sprung des BIC Wertes in diesem Bereich, wie er bei der vierten Stichprobe von fünf auf sechs Gruppen auftritt, ist nach den Erfahrungen aus den im Rahmen der Arbeit durchgeführten Versuchen ein Indiz für das Auftreten einer vorteilhaften Partitionierung.

Da es sich um eine Partitionierung in neun Dimensionen handelt, können das BIC-Diagramm und die Darstellung einer Projektion in eine Koordinatenebene jedoch nur Anhaltspunkte für eine erfolgreiche Partitionierung in die gewünschten Gruppen sein. Aus diesem Grunde wurden nach der Modellselektion anhand des BIC Diagramms auch die Scatterplotmatrizen aller Cluster des ausgewählten Modells visuell auf die korrekte Partitionierung innerhalb der orthotropen Gruppe überprüft. Anschließend konnte die Verschmelzung von Clustern wie in Abb. 6.19 dargestellt erfolgen.

Zunächst wurde mit Hilfe einer Scatterplotmatrix eine Projektionsebene gesucht, in der sich die Zusammengehörigkeit von zwei Clustern eindeutig bestimmen lässt. Im Beispiel handelte es sich dabei, wie in Abb. 6.19 ganz Links dargestellt, um die  $C_{13}$ - $C_{12}$ -Koordinatenebene. Hier lässt sich die Zusammengehörigkeit der Gruppen  $G2$  und  $Gb$ , im Diagramm Grün und Grau dargestellt, einwandfrei erkennen. Nach dem Hinzufügen der Gruppe  $Gb$  zur Gruppe  $G2$  ergibt sich das in Abb. 6.19 als zweites von links dargestellte Diagramm. Hier ist zu erkennen, dass die Projektion in die  $C_{13}$ - $C_{12}$ -Koordinatenebene keine weitere Entscheidung über das Verschmelzen weiterer Cluster zulässt. Wie in Abb. 6.19 als zweites Diagramm von rechts dargestellt, wird aus diesem Grund nun die Projektion in die  $C_{23}$ - $C_{33}$ -Koordinatenebene verwendet wobei die Gruppen  $G2$  und  $G4$  ausgeblendet werden. Nun ist zu erkennen, dass die Gruppen  $G3$  und  $Ga$  offensichtlich zusammen gehören. Die Projektion, welche sich nach Hinzufügen von Gruppe  $Ga$  zur Gruppe  $G3$  ergibt ist in Abb. 6.19 ganz rechts dargestellt.

Aus der hier skizzierten Vorgehensweise folgt die Gruppierung der Stichprobe von 12000 Elementen, welche nun verwendet werden kann, um alle Elemente des gesamten Datensatzes mit Hilfe einer Diskriminanzanalyse (DA) zu klassifizieren. Die im `mclust` Paket ebenfalls auf Basis des EM Algorithmus und Gauss'schen Mischverteilungen implementierte DA ist hierfür hervorragend geeignet, da sie die selben Modelle wie die `mclust` Clusteranalyse implementiert. Auf Basis des EEV Modells ergibt sich durch das soeben beschriebene Vorgehen für die ausgewählte Stichprobe mit 4 Komponenten das in Tab. 6.8 angegebene Modell. Das Modell weist eine Missklassifikationsrate von ca. 3% gegenüber der initialen Klassifikation mit 6 Komponenten auf, die durch visuelle Überprüfung jedoch nicht feststellbar ist. Dies bedeutet, es werden, durch die erneute Klassifikation in nur 4 Gruppen keiner der vier Gruppen wesentliche Ausreißer hinzugefügt.

Bei der genaueren Betrachtung des Modells, insbesondere der Gestalt  $\mathcal{B}$ , fällt auf, dass es sich bei den vier Gruppen um lang gestreckte Ellipsoide handelt. Deren größte Halbachse ist ca. 50 mal länger, als die nächst kürzere. Die zweit längste Achse hebt sich dann nochmals um den Faktor 5 von der dritt längsten ab. Die der Länge nach folgenden Achsen unterscheiden sich in ihrer Länge jeweils paarweise ungefähr um den Faktor 2. In dieser Arbeit folgenden Untersuchungen wird zu zeigen sein, ob sich die Gruppenanzahl, deren Gestalt und Ausrichtung aus dem mikrostrukturellen Aufbau des Knochenmaterials ergeben, oder ob es sich bei diesen Parametern um einen aus der Methode resultierenden Effekt handelt. Es wäre z.B. denkbar, dass es sich bei den vier Gruppen um dreidimensionale geometrische Permutationen der Materialparameter handelt, die nicht auf Symmetrie beruhen. Möglichkeiten zur

**Mittelwerte der Komponenten**

$\bar{z}_1$	276,1	476,7	574,6	107,3	113,8	156,1	132,0	140,9	188,7
$\bar{z}_2$	204,1	360,2	461,3	148,0	96,4	131,7	212,3	112,2	163,9
$\bar{z}_3$	212,3	336,8	424,5	92,0	98,0	206,4	116,2	124,5	314,3
$\bar{z}_4$	273,8	390,0	461,0	105,6	197,1	132,1	126,0	292,8	172,3

**Volumen**

$\lambda$	465494,8
-----------	----------

**Gestalt  $\cdot 10^{-3}$** 

$\underline{B}_{ii}$	1000	21,4	4,703	2,180	0,996	0,629	0,284	0,143	0,042
----------------------	------	------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

**Orientierung**

$\underline{R}_1$	0,417	0,805	0,005	0,334	-0,140	-0,185	0,054	0,104	-0,009
	0,552	-0,317	-0,685	0,165	0,175	-0,134	-0,088	-0,205	0,017
	0,583	-0,350	0,673	0,134	-0,147	0,051	-0,171	-0,114	0,022
	0,161	0,135	-0,129	-0,412	-0,429	0,371	0,098	-0,374	-0,546
	0,159	0,221	0,012	-0,193	0,321	0,607	0,124	-0,235	0,589
	0,196	-0,081	-0,162	-0,076	-0,116	0,442	-0,187	0,821	-0,070
	0,171	0,047	-0,037	-0,699	-0,274	-0,462	-0,128	0,107	0,403
	0,166	0,159	0,172	-0,367	0,741	-0,133	-0,156	0,081	-0,430
$\underline{R}_2$	0,188	-0,168	0,061	-0,083	0,064	-0,110	0,927	0,218	-0,046
	0,360	-0,629	-0,123	-0,435	-0,352	-0,301	0,009	-0,228	0,063
	0,487	0,246	0,773	-0,070	-0,095	-0,055	0,283	0,056	0,073
	0,579	0,500	-0,587	-0,041	-0,187	0,136	0,117	0,047	0,004
	0,246	-0,267	0,080	-0,106	0,045	0,397	-0,293	0,515	-0,583
	0,162	-0,164	-0,090	-0,240	0,574	0,071	0,017	0,406	0,618
	0,192	0,059	0,064	-0,232	0,515	0,297	-0,201	-0,694	-0,166
	0,330	-0,371	0,005	0,777	-0,040	0,257	-0,059	-0,157	0,230
$\underline{R}_3$	0,166	-0,118	-0,143	0,244	0,480	-0,528	0,425	0,051	-0,431
	0,197	0,204	0,065	0,133	0,062	-0,541	-0,772	0,060	0,051
	0,368	-0,845	0,249	0,190	-0,134	0,049	0,146	-0,105	0,002
	0,484	0,304	0,489	-0,454	0,219	0,231	0,212	-0,286	-0,006
	0,526	0,265	-0,540	0,403	-0,202	0,302	0,215	-0,143	-0,014
	0,150	-0,099	-0,170	-0,408	-0,354	0,155	-0,495	0,005	-0,615
	0,150	-0,169	-0,238	-0,177	0,297	0,324	-0,552	0,014	0,602
	0,297	0,103	0,200	0,029	-0,089	0,077	0,021	0,919	0,043
$\underline{R}_4$	0,171	-0,062	-0,310	-0,525	-0,371	-0,508	0,263	0,020	0,360
	0,172	-0,186	-0,385	-0,132	0,729	-0,233	0,181	0,156	-0,357
	0,402	0,191	0,190	0,323	0,056	-0,637	-0,485	-0,133	-0,003
	0,423	0,596	0,225	0,409	0,313	-0,191	0,263	-0,211	0,014
	0,480	-0,467	0,615	-0,320	0,231	0,110	0,070	0,007	0,022
	0,506	-0,350	-0,682	0,195	0,172	0,240	0,147	-0,103	-0,011
	0,162	0,040	0,168	0,286	-0,488	0,409	-0,219	-0,156	0,620
	0,275	0,214	-0,001	0,117	0,043	0,175	-0,366	0,824	-0,142
$\underline{R}_4$	0,173	-0,140	0,109	0,274	-0,243	-0,149	-0,562	-0,365	-0,577
	0,171	0,048	0,066	-0,030	-0,661	0,082	0,594	0,151	-0,379
	0,375	0,400	-0,242	-0,707	-0,178	-0,124	-0,231	-0,182	0,082
	0,185	-0,273	-0,063	0,142	-0,224	-0,807	0,000	0,230	0,335

Tab. 6.8: Modellparameter des Klassifikationsmodells

Klärung dieses Sachverhaltes wären z.B. die Verwendung anderer Zellgeometrien als der würfelförmigen, die Analyse analytischer Strukturen mit regelmäßigen Kavitäten oder aber die Analyse weiterer Knochenproben aus anderen Knochenbereichen, die deutlich andere Mikrostrukturen aufweisen als der Femurkopf.

Sollten diese Analysen zeigen, dass die Gruppenbildung von der Art der analysierten Knochenstruktur bzw. des analysierten Knochenbereiches abhängt, wäre ein weiteres charakteristisches Merkmal gefunden, um auf globaler Ebene Knochenmaterial

zu klassifizieren und durch statistische Auswertung gegenüber einer „Norm“ abweichende, eventuell krankhafte Ausbildungen detektieren zu können.

Durch das angegebene Modell lässt sich der Gesamtdatensatz mit Hilfe der Diskriminanzanalyse, wie in Abb. 6.20 dargestellt, vollständig und ohne wesentliche Ausreißer klassifizieren. Der erläuterte R-Code zur beschriebenen Vorgehensweise ist in Anhang E.3 zu finden. In der Abbildung ist die im Folgenden mit G2 bezeichnete Gruppe zu

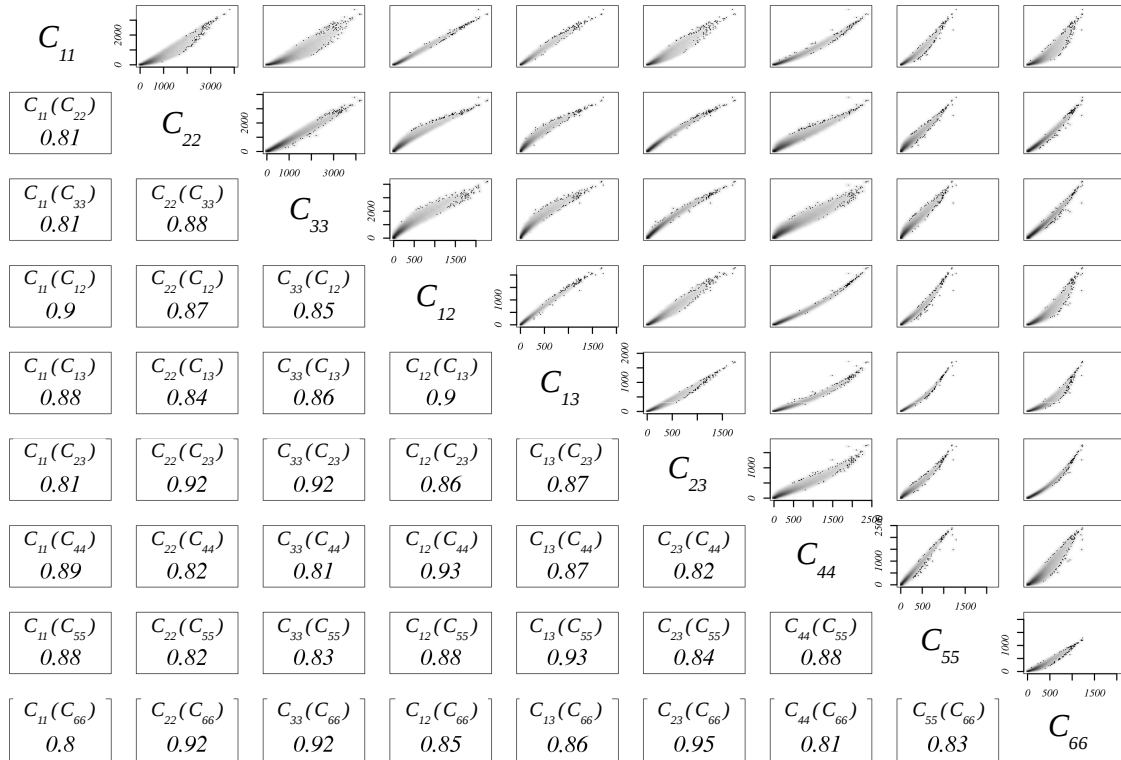


Abb. 6.20: Gruppe G2 des Klassifikationsergebnis für die Zerlegungsstufe 0,6 mm

sehen. Es ist zu erkennen, dass alle Korrelationen zwischen den Komponenten der orthotropen Gruppe nun einen linearen bzw. schwach nichtlinearen Verlauf zeigen. Dies ist im Vergleich zu Abb. 6.13 auch an den Kendall Korrelationskoeffizienten zu erkennen, die im Falle der dargestellten Gruppe im Mittel um 8,1% höher liegen als im Falle des vollständigen Datensatzes. Des weiteren ist zu sehen, dass die Klassifikation so gut wie keine Ausreißer erzeugt.

Da die Gestalt der Korrelationen der anderen drei Gruppen der von G2 gleich wird an dieser Stelle auf deren Darstellung verzichtet. Die Darstellungen der Scatterplotmatrizen aller Korrelationen der Komponenten der orthotropen Gruppe aller vier getrennten Gruppen ist in Anhang G zu finden. Auf die Darstellung der vollständigen Scatterplotmatrizen aller Komponenten der effektiven Steifigkeit, innerhalb dieser zum Druck gedachten Ausarbeitung, wird verzichtet, da sie in den hier durch-

geführten initialen Betrachtungen keine wesentliche Rolle spielen. Die vollständigen Scatterplotmatrizen sind jedoch in den elektronischen Anhängen dieser Arbeit zu finden.

Ein interessantes Ergebnis des in diesem Abschnitt beschriebenen Vorgehens, welches im Anschluss dieser Arbeit anhand weiterer Datensätze detaillierter zu betrachten sein wird, ist die Tatsache, dass sich das mit Hilfe einer Stichprobe der kleinsten Zerlegungsstufe von  $0,6\text{ mm}$  erstellte Statistische Modell dazu eignet auch die größeren Zerlegungsstufen mit  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$  Kantenlänge korrekt in die vier gewünschten Gruppen zu partitionieren. Dies ist an dieser Stelle beispielhaft durch die in Abb. 6.21 dargestellten Projektionen in die Koordinatenebenen  $C_{13}$ - $C_{12}$  sowie  $C_{23}$ - $C_{12}$  dargestellt. Es gilt bei der Darstellung in Abb. 6.21 zu beachten, dass

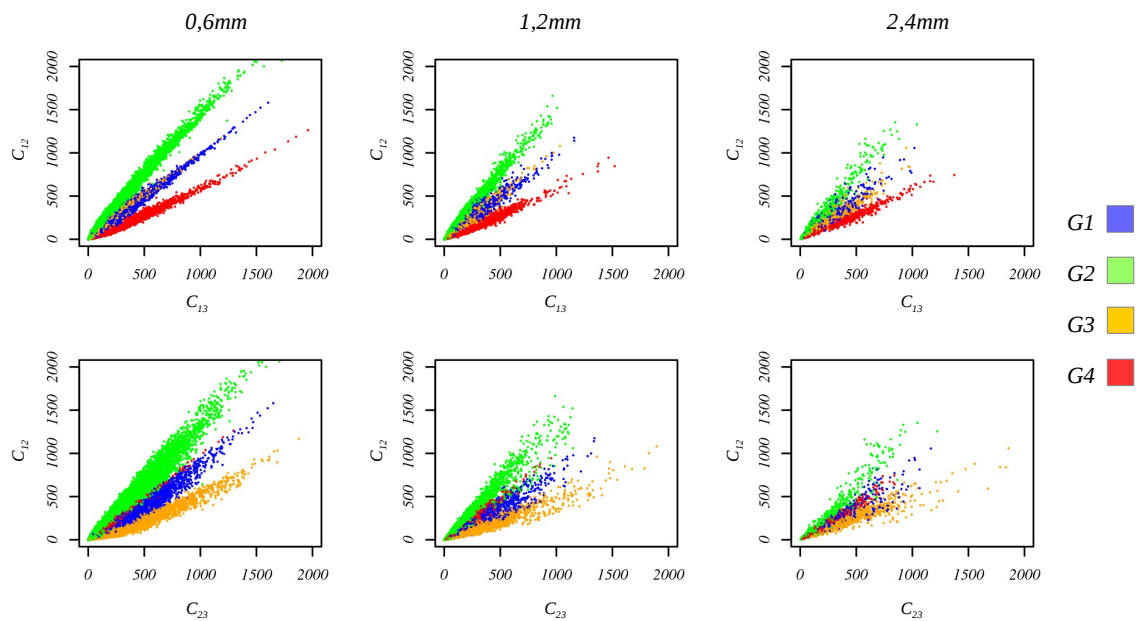


Abb. 6.21: Klassifikation der betrachteten Auflösungsstufen mit Hilfe des auf der Auflösungsstufe  $0,6\text{ mm}$  ermittelten statistischen Modells, projiziert in die Koordinatenebenen  $C_{13}$ - $C_{12}$  sowie  $C_{23}$ - $C_{12}$

die Kolorierung und Benennung der Gruppen willkürlich gewählt wurde. Die Farbgebung der Gruppen wird jedoch im weiteren Verlauf der Arbeit beibehalten. Die separate Darstellung der Scatterplotmatrizen für die Komponenten der orthotropen Gruppe der effektiven Steifigkeit aller vier Cluster in den jeweils drei betrachteten Auflösungsstufen ist ebenfalls in Anhang G zu finden. Die vollständigen Scatterplotmatrizen aller Komponenten sind in den elektronischen Anhängen dieser Arbeit zu finden.

In Abb. 6.21 ist zu erkennen, dass die Gruppierung der Korrelationen über den Auflösungsstufen erhalten bleibt. Dies lässt vermuten, dass durch die Kombination von

MVEs zu größeren Einheiten deren mechanische Eigenschaften gleichartig an die gröbere Auflösungsstufe vererbt werden und sich nicht zu anderem Verhalten rekombinieren.

Es wurde im Rahmen der Arbeit versucht dies durch visuelle Überprüfung der drei analysierten Auflösungsstufen im  $\mathbb{R}^3$  zu bestätigen. Es zeigt sich jedoch, dass die vermutete Vererbung keinem einfachen Schema folgt wie im Folgenden erläutert wird. In Abb. 6.22 ist in Form von halb durchsichtigen Kugeln die Gruppenzugehörig-

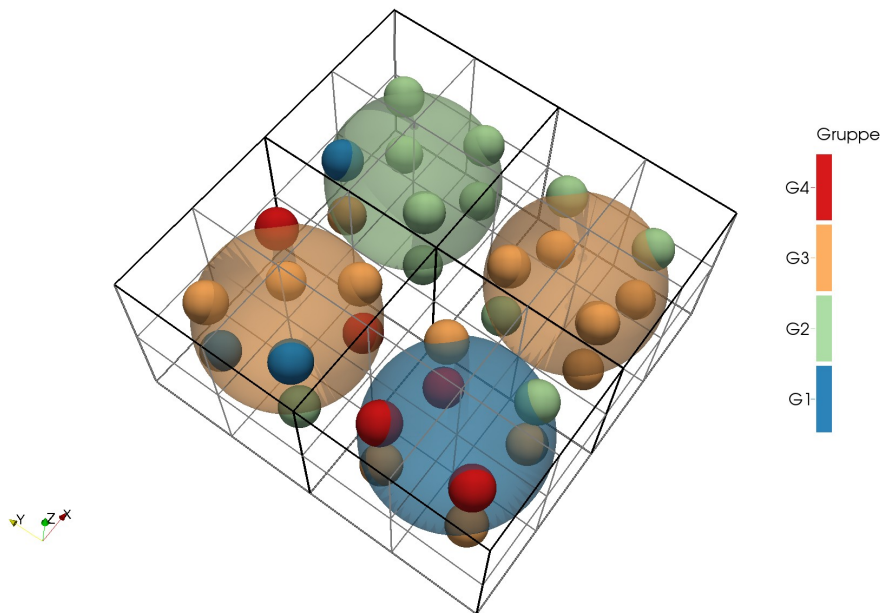


Abb. 6.22: Visualisierung der Gruppenzugehörigkeit von 32 MVEs der Kantenlänge  $1,2\text{ mm}$  sowie vier MVEs der Kantenlänge  $2,4\text{ mm}$  im  $\mathbb{R}^3$ . Die dargestellten Kugeln sind im Zentrum der MVEs aufgehängt und dienen nur der Visualisierung der Gruppenzugehörigkeit. Die physikalische Form ist im Falle der MVEs mit  $1,2\text{ mm}$  Kantenlänge durch graue Gitterlinien und im Falle der MVEs mit  $2,4\text{ mm}$  Kantenlänge durch schwarze Gitterlinien dargestellt.

keit von vier MVEs der Kantenlänge  $2,4\text{ mm}$  dargestellt. Dazu überlagert ist die Gruppenzugehörigkeit von 32 MVEs der Kantenlänge  $1,2\text{ mm}$  in Form von kleineren undurchsichtigen Kugeln dargestellt. Die Anordnung der MVEs entspricht deren original Lokation innerhalb der jeweiligen Zerlegung. Dies bedeutet, jeweils acht der dargestellten MVEs der Kantenlänge  $1,2\text{ mm}$  werden zum übergeordneten MVE mit der Kantenlänge von  $2,4\text{ mm}$  kombiniert.

Die Erwartung war nun zunächst, dass sich die mechanischen Eigenschaften der Gruppen von der feineren zur gröberen Zerlegungsstufe durch mehrheitliche Kombination vererben, wie im Falle des in Abb. 6.22 grün dargestellten, d.h. zur Gruppe G2



gehörenden MVE der Kantenlänge  $2,4\text{ mm}$ . Dieses MVE entsteht durch sechs MVEs der Kantenlänge  $1,2\text{ mm}$ , die ebenfalls zur Gruppe G2 gehören sowie ein MVE der Gruppe G1 und ein weiteres der Gruppe G3. Die mehrheitliche Kombination scheint ebenfalls für das in Abb. 6.22 rechts liegende MVE der Kantenlänge  $2,4\text{ mm}$ , welches zur Gruppe G3 gehört, zu gelten. Dieses kombiniert sich aus fünf MVEs die ebenfalls aus der Gruppe G3 stammen und drei weiteren der Gruppe G2.

Betrachtet man nun jedoch das in Abb. 6.22 links liegende MVE der Kantenlänge  $2,4\text{ mm}$ , welches zur Gruppe G3 gehört so stellt man fest, dass hier nur noch drei der zugehörigen, kleineren MVEs ebenfalls aus Gruppe G3 stammen während die übrigen fünf zu den drei anderen Gruppen gehören. Man könnte weiter argumentieren, dass in diesem Falle noch immer die größte Anzahl an MVEs der Gruppe G3 entstammt während von den anderen fünf zwei zur Gruppe G4, zwei zur Gruppe G2 und nur eines zur Gruppe G1 gehören. Dies würde bedeuten die größte Gruppe bestimmt die mechanischen Eigenschaften des kombinierten MVE.

Allerdings bestätigt sich auch diese Vermutung beim Betrachten des in Abb. 6.22 unten liegenden MVEs nicht. Hier liegt die Situation vor, dass vier (in diesem Falle die Mehrheit) der zu kombinierenden MVEs mit  $1,2\text{ mm}$  Kantenlänge aus der Gruppe G3 stammen, drei aus der Gruppe G4 und ein weiteres aus der Gruppe G2. Die Kombination dieser MVEs führt wie dargestellt zu einem MVE der Kantenlänge  $2,4\text{ mm}$ , welches aufgrund seiner mechanischen Eigenschaften der Gruppe G1 zuzuordnen ist.

Die im Rahmen der Arbeit durchgeführte visuelle Analysen der Datensätze mit  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$  Zerlegungsgröße zeigten, die anhand von Abb. 6.22 beschriebenen Beobachtungen über den gesamten Daten. Dies führte wie oben bereits angedeutet zu dem Schluss, dass die Vererbung mechanischer Eigenschaften zwischen unterschiedlichen Zerlegungsstufen mikrostrukturierter Volumina nicht durch einfache räumliche Mittelungsstrategien erklärt werden kann.

Untersuchungen, in wie weit sich mit Hilfe multivariater Methoden Strukturen in den den Kombinationsmöglichkeiten der vier Gruppen zwischen den untersuchten Auflösungsstufen entdecken lassen, wurden im Rahmen der Arbeit nicht angestellt. Ebenso wurde die Erarbeitung einer Theorie auf Basis mechanischer Betrachtungen, zur Beschreibung der Kombination mechanischer Eigenschaften mikrostrukturierter Volumina, auf einen späteren Zeitpunkt verschoben.

### 6.2.3.3. Parameterreduktion der Originaldaten

Soeben wurde gezeigt, dass sich in den berechneten Materialdaten durch Optimierung Gruppen ausbilden. Aus den Abbildungen der vorangegangenen Abschnitte

sowie auch des Anhanges G ist klar zu erkennen, dass sich innerhalb dieser Gruppen lineare bzw. nur schwach nichtlineare Korrelationen zwischen den Komponenten der effektiven Steifigkeit zeigen. Aus diesem Grunde liegt es nahe eine mögliche Parameterreduktion des zu betrachtenden 21 dimensionalen Raumes mit Hilfe eines linearisierten Ansatzes zu untersuchen.

Als linearisierter Ansatz wurde in dieser Arbeit die Hauptkomponentenanalyse gewählt wobei die zu Grunde liegenden Kovarianzmatrizen zunächst durch drei unterschiedliche Ansätze berechnet wurden.

- Berechnung der Komponenten mit Hilfe der Stichproben Kovarianz.
- Berechnung der Komponenten durch den Korrelationskoeffizienten nach Pearson
- Berechnung der Komponenten durch den Korrelationskoeffizienten nach Kendall

Die durch die Ansätze entstehenden Kovarianzmatrizen besitzen alle die gleichen, in Anhang A erläuterten, mathematischen Eigenschaft. Dies bedeutet, dass alle positiv semidefinit sind und eine Hauptachsentransformation die Kovarianzmatrix in allen drei Fällen diagonalisiert. Die Quadratwurzeln der Eigenwerte geben dabei ebenfalls in allen drei Fällen Standardabweichungen an.

Im Falle der Stichproben Kovarianz ist dies die Standardabweichung der Originaldaten. Im Falle des Korrelationskoeffizienten nach Pearson bzw. der Korrelationsmatrix ist es die Standardabweichung der auf den Mittelwert Null und die Standardabweichung Eins normierten Daten und im Falle des Korrelationskoeffizienten nach Kendall die Standardabweichung der rangtransformierten Originaldaten.

In Abb. 6.23 sind Anteile der Standardabweichungen der hauptachsentransformierten Kovarianz- bzw. Korrelationsmatrizen der vollständigen Datenreihen, d.h. ohne Berücksichtigung der Gruppen, für die drei betrachteten MVE Kantenlängen aufgetragen. Die Darstellung ist aus Gründen der Übersichtlichkeit nach der 14 Komponente abgebrochen wobei es anzumerken gilt, dass die Anteile der nachfolgenden Komponenten bei allen neun betrachteten Fällen unter 1,5% lagen. In der Abbildung ist deutlich zu erkennen, dass im Falle der Kovarianzmatrix der Originaldaten die erste Hauptkomponente bei allen drei Auflösungsstufen über 80% der Gesamtvarianz erklärt. Im Fall der MVE Kantenlänge von 0,6 mm liegt der Anteil sogar bei über 90% der Gesamtvarianz. Die folgenden drei Komponenten erklären zusammen, je nach Auflösung, nur noch 6% bis 11% der Gesamtvarianz. Dies bedeutet zum Einen, dass

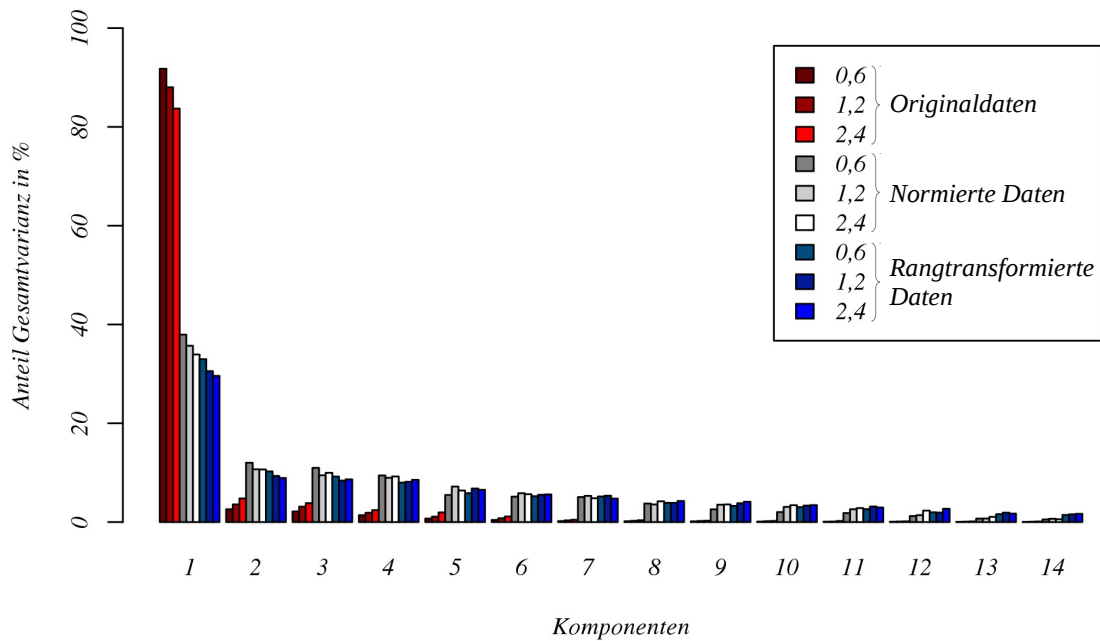


Abb. 6.23: Anteile der Hauptkomponenten an der Gesamtvarianz des vollständigen Datensatz. In unterschiedlichen Schattierungen des gleichen Farbtons dargestellt sind jeweils die drei untersuchten MVE Kantenlängen. In rötlichen Farben bei Verwendung der Kovarianzmatrix der Originaldaten, in Graustufen bei Verwendung der Korrelationsmatrix, d.h. der Kovarianzmatrix der normierten Daten und in blauen Farbtönen bei Verwendung der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten.

durch die ersten vier Komponenten der hauptachsentransformierten Kovarianzmatrix der Originaldaten auf allen drei Auflösungsstufen über 94% der Gesamtvarianz erklärt werden und zum Anderen, dass die gesamte Transformation sehr stark durch die erste Komponente dominiert wird.

Im Falle der Korrelationsmatrix bzw. der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten erklärt die erste Hauptkomponente dagegen nur ca. 35% der Gesamtvarianz. Die nächsten drei Komponenten erklären je nach Auflösungsstufe und verwendeter Normierungsmethode der Daten weitere 26% bis 32% der Gesamtvarianz. Daraus folgen zwischen 64% und 70% erklärte Gesamtvarianz im Falle der Korrelationsmatrix und zwischen 56% und 60% erklärte Gesamtvarianz im Falle der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten. Es ist zu erkennen, dass die Dominanz der ersten Komponente durch Normierung bzw. Rangtransformation der Daten deutlich reduziert wird, dies jedoch auch bedeutet, dass wesentlich mehr Komponenten notwendig sind, um den größten Anteil der Gesamtvarianz zu beschreiben.

