

Ein mechanisches Finite-Elemente-Modell des menschlichen Kopfes

Dissertation zur Erlangung des Grades
Dr. rer. nat.

der Fakultät für
Mathematik und Informatik
der Universität Leipzig

eingereicht von
Dipl. Phys. Ulrich Hartmann
geboren am 11. August 1969 in Oberhausen

angefertigt im
Arbeitsbereich Neurologie
(AG Bild- und Signalverarbeitung)
Max-Planck-Institut für
neuropsychologische Forschung in Leipzig

betreut von
Herrn Dr. F. Kruggel
AG Bild- und Signalverarbeitung,
Max-Planck-Institut für
neuropsychologische Forschung in Leipzig

Beschluß über die Verleihung des Doktorgrades vom
17.05.1999

Die Annahme der Dissertation haben empfohlen:

1. Prof. Dr. D.Y. von Cramon, Max-Planck-Institut für neuropsychologische
Forschung in Leipzig
2. Prof. Dr. D. Saupe, Universität Leipzig, Institut für Informatik
3. Prof. Dr. H.S. Stiehl, Universität Hamburg, Fachbereich Informatik

Bibliographische Beschreibung

Hartmann, Ulrich

Ein mechanisches Finite-Elemente-Modell des menschlichen Kopfes

Universität Leipzig, Diss.,

112 S., 129 Lit., 43 Abb., 3 Tab.

In dieser Arbeit wird ein dreidimensionales Modell des menschlichen Kopfes beschrieben, das es erlaubt, mit der Methode der Finiten Elemente mechanische Einflüsse auf den Kopf zu modellieren. Eine exakte Geometriebeschreibung eines individuellen Modells wird aus einem Kernspintomogramm des Kopfes gewonnen. Ausgehend von diesen medizinischen Bilddaten wird die diskrete Darstellung des Kopfes als Verbund finiter Elemente mit einem Gittergenerator gewonnen. Dieser schnelle und stabile Algorithmus ermöglicht die Erstellung von räumlich hochaufgelösten Finite-Elemente-Repräsentationen des Schädels und interner neuroanatomischer Strukturen. Es besteht die Auswahl zwischen anisotropen und isotropen Würfel- und Tetraedernetzen. Auf deren Basis werden die dem physikalischen Geschehen zugrundeliegenden Differentialgleichungen mittels der Finite-Elemente-Methode numerisch gelöst. Die FE-Analysen umfassen statische, dynamische und modale Simulationsrechnungen. Die zur Durchführung der Simulationen nötigen numerischen Verfahren wurden optimiert und auf einer parallelen Rechnerarchitektur implementiert. Jeder der oben genannten Analysearten ist eine klinisch-relevante Anwendung zugeordnet. Mit der nichtlinearen statischen Analyse werden die mechanischen Konsequenzen von Tumorwachstum untersucht, die dynamische Analyse dient dem Studium der Auswirkungen von fokalen Gewalteinwirkungen auf den Kopf und die modale Analyse gibt Aufschluß über das Schwingungsverhalten des Kopfes. Die Validierung des Modells wird durch den Vergleich von Simulationsergebnissen mit experimentell ermittelten Daten erzielt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Motivation und Konzept	1
1.2	Stand der Forschung	3
2	Vorverarbeitung	7
2.1	Definitionen	8
2.2	Segmentierung von MRT-Daten	12
2.2.1	Einführung	12
2.2.2	Der ISODATA-Algorithmus	12
2.2.3	Neuroanatomische Objekte aus “dual echo“-Datensätzen .	14
2.3	Netzgenerierung	15
2.3.1	Problemstellung	15
2.3.2	Der Algorithmus	17
2.3.3	Ergebnisse	23
3	Die Methode der finiten Elemente	27
3.1	Das Prinzip der virtuellen Verschiebungen	28
3.2	Herleitung der Finite-Elemente-Gleichungen	31
3.3	Das finite Würfelement	37
3.3.1	Die Verschiebungsinterpolationsmatrix H	39
3.3.2	Die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix B	39
3.3.3	Die Materialmatrix C	41
3.3.4	Numerische Integration	43
4	Numerische Verfahren	45
4.1	Aufbau der Strukturmatrizen	47
4.2	Die Methode der konjugierten Gradienten	48
4.2.1	Einführung	48

4.2.2	Theoretische Grundlagen	50
4.2.3	Skalierung und Vorkonditionierung	52
4.2.4	Parallelisierung	57
4.3	Die statische Analyse	59
4.3.1	Das Newton-Raphsonsche Schema	60
4.4	Die modale Analyse	62
4.4.1	Das Lanczos-Verfahren	62
4.5	Die dynamische Analyse	65
4.5.1	Die Newmarksche Methode	66
5	Anwendungen	69
5.1	Modellierung des Materialverhaltens	71
5.1.1	Allgemeine Betrachtungen	71
5.1.2	Festlegung der Parameter	74
5.2	Dynamische Simulationsrechnungen	75
5.2.1	Das Coup-Contrecoup-Phänomen	75
5.2.2	Validierung des Kopfmodells I	76
5.2.3	Okzipitale Krafteinwirkungen	80
5.2.4	Einfluß von Gehirnmembranen bei lateralen Schlägen	82
5.3	Modale Simulationsrechnungen	85
5.3.1	Einführung	85
5.3.2	Validierung des Kopfmodells II	86
5.3.3	Rotation und Scherspannungen	88
5.3.4	Die Diffuse Axonale Gehirnschädigung (DAI)	90
5.3.5	Eine hochfrequente Eigenmode des Gehirns	92
5.4	Nichtlinear-statische Simulationsrechnungen	93
5.4.1	Simulation eines Hirntumors	94
6	Zusammenfassung	99
	Literaturverzeichnis	112

Kapitel 1

Einführung

1.1 Motivation und Konzept

Bei fast 70 % aller Autounfälle mit Personenschäden werden Schädel und Gehirn verletzt [1]. Entsprechend wichtig ist es für die Behandlung eines solchen Schädel-Hirn-Traumas wie auch für die Entwicklung geeigneter Schutzvorrichtungen, die physikalischen Abläufe besser zu verstehen, die zu den Verletzungen führen. Zudem ist das Studium von strukturellen Veränderungen im Gehirn aufgrund *interner* mechanischer Einflüsse (z.B. ex-vacuo Erweiterungen der Ventrikel, intrazerebrale Blutungen, Tumorwachstum) von hohem medizinischen Interesse. Ein tiefere Einsicht in die Statodynamik des menschlichen Gehirns kann die Weiterentwicklung heutiger Therapieformen beeinflussen.

In der medizinischen Forschung gibt es seit langem histopathologische Fallstudien und experimentelle Untersuchungen, die sich mit den Mechanismen von Schädel-Hirnverletzungen beschäftigen [2, 3, 4, 5, 6, 7]. Parallel dazu wurden in den Ingenieur- und Computerwissenschaften Kopfmodelle entwickelt und getestet, die den zeitlichen Verlauf von Verformungen des Kopfes infolge von mechanischen Belastungen mathematisch oder physikalisch zu fassen versuchen [8, 9, 10, 11, 12].

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird ein neues mechanisches Gehirnmodell vorgestellt, das es erlaubt, die Auswirkungen sowohl interner als auch externer mechanischer Einflüsse zu studieren.

In diesem Zusammenhang lassen sich einige medizinisch motivierte Fragen formulieren, zu deren Beantwortung im Verlaufe dieser Arbeit beigetragen wird:

1. Wie breiten sich Deformationen und damit verbundene Spannungen im Gehirn infolge externer Einwirkungen (Kräfte, Beschleunigungen) aus?
2. Welche strukturellen Veränderungen ergeben sich im Gehirn aufgrund interner raumfordernder Prozesse?
3. Welche physikalischen Größen sind möglicherweise Indikatoren für eine erhöhte Verletzungswahrscheinlichkeit von Gehirngewebe?
4. Welchen Einfluß üben bestimmte neuroanatomische Strukturen auf die mechanische Systemantwort des Gehirns aus?
5. Welche Möglichkeiten der Modellvalidierung bestehen?
6. Was sind zukünftige Entwicklungslinien des Gehirnmodells?

Um die oben aufgelisteten Fragen angehen zu können, wird die aus der Ingenieurwissenschaft stammende Methode der Finiten Elemente (FEM) angewandt, um das mechanische Verhalten des menschlichen Kopfes zu modellieren. Im ersten Schritt des Modellaufbaus muß eine mathematische Formulierung des mechanischen Systems Kopf gefunden werden. Zu diesem Zweck wurde ein optimierter Netzgenerator entwickelt, der auf der Basis von Kernspintomogrammen diskrete Finite-Elemente-Repräsentationen des menschlichen Kopfes erstellt (siehe Kapitel 2). In Kapitel 3 wird die Finite-Elemente-Methode (FEM) allgemein aus dem Prinzip der virtuellen Verschiebungen hergeleitet und anhand eines speziellen Elements ihre Methodik konkretisiert. Zur Lösung der FE-Gleichungssysteme, die als Folge der Diskretisierung des Objekts entstehen, existiert eine Vielzahl von numerischen Strategien. Die mathematischen Grundlagen der Techniken, die zur Durchführung von FE-Analysen implementiert wurden, werden in Kapitel 4 dargestellt. Besonderes Gewicht nimmt hier die Methode der konjugierten Gradienten (Abschnitt 4.2) zur Lösung von linearen Gleichungssystemen ein. Da alle FE-Analysen innerhalb des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programmpakets auf sie zugreifen, ist ihre effiziente Implementierung auf einer parallelen Rechnerarchitektur notwendig, um Simulationsrechnungen mit räumlich hochaufgelösten FE-Netzen praktikabel zu machen. In Kapitel 5 wird für jede der drei genannten FE-Analysenmethoden eine Simulationsrechnung von klinischer Relevanz präsentiert, und die Ergebnisse des Modells werden validiert. Die Wahl der Materialparameter für Kopfgewebe wird an dieser Stelle in einem gesonderten Unterkapitel begründet (siehe

Abschnitt 5.1). In der abschließenden Diskussion (Kapitel 6) werden u.a. Entwicklungspfade aufgezeigt, die das Modell auf dem Weg zu einem klinischen Werkzeug noch zurückzulegen hat.

Vor der Beschreibung des biomechanischen FE-Modells soll eine Zusammenstellung und kritische Würdigung bestehender Gehirnmodelle vorgenommen werden.

1.2 Stand der Forschung

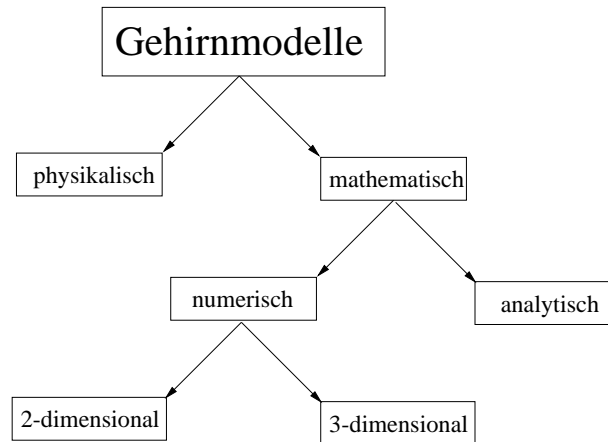


Abbildung 1.1: *Klassifizierung von Gehirnmodellen.*

Die Entwicklung von mechanischen Gehirnmodellen ist seit mehr als 50 Jahren Gegenstand der Forschung. Alle bis heute bekannten Modelle können in mathematische und physikalische unterteilt werden (siehe Abb. 1.1). Physikalische Modelle werden u.a. zur Validierung mathematischer Modellierungstechniken genutzt [13]. Die Untergruppe der mathematischen Gehirnmodelle gliedert sich abhängig von der Wahl der mathematischen Methode in analytische und numerische Modelle.

Die Erstellung des ersten analytischen Kopfmodells im Jahre 1943 wird Anzelius [14] zugeschrieben. Er berechnete die zeitliche Änderung des Drucks in einer kugelförmigen flüssigen Masse, die einer Beschleunigung ausgesetzt war. Seiner Analyse folgend wurde eine Reihe von einfachen Gehirnmodellen mit elastischen und viskoelastischen Materialien berechnet [15, 16, 17]. Exakte mathematische Lösungen der Gleichungen, die das Einwirken von Kräften auf den Kopf beschreiben, können jedoch nur bestimmt werden, wenn die Kopfform als

Kugel oder Ellipsoid idealisiert wird. Diese Restriktion und die Schwierigkeit, Gehirnstrukturen zu berücksichtigen, motivierte Mitte der Siebzigerjahre die Einführung numerischer Techniken zur approximativen Lösung der das physikalische Geschehen beschreibenden Differentialgleichungen. Shugar und Katona [18] wandten im Jahre 1975 die aus den Ingenieurwissenschaften stammende Methode der finiten Elemente an, um die Systemantwort zweidimensionaler Kopfmodelle zu untersuchen. Der Schädel wurde in ihrem Modell als geschichtete Struktur angenähert und das Gehirn als ideale Flüssigkeit interpretiert. Besonderer Nachdruck wurde auf die Untersuchung der aufgeprägten Schädeldeformation und der daraus resultierenden Druckänderungen im Gehirn gelegt. In zwei Übersichtsartikeln [19, 20], die den Fortschritt der Anwendung der FE-Methode auf die Biomechanik des Kopfes in den Jahren von 1975 bis 1992 beschreiben, findet man weitere zweidimensionale FE-Modelle ähnlicher Zielrichtung. Ihre Geometriebeschreibung beziehen diese 2D-Modelle aus sagittalen [21] oder koronaren [22] Schnitten durch das Gehirn, die entweder aus einem anatomischen Lehrbuch stammen [23] oder von einem bildgebenden Verfahren (MRT, CT) geliefert werden [24]. Der Vorteil der Reduzierung des Problems auf zwei Dimensionen ist, mit der gleichen Anzahl von Elementen eine im Vergleich zu einer 3D-Berechnung höhere Auflösung beim Diskretisieren des Raumes (siehe Abschnitt 2.3) zu erreichen. Die Anzahl von Elementen für die bisher zitierten Modelle bewegt sich in einem Bereich von 200 bis ca. 2000. Ein Nachteil zweidimensionaler Simulationsberechnungen ist zum einen, daß ihre Prämisse - die Symmetrie des Gehirns bezüglich der Schnittebene - nicht erfüllt ist und zum anderen der originär dreidimensionalen Natur der Ausbreitung von Deformationen im Kopf nicht Rechnung getragen werden kann.

Eines der ersten dreidimensionalen FE-Modelle, dessen Geometrie auf der Vermessung eines realen Schädels basiert, stellten Ward et al. [25] im Jahre 1975 vor. Aufgrund limitierender Faktoren wie Rechenzeit und Speicherkapazität sind die Ergebnisse dieses Modells numerisch ungenau. Bei einem Vergleich berechneter intrakranieller Druckänderungen mit gemessenen Werten, die von Kadaverexperimenten herrühren, konnte jedoch gezeigt werden, daß die Simulationsergebnisse qualitativ stimmig sind [5]. In den letzten zehn Jahren wurden sieben weitere dreidimensionale Modelle entwickelt, die für unterschiedliche Fragestellungen konzipiert wurden. Liu [26] untersuchte Mechanismen von Gehirnverletzungen mittels eines Modells, dessen Geometrie nur eine grobe Vereinfachung des menschlichen Kopfes und seiner komplexen Strukturen darstellt.

Willinger et al. [27] konstruierten die Geometrie ihres Modells aus 18 horizontalen Schnitten eines dreidimensionalen Magnetresonanztomographie (MRT-) Datensatzes des Kopfes. Der Schwerpunkt von Willingers Analysen liegt in der Bestimmung von Eigenfrequenzen des schwingenden Systems. Bandak et al. [28] widmen sich der Frage, wie Schädelfrakturen zustandekommen. Sie setzen ihr Modell auf CT-Daten auf, die dafür aufgrund der kontrastreichen Darstellung von Knochengewebe gut geeignet sind. Mendis [29] generierte Modelle des menschlichen Kopfes, um Kriterien für das Eintreten der diffusen axonalen Hirnschädigung (DAI) einzuführen. Zum Studium der biomechanischen Systemantwort des Kopfes infolge schockartig einwirkender Kräfte wie sie bei Autounfällen auftreten, wurden vier FE-Modelle entwickelt. Sie unterscheiden sich hinsichtlich der neuronatomischen Detailliertheit und der Art, wie die Simulationsergebnisse validiert werden. DiMasi [30] erstellte ein Modell, das drei verschiedene Materialien im Kopf berücksichtigt: den Schädel, das Gehirn und die harte Hirnhaut. Er verglich seine Ergebnisse mit experimentellen Daten, die bei Crash Tests mit Dummies akquiriert wurden. Ueno et al. [31] benutzen ein von Lighthall [32] vorgeschlagenes Experiment an einem Kadavergehirn, um die dabei erzielten Schädigungen mit im Modell berechneten Spannungswerten zu korrelieren. Die Geometrie basiert auf der Digitalisierung der Konturen von Querschnitten durch das Kadavergehirn. Ruans [33] Modell aus dem Jahre 1992 umfaßt fünf verschiedene Materialien und ist in der Lage, Druckverteilungen im Gehirn infolge frontaler Stöße zu ermitteln. Eine Weiterentwicklung dieses Modells stellten Zhou et al. [34] drei Jahre später vor. Ihr FE-Kopf besteht aus ungefähr 20 000 Elementen und soll die Durchschnittsform des Kopfes eines erwachsenen Menschen repräsentieren. Das Ruan-Zhou Modell ist das leistungsfähigste der bisher beschriebenen, da es sieben interne Gehirnstrukturen in Betracht zieht und eine vergleichsweise hohe Elementanzahl eine hohe numerische Genauigkeit erwarten läßt.

Im Vergleich mit den zitierten Arbeiten weist das hier vorgestellte Modell grundlegende Vorteile auf:

- Die Geometrie dieses Modells basiert auf *individuellen* MRT-Datensätzen des Kopfes. Dadurch werden Langzeitstudien am Patienten möglich, die dessen individuelle neuroanatomische Verhältnisse (z.B. Krankheitsprozesse) berücksichtigen. Im Gegensatz dazu basiert die Geometriebeschreibung bisheriger Modelle auf einer Durchschnittsform des menschlichen Kopfes.

- Die Anzahl der finiten Elemente, mit denen die Simulationen durchgeführt werden, ist bis zu zehnmal so hoch wie die bisher verwendeten Elementanzahlen. Dadurch werden die der FE-Methode inhärenten Diskretisierungsfehler minimiert und die Finite-Elemente-Repräsentation anatomischer Objekte wird detaillierter und realitätsnäher. Die Raumaufösung dieser Modelle liegt in der Größenordnung der Auflösung der bildgebenden Verfahren.
- Mittels einer modalen FE-Analyse gewinnt man wichtige Einblicke in das Schwingungsverhalten des mechanischen Systems. In Zusammenhang mit Kopfmodellen ist diese Analysemethode bisher nur für drei 3D Modelle durchgeführt worden [27, 35, 36] (vgl. Abschnitt 5.3.2).

Im folgenden Kapitel werden die Schritte ausführlich beschrieben, die zur Vorverarbeitung der MRT-Datensätze nötig sind, um anschließend FE-Analysen durchführen zu können.

Kapitel 2

Vorverarbeitung

Wie schon in der Einführung erwähnt, ist für die Durchführung einer FE-Analyse der Übergang vom kontinuierlichen Objekt zu einem Netz von Strukturelementen zu vollziehen. Durch diese Transformation werden die zu lösenden Differentialgleichungen in ein System algebraischer Gleichungen überführt, die sich mit dem Computer lösen lassen. Der Vorgang der Diskretisierung des Objekts wird auch Netzgenerierung genannt. Um ein auf individuellen MRT-Datensätzen basierendes Netz des Kopfes mitsamt interner Strukturen zu erzeugen, muß jedoch ein Verarbeitungsschritt vorgeschaltet werden; die Segmentierung der MRT-Schnittbilder. Die Segmentierung liefert die für die weitere Analyse wichtige Unterteilung des MRT-Datensatzes in Objekte unterschiedlicher Materialeigenschaften. Abschnitt 2.2.3 wird kurz eine Standardmethode vorstellen, die zur Segmentierung von medizinischen Bildern benutzt werden kann. Im darauffolgenden Abschnitt 2.3 wird die hier verwendete Strategie zur Erzeugung von Netzen anatomischer Objekte ausführlich vorgestellt [37]. Es wird ein Algorithmus beschrieben, mit dem Netze von extrem großer Elementanzahl und guter Qualität in Hinblick auf numerische Stabilität bei der FE-Analyse erzeugt werden können.

Abb. 2.1 verdeutlicht den Ablauf der Vorverarbeitungsschritte schematisch anhand eines repräsentativen Schnittes durch einen MRT-Datensatz. Um eine formale Darlegung der Algorithmen zur Segmentierung und Netzgenerierung zu erleichtern, müssen zuvor einige mathematische Begrifflichkeiten geklärt werden.

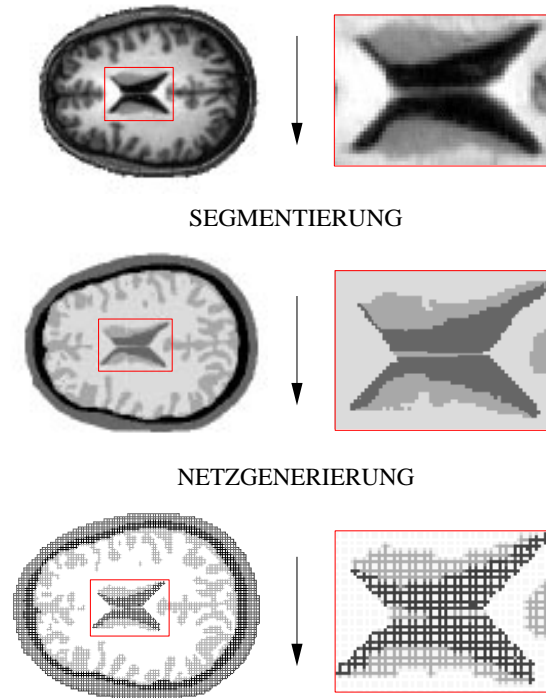


Abbildung 2.1: Von den Rohdaten zu den finiten Elementen. Nach der Segmentierung des MRT-Rohdatensatzes wird ein Netz aus finiten Elementen eingeführt, das als Ausgangspunkt für FE-Analysen dient.