Diese Analyse stimmt mit der in vielen Lehrbüchern ausgesprochenen Empfehlung

überein, die Daten vor einer Hauptachsentransformation zunächst zu normieren falls die einzelnen Dimensionen starke Größenunterschiede besitzen. Da es sich bei den hier untersuchten Daten jedoch um technische Materialdaten handelt, deren Größenverhältnisse einem funktionalen Schema folgen kann an dieser Stelle noch keine Aussage darüber getroffen werden, ob eine Normierung der hier analysierten Daten Sinn ergibt oder nicht. Aus diesem Grunde wird im Folgenden sowohl die Hauptkomponentenanalyse der Originaldaten als auch der normierten bzw. rangtransformierten Daten vorgestellt.

[77] weist darauf hin, dass Pearson's Korrelationskoeffizient bei der Beschreibung der Korrelation, die Dominanz starker Ausreißer nicht vollständig vermeiden kann wohingegen die Rangtransformation nach Kendall auch starke Ausreißer einfängt. Auch diese Aussage kann in oben dargestelltem Ergebnis wiedergefunden werden. In Abb. 6.23 ist zu erkennen, dass die ersten Hauptkomponenten bei Verwendung der Korrelationsmatrix größere Werte aufweisen als bei Verwendung der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten. Da die beiden Normierungsmethoden ansonsten ähnlich Eigenschaften zeigen, wird in den folgenden Analysen auf die Verwendung der Korrelationsmatrix verzichtet und es werden nur noch die Originaldaten sowie die rangtransformierten Daten analysiert.

Wie aus Abb. 6.23 zu erkennen ist, verhalten sich die Anteile der einzelnen Komponenten an der Gesamtvarianz auf allen drei analysierten Auflösungsstufen ähnlich. Der Abfall der Anteile der ersten Komponenten mit zunehmender MVE Kantenlänge ist durch die insgesamt größere Streuung der Daten bei größerer MVE Kantenlänge zu erklären. Aus diesem Grund wird für die folgenden Analysen exemplarisch die MVE Kantenlänge  $0,6\text{ mm}$  herangezogen. Die durchgeführten Betrachtungen gelten jedoch in gleicher Weise für die beiden größeren MVE Kantenlängen. Betrachtet man die in Tab. 6.9 für die MVE Kantenlänge  $0,6\text{ mm}$  angegebenen Eigenvektoren der Kovarianzmatrix der ungruppierten Daten, so ist zu erkennen, dass diese fast ausschließlich auf die Komponenten der orthotropen Gruppe laden. Dies bedeutet, dass sich die, durch die ersten vier Komponenten erklärten über 94% der Gesamtvarianz, nahezu vollständig durch die Orthotrope Gruppe beschreiben lassen.

Im Falle der rangtransformierten Daten ergeben sich die ebenfalls in Tab. 6.9 eingetragenen Verhältnisse. Es ist zu erkennen, dass nur der erste Eigenvektor auf die Komponenten der orthotropen Gruppe lädt während die nächsten Eigenvektoren fast ausschließlich auf die Komponenten der anisotropen Gruppe laden. Dies bedeutet, die orthotrope Gruppe erklärt durch die ersten Komponenten wie bereits oben angegeben, je nach MVE Kantenlänge nur noch ca. 35% der Gesamtvarianz der rangtransformierten Daten.

	Originaldaten				Rangtransformiert			
	Komp. 1	Komp. 2	Komp. 3	Komp. 4	Komp. 1	Komp. 2	Komp. 3	Komp. 4
AGV	91,765	2,593	2,153	1,392	33,0	10,3	9,2	8,0
Kum. AGV	91,765	94,358	96,511	97,904	33,0	43,2	52,4	60,4
$C_{11}$	<b>-0,388</b>	<b>0,396</b>	<b>0,458</b>	<b>0,157</b>	<b>-0,334</b>	-0,005	-0,004	0,003
$C_{22}$	<b>-0,508</b>	<b>-0,232</b>	<b>-0,080</b>	<b>-0,326</b>	<b>-0,343</b>	-0,002	0,000	0,000
$C_{33}$	<b>-0,573</b>	<b>-0,243</b>	<b>-0,271</b>	<b>-0,352</b>	<b>-0,344</b>	-0,002	0,000	0,001
$C_{12}$	<b>-0,208</b>	<b>0,326</b>	<b>-0,245</b>	<b>0,217</b>	<b>-0,336</b>	-0,003	-0,001	0,003
$C_{13}$	<b>-0,171</b>	<b>0,196</b>	<b>0,308</b>	<b>-0,051</b>	<b>-0,335</b>	-0,003	-0,007	0,000
$C_{23}$	<b>-0,205</b>	<b>-0,248</b>	<b>0,080</b>	<b>0,358</b>	<b>-0,338</b>	-0,007	-0,002	0,004
$C_{44}$	<b>-0,259</b>	<b>0,481</b>	<b>-0,506</b>	<b>0,342</b>	<b>-0,322</b>	-0,002	0,000	0,004
$C_{55}$	<b>-0,185</b>	<b>0,198</b>	<b>0,514</b>	<b>-0,174</b>	<b>-0,322</b>	-0,002	-0,007	0,000
$C_{66}$	<b>-0,216</b>	<b>-0,504</b>	<b>0,168</b>	<b>0,647</b>	<b>-0,324</b>	-0,008	-0,002	0,004
$C_{45}$	0,000	0,001	-0,002	-0,002	-0,003	<b>0,476</b>	<b>-0,129</b>	0,007
$C_{46}$	0,000	0,000	-0,003	-0,003	-0,006	<b>0,183</b>	<b>0,613</b>	0,025
$C_{56}$	0,000	0,000	0,000	-0,003	-0,004	0,033	0,015	<b>-0,650</b>
$C_{14}$	-0,001	-0,002	-0,002	-0,006	-0,003	0,017	0,005	<b>-0,390</b>
$C_{15}$	0,000	-0,004	0,002	0,000	-0,007	<b>0,127</b>	<b>0,403</b>	0,009
$C_{16}$	0,000	0,001	-0,002	-0,002	-0,003	<b>0,501</b>	<b>-0,136</b>	0,009
$C_{24}$	0,000	0,002	0,003	0,002	0,001	0,000	0,007	<b>-0,108</b>
$C_{25}$	0,000	-0,001	-0,002	-0,002	-0,005	<b>0,180</b>	<b>0,613</b>	0,026
$C_{26}$	0,000	0,001	0,005	-0,006	-0,005	<b>0,465</b>	<b>-0,155</b>	0,034
$C_{34}$	0,000	0,000	0,000	-0,003	-0,005	0,035	0,015	<b>-0,640</b>
$C_{35}$	0,000	-0,002	0,000	0,003	-0,002	-0,011	-0,049	-0,003
$C_{36}$	0,000	0,001	0,002	-0,004	-0,006	<b>0,470</b>	<b>-0,156</b>	0,035

Tab. 6.9: Anteile an der Gesamtvarianz, kumulierter Anteil an der Gesamtvarianz und die ersten vier Eigenvektoren der Kovarianzmatrizen der ungruppierten Original- und der ungruppierten rangtransformierten Daten bei 0,6 mm MVE Kantenlänge.

Dieses Ergebnis ist plausibel da die Rangtransformation die unterschiedlichen Größenordnungen der einzelnen Dimensionen ausgleicht. Betrachtet man die bereits im vorangegangenen Abschnitt in Abb. 6.14 verwendeten und in Abb. 6.24 nochmals dargestellten Korrelationen zwischen  $C_{33}$  und  $C_{22}$  sowie zwischen  $C_{33}$  und  $C_{25}$  mit und ohne Berücksichtigung der Skalen, so wird dies ebenfalls deutlich. Die in der Abbildung eingezeichneten Geraden sind im Schwerpunkt der jeweils dargestellten Korrelation aufgehängt. Die Steigungen der Geraden ergeben sich aus den, zu den Projektionsebenen gehörenden Komponenten, der in Tab. 6.9 ersten beiden Eigenvektoren. In Abb. 6.24 oben wurden die Komponenten der Eigenvektoren der Kovarianzmatrix der Originaldaten verwendet wobei die Skalierung der x- und y-Achsen so gewählt wurde, dass beide Diagramme den gleichen Skalenumfang darstellen. Es ist zu erkennen, dass die Streuung der Daten durch die gewählte Skalierung entlang der eingezeichneten beiden Hauptrichtungen wesentlich größer ist als senkrecht dazu. Dies stellt den Effekt der Hauptkomponentenanalyse auf den Originaldaten dar. Aufgrund der Berücksichtigung der Skalen der Dimensionen wird die Streuung derjenigen Dimension, die den größten Wertebereich aufweist wesentlich höher bewertet, als die Streuung der Dimensionen mit kleinerem Wertebereichen.

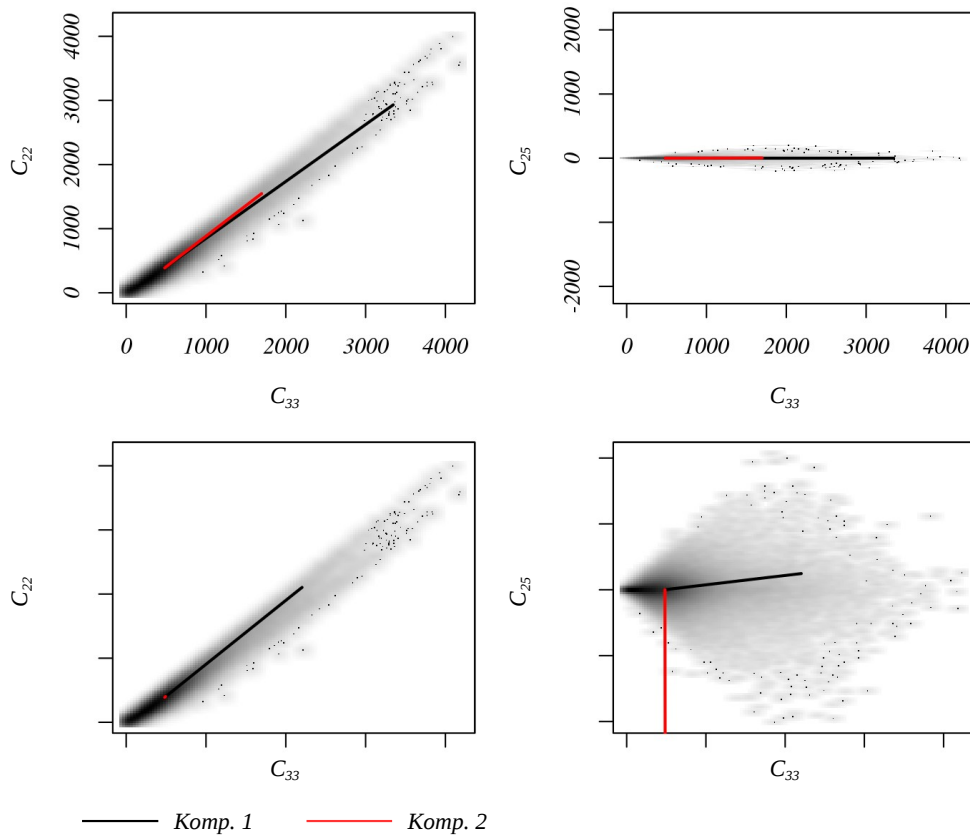


Abb. 6.24: Korrelationen der Auflösungsstufe  $0,6\text{ mm}$  mit projizierten Hauptrichtungen der ersten beiden Eigenvektoren

In Abb. 6.24 unten bestimmen sich die eingezeichneten Geraden durch die Komponenten der Eigenvektoren der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten wobei die Skalierung der Diagrammachsen so gewählt wurde, dass deren Wertebereich gerade mit dem Wertebereich der jeweiligen Dimension übereinstimmt. So ist die Wirkung der Rangtransformation zu erkennen. Betrachtete man die in schwarz eingezeichneten Geraden der Projektion der ersten Hauptrichtung, so sind diese in etwa gleich orientiert wie in den beiden oberen Diagrammen. An der Länge der Geraden ist jedoch wie auch an den Werten in Tab. 6.9 zu erkennen, dass die Ladungen der Eigenvektoren in diesem Fall geringer sind als bei den Originaldaten. Vergleicht man bei dieser Darstellungsmethode die Streuungen der Korrelationen senkrecht zur ersten Hauptrichtung so ist zu erkennen, dass im Falle der rangtransformierten Daten die Streuung in dieser Richtung im rechten Diagramm wesentlich größer ist als im rechten und dementsprechend stärker in der Hauptkomponentenanalyse Berücksichtigung findet.

Der soeben mit Hilfe der in Abb. 6.24 beispielhaft dargestellten Hauptkomponenten

analysierte Zusammenhang tritt bei allen Korrelationen innerhalb der orthotropen Gruppe, bei allen Korrelationen innerhalb der anisotropen Gruppe sowie bei allen Korrelationen zwischen Komponenten der anisotropen und der orthotropen Gruppe auf. Dies wird auch durch die in Abb. 6.25 und Abb. 6.26 dargestellte Entwicklung der Korrelationen bei Transformation in den Unterraum der ersten  $k$  Eigenvektoren mit Hilfe von Gl. (2.146) und Rücktransformation in den  $\mathbb{R}^{21}$  mit Hilfe von Gl. (2.147) deutlich. D.h. insgesamt ergibt sich:

$$\hat{X}_{mn} \mathcal{R}_{nk} \mathcal{R}_{nk}^T = \hat{X}_{mn,red} \quad (6.16)$$

Wie in Abschnitt 2.4.3 beschrieben, mit  $\hat{X}_{mn}$  der Datenreihe mit  $m$  Beobachtungen und  $n$  Dimensionen,  $\mathcal{R}_{nk}$  der Matrix der ersten  $k$  Eigenvektoren der angewandten Kovarianzmatrix und  $\hat{X}_{mn,red}$  der Datenreihe mit  $m$  Beobachtungen,  $n$  Dimensionen und reduzierter Varianz.

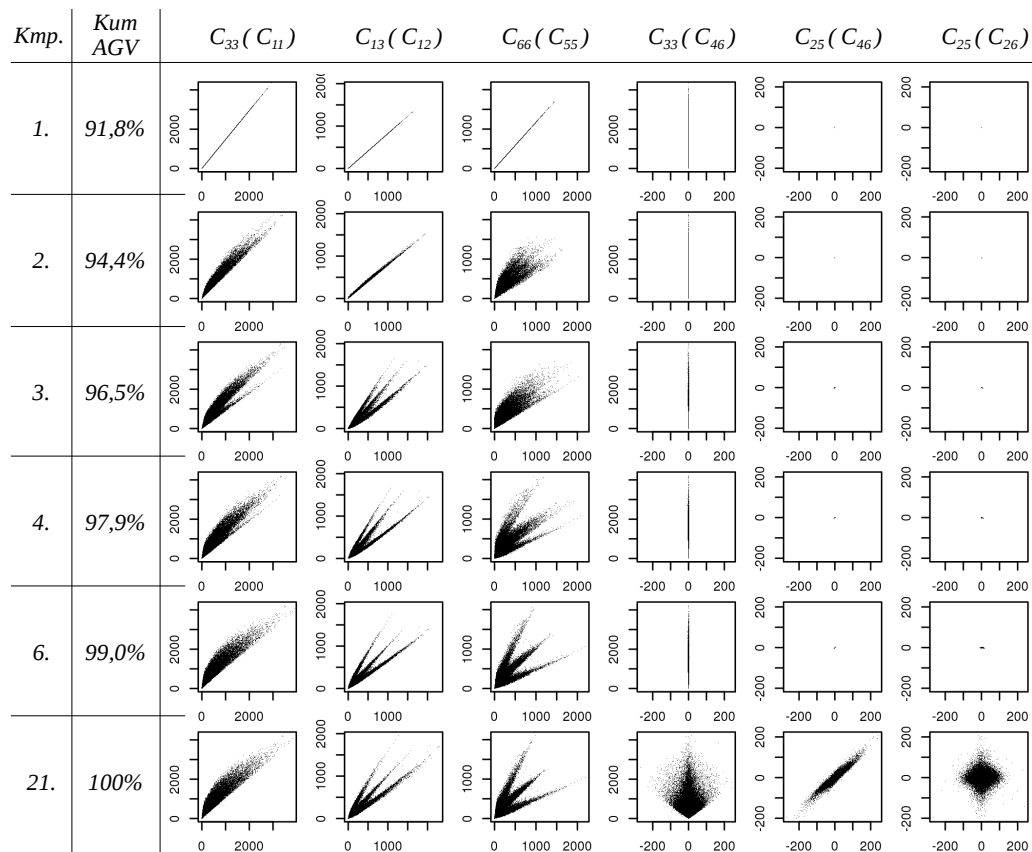


Abb. 6.25: Entwicklung der reduzierten Originaldaten bei Transformation mit Hilfe von Gl. (6.16)

In Abb. 6.25 sind exemplarisch die Entwicklungen von sechs Korrelationen der reduzierten Daten dargestellt. Die Reduktion wurde, wie in der ersten Spalte angegeben,

mit einer von oben nach unten ansteigenden Zahl von Eigenvektoren der Kovarianzmatrix der Originaldaten durchgeführt. Wie zu sehen ist entsprechen die in der letzten Zeile angegebenen Korrelationen den Originaldaten. In der zweiten Spalte sind die kumulierten Anteile der verwendeten Hauptkomponenten an der Gesamtvarianz der Originaldaten angegebenen. Die in den drei folgenden Spalten dargestellten Diagramme,  $C_{33}(C_{11})$ ,  $C_{13}(C_{12})$  und  $C_{66}(C_{55})$  zeigen Korrelationen zwischen Komponenten der orthotropen Gruppe. Spalte sechs enthält die Korrelation  $C_{13}(C_{46})$ , d.h. es wird eine Komponente der orthotropen Gruppe über einer Komponente der anisotropen Gruppe dargestellt. Die in den beiden Spalten ganz rechts dargestellten Diagramme  $C_{25}(C_{46})$  und  $C_{25}(C_{26})$  zeigen Korrelationen zwischen Komponenten der anisotropen Gruppe. Abb. 6.26 zeigt die gleiche Darstellung für die Reduktion der Varianz der Daten mit Hilfe der Eigenvektoren der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten.

Anhand der ersten fünf Zeilen von In Abb. 6.25 ist zu erkennen, dass bis zu einem Anteil von 99% der Gesamtvarianz der Daten, die Streuung der Korrelationen zwischen den Komponenten der orthotropen und den Komponenten der anisotropen Gruppe sowie die Streuung der Korrelationen innerhalb der anisotropen Gruppe nur zu einem sehr geringen Anteil durch die Hauptkomponenten berücksichtigt wird. Ebenso ist zu erkennen, dass die Korrelationen zwischen den Komponenten der orthotropen Gruppe bei Abbildung von 99% Gesamtvarianz in dieser Darstellung optisch nicht mehr von den Originaldaten zu unterscheiden sind. Dagegen ist bei der Verwendung von nur vier Komponenten, d.h. einer Abbildung von knapp 98% der Gesamtvarianz der Daten, noch eine deutliche Differenz zwischen den Korrelationen der reduzierten Daten und der Originaldaten zu erkennen. Die in Abb. 6.26 dargestellte Entwicklung der Daten unter Varianzreduktion mit Hilfe der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten zeigt im Vergleich zu Abb. 6.25 eine vollständig anderes Bild. So zeigt sich, dass die Korrelationen innerhalb der orthotropen Gruppe bis zu einem kumulierten Anteil von über 52% der Gesamtvarianz vollkommen linear bleiben während die Korrelationen, an welchen Komponenten der anisotropen Gruppe beteiligt sind, nun wesentlich stärker berücksichtigt werden und deutliche Streuung zeigen. Vergleicht man die erste Zeile von Abb. 6.25 und die vierte Zeile von Abb. 6.26, so wird der Unterschied in den beiden zu Grunde liegenden Vorgehensweisen besonders deutlich. In beiden Zeilen ist der kumulierte Anteil der verwendeten Komponenten an der Gesamtvarianz größer als 90%, d.h. im Falle der Originaldaten würde nach der in [48] angegebenen Daumenregel bereits eine Komponente ausreichen um die Daten im Wesentlichen zu beschreiben. Dies würde jedoch wie dargestellt eine vollständige Linearisierung der Daten bedeuten. Im Falle der rangtransformierten Daten



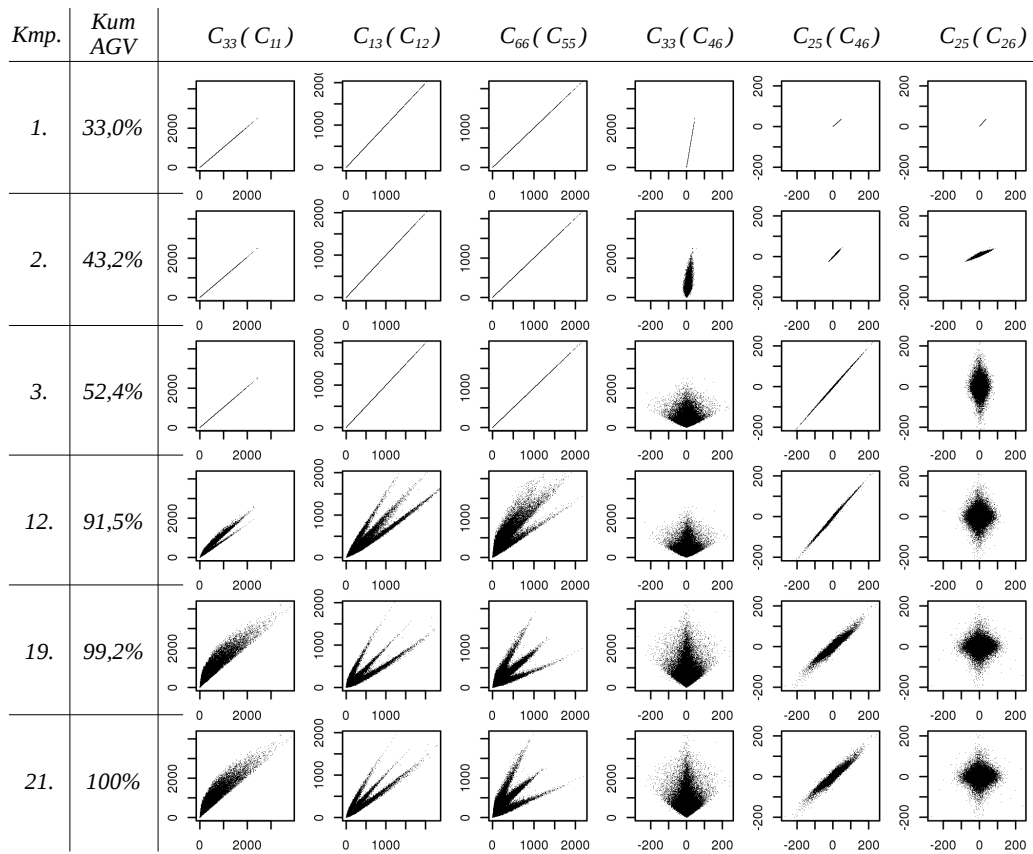


Abb. 6.26: Entwicklung der reduzierten, rangtransformierten Daten bei Transformation mit Hilfe von Gl. (6.16)

stellen 12 Komponenten über 90% der Gesamtvarianz dar wobei alle Komponenten der anisotropen Steifigkeitsmatrix gleichermaßen Berücksichtigung finden. Aus der rein optischen Beurteilung kann man aber auch hier zu dem Schluss kommen, dass insbesondere die Korrelationen zwischen Komponenten der orthotropen Gruppe noch wesentlich von denjenigen der Originaldaten verschieden sind.

Aufgrund der soeben angestellten Betrachtungen kann keine Beurteilung vorgenommen werden, welcher Ansatz zur Modellierung der Kovarianzmatrix zu bevorzugen ist und wie viele Dimensionen letztendlich notwendig sind um die Daten genügend genau zu beschreiben. Dies bedeutet, die Zusammenhänge können an dieser Stelle zunächst nur als beachtenswerte Tatsache angegeben werden. Die Entscheidung ob z.B. eine Rangtransformation und somit höhere Bewertung der anisotropen Koppelungskomponenten durch die Hauptkomponentenanalyse sinnvoll ist oder nicht muss anhand der detaillierten Auswertung kontinuumsmechanischer Simulationen, in dieser Arbeit folgenden Untersuchungen getroffen werden.

### 6.2.3.4. Parameterreduktion bei Gruppierung

An dieser Stelle wird zunächst der Einfluss der im vorangegangenen Abschnitt dargestellten Gruppierung der Daten auf die Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse analysiert. Die Ergebnisse der einzelnen Gruppen werden hierbei als relative Änderungen gegenüber den Ergebnissen des ungruppierten Datensatzes dargestellt. Dies bedeutet, es wurde innerhalb jeder Gruppe eine Hauptkomponentenanalyse durchgeführt und anschließend die gleichen Kennzahlen wie im Falle des ungruppierten Datensatzes berechnet.

Die Ergebnisse der kumulierten Anteile der einzelnen Hauptkomponenten an der Gesamtvarianz der jeweiligen Gruppe sind in Abb. 6.27 aufgetragen. Wie in der Abbildung links zu erkennen ist, ergibt die Gruppierung der Daten im Falle der Kovarianzmatrix der Originaldaten einen Anstieg des kumulierten Anteils der Gesamtvarianz von maximal 5% pro Gruppe gegenüber dem kumulierten Anteil der Gesamtvarianz der ungruppierten Daten. Der Anstieg betrifft dabei die ersten vier Komponenten. Bei der fünften Komponente liegt die Änderung gegenüber den un-

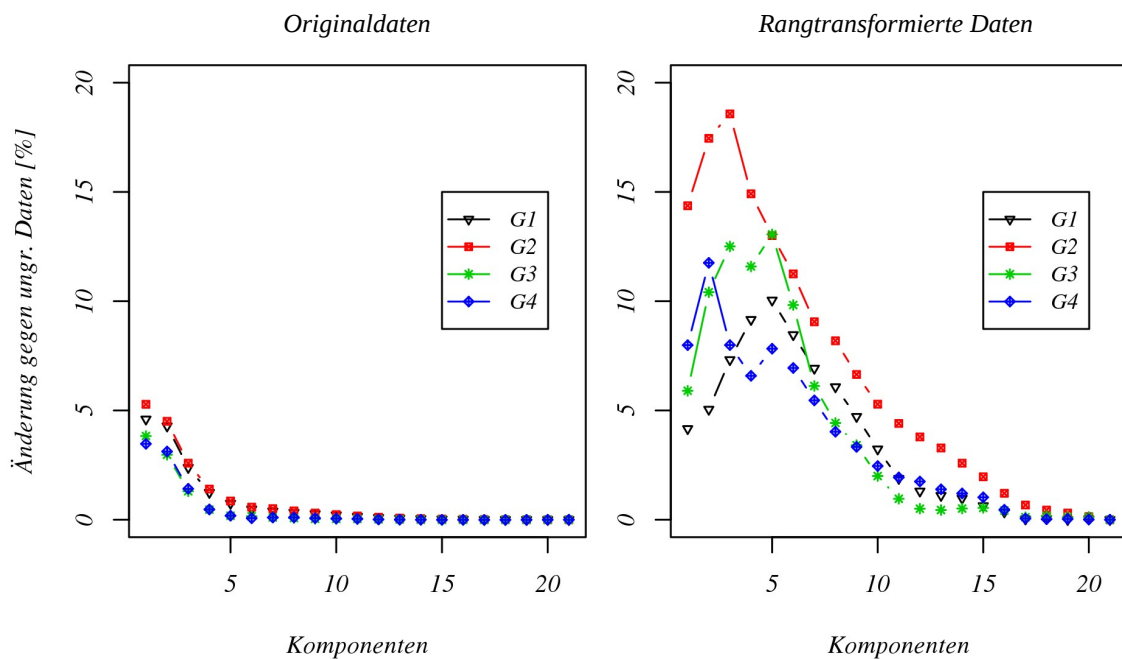


Abb. 6.27: Änderung des kumulierten Anteils der Gesamtvarianz durch Gruppierung. Links: Im Falle der Berechnung der Hauptkomponenten auf Basis der Kovarianzmatrix der Originaldaten. Rechts: Im Falle der Berechnung der Hauptkomponenten auf Basis der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten.

gruppierten Daten bei allen Gruppen bereits bei unter 1%. Im Vergleich zu den, in

Abb. 6.27 rechts zu sehenden, für den Fall der rangtransformierten Daten dargestellten Änderungen des kumulierten Anteils der Gesamtvarianz fällt zusätzlich auf, dass die Änderung bei allen Gruppen die gleichen Komponenten mit ähnlichen Beträgen betrifft.

Im Gegensatz zum soeben diskutierten Verhalten im Falle der Kovarianzmatrix der Originaldaten, steht die in Abb. 6.27 rechts dargestellte Entwicklung der kumulierten Anteile der Komponenten an der Gesamtvarianz der jeweiligen Gruppe im Falle der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten. In der Abbildung ist zu erkennen, dass bei allen vier Gruppen der kumulierte Anteil an der Gesamtvarianz der Gruppe gegenüber den Ergebnissen der ungruppierten Daten zwischen 4% und im Falle der dritten Komponente der Gruppe  $G_2$  um bis zu ca. 18% zunimmt.

Diese Ergebnis zeigt deutlich, dass die Gruppierung der Daten im Falle der rangtransformierten ein Werkzeug sein kann, um bei einer Parameterreduktion mit Hilfe einer Hauptkomponentenanalyse die Signifikanz der ersten Hauptkomponenten zu steigern. Inwiefern sich die Erfassung eines größeren Anteils der Gesamtvarianz der Daten in kontinuumsmechanischen Berechnungen bezahlt macht wird im nächsten Abschnitt überprüft.

Eine weitere Frage, die in diesem Zusammenhang geklärt werden muss ist, ob der größere Anteil an erklärter Gesamtvarianz die Einführung zusätzlicher Modellparameter durch die Gruppierung der Daten rechtfertigt. Ebenso konnte durch die im Rahmen der Arbeit durchgeführten Analysen nicht abschließend geklärt werden, ob sich die vier Gruppen anhand von Daten, die aus einer  $k$ -CT gewonnen werden, klar trennen lassen und so die Anwendung eines stärker differenzierten statistischen Modells ermöglichen.

Die Gruppierung der Daten hat nicht nur Einfluss auf den kumulierten Anteil der Gesamtvarianz, sondern beeinflusst im Falle der Kovarianzmatrix der Originaldaten, wie in Abb. 6.28 dargestellt, auch die Ladungen der zu den ersten Komponenten gehörenden Eigenvektoren. Die in der Abbildung dargestellten Balkendiagramme zeigen jeweils die Ladungen eines Eigenvektors auf die Komponenten der effektiven Steifigkeit. Die Anordnung der Komponenten der effektiven Steifigkeit ist dabei wie in Abschnitt 6.2.2 erläutert:

- Orthotrope Gruppe :  $C_{11}$  ,  $C_{22}$  ,  $C_{33}$  ,  $C_{12}$  ,  $C_{13}$  ,  $C_{23}$  ,  $C_{44}$  ,  $C_{55}$  ,  $C_{66}$
- Anisotrope Gruppe :
  - Schub-Schubkopplung :  $C_{45}$  ,  $C_{46}$  ,  $C_{56}$
  - Normal-Schubkopplung :

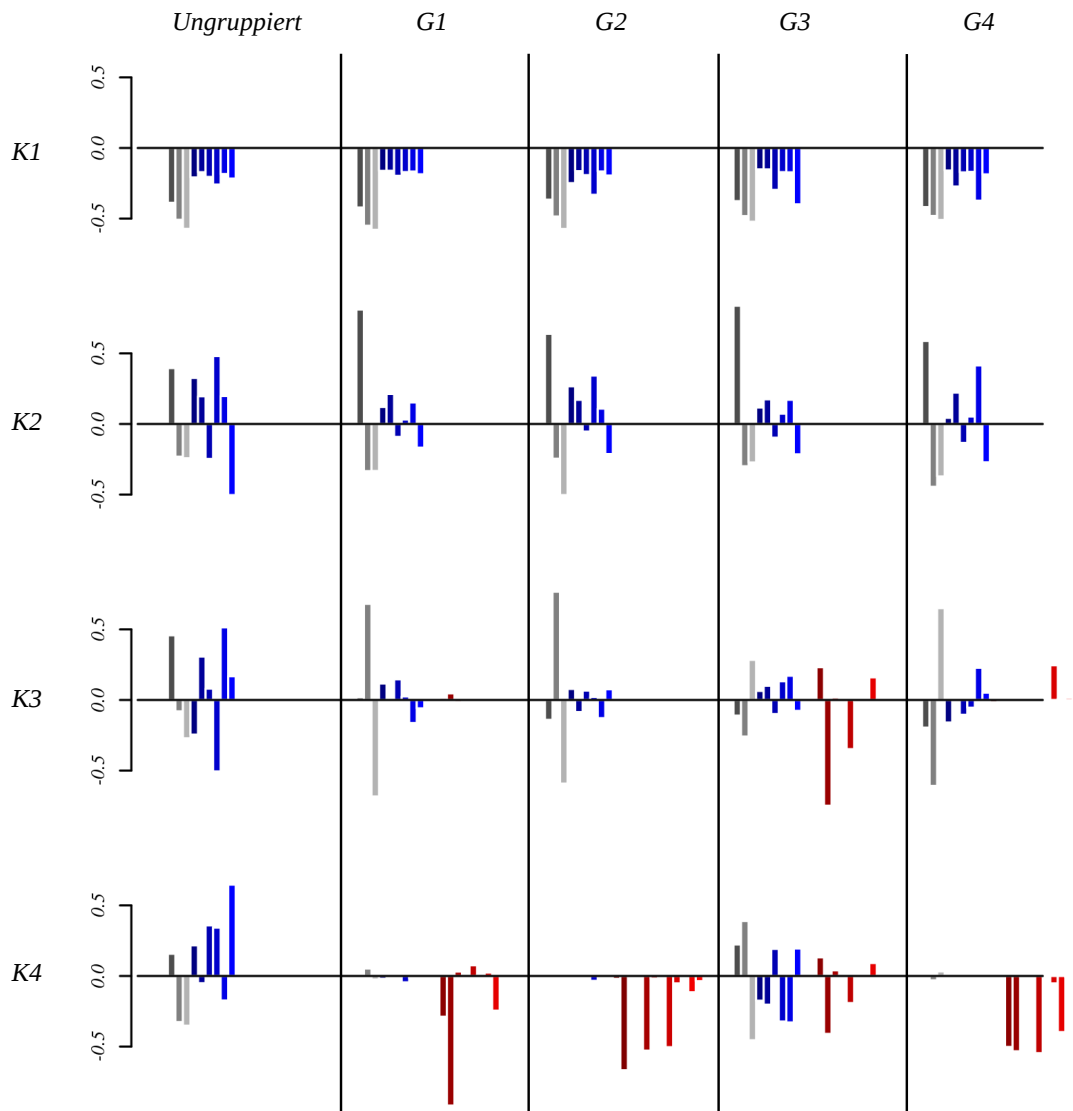


Abb. 6.28: Änderungen der Ladungen der ersten vier Eigenvektoren durch Gruppierung bei einer MVE Kantenlänge von  $0,6\text{ mm}$  und Betrachtung der Kovarianzmatrix der Originaldaten.

$$C_{14}, C_{15}, C_{16}, C_{24}, C_{25}, C_{26}, C_{34}, C_{35}, C_{36}$$

wobei die drei Normaldehnungskomponenten  $C_{11}$ ,  $C_{22}$  und  $C_{33}$  in Graustufen eingefärbt sind. Die folgenden sechs Komponenten der orthotropen Gruppe  $C_{12}$  bis  $C_{26}$  sind bläulich eingefärbt und die zwölf Komponenten der anisotropen Gruppe  $C_{27}$  bis  $C_{36}$  sind rötlich eingefärbt.

In der ganz linken Spalte von Abb. 6.28 sind die Ladungen der ersten vier Eigenvektoren  $K1$  bis  $K4$  der Kovarianzmatrix des ungruppierten Datensatzes auf die Komponenten der effektiven Steifigkeit dargestellt. Die Darstellung ist eine Wieder-

holung der in Tab. 6.9 angegebenen Daten. Es ist wieder deutlich zu erkennen, dass in diesem Falle die ersten Eigenvektoren ausschließlich auf die Komponenten der orthotropen Gruppe laden. Diese Aussage trifft im Falle des gruppierten Datensatzes auch auf die Ladungen der ersten beiden Eigenvektoren aller vier Gruppen zu. Die genauere Betrachtung ergibt des Weiteren, dass die Ladungen der ersten beiden Eigenvektoren im ungruppierten Falle wie auch in den einzelnen Gruppen, prinzipiell die gleiche Struktur aufweisen. Dies bedeutet, dass alle Ladungen der ersten Eigenvektoren negativ sind, und dass alle Ladungen der zweiten Eigenvektoren des ungruppierten Datensatzes und der Gruppen die gleichen Vorzeichen besitzen.

Neben der prinzipiell ähnlichen Struktur der Ladungen sind bei den beiden ersten Eigenvektoren jedoch auch Unterschiede im Detail zu erkennen. So ist beim detaillierten Vergleich der zum ersten Eigenvektor gehörenden Balkendiagramme zu sehen, dass bei den bläulich eingefärbten Komponenten der Orthotropen Gruppe Unterschiede auftreten. Während bei der Gruppe  $G1$  alle Ladungen der Normaldehnungskopplungskomponenten und der Schubkomponenten einen ähnlichen Betrag aufweisen, sind bei den Gruppen  $G2$  bis  $G4$  jeweils zwei der sechs Ladungen von größerem Betrag. Bei der Gruppe  $G2$  sind dies die Ladungen auf die Querdehnungskomponente  $C_{12}$  und die Schubkomponente in der 12-Ebene,  $C_{44}$ , bei der Gruppe  $G3$  weisen die Querdehnungskomponente  $C_{23}$  und die Schubkomponente in der 23-Ebene,  $C_{66}$  erhöhte Ladungen auf und bei der Gruppe  $G4$  sind bei der Querdehnungskomponente  $C_{13}$  sowie der Schubkomponente in der 13-Ebene,  $C_{55}$  erhöhte Beträge zu beobachten.

Betrachtet man in diesem Zusammenhang die in Abb. 6.29 dargestellten MVEs, die jeweils einer der vier Gruppen entstammen, so ist ein direkter Zusammenhang zwischen den Ladungen der ersten Eigenvektoren der Kovarianzmatrix der Originaldaten und der Gestalt bzw. den mechanischen Eigenschaften der MVEs zu erkennen. Die Abbildung zeigt pro Zeile jeweils drei Ansichten des selben MVEs, wobei die MVEs aus den Gruppen auf Grund der Verhältnisse zwischen den Konstanten ihrer effektiven Steifigkeitsmatrizen ausgewählt wurden. Die Verhältnisse, insbesondere der in Abb. 6.28 bläulich eingefärbten Komponenten entsprechen dabei gerade denen der Ladungen des jeweils ersten Eigenvektors der Kovarianzmatrix der Originaldaten der Gruppe. Ein weiteres Kriterium für die Auswahl der MVEs war der Wertebereich der Komponenten der orthotropen Gruppe ihrer effektiven Steifigkeit. Dieser repräsentiert ungefähr den Mittelwert der jeweiligen Gruppe und liegt, wie in Abb. 6.30 zu erkennen ist, für alle Gruppen in einem ähnlichen Bereich. Dies bedeutet, dass die MVEs in Bezug auf ihre prinzipiellen mechanischen Eigenschaften für die jeweilige Gruppe repräsentativ sind und dass sie in Bezug auf ihre absoluten elastischen Ei-

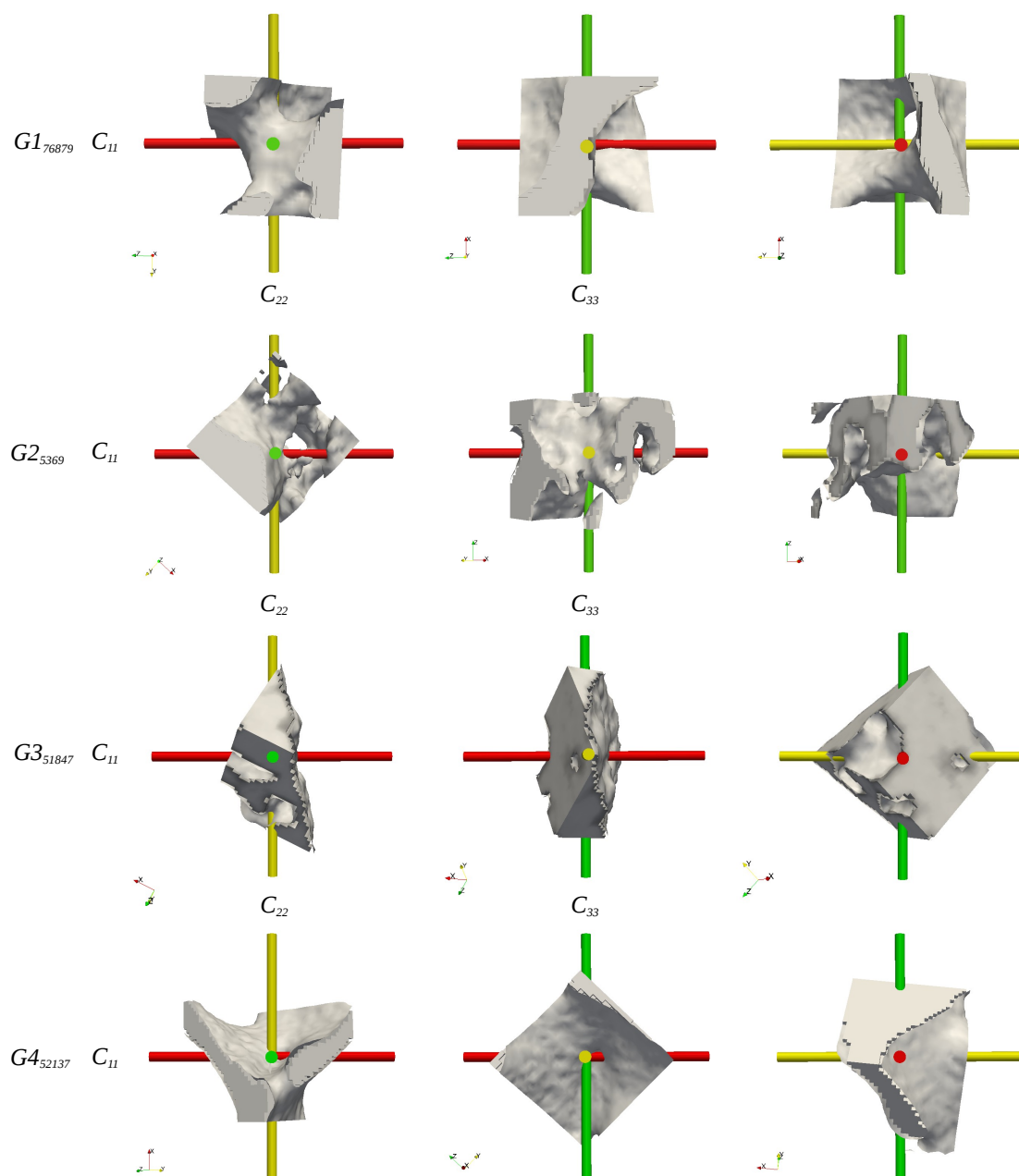


Abb. 6.29: Repräsentative MVEs der Gruppen  $G1$  bis  $G4$  (von oben nach unten). Die dargestellten Achsen sind die Achsen des Materialkoordinatensystems. Die farbliche Zuordnung in der aufsteigender Reihenfolge der Elastizität ist: Rot,  $C_{11}$ -Richtung, Gelb,  $C_{22}$ -Richtung und Grün,  $C_{33}$ -Richtung. Dargestellt sind jeweils Projektionen in Ebenen parallel zur (Links)  $C_{11}$ - $C_{22}$ -Ebene, (Mitte)  $C_{11}$ - $C_{33}$ -Ebene und (Rechts)  $C_{22}$ - $C_{33}$ -Ebene.

enschaften dennoch vergleichbar sind. Die Vergleichbarkeit zeigt sich auch an den Werten der effektiven Steifigkeit, die bei den vier MVEs im Bereich von 0,401 und 0,463 liegen.

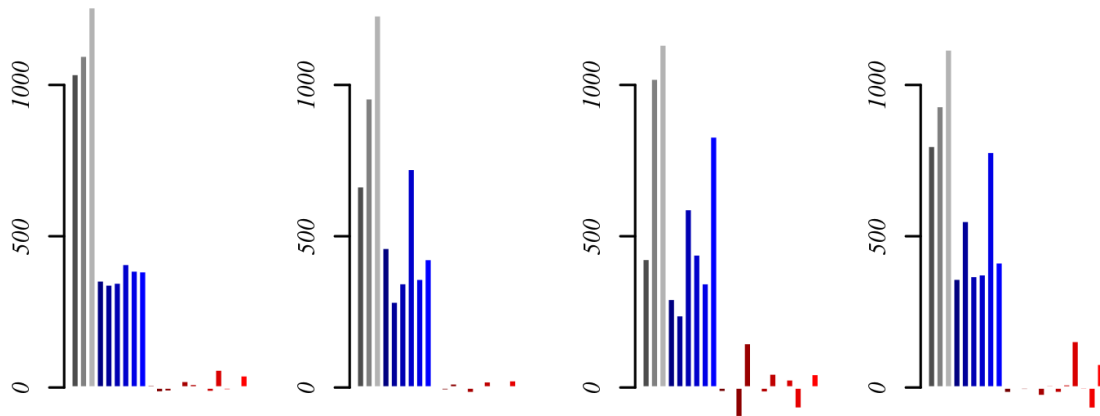


Abb. 6.30: Komponenten der nach dem orthotropen Kriterium optimierten effektiven Steifigkeitsmatrizen der in Abb. 6.29 dargestellten repräsentativen MVEs.

Im Falle des in der ersten Zeile dargestellten MVEs der Gruppe  $G1$  ist zu erkennen, dass das MVE in allen drei Ansichten, einen ähnlichen, annähernd homogenen Querschnitt aufweist, womit sich die drei annähernd gleichen Beträge der Schubmoduli erklären lassen. Wie die tatsächliche Mechanik der Querdehnung bei diesem MVE wirkt, ist anhand der Abbildung nur schwer zu sehen. In allen drei Projektionsebenen sind jedoch gewisse Parallelen in der Struktur, wie der effektive Querschnitt bei Normaldehnung, zu erkennen, auf Basis derer sich die Ähnlichkeit der drei Querdehnungskomponenten erklären lässt.

Die in den Zeilen zwei, drei und vier dargestellten Ansichten der den Gruppen  $G2$  bis  $G4$  entstammenden MVEs lassen im Gegensatz zu den soeben beschriebenen Verhältnissen, insbesondere bei den Schubkomponenten jeweils eine klare Vorzugsrichtung erkennen. So ist bei jedem der drei MVEs in einer Projektionsebene die Querschnittsfläche deutlich vergrößert, was auf einen, im Verhältnis zu den anderen Ebenen vergrößerten Schubmodul hinweist. Bei der Gruppe  $G2$  ist dies in der 12-Ebene, bei der Gruppe  $G3$  in der 23-Ebene und bei der Gruppe  $G4$  in der 13-Ebene der Fall. Im Bezug auf die erhöhten Normaldehnungskopplungskomponenten kann anhand von Abb. 6.29 gesagt werden, dass die Mechanik der Querdehnung insbesondere bei den, der Gruppe  $G3$  und  $G4$  entstammenden, MVEs durch den Vergleich der effektiven Querschnitte der Normaldehnung direkt sichtbar ist. Die Vorzugsrichtungen stimmen mit den Richtungen der erhöhten Schubkomponenten überein.

Bezieht man die soeben durchgeführten Analysen auf Abb. 6.28 so stellt man fest, dass die zu erkennenden Vorzugsrichtungen der Schubsteifigkeit und der Querdeh-

nung mit den erhöhten Beträgen der Ladungen der ersten Eigenvektoren der Gruppen korrespondieren. Dies bedeutet, dass die Gruppierung der Daten, sowie die getrennte statistische Modellierung der Gruppen, aus mechanischen Gesichtspunkten nun durchaus sinnvoll erscheint. Der Einfluss der Gruppierung auf die Ergebnisse kontinuumsmechanischer Simulationen kann jedoch noch immer nicht abgeschätzt werden und bleibt, wie bereits erwähnt, dieser Arbeit folgenden detaillierten Untersuchungen vorbehalten.

Neben dem Einfluss der Gruppierung auf die detaillierten Ladungen der Komponenten der orthotropen Gruppe ist in Abb. 6.29 auch klar die Wirkung der Gruppierung auf die Ladungen der Komponenten der anisotropen Gruppe erkennbar. Während bei den ungruppierten Daten keinerlei Ladung auf die Komponenten der anisotropen Gruppe erfolgt, zeigt sich diese bei den Gruppen  $G3$  und  $G4$  bereits beim dritten Eigenvektor und bei den Gruppen  $G1$  und  $G2$  beim vierten Eigenvektor. Dies bedeutet, dass sich der anisotrope Charakter des Knochenmaterials durch die Gruppierung besser, bzw. mit weniger Parametern modellieren ließe, falls die Gruppen auf Basis von  $k$ -CT-Daten getrennt werden können.

Neben der Detaillierung des lokalen mechanischen Verhaltens, lässt es die Korrespondenz zwischen der Hauptkomponentenanalyse der Kovarianzmatrix der Originaldaten der einzelnen Gruppen und der Gestalt, der in ihnen enthaltenen MVEs, des weiteren möglich erscheinen, dass sich aus diesem Sachverhalt ein histomorphologisches Kriterium zur Erkennung gewisser Unregelmäßigkeiten im Wachstum von spongiösem Knochen entwickeln lässt. Inwiefern diese Vermutung zutreffend ist, muss durch dieser Arbeit folgende Analysen einer statistisch relevanten Anzahl von Knochenproben genauer bestimmter Patientengruppen geklärt werden.

Mit den in Tab. 6.9 angegebenen Daten konnte bereits gezeigt werden, dass der anisotrope Charakter des spongiösen Knochenmaterials bei Anwendung der Hauptkomponentenanalyse auf Basis der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten schon ab der zweiten Hauptkomponente eine wesentlich stärkere Gewichtung erfährt. Betrachtet man im Hinblick darauf, den in Abb. 6.31 dargestellten Einfluss der Gruppierung auf diesen Sachverhalt, so stellt man fest, dass die stärkere Gewichtung der Komponenten der anisotropen Gruppe ab dem zweiten Eigenvektor durch die Gruppierung der Daten bestehen bleibt bzw. noch weiter verstärkt wird. Wie in Abb. 6.31 zu erkennen ist, korrespondieren die Ladungen des zweiten bis vierten Eigenvektors der Gruppe  $G2$  bis auf das Vorzeichen des zweiten Eigenvektors mit den Ladungen der Eigenvektoren des ungruppierten Datensatzes. Die Eigenvektoren der anderen Gruppen dagegen laden jeweils auf völlig andere Komponenten der anisotropen Gruppe der effektiven Steifigkeit. Daraus ergibt sich, wie auch im bereits



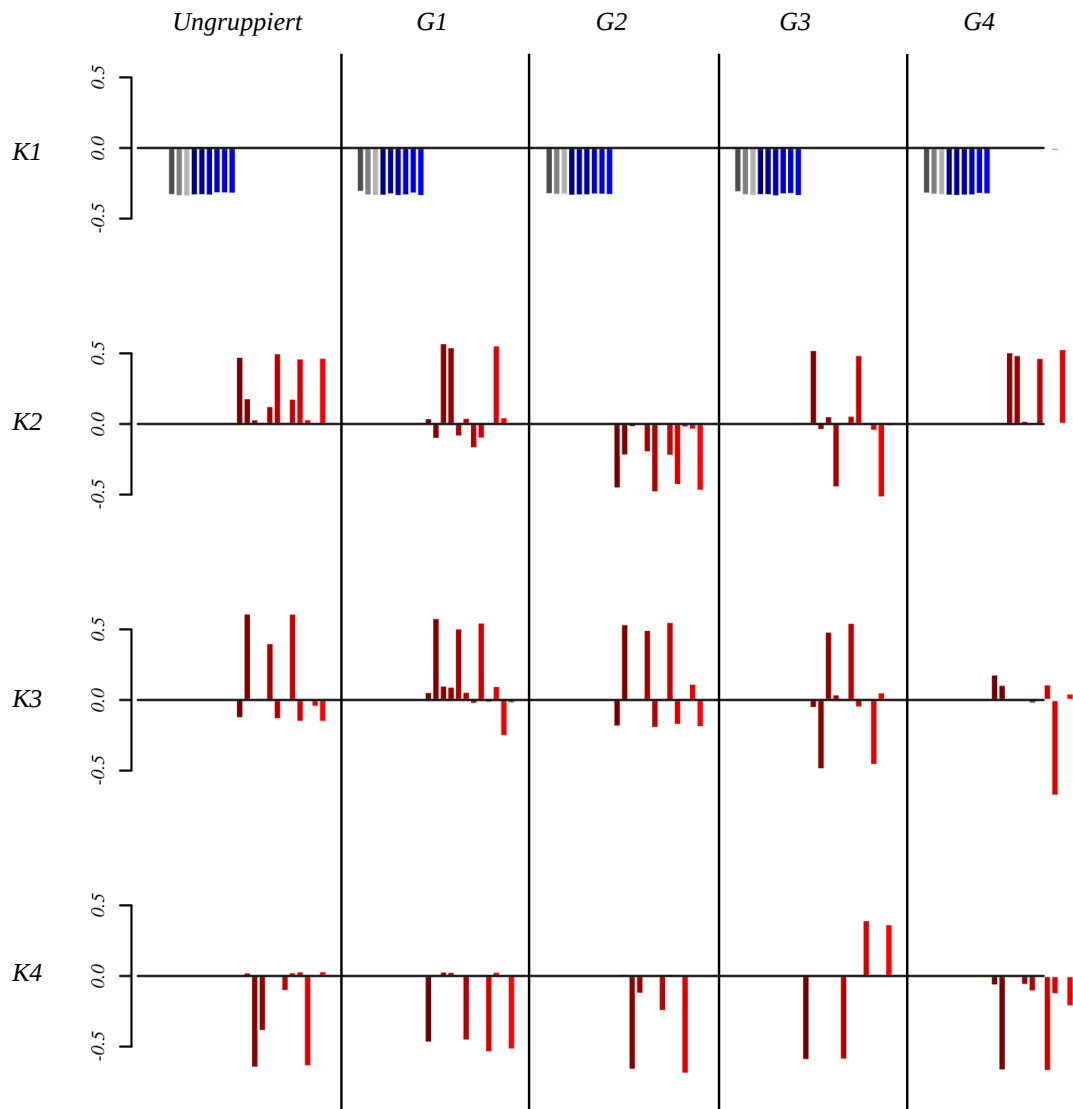


Abb. 6.31: Änderungen der Ladungen der ersten vier Eigenvektoren durch Gruppierung bei einer MVE Kantenlänge von  $0,6\text{ mm}$  und Betrachtung der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten.

dargestellten Fall der Hauptkomponentenanalyse der Kovarianzmatrix der Originaldaten, eine wesentlich stärkere Differenzierung des lokalen Materialverhaltens unter Parameterreduktion. Inwiefern sich diese stärkere Differenzierung auf die Ergebnisse kontinuumsmechanischer Simulationen auswirkt, kann auch in diesem Fall nicht auf einfache Art und Weise bestimmt werden. Eine Abschätzung der Auswirkung der Differenzierung mit Hilfe numerischer Untersuchungen bleibt dieser Arbeit folgenden Untersuchungen vorbehalten.

Es gilt an dieser Stelle noch festzustellen, dass es im Falle der soeben dargestellten

Ergebnisse, im Gegensatz zu den vorangegangenen Betrachtungen der Eigenvektoren der Kovarianzmatrix der Originaldaten, nun auch nicht mehr möglich ist, auf visuellem Wege einen einfachen Bezug zwischen der Gestalt repräsentativer MVEs der einzelnen Gruppen und den in Abb. 6.29 angegebenen Ladungen der Eigenvektoren herzustellen. Aufgrund der Unsymmetrien der in Abb. 6.29 dargestellten MVEs ist es jedoch prinzipiell einzusehen, dass anisotrope Kopplungseffekte zwischen Normal- und Schubdehnungen auftreten. In Bezug auf diese Fragestellung sind dieser Arbeit folgende Untersuchungen an analytischen Geometrien geplant, die Aufschluss darüber geben sollen, welche Eigenschaften der Gestalt eines MVEs welchen Einfluss auf die Komponenten der Anisotropen Gruppe haben.

## 6.3. Kontinuumsmechanische Simulationen

In diesem Abschnitt wird die Korrelation zwischen kontinuumsmechanischen Berechnungen mit den ermittelten Materialdaten bzw. den den ermittelten effektiven Steifigkeiten und direkten mikromechanischen Simulationen der entsprechenden Struktur analysiert. Die Analyse erfolgt anhand des MVE Nr. 98 der Zerlegung des Datensatzes Femurkopf mit einer Kantenlänge von  $4,8\text{ mm}$ . Die durchgeführten Betrachtungen besitzen in dem hier vorgestellten Umfang zwar nur prinzipiellen Charakter, jedoch zeigen sie bereits in diesem Stadium Erkenntnisse, die weitere detaillierte Untersuchungen sinnvoll erscheinen lassen.

### 6.3.1. Korrelation zwischen mikromechanischen und kontinuumsmechanischen Berechnungen

Ausgangspunkt für die in diesem Abschnitt vorgestellten Analysen ist die mikromechanische Simulation eines MVE mit  $4,8\text{ mm}$  Kantenlänge. Das betrachtete MVE besitzt die Nummer 98 in der linearen Nummerierungsreihenfolge der Gesamtzerlegung des Datensatzes Femurkopf mit  $4,8\text{ mm}$  und stellt damit das Achtel der zentralen Gruppe dar, welches dem Ursprung des globalen Koordinatensystems am nächsten liegt. Zur Definition der zentralen Gruppe siehe Abschnitt 4.3.1.3. Das MVE enthält entweder  $2^3 = 8$  Makroelemente der Kantenlänge  $2,4\text{ mm}$ ,  $4^3 = 64$  Makroelemente der Kantenlänge  $1,2\text{ mm}$  oder  $8^3 = 512$  Makroelemente der Kantenlänge  $0,6\text{ mm}$ . Die Mikrostruktur sowie die Diskretisierungen mit den aus ihnen resultierenden Verteilungen der relativen Dichte sind in Abb. 6.32 dargestellt. Die auf den Oberflächen der mit Makroelementen diskretisierten MVEs zu erkennenden Konturen entsprechen denjenigen der Mikrostruktur und zeigen, dass die Verteilung der relativen Dichte der Makroelemente der Mikrostruktur folgt. Dies wird auch anhand der, in Abb.

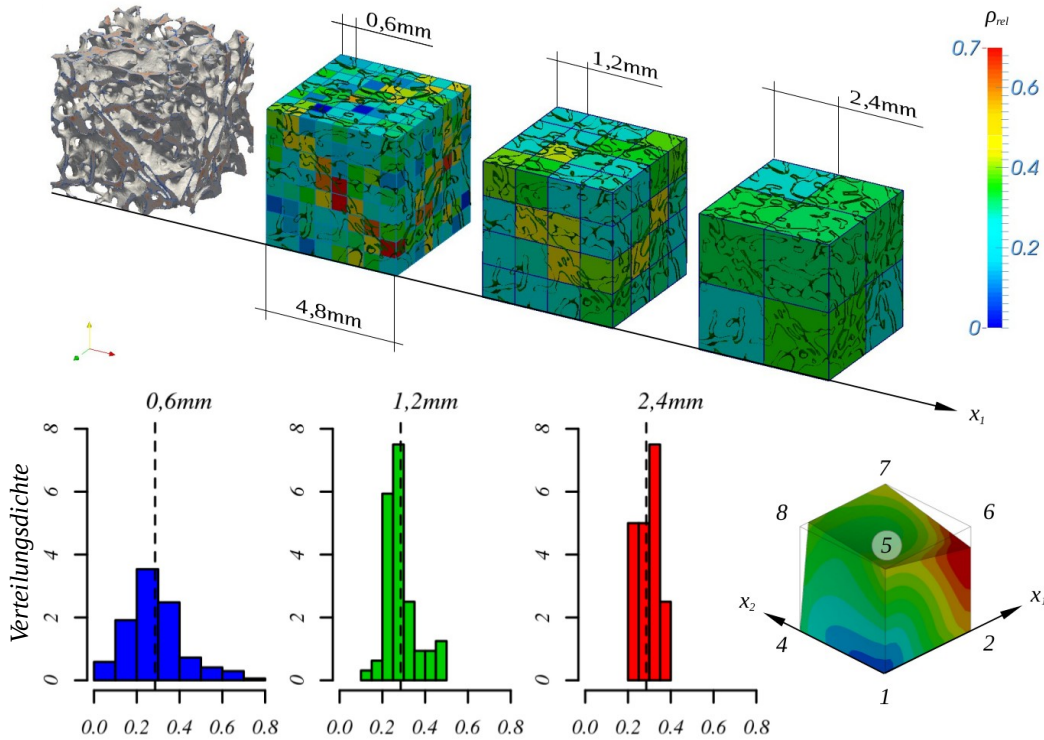


Abb. 6.32: Ganz links oben: Mikromechanisches Simulationsmodell des MVE Nr. 98 in der Zerlegung mit  $4,8\text{ mm}$  Kantenlänge. Mitte links bis rechts Mitte: Makromechanische Simulationsmodelle mit  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$  Elementkantenlänge. Rechts unten: Verschiebungsfeld bei Applikation des Lastfall 18 zur Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit. Balkendiagramme unten: Histogramme der relativen Dichte  $\rho_{rel}$  in den Makromodellen.

6.32 unten dargestellten, Histogramme der relativen Dichte der Makroelemente verdeutlicht. Die Maxima der Histogramme liegen bei allen drei Diskretisierungen in der Nähe der, durch senkrechte gestrichelte Linien markierten, relativen Dichte von  $\rho_{rel} = 0,286$  des direkt diskretisierten MVEs.

Der ebenfalls in der Abbildung dargestellte, simulierte Lastfall entsteht durch Randbedingungen, die dem in Abschnitt 3.5 vorgestellten Lastfall 18 zur Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit entsprechen. In diesem Fall wird der achte Knoten des linearen Makroelementes um  $1\varepsilon = -1 \cdot 10^{-6}$  in  $x_1$ -Richtung und der sechste Knoten des Makroelementes um  $2\varepsilon = -2 \cdot 10^{-6}$  in negative  $x_3$ -Richtung ausgelenkt. Das FE-Modell der Mikrostruktur weist die in Tab. 6.10 angegebenen Parameter auf. Die Modellerstellung erfolgte nach der in Abschnitt 5.3.1 beschriebenen Methode. Die Lösung des Problems erfolgte mit Hilfe von FMPS wobei PETSc als Gleichungssystemlöser zum Einsatz kam. In Zeile drei von Tab. 6.10 ist die Gesamtanzahl der im

MVE Kantenlänge [mm]	4,8
$\rho_{rel}$ [-]	0,286
Knoten [#]	20.285.733
Elemente [#]	4.355.690
Freiheitsgrade [#]	59.867.643

Tab. 6.10: Parameter des mikromechanischen FE-Modells

Modell vorhandenen Gitterknoten angegeben. Die in Zeile fünf angegebene Anzahl von Freiheitsgraden ergibt sich aus der Gesamtanzahl der Gitterknoten multipliziert mit drei Verschiebungsfreiheitsgraden pro Knoten und reduziert um die unterdrückten Freiheitsgrade der Knoten an den MVE Außenflächen.