2.1 Definitionen

Medizinische Bilddaten können ganz allgemein als eine dreidimensionale Matrix (Bildgitter) betrachtet werden:

$$\mathcal{A} = \{(p_s, p_r, p_c) \mid 0 \leq p_s < n_s, 0 \leq p_r < n_r, 0 \leq p_c < n_c\}, \quad (2.1)$$

wobei n_s, n_r, n_c für die Anzahl von Schichten, Spalten und Zeilen des 3D-Datensatzes stehen. Jedes Matrixelement kann als Punkt im Euklidischen Raum interpretiert werden (dargestellt als schwarze Kreise in Abb. 2.2). Diese Punkte werden in Zusammenhang mit der Finite-Elemente-Diskretisierung auch als Knoten oder Knotenpunkte bezeichnet. Den Elementen von \mathcal{A} Markierungen zuzuweisen, kann mathematisch als Abbildung

$$f_{\text{Bild}} : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{G} \quad (2.2)$$

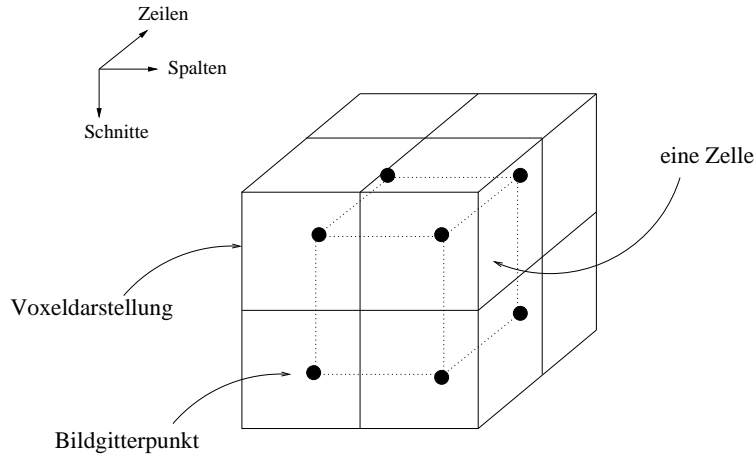


Abbildung 2.2: Erläuterung einiger der im Text verwendeten Begriffe.

formuliert werden, wobei \mathcal{G} für MRT-Datensätze im allgemeinen als $\mathcal{G} = \{0, 1, \dots, 255\}$ gewählt wird. Mithilfe dieser Definitionen kann ein Voxel v definiert werden als ein Element der Menge \mathcal{A} , das mit einer durch die Funktion f_{Bild} definierten Markierung $l \in \mathcal{G}$ versehen ist. Voxel werden fast immer als intensitätskodierte Würfel visualisiert (siehe Abb. 2.2). Wird auf die Menge aller Voxel \mathcal{V} eine Abbildung $f_{segment}$ angewendet, die im ersten Schritt alle Voxel entsprechend ihrer Markierung l klassifiziert und im zweiten Schritt alle Mitglieder einer Klasse mit einer einheitlichen Markierung u belegt, erhält man als Ergebnis ein segmentiertes Bild L . Mathematisch formuliert werden die Voxel des Originalbildes der Abbildung

$$f_{segment} : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{U}, \quad (2.3)$$

unterzogen, wobei $\mathcal{U} = \{1, 2, \dots, u_{max}\}$ die Menge aller Klassenmarkierungen u darstellt.

Ziel einer Bildsegmentierung (siehe Abschnitt 2.2.3) ist es, anatomische Strukturen im Datensatz mit einer eindeutigen Markierung zu belegen. Ein neuroanatomisches Objekt kann jedoch nicht ohne Klärung des Begriffs der Nachbarschaft von Voxeln definiert werden. Mit der oben vorgenommenen Einführung des Gitterpunktnetzes lassen sich unterschiedliche Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Bildgitterpunkten bzw. Voxeln eines dreidimensionalen Datensatzes beschreiben. Zuvor muß jedoch der Abstandsbeginn in einem solchen 3D-Gitter geklärt werden.

Definition 2.1 Es seien $P = (p_1, p_2, p_3) \in \mathcal{A}$ und $Q = (q_1, q_2, q_3) \in \mathcal{A}$ zwei

Punkte in einem dreidimensionalen Gitter. Der euklidische Abstand zwischen P und Q ist definiert als

$$D_0(P, Q) = \sqrt{\sum_{i=1}^3 (p_i - q_i)^2}. \quad (2.4)$$

Die D_1 Distanz zwischen P und Q ist

$$D_1(P, Q) = \sum_{i=1}^3 |p_i - q_i|, \quad (2.5)$$

und die maximale Distanz zwischen P und Q wird definiert als

$$D_\infty(P, Q) = \max_{i=1, \dots, n} |p_i - q_i|. \quad (2.6)$$

Diese Abstandsdefinitionen führen zu unterschiedlichen Arten von Nachbarschaft zwischen Voxeln:

Definition 2.2 Es sei $P = (p_1, p_2, p_3) \in \mathcal{A}$ ein Punkt auf einem Bildgitter. Die V_1^i -Nachbarschaft von P wird dann definiert als

$$V_1^i(P) = \{Q \mid D_1(P, Q) \leq i\}, \quad (2.7)$$

und die V_∞^i -Nachbarschaft ist zu schreiben als

$$V_\infty^i(P) = \{Q \mid D_\infty(P, Q) \leq i\}. \quad (2.8)$$

Diese Nachbarschaften bestimmen eine Menge von Gitterpunkten innerhalb eines Radius i gemessen vom Ausgangspunkt.

Mithilfe dieser Definitionen können drei Typen von sogenannter n -Nachbarschaft unterschieden werden.

Definition 2.3 Es sei $P = (p_1, p_2, p_3) \in \mathcal{A}$ ein Punkt auf einem dreidimensionalen Bildgitter. Die n -Nachbarschaften mit $n = 6, 18, 26$ benachbarten Voxeln sind folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} N_6(P) &= V_1^1(P) \\ N_{18}(P) &= V_1^2(P) \cap V_\infty^1(P) \\ N_{26}(P) &= V_\infty^1(P) \end{aligned}$$

Die Definition eines Objekts in einem 3D-Gitter hängt eng mit dem Begriff der oben beschriebenen Nachbarschaftsbeziehungen zwischen Voxeln zusammen.

Definition 2.4 Ein Objekt o wird im Rahmen der Bildverarbeitung beschrieben als eine Menge \mathcal{T} ($\mathcal{T} \subset \mathcal{V}$) benachbarter Voxel mit identischer Klassenmarkierung u .

Ein wichtiges mathematisches Konstrukt, das die Beschreibung des Algorithmus zur Netzgenerierung erleichtert, ist das der sogenannten *Zelle*.

Definition 2.5 Eine Zelle c sei definiert als ein Würfel, dessen Eckpunkte eine Teilmenge von \mathcal{A} sind, d.h. eine Zelle wird begrenzt von Bildgitterpunkten. Eine Zelle kann auch Bildgitterpunkte auf ihren Kanten und Begrenzungsflächen haben. Die Menge aller Punkte, die zur i -ten Zelle gehören, wird mit \mathcal{N}_i bezeichnet und n_i^j steht für das j -te Element von \mathcal{N}_i .

Die Anzahl w der Elemente der Menge \mathcal{C} aller Zellen in einem MRT-Datensatz ist abhängig von der Bildstruktur, d.h. der Größe homogener Gebiete im segmentierten Datensatz und von benutzerdefinierten Parametern, die maximale und minimale Kantenlängen der Zellen festlegen. \mathcal{C} ist definiert als

$$\mathcal{C} = \{\mathcal{N}_1 \cup \mathcal{N}_2 \cup \dots \cup \mathcal{N}_w\}. \quad (2.9)$$

Eine nur aus acht Knoten bestehende Zelle wird im folgenden als Würfel bezeichnet.

Die Menge \mathcal{M} an Knotenpunkten, aus denen ein FE-Netz besteht, ist dann die Schnittmenge

$$\mathcal{M} = \mathcal{C} \cap \mathcal{A}. \quad (2.10)$$

Abschließend soll eine formale Beschreibung eines FE-Netzes gegeben werden.

Definition 2.6 Ein Netz finiter Elemente wird repräsentiert durch eine Menge von Knotenpunkten \mathcal{M} zusammen mit einer Menge von (finiten) Elementen \mathcal{E} . Ein Knotenpunkt eines FE-Netzes wird dargestellt durch eine Ordnungszahl k und seine drei euklidischen Koordinaten.

$$k \quad x \quad y \quad z. \quad (2.11)$$

Ein Element von \mathcal{E} wird durch die Angabe seiner Eckpunkte vollständig beschrieben. Es reicht aus, die entsprechenden Eckpunkte durch ihre Ordnungszahl k zu identifizieren. Werden Tetraeder als finite Elemente gewählt, genügen fünf Zahlen

$$k_1 \quad k_2 \quad k_3 \quad k_4 \quad m, \quad (2.12)$$

wobei die ersten vier Zahlen die Eckpunkte des Tetraeders symbolisieren und m als Materialnummer anzusehen ist. Wählt man anstelle von Tetraedern Würfel als finite Elemente (siehe Abschnitt 3.3), benötigt man acht Zahlen k_i zur eindeutigen Darstellung ihrer Geometrie.

2.2 Segmentierung von MRT-Daten

2.2.1 Einführung

Das Ziel einer Bildsegmentierung ist es, Bildelemente (Voxel), die in einem vordefinierten Sinne ähnlich sind, zu einer Klasse zusammenzufassen. Zumeist basiert das Ähnlichkeitskriterium auf den Grauwerten der Voxel, so daß Voxel mit ähnlichen Grauwerten eine identische Klassenmarkierung erhalten. Da es eine große Anzahl von Algorithmen zur Segmentierung von MRT-Schnittbildern gibt, wird sich dieser Abschnitt auf die Darstellung einer grundlegenden Technik beschränken.

Um die hier interessierenden Materialien in einem MR-Tomogramm segmentieren zu können, benötigt man einen "dual echo" MRT-Datensatz. Ein solcher Datensatz besteht aus zwei Datensätzen, die durch das Verwenden unterschiedlicher MRT-Aufnahmetechniken entstehen. Bei der "proton density"-Aufnahme wird die Protonendichte der unterschiedlichen Gewebetypen abgebildet, der T1-gewichtete Datensatz stellt die gewebsabhängigen Spinrelaxationszeiten T1 dar. Mit den Mitteln der digitalen Bildanalyse gewinnt man einen Datensatz, der als Ausgangspunkt für das Generieren von FE-Netzen des Kopfes dient (siehe Abschnitt 2.2.3). Auf der Basis dieser Netze werden klinische Simulationsrechnungen durchgeführt (siehe Kapitel 5).

2.2.2 Der ISODATA-Algorithmus

Zur Zeit verfügbare Methoden zur Segmentierung von MRT-Schnittbildern können in klassische, statistische und neuronale Netzwerk-Techniken eingeteilt werden [38]. Diese Verfahren unterscheiden sich in der Qualität der Segmentierung, die als Grad der erreichten Übereinstimmung zwischen realem Objekt und digitalem Voxelobjekt grob definiert werden kann. In der vorliegenden Arbeit wird eine Technik beschrieben, die im Bereich der dreidimensionalen Bildsegmentierung weite Verbreitung gefunden hat. Der zur Segmentation ausgewählte ISODATA-Algorithmus [39] ist der Gruppe der klassischen Methoden zuzuord-

nen, zu der auch Standardwerkzeuge der Bildverarbeitung wie Schwellwertverfahren [40, 41] oder kanten- bzw. regionenbasierte Techniken [42] gehören. Das Schwellwertverfahren ist die einfachste Methode, um Voxel zu klassifizieren. Alle Voxel, deren Grauwerte in einem festzulegenden Bereich l_{min} bis l_{max} liegen, werden derselben Klasse zugeordnet. Am häufigsten wird diese Methode benutzt, um Grauwertbilder zu binarisieren: Voxel, deren Markierungen im vordefinierten Grauwertbereich liegen, werden als Bildvordergrund definiert. Dieses Verfahren ist jedoch nicht voll automatisch, da die Wahl des Schwellwertes häufig das Eingreifen des Anwenders erfordert. Daher wurden sogenannte unüberwachte Klassifizierungsmethoden entwickelt, die die Festlegung der Schwellwerte automatisch vornehmen. Der ISODATA-Algorithmus, der zu dieser Klasse von Segmentierungsalgorithmen gehört, soll nun kurz dargestellt werden.

Ganz allgemein kann für jedes Bildelement ein sogenannter Merkmalsvektor $x = (x_0, \dots, x_n) \in \mathcal{R}^n$ definiert werden. Hier ist $l \in \mathcal{G}$ ein eindimensionaler Merkmalsvektor, der den Grauwert eines bestimmten Voxels repräsentiert. Die Menge \mathcal{S}

$$\mathcal{S} = \{l_i \in \mathcal{G} \mid i = 1, \dots, k\} \quad (2.13)$$

aller Merkmalsvektoren l eines 3D-Bilddatensatzes wird als eindimensionaler Merkmalsraum bezeichnet. Die Mächtigkeit k der Menge \mathcal{S} entspricht der von \mathcal{A} . Die Merkmalsvektoren sollen nun derart in u_{max} ($2 \leq u_{max} < k$) Klassen eingeteilt werden, daß ähnliche Merkmalsvektoren zur selben Klasse gehören. Als Klassenzentrum bezeichnet man den Mittelwert aller Merkmalsvektoren der betreffenden Klasse. Der ISODATA-Algorithmus bestimmt die Klassenzentren derart, daß die Abstände zwischen den Klassenzentren und den Klassenmitgliedern minimiert werden. Die ISODATA-Methode ist ein iteratives Verfahren, bei dem während jeder Iteration die Klassenzentren aktualisiert werden bis Konvergenz erreicht ist. Die Anzahl u_{max} der zu bestimmenden Klassen wird im vorab vom Benutzer festgelegt. Sei $\mu_j(i)$, $1 \leq j \leq u_{max}$ das j -te Klassenzentrum nach der i -ten Iteration. Die Ausgangswerte $\mu_j(0)$, $1 \leq j \leq u_{max}$ seien willkürlich im Merkmalsraum verteilt. Bei der i -ten Iteration wird zu jedem Merkmalsvektor die nächstliegende Klasse $\mu_{j_0}(i)$ bestimmt. Daraufhin wird dem Merkmalsvektor der Index j_0 zugewiesen und das Klassenzentrum $\mu_{j_0}(i)$ unter Berücksichtigung des neuen Mitgliedes erneut berechnet. Diese Prozedur wird wiederholt bis die Klassenzentren sich nur noch unwesentlich verändern. In zukünftigen Untersuchungen, in denen detaillierte anatomische Strukturen von Interesse sein

könnten, sollten kompliziertere Segmentationstechniken verwendet werden [43].

2.2.3 Neuroanatomische Objekte aus “dual echo“-Datensätzen

Da in vielen Fällen von Gehirnverletzungen die mechanische Interaktion des Gehirn-Schädel-Systems als Ursache ausgemacht werden kann, ist neben der Modellierung interner Gehirnstrukturen die Berücksichtigung des Schädels von großer Wichtigkeit. Aus diesem Grund basiert das hier vorgestellte Modell auf “dual echo“ MRT-Datensätzen, die sich aus einem “proton density“ (PD) und einem T1-gewichteten Datensatz zusammensetzen. Den Schädelknochen segmentiert man aus dem PD-Datensatz, da der Schädel aufgrund des relativen Protonenmangels mit einem hohen Kontrast im Vergleich zum umliegenden Gewebe abgebildet wird. Die Gehirnstrukturen (Ventrikel, weiße und graue Gehirnmasse) werden aus den T1-gewichteten MR-Daten segmentiert, da diese Wichtung den besten Kontrast für diese Objekte liefert (siehe Abb. 2.3). Beide Rohdatensätze weisen eine räumliche Auflösung von 0.9 mm innerhalb einer Schicht und von 1.1 mm zwischen den Schichten auf. Nach trilinearer Interpolation besitzen beide Datensätze eine isotrope Auflösung von 1.0 mm. Nach der Registrierung der Datensätze wird die Segmentierung mit dem ISODATA-Algorithmus durchgeführt. Das ISODATA-Verfahren liefert eine Vielzahl von Objekten im Sinne von Def. 2.4, von denen meistens nur wenige mit anatomischen Strukturen gleichzusetzen sind. Um einzelne anatomische Strukturen aus dem vorverarbeiteten Datensatz zu gewinnen, müssen Objekte mittels einer “connected component analysis“ gefunden werden. Zur Lösung dieser Aufgabe dient Samets Algorithmus [44], der in [39] beschrieben wird. Nach Auswahl der Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Voxeln (vgl. Def. 2.3) definiert dieser Algorithmus Objekte innerhalb des 3D-Datensatzes und weist ihnen eine charakteristische Objektmarkierung m zu. Ein einzelnes Objekt erhält man aus diesem Datensatz durch Anwendung des im vorangehenden Abschnitt beschriebenen Schwellwertverfahrens, indem man nur die charakteristische Markierung m des gewünschten Objekts als minimalen und maximalen Schwellwert angibt. Mit diesem Verfahren wurden die im Modell berücksichtigten neuroanatomischen Strukturen aus den mittels ISODATA segmentierten Rohdatensätzen gewonnen. Abb. 2.3 zeigt das Ergebnis der Vorgehensweise anhand von zwei Beispielen. Die aus den beiden MRT-Rohdatensätzen segmentierten Objekte werden durch voxelweise Addition der Datensätze, in denen sie beschrieben sind, in einen Datensatz überführt. Im folgenden soll eingehend erläutert werden, wie

auf der Basis eines solchen 3D-Voxeldatensatzes Netze aus finiten Elementen generiert werden können.

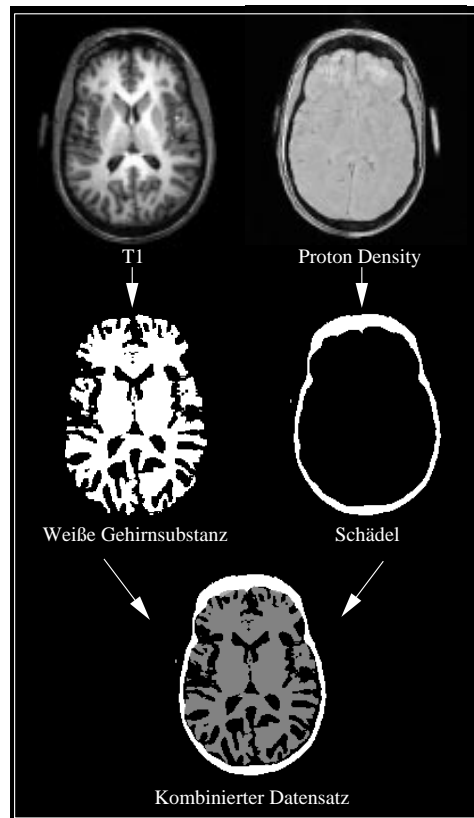


Abbildung 2.3: Durch Segmentierung des PD-Datensatzes erhält man eine präzise Geometriebeschreibung des Schädels. Eine Segmentierung des T1-gewichteten Datensatzes liefert die Geometrie von Gehirnstrukturen (nur ein repräsentativer Schnitt ist abgebildet). Durch Kombination der segmentierten Objekte (im obigen Fall Schädel und weiße Materie) entsteht ein 3D-Voxeldatensatz, der als Ausgangspunkt für den Prozeß der Netzgenerierung dient.

2.3 Netzgenerierung

2.3.1 Problemstellung

Das Problem der dreidimensionalen Netzgenerierung ist ein aktuelles Forschungsthema innerhalb des Gebiets der “computational geometry“. Die Strategien zur

3D-Netzgenerierung, die das Problem für Objekte verschiedenster Geometrie (z.B. maschinelle Bauteile, komplexe geologische Strukturen) lösen wollen, lassen sich grob in zwei Klassen einteilen.

Der häufigste Ansatz, ein dreidimensionales Netz eines Objekts zu erzeugen, ist eine oberflächenorientierte Methode [45, 46, 47, 48, 49]. Die Oberfläche des kontinuierlichen Objekts wird im ersten Schritt durch einen Polyeder approximiert. Während der Netzgenerierung werden sogenannte Steiner-Punkte in das Innere des Polyeders gesetzt. Es kann gezeigt werden, daß es im allgemeinen nicht möglich ist, ein 3D-Netz ohne die Einführung von Steiner-Punkten zu generieren [50]. Nach Delaunay [51] kann durch jeden Satz von Punkten im \mathcal{R}^3 ein Netz aus Tetraedern gelegt werden. Beim oberflächenorientierten Lösungsansatz werden die Steiner-Punkte und die Eckpunkte des Polyeders zu meist einer sogenannten Delaunay-Triangulierung unterzogen [52, 53, 54], um ein Netz mit Tetraedern als finiten Elementen zu erzeugen. Häufig ist eine Nachbehandlung des Netzes vonnöten, um dessen Qualität zu erhöhen. Degenerierte Elemente, wie z.B. Tetraeder mit stumpfen Winkeln, führen zu numerischen Ungenauigkeiten in den Simulationsergebnissen. Um diese zu beseitigen, muß das Netz neu konfiguriert werden. Verschiebung (“shiften“) von Knoten und lokale Erhöhung der Elementanzahl (“refinement“) sind Möglichkeiten zur Verbesserung der Netzqualität [55, 56].

Ein zweiter Ansatz zur 3D-Netzgenerierung basiert auf der rekursiven räumlichen Zerlegung des Objekts in Würfel oder Oktanten [57, 58, 59, 60, 61, 62]. Die Unterteilung liefert isotrope oder anisotrope Netze abhängig von den Objektkonturen oder vordefinierten Grenzen für die räumliche Auflösung des Netzes [63, 64]. Für beide Algorithmustypen stellen sich mehrere Probleme aufgrund der speziellen Art der Objektbeschreibung in medizinischen Datensätzen.