Durch den aufgeprägten Lastfall wird im mikromechanischen Modell die, in Abb. 6.33 links dargestellte, Verteilung der ersten Hauptspannung induziert. Es gilt anzumerken, dass aufgrund, des im Wertebereich der ersten Hauptspannung besseren Kontrastes eine, im Vergleich zur üblichen Darstellungsweise von Spannungsfeldern in der Strukturmechanik, verschobene Farbskala Verwendung findet. Hohe negative Spannungen werden hierbei in bläulichen Farbtönen dargestellt. Spannungen um den Wert Null werden dagegen nicht wie üblich in grünlichen sondern in rötlichen Farbtönen dargestellt.

Neben der dreidimensional dargestellten Spannungsverteilung der ersten Hauptspannung ergeben sich im Modell auch die in Abb. 6.33 rechts in Form von Kerndichtediagrammen dargestellten statistischen Verteilungen der drei Hauptspannungen. Hier und im folgenden werden die Hauptspannungen bzw. die aus ihnen gebildete

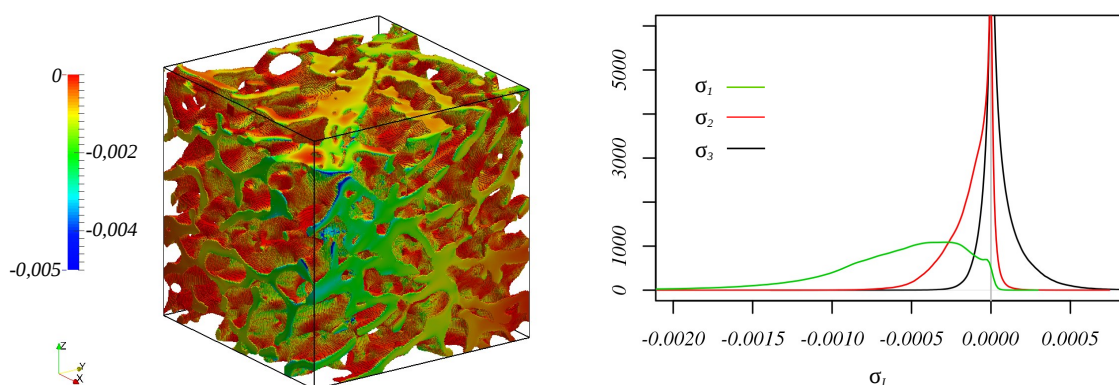


Abb. 6.33: Links: Dreidimensionale Verteilung der ersten Hauptspannung im mikromechanischen Modell. Rechts: Kerndichtediagramme der drei Hauptspannungen.

erste Invariante des Cauchy Spannungstensors ausgewertet, da sich der Spannungszustand objektiver ohne die stark von der Wahl des Koordinatensystems beeinflussten Schubspannungen beurteilen und vergleichen lässt. Im Falle der ersten Invarianten ist es sogar möglich, den Einfluss des verwendeten Koordinatensystems vollständig aus den Betrachtungen auszuschließen.

Anhand der dreidimensionalen Darstellung in Abb. 6.33 ist zu erkennen, dass durch den applizierten Lastfall hauptsächlich Druckspannungen im Modell hervorgerufen werden, die von außen nach innen inhomogen in die Struktur eingeleitet und dort verteilt werden. Dies wird auch durch die Kerndichtediagramme der Hauptspannungen bestätigt. Wie in Abb. 6.33 rechts zu erkennen ist, liegen die Verteilungen der ersten und zweiten Hauptspannungen fast ausschließlich im negativen Druckbereich und die dritte, d.h. die größte Hauptspannung, weist im Vergleich zum negativen Wertebereich der beiden anderen Hauptspannungen einen wesentlich kleineren positiven Wertebereich auf. Diese Ergebnisse sind plausibel, da der Lastfall Nr. 18 aufgrund der Verschiebung zweier Knoten in Richtung des MVE Inneren durch eine Volumenverkleinerung mit einhergehender Druckbelastung gekennzeichnet ist. Die statistischen

		$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\sigma_3$	$\mathfrak{I}_1$
$\min(x)$	$[10^{-4}]$	-64,454	-20,834	-13,762	-92,468
$\bar{x}$	$[10^{-4}]$	-5,938	-1,224	0,590	-6,572
$\max(x)$	$[10^{-4}]$	2,447	7,298	26,443	32,271

Tab. 6.11: Statistische Kennwerte der Hauptspannungen und der ersten Invariante des Cauchy Spannungstensors im mikromechanischen Modell

Kennwerte Minimum, arithmetischer Mittelwert und Maximum der Hauptspannungen sowie der ersten Invariante des Cauchy Spannungstensors sind in Tab. 6.11 angegeben.

### 6.3.2. Makromechanische Auswertung des mikromechanischen Modells

Um die Ergebnisse des mikromechanischen Modells mit denjenigen der kontinuumsmechanischen Modelle vergleichbar zu machen, wurde das mikromechanische Modell den Gebietszerlegungen der kontinuumsmechanischen Modelle unterworfen. In den so entstehenden Teilgebieten des mikromechanischen Modells wurden anschließend ebenfalls das Minimum, das Maximum und der arithmetische Mittelwerte des Spannungstensors ermittelt. Für die Zerlegungen mit 2,4 mm, 1,2 mm und 0,6 mm Kan-

tenlänge ergaben sich die in Tab. 6.12 angegebenen Werte.

Im Vergleich mit Tab. 6.11 ist zu erkennen, dass sich mit besserer Auflösung der Mikrostrukturen, d.h. abnehmender Zerlegungsgröße, die arithmetischen Mittelwerte, die Minima und die Maxima der  $\sigma_i$  an die Werte des Mikromodells annähern. Gleiches gilt für die Minima und die Maxima der ersten Invariante des Spannungstensors der in Tab. 6.12 ausgewerteten Zerlegungsstufen. Auffallend ist dagegen die

		$\sigma_1$	$\sigma_2$	$\sigma_3$	$\mathfrak{J}_1$
$\min_{2,4}(x)$	$[10^{-4}]$	-7,367	-3,208	-1,014	-10,608
$\min_{1,2}(x)$	$[10^{-4}]$	-10,489	-3,253	-1,109	-13,408
$\min_{0,6}(x)$	$[10^{-4}]$	-19,035	-6,541	-2,139	-24,669
$\bar{x}_{2,4}$	$[10^{-4}]$	-4,086	-1,656	-0,491	-6,233
$\bar{x}_{1,2}$	$[10^{-4}]$	-4,302	-1,466	-0,309	-6,077
$\bar{x}_{0,6}$	$[10^{-4}]$	-4,559	-1,346	-0,096	-6,001
$\max_{2,4}(x)$	$[10^{-4}]$	-1,497	-0,651	-0,035	-2,709
$\max_{1,2}(x)$	$[10^{-4}]$	-0,931	-0,419	1,066	-1,155
$\max_{0,6}(x)$	$[10^{-4}]$	-0,406	0,289	2,683	1,701

Tab. 6.12: Statistische Kennwerte der Hauptspannungen und der ersten Invariante des Cauchy Spannungstensors in den Zerlegungen des mikromechanischen Modells

Entwicklung des arithmetischen Mittelwertes der ersten Invariante. Dieser entfernt sich auf allen drei ausgewerteten Zerlegungsstufen mit abnehmender Zerlegungsgröße immer weiter vom Wert des mikromechanischen Modells. Aufgrund dieser Auffälligkeit wurden neben den Zerlegungsgrößen  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$  auch noch die statistischen Kennwerte der in Abb. 6.34 aufgetragenen Zwischengrößen der Gebietszerlegung ausgewertet. In der Abbildung sind links die arithmetischen Mittelwerte der drei Hauptspannungen sowie der ersten Invariante des Spannungstensors aufgetragen. Im Diagramm rechts oben sind die relativen Werte der, mit Hilfe der Gebietszerlegungen berechneten, arithmetischen Mittelwerte der Hauptspannungen gegenüber dem arithmetischen Mittelwert der jeweiligen Hauptspannung im mikromechanischen Modell aufgetragen. Im Diagramm rechts unten erfolgte die gleiche Auftragung für die erste Invariante. Hierbei gilt es zu beachten, dass die beiden Diagramme rechts zwar die gleiche Auftragung für Hauptspannungen und Invariante zeigen, jedoch die y-Achsen der beiden Diagramme unterschiedlich skaliert sind.

Wie in Abb. 6.34 links und rechts oben zu erkennen ist, zeigen nur die arithmetischen Mittelwerte der ersten und dritten Hauptspannung monotonen Verhalten bis zur mikromechanische Lösung. Das arithmetische Mittel der zweiten Hauptspannung und

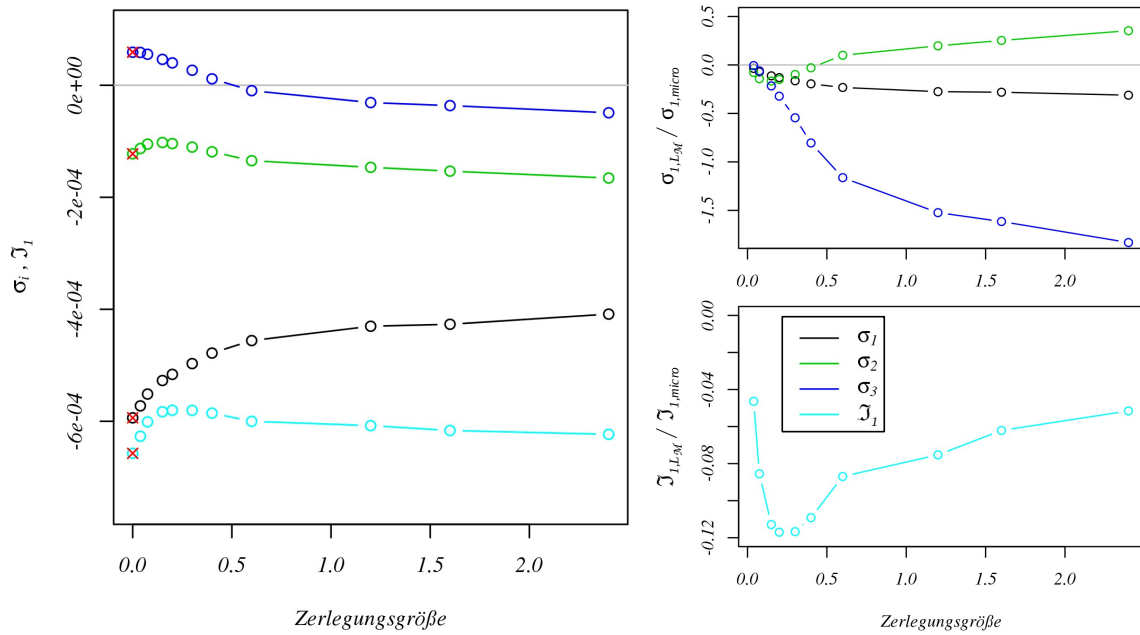


Abb. 6.34: Konvergenzverhalten des arithmetischen Mittelwertes der Hauptspannungen und der ersten Invariante bei Verkleinerung der Kantenlänge der Elemente der Gebietszerlegung. **Links:** Entwicklung der absoluten Werte. **Rechts oben:** Entwicklung der relativen Werte der Hauptspannungen in den makromechanischen Gebietszerlegungen gegenüber den entsprechenden arithmetischen Mittelwerten der Hauptspannungen im mikromechanischen Modell. **Rechts unten:** Entwicklung der relativen Werte der ersten Invariante in den makromechanischen Gebietszerlegungen gegenüber den entsprechenden arithmetischen Mittelwerten der Hauptspannungen im mikromechanischen Modell.

insbesondere das der ersten Invariante verhalten sich nicht wie erwartet monoton, sondern zeigen wie dargestellt ein nicht monotonen Konvergenzverhalten gegen das mikromechanische Ergebnis.

Der Anstieg des arithmetischen Mittelwertes der ersten Invariante, der wie bei der ersten und dritten Hauptspannung ab einer Zerlegungsgröße von  $0,6 \text{ mm}$  von linearem in nichtlineares Verhalten übergeht, zeigt bei einer Zerlegungsgröße von  $0,15 \text{ mm}$  einen Extremwert und wechselt erst danach seine Entwicklungsrichtung hin zum erwarteten mikromechanischen Ergebnis. Bei näherer Betrachtung von Abb. 6.34 links ist zu erkennen, dass dieses Verhalten aus der Summation der stark unterschiedlich großen arithmetischen Mittelwerte der Hauptspannungen resultiert, die ihrerseits aus der durch Druck geprägten Lastsituation entstehen. Die Frage, die sich hieraus ergibt, ist woraus der Übergang zwischen linearer und nicht linearer Entwicklung der Hauptspannungen bei einer Zerlegungsgröße von  $0,6 \text{ mm}$  folgt.

In Abschnitt 6.1.2 wurde bereits erläutert, dass unterhalb einer Elementkantenlänge von  $0,6\text{ mm}$  in den Gebietszerlegungen Elemente auftauchen, die keinen oder nur einen sehr geringen Strukturanteil aufweisen. Dieser Effekt wird durch das Unterschreiten der Porengröße der Spongiosa durch die Elementgröße der Gebietszerlegung hervorgerufen und verstärkt sich weiter, je kleiner man die Elementkantenlänge der Gebietszerlegung wählt. Die Entwicklung der Anzahl von Elementen im betrachteten

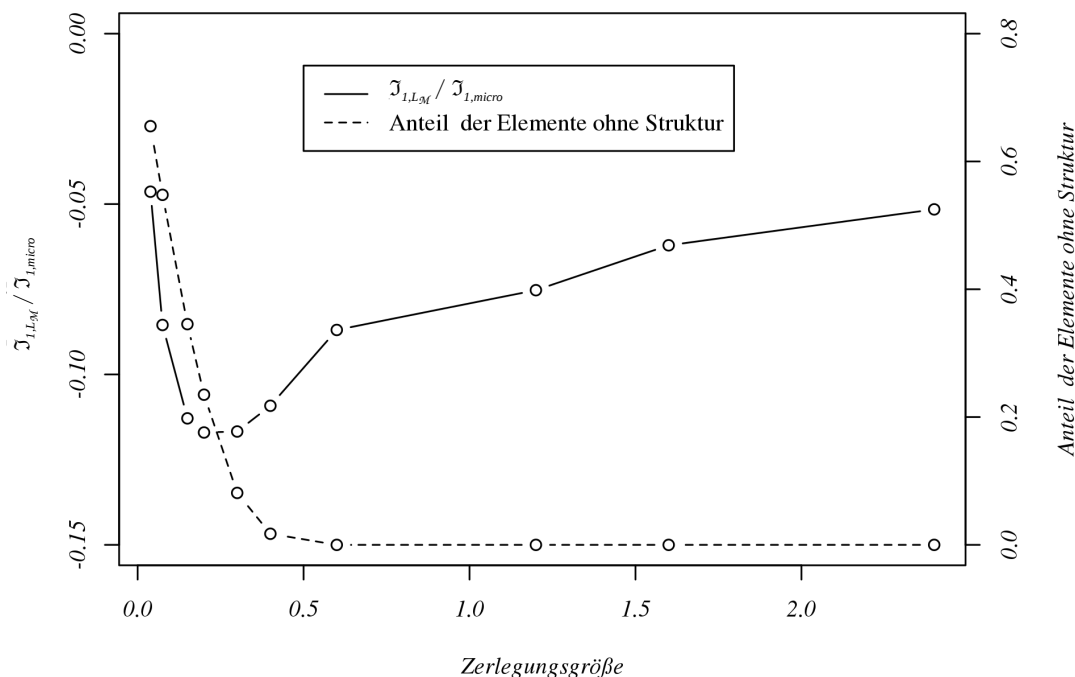


Abb. 6.35: Entwicklung der Anzahl von Elementen der Gebietszerlegung im betrachteten Volumen, die keine Struktur enthalten

Volumen, die keine Struktur enthalten, ist in Abb. 6.35 dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass der Bereich der linearen Entwicklung der ersten Invariante und mit ihr der Hauptspannungen, mit dem Bereich der Gebietszerlegungsgrößen zusammenfällt, in dem alle Elemente der Gebietszerlegung Struktur beinhalten. Mit der Zerlegungsgröße  $0,4\text{ mm}$ , bei der zum ersten Mal Elemente ohne Struktur auftreten, beginnt auch die nichtlineare Entwicklung des arithmetischen Mittelwertes der ersten Invariante bzw. der Hauptspannungen.

Die Schlussfolgerung aus dieser Analyse ist, dass der Bereich um  $0,4\text{ mm}$  Elementkantenlänge der Gebietszerlegung den Bereich markiert, in dem ein Wechsel in der Strukturbetrachtung vollzogen werden muss. Dies bedeutet, dass durch das Unterschreiten der Porengröße die bisher angestellte Betrachtungsweise des spongiösen Knochens als Kontinuum bestehend aus MVEs, die ihrerseits aus Struktur und Einschlüssen einer zweiten Phase bestehen, verändert werden muss. Unterhalb einer



Elementkantenlänge von  $0,4\text{ mm}$  kann das Spongiöse Knochenmaterial, bestehend aus trabekulärer Struktur und Poren bzw. Einschlüssen, nicht mehr als zweiphasiges Kontinuum betrachtet werden, sondern es muss die trabekuläre Struktur als einphasiges Kontinuum betrachtet werden, dass in Volumenelemente zerlegt wird. Dies bedeutet, die Phase der Einschlüsse wird in diesem Moment aus den Betrachtungen ausgeschlossen.

Neben dem soeben erläuterten Ergebnis liefert die durchgeführte Analyse die Erkenntnis, dass die Untergrenze der linearen Übertragbarkeit zwischen makroskopischen und mikroskopischen Spannungsgrößen von der Beschaffenheit des betrachteten Knochenmaterials abhängt. Dies bedeutet, dass z.B. bei der Betrachtung von osteoporotischem Knochenmaterial mit geschwächter Knochenstruktur und vergrößerten Poren die gezeigte Nichtlinearität in der Übertragungsfunktion bei wesentlich größeren Elementkantenlängen der Gebietszerlegung zu erwarten ist. Bei der Anwendung von kontinuumsmechanischen Wachstumsmodellen, welche auf mittleren lokalen Spannungsgrößen aufsetzen, müssten bei der Betrachtung von osteoporotischem Knochenmaterial sehr wahrscheinlich bereits bei größeren Auflösungen nicht-lineare Effekte bei der Übertragung von makroskopischen mittleren Spannungs- und Dehnungswerten auf die entsprechenden mikromechanischen Größen berücksichtigt werden.

Es muss somit wiederum die Schlussfolgerung gezogen werden, dass die hier durchgeführten Analysen im Anschluss an diese Arbeit an weiteren Knochenproben vorgenommen werden müssen, um statistische Aussagen über verschiedene Patientengruppen und Krankheitsbilder zu erhalten. Eine weitere Analyse, die ebenfalls im Anschluss dieser Arbeit durchzuführen ist, muss zeigen, in wie weit die lineare Übertragbarkeit der makromechanischen Spannungswerte auf die entsprechenden arithmetischen Mittelwerte des mikromechanischen Modells unabhängig von dem auf das mikromechanische Modell applizierten Lastfall ist.

### 6.3.3. Korrelationen der statistischen Spannungsverteilungen

Nachdem die Übertragbarkeit zwischen den mikroskopischen Spannungswerten und deren arithmetischen Mittelwerten bei makroskopischer Auswertung überprüft wurde, erfolgt nun der Vergleich zwischen den Spannungswerten der in Abb. 6.32 dargestellten, makroskopischen Modelle und den entsprechenden makroskopischen Auswertungen des mikromechanischen Modells. In Abb. 6.36 ist zunächst der direkte Vergleich der arithmetischen Mittelwerte der Spannungsverteilungen der ersten Invariante in den drei betrachteten Zerlegungsgrößen  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$

aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass auch die Ergebnisse der, mit Hilfe der berech-

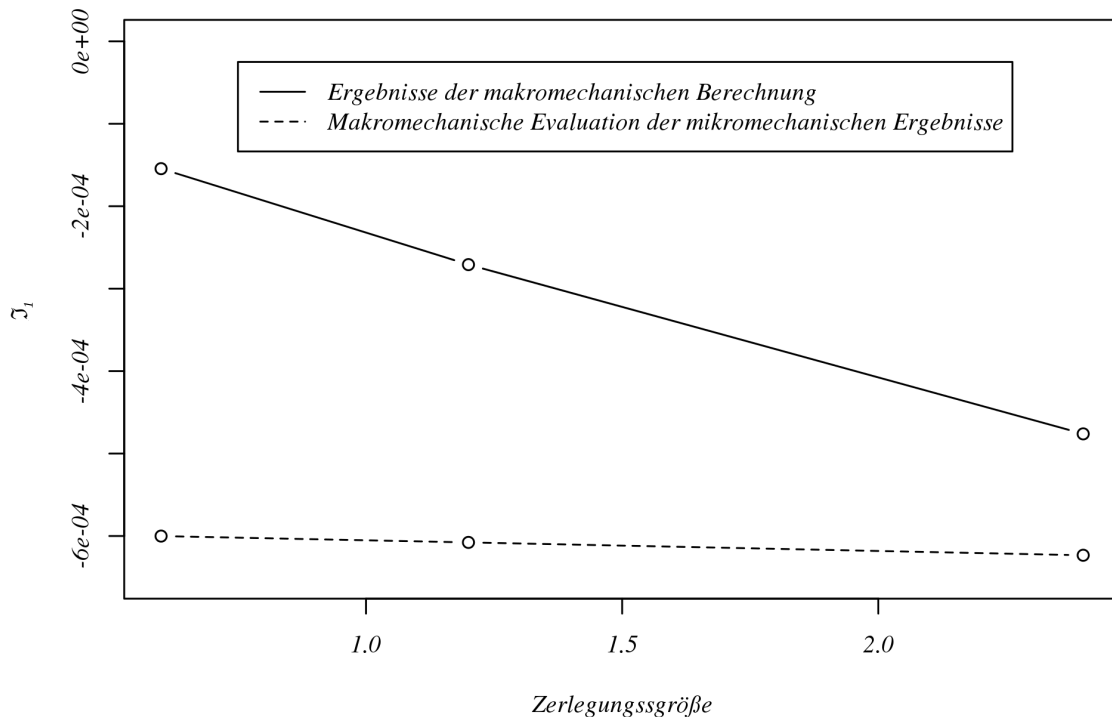


Abb. 6.36: Vergleich der arithmetischen Mittelwerte der ersten Invariante zwischen den makromechanischen Modellen und der makromechanischen Auswertungen des mikromechanischen Modells für die Zerlegungsgrößen  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$ .

neten anisotropen Materialdaten durchgeführten, makromechanischen Simulationen lineares Verhalten zeigen. Wie bereits bei den makroskopischen Auswertungen des mikromechanischen Modells aufgefallen war, zeigt die erste Invariante auch bei den makromechanischen Modellen mit besserer Approximation, d.h. abnehmender Zerlegungsgröße arithmetische Mittelwerte, die sich von der mikromechanischen Lösung entfernen. Das Verhalten ist jedoch wesentlich stärker ausgeprägt als bei der makroskopischen Auswertung des mikromechanischen Modells.

Zu überprüfen, ob auch die Ergebnisse der makromechanischen Modelle ab einer Zerlegungsgröße von  $0,4\text{ mm}$  nichtlineares Konvergenzverhalten gegen die mikromechanische Lösung entwickeln, bleibt den dieser Arbeit folgenden Untersuchungen vorbehalten. Es ist jedoch zu vermuten, dass der Übergang in der Volumenbetrachtung durch die steigende Anzahl von Elementen ohne Strukturinhalt auch bei den makroskopischen Berechnungen den in Abb. 6.35, für die makroskopische Auswertung des mikromechanischen Modells, dargestellten Effekt hervorrufen wird.

Nach dem arithmetischen Mittelwert als globalen Parameter des Gesamtmodells, der

wie soeben dargestellt, eine Aussage über das globale Konvergenzverhalten der Lösungen liefert, werden nun die statistischen Verteilungen der Spannungswerte, des mikromechanischen Modells, der makromechanischen Auswertung des mikromechanischen Modells sowie den mit Hilfe des makromechanischen Modells ermittelten Werten gegenüber gestellt. In Abb. 6.37 sind die initial ermittelten Verteilungen der ersten Invariante des Spannungstensors in Form von Kerndichteschätzungen aufgetragen. Zum Begriff der Kerndichteschätzung siehe [75] und die dort angegebenen Quellen. Wie zu erkennen ist, bildet die makromechanische Auswertung des mikro-

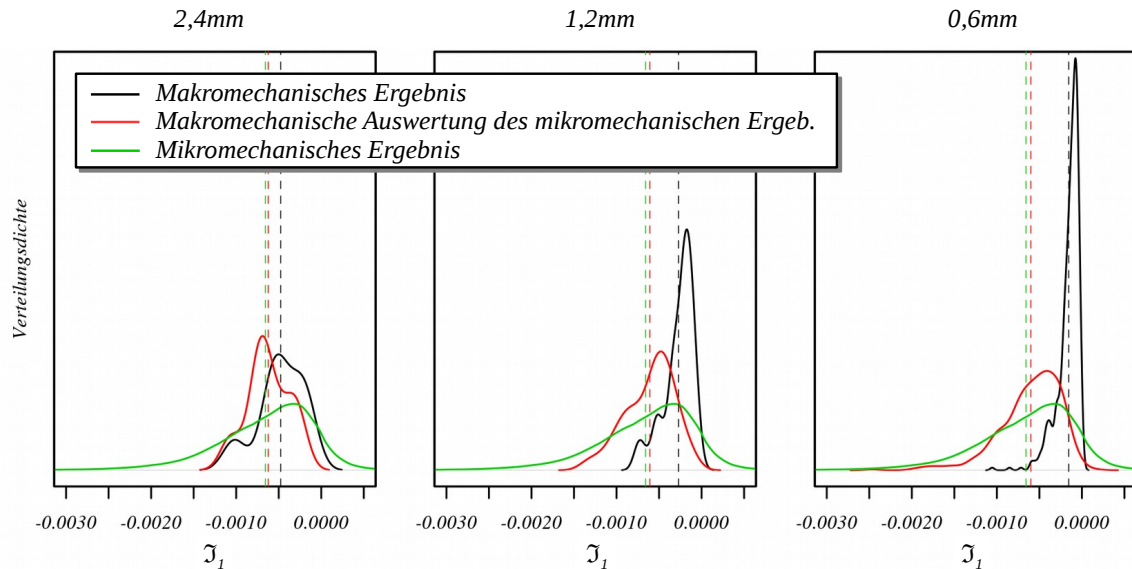


Abb. 6.37: Vergleich der statistischen Verteilungen der ersten Invariante des Spannungstensors zwischen mikromechanischem Modell, makromechanischer Auswertung des mikromechanischen Modells und makromechanischem Modell für die Zerlegungsgrößen  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$ .

mechanischen Modells die mikromechanische Verteilung um so besser ab, je geringer die Zerlegungsgröße gewählt wird. Der durch die rot gestrichelten Linien markierte arithmetische Mittelwert bleibt auf allen drei Zerlegungsgrößen, wie bereits durch die vorangegangenen Betrachtungen gezeigt, im Vergleich zum Mittelwert des mikromechanischen Modells fast unverändert. Der minimale und maximale Wert der ersten Invarianten verschiebt sich dagegen, bedingt durch die Mittelung der makroskopischen Auswertung, mit zunehmender Zerlegungsgröße mehr und mehr in Richtung des Mittelwertes.

Im Falle des makromechanischen Modells zeigt die erste Invariante auf allen drei Zerlegungsgrößen wesentlich geringere Wertebereiche als im mikromechanischen Modell, wobei die Abweichung mit abnehmender Zerlegungsgröße signifikanter wird.

Betrachtet man in diesem Zusammenhang die in Abb. 6.38 dargestellte Qualitative Gegenüberstellung der Verteilung der ersten Invariante des Spannungstensors innerhalb des mikromechanischen und des makromechanischen Modells mit  $0,6\text{ mm}$  Zerlegungsgröße, so stellt man fest, dass sich diese sehr wohl ähneln. Wie zu erkennen ist, stimmen die Verteilungen in den beiden Modellen zum einen farblich und zum anderen in der Anordnung der durch den Lastfall und die vorhandene Mikrostruktur ausgeprägten Lasttrajektorien überein. Zur Verdeutlichung sind die drei in der dar-

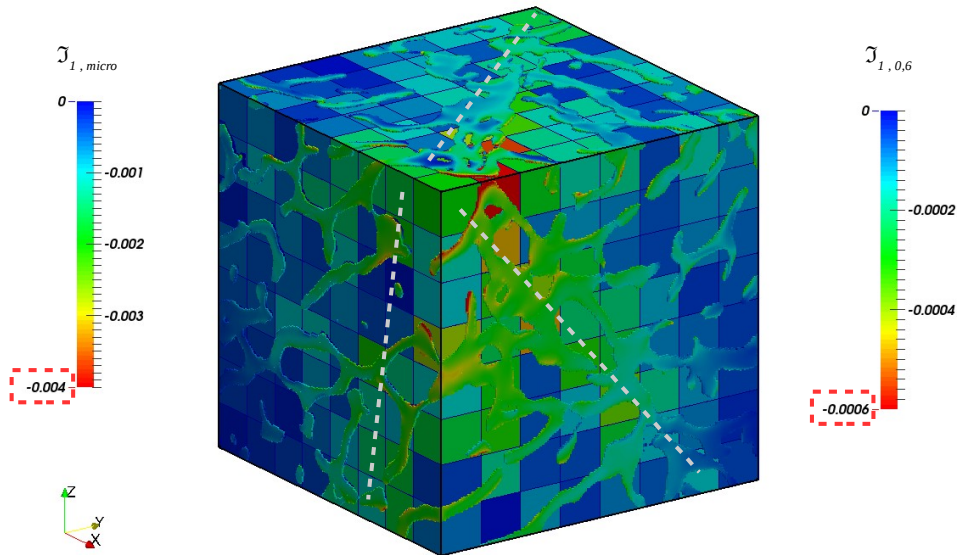


Abb. 6.38: Qualitativer Vergleich der Verteilung der ersten Invariante zwischen mikromechanischem Modell und makromechanischem Modell mit  $0,6\text{ mm}$  Zerlegungsgröße

gestellten Ansicht zu erkennenden Lasttrajektorien durch grau gestrichelte Linien angedeutet.

Wie in Abb. 6.38 durch rot gestrichelte Rahmen um die Minimalwerte der Farbskalen angedeutet, konnte die soeben beschriebene qualitative Übereinstimmung der Spannungsverteilungen in den beiden Modellen nur durch eine entsprechende Skalierung der Farbskala des makromechanischen Modells erzeugt werden. Dies legt den Schluss nahe, dass auch die in Abb. 6.37 dargestellten statistischen Verteilungen durch Skalierung zur Deckung gebracht werden können. Das Ergebnis der Überprüfung dieser Vermutung ist in Abb. 6.39 dargestellt. Die Skalierung der Spannungsverteilungen des makromechanischen Modells sowie der makromechanischen Auswertung des mikromechanischen Modells erfolgte dabei mit Hilfe der Mittelwerte der Verteilungen.

$$d(\mathfrak{J}_{1,L_M}) = d(\mathfrak{J}_{1,L_M}) \frac{\overline{\mathfrak{J}_{1,micro}}}{\overline{\mathfrak{J}_{1,L_M}}} \quad (6.17)$$

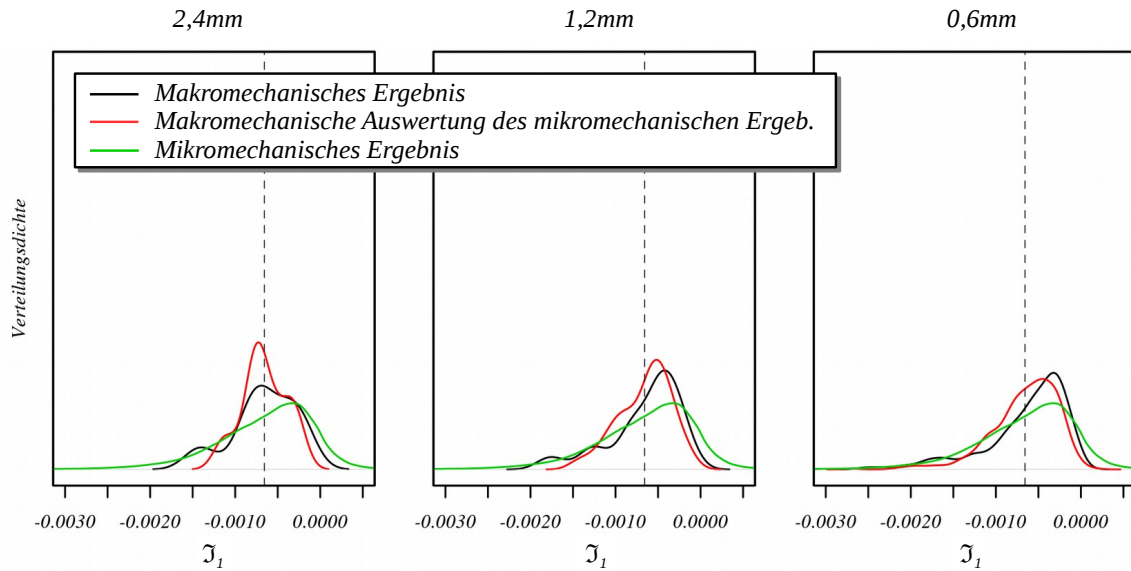


Abb. 6.39: Vergleich der skalierten statistischen Verteilungen der ersten Invariante des Spannungstensors zwischen mikromechanischem Modell, makromechanischer Auswertung des mikromechanischen Modells und makromechanischem Modell für die Zerlegungsgrößen  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$ .

Mit  $d(\mathfrak{J}_{1,L_{\mathcal{M}}})$  der Verteilung der ersten Invariante des Spannungstensors auf der entsprechenden Zerlegungsgröße  $L_{\mathcal{M}}$ ,  $\overline{\mathfrak{J}}_{1,L_{\mathcal{M}}}$  dem Mittelwert dieser Verteilung und  $\overline{\mathfrak{J}}_{1,micro}$  dem Mittelwert der ersten Invariante des Spannungstensor im mikromechanischen Modell.

Dies bedeutet, die Mittelwerte der makromechanischen Verteilungen und der makromechanisch ausgewerteten mikromechanischen Verteilungen werden an den Mittelwert der Verteilung im mikromechanischen Modell angeglichen, so dass in Abb. 6.39 alle Verteilungen den grau gestrichelt markierten Mittelwert aufweisen. In Abb. 6.39 ist zu erkennen, dass sich sowohl die Wertebereiche der skalierten Verteilungen als auch deren Gestalt mit kleinerer Zerlegungsgröße besser an die Verteilung im mikromechanischen Modell annähern.

Ob diese Plausibilisierung der Ergebnisse auch bei der Berechnung weiterer Zerlegungsgrößen sowie der Analyse weiterer Knochenproben Bestand hat werden dieser Arbeit folgende Untersuchungen zeigen müssen. Es ist jedoch bereits jetzt plausibel, dass eine Skalierung des Wertebereiches, der auf den kontinuumsmechanischen Gittern ermittelten Spannungsverteilungen, in jedem Fall notwendig sein wird, da durch den Mittelungsprozess des kontinuumsmechanischen Gitters Spitzenwerte geglättet werden. Ebenso ist es bereits jetzt plausibel, dass die Gestalt der ermittelten Verteilungen mit kleineren Zerlegungsgrößen, durch die bessere Abbildungen der mi-

kromechanischen Struktureigenschaften, derjenigen des mikromechanischen Modells ähnlicher wird.

### 6.3.4. Korrelationen der Spannungsverteilungen im makromechanischen Modell

Die in Abb. 6.40 dargestellte Auswertung der mit Hilfe des makromechanischen Modells ermittelten Verteilung der ersten Invarianten des Spannungstensors gegenüber der durch makromechanische Auswertung des mikromechanischen Modells ermittelten Verteilung zeigt die Übereinstimmung der lokalen Spannungswerte im makromechanischen Modell. Dies bedeutet, dass für den Fall der exakten Übereinstimmung

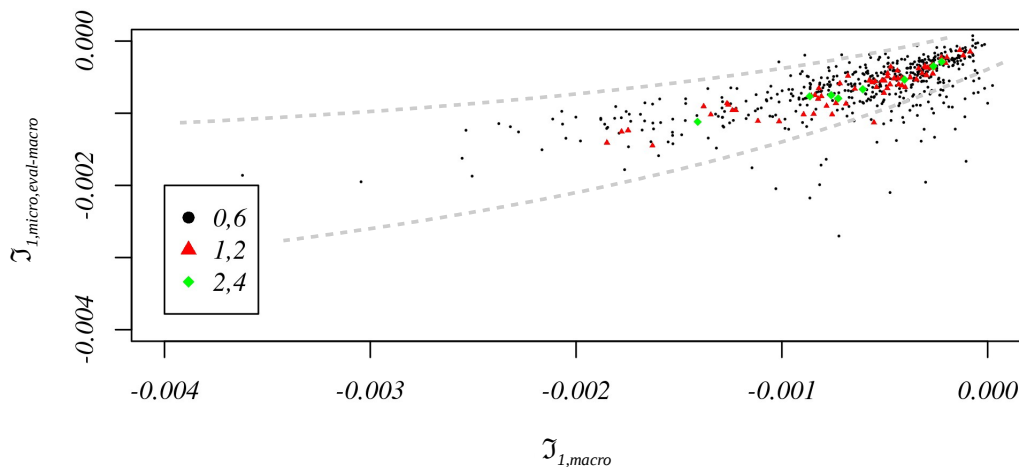


Abb. 6.40: Korrelation der ersten Invariante zwischen makromechanischem Ergebnis und makromechanischer Auswertung des mikromechanischen Ergebnis.

der Spannungswerte, in jeder physikalischen Position des gesamten Modells bzw. in allen Elementen des Modells, die Wertepaare der ersten Invariante einen linearen Zusammenhang darstellen müssen.

Wie in Abb. 6.40 zu erkennen ist, ist dies für die Zerlegungsgrößen  $1,2\text{ mm}$  und  $2,4\text{ mm}$  näherungsweise der Fall, wobei die Streubreite orthogonal zur Richtung der linearen Abhängigkeit anscheinend mit abnehmender Zerlegungsgröße zunimmt. Dieses Verhalten kann im vorliegenden Fall durch die relativ geringe Anzahl von Datenpunkten der Zerlegungsstufe  $2,4\text{ mm}$  entstehen oder es zeigt sich auch in diesem Fall die Annäherung an die Grenze der kontinuumsmechanischen Betrachtungsweise. Für den letzteren Fall spricht, dass alle Datenpunkte der beiden größeren Zerlegungsstufen innerhalb des, in Abb. 6.40 zu Zwecken der Orientierung mit grau

gestrichelten Linien eingezeichneten, Streubereichs liegen. Die Datenpunkte der Zerlegungsstufe  $0,6\text{ mm}$ , die bereits unterhalb der Grenze der kontinuumsmechanischen Betrachtungsweise liegt, befinden sich dagegen nur zum größten Teil innerhalb des Streubereichs.

Inwieweit sich die dargestellten Verhältnisse der quantitativen Korrelation der lokalen Spannungen, zwischen makroskopischer Berechnung und makroskopischer Auswertung des mikromechanischen Ergebnis, durch die Berechnung weiterer Zerlegungsgrößen bestätigen lassen bzw. wie sich diese mit dem applizierten Lastfall ändern, wird ebenfalls in dieser Arbeit folgenden Untersuchungen zu klären sein.

Die qualitative Korrelation der lokalen Spannungen zwischen makroskopischer Berechnung und makroskopischer Auswertung der mikromechanischen Ergebnisse ist für die Zerlegungsgrößen  $1,2\text{ mm}$  und  $0,6\text{ mm}$  in Abb. 6.41 dargestellt. Die Zerlegungsgröße  $2,4\text{ mm}$  wurde in der Abbildung ausgenommen, da sie zu wenige Datenpunkte für eine sinnvolle Darstellung enthält. In Abb. 6.41 sind links und rechts

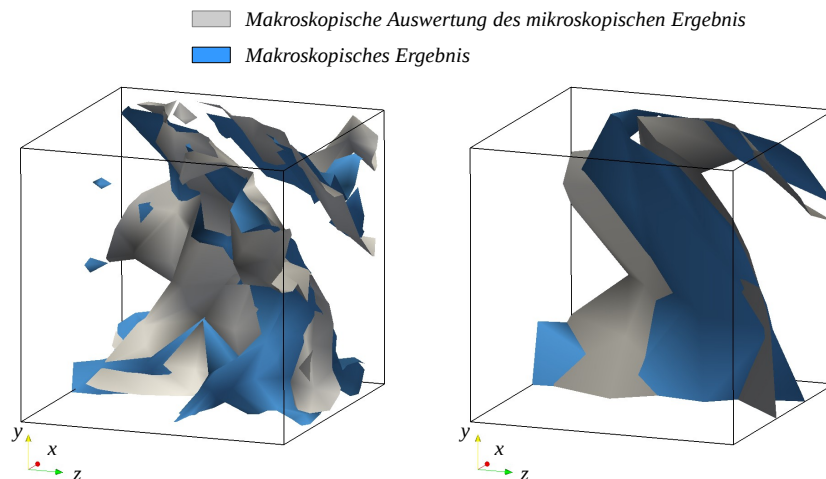


Abb. 6.41: Qualitativer Vergleich der ersten Invariante des Spannungstensors zwischen makromechanischen Ergebnissen und makroskopischer Auswertung des mikromechanischen Ergebnis. Dargestellt sind jeweils die Isoflächen der ersten Invariante.

jeweils (in blau) eine Isofläche der ersten Invariante extrahiert aus den makromechanischen Ergebnissen, sowie (in grau) eine Isofläche extrahiert aus der makromechanischen Auswertung des mikromechanischen Ergebnis, dargestellt. Zur Extraktion der Isoflächen wurden die eigentlich als Elementergebnisse vorliegenden Felder der ersten Invariante als Knotenergebnisse eines regulären Gitters interpretiert, dessen Knotenpunkte in den Mittelpunkten der Elemente des ursprünglichen Gitters liegen. Da dieses Vorgehen zur Folge hat, dass das Gitter der Zerlegungsgröße  $0,6\text{ mm}$  eine

größere physikalische Ausdehnung besitzt, als das Gitter der Zerlegungsstufe  $1,2\text{ mm}$  wurde das Ergebnis der Zerlegung  $0,6\text{ mm}$  zur besseren Vergleichbarkeit auf die kleineren Abmessungen beschnitten.

Es ist zu erkennen dass die Isoflächen sowohl innerhalb der Zerlegungsstufen als auch im Vergleich zwischen den beiden Zerlegungsstufen die gleiche Struktur aufweisen. Dies ist ein weiterer Hinweis, dass die mit Hilfe der effektiven Materialdaten berechneten makromechanischen Ergebnisse nicht nur statistisch sondern auch lokal in Struktur und absoluten Feldwerten mit den makromechanisch ausgewerteten mikromechanischen Ergebnissen korrelieren. Da in Abschnitt 6.3.2 bereits die Korrelation zwischen mikromechanischen Spannungswerten und deren, durch makromechanische Auswertung ermittelten, effektiven Werten gezeigt wurde, ist an dieser Stelle die Aussage gerechtfertigt, dass es die in diesem Kapitel durchgeführten Analysen darauf hinweisen, dass die mit Hilfe der vorgestellten Methode ermittelten Spannungsfelder dafür geeignet sind, aus kontinuumsmechanischen Berechnungen direkt auf die mikromechanischen Spannungsverteilungen der zugrunde liegenden Mikrostruktur zu schließen und so mechanisch induzierte Knochenwachstumsprognosen durchzuführen.



---

## 7. Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit beschäftigte sich mit der Bestimmung kontinuumsmechanischer Elastizitätsparameter, mikrostrukturierter Materialien im allgemeinen sowie spongiösem Knochenmaterial im speziellen. Die Ableitung der effektiven kontinuumsmechanischen Materialdaten geschieht mit Hilfe der direkten strukturmechanischen Simulation der Trabekelstruktur des spongiösen Knochenmaterials.

Zunächst wurden in Kapitel 1 die Motivation, der Stand der Technik in den relevanten Gebieten, sowie die Ziele der Arbeit dargelegt. In Kapitel 2, Grundlagen, wurden danach die mathematischen und technischen Prinzipien erläutert, die als Basis für die im Rahmen der Arbeit erfolgten Entwicklungen dienten. Hierzu zählen Grundlagen der Elastizitätstheorie, der Methode der Finiten Elemente, der multivariaten Statistik sowie die Erläuterung der Prinzipien der Computertomographie (CT).

Im folgenden Kapitel 3, Direkter mechanischer Ansatz zur Berechnung von elastischen Eigenschaften mikrostrukturierter Volumina, wurde die von Hill entwickelte Theorie der direkten mechanischen Simulation zur Bestimmung effektiver Materialparameter mikrostrukturierter Volumina auf Kontinuumsebene eingeführt. Es wurde anhand prinzipieller zweidimensionaler Betrachtungen gezeigt, dass die klassische Methode nach Hill die Schwäche aufweist, dass die mit ihrer Hilfe berechneten Materialdaten von der Wahl der auf die Mikrostruktur applizierten Randbedingungen abhängen. Da dies nicht zufriedenstellend ist, wurde im gleichen Kapitel eine Erweiterung der Methode vorgeschlagen, die zur Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeit mikrostrukturierter Volumina führt. Der Vorteil dieser Methode ist die Unabhängigkeit der daraus resultierenden Steifigkeitsmatrizen von den applizierten Randbedingungen. Des weiteren ist die vorgestellte Methode durch den Einsatz von Ansatzfunktionen höheren Grades in ihrer Genauigkeit erweiterbar.

Als Basisdatensatz für die Entwicklung der vorgestellten Methode und der in dieser Arbeit durchgeführten Analysen diente der  $\mu$ -CT-Volumendatensatz eines menschlichen Femurkopfes. Der Femurkopf wurde im Rahmen der Implantation einer Totalhüftendoprothese in der Klinik für Unfallchirurgie und Orthopädie des Universitätsklinikum Freiburg entnommen. Der Volumendatensatz wurde nach der Entnahme durch das Institut für Bauweisen und Strukturtechnologie des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) erstellt. Die Parameter des Datensatzes sowie die

Definition ausgezeichneter Bereiche, die in Kapitel 6 zu Analysen herangezogen wurden, sind in Kapitel 4 angegeben.

Neben dem  $\mu$ -CT Datensatz des Femurkopfes wurden im Rahmen der Arbeit auch  $k$ -CT Datensätze im Universitätsklinikum Freiburg aufgenommen. Da sich allerdings zeigte, dass diese Aufnahmen mit ungeeigneten Faltungskernen rekonstruiert wurden, wurden in Kapitel 4 nur die Parameter der Datensätze angegeben, ohne dass die Daten in der Arbeit weitere Verwendung fanden. Die  $k$ -CT-Datensätze sind jedoch zusammen mit den Rohdaten der  $k$ -CT sowie dem  $\mu$ -CT-Datensatz am HLRS archiviert, so dass in der Arbeit folgenden Untersuchungen beispielsweise erneute, auflösungssteigernde Mehrfachrekonstruktionen mit geeigneteren Faltungskernen vorgenommen werden können. Es bestünde so die Aussicht, einen Bezug zwischen den rekonstruierten  $k$ -CT-Volumendaten und den im Rahmen dieser Arbeit berechneten Materialfeldern herzustellen.

In Kapitel 5 wurde die während dieser Arbeit vorgenommene Implementierung der Prozesskette beschrieben, welche es ermöglicht, aus  $\mu$ -CT-Datensätzen ganzer Knochenbereiche mit Hilfe direkter, mechanischer Simulation, das Feld der linear elastischer Materialeigenschaften des Knochenbereichs sowie das Feld der effektiven numerischen Steifigkeitsmatrizen auf Kontinuumsebene in beliebiger Auflösung zu berechnen. Dabei wurde zunächst eine Abschätzung der benötigten Ressourcen angestellt, um auf eventuelle Probleme bei der Applikation der Prozesskette auf den HPC-Ressourcen des HLRS vorbereitet zu sein. Wie sich zeigte, bereiteten insbesondere die Prozesssteuerung auf Scriptbasis und die Organisation der Datei Ein- und Ausgabe bei der Bearbeitung kleiner Zerlegungsgrößen sowie die fehlende Parallelisierung des verwendeten FEM-Softwarepaketes FMPS bei der Bearbeitung großer Zerlegungsgrößen Schwierigkeiten.

Die Schwierigkeiten bei der Prozesssteuerung konnten durch die in Abschnitt 5.4.2 beschriebene Implementierung eines Steuerungsprogramms auf Basis von MPI überwunden werden. Die übermäßige Beanspruchung der Dateisysteme wurde durch die Entwicklung und Implementierung eines für alle Glieder der Simulationsprozesskette gemeinsamen Datenformates behoben, das sich ebenfalls zur effizienten parallelen Archivierung großer feingranularer Datensätze eignet. Die Implementierung sowie die typischen Verwendungsszenarien des Datenformates sind in Abschnitt 5.2.1 beschrieben. Die Effizienz des mit Hilfe des Datenformates entwickelten Packalgorithmus wird in Abschnitt 5.5 diskutiert.

Um die Bearbeitung von Gebietszerlegungen mit Kantenlängen größer  $2,4\text{ mm}$  zu ermöglichen, wurde FMPS mit der MPI-parallelen Löserbibliothek PETSc auf der

---

Basis von Shared Memory Datenkommunikation gekoppelt. Diese Methode wurde gewählt, um den tiefen und weit verzweigten Aufrufbaum von FMPS nicht mit MPI-Bibliotheksaufrufen durchsetzen zu müssen und so dessen serielle Effizienz beim Lösen kleiner Probleme beizubehalten. Die angewandte Implementierungsstrategie wurde in Abschnitt 5.3.2 beschrieben.

Ein Problem, welches im Rahmen dieser Arbeit nicht gelöst wurde, dessen Implementierung jedoch für die Bearbeitung weiterer Datensätze bzw. größerer Patientenkollektive erforderlich sein wird, ist die Integration des mit PETSc parallelisierten FMPS in das MPI-parallele Steuerprogramm. Dieser Schritt wird die effiziente Ausführung der Simulationsprozesskette als integrierte parallel Applikation erlauben und eine weitere wesentliche Entlastung der Ein-/Ausgabesysteme mit sich bringen.

Nach der Beschreibung und Diskussion der im Rahmen der Arbeit durchgeführten Softwareentwicklungen folgen im Kapitel 6, Ergebnisse, die Analysen der auf unterschiedlichen Auflösungsstufen berechneten Datenfelder der effektiven Steifigkeit und die Diskussion über deren Zusammenhänge mit dem analysierten strukturbeschreibenden Parameter  $\rho_{rel}$ , d.h. der relativen Dichte, auf kontinuumsmechanischer Ebene. Es sei an dieser Stelle nochmals darauf hingewiesen, dass die in dieser Arbeit durchgeführten Betrachtungen ausschließlich auf der Analyse des verwendeten  $\mu$ -CT-Datensatzes basieren. Die durchgeführten Untersuchungen müssen zu einer endgültigen Validierung der errechneten Materialparameter messtechnisch überprüft werden. Diese Validierung und Kalibrierung sollte jedoch durch lineare Skalierung der in dieser Arbeit ermittelten Ergebnisse möglich sein, da der Abhängigkeitspfad zwischen der  $\mu$ -CT und den berechneten Materialdaten, wie in Abschnitt 4.3.3 sowie Kapitel 6 dargestellt, in gewissen Grenzen ausschließlich aus linearen Beziehungen besteht.

Die in Abschnitt 6.1 beschriebenen statistischen Analysen der relativen Dichte wurden innerhalb der in Abschnitt 4 definierten Bereiche des  $\mu$ -CT-Datensatzes durchgeführt. Die erste aus diesen Auswertungen gewonnene Erkenntnis war, dass die Zerlegungsgröße von  $9,6\text{ mm}$  in keiner Weise als Basis kontinuumsmechanischer Betrachtungen von spongiösem Knochenmaterial geeignet ist. Diese Zerlegungsgröße ist zum einen, verglichen mit den betrachteten Knochenstrukturen wie beispielsweise dem Femurkopf, zu grob, um statistisch relevante Probenanzahlen gewinnen zu können und zum anderen, verglichen mit den Größen der spongiösen Trabekelstruktur, ebenfalls zu grob, um kontinuierliche Materialverteilungen zu gewinnen. Dies bedeutet mit anderen Worten, dass, bedingt durch die starke Mittelung, zu große Varianzen der relativen Dichte zwischen benachbarten Elementen erzeugt werden.

Eine weitere Erkenntnis aus den in Abschnitt 6.1 durchgeführten Auswertungen ist, dass mit der Zerlegungsgröße von  $0,6\text{ mm}$  erstmals die Porengröße des betrachteten spongiösen Knochenmaterials unterschritten wird. In Bezug zu diesem Ergebnis wäre es sicherlich sinnvoll, dieser Arbeit Untersuchungen folgen zu lassen, die ein geeignetes histomorphometrisches Verfahren implementieren, welches den Parameter der durchschnittlichen Porengröße sowie weitere Parameter zur Klassifizierung der Beschaffenheit der Spongiosa exakt und auf automatische Weise bestimmt. Es steht zu erwarten, dass dieses Vorgehen die globale Parametrisierung und Klassifizierung von spongiösem Knochenmaterial nach Alter, Geschlecht und Krankheitsbild erlauben würde.

Durch den Vergleich der statistischen Auswertungen des spongiösen Volumens sowie der Zerlegung des Gesamtdatensatzes konnte zusätzlich festgestellt werden, dass die Materialmodellierung auf Basis der relativen Dichte für die Auflösungsstufen  $0,6\text{ mm}$  -  $\approx 2,4\text{ mm}$  in den zwei Bereichen Spongiosa und Kortikalis getrennt betrachtet werden sollte, da sich die beiden Bereiche bereits durch den einfachsten histomorphometrischen Parameter  $\rho_{rel}$  klar unterscheiden lassen.

Die Auswertung weiterer strukturbeschreibender Parameter konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr durchgeführt werden. In den Daten der elektronischen Anhänge dieser Arbeit sind jedoch die Eigenwerte und Eigenvektoren der Trägheitstensenoren der betrachteten MVEs abgelegt, so dass diese in folgenden Untersuchungen direkt ausgewertet werden können.

Nach der Auswertung der relativen Dichte als strukturbeschreibenden Parameter, wurden in Abschnitt 6.2 die auf den Auflösungsstufen  $0,6\text{ mm}$ ,  $1,2\text{ mm}$  sowie  $2,4\text{ mm}$  berechneten Felder der effektiven Steifigkeit analysiert. Hierbei wurden die Spektralnorm und Symmetrieabweichung der effektiven Steifigkeit, die statistischen Verteilungen der Komponenten der effektiven Steifigkeit und die Korrelationen zwischen den Komponenten der effektiven Steifigkeit untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass sowohl durch orthotrope Optimierung, als auch durch monotrope Optimierung der berechneten effektiven Steifigkeitsmatrizen Gruppen annähernd linearer Korrelation zwischen allen Komponenten der effektiven Steifigkeitsmatrix entstehen. Ferner konnte gezeigt werden, dass diese Gruppen mit Hilfe des Expectation Maximisation Algorithmus auf der Basis multivariater Gauß'scher Mischverteilungen separiert werden können und dass diese Gruppen auf allen drei betrachteten Auflösungsstufen bestehen bleiben.

In dieser Arbeit folgenden Untersuchungen gilt es nun zu analysieren, weshalb sich die beobachtete Gruppierung im effektiven, strukturmechanischen Verhalten von spon-

---

gigem Knochenmaterial ausbildet und ob sich diese Gruppierung auch bei der Untersuchung weiterer Knochenproben bestätigen bzw. wiederfinden lässt. Falls dies möglich ist, ließen sich auf Basis der Gruppeneigenschaften weitere histomorphometrische Parameter zur Klassifizierung von spongiösem Knochenmaterial entwickeln.

Im Anschluss an die Analyse der möglichen Gruppierung der Daten, wurde die Möglichkeit der Parameterreduktion mit Hilfe der Hauptachsenanalyse sowohl der ungruppierten als auch der gruppierten Daten untersucht. Es zeigte sich, dass durch die Hauptachsentransformation der Kovarianzmatrix der Originaldaten über 90% der Varianz der Originaldaten durch die erste Hauptkomponente beschrieben werden. Im Falle der gruppierten Daten lässt sich dieser Anteil noch weiter um maximal 5% steigern. Wird die Hauptachsentransformation dagegen mit Hilfe der Kovarianzmatrix der nach Kendall rangtransformierten Originaldaten durchgeführt, so werden nur noch 33% der gesamten Varianz der rangtransformierten Daten durch die erste Hauptkomponente beschrieben, und es sind 12 Komponenten notwendig, um den kumulierten Anteil der durch diese Komponenten beschriebenen Gesamtvarianz auf über 90% zu steigern. Im Falle der rangtransformierten Daten zeigt sich weiter, dass sich der Anteil der erklärten Varianz der ersten Hauptkomponenten durch Gruppierung um bis zu 18% steigern lässt.

Die Parameterreduktion der ungruppierten sowie der gruppierten Daten ist aus dem Grunde von besonderem Interesse, da durch sie die Aussichten, die Materialmodellierung auf Basis von  $k$ -CT-Daten durchführen zu können, wesentlich verbessert würden. Mit anderen Worten erscheint es sehr viel wahrscheinlicher, dass sich eine Abhängigkeit zwischen dem Dichtefeld der klinischen CT-Daten und dem Feld der ermittelten Materialdaten bzw. numerischen Steifigkeiten finden lässt, falls die Anzahl der zu beschreibenden Parameter möglichst gering ist.

Die Frage, die anhand der durchgeführten Analysen nicht beantwortet werden konnte war, bis zu welchem Grad die Parameterreduktion erfolgen sollte bzw. welchen Einfluss sie auf die Ergebnisse kontinuumsmechanischer Simulationen hat. Des Weiteren konnte nicht beurteilt werden, ob die Materialmodellierung und Parameterreduktion auf Basis der Kovarianzmatrix der Originaldaten oder auf Basis der Kovarianzmatrix der rangtransformierten Daten durchgeführt werden sollte. Die Klärung dieser Fragen bleibt dieser Arbeit folgenden Untersuchungen vorbehalten.

Im abschließenden Abschnitt 6.3 der Ergebnisdarstellung werden erste Vergleiche zwischen mikromechanischen Berechnungen eines größeren Knochenbereiches sowie der kontinuumsmechanischen Simulation des selben Knochenbereiches mit Hilfe der berechneten kontinuumsmechanischen Materialdaten angestellt. Zusammengefasst

zeigten die in diesem Abschnitt angestellten Vergleiche, dass auf der einen Seite mit gewissen Beschränkungen einfache lineare Korrelationen zwischen den Spannungsergebnissen auf den beiden betrachteten Skalen sowohl in den statistischen Verteilungen, als auch in den quantitativen lokalen Werten nachgewiesen werden können.

Auf der anderen Seite gilt es jedoch auch als wesentliches Ergebnis und auch wesentliche Beschränkung der vorangegangenen Behauptung festzuhalten, dass ebenfalls gezeigt werden konnte, dass die lineare Übertragbarkeit zwischen den Spannungsergebnissen der beiden Skalen verloren geht, sobald die Porengröße des betrachteten Knochenmaterials durch die Zerlegungsgröße des kontinuumsmechanischen Materialmodells unterschritten wird. In Bezug auf diesen Effekt sind dieser Arbeit folgende Untersuchungen unbedingt notwendig, da gezeigt wurde, dass das Schließen der in der Einleitung dieser Arbeit dargestellten Auflösungslücke in bestimmten Fällen, insbesondere bei der detaillierten Betrachtung mit hoher Auflösung, nicht auf triviale Weise möglich ist.

Die Auswertung der ebenfalls in den Daten der elektronischen Anhänge dieser Arbeit zu findenden berechneten effektiven numerischen Steifigkeitsmatrizen konnte im Rahmen dieser Arbeit leider nicht mehr erfolgen und bleibt folgenden Untersuchungen vorbehalten.

Insgesamt konnte nach Meinung des Verfassers durch die angestellten Entwicklungen und Untersuchungen ein wesentlicher Schritt in Richtung des übergeordneten Zieles dieser Arbeit, nämlich der individuellen, detaillierten Modellierung von spongiösem Knochenmaterial getan werden. Die vorgestellte Methode ist zum jetzigen Zeitpunkt soweit entwickelt, dass sie mit nicht mehr allzu hohem Implementierungsaufwand auf große Patientenkollektive angewendet werden kann. Dieses Vorgehen ließe Analysen und Untersuchungen zu, die wesentliche Einsichten in die Morphologie, mechanische Funktionsweise und elastischen Parameter von spongiösem Knochenmaterial spezieller Patientengruppen und Krankheitsbilder ermöglichen würden.

---

## Literatur

- [1] R. Hill. „Elastic Properties of Reinforced Solids: Some Theoretical Principles“. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11 (1963), S. 357–372.
- [2] H. Wüstenberg. „Finite Method Programming System - FMPS 4.00“. User’s Guide. Mai 2014.
- [3] PETSc Developer Team. „Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation“. Feb. 2016. URL: <http://www.mcs.anl.gov/petsc/index.html> (besucht am 10.02.2016).
- [4] P. Helwig u. a. „Finite element analysis of four different implants inserted in different positions to stabilize an idealized trochanteric femoral fracture“. In: *Injury* 40 (2 2009), S. 288–295.
- [5] M. J. Parker und H. W. Stedtfeld. „Internal fixation of intracapsular hip fractures with a dynamic locking plate: Initial experience and results for 83 patients treated with a new implant.“ In: *Injury* 41 (4 2010), S. 348–351.
- [6] J. E. Gjertsen u. a. „Internal screw fixation compared with bipolar hemiarthroplasty for treatment of displaced femoral neck fractures in elderly patients.“ In: *J Bone Joint Surg Am* 92 (3 2010), S. 619–628.
- [7] M. Muller u. a. „Proximal femur fractures : Results and complications after osteosynthesis with PFN and TGN.“ In: *Unfallchirurg* 111 (2 2008), S. 71–78.
- [8] U. Holzwarth und G. Cotogno. „Total Hip Arthroplasty - State of the Art, Challenges and Prospects“. In: *JRC Scientific and Policy Reports* (2012). ISSN: 1831-9424. DOI: 10.2788/31286.
- [9] P. Helwig. „Sinnhaftigkeit des Einsatzes von Simulationsverfahren zur Evaluation von Knochen-Implantat-Systemen in der Hüftendoprothetik“. Mündliche Mitteilung. 2007.
- [10] C. Schmieder. „Sinnhaftigkeit des Einsatzes von Simulationsverfahren zur Evaluation von Knochen-Implantat-Systemen in der Implantationschirurgie der Wirbelsäule“. Mündliche Mitteilung. 2011.