- Ungenauigkeiten bei der Bildgebung (z.B. nichtlineares Verhalten des MRT-Geräts, Bewegung des Patienten, „partial volume effect“, Rauschen) können zu Segmentierungsfehlern führen und somit zu einem unvollständig definierten Objekt oder grob angenäherten Oberflächen.
- Die komplexen und nicht-konvexen Grenzflächen anatomischer Strukturen können zum einen zur Erzeugung einer unverhältnismäßig hohen Anzahl von Elementen führen und zum anderen Elemente schlechter Qualität (z.B. Tetraeder mit stumpfen Winkeln) zur Folge haben. Letzteres kann sich bei der Lösung des FE-Gleichungssystems in numerischer Ungenau-

igkeit niederschlagen.

- Zahlreiche anatomische Objekte, die aus verschiedenen Gewebetypen bestehen, müssen separat adressiert werden können, aber aus Gründen der Konnektivität vom Netzgenerator im gleichen Verarbeitungsschritt erzeugt werden. Dies führt bei einigen Implementierungen der beschriebenen Lösungsansätze zu immensem Speicherplatz- und Rechenzeitbedarf.

Aufgrund dieser Schwierigkeiten war von einer Reihe kommerzieller und nicht-kommerzieller Netzgeneratoren keiner in der Lage, ein Netz von Hirnstrukturen aus einem MRT-Datensatz zu generieren. Der Algorithmus, der im folgenden Abschnitt beschrieben wird, nutzt die Diskretisierung des Raumes in Voxel, die einem MRT-Datensatz zugehörig ist. Durch die sequentielle Bearbeitung von Teilmengen von \mathcal{M} kann man das komplexe Problem der Netzgenerierung in kleine Unterprobleme zerlegen, die effizient zu lösen sind.

2.3.2 Der Algorithmus

Die Grundidee des hier vorgestellten Algorithmus ist es, das Problem der Netzgenerierung zu vereinfachen, indem der segmentierte MRT-Datensatz L in einen Verbund aus Zellen unterschiedlicher Kantenlänge transformiert wird. Diese Zellen werden dann abhängig von der Anzahl zellulärer Knoten n_i^j bearbeitet. Die mit $u = 0$ markierten Voxel des Datensatzes L werden als Bildhintergrund interpretiert, und die Erzeugung von Hintergrundelementen wird unterdrückt. In diesem Kontext gehören die Voxel mit $u \neq 0$ zu verschiedenen neuroanatomischen Objekten (z.B. Ventrikel, Schädelknochen, etc) mit unterschiedlichen mechanischen Eigenschaften. Dieser Algorithmus kann in drei Phasen unterteilt werden:

1. Die isotrope Unterteilung von L in Würfel gleicher Kantenlänge.
2. Die Bildung von Zellen durch das Zusammenfassen von Würfeln.
3. Die Tetraedrisierung der Zellen.

Jede dieser Phasen liefert ein FE-Netz, das Ausgangspunkt von FE-Analysen sein kann. Eine Skizze zur Implementierung des Algorithmus ist in Abb. 2.6 zu finden. Die einzelnen Phasen des Algorithmus sollen im folgenden beschrieben werden.

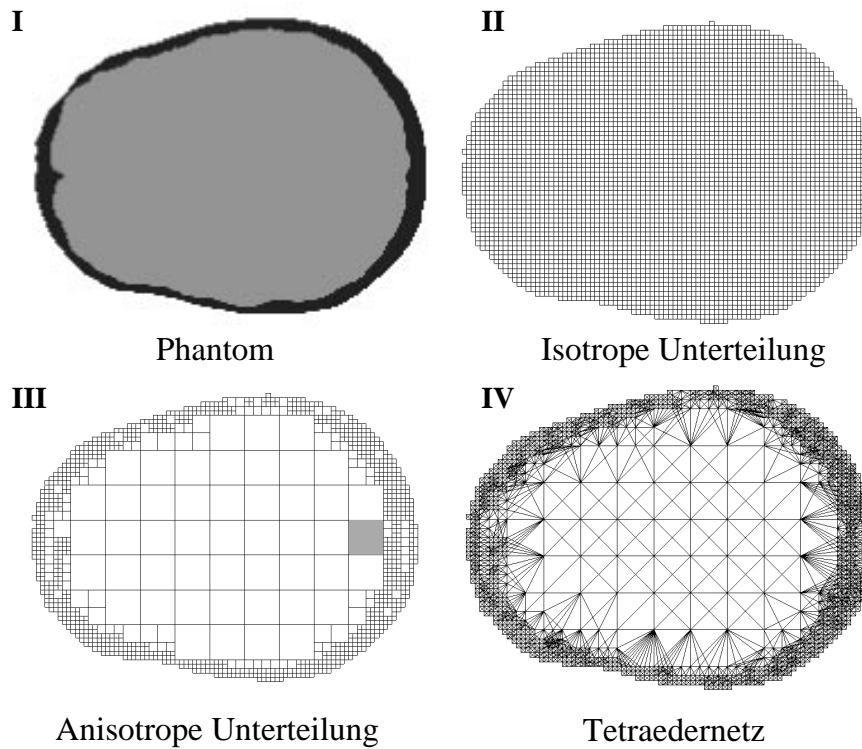


Abbildung 2.4: Dieses Bild zeigt die drei Phasen des Algorithmus. Im ersten Schritt wird das Phantom (I), das das Gehirn-Schädel-System darstellt, in ein isotropes Würfelnetz überführt (II). Die Zusammenfassung von Würfeln zu Zellen liefert eine anisotrope Unterteilung von L (III). Diese dient als Basis einer zellenweisen Tetraedrisierung (IV).

Isotrope Unterteilung und Zellenbildung

Abb. 2.4 zeigt das Zwischenergebnis jeder Phase des Algorithmus für einen segmentierten Gehirn-Schädel-Datensatz L , dessen Voxel eine Kantenlänge von 1 mm aufweisen. In diesem Beispiel ist der Datensatz L zuerst in Würfel der Kantenlänge 2 mm unterteilt worden, um relativ feine Strukturen zu bewahren. Die vom Benutzer zu bestimmende Würfelkantenlänge e_{min} soll im weiteren die *Feinheit des Netzes* genannt werden. Jedem der abgebildeten Würfel wurde eine spezifische Materialnummer zugewiesen. Da der i -te Würfel durch acht zelluläre Knoten n_i^j definiert ist, kann man seine Materialnummer bestimmen, indem erstens die Würfelknoten in Voxel transformiert werden (Funktion 2.2) und zweitens seine Klassenmarkierung gefunden wird (Funktion 2.3). Der am häufigsten

in einem Würfel auftretende Klassenlabel wird dem Würfel als Materialnummer m zugewiesen. Im Falle gleicher Häufigkeit unterschiedlicher Klassenlabels entscheidet der Zufallsgenerator. Auf die Phase der isotropen Unterteilung folgt die der Zellbildung. Beim rekursiven Durchlaufen des in Würfel unterteilten Bildes werden Zellen gebildet, indem Würfel gleicher Materialnummer zusammengefaßt werden. Eine Zelle erhält die Materialmarkierung der sie konstituierenden Würfel. Die maximale Kantenlänge e_{max} , die *Grobheit des Netzes*, ist ebenfalls vom Benutzer vorzugeben. Der Quotient aus Grobheit und Feinheit eines FE-Netzes wird *Anisotropiefaktor* genannt. Im abgebildeten Beispiel wurde er auf den Wert acht gesetzt.

In Bild III von Abb. 2.4 kann man erkennen, daß Zellen unterschiedlicher Kantenlänge erzeugt worden sind. Innerhalb der homogenen Region (Gehirn) wurden Zellen der Kantenlänge $e_{max} = 16$ erzeugt, während im geometrisch komplizierteren Gebiet (Schädel) fast alle Zellen die Kantenlänge $e_{min} = 2$ aufweisen. In der Übergangsregion zwischen Gehirn und Schädel wurden Zellen mit $e_{min} < e < e_{max}$ produziert. Wie in Abschnitt 2.1 erläutert, wird die i -te Zelle durch eine Menge \mathcal{N}_i repräsentiert. Die Mächtigkeit dieser Menge kann bestimmt werden, indem die 8er-Nachbarschaft (siehe Def. 2.3) der i -ten Zelle untersucht wird. Eine Untersuchung der graumarkierten Zelle c_{grau} in Bild III von Abb. 2.4 ergibt, daß die Mächtigkeit von \mathcal{N}_{grau} den Wert 39 hat, d.h. 39 Knoten n_{grau}^j sind notwendig, um die Nachbarschaftsbeziehungen zu den umliegenden Zellen zu organisieren. Die Mächtigkeiten der Mengen \mathcal{N}_i liegen zwischen 8 und 150. Sind die Mengen \mathcal{N}_i bestimmt, beginnt der Algorithmus sie in Abhängigkeit von der Anzahl ihrer Elemente sequentiell zu bearbeiten, um anisotrope Tetraedernetze zu generieren. Bild IV in Abb. 2.4 zeigt als Beispiel ein anisotropes Tetraedernetz des Schädel-Hirn-Phantoms. Die hohe Auflösung im geometrisch komplexen Gebiet ist sinnvoll bei mechanischen Anwendungen, da in diesen Arealen Deformation und Spannung meist eine große Variabilität aufweisen. Bevor im nächsten Abschnitt die Generierung anisotroper Tetraedernetze anhand eines einfachen mathematischen Phantoms erläutert wird, soll nochmal betont werden, daß sowohl der isotrop in Würfel unterteilte als auch der anisotrop in Zellen zerlegte Eingangsdatensatz L als FE-Netz interpretiert werden kann. Im ersten Fall werden FE-Analysen auf der Basis sogenannter 8-Knoten-Würfelemente (siehe Abschnitt 3.3) durchgeführt, im zweiten Fall ist eine komplizierte Implementierung der FEM zu vollziehen. Während die isotropen Würfelnetze wegen der guten Interpolationseigenschaften der Würfelemente

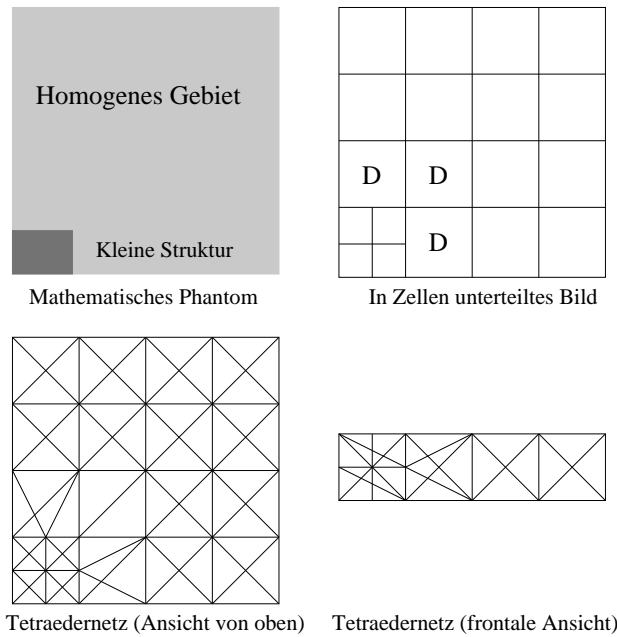


Abbildung 2.5: Diese Abbildung erklärt das Verhalten des Algorithmus bei der Anwesenheit einer kleinen Struktur innerhalb eines homogenen Gebietes. Das Bild oben rechts zeigt das Ergebnis der anisotropen Unterteilung in Zellen. Abhängig von der Anzahl der Knoten werden die Zellen entweder einer Delaunay-Tetraedrisierung (markiert mit einem “D”) unterzogen oder einfach in fünf Tetraeder unterteilt (siehe Abb. 2.7). Das Ergebnis der Tetraedrisierung ist in der unteren Reihe abgebildet.

für die klinischen Simulationsrechnungen eine große Rolle spielen, werden anisotrope Zellennetze für die vorgestellten Analysen nicht benutzt. Im Falle nur eingeschränkt verfügbaren Arbeitsspeichers sind Berechnungen auf der Basis anisotroper FE-Netze jedoch sehr nützlich, da sie einen Kompromiß zwischen Elementanzahl und Rechengenauigkeit erreichen.

Tetraedrisierung der Zellen

Abb. 2.5 zeigt ein einfaches mathematisches Phantom, das aus $128 \times 128 \times 32$ Voxeln besteht. Der Anisotropiefaktor wurde auf den Wert zwei festgelegt. Während der Phase der Zusammenfassung von Würfeln zu Zellen „entdeckt“ der Algorithmus die kleine Struktur und erzeugt Zellen geeigneter Kantenlänge in dieser Region (siehe Bild oben rechts). Bis auf drei (mit einem “D“ mar-

```

NETZGENERATOR VGRID {

    Einlesen des segmentierten Datensatzes L

    ISOTROPE UNTERTEILUNG IN WÜRFEL {
        Zusammenfassung von Voxeln zu Würfeln mit der Kantenlänge  $e_{min}$ 
        Markierung der Würfel mit dem häufigsten Klassenlabel u
    }
    if(output == isotropes Würfelnetz)
        goto ErzeugeListe;

    ANISOTROPE UNTERTEILUNG IN ZELLEN (Bestimmung von  $C$ ) {
        Verschmelzen der Würfel zu Zellen der max. Kantenlänge  $e_{max}$ 
        Beschreibung der Zellen durch eine Menge  $\mathcal{N}_i$ 
        Markierung der Zellen mit dem Würfellabel
    }
    if(output == anisotropes Würfelnetz)
        goto ErzeugeListe;

    TETRAEDRISIERUNG DER ZELLEN {
        Erzeugung der Tetraeder
        for i = 1 to i = Mächtigkeit von  $C$  {
            if( Mächtigkeit von  $\mathcal{N}_i$  == 8) {
                Erzeugung von Tetraedern nach Abb. 2.7
                Zuweisung der Materialmarkierung
            }
            else {
                Sortieren der  $n_i^j$  zur Vermeidung degenerierter Tetraeder
                Delaunay Tetraedrisierung der Menge  $\mathcal{N}_i$ 
                Zuweisung der Materialmarkierung
            }
        }
    }

    ERZEUGUNG DER KNOTENPUNKTLISTE
    ErzeugeListe:
        Bestimmung der Schnittmenge  $\mathcal{M}$ 
}

```

Abbildung 2.6: Skizze einer Implementierung des beschriebenen Algorithmus VGrid zur FE-Netzgenerierung.

kiert) sind alle Zellen Würfel. Diese Würfel werden vom Algorithmus entsprechend Abb. 2.7 in fünf Tetraeder unterteilt. Die drei mit einem ‘‘D’’ markierten Zellen \mathcal{N}_D , die entweder 9 oder 13 Knoten enthalten, werden einer Tetraedrisierung nach Delaunay unterzogen. Um Tetraeder zu generieren, deren Begrenzungsflächen kompatibel mit denen der Nachbarn sind, wurde der inkrementelle Clarkson-Algorithmus [66] zur Zelltetraedrisierung gewählt. Da die Anzahl von Knotenpunkten pro Zelle relativ klein ist (typischerweise 9 bis 150) ist der Clarkson-Algorithmus schnell und numerisch stabil. Mit der Bestimmung der Schnittmenge \mathcal{M} (Mächtigkeit von $\mathcal{M} = 69$) und der Elementmenge \mathcal{E} (Mächtigkeit von $\mathcal{E} = 147$) ist die Netzgenerierung abgeschlossen. Um die Stabilität einer

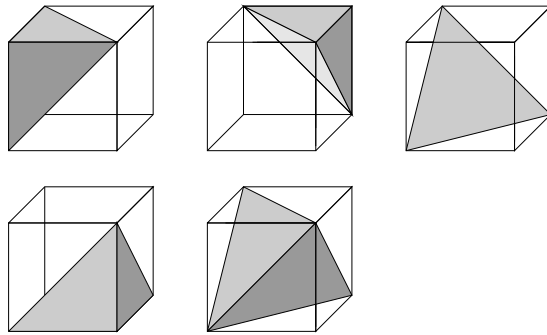


Abbildung 2.7: Unterteilung eines Würfels in fünf Tetraeder.

FE-Analyse mit Tetraedernetzen zu sichern, müssen die Tetraeder bestimmten Qualitätskriterien genügen. Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Stabilitätsproblemen beim Lösen der FE-Gleichungssysteme (vgl. Abschnitt 4.2) ist gemäß einer Daumenregel erhöht, wenn innerhalb eines Tetraeders Winkel auftreten, die größer als 10 Grad sind. Für die Tetraeder, die durch die Zerlegung eines Würfels entstehen, sind die Qualitätsanforderungen vollkommen erfüllt. Es treten nur drei verschiedene Winkel (alle > 10 Grad) und drei unterschiedliche Kantenlängen auf. Im Falle der Tetraedrisierung nach Delaunay ist die Situation etwas komplizierter. Die Erzeugung degenerierter Tetraeder (d.h. all seine Knoten sind koplanar) muß unterdrückt werden. Dieses Ziel wird erreicht, indem die Reihenfolge festgelegt wird, in der die Knoten n_{grau}^j bearbeitet werden. Da alle zellulären Knoten auf einem konvexen Polyeder liegen, sind alle Tetraederwinkel im allgemeinen größer als 10 Grad, wenn der Anisotropiefaktor auf den Wert acht begrenzt wird. Den Einfluß des Anisotropiefaktors auf die

auftretenden Winkel kann man sich folgendermaßen erklären. Im ungünstigsten denkbaren Fall hat die kleinste Kante des Tetraeders die Länge e_{min} und die größte den Wert e_{max} . Wenn der Quotient dieser beiden Zahlen (d.h. der Anisotropiefaktor) zu groß gewählt wird, können kleine Winkel auftreten. Wie im Abschnitt 2.3.3 gezeigt wird, lassen sich die Knotenanzahlen durch die Verwendung anisotroper Tetraedernetze im Vergleich mit entsprechenden isotropen Würfelnetzen beträchtlich reduzieren.

2.3.3 Ergebnisse

Ziel dieses Abschnitts ist es, Eigenschaften des präsentierten Algorithmus zu diskutieren und Netze neuroanatomischer Strukturen zu präsentieren. Als Ausgangspunkt dienen segmentierte Datensätze wie sie in Abschnitt 2.2.3 beschrieben wurden. Abb. 2.8 zeigt als ein erstes Beispiel für die Ausgabe des Algorithmus das anisotrope Tetraedernetz eines Ventrikelpaares. Um quantitative

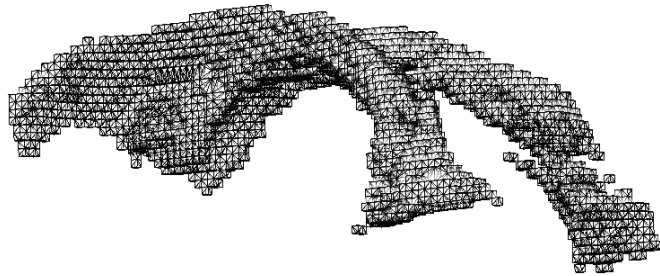


Abbildung 2.8: *Das FE-Netz eines neuroanatomischen Objekts; die im Gehirninneren liegenden Hohlräume, die Ventrikel, sind dargestellt als ein Tetraedernetz aus 1579 Knoten und 3006 Elementen.*

Aussagen über die Eigenschaften des Netzgenerators machen zu können, werden FE-Netze von einem segmentierten $192 \times 192 \times 200$ Gehirndatensatz (siehe Abb. 2.9) erzeugt. Eine Zusammenstellung von Ergebnissen für die Erstellung anisotroper Tetraedernetze des Gehirns bei variierendem Anisotropiefaktor listet Tab. 2.1 auf. Die Testdurchläufe beweisen den Zusammenhang zwischen der Anzahl von Elementen eines Netzes und dem Anisotropiefaktor e_{max}/e_{min} . Die Anzahl von Knotenpunkten hängt offensichtlich auch von der Größe homogener Bereiche im Eingabebild ab. Wegen der Annahme, daß homogene Bereiche

e_{min}	2	4	2	2	2	4	4
e_{max}	2	4	4	8	16	8	16
$A(\mathcal{E})$	863540	108250	244325	188673	186954	45510	42228
$A(\mathcal{M})$	185914	24944	53989	41029	40095	10574	9516
KR [%]	-	-	71	78	79	58	62
t [s]	211	31	190	185	181	35	32

Tabelle 2.1: Zusammenstellung der Element- und Knotenanzahlen, die der Algorithmus zum Generieren eines anisotropen Gehirnnetzes aus Tetraedern bei variierendem Anisotropiefaktor erzeugt. KR steht für den Prozentsatz, um den die Knotenanzahl im Vergleich zum entsprechenden isotropen Fall reduziert wurde, $A(\)$ bezeichnet die Anzahl der Elemente der entsprechenden Menge und t ist die Ausführungszeit des Programms in Sekunden auf einer SGI 02 Workstation.

in medizinischen Datensätzen nicht größer als 16^3 Voxel sind, ist es sinnvoll e_{max} auf diesen Wert zu begrenzen. Experimente mit $e_{min} = 1$ wurden nicht durchgeführt, weil bei einer fünffachen Unterteilung eines Würfels in Tetraeder eine räumliche Auflösung erzielt würde, die über der des MRT-Geräts liegt. Für die Datensätze hat man mit Anisotropiefaktoren von vier bzw. acht gute Ergebnisse bei der Reduzierung der Knotenanzahl erzielen können. Wie in Tabelle 2.1 aufgelistet, konnte die Knotenanzahl gegenüber dem isotropen Fall um bis zu 80% verringert werden. Wie erwartet, wird dieser Effekt kleiner mit wachsendem e_{min} und kleinerem e_{max} . Die Ausführungszeiten zur Erstellung dieser Netze sind auch in Tab. 2.1 aufgeführt. Hocho aufgelöste Tetraedernetze werden innerhalb von wenigen Minuten erzeugt, für grobere Netze benötigt der Algorithmus nur einige Sekunden.

Eine bemerkenswerte Eigenschaft des Netzgenerators ist die günstige Knotennummerierung, die automatisch bei der Erzeugung der Elemente vorgenommen wird. Die Numerierung der Knoten bestimmt die Besetzungsstruktur der FE-Matrizen, die ausgehend von den FE-Netzen erstellt werden (siehe Abschnitt 4.1). Die Besetzungsstruktur der Matrizen wiederum spielt für die Effizienz und Stabilität der Lösung von Gleichungssystemen eine zentrale Rolle. Ein wichtiges Maß für die Qualität der Besetzungsstruktur einer Matrix ist ihre Bandbreite B . Sie ist definiert als größter Abstand eines Nicht-Nulleintrages von der Diagonalen der Matrix. Speicher- und rechenintensive Umsortier-Routinen [67, 68] werden oft als weiterer Nachverarbeitungsschritt erforderlich, um

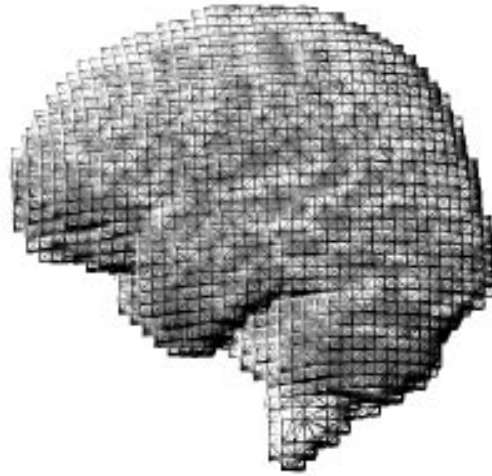


Abbildung 2.9: *Anisotropes Tetraedernetz des Gehirns (188000 Elemente und 41000 Knoten). Deutlich sichtbar ist die regelmäßige Unterteilung von Zellen in Tetraeder vor allem im Randgebiet. Einige Delaunay-tetraedrisierte Zellen sind im Bereich des Hirnstamms zu sehen.*

die Differenz D zwischen größter und kleinster Knotennummer innerhalb eines Elements zu minimieren. Denn die Bandbreite einer Matrix ist gegeben durch

$$B = \max_e [D] + 1. \quad (2.14)$$

Die Anwendung von Ummumerierungsalgorithmen ist für diese Netze nicht notwendig. Da der segmentierte Datensatz für die Erzeugung der Elemente schichtweise durchlaufen wird, ist die maximale Differenz D_{max} gleich der Anzahl von Knoten, die erzeugt werden, um die finiten Elemente eines MRT-Schnitts zu generieren. Die Eigenschaften des Netzgenerators lassen sich somit folgendermaßen zusammenfassen:

- Der Algorithmus ist schnell.
- Der Algorithmus ist stabil.
- Die Elemente sind von hoher Qualität.
- Ummumerierung der Knoten ist nicht notwendig.

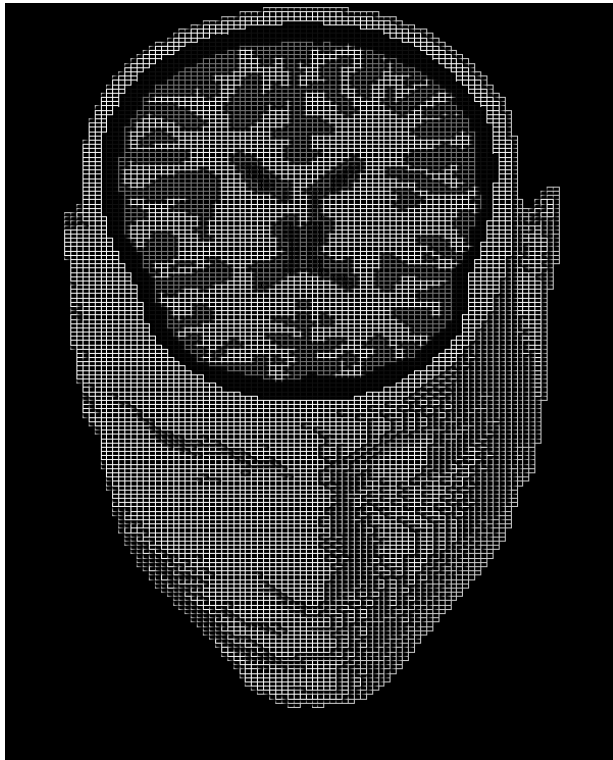


Abbildung 2.10: *Isotropes Würfelnetz des Kopfes mit vier internen Strukturen (140000 Elemente, 150000 Knoten). Außer Kopfhaut, Schädel und Ventrikel sind weiße und graue Gehirnschicht berücksichtigt.*

Aufgrund einiger Vorteile, die im weiteren Verlauf dieser Arbeit noch verdeutlicht werden sollen, werden Simulationsrechnungen ausschließlich mit isotropen Würfelnetzen hoher Auflösung durchgeführt. Einen Querschnitt durch ein solches Netz mit einer Kantenauflösung von 3 mm, das auf einem speziell präparierten Datensatz (vgl. Abschnitt 2.2.3) basiert, zeigt Abbildung 2.10. Bevor jedoch Simulationsergebnisse auf Grundlage der in diesem Abschnitt präsentierten Netze diskutiert werden können, müssen die mathematischen Aspekte (siehe Kapitel 3) der FEM und die Implementierung effizienter numerischer Techniken auf einer parallelen Rechnerarchitektur (siehe Kapitel 4) behandelt werden.

Kapitel 3

Die Methode der finiten Elemente

Die Methode der finiten Elemente (FEM) ist ein numerisches Verfahren zur Lösung von elliptischen und parabolischen Differentialgleichungen, für die keine geschlossenen Lösungen existieren. Ihre Entwicklung begann im wesentlichen erst mit dem Aufkommen elektronischer Digitalrechner. Die FE-Methode wurde anfänglich auf physikalischer Grundlage zur Berechnung von Problemen der Strukturmechanik entwickelt, jedoch wurde bald deutlich, daß ihr Anwendungsgebiet um eine Reihe weiterer Problemklassen erweitert werden kann.

Es ist nicht möglich, ein exaktes Datum für die „Erfindung“ der FE-Methode anzugeben. Ihre Wurzeln gehen auf die angewandte Mathematik, die Physik und die Ingenieurwissenschaft zurück [69, 70, 71]. Die wesentliche Begriffsbildung fand in der Ingenieurwissenschaft statt und wurde insbesondere von Turner [72] sowie von Argyris und Kelsey [73] vorangetrieben. Der Begriff der finiten Elemente wurde im Jahre 1960 von Clough [74] eingeführt. Die Bezeichnung spielt auf die mathematische Annäherung eines Objekts durch eine begrenzte Anzahl von Elementen an. Seither wurde die Technik der finiten Elemente intensiv weiterentwickelt, was in ihrer klassischen Domäne, der Ingenieurwissenschaft, durch eine große Zahl an Publikationen dokumentiert ist [75, 76]. In der Informatik haben sich die finiten Elemente als fester Bestandteil von CAD-Systemen etabliert [77]. Innerhalb des Fachgebiets der medizinischen Bildverarbeitung wird die FE-Methode neuerdings auch zur Operationsplanung [78], zur Erstellung deformierbarer Modelle [79] und zur Optimierung von Prothesen [80] genutzt. Die FE-Methodik umfaßt heute ein breites Spektrum von Verfahren. Eine beson-

ders wichtige, in der Praxis häufig angewandte Formulierung ist die *Verschiebungsmethode*. Fast alle allgemein verwendbaren mechanischen FE-Programme basieren auf dieser Formulierung, da sie gute numerische Eigenschaften hat.

Im folgenden Abschnitt soll nun die allgemeine mathematische Ableitung der Verschiebungsmethode beschrieben werden.

3.1 Das Prinzip der virtuellen Verschiebungen

Das in Bild 3.1 schematisch dargestellte Gehirn repräsentiert einen Körper, der sich im Gleichgewicht befindet. An äußeren Lasten können Oberflächenspannungen \mathbf{f}^S , Volumenkräfte \mathbf{f}^B und Einzelkräfte \mathbf{F}^i wirken.

$$\mathbf{f}^S = \begin{pmatrix} f_X^S \\ f_Y^S \\ f_Z^S \end{pmatrix}; \quad \mathbf{f}^B = \begin{pmatrix} f_X^B \\ f_Y^B \\ f_Z^B \end{pmatrix}; \quad \mathbf{F}^i = \begin{pmatrix} F_X^i \\ F_Y^i \\ F_Z^i \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Die auf den unbelasteten Zustand des Körpers bezogenen Verschiebungen kenn-

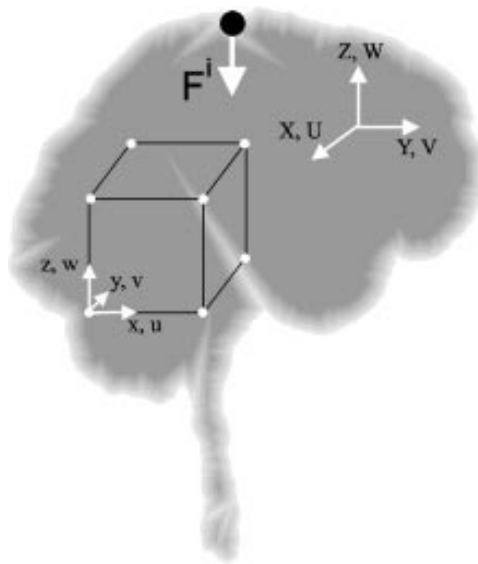


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung des Gehirns als Körper im Gleichgewicht. Ein finites 8-Knoten-Element und eine an der Oberfläche wirkende Einzelkraft F_i sind eingezeichnet. Außerdem ist das globale Koordinatensystem (X, Y, Z) mit den in ihm gemessenen Verschiebungen (U, V, W) sowie ein lokales Element-Koordinatensystem (x, y, z) dargestellt.

zeichnet der Verschiebungsvektor \mathbf{U} mit

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Über die noch herzuleitenden Verzerrungs-Verschiebungs-Beziehungen (3.11) sind dem Verschiebungsvektor \mathbf{U} die Verzerrungen

$$\boldsymbol{\epsilon}^T = (\epsilon_{xx} \ \epsilon_{yy} \ \epsilon_{zz} \ \epsilon_{xy} \ \epsilon_{yz} \ \epsilon_{zx}) \quad (3.3)$$

zugeordnet. Die Komponenten ϵ_{xx} , ϵ_{yy} und ϵ_{zz} des Verzerrungstensors $\boldsymbol{\epsilon}$ bedeuten die Dehnungen eines Körperelements in x, y, z-Richtung, während die Komponenten ϵ_{xy} , ϵ_{yz} , ϵ_{zx} die Schiebungen, d.h. die Änderungen des ursprünglich rechten Winkels in der (x, y)-, (y, z)- und (z, x)-Ebene darstellen. Den Verzerrungen entsprechen sechs Spannungszustände, die im Spannungstensor

$$\boldsymbol{\tau}^T = (\tau_{xx} \ \tau_{yy} \ \tau_{zz} \ \tau_{xy} \ \tau_{yz} \ \tau_{zx}) \quad (3.4)$$

zusammengefaßt werden. Die Spannung S ist im allgemeinen die Kenngröße für die Beanspruchung von Festkörperteilchen. Sie ist definiert als Quotient der Teilkraft $d\mathbf{F}$ und dem Flächenelement $d\mathbf{A}$ (siehe Abb. 3.2)

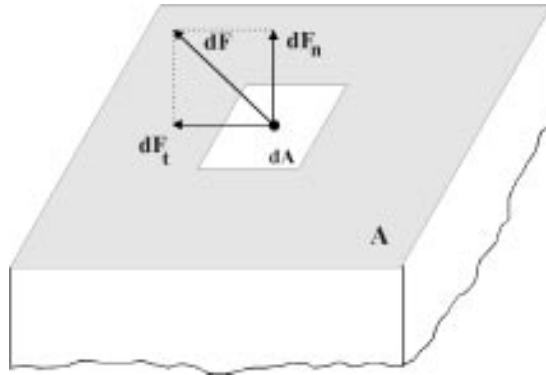


Abbildung 3.2: Zur Definition der Spannung und ihrer Komponenten.

$$S = \frac{d\mathbf{F}}{d\mathbf{A}}. \quad (3.5)$$

Wird nach Abb. 3.2 die Teilkraft $d\mathbf{F}$ in ihre Normalkomponente $d\mathbf{F}_n$ und ihre Tangentialkomponente $d\mathbf{F}_t$ zerlegt, dann ergeben sich eine Normalspannung τ_n

und eine Schubspannung τ_t

$$\begin{aligned}\tau_n &= \frac{dF_n}{dA} \\ \tau_t &= \frac{dF_t}{dA}.\end{aligned}\quad (3.6)$$

In einem würfelförmigen Körperelement läßt sich, wie Bild 3.3 zeigt, der Spannungszustand vollständig beschreiben durch drei Normalspannungen τ_{xx} , τ_{yy} , τ_{zz} und sechs Schubspannungen τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yx} , τ_{yz} , τ_{zx} und τ_{zy} . Dabei gibt der erste Index die Schnittebene, der zweite die Wirkungsrichtung an. Da aus Symmetriegründen $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ und $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ ist, wird der Spannungszustand des Körpers durch die sechs Komponenten des Spannungstensors (3.4) vollständig beschrieben. Eine der zahlreichen Möglichkeiten, das Gleichgewicht

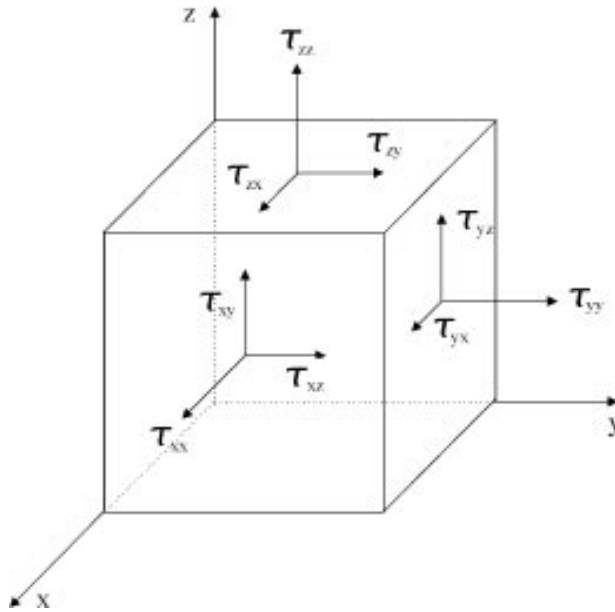


Abbildung 3.3: Zur Erläuterung der Komponenten des Spannungstensors.

eines Körpers zu beschreiben, ist das *Prinzip der virtuellen Verschiebungen*:

Wenn sich ein Körper im Gleichgewicht befindet, ist für beliebige, kompatible, kleine, virtuelle, auf den Körper einwirkende Verschiebungen, die die wesentlichen Randbedingungen befriedigen, die gesamte innere virtuelle Arbeit gleich der gesamten äußeren virtuellen Arbeit.

Mathematisch formuliert man dieses Prinzip als

$$\int_V \bar{\epsilon} \tau \, dV = \int_V \bar{\mathbf{U}}^T \mathbf{f}^B \, dV + \int_S \bar{\mathbf{U}}^{ST} \mathbf{f}^S \, dS + \sum_i \bar{\mathbf{U}}^{iT} \mathbf{F}^i. \quad (3.7)$$

Die innere virtuelle Arbeit auf der linken Seite von Gleichung (3.7) ist die Arbeit, die die aktuellen Spannungen τ entlang der virtuellen Verzerrungen $\bar{\epsilon}$ leisten, die den auferlegten virtuellen Verschiebungen $\bar{\mathbf{U}}$ entsprechen. Die äußere virtuelle Arbeit auf der rechten Seite von Gleichung (3.7) ist die Arbeit, die die virtuellen Lasten an den virtuellen Verschiebungen

$$\bar{\mathbf{U}}^T = (\bar{U} \quad \bar{V} \quad \bar{W}) \quad (3.8)$$

leisten. Das Prinzip der virtuellen Verschiebungen erfüllt alle Forderungen, die an die Lösung eines Problems aus der Strukturmechanik gestellt werden: die betrachteten Verschiebungen sind kontinuierlich und kompatibel, die Verschiebungsrandbedingungen sind befriedigt und die Spannungen im Körper können über ein Materialgesetz (vgl. Abschnitt 3.3.3) aus den Verzerrungen berechnet werden.

Im folgenden Abschnitt soll das Prinzip als Mechanismus zur Aufstellung von Finite-Elemente-Gleichungen für statische, modale und dynamische Analysen angewandt werden.

3.2 Herleitung der Finite-Elemente-Gleichungen

Das kontinuierliche Objekt, dessen mechanische Systemantwort es zu ermitteln gilt, sei nun durch ein Netz von finiten Elementen (siehe Abschnitt 2.3) angenähert. Die in einem lokalen Koordinatensystem x, y, z beschriebenen Verschiebungen innerhalb eines jeden Elements werden als Funktionen der Verschiebungen der N Knotenpunkte des FE-Netzes angenommen. Es gilt für das m -te Element

$$\mathbf{u}^{(m)}(x, y, z) = \mathbf{H}^{(m)}(x, y, z) \hat{\mathbf{U}}. \quad (3.9)$$

$\mathbf{H}^{(m)}$ ist die Verschiebungsinterpolationsmatrix, der hochgestellte Index m kennzeichnet das m -te Element und $\hat{\mathbf{U}}$ ist ein Vektor, der die drei globalen Verschiebungskomponenten U_i, V_i und W_i aller N Knotenpunkte auflistet. $\hat{\mathbf{U}}$ hat folglich die Dimension $3N$ und wird geschrieben als

$$\hat{\mathbf{U}}^T = (U_1 V_1 W_1 \quad U_2 V_2 W_2 \quad U_N V_N W_N). \quad (3.10)$$

Obwohl alle Knotenpunktverschiebungen des FE-Netzes im Verschiebungsvektor $\hat{\mathbf{U}}$ aufgelistet sind, hängen die Verschiebungen und Verzerrungen im Inneren eines bestimmten Elements nur von den Verschiebungen der Knoten *dieses* Elements ab. Mit der Verschiebungsannahme (3.9) können nun die entsprechenden Element-Verzerrungen über

$$\boldsymbol{\epsilon}^{(m)}(x, y, z) = \mathbf{B}^{(m)}(x, y, z)\hat{\mathbf{U}} \quad (3.11)$$

ermittelt werden. Dabei ist $\mathbf{B}^{(m)}$ die Verzerrungs-Verschiebungs-Matrix und wird durch Differenzieren und Kombinieren der Zeilen der Matrix $\mathbf{H}^{(m)}$ erhalten. $\mathbf{B}^{(m)}$ und $\mathbf{H}^{(m)}$ werden im Abschnitt 3.3 für das 8-Knoten-Würfelement hergeleitet. Die Spannungen $\boldsymbol{\tau}^{(m)}$ in einem finiten Element sind mit den Verzerrungen über das Materialgesetz

$$\boldsymbol{\tau}^{(m)} = \mathbf{C}^{(m)}\boldsymbol{\epsilon}^{(m)} \quad (3.12)$$

verknüpft, wobei die Matrix $\mathbf{C}^{(m)}$ die Materialparameter des Elements enthält (vgl. Abschnitt 3.3.3).