- [11] J. Degreif. „Sinnhaftigkeit des Einsatzes von Simulationsverfahren zur Evaluation von Knochen-Implantat-Systemen im Bereich der Osteosynthese“. Mündliche Mitteilung. 2013.
- [12] European Commission. 2009. URL: [http://cordis.europa.eu/projects/rcn/79488\\_en.html](http://cordis.europa.eu/projects/rcn/79488_en.html) (besucht am 16. 11. 2009).
- [13] P. Schuller-Götzburg u. a. „Entwicklung von 3D-FE Modellen zur Simulation und Optimierung von Implantaten.“ In: *Biometarialien* 4 (7 2006), S. 263–270.
- [14] Simpleware Ltd. 2014. URL: <http://www.simpleware.com/> (besucht am 23. 04. 2014).
- [15] Materialise. 2014. URL: <http://biomedical.materialise.com/mimics> (besucht am 23. 04. 2014).
- [16] Visualization Sciences Group. 2013. URL: <http://www.vsg3d.com/amira/overview> (besucht am 23. 04. 2014).
- [17] O. Röhrle u. a. „Multiscale Skeletal Muscle Modeling: From Cellular Level to a Multi-segment Skeletal Muscle Model of the Upper Limb“. English. In: *Computer Models in Biomechanics*. Hrsg. von G. A. Holzapfel und E. Kuhl. Springer Netherlands, 2013, S. 103–116. ISBN: 978-94-007-5463-8. DOI: 10.1007/978-94-007-5464-5\_8. URL: [http://dx.doi.org/10.1007/978-94-007-5464-5\\_8](http://dx.doi.org/10.1007/978-94-007-5464-5_8).
- [18] M. Cronskär, J. Rasmussen und M. Tinnsten. „Combined finite element and multibody musculoskeletal investigation of a fractured clavicle with reconstruction plate“. In: *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering* 18.7 (2015). PMID: 24156391, S. 740–748. DOI: 10.1080/10255842.2013.845175. eprint: <http://dx.doi.org/10.1080/10255842.2013.845175>. URL: <http://dx.doi.org/10.1080/10255842.2013.845175>.
- [19] AnyBody Technology. 2014. URL: <http://www.anybodytech.com/> (besucht am 23. 04. 2014).
- [20] R. B. Ashman und J. Y. Rho. „Elastic modulus of trabecular bone material“. In: *Journal of Biomechanics* 21.3 (1988), S. 177 –181. ISSN: 0021-9290. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9290\(88\)90167-4](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9290(88)90167-4).
- [21] J. Y. Rho, R. B. Ashman und C. H. Turner. „Young’s modulus of trabecular and cortical bone material: Ultrasonic and microtensile measurements“. In: *Journal of Biomechanics* 26.2 (1993), S. 111 –119. ISSN: 0021-9290. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9290\(93\)90042-D](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9290(93)90042-D). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002192909390042D>.



- [22] P. K. Zysset u. a. „Elastic modulus and hardness of cortical and trabecular bone lamellae measured by nanoindentation in the human femur“. In: *Journal of Biomechanics* 32.10 (1999), S. 1005 –1012. ISSN: 0021-9290. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9290\(99\)00111-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9290(99)00111-6). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929099001116>.
- [23] C. Albert u. a. „Bone properties by nanoindentation in mild and severe osteogenesis imperfecta“. In: *Clinical Biomechanics* 28.1 (2013), S. 110 –116. ISSN: 0268-0033. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.clinbiomech.2012.10.003>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0268003312002306>.
- [24] K. K. Nishiyama u. a. „Proximal femur bone strength estimated by a computationally fast finite element analysis in a sideways fall configuration“. In: *Journal of Biomechanics* 46.7 (2013), S. 1231 –1236. ISSN: 0021-9290. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jbiomech.2013.02.025>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002192901300105X>.
- [25] F. Taddei u. a. „European Society of Biomechanics S.M. Perren Award 2014: Safety factor of the proximal femur during gait: A population-based finite element study“. In: *Journal of Biomechanics* 47.14 (2014), S. 3433 –3440. ISSN: 0021-9290. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jbiomech.2014.08.030>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929014004692>.
- [26] J. C. Lotz, T. N. Gerhart und W. C. Hayes. „Mechanical properties of trabecular bone from the proximal femur: a quantitative CT study“. In: *Journal of computer assisted tomography* 14.1 (1990), S. 107 –114.
- [27] J. Y. Rho, M. C. Hobatho und R. B. Ashman. „Relations of mechanical properties to density and {CT} numbers in human bone“. In: *Medical Engineering and Physics* 17.5 (1995), S. 347 –355. ISSN: 1350-4533. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/1350-4533\(95\)97314-F](http://dx.doi.org/10.1016/1350-4533(95)97314-F). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/135045339597314F>.
- [28] J. Kabel u. a. „The role of an effective isotropic tissue modulus in the elastic properties of cancellous bone“. In: *Journal of Biomechanics* 32.7 (1999), S. 673 –680. ISSN: 0021-9290. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9290\(99\)00045-7](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9290(99)00045-7). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929099000457>.

- [29] B. van Rietbergen u. a. „A new Method to determine trabecular Bone Elastic Properties and loading using Micromechanical Finite-Element Models“. In: *Journal of Biomechanics* 28 (1 1995), S. 69–81.
- [30] M. E. Moreno, V. Tita, F. D. Marques. „Influence of Boundary conditions on the Determination of Effective Material Properties for Active Fiber Composites“. In: 11th Pan-American Congress of Applied Mechanics. Jan. 2010.
- [31] P. Makowski und W. Kuś. „Trabecular bone numerical homogenization with the use of buffer zone“. In: *Computer Assisted Methods in Engineering and Science* 21 (2014), S. 113 –121.
- [32] H. Parisch. *Festkörper Kontinuumsmechanik*. 1. Aufl. Teubner, B. G., 2003.
- [33] D. Gross u. a. In: *Technische Mechanik 4*. 4. Aufl. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2002. Kap. 2.3.
- [34] F. Irgens. In: *Continuum Mechanics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008. Kap. 3.2.4, S. 50–54.
- [35] R. Kienzler und R. Schröder. In: *Einführung in die Höhere Festigkeitslehre*. Springer, 2009. Kap. 4 Elastizitätsgesetz. ISBN: 978-3-540-89324-0. DOI: 10.1007/978-3-540-89325-7.
- [36] R. O. Davis und A. P. S. Selvadurai. In: *Plasticity and Geomechanics*. Cambridge University Press, 2009. Kap. E, 255 ff. ISBN: 9780511614958. DOI: <http://dx.doi.org/10.1017/CB09780511614958.013>.
- [37] In: *Abaqus 6.9 Analysis User’s Manual*. Dassault Systèmes, 2009. Kap. 18.2.1 Linear elastic behavior.
- [38] R. Schneider, U. Hindenlang und M. Resch. „Identification of Anisotropic Elastic Material Properties from Micro-Fem Simulations for Natural Materials“. In: *inSiDE* 7.2 (Nov. 2009).
- [39] J. H. Argyris und H.-P. Mlejnek. In: *Die Methode der finiten Elemente Band 1*. Friedr. Vieweg & Sohn, 1986. Kap. 5.
- [40] H. Parisch. „Diskretisierung II“. Manuskript zur Vorlesung - Institut für Statik und Dynamik der luft- und Raumfahrtkonstruktionen - Universität Stuttgart. März 2006.
- [41] L. A. Feldkamp, L. C. Davis und J. W. Kress. „Practical cone-beam algorithm“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 1.6 (1984), S. 612–619. URL: <http://dx.doi.org/10.1364/JOSAA.1.000612>.
- [42] W. A. Kalender. *Computertomographie Grundlagen, Gerätetechnologie, Bildqualität, Anwendungen*. 2. Aufl. Publicis, 2006. ISBN: 978-3-89578-215-2.

- 
- [43] H. C. Elbracht. In: *Statistische Methoden zur Quantifizierung und Schätzung des Loss Given Default*. Finanzierung, Kapitalmarkt und Banken. Eul, 2011. Kap. 5.1.1, S. 50. ISBN: 9783844100549.
- [44] C. Fraley und A. E. Raftery. „Model-Based Clustering, Discriminant Analysis, and Density Estimation“. In: *Journal of the American Statistical Association* 97.458 (2002), S. 611–631. DOI: 10.1198/016214502760047131. eprint: <http://dx.doi.org/10.1198/016214502760047131>. URL: <http://dx.doi.org/10.1198/016214502760047131>.
- [45] J. D. Banfield und A. E. Raftery. „Model-Based Gaussian and Non-Gaussian Clustering“. In: *Biometrics* 49.3 (Sep. 1993), S. 803–821.
- [46] Fraley C. u. a. *mclust Version 4 for R: Normal Mixture Modeling for Model-Based Clustering, Classification, and Density Estimation*. 597. Technical Report. 2012.
- [47] C. F. Dormann. *Parametrische Statistik*. Hrsg. von H. Dette und W. Härdle. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013. ISBN: 978-3-642-34785-6. DOI: 10.1007/978-3-642-34786-3.
- [48] C. F. Dormann. In: *Parametrische Statistik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013. Kap. 15.3.1 Hauptkomponentenanalyse, S. 280. ISBN: 978-3-642-34785-6. DOI: 10.1007/978-3-642-34786-3.
- [49] S. Nemat-Nasser und M. Hori. *Micromechanics: Overall properties of heterogeneous materials*. 2. Aufl. Elsevier Science B.V., 1999.
- [50] S. J. Hollister und N. Kikuchi. „A comparison of homogenization and standard mechanics analyses for periodic porous composites“. In: *Computational Mechanics* 10 (1992), S. 73–95.
- [51] P. M. Suquet. „Elements of homogenization theory for inelastic solid mechanics“. In: *Homogenization Techniques for Composite Media*. Hrsg. von E. Sanchez-Palencia und A. Zaoui. Springer, 1987, S. 194–278.
- [52] M. Sommer Bittencourt u. a. „Iterative reconstruction in image space (IRIS) in cardiac computed tomography: initial experience“. In: *The International Journal of Cardiovascular Imaging (formerly Cardiac Imaging)* 27 (7 2011). 10.1007/s10554-010-9756-3, S. 1081–1087. ISSN: 1569-5794. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s10554-010-9756-3>.

- [53] N. Patel und U. Küster. „Geometry Dependent Computational Study of Patient Specific Abdominal Aortic Aneurysm“. English. In: *Sustained Simulation Performance 2014*. Hrsg. von M. M. Resch u. a. Springer International Publishing, 2015, S. 221–238. ISBN: 978-3-319-10625-0. DOI: 10.1007/978-3-319-10626-7\_18. URL: [http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-10626-7\\_18](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-10626-7_18).
- [54] R. Jemali Institut für Bauweisen und Konstruktionsforschung Deutsches Zentrum für Luft-und Raumfahrt. „Anforderungen an die Auflösung einer  $\mu$ -CT im Verhältnis zur darzustellenden Struktur“. Mündliche Mitteilung. 2009.
- [55] Kitware Inc. 2014. URL: <http://www.vtk.org/doc/release/6.1/html/classvtkDelaunay3D.html#details> (besucht am 24.04.2014).
- [56] J. Schreiner u. a. „Direct (Re)Meshing for Efficient Surface Processing“. In: *Computer Graphics Forum* 25.3 (2006), 527 – 536. DOI: 10.1111/j.1467-8659.2006.00972.x.
- [57] A. Düster u. a. „The finite cell method for three-dimensional problems of solid mechanics“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197.45-48 (Aug. 2008), 3768–3782. DOI: 10.1016/j.cma.2008.02.036.
- [58] M. Karo u. a. „The Application Level Placement Scheduler“. In: Cray User Group. Cray Inc. Mai 2006. URL: [https://cug.org/5-publications/proceedings\\_attendee\\_lists/2006CD/S06\\_Proceedings/pages/Authors/Karo-4C/Karo\\_alps\\_paper.pdf](https://cug.org/5-publications/proceedings_attendee_lists/2006CD/S06_Proceedings/pages/Authors/Karo-4C/Karo_alps_paper.pdf) (besucht am 24.04.2014).
- [59] S. Sumimoto. „An Overview of Fujitsu’s Lustre Based File System“. Apr. 2011. URL: <http://www.fujitsu.com/downloads/TC/sc11/fefs-sc11.pdf> (besucht am 21.04.2012).
- [60] Wikipedia. „IBM General Parallel File System“. Apr. 2012. URL: <http://en.wikipedia.org/wiki/GPFS> (besucht am 21.04.2012).
- [61] R. Schneider. „Storage and Indexing of Fine Grain, Large Scale Data Sets“. English. In: *Sustained Simulation Performance 2013*. Hrsg. von M. M. Resch u. a. Springer International Publishing, 2013, S. 89–104. ISBN: 978-3-319-01438-8. DOI: 10.1007/978-3-319-01439-5\_7. URL: [http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-01439-5\\_7](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-01439-5_7).
- [62] U. Küster. „Verfahren zur Aufdeckung unverbundener Bereiche in Graphen“. Mündliche Mitteilung. 2010.
- [63] D. Khabi. „Verfahren zur Kopplung von seriellen Quellcode mit MPI parallelen Subroutinen“. Mündliche Mitteilung. 2012.

- [64] S. P. Booth u. a. 2012. URL: [http://cresta-project.eu/images/docs/deliverables/D4.1.1\\_Overview\\_of\\_major\\_limiting\\_factors\\_of\\_existing\\_algorithms\\_and\\_libraries.pdf](http://cresta-project.eu/images/docs/deliverables/D4.1.1_Overview_of_major_limiting_factors_of_existing_algorithms_and_libraries.pdf) (besucht am 19.06.2014).
- [65] J. Močnik, M. Novak und E. Focht. „I/O Forwarding for Quiet Clusters“. English. In: *High Performance Computing on Vector Systems 2011*. Hrsg. von M. Resch u. a. Springer Berlin Heidelberg, 2012, S. 21–39. ISBN: 978-3-642-22243-6. DOI: 10.1007/978-3-642-22244-3\_2. URL: [http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-22244-3\\_2](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-22244-3_2).
- [66] HLRS Mitarbeiter. „CRAY XE6 Hardware and Architecture“. Okt. 2011. URL: [https://wickie.hlrs.de/platforms/index.php/CRAY\\_XE6\\_Hardware\\_and\\_Architecture](https://wickie.hlrs.de/platforms/index.php/CRAY_XE6_Hardware_and_Architecture) (besucht am 31.03.2015).
- [67] Oracle. *Lustre File System TM - Operations Manual for Lustre - Version 2.0*. 2. Aufl. Jan. 2011. URL: <http://wiki.lustre.org/images/3/35/821-2076-10.pdf> (besucht am 31.03.2015).
- [68] Message Passing Interface Forum. *MPI: A Message-Passing Interface Standard, Version 3.0*. Sep. 2012. URL: <http://www.mpi-forum.org/docs/mpi-3.0/mpi30-report.pdf>.
- [69] S. Andersson. „Diskussion über die Anzahl möglicher Dateisystemoperationen der an Hermit angeschlossenen Lustre Dateisysteme“. Mündliche Mitteilung. 2011.
- [70] D. W. Dempster u. a. „Standardized nomenclature, symbols, and units for bone histomorphometry: A 2012 update of the report of the ASBMR Histomorphometry Nomenclature Committee“. In: *Journal of Bone and Mineral Research* 28.1 (2013), S. 2–17. ISSN: 1523-4681. DOI: 10.1002/jbmr.1805. URL: <http://dx.doi.org/10.1002/jbmr.1805>.
- [71] D. W. Dempster. „Bone microarchitecture and strength“. English. In: *Osteoporosis International* 14.5 (2003), S. 54–56. ISSN: 0937-941X. DOI: 10.1007/s00198-003-1474-4. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s00198-003-1474-4>.
- [72] F. Bartels. „Histomorphometrische Untersuchungen der Knochenstruktur am ovariectomierten Göttinger Minischwein zur Etablierung eines Großtiermodells zur Simulation der postmenopausalen Osteoporose“. Diss. Georg-August-Universität Göttingen, Nov. 2011. URL: <http://hdl.handle.net/11858/00-1735-0000-0006-B292-E> (besucht am 27.03.2014).

- [73] P. M. Chavassieux, M. E. Arlot und P. J. Meunier. „Intersample variation in bone histomorphometry: comparison between parameter values measured on two contiguous transiliac bone biopsies“. In: *Calcif Tissue Int.* 37.4 (1985), S. 345–350.
- [74] C. C. Roberts u. a. „Assessment of bone biopsy needles for sample size, specimen quality and ease of use“. English. In: *Skeletal Radiology* 34.6 (2005), S. 329–335. ISSN: 0364-2348. DOI: 10.1007/s00256-004-0859-6. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s00256-004-0859-6>.
- [75] R Core Team. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing. Vienna, Austria, 2013. URL: <http://www.R-project.org/>.
- [76] P. Filzmoser, H. Fritz und K. Kalcher. *pcaPP: Robust PCA by Projection Pursuit*. R package version 1.9-49. 2013. URL: <http://CRAN.R-project.org/package=pcaPP>.
- [77] C. F. Dormann. In: *Parametrische Statistik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013. Kap. 5.1.1 Nicht-parametrische Korrelation, S. 88–89. ISBN: 978-3-642-34785-6. DOI: 10.1007/978-3-642-34786-3.
- [78] D. F. Swayne u. a. „GGobi: evolving from XGobi into an extensible framework for interactive data visualization“. In: *"Computational Statistics & Data Analysis"* 43 (2003), S. 423–444.
- [79] K. Meyberg und P. Vachenaer. In: *Höhere Mathematik 1*. 6. Aufl. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2001. Kap. 8-4.5, S. 477.
- [80] K. Meyberg und P. Vachenaer. In: *Höhere Mathematik 1*. 6. Aufl. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2001. Kap. 8-5.3, S. 492.
- [81] K. Meyberg und P. Vachenaer. In: *Höhere Mathematik 1*. 6. Aufl. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2001. Kap. 6-6.3, S. 316.
- [82] C. F. Dormann. In: *Parametrische Statistik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013. Kap. 3.3.1 Die likelihood, S. 45–46. ISBN: 978-3-642-34785-6. DOI: 10.1007/978-3-642-34786-3.
- [83] R. I. Kabacoff. *R in Action - Data Analysis and Graphics with R*. 1. Aufl. Manning Publications, 2011.

---

# A. Mathematische Grundlagen

An dieser Stelle werden einige mathematische Grundlagen angegeben, die aus Sicht des Verfassers zum einfacheren Verständnis der Arbeit beitragen.

## A.1. Differential- und Integralrechnung

- **Integraler Mittelwert**

Ist  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  eine Riemann integrierbare tensorwertige Funktion  $\mathbf{f} : V \mapsto \mathbb{R}^m$ ,  $V \subseteq \mathbb{R}^n$  so wird

$$\bar{\mathbf{f}} = \frac{1}{|V|} \int_V \mathbf{f}(\mathbf{x}) dV \quad (\text{A.1})$$

integraler Mittelwert oder einfach Mittelwert von  $\mathbf{f}$  über  $V$  genannt.

- **Nablaoperator**

Wird in Tensorgleichungen der Differentialoperator  $\nabla$  verwendet, so ist dieser in  $n$  Dimensionen folgendermaßen definiert:

$$\nabla(\cdot) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i}(\cdot) \mathbf{e}^i = \sum_{i=1}^n \nabla_i(\cdot) \mathbf{e}^i \quad (\text{A.2})$$

und wird Nablaoperator genannt.

- **Laplaceoperator**

Wird in Tensorgleichungen der Differentialoperator  $\Delta$  verwendet, so ist dieser in  $n$  Dimensionen folgendermaßen definiert:

$$\Delta(\cdot) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}(\cdot) \mathbf{e}^i = \sum_{i=1}^n \Delta_i(\cdot) \mathbf{e}^i \quad (\text{A.3})$$

- **Levi-Civita Symbol**

Das Levi-Civita Symbol, auch Permutationstensor genannt, wird in dieser Arbeit ausschließlich in drei Dimensionen nach der folgenden Definition verwendet:

$$e_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{Falls } (i, j, k) = (1, 2, 3) \vee (2, 3, 1) \vee (3, 1, 2) \\ -1 & \text{Falls } (i, j, k) = (3, 2, 1) \vee (1, 3, 2) \vee (2, 1, 3) \\ 0 & \text{Falls } (i = j) \vee (j = k) \vee (k = i) \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

- **Transformationsformel für Oberflächenintegrale [79]**

Ist  $\mathbf{x} = \mathbf{s}(\boldsymbol{\xi})$  die Koordinatentransformation, welche den Bereich  $\partial\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$  in den Bereich  $\partial V \subseteq \mathbb{R}^2$  transformiert, so gilt für jedes auf  $\partial\Omega$  stetige Skalarfeld  $f$  die Transformationsformel:

$$\iint_{\partial V} f(\mathbf{x}) \, dS_{\partial V} = \iint_{\partial\Omega} f(\mathbf{s}(\boldsymbol{\xi})) \left| \frac{\partial \mathbf{s}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right| \, dS_{\partial\Omega} = \iint_{\partial\Omega} f(\mathbf{s}(\boldsymbol{\xi})) \left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right| \, dS_{\partial\Omega} \quad (\text{A.5})$$

mit  $\left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right| = |\det(\mathbf{j})|$  dem Betrag der Jacobi- oder auch Funktionaldeterminante des  $\mathbb{R}^2$ .

- **Transformationsformel für Volumenintegrale [80]**

Ist  $\mathbf{x} = \mathbf{S}(\boldsymbol{\xi})$  die Koordinatentransformation, welche den Bereich  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  in den Bereich  $V \subseteq \mathbb{R}^3$  transformiert, so gilt für jedes auf  $\Omega$  stetige Skalarfeld  $F$  die Transformationsformel:

$$\iiint_V F(\mathbf{x}) \, dV = \iiint_{\Omega} F(\mathbf{S}(\boldsymbol{\xi})) \left| \frac{\partial \mathbf{S}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right| \, d\Omega = \iiint_{\Omega} F(\mathbf{S}(\boldsymbol{\xi})) \left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right| \, d\Omega \quad (\text{A.6})$$

mit  $\left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right| = |\det(\mathbf{J})|$  dem Betrag der Jacobi- oder auch Funktionaldeterminante des  $\mathbb{R}^3$ .

## A.2. Matrizen- und Vektorrechnung

- **Eigenvektor-/ Eigenwertmatrix**

Als Eigenvektormatrix wird in dieser Arbeit die Matrix bezeichnet, welche die Eigenvektoren einer Matrix Spaltenweise in normierter Form enthält. D.h. es



gilt:

$$\underline{\mathbf{A}} \underline{\mathbf{R}} = \underline{\mathbf{R}} \underline{\mathbf{\Lambda}} \quad (\text{A.7})$$

bzw. im Falle einer symmetrischen Matrix  $\underline{\mathbf{A}}$

$$\underline{\mathbf{R}}^{-1} \underline{\mathbf{E}} \underline{\mathbf{R}} = \underline{\mathbf{\Lambda}} \quad (\text{A.8})$$

mit  $\underline{\mathbf{\Lambda}}$  der diagonalen Eigenwertmatrix, welche die zu den Spalten von  $\underline{\mathbf{R}}$  passenden Eigenwerte von  $\underline{\mathbf{A}}$  enthält.

### • Orthogonale Matrix[81]

Für eine orthogonale Matrix gilt:

$$\underline{\mathbf{A}}^T \underline{\mathbf{A}} = \underline{\mathbf{E}} \quad \text{d.h.} \quad \underline{\mathbf{A}}^T = \underline{\mathbf{A}}^{-1} \quad (\text{A.9})$$

Eine orthogonale Matrix zeichnet sich durch folgende Eigenschaften aus:

- Ihre Spalten und Zeilenvektoren sind normiert
- Ihre Spalten und Zeilenvektoren sind paarweise orthogonal

D.h. für eine Matrix  $\underline{\mathbf{A}}$  mit Spaltenvektoren  $\underline{\mathbf{a}}_i$  gilt

$$\underline{\mathbf{a}}_i \cdot \underline{\mathbf{a}}_j = 0 \quad \text{für } i \neq j \quad \text{und} \quad |\underline{\mathbf{a}}_i| = 1$$

### • Spur einer Matrix

Die Summe aller Hauptdiagonalelemente heißt Spur der Matrix  $\underline{\mathbf{A}} = a_{ij} \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$$\text{Sp}(\underline{\mathbf{A}}) = \sum_{i=1}^n a_{ii} \quad (\text{A.10})$$

Für das Skalarprodukt zweier Vektoren  $\underline{\mathbf{a}}, \underline{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^n$  gilt die folgende Identität:

$$\underline{\mathbf{a}}^T \underline{\mathbf{b}} = \text{Sp}(\underline{\mathbf{b}} \underline{\mathbf{a}}^T) \quad (\text{A.11})$$

### • Invarianten einer $3 \times 3$ Matrix

Eine Matrix bzw. ein Tensor zweiter Stufe des  $\mathbb{R}^3$  besitzt drei Invarianten, die

sich aus den Eigenwerten der Matrix folgendermaßen berechnen lassen:

$$I_1 = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \quad (\text{A.12})$$

$$I_2 = \lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1 \quad (\text{A.13})$$

$$I_3 = \lambda_1\lambda_2\lambda_3 \quad (\text{A.14})$$

### A.3. Begriffe der multivariaten Statistik

- **Likelihood**[82]

Nach Dormann ist die Likelihood das Gegenteil der Wahrscheinlichkeitsdichte [82]. Die likelihood beschreibt, wie wahrscheinlich die Parameter eines statistischen Modells bei gegebenen Daten sind. Dies bedeutet genauer

$$\mathcal{L} = p(\underline{\mathbf{z}}|\underline{\boldsymbol{\theta}}) = \prod_{i=1}^n p(z_i|\underline{\boldsymbol{\theta}}) \quad (\text{A.15})$$

Da es sich bei der Likelihood um ein Produkt kleiner Werte handelt, das numerisch schlecht zu verarbeiten sein kann, wird oftmals der Logarithmus der Likelihood verwendet. Dieser ist nach [82] definiert als:

$$\ln(\mathcal{L}) = \ln(p(\underline{\mathbf{z}}|\underline{\boldsymbol{\theta}})) = \ln\left(\prod_{i=1}^n p(z_i|\underline{\boldsymbol{\theta}})\right) = \sum_{i=1}^n \ln(p(z_i|\underline{\boldsymbol{\theta}})) \quad (\text{A.16})$$

- **Kovarianz und Kovarianzmatrix**[77]

Nach [77] beschreibt man die Kovarianz zweier Merkmale  $\underline{\mathbf{x}}_1$  und  $\underline{\mathbf{x}}_2$  formal „als summiertes Produkt der Abweichung jedes Werts vom jeweiligen Mittelwert“.

$$s(\underline{\mathbf{x}}_1, \underline{\mathbf{x}}_2) = s_{12} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{1i} - \bar{\underline{\mathbf{x}}}_1)(x_{2i} - \bar{\underline{\mathbf{x}}}_2) \quad (\text{A.17})$$

Die Kovarianzmatrix eines Datensatzes, der aus  $n$  Beobachtungen mit  $m$  Merkmalen besteht wird durch die Vorschrift

$$\underline{\boldsymbol{\Sigma}} = \begin{bmatrix} s_{11} & \cdots & s_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{m1} & \cdots & s_{mm} \end{bmatrix} \quad (\text{A.18})$$

gebildet.

Dabei gilt es anzumerken, dass die Kovarianz eines Merkmals mit sich selbst gerade dessen unkorrigierter Stichprobenvarianz entspricht. Unkorrigiert, weil die sog. korrigierte Stichprobenvarianz durch  $n - 1$ , d.h. die Anzahl der Stichprobenwerte minus eins, teilt. Dies bedeutet, auf der Diagonalen der Kovarianzmatrix stehen die unkorrigierten Stichprobenvarianzen der einzelnen Merkmale. Des Weiteren gilt es festzustellen, dass die Kovarianzmatrix immer symmetrisch und positiv semidefinit ist.

## A.4. Grundlagen der Tensorrechnung

An dieser Stelle werden die für die Ableitungen dieser Arbeit benötigten Grundlagen der Tensorrechnung angegeben, wobei keinesfalls ein Anspruch auf eine vollständige Darstellung dieses komplexen Gebiets erhoben wird. Dem interessierten Leser sei für eine wesentlich ausführlichere und auch sehr anschauliche Einführung in die Tensorrechnung [32] empfohlen, welches auch zur Erarbeitung der hier vorgestellten Grundlagen als Vorlage diene.

Tensoren werden in dieser Arbeit zur Darstellung von Feldgrößen im dreidimensionalen, kartesischen Raum verwendet. Um die Inhalte dieser Felder zu beschreiben, sind zum einen Maßzahlen und zum anderen, im Falle von gerichteten Größen oder Größen, die sich auf Längen, Flächen oder Volumen beziehen, Richtungsinformationen bzw. Informationen über die Lage der Bezugsobjekte im Raum notwendig. Dies wird an den Beispielen eines Temperaturfeldes als ungerichtete (skalare) Größe, eines Kraftfeldes als gerichtete (vektorielle) Größe, sowie des Dehnungsfeldes eines Körpers als gerichtete mit einer Bezugsgröße versehene (tensorielle) Größe verdeutlicht.

Soll im dreidimensionalen Raum eine Temperaturverteilung  $Temp = Temp(\mathbf{x})$  beschrieben werden, so ist dafür die Angabe einer Maßzahl pro Raumpunkt, nämlich die aktuelle Temperatur des Raumpunktes, notwendig.

Zur Beschreibung eines Kraftfeldes  $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{x})$  sind drei Maßzahlen pro Raumpunkt notwendig, um die Wirkungsrichtung der Kraft anzugeben, wobei der Betrag der Kraft üblicherweise durch eine Kombination der drei Maßzahlen ausgedrückt wird. Im Unterschied zum Temperaturfeld ist der Betrag der Kraft nun jedoch nicht mehr vom Koordinatensystem unabhängig, in dem er beschrieben wird. Dies bedeutet, dass zusätzlich zu den drei Maßzahlen, den sog. Koordinaten des Kraftfeldes auch das Koordinatensystem angegeben werden muss, in dem diese ausgedrückt sind. Man spricht in diesem Zusammenhang von einem Basissystem oder einfach von einer Basis. Wollen wir nun das Dehnungsfeld eines deformierten Körpers im Raum beschreiben, so ist dazu die Angabe von zwei Größen, nämlich der Ausgangslage des Linienelementes

sowie dessen Verzerrung, nötig. Dies bedeutet, dass die Dehnung durch  $3 \times 3 = 9$  Maßzahlen beschrieben werden kann. Diese Koordinaten kann man sich als die Veränderung der 3 Koordinaten des Ortsvektors des undeformierten Linienelements in jeder Raumrichtung vorstellen. Hierbei gilt es zu beachten, dass nun zwei Koordinatensysteme, eines für die Beschreibung der Lage des Linienelementes und eines für die Beschreibung der Verlängerungen benötigt werden.

Anhand dieser Beispiele wird deutlich, dass eine Einteilung von Tensorgrößen nach der Anzahl der zu ihrer Beschreibung benötigten Koordinatensysteme vorgenommen werden kann.

- Stufe 0:  $3^0 = 1$  Maßzahl, keine Basis z.B.: Temperatur
- Stufe 1:  $3^1 = 3$  Maßzahlen, eine Basis z.B.: Kraftfeld
- Stufe 2:  $3^2 = 9$  Maßzahlen, zwei Basen z.B.: Dehnungsfeld
- Stufe 3:  $3^3 = 27$  Maßzahlen, drei Basen z.B.: Levi-Civita-Symbole
- Stufe 4:  $3^4 = 81$  Maßzahlen, vier Basen z.B.: Materialtensor

### A.4.1. Notation und Summationskonvention

Um die in dieser Arbeit verwendeten Darstellungs- und Summationskonventionen zu erläutern, betrachten wir nochmals das Beispiel des Kraftfeldes aus dem vorhergegangenen Abschnitt.

Eine Kraft kann im dreidimensionalen Raum als Summe dreier linear unabhängiger Vektoren in Kombination mit drei Maßzahlen, dargestellt werden.

$$\mathbf{F} = F_1 \mathbf{e}^1 + F_2 \mathbf{e}^2 + F_3 \mathbf{e}^3 = \sum_{i=1}^3 F_i \mathbf{e}^i \quad (\text{A.19})$$

Die Vektoren  $\mathbf{e}^i$  heißen Basisvektoren oder einfach Basis des Tensors  $\mathbf{F}$ . Die skalaren Maßzahlen  $F_i$  heißen Koordinaten des Tensors  $\mathbf{f}$  und „bemessen“ ihn in der Basis  $\mathbf{e}^i$ .