Mithilfe der für bestimmte Integrale gültigen Beziehung

$$\int_V (\quad) dV = \sum \int_{V_e} (\quad) dV \quad (3.13)$$

kann Gleichung (3.7) als eine Summe von Integralen über das Volumen und die Flächen aller Elemente umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} \sum_m \int_{V^{(m)}} \bar{\boldsymbol{\epsilon}}^T \boldsymbol{\tau} dV^{(m)} &= \sum_m \int_{V^{(m)}} \bar{\mathbf{U}}^{(m)T} \mathbf{f}^{B(m)} dV^{(m)} \\ &+ \sum_m \int_{S^{(m)}} \bar{\mathbf{U}}^{S(m)T} \mathbf{f}^{S(m)} dS^{(m)} \\ &+ \sum_i \bar{\mathbf{U}}^{iT} \mathbf{F}^i. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Der Index m durchläuft alle Elemente und der Index i kennzeichnet Verschiebungen in denjenigen Punkten, an denen Einzelkräfte \mathbf{F}^i wirken. Jedes der obigen Integrale kann in einer ganz allgemeinen Elementegruppierung effektiv ausgewertet werden, da theoretisch nach Belieben unterschiedliche Koordinatensysteme für die einzelnen Elemente verwendet werden können. Mit den Beziehungen (3.9) bis (3.12) lautet (3.14)

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{U}}^T \left[\sum_m \int_{V^{(m)}} \mathbf{B}^{(m)T} \mathbf{C}^{(m)} \mathbf{B}^{(m)} dV^{(m)} \right] \hat{\mathbf{U}} &= \\ \bar{\mathbf{U}}^T \left\{ \sum_m \int_{V^{(m)}} \mathbf{H}^{(m)T} \mathbf{f}^{B(m)} dV^{(m)} + \sum_m \int_{S^{(m)}} \mathbf{H}^{S(m)T} \mathbf{f}^{S(m)} dS^{(m)} + \mathbf{F} \right\}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

$\mathbf{H}^{S(m)}$ ist in obiger Gleichung die Interpolationsmatrix für Oberflächenverschiebungen, die sich aus $\mathbf{H}^{(m)}$ durch Verwendung der Oberflächenkoordinaten ergibt. Für die Simulationsberechnungen von größerer Bedeutung ist der Vektor \mathbf{F} der äußeren Einzelkräfte, die auf die Knoten des FE-Netzes wirken. Die i -te Komponente von \mathbf{F} ist die Knotenpunkteinzelfraft, die der i -ten Verschiebungskomponente in $\hat{\mathbf{U}}$ entspricht. In Gleichung (3.15) ist der Knotenverschiebungsvektor $\hat{\mathbf{U}}$ unabhängig vom jeweils betrachteten Element. Aus diesem Grunde konnte er aus der Summation herausgezogen werden. Um aus Gleichung (3.15) die unbekanntenen Knotenverschiebungen zu gewinnen, wendet man das Theorem der virtuellen Verschiebungen so an, daß für alle Verschiebungskomponenten der Reihe nach virtuelle Einheitsverschiebungen vorgeschrieben werden. Auf diese Weise wird $\hat{\mathbf{U}}^T$ zur Einheitsmatrix \mathbf{I} . Setzt man nun $\hat{\mathbf{U}} \equiv \mathbf{U}$, lauten die auf die Knotenpunktverschiebungen bezogenen Gleichgewichtsbedingungen:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}\mathbf{U} &= \mathbf{R} \\ \text{mit } \mathbf{R} &= \mathbf{R}_B + \mathbf{R}_S + \mathbf{R}_E. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Die Matrix

$$\mathbf{K} = \sum_m \underbrace{\int_{V^{(m)}} \mathbf{B}^{(m)T} \mathbf{C}^{(m)} \mathbf{B}^{(m)} dV^{(m)}}_{=\mathbf{K}^{(m)}} \quad (3.17)$$

ist die Steifigkeitsmatrix der Elemente-Gruppierung. Der Lastvektor \mathbf{R} enthält den Anteil der auf die Elemente wirkenden Volumenkräfte (z.B. Gravitation, magnetische Krafteinwirkungen)

$$\mathbf{R}_B = \sum_m \underbrace{\int_{V^{(m)}} \mathbf{H}^{B(m)T} \mathbf{f}^{B(m)} dV^{(m)}}_{=\mathbf{R}_B^{(m)}}, \quad (3.18)$$

der Oberflächenkräfte

$$\mathbf{R}_S = \sum_m \underbrace{\int_{S^{(m)}} \mathbf{H}^{S(m)T} \mathbf{f}^{S(m)} dS^{(m)}}_{=\mathbf{R}_S^{(m)}} \quad (3.19)$$

und der Einzelkräfte

$$\mathbf{R}_E = \mathbf{F}. \quad (3.20)$$

Die in Gleichung (3.17) vorgeschriebene Summation der Volumenintegrale über die Elemente entspricht der direkten Addition der Steifigkeitsmatrizen $\mathbf{K}^{(m)}$ der

Elemente. Sie liefert die Steifigkeitsmatrix \mathbf{K} der gesamten Elemente-Gruppierung. Somit enthält die Formulierung der Gleichgewichtsbedingungen (3.16) in der hier entwickelten Weise automatisch die Zusammenfügung von Element-Matrizen zu einer Strukturmatrix. Dieses Vorgehen bezeichnet man als *direkte Steifigkeitsmethode*. In der Praxis werden die Element-Matrizen jedoch in kompakter Form berechnet (siehe Abschnitte 3.3 und 4.1). Die Ordnung der Element-Matrizen entspricht dann den Element-Freiheitsgraden und sie werden unter Berücksichtigung der bekannten Element-Nachbarschaftsbeziehungen nach der direkten Steifigkeitsmethode zusammengefügt. Die Gleichung (3.16) beschreibt das statische Gleichgewicht der Element-Gruppierung. Die unbekannten Knotenverschiebungen, die sich infolge der zeitlich konstanten Belastung einstellen, können mithilfe mathematischer Verfahren zur Lösung von Gleichungssystemen bestimmt werden (siehe Abschnitt 4.2). Das Lösen der Gleichung (3.16) wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit als *statische Analyse* bezeichnet.

Will man die Veränderung der Knotenverschiebungen infolge einer zeitabhängigen Kraft modellieren, muß das Problem kinetisch behandelt werden, d.h. Trägheitskräfte müssen berücksichtigt werden. Nach einem weiteren elementaren Grundsatz der Mechanik, dem sogenannten d'Alembertschen Prinzip, können die Trägheitskräfte formal so berücksichtigt werden, als ob sie zusätzliche räumlich verteilte Kräfte wären. Unter der Voraussetzung, daß für die Beschleunigung der Elementknoten die gleiche Näherung verwendet wird wie für die Verschiebung in (3.9), ist der Beitrag der gesamten räumlich verteilten Kräfte zum Gesamtlastvektor \mathbf{R} in einem stationären X, Y, Z -Koordinatensystem gleich

$$\mathbf{R}_B = \sum_m \int_{V^{(m)}} \mathbf{H}^{B(m)T} [\mathbf{f}^{B(m)} - \rho^{(m)} \mathbf{H}^{B(m)} \ddot{\mathbf{U}}] dV^{(m)}. \quad (3.21)$$

$\ddot{\mathbf{U}}$ ist der Beschleunigungsvektor und $\rho^{(m)}$ die Dichte des Materials im m-ten Element. In diesem Fall sind

$$\mathbf{M} \ddot{\mathbf{U}}(t) + \mathbf{K} \mathbf{U}(t) = \mathbf{R}(t) \quad (3.22)$$

die kinetischen Gleichgewichtsbedingungen bzw. die Bewegungsgleichungen. Die Matrix

$$\mathbf{M} = \sum_m \underbrace{\int_{V^{(m)}} \rho^{(m)} \mathbf{H}^{(m)T} \mathbf{H}^{(m)} dV^{(m)}}_{=\mathbf{M}^{(m)}} \quad (3.23)$$

ist die Massenmatrix der Struktur. Setzt man in Gleichung (3.22) alle Komponenten des Lastvektors $\mathbf{R}(t)$ identisch Null, so erhält man das Gleichungssystem

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{U}(t) = 0 \quad (3.24)$$

für die freie Schwingungsantwort der Elemente-Gruppierung. Als Lösungsansatz dieses Differentialgleichungssystems wählt man

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}_0 e^{i\omega t}. \quad (3.25)$$

Nach Einsetzen von (3.25) in (3.24) erhält man

$$\mathbf{K}\mathbf{U}_0 = \omega^2 \mathbf{M}\mathbf{U}_0. \quad (3.26)$$

Gleichung (3.26) wird auch als generalisiertes Eigenwertproblem bezeichnet, dessen Lösung $3N$ Werte für ω^2 liefert, wenn \mathbf{K} und \mathbf{M} quadratische Matrizen der Dimension $3N$ sind. Eine Elemente-Gruppierung von $3N$ Freiheitsgraden hat somit $3N$ Eigenfrequenzen ω_i . Von physikalischem Interesse sind jedoch häufig nur die Werte am unteren Ende des Eigenwertspektrums (vgl. Abschnitt 5.3). Im Unterkapitel 4.4 wird daher eine Methode vorgestellt, die Eigenwerte gewünschter Eigenschaften berechnet. Die Lösung von Gleichung (3.26) wird im weiteren Verlauf der Arbeit als *modale Analyse* bezeichnet.

Die Messung der kinetischen Antwort von Strukturen zeigt, daß Energie im Verlauf einer Schwingung verlorengeht. Dem trägt man in der Schwingungsanalyse Rechnung, indem man eine geschwindigkeitsabhängige Dämpfungskraft berücksichtigt. Wenn diese Dämpfungskraft als weiterer Beitrag in die räumlich verteilte Kraft eingebracht wird, geht Gleichung (3.21) über in

$$\mathbf{R}_B = \sum_m \int_{V^{(m)}} \mathbf{H}^{(m)T} [\mathbf{f}^{B(m)} - \rho^{(m)} \mathbf{H}^{(m)} \ddot{\mathbf{U}} - \kappa^{(m)} \mathbf{H}^{(m)} \dot{\mathbf{U}}] dV^{(m)}. \quad (3.27)$$

$\dot{\mathbf{U}}$ ist der Geschwindigkeitsvektor der Knotenpunkte und $\kappa^{(m)}$ die Dämpfungskonstante des Materials im m -ten Element. Damit geht (3.22) über in

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}}(t) + \mathbf{C}\dot{\mathbf{U}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{U}(t) = \mathbf{R}(t), \quad (3.28)$$

wobei

$$\mathbf{C} = \sum_m \underbrace{\int_{V^{(m)}} \kappa^{(m)} \mathbf{H}^{(m)T} \mathbf{H}^{(m)} dV^{(m)}}_{=\mathbf{C}^{(m)}} \quad (3.29)$$

die Dämpfungsmatrix der Struktur ist. Zur Lösung des Gleichungssystems (3.28) gibt es verschiedene Schemata, von denen eines im Abschnitt (4.5.1) vorstellt

wird. Als Ergebnis der Berechnungen erhält man die Verschiebungen, Geschwindigkeiten und Beschleunigungen aller Knotenpunkte des FE-Netzes in allen drei Raumrichtungen. Die Durchführung derartiger Berechnungen wird im folgenden *dynamische Analyse* genannt.

Bei den in diesem Abschnitt hergeleiteten Finite-Elemente-Gleichungen wurde angenommen, daß die Verschiebungen der Netzknoten klein sind und das Material linear elastisch ist. Die hergeleiteten Gleichungssysteme gelten damit für eine *lineare* Strukturberechnung, weil die Verschiebungsantwort eine lineare Funktion des Vektors der wirkenden Kraft ist. Hier soll kurz rekapituliert werden, an welche Stellen die oben erwähnten Annahmen in die Herleitung eingeflossen sind. Die Voraussetzung, daß die Verschiebungen klein sein müssen, ist in die Auswertung der Strukturmatrizen eingegangen, weil dabei alle Integrationen über das Volumen der unverformten finiten Elemente ausgeführt worden sind und weil die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix $\mathbf{B}^{(m)}$ und Interpolationsmatrizen $\mathbf{H}^{(m)}$ eines jeden Elements als konstant und unabhängig von den Elementverschiebungen angenommen wurde. Die Annahme eines linear-elastischen Materialverhaltens ist mitenthalten in der Verwendung einer konstanten Materialmatrix $\mathbf{C}^{(m)}$. Für die modalen und dynamischen FE-Analysen, die in Kapitel 5 vorgestellt werden, sind die Voraussetzungen für eine lineare FE-Analyse erfüllt. Anders verhält es sich jedoch bei der Simulation eines Tumorwachstums im Kopf (siehe Abschnitt 5.4). Hier treten große Verschiebungen der Netzknoten auf, weswegen eine *nichtlineare* FE-Analyse angezeigt ist. Aus Gründen, die erst in Abschnitt 5.4 deutlich werden, kann man sich bei der Simulation des Tumorwachstums auf eine *geometrisch* nichtlineare (statische) Analyse beschränken, d.h. die Deformation der finiten Elemente wird bei der Integration über ihr Volumen berücksichtigt. Ausführlich beschrieben sind die mathematische Grundlagen einer solchen nichtlinearen Berechnung in Abschnitt 4.3.1.

Da in der vorangehenden Herleitung keine Annahmen über Geometrie und Interpolationsverhalten finiter Elemente gemacht wurden, soll dies im folgenden Abschnitt nachgeholt werden. Darin wird der Aufbau der Elementmatrizen $\mathbf{M}^{(m)}$, $\mathbf{C}^{(m)}$ und $\mathbf{K}^{(m)}$ für ein spezielles Element beschrieben. Dieses sogenannte 8-Knoten-Würfelement wird aufgrund seiner guten Interpolationseigenschaften für alle Analysen verwendet.

3.3 Das finite Würfelement

Das 8-Knoten-Würfelement gehört zur Familie der isoparametrischen Elemente. Der Grundgedanke bei der Formulierung dieser Elementart ist, die Verbindung zwischen den Element-Verschiebungen in einem beliebigen Punkt und den Element-Knotenpunktverschiebungen durch Interpolationsfunktionen auszudrücken. Die Interpolationsfunktionen werden im sogenannten natürlichen Koordinatensystem des Elements definiert. Die natürlichen Koordinaten r , s , t eines Elements laufen jeweils von -1 bis 1 und der Ursprung des Koordinatensystems befindet sich im Mittelpunkt des Elements (siehe Abb. 3.4).

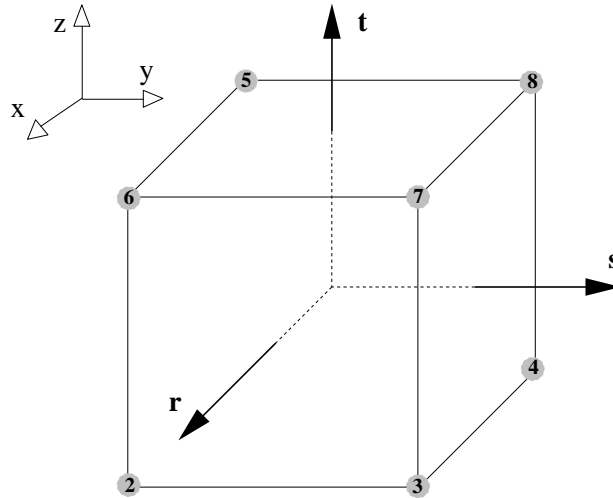


Abbildung 3.4: Natürliches Koordinatensystem und Knotennummerierung des finiten Würfelements.

Die Koordinateninterpolationen für ein allgemeines dreidimensionales Element sind

$$x = \sum_{i=1}^q h_i x_i; \quad y = \sum_{i=1}^q h_i y_i; \quad z = \sum_{i=1}^q h_i z_i. \quad (3.30)$$

Dabei sind x , y und z die lokalen Koordinaten in einem beliebigen Punkt des Elements und x_i , y_i sowie z_i , ($i=1, 2, \dots, q$) die Koordinaten der q Elementknoten. Die zum Knoten i gehörige Interpolationsfunktion h_i aus Gleichung (3.30) ist im natürlichen Koordinatensystem definiert und muß für die Koordinaten des i -ten Knotens den Wert 1 liefern und für alle anderen Knoten den Wert 0. Diese Bedingungen kann man dazu benutzen, die Funktionen h_i für eine be-

stimmte Knotenpunktanzahl auf systematische Art zu bestimmen. Für das 8-Knoten-Würfelement lauten sie

$$\begin{aligned}
 h_1 &= 0.125 (1-r) (1-s) (1-t), \\
 h_2 &= 0.125 (1+r) (1-s) (1-t), \\
 h_3 &= 0.125 (1+r) (1+s) (1-t), \\
 h_4 &= 0.125 (1-r) (1+s) (1-t), \\
 h_5 &= 0.125 (1-r) (1-s) (1+t), \\
 h_6 &= 0.125 (1+r) (1-s) (1+t), \\
 h_7 &= 0.125 (1+r) (1+s) (1+t) \quad \text{und} \\
 h_8 &= 0.125 (1-r) (1+s) (1+t).
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

Von den Funktionen h_i verlangt man, daß sie stetig sind und ihre ersten Ableitungen einen endlichen Wertebereich aufweisen. Funktionen mit diesen Eigenschaften nennt man C_0 -stetig.

Theoretisch läßt sich das 8-Knoten Element auf bis zu 20 Knoten erweitern, indem Knoten auf Flächen und Kanten hinzugefügt werden. Es gilt dann, für jeden weiteren Knoten eine zusätzliche Interpolationsfunktion zu erstellen und die schon bestehenden zu modifizieren. Dieser Hinweis soll als nachträgliche Begründung dienen, warum in dieser Arbeit Simulationen nicht auf der Basis anisotroper Würfelnetze durchgeführt werden. Man kann an dieser Stelle den Aufwand ermessen, der bei der Implementierung nötig wäre, um Würfelemente unterschiedlichster Knotenanzahl in einer FE-Analyse zu berücksichtigen. Dieser Aufwand steht in keinem Verhältnis zum erzielbaren Nutzen einer Reduzierung der Elementanzahlen, die viel bequemer über anisotrope Tetraedernetze erreicht wird.

Für das Erstellen der Steifigkeits-, Dämpfungs- und Massenmatrix eines finiten Elements benötigt man, wie den Definitionsgleichungen (3.28), (3.23) und (3.17) zu entnehmen ist, die Matrizen \mathbf{H} , \mathbf{B} und \mathbf{C} . Der hochgestellte Index $^{(m)}$ wird aus Gründen der Übersichtlichkeit im folgenden weggelassen. Das Aufstellen der Matrizen und die Lösung von Integralen über Produkte dieser Matrizen für den speziellen Fall des finiten Würfelements sollen in den nächsten Unterabschnitten erläutert werden.

3.3.1 Die Verschiebungsinterpolationsmatrix \mathbf{H}

Es ist ein Vorteil der isoparametrischen Formulierung, daß die Element-Verschiebungsfunktionen leicht konstruiert werden können. Die lokalen Element-Verschiebungen u , v und w werden in der gleichen Weise interpoliert wie die Geometrie des Elements. Analog zu (3.31) werden die Beziehungen

$$u = \sum_{i=1}^q h_i u_i; \quad v = \sum_{i=1}^q h_i v_i; \quad w = \sum_{i=1}^q h_i w_i \quad (3.32)$$

verwendet. u_i , v_i und w_i ($i=1, \dots, q$) sind die Element-Verschiebungen in den Knotenpunkten. Es wird also angenommen, daß jeder Knotenpunktcoordinate, die zur Beschreibung der Geometrie des Elements erforderlich ist, eine Knotenpunktverschiebung entspricht.

Die Beziehungen (3.32) lassen sich analog zu (3.9) vektoriell darstellen als

$$\mathbf{u}(r, s, t) = \mathbf{H}(r, s, t) \hat{\mathbf{u}}, \quad (3.33)$$

wobei \mathbf{u} der 3-komponentige Vektor der Verschiebungen u , v und w ist, \mathbf{H} die von den natürlichen Koordinaten abhängige Verschiebungsinterpolationsmatrix und der Vektor $\hat{\mathbf{u}}$ die 3 x 8 Knotenpunktverschiebungen $u_1, v_1, w_1, \dots, u_8, v_8, w_8$ gemessen im lokalen Koordinatensystem x, y, z auflistet. Die Interpolationsmatrix hat für ein Würfelement die Form

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_1 & 0 & 0 & h_2 & 0 & 0 & h_3 & \dots & h_8 & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 0 & 0 & h_2 & 0 & 0 & h_3 & \dots & h_8 & 0 \\ 0 & 0 & h_1 & 0 & 0 & h_2 & 0 & 0 & h_3 & \dots & h_8 \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

Die h_i sind die in (3.31) definierten Funktionen. Die Matrix \mathbf{H} wird zur Erzeugung der Masse- und Dämpfungsmatrix eines finiten Elements benötigt (siehe Gleichungen (3.29) und (3.23)). Zum Aufstellen der Steifigkeitsmatrix bedarf es noch der Verzerrungs-Verschiebungsmatrix \mathbf{B} , die nun definiert werden soll.

3.3.2 Die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix \mathbf{B}

Um an die Einträge dieser Matrix für das finite Würfelement zu gelangen, muß zunächst der Verzerrungstensor (3.3) definiert werden. Im Rahmen der linearen Elastizitätstheorie erhält man die Element-Verzerrungen in Form von Ableitungen der Element-Verschiebungen nach den lokalen Koordinaten. Die Einträge des Verzerrungstensor lauten dann

$$\epsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \epsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \epsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z},$$

$$\epsilon_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \epsilon_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}, \quad \epsilon_{zx} = \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}. \quad (3.35)$$

Mithilfe dieser Definitionsgleichungen und der Beziehung (3.32) läßt sich der Zusammenhang zwischen dem Verzerrungstensor und den Knotenpunktverschiebungen definieren (vgl. (3.11)) als

$$\boldsymbol{\epsilon}(r, s, t) = \mathbf{B}(r, s, t) \hat{\mathbf{u}}. \quad (3.36)$$

Die Matrix

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial x} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial h_8}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial h_1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial y} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial h_8}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial h_1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial z} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial h_8}{\partial z} \\ \frac{\partial h_1}{\partial y} & \frac{\partial h_1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial y} & \frac{\partial h_2}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial h_8}{\partial y} & \frac{\partial h_8}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial h_1}{\partial z} & \frac{\partial h_1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial z} & \frac{\partial h_2}{\partial y} & \dots & 0 & \frac{\partial h_8}{\partial z} & \frac{\partial h_8}{\partial y} \\ \frac{\partial h_1}{\partial z} & 0 & \frac{\partial h_1}{\partial x} & \frac{\partial h_2}{\partial z} & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial x} & \dots & \frac{\partial h_8}{\partial z} & 0 & \frac{\partial h_8}{\partial x} \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

ist die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix für das finite Würfелеlement. Ihre Einträge sind die Ableitungen der Interpolationsfunktionen, die in den natürlichen Koordinaten r , s und t beschrieben sind, nach den lokalen Koordinaten x , y und z . Da die beiden Koordinatensysteme über die Beziehung (3.30) miteinander verknüpft sind, ermittelt man die partiellen Ableitungen $\partial/\partial r$, $\partial/\partial s$ und $\partial/\partial t$ mit der Kettenregel

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial s} \\ \frac{\partial}{\partial t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

oder in Matrixschreibweise

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{J} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}. \quad (3.39)$$

Die Matrix \mathbf{J} wird auch Jacobischer Operator genannt. Durch Inversion folgt aus (3.39)

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{J}^{-1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}. \quad (3.40)$$

Die Inverse von \mathbf{J} existiert, wenn die Beziehungen zwischen den natürlichen und lokalen Koordinaten eindeutig sind. Die Ableitungen nach den lokalen Koordinaten der i -ten Interpolationsfunktion erhält man somit mithilfe des inversen

Jacobischen Operators

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial h_i}{\partial x}(x, y, z) \\ \frac{\partial h_i}{\partial y}(x, y, z) \\ \frac{\partial h_i}{\partial z}(x, y, z) \end{pmatrix} = \mathbf{J}^{-1}(r, s, t) \begin{pmatrix} \frac{\partial h_i}{\partial r}(r, s, t) \\ \frac{\partial h_i}{\partial s}(r, s, t) \\ \frac{\partial h_i}{\partial t}(r, s, t) \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

Da sich die Einträge von \mathbf{J}^{-1} nur mit großem Aufwand explizit bestimmen lassen, nutzt man zur Berechnung der in der Matrix \mathbf{B} vorkommenden Ableitungen der Funktionen h_i nach den lokalen Koordinaten die Cramersche Regel.

Cramersche Regel *Es sei \mathbf{J} eine quadratische Matrix und $\det \mathbf{J} \neq 0$. Dann ist die Lösung des linearen Gleichungssystems $\mathbf{x} = \mathbf{J}^{-1}\mathbf{b}$ gegeben durch*

$$x_j = \frac{(\det \mathbf{J})_j}{\det \mathbf{J}}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (3.42)$$

Dabei entsteht die Determinante $(\det \mathbf{J})_j$ aus der Determinante der Matrix \mathbf{J} , indem man dort die j -te Spalte durch \mathbf{b} ersetzt.

Die Anwendung dieser Regel bedeutet, daß (3.41) gelöst werden kann, wenn die Einträge der Matrix \mathbf{J} bekannt sind. Da die Ableitungen der lokalen Koordinaten x, y, z nach den natürlichen Koordinaten r, s, t aus den Gleichungen (3.30) und (3.31) zu berechnen sind, ist die Matrix \mathbf{J} im Vergleich zu ihrer Inversen bequem aufzustellen. Die Einträge der Verzerrungs- und Verschiebungsmatrix $\mathbf{B}(r, s, t)$ für ein finites Würfelement sind damit bestimmt.

3.3.3 Die Materialmatrix \mathbf{C}

Zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix eines finiten Elements ist neben der Verzerrungs- und Verschiebungsmatrix \mathbf{B} noch die Materialmatrix \mathbf{C} aufzustellen. Sie enthält alle nötigen Materialparameter, die das elastische Verhalten des finiten Elements bestimmen. Sie stellt die Beziehung zwischen dem Spannungstensor (3.4) und dem Verzerrungstensor (3.3) über das verallgemeinerte Hook'sche Gesetz $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{C}\boldsymbol{\epsilon}$ (vgl. 3.12) her. Wenn die Materialien als elastisch und isotrop angenommen werden, läßt sich ihr mechanisches Verhalten mit zwei Parametern beschreiben, dem Elastizitätsmodul E und der Poissonschen Zahl ν . Die Matrix

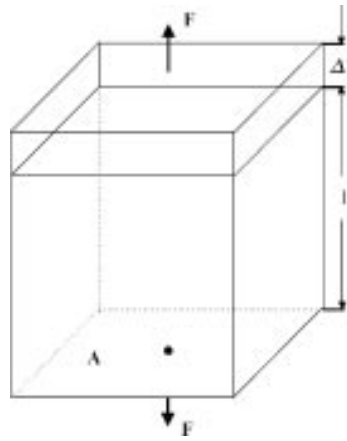


Abbildung 3.5: Die Verformungsart, die durch das Elastizitätsmodul erfaßt wird.

$$\mathbf{C} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\nu}{1-\nu} & \frac{\nu}{1-\nu} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu}{1-\nu} & 1 & \frac{\nu}{1-\nu} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu}{1-\nu} & \frac{\nu}{1-\nu} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

hat in diesem Fall als Einträge nur Produkte der beiden Materialparameter, die über die folgenden betragsmäßigen Gleichungen definiert sind:

$$\begin{aligned} E &= \frac{A \Delta l}{F l} \\ \nu &= \frac{\Delta l}{l} \frac{d}{\Delta d}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Die schematischen Darstellungen (3.5) und (3.6) erklären die Bedeutungen der in (3.44) benutzten Größen. Die Abbildungen geben zudem an, welche Art von Verformung des Körpers von E und ν erfaßt werden. Das Elastizitätsmodul entspricht der Steifigkeit eines Materials und die Poissonsche Zahl ν ist das Verhältnis von Längsdehnung und Querkontraktion eines Körpers unter Zug.

Es sei an dieser Stelle betont, daß es sich bei den Einträgen der Matrix \mathbf{C} um Konstanten handelt, d.h. daß ihre Werte innerhalb des finiten Elements nicht variieren. Die Begründung für die Wahl linearen Materialverhaltens und die Auswahl bestimmter Materialparameter wird ausführlich in Abschnitt 5.1

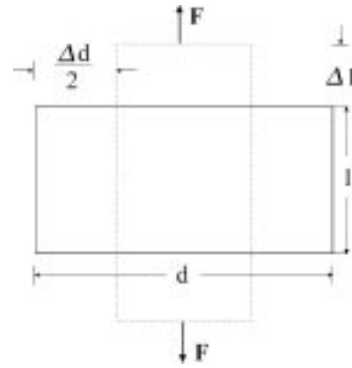


Abbildung 3.6: Die Verformungsart, die durch die Poissonsche Zahl erfaßt wird.

behandelt. Auf die aktuelle Forschungssituation bei der Bestimmung des Verhaltens der “Kopfmaterialeien“ wird in der abschließenden Diskussion nochmal Bezug genommen.

3.3.4 Numerische Integration

Nach der Erstellung aller Matrizen, die zur Berechnung der Elementmatrizen \mathbf{K} , \mathbf{C} und \mathbf{M} benötigt werden, gilt es im letzten Schritt die in den Gleichungen (3.28), (3.23) und (3.17) vorkommende Integration über das Elementvolumen durchzuführen. Im Falle des finiten Würfelements geschieht dies numerisch mit der Gauß-Quadratur. Da die numerische Integration der Einfachheit halber im natürlichen Koordinatensystem ausgeführt wird, in dem auch die Matrizen \mathbf{H} , \mathbf{B} und \mathbf{J} beschrieben sind, muß das infinitesimale Volumenelement dV über

$$dV = dx dy dz = dr ds dt \det \mathbf{J} \quad (3.45)$$

transformiert werden. Die numerische Integration im Dreidimensionalen läßt sich nun allgemein als Ersetzung eines Integrals durch eine Summe schreiben

$$\int_V \mathbf{F}(r, s, t) dr ds dt = \sum_{i,j,k} \alpha_{i,j,k} \mathbf{F}(r_i, s_j, t_k). \quad (3.46)$$

Für die Berechnung

$$\begin{aligned} \text{der Steifigkeitsmatrix ist } \mathbf{F} &= \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} \det \mathbf{J}, \\ \text{für die Massenmatrix } \mathbf{F} &= \mathbf{H}^T \rho \mathbf{H} \det \mathbf{J} \\ \text{und bei der Dämpfungsmatrix } \mathbf{F} &= \mathbf{H}^T \kappa \mathbf{H} \det \mathbf{J}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Die $\alpha_{i,j,k}$ sind Wichtungsfaktoren und die $\mathbf{F}(r_i, s_j, t_k)$ sind die Werte der Matrizen $\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \mathbf{t})$ an den Stützstellen. Bei dem Verfahren der Gauß-Quadratur sind sowohl die Lage der Stützpunkte als auch die Gewichtungsfaktoren optimiert. Die zu wählende Anzahl der Stützstellen hängt von der Ordnung der zu integrierenden Funktion ab. Es gilt die Regel, daß mit n Stützstellen ein Polynom $(2n-1)$ -ter Ordnung exakt integriert werden kann. Einfache Überlegungen (vgl. auch [81]) zeigen, daß im Falle des finiten Würfelements zwei Stützstellen pro Raumrichtung ausreichen, um über das Elementvolumen exakt zu integrieren. Die für diese $2 \times 2 \times 2$ -Integration benötigten Koordinaten der acht Stützpunkte und ihre entsprechenden Wichtungsfaktoren können der einschlägigen Literatur entnommen werden [82].

Hiermit wird die Beschreibung der mathematischen Grundlagen der FEM und die Formulierung eines speziellen finiten Elements, des isoparametrischen Würfelements, abgeschlossen. Die Lösung der Integrale für Volumen- und Oberflächenkräfte (3.18) und (3.19) wurde in diesem Kapitel ausgespart, da sie für die in Kapitel 5 vorgestellten Simulationen keine Rolle spielen. Die Implementierung und Lösung der in diesem Kapitel allgemein hergeleiteten FE-Gleichungssysteme auf einer parallelen Computerarchitektur sind Gegenstand des nächsten Kapitels.

Kapitel 4

Numerische Verfahren

In diesem Kapitel werden Algorithmen und numerische Techniken vorgestellt, die FE-Analysen unterschiedlicher Zielrichtung (statisch, modal, dynamisch) für räumlich hochaufgelöste FE-Netze des menschlichen Kopfes praktikabel machen. Dabei gilt es je nach Analyseart die aus Abschnitt 3.2 bekannten Gleichungssysteme

$$\begin{aligned}\mathbf{KU} &= \mathbf{R}, \\ \mathbf{KU}_0 &= \omega^2 \mathbf{MU}_0 \text{ und} \\ \mathbf{KU}(t) + \mathbf{C}\dot{\mathbf{U}}(t) + \mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}}(t) &= \mathbf{R}(t)\end{aligned}$$

zu lösen. Im ersten Arbeitsschritt werden die für das jeweilige Gleichungssystem notwendigen $n \times n$ Strukturmatrizen aufgestellt, während gleichzeitig Randbedingungen für die Netzknoten berücksichtigt werden. Daraufhin werden die Gleichungssysteme bei optimiertem Speicher- und Rechenzeitaufwand mit Methoden gelöst, die von der gewählten Analyseart abhängen. Trotz der Verschiedenartigkeit der drei obigen Gleichungssysteme weisen die numerischen Techniken identische Unterroutrinen auf. Die zentrale Rolle spielt bei allen drei Analysen das Lösen linearer Gleichungssysteme. Zu diesem Zweck wurde die *Methode der konjugierten Gradienten* (CG-Methode) ausgewählt, deren theoretische Grundlagen und effiziente Implementierung in Abschnitt 4.2 ausführlich behandelt werden.

Das iterative Lösungsschema von Newton-Raphson zur Durchführung der geometrisch-nichtlinearen statischen Analyse ist in Abschnitt 4.3.1 zu finden. Eine kurze Einführung in den iterativen Lanczos-Algorithmus zur Lösung von generalisierten Eigenwertproblemen (siehe Gleichung 3.26) liefert Abschnitt 4.4.

Im darauffolgenden Unterkapitel wird eine der bekanntesten Methoden zur Integration von (3.28), das Newmarksche Verfahren, vorgestellt. Die drei Analysearten liefern numerische Ergebnisse (Verschiebungen, Eigenmoden, zeitabhängige Spannungszustände), die im letzten Arbeitsschritt des FE-Programms zu visualisieren sind. Auf Darstellungstechniken von Simulationsergebnissen wird erst in Kapitel 5 Bezug genommen. Abb. 4.1 faßt die Arbeitsschritte des FE-Programms in einem Schaubild zusammen.

Bevor jedoch die algorithmischen Details der verschiedenen FE-Analysearten vorgestellt werden, sollen die Routinen, die bei allen drei Untersuchungsmethoden identisch sind, beschrieben werden; der nächste Abschnitt gibt einen Einblick in das Erstellen der Strukturmatrizen und ihr spezielles Format; Gegenstand des darauffolgenden Unterkapitels ist die Methode der konjugierten Gradienten zur Lösung von Gleichungssystemen.

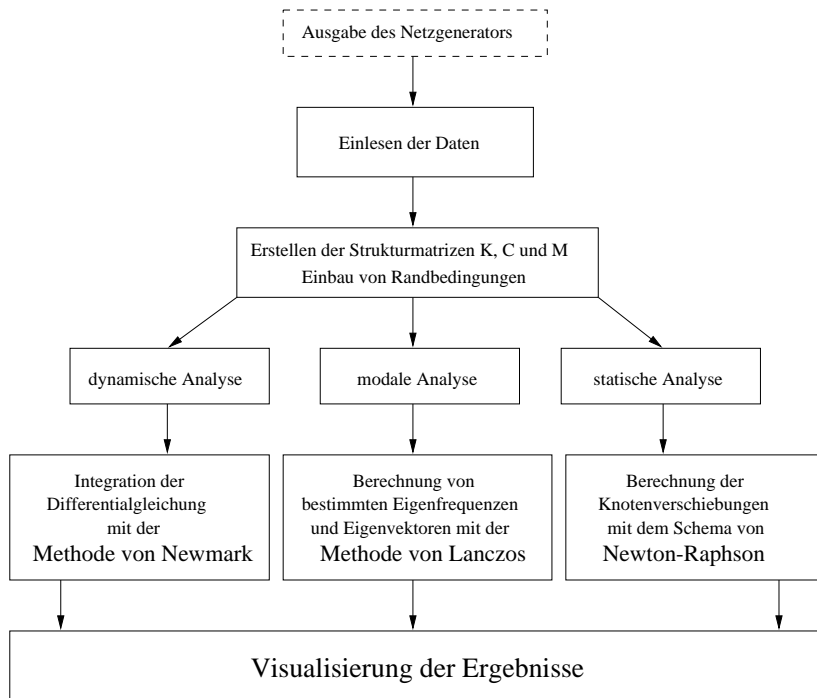


Abbildung 4.1: *Flußdiagramm des FE-Programms; nach dem Aufbau der Strukturmatrizen verzweigt sich der Ablauf des Programms. Je nach Wahl der Analyseart wird eine geeignete Methode gewählt. Alle drei Lösungsverfahren nutzen die CG-Methode.*

4.1 Aufbau der Strukturmatrizen

Der Aufbau der globalen Strukturmatrizen \mathbf{K} , \mathbf{C} und \mathbf{M} erfolgt im ersten Schritt des FE-Programms. Für jedes Element wird eine Elementmatrix erstellt, die gemäß den globalen Freiheitsgraden, die im jeweiligen Element enthalten sind, in die Strukturmatrix eingebaut werden. Die $3N$ Freiheitsgrade der Berechnungen sind die Verschiebungen aller N Knoten des FE-Netzes in die drei Raumrichtungen. Abb. 4.2 verdeutlicht das Vorgehen der sogenannten direkten

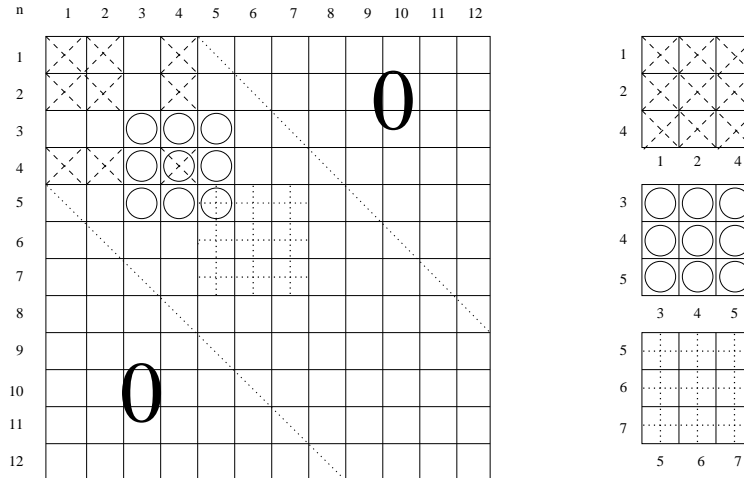


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung des Einbaus von 3×3 Elementmatrizen (rechts im Bild) in eine 12×12 Strukturmatrix (links im Bild).

Steifigkeitsmethode (vgl. Abschnitt 3.2) mithilfe von drei Elementmatrizen, die in eine Strukturmatrix eingebaut werden. Die Zahlen am Rande der Matrizen stellen die Numerierung der Freiheitsgrade dar. Die Matrix enthält nur Nicht-Nulleinträge in einem schmalen Bereich rechts und links der Hauptdiagonalen. Diese Bandstruktur der Matrix ermöglicht es, Berechnungen hoher räumlicher Auflösung mit der FEM durchführen zu können. Bei einer Strukturmatrix der Dimension $n=200\,000$ sind weniger als 0.0001% aller Einträge ungleich Null. Das Aussehen einer typischen Strukturmatrix \mathbf{S} , die einer elastomechanischen FE-Berechnung zugrundeliegt, zeigt Abb. 4.3. Die Matrizen, auf denen die FE-Berechnungen basieren, weisen nicht nur Bandgestalt auf, sondern sind zudem symmetrisch. Diese beiden Eigenschaften ermöglichen ein speicherplatzsparendes Matrizenformat. Da im weiteren Verlauf des FE-Programms die Strukturmatrizen nur über eine Matrix-Vektormultiplikation adressiert werden, kann man ein besonders effizientes Format benutzen. Im FE-Programm wird nur die

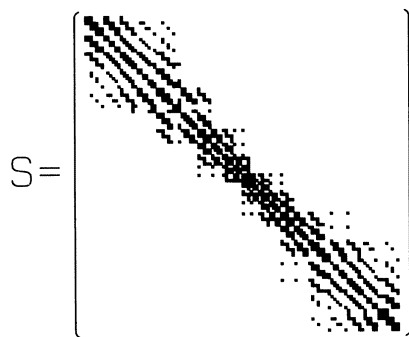


Abbildung 4.3: *Typische Strukturmatrix einer FE-Analyse: Nicht-Null Elemente sind schwarz markiert.*

obere Hälfte einer Strukturmatrix berücksichtigt. Von jeder Matrixzeile werden nur die Nicht-Nullelemente und deren Spaltenindizes j in Vektoren gespeichert. Die Diagonalelemente werden in einem gesonderten Vektor abgespeichert, da sie für die Jacobi-Vorkonditionierung (siehe Abschnitt 4.2.3) verfügbar sein müssen.

Den Randbedingungen, die für alle Netzknoten definiert sein müssen, wird beim Aufbau der Strukturmatrizen Rechnung getragen. Das FE-Programm läßt die Wahl zwischen zwei verschiedenen Randbedingungen für die Netzknoten zu. Als standardmäßige Ausgabe liefert der Netzgenerator Knoten, die in alle drei Richtungen frei beweglich sind. Netzknoten können in ihrer Beweglichkeit eingeschränkt werden, indem man einen, zwei oder alle drei Freiheitsgrade fixiert. Programmtechnisch erfolgt die Fixierung durch Nullsetzen der zum Freiheitsgrad gehörigen Zeilen und Spalten der Strukturmatrizen. Mithilfe der beschriebenen Möglichkeiten lassen sich die physikalischen Randbedingungen eines realen Körpers bequem bei der Erstellung der FE-Matrizen in das FE-Modell einbauen.

4.2 Die Methode der konjugierten Gradienten

4.2.1 Einführung

Es existiert eine Reihe von Strategien zur Lösung von Gleichungssystemen, die auf dünn besetzten Matrizen beruhen [83]. Die Lösungsverfahren lassen sich in zwei Klassen einteilen, in direkte [84] und iterative Methoden [85]. Eine direkte Methode ist ein Algorithmus, der die Lösung in einer Anzahl von Schrit-

ten produziert, die a priori durch die Problemgröße festgelegt ist. Bei genauer Arithmetik eines Digitalrechners würde eine direkte Methode die exakte Lösung des Gleichungssystems liefern. Im Gegensatz dazu würde eine iterative Strategie keine exakte Lösung berechnen, sondern eine Sequenz von Annäherungen an die Lösung. Die Länge dieser Sequenz ist nicht durch das Problem vorbestimmt, sie wird durch ein Abbruchkriterium festgelegt. Trotz des Nachteils bezüglich der Genauigkeit wurde für das FE-Programm eine iterative Strategie ausgewählt, die Methode der konjugierten Gradienten (CG-Methode). Ihr wichtigster Vorteil gegenüber direkten Verfahren (z.B. LU- oder Cholesky-Zerlegung) besteht im vergleichsweise geringen Speicherplatzbedarf. Bei direkten Verfahren wächst der Bedarf an Speicher quadratisch mit der Problemgröße. Die auf einem direkten Verfahren basierende SGI-Bibliotheksroutine „psldlt“ alloziert für ein Problem mit ungefähr 100000 Unbekannten mehr als 1.5 GB, wohingegen die (vorkonditionierte) CG-Methode mit 150 MB auskommt. Eine alternative direkte Routine aus der SuperLU-Bibliothek [86] übertrifft sogar den Speicherbedarf von „psldlt“, da sie es nicht ermöglicht, die Symmetrie der Matrix auszunutzen. Da man aufgrund der komplexen Geometrie des Untersuchungsobjekts auf eine hohe räumliche Auflösung angewiesen ist, die zu einer großen Zahl von Unbekannten führt, scheiden hier direkte Techniken aus. Iterative Verfahren benötigen jedoch im allgemeinen mehr Rechenoperationen als direkte Strategien, um zu einem Ergebnis ausreichender Genauigkeit zu kommen. Diesen Nachteil kann man, wie im weiteren gezeigt werden wird, durch Modifikationen des CG-Algorithmus teilweise kompensieren.

Die Vorteile der CG-Methode im Rahmen der Problemstellung können wie folgt zusammengestellt werden.

- Durch den relativ geringen Speicherplatzbedarf der CG-Methode ist man in der Lage, Probleme mit bis zu einer halben Million Unbekannten zu lösen.
- Da die CG-Methode nur die von Null verschiedenen Matrixelemente bei einer Matrix-Vektoroperation adressiert, müssen nur die Nicht-Null-Einträge in einer zeilenorientierten Weise abgespeichert werden.
- Ohne hohen zusätzlichen Rechenaufwand läßt sich durch Skalierung, Vorkonditionierung und Parallelisierung eine erhebliche Beschleunigung des CG-Algorithmus erzielen (siehe Abschnitt 4.2.4).

Die theoretische Basis des CG-Verfahrens und die Möglichkeiten zu seiner Beschleunigung sind Gegenstand des nächsten Abschnitts.

4.2.2 Theoretische Grundlagen

Die Methode der konjugierten Gradienten nach Hestenes-Stiefel [87] ist ein Algorithmus zur approximativen Lösung von symmetrischen und positiv definiten $n \times n$ Gleichungssystemen, die man allgemein schreibt als

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}. \quad (4.1)$$

Innerhalb der Gruppe der iterativen Verfahren gehört sie zu den sogenannten nichtstationären Methoden. Diese unterscheiden sich von stationären Verfahren (z.B. Gauß-Seidel-Iteration) dadurch, daß sie Informationen in die Berechnungen einbeziehen, die sich bei jeder Iteration ändern. Die CG-Methode basiert auf der Idee, das Funktional

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} \quad (4.2)$$

zu minimieren. Im Verfahren der konjugierten Gradienten wird das Minimum von $f(\mathbf{x})$ bestimmt, indem in jedem Teilschritt von der Richtung des Gradienten der zu minimierenden Funktion Gebrauch gemacht wird. Der Gradient ist gegeben durch

$$\nabla f = \mathbf{Ax} - \mathbf{b} = \mathbf{r}. \quad (4.3)$$

Der Gradient ist also gleich dem Residuenvektor \mathbf{r} zum Vektor \mathbf{x} . Der Gradient der Funktion $f(\mathbf{x})$ weist im Punkt \mathbf{x} in die Richtung der lokal stärksten Zunahme. Man wählt daher den negativen Gradienten als Suchrichtung für das Minimum von $f(\mathbf{x})$. Im folgenden sollen nur die wesentlichen Punkte des Verfahrens skizziert werden. Eine detaillierte Herleitung findet man in [88].