Wendet man nun die nach Einstein benannte Summationskonvention an, so darf das Summenzeichen weggelassen werden, da hier die Vereinbarung getroffen wird, dass über ein sogenanntes stummes Indexpaar, welches aus einem hoch- und einem tiefgestellten Index gebildet wird, von 1-3 summiert wird. Die so entstehende Darstellung

$$\mathbf{F} = F_i \mathbf{e}^i \quad (\text{A.20})$$

nennt man Indexschreibweise des Tensors. Weitere Beispiele zur Indexschreibweise und Summationskonvention werden an anderer Stelle, bei der Einführung entsprechender Größen, gegeben.

### A.4.2. Duale Basen und Metriktensoren

In den oben stehenden Tensorgleichungen wurden bereits hoch- und tiefgestellte Indizes verwendet. Es folgt nun die Erläuterung, warum diese Unterscheidung bei der Verwendung allgemeiner Basissysteme notwendig und in dieser Arbeit, bei der sämtliche Betrachtungen im  $\mathbb{R}^3$  durchgeführt werden, sinnvoll ist.

Es sei  $\mathbf{e}_i$  eine beliebige Basis des  $\mathbb{R}^3$  bestehend aus drei Basisvektoren. Wird durch jeweils zwei ihrer drei Basisvektoren mit Hilfe des aus der Vektorrechnung bekannten Kreuzproduktes ein orthogonaler Vektor gebildet, so lassen sich auf diese Weise drei Normalenvektoren bestimmen, welche die zu  $\mathbf{e}_i$  duale Basis  $\mathbf{e}^j$  bilden. Die Länge der drei neu gebildeten Vektoren, wird durch die Orthonormalitätsbedingung

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}^j = \delta_i^j \quad (\text{A.21})$$

festgelegt. Mit  $\delta_i^j$  dem Kronecker-Delta, welches folgende Eigenschaften aufweist:

$$\delta_i^j = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad (\text{A.22})$$

Die Ausgangsbasis  $\mathbf{e}_i$  wird als kovariante Basis und die dazu duale Basis  $\mathbf{e}^j$  als kontravariante Basis bezeichnet.

Der Wechsel zwischen den dualen Basissystemen erfolgt mit Hilfe der sogenannten Metriktensoren  $g_{ij}$ . Diese enthalten alle Skalarprodukte der Basisvektoren untereinander.

$$g_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j \quad (\text{A.23})$$

D.h. auf der Diagonalen stehen die Quadrate der Längen der Basisvektoren während die Nebendiagonaleinträge neben dem Betrag jeweils den Kosinus des durch zwei Basisvektoren eingeschlossenen Winkels enthalten. Es gilt:

$$\mathbf{e}_i = g_{ij} \mathbf{e}^j \quad (\text{A.24})$$

Der Beweis dieser Beziehung zusammen mit weiterführenden Erläuterungen ist in [32] zu finden.

Es ist einzusehen, dass im Falle von orthonormalen Basissystemen des  $\mathbb{R}^3$  die Metrik-

tensoren gerade dem Kronecker-Delta entsprechen, da die Beträge der Basisvektoren auf der Diagonalen gleich 1 sind und die Skalarprodukte auf den Nebendiagonalen gleich Null werden, da alle Basisvektoren orthogonal aufeinander stehen. Damit folgt weiter, dass ko- und kontravariante Basis gleich sind und somit die Hoch- und Tiefstellung der Indizes eigentlich vernachlässigt werden kann. In dieser Arbeit wird dies jedoch nicht getan, da die Einhaltung dieser Formulierung wesentliche Vorteile in der Lesbarkeit sowie Überprüfbarkeit von Tensorbeziehungen in Indexschreibweise mit sich bringt. So ist durch die Einhaltung der ko- und kontravarianten Indizierung die Einstein'sche Summationskonvention besser zu erkennen, und Fehler bezüglich der Indizierung fallen ebenfalls wesentlich besser ins Auge als bei durchgehend tiefgestellter Indizierung.

### A.4.3. Verknüpfung von Tensoren

Die Tensoralgebra kennt neben den Basisoperationen, Addition, Subtraktion und Multiplikation mit einem skalaren Faktor, welche komponentenweise erklärt sind, auch mehrere multiplikative Verknüpfungen, die nachfolgend erläutert werden.

#### A.4.3.1. Tensorielles Produkt

Das tensorielle Produkt wird gebildet, indem jede Koordinate des einen Tensors mit jeder Koordinate des anderen Tensors unter Einhaltung der Reihenfolge multipliziert wird. Aus zwei Tensoren der Stufe  $n$  wird so ein Tensor der Stufe  $2n$ . Die Verknüpfung wird durch das Symbol  $\otimes$  dargestellt.

**Beispiel 1:**

$$\mathbf{a} = \mathbf{u} \otimes \mathbf{v} = u^i \mathbf{e}_i \otimes v^j \mathbf{e}_j = u^i v^j \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j = a^{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$$

Anschaulich bedeutet diese Beispiel die Kombination der beiden Tensoren erster Stufe, die nur eine Dimension zu ihrer Darstellung benötigen, zu einem Tensor zweiter Stufe der in einem Vektorraum beschrieben wird, der von den beiden Basisvektoren der kombinierten Tensoren erster Stufe aufgespannt wird.

**Beispiel 2:**

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = A^{ij} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \otimes B^{mn} (\mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n) = C^{ijmn} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n)$$

Ein weiteres Beispiel für ein tensorielles Produkt ist der Gradient des Ortsvektors  $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_3]^T$  eines Vektorraumes  $V \subseteq \mathbb{R}^3$ , der im weiteren Verlauf noch Verwendung

finden wird.

$$\begin{aligned}
\nabla \otimes \mathbf{x} &= (\nabla_i \mathbf{e}^i) \otimes (x_j \mathbf{e}^j) \\
&= \nabla_i x_j \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \\
\nabla \otimes \mathbf{x} &= \mathcal{I}^{(2)}
\end{aligned} \tag{A.25}$$

Mit  $\mathcal{I}^{(2)}$  dem Einheitstensor zweiter Stufe, der das neutrale Element der Multiplikation bzw. Tensorverknüpfung darstellt und wie folgt definiert ist:

$$\mathcal{I}^{(2)} = \mathcal{I}_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \tag{A.26}$$

Dies bedeutet, der Einheitstensor zweiter Stufe hat die gleichen Koordinaten wie das Kronecker-Delta, besitzt im Gegensatz zu diesem jedoch 2 Basissysteme. In Gl. (A.25) findet des Weiteren der Nablaoperator  $\nabla$  Verwendung, der wie üblich definiert ist.

$$\nabla = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{bmatrix} \tag{A.27}$$

#### A.4.3.2. Einfach verjüngendes Produkt

Seien  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$  zwei Tensoren, so wird das verjüngende Produkt nach dem folgenden Schema gebildet:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} &= (A_{ij\dots m} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^m) \cdot (B_{kl\dots n} \mathbf{e}^k \otimes \mathbf{e}^l \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^n) \\
&= A_{ij\dots m} B_{kl\dots n} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \dots \otimes (\mathbf{e}^m \cdot \mathbf{e}^k) \otimes \mathbf{e}^l \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^n \\
&= A_{ij\dots m} B_{kl\dots n} g^{mk} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^{m-1} \otimes \mathbf{e}^l \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^n \\
\mathbf{C} &= A_{ij\dots m-1}{}^k B_{kl\dots n} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^{m-1} \otimes \mathbf{e}^l \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^n
\end{aligned} \tag{A.28}$$

Dies bedeutet, zwischen den beiden angrenzenden Koordinatenvektoren wird das Skalarprodukt gebildet. Das verjüngende Produkt reduziert also die Summe der Stufen der beteiligten Tensoren  $m + n$  um 2 und entspricht, falls  $A$  und  $B$  die Stufe 1 besitzen, dem aus der Vektorrechnung bekannten Skalarprodukt.

Es sei noch angemerkt, dass die Verjüngung im allgemeinen nicht kommutativ ist. Im Falle der Verjüngung eines Tensors erster Stufe  $a_i$  mit einem Tensor zweiter Stufe  $b_{jk}$  ist die Kommutativität nur gegeben, falls es sich bei  $b_{jk}$  um einen symmetrischen

Tensor handelt, also gilt  $b_{jk} = b_{kj}$ .

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_{jk} \mathbf{e}^i \cdot \mathbf{e}^j \otimes \mathbf{e}^k \quad \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} = b_{jk} a_i \mathbf{e}^j \otimes \mathbf{e}^k \cdot \mathbf{e}^i \quad (\text{A.29})$$

$$= a_i b_{jk} g^{ij} \mathbf{e}^k \quad = b_{jk} a_i g^{ki} \mathbf{e}^j \quad (\text{A.30})$$

$$= a^j b_{jk} \mathbf{e}^k \quad = b_{jk} a^k \mathbf{e}^j \quad (\text{A.31})$$

### A.4.3.3. Zweifach verjüngendes Produkt

Seien  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$  zwei Tensoren, so wird das zweifach verjüngende Produkt, welches der aufeinander folgenden Ausführung von zwei einfach verjüngenden Produkten entspricht, nach dem folgenden Schema gebildet:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} : \mathbf{B} &= (A_{ij\dots m} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^m) : (B_{op\dots s} \mathbf{e}^o \otimes \mathbf{e}^p \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^s) \\ &= A_{ij\dots m} B_{op\dots s} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \dots \otimes (\mathbf{e}^{m-1} \cdot \mathbf{e}^o) (\mathbf{e}^m \cdot \mathbf{e}^p) \otimes \mathbf{e}^q \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^s \\ &= A_{ij\dots m} B_{op\dots s} g^{m-1o} g^{mp} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^{m-2} \otimes \mathbf{e}^q \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^s \\ \mathbf{C} &= A_{ij\dots m-2}{}^{op} B_{op\dots n} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^{m-1} \otimes \mathbf{e}^q \otimes \dots \otimes \mathbf{e}^s \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Das Produkt ist nur für Tensoren der Stufe  $> 2$  definiert und es wird in dieser Arbeit ausschließlich nach dem angegebenen Schema gebildet. Es sei jedoch angemerkt, dass auch jede andere Kombination von Skalarprodukten der beteiligten Basen denkbar und deren Ergebnis im Falle nicht orthonormaler Basissysteme ungleich dem Ergebnis des hier angegebenen Schemas wäre.

### A.4.3.4. Transformation von Tensoren

Es seien die kovarianten Koordinaten  $a_i$  eines Tensors in der Basis  $\mathbf{e}^i$  bekannt. Gesucht seien die kovarianten Koordinaten  $A_J$  in der Basis  $\mathbf{E}^J$ .

$$\mathbf{a} = a_i \mathbf{e}^i = A_J \mathbf{E}^J \quad (\text{A.33})$$

Multiplikation von links mit der kovarianten Basis  $\mathbf{E}_K$  legt die gesuchten Koordinaten frei

$$\mathbf{E}_K \mathbf{a} = \begin{cases} a_i (\mathbf{E}_K \cdot \mathbf{e}^i) & = a_i c_K^i \\ A_J (\mathbf{E}_K \cdot \mathbf{E}^J) & = A_J \delta_K^J = A_K \end{cases} \quad (\text{A.34})$$

$$A_K = a_i c_K^i \quad (\text{A.35})$$

Mit  $c_K^i$  der Lineartransformation, welche die Koordinaten  $a_i$  der Basis  $\mathbf{e}^i$  in die Koordinaten  $A_K$  der Basis  $\mathbf{E}^K$  transformiert.



**Beispiel für die Transformation von Tensoren höherer Stufe:**

Es seien die kovarianten Koordinaten  $a_{ij}$  eines Tensors in den Basen  $\mathbf{e}^i$  und  $\mathbf{e}^j$  bekannt. Gesucht seien die kovarianten Koordinaten  $A_{MN}$  in den Basen  $\mathbf{E}^M$  und  $\mathbf{E}^N$ .

$$\mathbf{a} = a_{ij} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j = A_{MN} \mathbf{E}^M \otimes \mathbf{E}^N$$

Multiplikation von links mit der zu  $\mathbf{E}^M$  dualen Basis  $\mathbf{E}_K$  lässt die erste Basis bei den gesuchten Koordinaten verschwinden

$$\mathbf{E}_K \mathbf{a} = \begin{cases} a_{ij} (\mathbf{E}_K \cdot \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j) & = a_{ij} c_K^i \mathbf{e}^j \\ A_{MN} (\mathbf{E}_K \cdot \mathbf{E}^M \otimes \mathbf{E}^N) & = A_{MN} \delta_K^M \mathbf{E}^N \end{cases}$$

Die weitere Multiplikation von links mit der zu  $\mathbf{E}^N$  dualen Basis  $\mathbf{E}_L$  legt die gesuchten Koordinaten vollständig frei.

$$\mathbf{E}_L \mathbf{a} = \begin{cases} a_{ij} c_K^i (\mathbf{E}_L \cdot \mathbf{e}^j) & = a_{ij} c_K^i c_L^j \\ A_{MN} \delta_K^M (\mathbf{E}_L \cdot \mathbf{E}^N) & = A_{MN} \delta_K^M \delta_L^N = A_{KL} \end{cases}$$

$$A_{KL} = a_{ij} c_K^i c_L^j$$



---

## B. Explizite Elementsteifigkeit - HEXE-8

An dieser Stelle wird die Steifigkeitsmatrix eines Hexaeder Elementes mit acht Knoten an den Ecken des Elementes, mit anderen Worten eines klassischen HEXE-8 Elementes, angegeben. Dies soll in dieser Arbeit folgenden Untersuchung die Analyse der in den Daten der elektronischen Anhangen angegeben effektiven Steifigkeitsmatrizen der drei untersuchten Zerlegungsgrößen erleichtern da initiale, im Rahmen dieser Arbeit durchgefohrte Untersuchungen zeigten, das eine Auswertung der Eigenschaften der berechneten effektiven numerischen Steifigkeitsmatrizen gegenuber ihren analytischen Gegenstucken sinnvoll erscheint. Die Ableitung der Matrix erfolgt in Abschnitt 2.2.7. Sie kann nach Gl. (2.100) in Submatrizenschreibweise wie folgt formuliert werden:

$$\underline{\mathbf{K}}_{HEXE-8} = \frac{E}{3a(\nu + 1)(1 - 2\nu)} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{K}}_{11}(\nu) & \underline{\mathbf{K}}_{12}(\nu) & \underline{\mathbf{K}}_{13}(\nu) \\ \underline{\mathbf{K}}_{21}(\nu) & \underline{\mathbf{K}}_{22}(\nu) & \underline{\mathbf{K}}_{23}(\nu) \\ \underline{\mathbf{K}}_{31}(\nu) & \underline{\mathbf{K}}_{32}(\nu) & \underline{\mathbf{K}}_{33}(\nu) \end{bmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Die Submatrizen  $\underline{\mathbf{K}}_{ij}$  lauten dabei wie folgt:

$$\underline{\mathbf{K}}_{11}(\nu) = \begin{bmatrix} -\frac{6\nu-4}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{3\nu-1}{6} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{3\nu-2}{6} \\ \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} \\ \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} \\ \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{3\nu-2}{6} & -\frac{1}{3} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} \\ \frac{3\nu-2}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & -\frac{1}{3} \\ \frac{3\nu-1}{6} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & -\frac{6\nu-4}{3} \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

$$\underline{\mathbf{K}}_{12}(\nu) = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} \\ -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} \\ \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} \\ -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} \\ \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad (\text{B.3})$$

$$\underline{\mathbf{K}}_{13}(\nu) = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} \\ -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} \\ -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} \\ \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} \\ -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} \\ \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

$$\underline{\mathbf{K}}_{21}(\nu) = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} \\ \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} \\ -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} \\ -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} \\ \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} \\ -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad (\text{B.5})$$

$$\underline{\mathbf{K}}_{22}(\nu) = \begin{bmatrix} -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} \\ \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} \\ \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} \\ -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} \\ \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} \\ \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

$$\underline{\mathbf{K}}_{23}(\nu) = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} \\ -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} \\ -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} \\ \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} \\ \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} \\ -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad (\text{B.7})$$

$$\underline{\mathbf{K}}_{31}(\nu) = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} \\ \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} \\ \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} \\ -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} \\ -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} \\ -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} \\ -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad (\text{B.8})$$

$$\underline{\mathbf{K}}_{32}(\nu) = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} \\ \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} \\ \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} \\ -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} \\ -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} \\ -\frac{1}{8} & -\frac{1}{4} & \frac{4\nu-1}{4} & \frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{8} & -\frac{4\nu-1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{8} & \frac{4\nu-1}{8} & \frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{4} & -\frac{4\nu-1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad (\text{B.9})$$

$$\underline{\mathbf{K}}_{33}(\nu) = \begin{bmatrix} -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} \\ \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} \\ \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} \\ \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} \\ \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} \\ \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{6\nu-5}{12} & \frac{3\nu-2}{6} & \frac{6\nu-5}{12} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{3\nu-1}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{6\nu-4}{3} \end{bmatrix} \quad (\text{B.10})$$

## C. Elementare Verschiebungsmoden

An dieser Stelle werden die in Abschnitt 2.2.7 definierten Verschiebungsmoden zur Berechnung der effektiven numerischen Steifigkeitsmatrix mit linearem Ansatz explizit angegeben. Es gilt dabei die in Abb. C.1 angegebenen Definitionen bezüglich Knotennummerierung des Elementes und Sortierung der Freiheitsgrade in den Vektor der Knotenverschiebungen zu beachten.

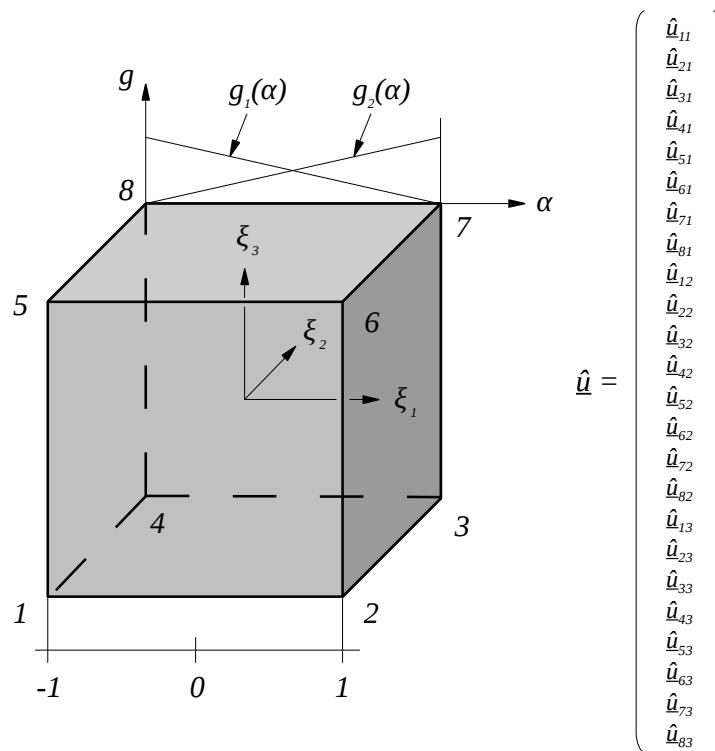
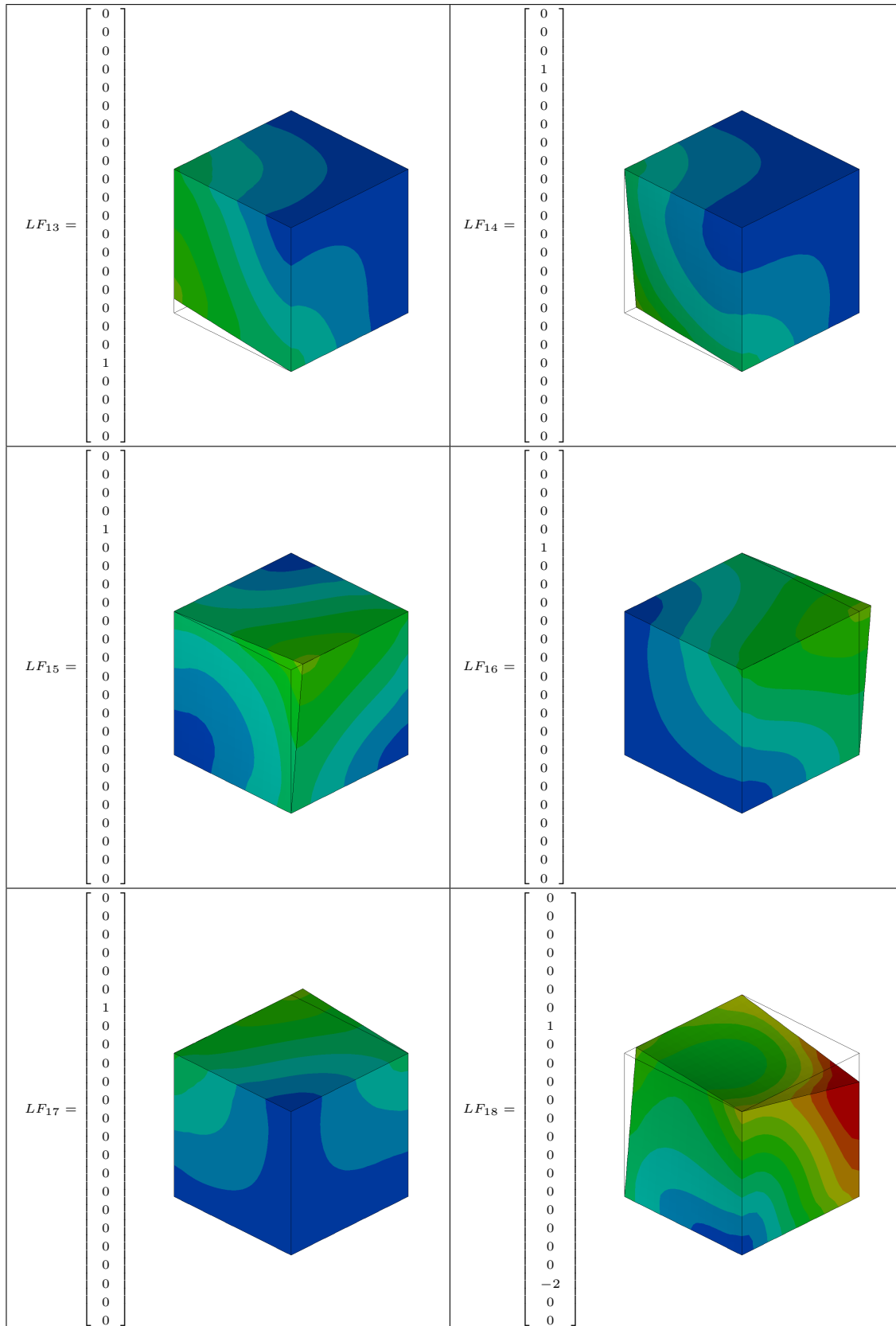


Abb. C.1: Definitionen am HEXE-8 Element













---

## D. Antragsschreiben Ethikkommission

### **Erstellung eines anisotropen Materialmodells für Knochen**

Ziel dieser Studie ist die Erstellung eines anisotropen Materialmodells für Knochen. Das Modell soll auf klinische Computertomographieaufnahmen (CT-Aufnahmen) anwendbar sein, und Materialdaten für die biomechanische Simulation von Knochen-Implantat-Systemen wie z.B. intramedullären Femurnägeln liefern.

Simulationen dieser Art verwenden aktuell Berechnungsgitter, bei welchen die einzelnen Elemente eine Kantenlänge zwischen  $1\text{mm}$  und  $2\text{mm}$  aufweisen. Diese Auflösung entspricht auch derjenigen, die mit aktuellen CT-Apparaten erreicht werden kann.

Um mit biomechanischen Simulationen hinreichend genaue Ergebnisse zu erzielen, ist ein Materialmodell, welches anisotrope Materialdaten in der korrekten Auflösung sowie in Abhängigkeit klinischer Ct-Daten liefert, unerlässlich. Ein solches Modell ist jedoch nicht verfügbar.

Zur Entwicklung des Modells sind folgende Schritte vorgesehen:

#### **1. Klinische CT-Aufnahme**

Zunächst werden klinische CT-Aufnahmen der zu untersuchenden Knochenstrukturen mit einer in der Traumadiagnostik üblichen Bestrahlungsdosis angefertigt. Diese Aufnahmen werden mit der höchst möglichen Auflösung rekonstruiert und in Form von DICOM-Datensätzen abgespeichert.

#### **2. Micro-CT Aufnahme**

Nach der klinischen CT wird eine Micro-CT Aufnahme der Knochenstrukturen angefertigt. Dieses Bildgebungsverfahren weist eine Auflösung im Sub-Millimeter Bereich auf und ermöglicht so die detaillierte Darstellung der Mikrostruktur der Spongiosa.

#### **3. Mechanische Analyse**

Die Micro-CT Aufnahme wird nun virtuell in Probewürfel der Kantenlänge  $1\text{mm} - 2\text{mm}$  zerlegt. Jeder Würfel wird separat in ein Finite-Element-Modell überführt, welches in der Simulation 6 Lastfällen unterworfen wird. Aus den Ergebnissen dieser Simulationen lässt sich für jeden Würfel die sogenannte mittlere

re anisotrope Steifigkeitsmatrix mit Hilfe des direkten mechanischen Ansatzes berechnen.

4. **Ableitung des Materialmodells** Wird nun die Klinische CT-Aufnahme so transformiert, dass die enthaltene Knochenstruktur die gleiche räumliche Lage aufweist wie in der Micro-CT Aufnahme, so kann ein direkter Vergleich der beiden Datenfelder, klinische CT-Dichte und Feld der anisotropen Steifigkeitsmatrizen, vorgenommen werden. Aus diesem Vergleich soll im folgenden eine generelle Beziehung zwischen klinischen CT-Dichten und anisotropen Steifigkeitsmatrizen abgeleitet werden.

Eine solche Beziehung würde es ermöglichen aus einer klinischen CT-Aufnahme ein biomechanisches Finite-Element Simulationsmodell mit einer patientenspezifischen anisotropen Steifigkeitsverteilung zu erstellen.

Die Entwicklung der beschriebenen Prozedur soll an an einem menschlichen Femurkopf vorgenommen werden, welcher nach der Implantation einer Hüftendoprothese keine weitere Verwendung findet.

Um die Prozedur nach ihrer Entwicklung zunächst in begrenztem Rahmen statistisch zu untersuchen sollen weitere 5 menschliche Femurköpfe ebenfalls aus der Implantation von Hüftendoprothesen untersucht werden.

Ich würde Sie hiermit bitten, der Verwendung von 6 menschlichen Femurköpfen aus der Implantation von Hüftendoprothesen zum Zwecke der Durchführung des beschriebenen Projektes zu zustimmen.

---

## E. Multivariate Statistik mit R

An dieser Stelle werden einige grundlegende Befehle der statistischen Programmiersprache R, die Funktion `plot_comp_relations` sowie das Vorgehen bei der Cluster- und Diskriminanzanalyse mit `mclust` angegeben. Dies soll den Einstieg in die Verwendung der in den elektronischen Anhängen angefügten R-Datensätzen und Objekten sowie die Reproduktion der ebenfalls in den elektronischen Anhängen dieser Arbeit angegebenen Scatterplotmatrizen ermöglichen.

Für eine sehr anschauliche Einführung in die statische Programmiersprache R sei [83] empfohlen, dass auch für die Erarbeitung weiter Teile der in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse von sehr großem Nutzen war.

### E.1. Grundlegende Befehle

- Laden eines Objektes: `load("filename")`
- Auflisten der aktuell im Workspace geladenen Objekte: `ls()`
- Anzeigen der Struktur eines Objektes: `str(object)`
- Anzeigen der Klasse eines Objektes: `class(object)`
- Anzeigen der in einem Objekt enthaltenen Benennungen: `names(object)`
- Anzeigen (ausdrucken) eines Objektes: `object`
- Löschen eines Objektes aus dem Workspace: `rm(object)`
- Anzeigen der Dimensionen mehrdimensionaler Objekte wie Matrizen oder Data Frames: `dim(object)`
- Anzeigen der Länge eindimensionaler Objekte (Vektoren): `len(object)`
- Kombination eindimensionaler Objekte (Vektoren):
  - Zu einem Vektor: `a<-c(object,object,...)`
  - Spaltenweise zu einer Matrix: `a<-cbind(object,object,...)`

- Zeilenweise zu einer Matrix: `a<-rbind(object,object,...)`
- Zugriff auf:
  - Spalten 3 bis 6 und 9 eines Data Frame: `my.frame[,c(3:6,9)]`
  - Benannte Spalten eines Data Frames: `my.frame[,c("ID","Age")]`
  - Einzelne Spalte eines Data Frames: `my.frame$ID`
- Laden einer CSV-Datei <sup>1</sup>: `my.frame <- read.csv(filename)`  
Gibt einen Data Frame zurück.
- Schreiben einer CSV-Datei: `write.table("filename")`

## E.2. Scatterplotmatrizen

```
plot_comp_relations <- function(fs,comps,
                               col.thres=0.25,
                               cex.scale=1,
                               p.style="smoothScatter",
                               p.col=1,
                               p.cex=1,
                               p.pch=".",
                               subset=2,
                               local.minmax=F)
{
  #
  if (length(subset)!=nrow(fs)) {
    df<-fs
  } else {
    df<-fs[subset,]
  }
  #
  if (length(local.minmax)==2*length(comps)) {
    comps.min<-local.minmax[1,]
    comps.max<-local.minmax[2,]
    print(names(comps.max))
  } else {
    if (local.minmax) {
      comps.min<-apply(df,2,min)
    }
  }
}
```

---

<sup>1</sup>CSV: Comma Separated Values



```

        comps.max<-apply(df,2,max)
    } else {
        comps.min<-apply(fs,2,min)
        comps.max<-apply(fs,2,max)
    }
}
#
n<-length(comps)
#
o.par<-par
par( mar=c(1,1,1,1),
      family="serif",
      font=3, font.axis=3, font.lab=3, font.main=3,
      mfrow=c(n,n), lwd=0.5 )
#
tau<-cor.fk(df[,comps])
#
for (i in 1:n) {
  for (j in 1:n) {
    if (i==j) {
      lim.min<-min(df[,comps[i]])
      lim.max<-max(df[,comps[i]])
      plot(c(1,1), axes=F, col="white", xlab="",
            ylab="", xlim=c(0,2), ylim=c(0,2) )
      text(1,1,comps[i],cex=3*cex.scale)
    } else {
      if (i<j) {
        if (p.style == "smoothScatter") {
          smoothScatter(df[,c(comps[j], comps[i])],
                        pch='.', axes=F,
                        colramp=colorRampPalette(c("white","black")),
                        nbin=400,
                        xlim=c(comps.min[comps[j]],comps.max[comps[j]]),
                        ylim=c(comps.min[comps[i]],comps.max[comps[i]])
          )
        } else {
          plot(df[,c(comps[j],comps[i])],
              cex=p.cex, pch=p.pch, axes=F, col=p.col,
              xlim=c(comps.min[comps[j]],comps.max[comps[j]]),
              ylim=c(comps.min[comps[i]],comps.max[comps[i]]))
        }
      }
    }
  }
}

```

```
    }
    if ((j-i)==1) {
      axis(1)
      axis(2)
    }
    if (tau[j,i] > col.thres) {
      box(col=3,lwd=2)
    }
  } else {
    plot(c(1,1), axes=F, col="white", xlab="", ylab="",
          xlim=c(0,2), ylim=c(0,2))
    text(1, 1.5,
         bquote(italic(
           {paste(. (comps[j]),",",. (comps[i]))}
         )),
         cex=1.8*cex.scale)
    text(1, 0.5, round(tau[j,i],digits=2),
         cex=2.5*cex.scale)
    if (tau[j,i] > col.thres) {
      box(col=3,lwd=2)
    } else {
      box(col=1)
    }
  }
}
}
}
#
par(o.par)
}
```

### E.3. Cluster- und Diskriminanzanalyse mit mclust

Es wird im folgenden davon ausgegangen, dass die Komponenten der effektiven Steifigkeitsmatrizen als Spalten eines `data.frame` vorliegen, von dem eine Stichprobe mit 12000 Beobachtungen gezogen wird.

```
Cn.Ct.06.smpl<-Cn.Ct.06[sample(1:nrow(Cn.Ct.06),size=12000),]
```

Von dieser Stichprobe wird für die Komponenten der orthotropen Gruppe zunächst das BIC für die Gruppenanzahl  $G=5:10$  sowie das EEV Modell berechnet.

```
ortho.g.o <- c("S11.0", "S22.0", "S33.0", "S12.0", "S13.0", "S23.0",
             "S44.0", "S55.0", "S66.0")
```

```
Mclusters.06.12k.BIC <- mclustBIC(Cn.Ct.06.smpl[,ortho.g.o], G=5:10,
                                modelNames=c("EEV"))
```

Mit Hilfe der Funktion `plot.mclust.models` kann anschließend durch visuelle Kontrolle einer oder mehrerer Projektionsebenen die Anzahl von Gruppen ermittelt werden, welche die gewünschte Partitionierung ergibt. In den während dieser Arbeit durchgeführten Tests erwies sich das in Abschnitt 6.2.3.2 vorgestellte Vorgehen als in allen getesteten Fällen als zielführend.