Es sei $\mathbf{x}^{(0)}$ ein gewählter Startvektor. Um $f(\mathbf{x}^{(1)}) < f(\mathbf{x}^{(0)})$ zu erreichen, wird im ersten Schritt des Verfahrens die Suchrichtung $\mathbf{p}^{(1)}$ durch den negativen Residuenvektor $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{Ax}^{(0)} - \mathbf{b}$ festgelegt.

$$\mathbf{p}^{(1)} = -\mathbf{r}^{(0)} = -(\mathbf{Ax}^{(0)} - \mathbf{b}) \quad (4.4)$$

Ausgehend von $\mathbf{x}^{(0)}$ sucht der Algorithmus in Richtung $\mathbf{p}^{(1)}$ das Minimum der Funktion $f(\mathbf{x})$. Mit dem Ansatz

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + q_1 \mathbf{p}^{(1)} \quad (4.5)$$

wird die Forderung $f(\mathbf{x}^{(1)}) = \text{Min!}$ für

$$q_1 = -\frac{\mathbf{p}^{(1)T} \mathbf{r}^{(0)}}{\mathbf{p}^{(1)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(1)}} = \frac{\mathbf{r}^{(0)T} \mathbf{r}^{(0)}}{\mathbf{p}^{(1)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(1)}} \quad (4.6)$$

erfüllt. Im zweiten und allgemeinen k -ten Iterationsschritt wird als Suchrichtung $\mathbf{p}^{(k)}$ eine Linearkombination von $-\mathbf{r}^{(k-1)}$ und der vorhergehenden Suchrichtung $\mathbf{p}^{(k-1)}$ so bestimmt, daß die beiden Richtungen $\mathbf{p}^{(k)}$ und $\mathbf{p}^{(k-1)}$ konjugiert zueinander sind, d.h. daß

$$\mathbf{p}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k-1)} = 0 \quad (4.7)$$

gilt. Diese Forderung kann geometrisch begründet werden [89]. Für die k -te Suchrichtung lautet dann der Ansatz

$$\mathbf{p}^{(k)} = -\mathbf{r}^{(k-1)} + e_{(k-1)} \mathbf{p}^{(k-1)}, \quad (k \geq 2). \quad (4.8)$$

Der Koeffizient $e_{(k-1)}$ bestimmt sich aus der Bedingung (4.7) zu

$$e_{k-1} = \frac{\mathbf{r}^{(k-1)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k-1)}}{\mathbf{p}^{(k-1)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k-1)}}. \quad (4.9)$$

Aus den Beziehungen (4.8) und (4.9) ergibt sich der neue Näherungsvektor zu

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k-1)} + q_k \mathbf{p}^{(k)} \quad (4.10)$$

mit dem analog zu (4.6) ermittelten Wert

$$q_k = -\frac{\mathbf{p}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k-1)}}{\mathbf{p}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k)}}. \quad (4.11)$$

Unter Berücksichtigung der Tatsache, daß der Residuenvektor $\mathbf{r}^{(k)}$ orthogonal zur Ebene steht, die durch die Vektoren $\mathbf{r}^{(k-1)}$ und $\mathbf{p}^{(k)}$ aufgespannt wird, lassen sich die Formeln (4.9) und (4.11) umformen in

$$e_{k-1} = \frac{\mathbf{r}^{(k-1)T} \mathbf{r}^{(k-1)}}{\mathbf{r}^{(k-2)T} \mathbf{r}^{(k-2)}}, \quad q_k = -\frac{\mathbf{r}^{(k-1)T} \mathbf{r}^{(k-1)}}{\mathbf{p}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{p}^{(k)}} \quad (k \geq 2). \quad (4.12)$$

Infolge der positiven Definitheit von \mathbf{A} sind die Zahlenwerte $e_{(k-1)}$ und q_k als Quotienten von positiven Ausdrücken gegeben. Solange $\mathbf{r}^{(k-1)} \neq 0$ ist, d.h. $\mathbf{x}^{(k-1)}$ nicht die Lösung des Gleichungssystems darstellt, sind $e_{(k-1)}$ und q_k positiv.

Um den Rechenaufwand der CG-Methode pro Iterationsschritt abzuschätzen,

betrachtet man zunächst den rechenintensivsten Teil des Algorithmus, die einmal pro Iteration auszuführende Matrix-Vektormultiplikation. In repräsentativen Problemen ist die Anzahl der von Null verschiedenen Matrixelemente nur direkt proportional zur Ordnung n von \mathbf{A} . Bedeutet γ den Mittelwert der von Null verschiedenen Matrixelemente pro Zeile, so beträgt der Rechenaufwand zur Bildung einer Matrix-Vektormultiplikation nur γn Multiplikationen. Die schwache Besetzung der Matrix wird also an dieser Stelle ausgenutzt. Zudem erfordert der Algorithmus die Berechnung von zwei Skalarprodukten und drei Multiplikationen von Vektoren der Dimension n mit einem Skalar. Pro Iterationsschritt beträgt der Rechenaufwand Z deshalb etwa

$$Z = (\gamma + 5)n. \quad (4.13)$$

Die Methode der konjugierten Gradienten besitzt die theoretische Eigenschaft, daß die Sequenz der Suchrichtungen $\mathbf{p}^{(k)}$ ein System von paarweise konjugierten Vektoren bildet, und daß die Residuenvektoren $\mathbf{r}^{(k)}$ paarweise orthogonal sind. Dies hat zur Folge, daß die CG-Methode theoretisch die Lösung nach n Iterationsschritten liefert, da ein System von paarweise orthogonalen Vektoren im n -dimensionalen Vektorraum höchstens n von Null verschiedene Vektoren enthalten kann. In der Praxis werden zumeist weit weniger als n Iterationsschritte benötigt, um zu brauchbaren Ergebnissen zu kommen. Die Iteration wird üblicherweise abgebrochen, wenn die euklidische Norm des Residuenvektors eine vorgegebene Toleranz ϵ unterschreitet. Die Anzahl von Iterationen hängt zudem von der Konditionszahl κ der Matrix ab, die als Quotient von größtem und kleinstem Eigenwert der Matrix definiert ist. Eine Abschätzung für die Anzahl k der CG-Schritte, die zu $\|\mathbf{r}^{(k)}\| / \|\mathbf{r}^{(0)}\| < \epsilon$ führt, ist gegeben durch

$$k \leq \frac{1}{2} \sqrt{\kappa(\mathbf{A})} \ln \frac{2}{\epsilon} + 1. \quad (4.14)$$

4.2.3 Skalierung und Vorkonditionierung

Als einfache Maßnahme zur Verringerung der Iterationsschritte bis zur Konvergenz bietet sich die Skalierung der Matrix \mathbf{A} an, bei der die i -te Zeile und Spalte mit dem positiven Zahlenwert d_i multipliziert wird. Damit die Symmetrie von \mathbf{A} erhalten bleibt, können nur gleichzeitige Zeilen- und Spaltenskalierungen vorgenommen werden. Eine optimale Skalierung wird erreicht, falls die Matrix äquilibriert ist [90], d.h. daß die euklidischen Normen von allen Zeilen und damit

wegen der Symmetrie auch von allen Spalten die Länge Eins besitzen gemäß

$$d_i \left[\sum_{j=1}^n (a_{ij} d_j)^2 \right]^{1/2} = 1, \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (4.15)$$

Die Bestimmung der optimalen Skalierfaktoren d_i aus den nichtlinearen Gleichungen (4.15) ist aufwendig. Mit der vereinfachenden Wahl

$$d_i = \frac{1}{\sqrt{a_{ii}}}, \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (4.16)$$

kann schon ein Schritt in Richtung der Äquilibration getan werden. Die mit (4.16) skalierte Matrix $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{D}_S \mathbf{A} \mathbf{D}_S$ mit den Matrixelementen $\hat{a}_{ij} = d_i a_{ij} d_j$ besitzt Diagonalelemente $\hat{a}_{ii} = 1$ und für die Nichtdiagonalelemente gilt wegen der positiven Definitheit von \mathbf{A} und $\hat{\mathbf{A}}$ notwendigerweise

$$\hat{a}_{ij}^2 < 1, \quad i \neq j. \quad (4.17)$$

Enthält die i -te Zeile γ_i von Null verschiedene Matrixelemente, so erfüllen die Zeilen- und Spaltennormen der skalierten Matrix $\hat{\mathbf{A}}$ die Ungleichungen

$$1 \leq \left[\sum_{j=1}^n \hat{a}_{ij}^2 \right]^{1/2} \leq \sqrt{\gamma_i}, \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (4.18)$$

Die Konvergenzeigenschaft der CG-Methode kann auch durch eine Vorkonditionierung wesentlich verbessert werden. Das zu lösende Gleichungssystem wird dabei vermittle einer Transformation in ein solches mit besser konditionierter Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$ überführt. Mit einer $n \times n$ Matrix \mathbf{C} werde $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ in das äquivalente System $\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}$ transformiert mittels

$$\tilde{\mathbf{A}} := \mathbf{C}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{C}^{-T}, \quad \tilde{\mathbf{b}} := \mathbf{C}^{-1} \mathbf{b}, \quad \tilde{\mathbf{x}} := \mathbf{C}^T \mathbf{x}. \quad (4.19)$$

Darin ist $\tilde{\mathbf{A}}$ symmetrisch, positiv definit und ähnlich zu

$$\mathbf{K} := \mathbf{C}^{-T} \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{C}^T = (\mathbf{C} \mathbf{C}^T)^{-1} \mathbf{A} =: \mathbf{M}^{-1} \mathbf{A}. \quad (4.20)$$

Die Vorkonditionierungsmatrix $\mathbf{M} = \mathbf{C} \mathbf{C}^T$ muß somit eine Approximation von \mathbf{A} sein, damit für die Konditionszahl $\kappa(\tilde{\mathbf{A}}) = \kappa(\mathbf{K}) = \kappa(\mathbf{M}^{(-1)} \mathbf{A}) \ll \kappa(\mathbf{A})$ gilt. Zur Vorkonditionierung eines Gleichungssystems stehen verschiedene Strategien zur Verfügung [91]. Bei der Wahl der Vorkonditionierungsmatrix \mathbf{M} gilt es, abzuwägen zwischen dem Gewinn an Konvergenzgeschwindigkeit und dem zusätzlichen Aufwand, den die Vorkonditionierung pro Iteration erfordert.

Eine effektive Vorkonditionierung der Gleichungssysteme erhält man durch die Zerlegung der schon mit den Faktoren (4.16) skalierten Matrix \mathbf{A} in eine untere Dreiecksmatrix \mathbf{E} , eine Einheitsmatrix \mathbf{I} und eine obere Dreiecksmatrix \mathbf{F} .

$$\mathbf{A} = \mathbf{E} + \mathbf{I} + \mathbf{F}, \text{ mit } \mathbf{F} = \mathbf{E}^T. \quad (4.21)$$

Eine erste auf Evans [92] zurückgehende Vorkonditionierungsmatrix \mathbf{M} läßt sich dann konstruieren als

$$\mathbf{M} = (\mathbf{I} + \omega\mathbf{E})(\mathbf{I} + \omega\mathbf{F}), \text{ mit } \mathbf{C} = \mathbf{I} + \omega\mathbf{E}, \quad (4.22)$$

wobei der Parameter ω für das spezielle Problem zu optimieren ist. Die Definition (4.22) hat den rechentechnischen Vorteil, daß für \mathbf{M} kein zusätzlicher Speicherbedarf benötigt wird, denn die Auflösung des Systems $\mathbf{M}\mathbf{z} = \mathbf{r}$ erfolgt in den zwei Schritten

$$(\mathbf{I} + \omega\mathbf{E})\mathbf{y} = \mathbf{r} \text{ und } (\mathbf{I} + \omega\mathbf{F})\mathbf{z} = \mathbf{y}, \quad (4.23)$$

wobei die gespeicherten Matrixelemente von \mathbf{A} verwendet werden können. Wird die Bandstruktur von \mathbf{A} bei der Lösung von (4.23) ausgenutzt, so beträgt der zusätzliche Rechenaufwand nur $(\gamma + 1)n$ Multiplikationen. Der Rechenaufwand eines Iterationsschrittes der vorkonditionierten Methode der CG-Methode erhöht sich gegenüber (4.13) auf

$$Z_{vorkond} = (6 + 2\gamma)n \quad (4.24)$$

Rechenoperationen. Im Vergleich zum nicht vorkonditionierten Algorithmus ist der Aufwand pro Schritt folglich mehr als doppelt so hoch. Die Reduktion der Iterationsschritte durch die Vorkonditionierung nach Evans (4.22) mit optimiertem $\omega = 1.25$ zeigt Abbildung 4.4. Hier wird der Verlauf des Fehlermaßes in Abhängigkeit von der Iterationszahl dargestellt. Das Diagramm 4.4 zeigt zudem, daß das Fehlermaß nicht zwangsläufig monoton abnimmt [88]. Die deutliche Abnahme der Anzahl von Iterationen im Vergleich zum Basisalgorithmus kann man theoretisch erklären, indem man Gleichung (4.22) ausmultipliziert und für \mathbf{M} die Gleichung

$$\mathbf{M} = \omega[\mathbf{A} + (\omega^{-1} - 1)\mathbf{I} + \omega\mathbf{E}\mathbf{F}] \quad (4.25)$$

erhält. Für $\omega \neq 0$ stellt \mathbf{M} also eine Approximation von \mathbf{A} dar. Für $\omega = 0$ reduziert sich \mathbf{M} auf \mathbf{I} , so daß in diesem Fall die vorkonditionierte Methode in den Basisalgorithmus übergeht.

Eine zweite einfachere, aber trotzdem effektive Vorkonditionierungsmatrix \mathbf{M} ist die Matrix, die nur aus den Diagonalelementen von \mathbf{A} besteht

$$m_{i,j} = \begin{cases} a_{i,i} & \text{wenn } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (4.26)$$

Diese als Jacobi-Vorkonditionierung bezeichnete Methode hat folgende positive Eigenschaften:

- Sie benötigt nur einen Vektor der Dimension n als zusätzlichen Speicherbedarf.
- Die Diagonalelemente der Matrix \mathbf{A} sind in hier gewählten Matrizenformat in einem separaten Vektor gespeichert und daher ohne Aufwand adressierbar.
- Der zusätzliche Rechenaufwand pro Iteration beschränkt sich auf die komponentenweise Division zweier Vektoren, die leicht parallelisierbar ist (siehe Abschnitt 4.2.4). Der Rechenaufwand pro Iteration verändert sich gegenüber Gleichung (4.13) zu

$$Z = (\gamma + 6)n. \quad (4.27)$$

Die Anzahl an Rechenoperationen pro Iteration ist für die Jacobi-Vorkonditionierung also genau halb so groß wie für die auf Evans zurückgehende Methode. Die Jacobi-Vorkonditionierung ist jedoch nicht so effizient wie die Evans-Methode und benötigt daher eine im Vergleich zur Jacobi-Vorkonditionierung um den Faktor 3 erhöhte Anzahl an Iterationen, um zu einem Ergebnis gleicher Genauigkeit zu gelangen (siehe Abb. 4.4). Die Bilanz bezüglich der Anzahl an Rechenoperationen spricht daher eindeutig für die Verwendung der Evans-Methode, da sie nur $2/3$ der Rechenoperationen braucht. Die Überlegenheit der Evans-Methode bezüglich der Ausführungszeit ist aber bei Parallelisierung beider Routinen nicht mehr gegeben. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die Lösung der Gleichungssysteme (4.23) nicht parallelisierbar ist und somit eine Parallelisierung des CG-Algorithmus in dieser Variante nicht sinnvoll erscheint (siehe Abschnitt 4.2.4).

Ein anderer Aspekt rechtfertigt jedoch die Verwendung der Evans-Vorkonditionierung. Bei der Lösung der Gleichungssysteme, die bei modalen Analysen anfallen, treten bei der Jacobi-Vorkonditionierung numerische Instabilitäten

auf, weil die Matrizen von schlechter Kondition sind und zudem kein guter Startvektor verfügbar ist. In diesen Fällen führt nur die nach Evans vorkonditionierte CG-Methode zum Ergebnis. Andere Vorkonditionierungen wie die partielle Cholesky-Zerlegung benötigen zusätzlichen Speicherplatz, der in der Größenordnung der Matrix \mathbf{A} liegen kann. Da die modale Analyse nicht routinemäßig durchgeführt werden soll, sondern hauptsächlich zur einmaligen Validierung des Modells dient (vgl. Kapitel 5.3), ist der Minimierung des Speicherbedarfs Vorrang gegeben worden. Damit ist eine hohe räumliche Auflösung des Modells auch für die modale Analyse gesichert. Bei statischen und dynamischen Analysen wird ausschließlich die CG-Methode mit der Jacobi-Variante in der parallelisierten Form verwendet, da sie wegen des großen Geschwindigkeitsgewinns die kürzeste Ausführungszeit aufweist (siehe Tab.4.1). Über die Strategie zur Parallelisierung der CG-Methode soll der folgende Abschnitt Aufschluß geben. Der Ablauf der Rechenschritte bei der vorkonditionierten CG-Methode ist

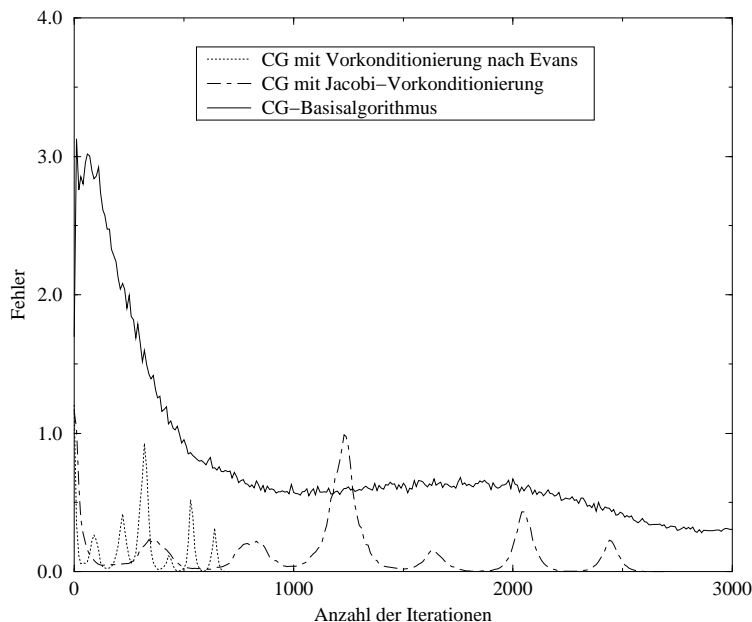


Abbildung 4.4: Verlauf des Fehlermaßes in Abhängigkeit von der Iterationsanzahl für die im Text beschriebenen Modifikationen des CG-Algorithmus.

Abb. 4.5 zu entnehmen. Die Gleichungen (4.4) bis (4.12) müssen für die vorkonditionierte Version umformuliert werden. Die Suchrichtungen $\mathbf{p}^{(k)}$ werden durch die Vektoren $\mathbf{g}^{(k)}$ ersetzt. Zusätzlich ist der Vektor $\mathbf{z}^{(k)}$ mitzuführen, der das Ergebnis der Lösung des Gleichungssystems zur Vorkonditionierung speichert.

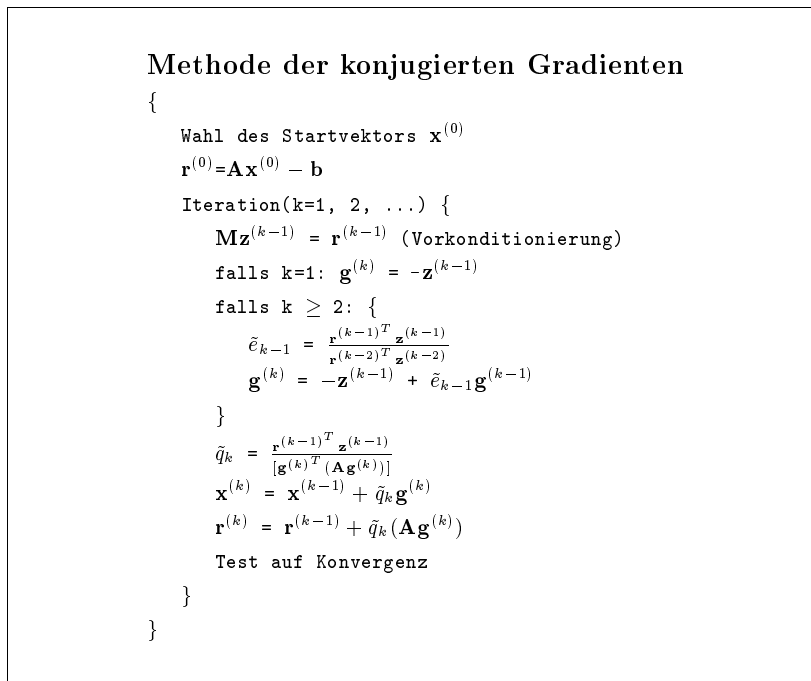


Abbildung 4.5: Der vorkonditionierte CG-Algorithmus.