Im folgenden Beispiel wird auf die  $S_{13}$ - $S_{12}$ -Koordinatenebene, d.h. die Koordinaten `plot1d=4` und `plot2d=5` projiziert. Dargestellt werden die Modelle `EEV` und `VEV`.

```
plot.mclust.models(BIC=Mclusters.06.12k.BIC, dat=Cn.Ct.06.smpl[,ortho.g.o],
                  models=c("EEV", "VEV"), plotd1=4, plotd2=5)
```

Ist ein geeignetes Modell und eine geeignete Anzahl von Komponenten gewählt, so kann aus der Wahl ein konkretes Modell abgeleitet werden.

```
Mclusters.06.12k.Model <- summary(Mclusters.06.12k.BIC,
                                data=Cn.Ct.06.smpl[,ortho.g.o],
                                modelNames="EEV", G=6)
```

Die durch das Modell erhaltene Klassifikation wird an die Daten der Stichprobe angefügt.

```
Cn.Ct.06.smpl$cl<-Mclusters.06.12k.Model$classification
```

Die in Abschnitt 6.2.3.2 verwendete Kolorierung kann mit Hilfe einer Farbtabelle erzeugt werden, die bei sechs Komponenten zunächst die folgende Form hat:

```
color_table<-c("blue", "green", "orange", "red", "purple", "gray")
```

Die Darstellung einer einzelnen 2D-Projektion kann mit folgendem Befehl vorgenommen werden:

```
coordProj(data=Cn.Ct.06.smpl[,ortho.g.o], dimens=c(4,5),
           parameters=Mclusters.06.12k.Model$parameters,
           z=Mclusters.06.12k.Model$z, CEX=0.5, colors=color_table)
```

Die Funktion `coordProj` erzeugt einen Scatterplot der partitionierten Daten in dem die multivariaten Gegenstücke der Standardabweichung für jede Komponente der Mischverteilung in Form von Ellipsen überlagert sind. Die Parameter der Ellipsen sind dabei wie folgt:

- Mittelpunkte : `Mclusters.06.10k.Model$parameters$mean`
- Länge der Halbachsen :

```
for (i in 1:no_clusters) {
  print(
    sqrt(eigen(
      Mclusters.06.10k.Model$parameters$variance$sigma[, ,i])$values
    ))
}
```

Für das Plotten von einer oder mehrerer Gruppen empfiehlt sich der gewöhnlich R-Scatterplot. Im folgenden Befehl werden beispielsweise die Gruppen 2, 5 und 6 nicht ausgegeben.

```
plot(Cn.Ct.06.smpl[
  ((Cn.Ct.06.smpl$c1!=2)&(Cn.Ct.06.smpl$c1!=5)&(Cn.Ct.06.smpl$c1!=6)),
  c("S12.0","S13.0"), cex=0.5, pch=16,
  col=color_table[Cn.Ct.06.smpl$c1[
  ((Cn.Ct.06.smpl$c1!=2)&(Cn.Ct.06.smpl$c1!=5)&(Cn.Ct.06.smpl$c1!=6))]
])
```

Zur finalen Klassifikation der Stichprobe wird eine neue Spalte an den Datensatz der Stichprobe angehängt

```
Cn.Ct.06.smpl$c1.f<-Cn.Ct.06.smpl$c1
```

und die zusammengehörenden Gruppen werden entsprechend umbenannt:

```
Cn.Ct.06.smpl$c1.f[Cn.Ct.06.smpl$c1==6]<-2
Cn.Ct.06.smpl$c1.f[Cn.Ct.06.smpl$c1==3]<-1
Cn.Ct.06.smpl$c1.f[Cn.Ct.06.smpl$c1==4]<-3
Cn.Ct.06.smpl$c1.f[Cn.Ct.06.smpl$c1==5]<-4
```

Mit Hilfe der Klassifikation der Stichprobe in 4 Gruppen wird ein Modell für die Diskriminanzanalyse (DA) erstellt

```
Mclusters.06.12k.DAModel <- MclustDA(Cn.Ct.06.smpl[,ortho.g.o],
                                     Cn.Ct.06.smpl$c1.f,modelType="EDDA",
                                     modelNames="EEV")
```

Mit Hilfe des DA Modells kann nun der vollständige Datensatz klassifiziert werden.

```
pred<-predict(Mclusters.06.12k.DAModel,Cn.Ct.06[,ortho.g.o])
```

---

## F. Mittlere Steifigkeitsmatrizen der Gesamtzerlegungen

### F.1. Mittlere Steifigkeitsmatrizen - 0,6 mm

Auf Monotropie optimierte Steifigkeitsmatrix:

$$\underline{C}_{eff,0,6,mono} = \begin{bmatrix} 246,1 & 130,6 & 126,6 & -0,9 & 0,5 & -0,3 \\ 130,1 & 362,9 & 155,8 & 0,7 & 0,4 & 0,3 \\ 126,0 & 155,6 & 452,5 & -0,2 & -0,4 & -0,2 \\ -0,9 & 0,7 & -0,2 & 179,3 & -0,4 & 0,6 \\ 0,5 & 0,4 & -0,4 & -0,4 & 166,1 & -0,2 \\ -0,3 & 0,3 & -0,2 & 0,6 & -0,2 & 210,1 \end{bmatrix} \quad (F.1)$$

Auf Orthotropie optimierte Steifigkeitsmatrix:

$$\underline{C}_{eff,0,6,ortho} = \begin{bmatrix} 232,3 & 124,4 & 114,2 & 0,5 & 0,7 & 0,0 \\ 123,8 & 388,9 & 153,3 & -0,2 & 0,1 & 0,6 \\ 113,5 & 153,1 & 482,7 & 0,1 & 0,0 & 0,3 \\ 0,5 & -0,2 & 0,1 & 167,2 & 0,0 & 0,2 \\ 0,7 & 0,1 & 0,0 & 0,0 & 144,5 & 0,1 \\ 0,0 & 0,5 & 0,3 & 0,2 & 0,1 & 201,5 \end{bmatrix} \quad (F.2)$$

### F.2. Mittlere Steifigkeitsmatrizen - 1,2 mm

Auf Monotropie optimierte Steifigkeitsmatrix:

$$\underline{C}_{eff,1,2,mono} = \begin{bmatrix} 372,5 & 195,6 & 200,0 & -1,6 & 0,7 & -2,3 \\ 195,1 & 524,0 & 235,1 & 1,5 & 1,4 & 2,0 \\ 199,2 & 234,7 & 674,8 & -0,2 & -0,6 & 1,1 \\ -1,6 & 1,5 & -0,2 & 254,4 & -3,2 & 2,2 \\ 0,7 & 1,4 & -0,6 & -3,2 & 259,3 & -0,6 \\ -2,3 & 2,1 & 1,1 & 2,2 & -0,6 & 320,0 \end{bmatrix} \quad (F.3)$$

Auf Orthotropie optimierte Steifigkeitsmatrix:

$$\underline{\mathbf{C}}_{eff,1,2,ortho} = \begin{bmatrix} 356,6 & 180,4 & 192,5 & -0,2 & 1,3 & 0,0 \\ 179,9 & 546,8 & 231,1 & 0,1 & 0,2 & 4,4 \\ 191,5 & 230,7 & 721,5 & 0,8 & -0,0 & 1,5 \\ -0,2 & 0,1 & 0,8 & 224,4 & -0,0 & 0,3 \\ 1,3 & 0,2 & -0,0 & -0,0 & 246,1 & 0,7 \\ -0,0 & 4,4 & 1,5 & 0,3 & 0,7 & 309,7 \end{bmatrix} \quad (\text{F.4})$$

### F.3. Mittlere Steifigkeitsmatrizen - 2,4 mm

Auf Monotropie optimierte Steifigkeitsmatrix:

$$\underline{\mathbf{C}}_{eff,2,4,mono} = \begin{bmatrix} 588,4 & 318,9 & 334,8 & -2,5 & 1,0 & -4,4 \\ 318,2 & 816,4 & 385,4 & 0,1 & 2,0 & 0,6 \\ 333,5 & 384,7 & 1098,8 & 4,5 & 1,2 & -0,6 \\ -2,5 & 0,1 & 4,5 & 389,3 & -6,2 & 3,1 \\ 0,9 & 2,0 & 1,2 & -6,2 & 416,0 & 4,2 \\ -4,4 & 0,7 & -0,6 & 3,1 & 4,2 & 504,2 \end{bmatrix} \quad (\text{F.5})$$

Auf Orthotropie optimierte Steifigkeitsmatrix:

$$\underline{\mathbf{C}}_{eff,2,4,ortho} = \begin{bmatrix} 565,7 & 282,9 & 325,0 & -5,0 & 0,6 & 0,2 \\ 282,2 & 833,1 & 389,1 & 0,3 & 0,6 & 6,8 \\ 323,3 & 388,1 & 1189,7 & 2,7 & -0,3 & -1,6 \\ -5,0 & 0,3 & 2,7 & 317,8 & 0,4 & 0,8 \\ 0,6 & 0,6 & -0,3 & 0,4 & 399,4 & 1,8 \\ 0,2 & 6,7 & -1,6 & 0,8 & 1,8 & 507,5 \end{bmatrix} \quad (\text{F.6})$$

# G. Scatterplots

## G.1. Zerlegungsgröße 0,6 mm

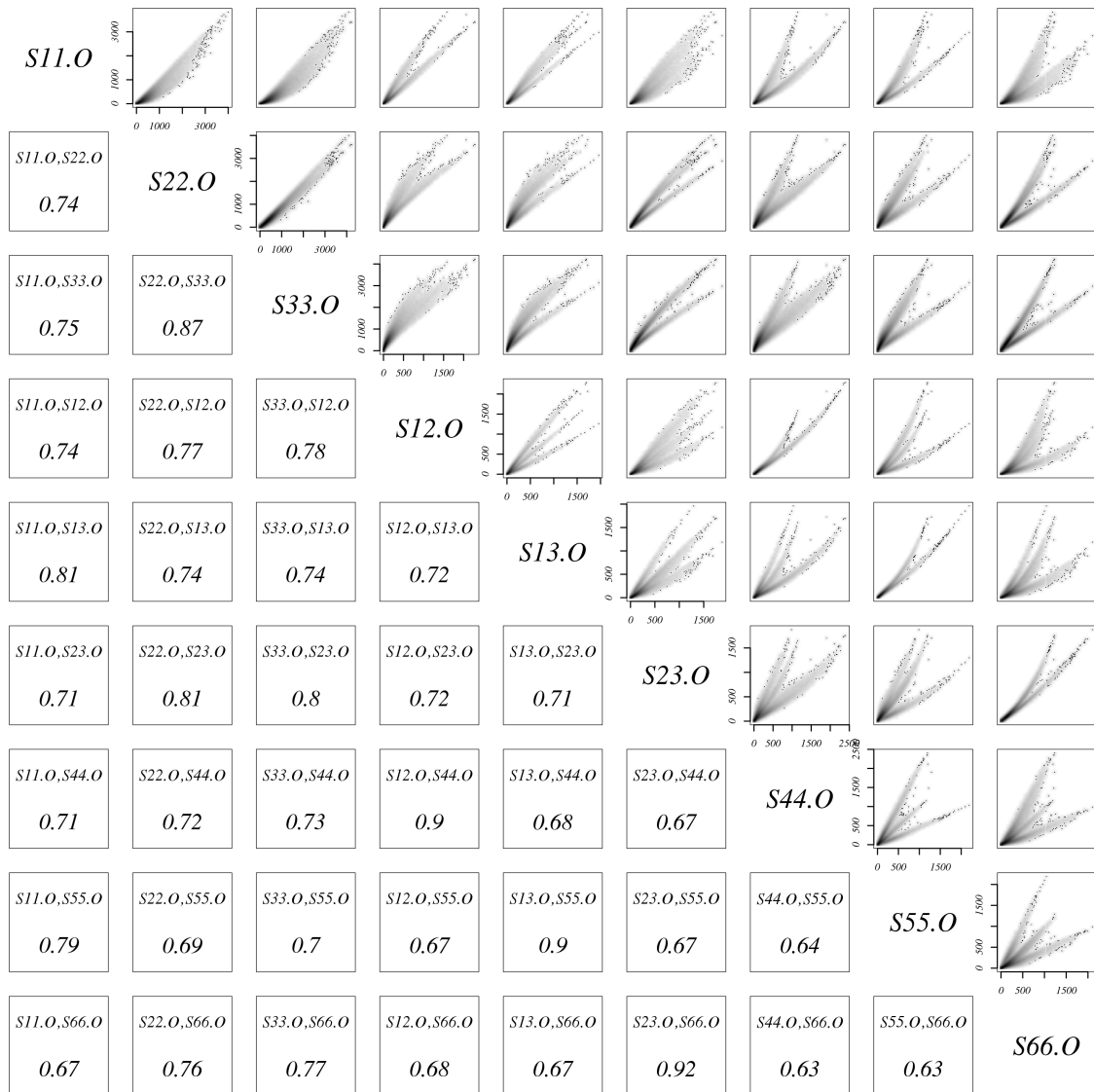


Abb. G.1: Korrelationen der Komponenten der orthotropen Gruppe der effektiven Steifigkeit für die Zerlegungsstufe 0,6 mm

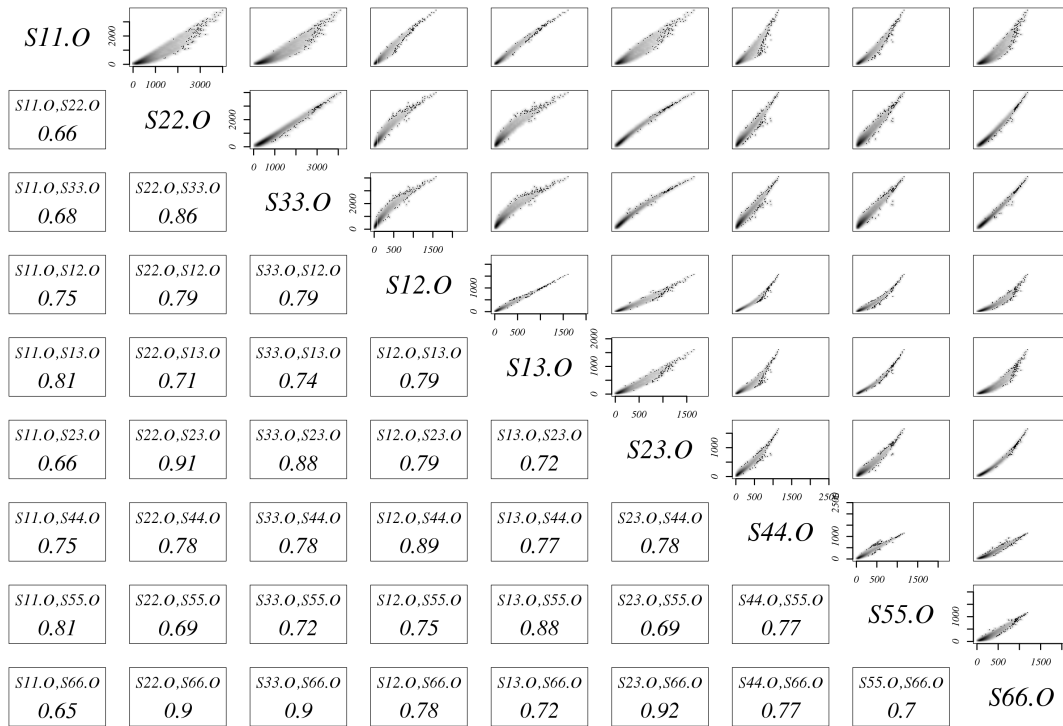


Abb. G.2: Gruppe G1 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 0,6 mm

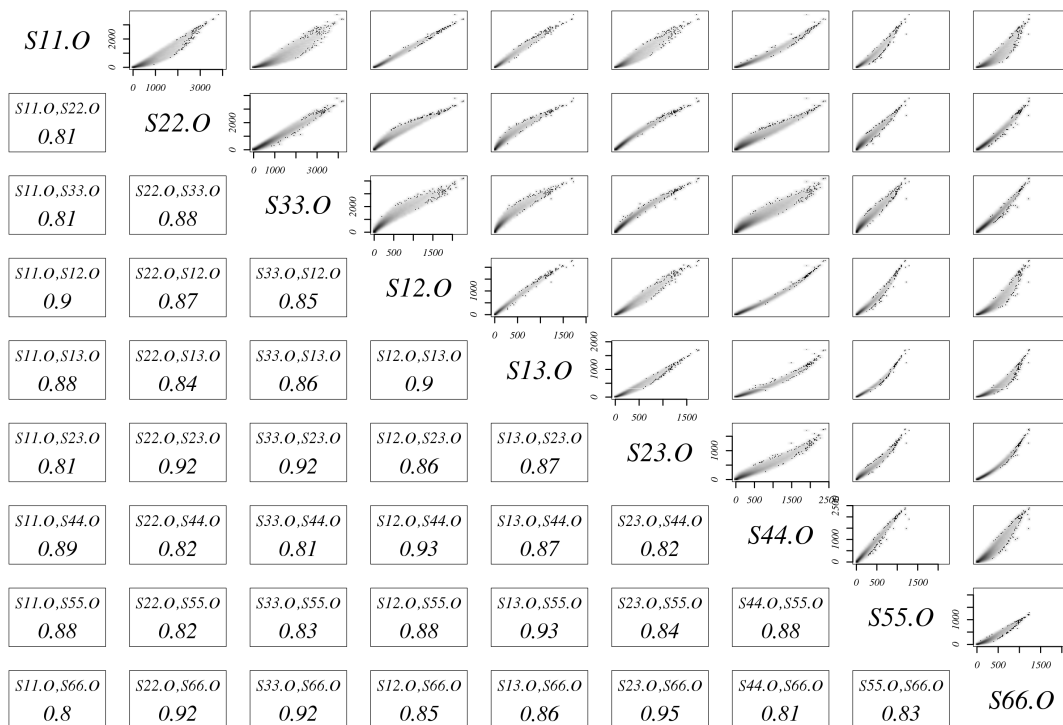


Abb. G.3: Gruppe G2 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 0,6 mm





## G.2. Zerlegungsgröße 1,2 mm

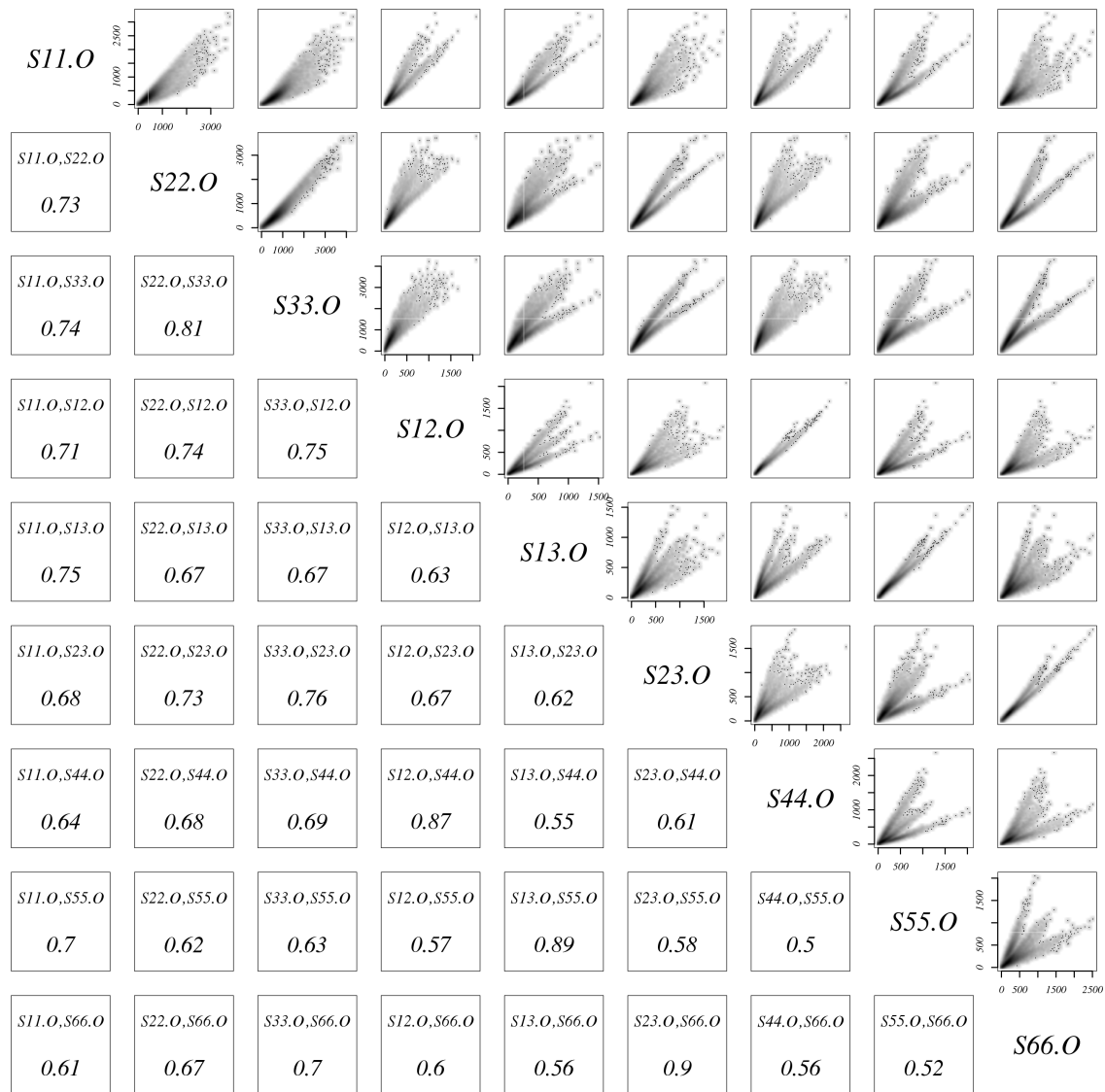


Abb. G.6: Korrelationen der Komponenten der orthotropen Gruppe der effektiven Steifigkeit für die Zerlegungsstufe 1,2 mm



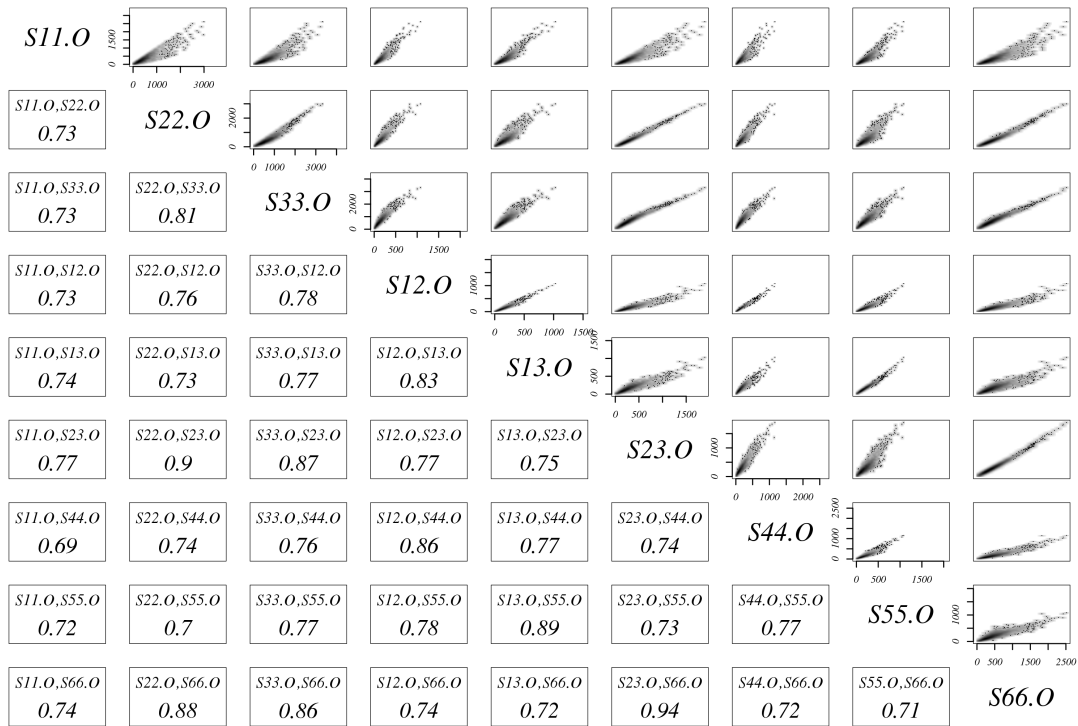


Abb. G.9: Gruppe G3 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 1,2 mm

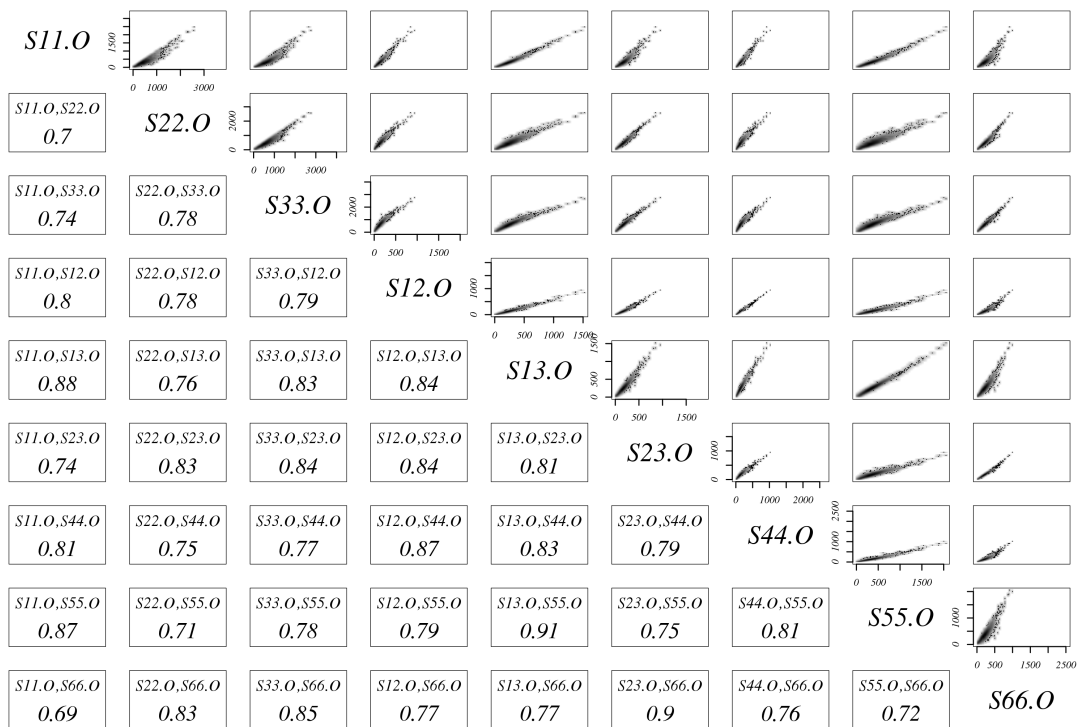


Abb. G.10: Gruppe G4 der Klassifikation von Zerlegungsstufe 1,2 mm

### G.3. Zerlegungsgröße 2,4 mm

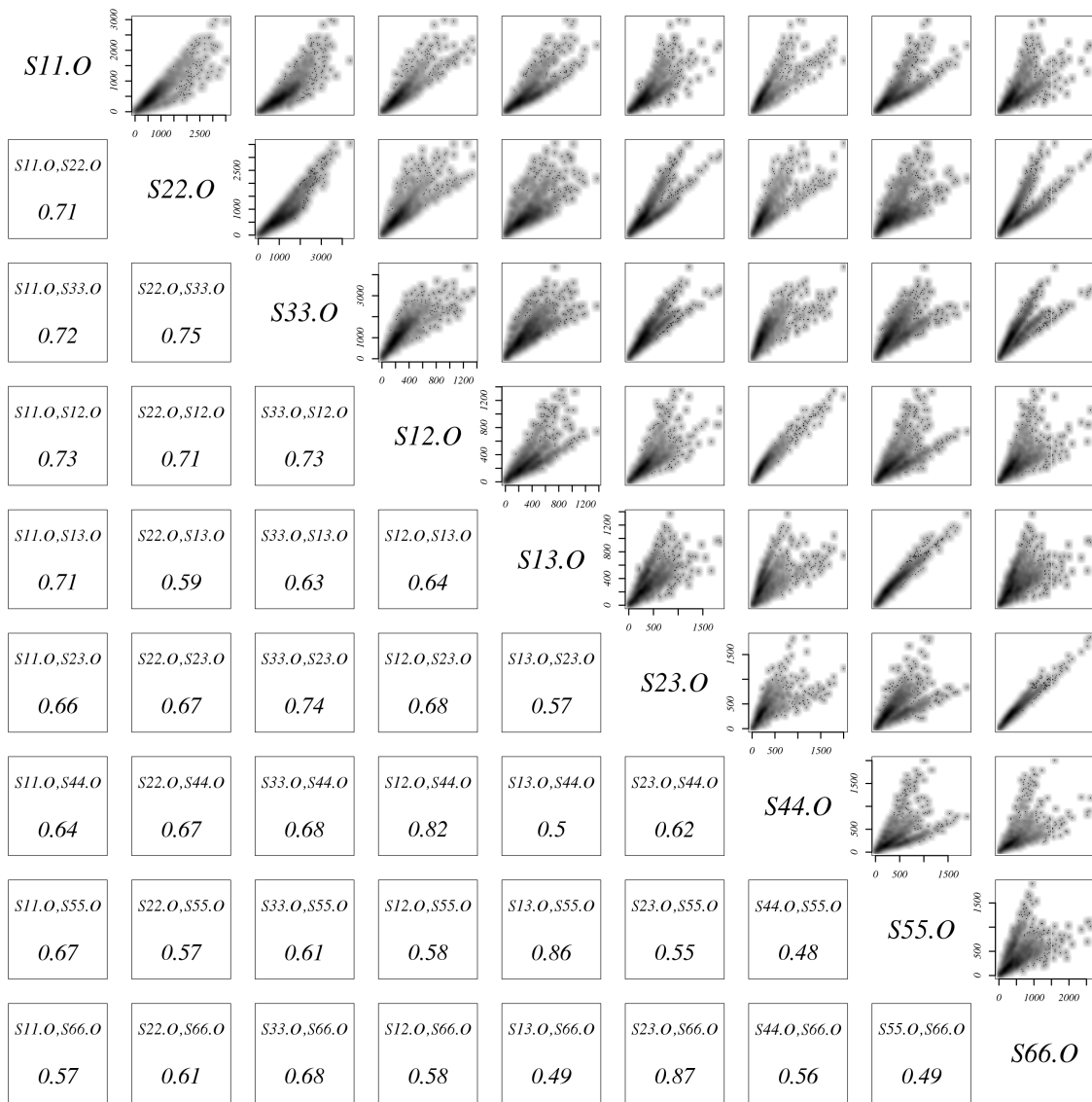


Abb. G.11: Korrelationen der Komponenten der orthotropen Gruppe der effektiven Steifigkeit für die Zerlegungsstufe 2,4 mm