4.2.4 Parallelisierung

Seit vielen Jahren wird zur Klassifikation von “high-performance“-Computern die Taxonomie von Flynn [93] herangezogen. Sie basiert auf der Art und Weise wie Befehle und Datenströme vom Computer verwaltet werden und umfaßt vier Basisklassen. Der zur Verfügung stehende Supercomputer Origin 2000 von der Firma Silicon Graphics gehört zur Klasse der sogenannten MIMD (multiple instruction multiple data)-Rechner. Computer dieser Bauweise führen mehrere Befehlsströme auf unterschiedlichen Daten parallel aus. Befehle und Daten stehen in Beziehung zueinander, da sie verschiedene Teile derselben Aufgabe repräsentieren. Es gibt eine große Variabilität innerhalb der MIMD-Klasse. Daher ist eine weitere Unterteilung sinnvoll. Man unterscheidet zusätzlich zwischen sogenannten shared memory- und distributed memory-Systemen. Bei den shared memory-Computern, zu denen die Origin 2000 in erster Näherung zu zählen ist, greifen alle Prozessoren (CPU’s) auf den gleichen Speicher zu (siehe Abb. 4.6). Dies bedeutet, daß die Speicherverwaltung der Daten nicht innerhalb der Verantwortung des Benutzers liegt. Dagegen ist bei distributed memory-Systemen jeder CPU ein spezieller Speicher zugewiesen. Die Prozessoren sind

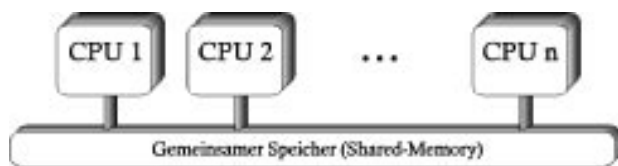


Abbildung 4.6: Das shared-memory-Modell: alle CPU's greifen auf den gleichen Speicher zu. Bei der Origin 2000 haben zwar alle Prozessoren den gleichen Adreßraum, jedoch sind einzelnen CPU's Speichersegmente zugewiesen, um den Datenzugriff zu beschleunigen. Somit kann die Origin als ein distributed shared-Parallelrechner bezeichnet werden

durch ein Netzwerk verbunden und können Daten zwischen dem ihnen zugewiesenen Speicher austauschen. Im Unterschied zu shared memory-Computern muß der Benutzer die Daten innerhalb der lokalen Speicherbereiche verwalten und sie explizit verschieben, wenn sie von einem bestimmten Prozessor benötigt werden. Es existiert eine Reihe von public domain-Bibliotheken mit parallelisierten Algorithmen zur Lösung großer Gleichungssysteme [94, 95, 96, 97] auf distributed memory-MIMD-Rechnern. Die meisten Implementierungen bedienen sich zur interprozessoralen Kommunikation der MPI (Message passing interface)-Bibliothek [98]. Für shared-memory-Computer liegen jedoch kaum fertige Problemlösungen vor. Da auch die von SGI mitgelieferte Bibliotheksroutine "psldt" keine zufriedenstellenden Ergebnisse lieferte (vgl. Abschnitt 4.2), wurde die Parallelisierung "von Hand" durchgeführt. Um die CG-Methode auf einem shared-memory-Computer zu parallelisieren, wurden die im Algorithmus vorkommenden Skalarproduktbildungen, Vektorskalierungen und die Matrix-Vektormultiplikation mit Präprozessordirektiven versehen, die vom Compiler erkannt und automatisch in parallelisierten Code übertragen werden.

Wie im vorangehenden Unterkapitel erörtert, wurde die CG-Methode nur für die Jacobi-Variante parallelisiert. Die Beschleunigungsfaktoren bei der Verwendung von acht Prozessoren für unterschiedliche Problemgrößen listet Tab. 4.1 auf. Wie im letzten Abschnitt dargelegt, ist das Parallelisieren der Evans-Variante des CG-Verfahrens nicht sinnvoll. Das Amdahlsche Gesetz [99] gibt eine theoretische Erklärung dieser Aussage. Ein sequentielles Programm habe die Ausführungszeit T_1^S , wobei der Anteil $(1 - \epsilon)$ an dieser Zeit optimal parallelisierbar und der Anteil ϵ sequentiell sei. Damit hat ein paralleles Programm

Anzahl der Unbekannten	13000	45000	100000	450000
Ausführungszeit für 1 CPU in [s]	5.45	22.66	53.88	287.10
Ausführungszeit für 8 CPU's in [s]	0.79	3.55	9.24	45.44
Geschwindigkeitsgewinn	6.90	6.38	5.83	6.3

Tabelle 4.1: *Ausführungszeiten der CG-Routine pro 100 Iterationen und Beschleunigungsfaktoren der parallelisierten Version in Abhängigkeit von der Problemgröße.*

auf p Prozessoren die Ausführungszeit

$$T_P = (1 - \epsilon) \frac{T_1^S}{p} + \epsilon T_1^S. \quad (4.28)$$

Der Geschwindigkeitsgewinn S ergibt sich dann zu

$$S = \frac{T_1^S}{T_P} = \frac{p}{(1 - \epsilon) + \epsilon p}. \quad (4.29)$$

Diese Gleichung sagt aus, daß bereits ein kleiner nicht parallelisierbarer Teil eines Algorithmus dessen Speedup deutlich begrenzt. In Falle des Evans-vorkonditionierten CG-Verfahrens sind ca. 50 % des Algorithmus nicht parallelisierbar. Bei acht Prozessoren ergibt sich nach (4.29) ein theoretischer maximaler Geschwindigkeitsgewinn von $S=1.78$. Dieser Wert rechtfertigt nicht die Benutzung von acht CPUs.

4.3 Die statische Analyse

Das Ziel einer statischen elastomechanischen FE-Analyse ist es, die $3N$ Knotenverschiebungen einer Elemente-Gruppierung zu berechnen, die sich aufgrund an den Knoten angelegter Kräfte einstellen. Zur Bestimmung des neuen Gleichgewichtszustands der Struktur ist im Falle einer vollkommen linearen Analyse das Gleichungssystem (3.16) zu lösen. Da bei den Simulationen nur Einzelkräfte $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$ berücksichtigt werden, ergibt sich der $3N$ dimensionale Kraftvektor \mathbf{R} als Auflistung aller angelegten Kraftvektorkomponenten F_i . Der Index einer bestimmten Komponente F_i im Gesamtkraftvektor \mathbf{R} entspricht der Nummer des Freiheitsgrades, auf den die Kraftkomponente wirkt.

Aus den abschließenden Bemerkungen des Abschnitts 3.2 wurde deutlich, daß zur Modellierung des Tumorwachstums im Kopf (siehe Unterkapitel 5.4) eine geometrisch-nichtlineare Analyse angezeigt ist. Zu ihrer Durchführung reicht

die einfache Lösung von Gleichung (3.16) nicht aus, es bedarf vielmehr einer schrittweisen Lösungsstrategie, des Newton-Raphsonschen Schemas.

4.3.1 Das Newton-Raphsonsche Schema

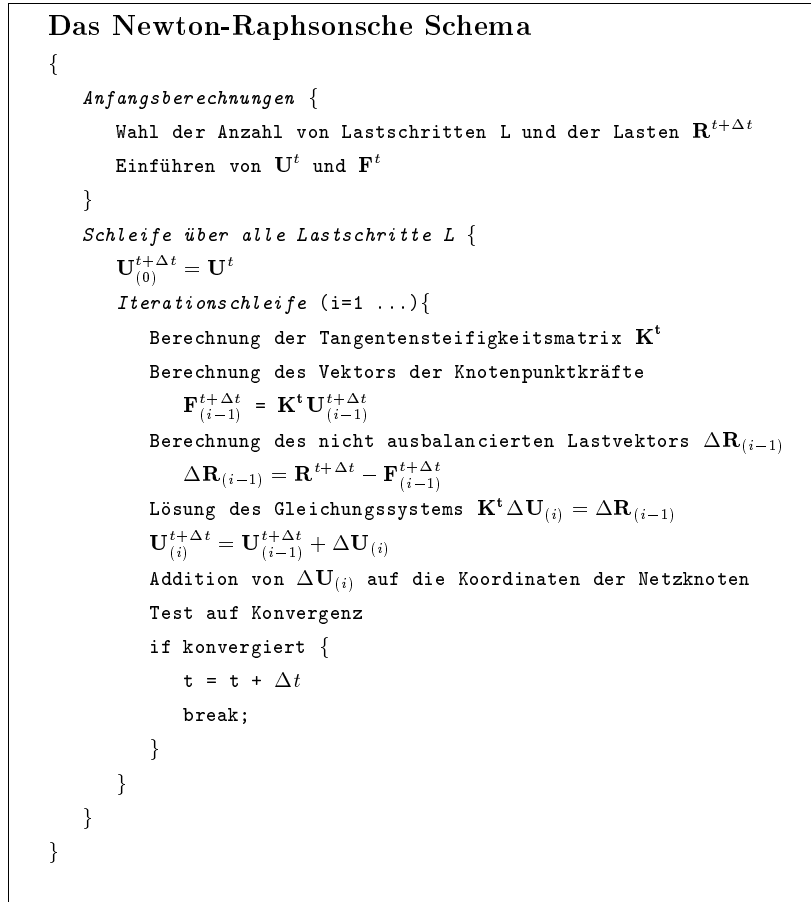


Abbildung 4.7: Implementierung des Newton-Raphsonschen Schemas.

Die Newton-Raphsonsche Methode ist die am schnellsten konvergierende Technik, die zur Lösung von nichtlinearen Problemen zur Verfügung steht. Die in nichtlinearen Rechnungen zu lösenden Gleichungen lauten

$$\mathbf{R}^t - \mathbf{F}^t = 0. \quad (4.30)$$

Dabei faßt der Vektor \mathbf{R}^t die äußeren Knotenpunktkräfte in der Konfiguration zur Zeit t zusammen, und der Vektor \mathbf{F}^t enthält die Knotenpunktkräfte, die den Elementspannungen in dieser Konfiguration entsprechen. Die Gleichungen

(4.30) gelten allgemein, also auch für dynamische Probleme. In statischen Berechnungen ist die Zeit nur eine zweckmäßige Variable, die verschiedene Lastwerte und die zugehörigen Konfigurationen kennzeichnet. Die Aufteilung der Gesamtlast in Teilschritte führt zu der Bezeichnung Inkrementallösung. Diese Vorgehensweise geht von der Annahme aus, daß für einen bestimmten Zeitpunkt t die Lösung bekannt ist und daß sie für den Zeitpunkt $t + \Delta t$ gesucht wird. So lautet Gleichung (4.30) zur Zeit $t + \Delta t$

$$\mathbf{R}^{t+\Delta t} - \mathbf{F}^{t+\Delta t} = 0. \quad (4.31)$$

Die Finite-Elemente-Gleichgewichtsforderungen laufen somit auf die Lösungen der Gleichungen

$$\mathbf{f}(\mathbf{U}^*) = \mathbf{R}^{t+\Delta t}(\mathbf{U}^*) - \mathbf{F}^{t+\Delta t}(\mathbf{U}^*) = 0 \quad (4.32)$$

hinaus. Mit der Näherung (4.33) entspricht die Newton-Raphsonsche Methode einem Iterationsverfahren für jeden Zeitschritt t . Wenn die Lösung $\mathbf{U}_{i-1}^{t+\Delta t}$ schon berechnet worden ist, liefert eine Taylorsche Reihenentwicklung

$$\mathbf{f}(\mathbf{U}^*) = \mathbf{f}(\mathbf{U}_{i-1}^{t+\Delta t}) + \left[\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{U}} \right] \Big|_{\mathbf{U}_{i-1}^{t+\Delta t}} (\mathbf{U}^* - \mathbf{U}_{i-1}^{t+\Delta t}), \quad (4.33)$$

wobei Terme höherer Ordnung vernachlässigt worden sind. Die Antwort des Finite-Elemente-Verbundes wird dadurch linearisiert. Durch Einsetzen von (4.33) in (4.31) und Verwendung von (4.30) erhält man

$$\left[\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} \right] \Big|_{\mathbf{U}_{i-1}^{t+\Delta t}} (\mathbf{U}^* - \mathbf{U}_{i-1}^{t+\Delta t}) = \mathbf{R}^{t+\Delta t} - \mathbf{F}_{(i-1)}^{t+\Delta t}. \quad (4.34)$$

Hier wurde angenommen, daß die äußeren Lasten nicht von den Verschiebungen abhängen. Nun wird

$$\Delta \mathbf{U}_{(i)} = \mathbf{U}^* - \mathbf{U}_{i-1}^{t+\Delta t} \quad (4.35)$$

definiert und erkannt, daß

$$\left[\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} \right] \Big|_{\mathbf{U}_{i-1}^{t+\Delta t}} = \mathbf{K}_{i-1}^{t+\Delta t}. \quad (4.36)$$

$\mathbf{K}_{i-1}^{t+\Delta t}$ ist die sogenannte Tangentensteifigkeitsmatrix im $(i-1)$ ten Iterationsschritt. Sie wird für jeden Iterationsschritt neu berechnet, indem zu den Koordinaten der Netzknoten in der Ausgangskonfiguration der akkumulierte Verschiebungsvektor addiert wird. Die Berechnung der Tangentenmatrix ist der

rechenintensivste Vorgang des Newton-Raphsonschen Verfahrens. Mit (4.36) kann (4.34) als

$$\mathbf{K}_{i-1}^{t+\Delta t} \Delta \mathbf{U}_{(i)} = \mathbf{R}^{t+\Delta t} - \mathbf{F}_{(i-1)}^{t+\Delta t} \quad (4.37)$$

geschrieben werden. Das Gleichungssystem (4.37) stellt wegen (4.33) nur eine Näherung dar. Deshalb wird die Korrektur des Verschiebungsincrements dazu benutzt, die nächste Verschiebungsnäherung

$$\mathbf{U}_{(i)}^{t+\Delta t} = \mathbf{U}_{(i-1)}^{t+\Delta t} + \Delta \mathbf{U}_{(i)} \quad (4.38)$$

zu gewinnen. Die Iteration wird abgebrochen, wenn eine vorab definierte Vektornorm von $\Delta \mathbf{U}_{(i)}$ ein vorgegebenes Maß unterschreitet. Abb. 4.7 zeigt eine mögliche Implementierung.

4.4 Die modale Analyse

Die modale Analyse dient der Bestimmung von Eigenfrequenzen und der zugehörigen Eigenvektoren eines FE-Modells. Die Kenntnis vom Eigenschwingungsverhalten eines Objekts liefert wichtige Aussagen über das dynamische Verhalten desselben, die im Unterkapitel 5.3 zusammengefaßt sind.

Zur Lösung des Gleichungssystems (3.26) existiert wiederum eine Reihe von Lösungsstrategien. Eine Zusammenstellung einiger Verfahren liefert [89]. Von den dort vorgestellten Methoden wird der Lanczos-Prozeß, insbesondere bei der Anwendung auf Probleme mit sehr vielen Freiheitsgraden, als der effizienteste Algorithmus bezeichnet. Da es zu seiner erfolgreichen Implementierung komplizierter Maßnahmen bedarf, um seine Stabilität zu gewährleisten, wurde eine Bibliotheksroutine [100] herangezogen. Im folgenden soll auf die Einzelheiten dieser Implementierung nicht eingegangen werden, sondern nur die Idee des Lanczos-Prozesses ausgehend von der Theorie des CG-Verfahrens mathematisch dargestellt werden.

4.4.1 Das Lanczos-Verfahren

Die Behandlung des generalisierten Eigenwertproblems, das allgemein als

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{B}\mathbf{x} \quad (4.39)$$

geschrieben wird (wobei \mathbf{A} und \mathbf{B} symmetrisch und \mathbf{B} positiv definit sind), läßt sich formal auf das spezielle Eigenwertproblem

$$\mathbf{C}\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y} \quad (4.40)$$

zurückführen. Hier entspricht die Matrix \mathbf{A} der Steifigkeitsmatrix \mathbf{K} und die Matrix \mathbf{B} der Massenmatrix \mathbf{M} des FE-Modells.

Nach Golub [101] kann der Lanczos-Algorithmus aus der Methode der (nicht vorkonditionierten) konjugierten Gradienten hergeleitet werden und umgekehrt. Es sei die $n \times k$ Matrix $\mathbf{R}^{(k)}$ definiert durch

$$\mathbf{R}^{(k)} = (\mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{r}^{(1)}, \dots, \mathbf{r}^{(k-1)}) \quad (4.41)$$

und die obere $k \times k$ Bidiagonalmatrix \mathbf{B}_k durch

$$\mathbf{B}_k = \begin{pmatrix} 1 & -e_1 & & \dots & 0 \\ & 1 & -e_2 & & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & -e_{(k-1)} \\ 0 & \dots & & & & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.42)$$

gegeben. Die Sequenz $\{\mathbf{r}^{(k)}\}$ ist die Abfolge der Residuenvektoren des CG-Algorithmus, und die Koeffizienten $\{e_k\}$ werden durch die Gleichungen (4.9) definiert. Wegen (4.4) und (4.8) gilt dann

$$\mathbf{R}_k = \mathbf{P}_k \mathbf{B}_k, \quad (4.43)$$

wobei

$$\mathbf{P}_k = (\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \dots, \mathbf{p}^{(k-1)}) \quad (4.44)$$

ist. Aufgrund der Konjugiertheit der Vektoren $\mathbf{p}^{(k)}$ (vgl. (4.7)) folgt, daß

$$\hat{\mathbf{T}}_k = \mathbf{R}_k^T \mathbf{C} \mathbf{R}_k = \mathbf{B}_k^T \hat{\mathbf{\Lambda}}_k \mathbf{B}_k \quad (4.45)$$

eine Dreiecksmatrix ist, denn $\hat{\mathbf{\Lambda}}_k$ hat die Gestalt

$$\hat{\mathbf{\Lambda}}_k = \begin{pmatrix} \mathbf{p}^{(1)T} \mathbf{C} \mathbf{p}^{(1)} & 0 & & \dots & 0 \\ 0 & \mathbf{p}^{(2)T} \mathbf{C} \mathbf{p}^{(2)} & & & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & & & 0 & \mathbf{p}^{(k)T} \mathbf{C} \mathbf{p}^{(k)} \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

Da die Folgen von Vektoren $\mathbf{p}^{(k)}$ und $\mathbf{r}^{(k)}$ den gleichen Raum aufspannen und die Residuenvektoren wechselseitig orthogonal sind, bilden die Spalten der

$n \times k$ Matrix $\mathbf{Q}_k = \mathbf{R}_k \mathbf{\Delta}^{-1}$ eine orthonormale Basis des sogenannten Krylov-Unterraums K , der gegeben ist durch

$$K = \{\mathbf{b}, \mathbf{C}\mathbf{b}, \dots, \mathbf{C}^{(k-1)}\mathbf{b}\}. \quad (4.47)$$

$\mathbf{\Delta}$ ist eine Diagonalmatrix, deren i -tes Element die euklidische Norm des i -ten Residuenvektors ist. Die Spalten der Matrix \mathbf{Q}_k sind die Lanczos-Vektoren. Die entsprechende Projektion der Matrix \mathbf{C} in den Krylov-Unterraum stellt sich als die Tridiagonalmatrix

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_k &= \mathbf{\Delta}^{-1} \mathbf{B}_k^T \hat{\mathbf{\Lambda}}_k \mathbf{B}_k \mathbf{\Delta}^{-1} \text{ oder} \\ \mathbf{T}_k &= \mathbf{Q}_k^T \mathbf{C} \mathbf{Q}_k \end{aligned} \quad (4.48)$$

dar. Die leicht bestimmbaren Eigenwerte des Problems

$$\mathbf{T}_k \mathbf{s}_i = \Theta_i \mathbf{s}_i \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (4.49)$$

stellen bestmögliche Approximationen für Eigenwerte λ_j von \mathbf{C} dar. Zudem sind die sogenannten Ritzvektoren

$$\mathbf{z}_i = \mathbf{Q}_k \mathbf{s}_i \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (4.50)$$

optimale Näherungen für die zu λ_j gehörenden Eigenvektoren \mathbf{y}_j von \mathbf{C} .

Eigenschaften der Arpack-Implementierung

Die zur Lösung des generalisierten Eigenproblems angewandte Bibliotheksroutine aus dem Arpack-Programmpaket beschreitet einen ähnlichen Weg wie der oben skizzierte Algorithmus. Die Reduktion des generalisierten Eigenproblems (4.39) auf ein spezielles der Form (4.40) wird nicht explizit vorgenommen, da

- die inverse Matrix der Massenmatrix \mathbf{M} bestimmt werden müßte und
- die Matrix $\mathbf{C} = \mathbf{K} \mathbf{M}^{-1}$ im allgemeinen keine Bandstruktur aufweist.

Die Umformung auf die Form (4.40) geschieht implizit, indem durch eine vom Benutzer bereitgestellte Routine das Gleichungssystem

$$\mathbf{M}\mathbf{y} = \mathbf{K}\mathbf{x} \quad (4.51)$$

gelöst wird, wobei der Vektor \mathbf{x} vom Arpack-Algorithmus vorgegeben wird. Das Lanczos-Verfahren konvergiert bei der Suche nach den betragsmäßig großen Eigenwerten sehr viel schneller als für kleine Eigenwerte. Durch eine "shift-invert"-

Transformation [102] kann man diese Eigenschaft für die Bestimmung beliebiger Eigenwerte nutzen. Sucht man Eigenwerte in der Nähe eines bestimmten Wertes σ , so gilt es anstatt (4.51) nun das System

$$(\mathbf{K} - \sigma\mathbf{M})\mathbf{y} = \Theta\mathbf{x} \text{ mit } \Theta = \frac{1}{\lambda - \sigma} \quad (4.52)$$

zu lösen. Diese Transformation verbessert die Konvergenz des Verfahrens beträchtlich, da man nun die größten Eigenwerte Θ_i der Matrix

$$\mathbf{C} = (\mathbf{K} - \sigma\mathbf{M})^{-1}\mathbf{M} \quad (4.53)$$

berechnet. Diese Werte Θ_i korrespondieren mit den Eigenwerten λ_i des Ausgangsproblems (4.39), die betragsmäßig am nächsten zum Wert σ liegen.

Die Arpack-Routine ermöglicht es, Anzahl und Eigenschaften der zu bestimmenden Eigenwerte im vorab zu wählen. In diesem Zusammenhang sind fast ausschließlich Eigenwerte aus dem nieder- und mittelfrequenten Bereich des Spektrums interessant. Daher benutzen wir vor allem die "shift-invert"-Version des Algorithmus. Vom Benutzer wird zweierlei gefordert: die Lösung eines linearen Gleichungssystems und eine Matrix-Vektormultiplikation. Beides liegt gemäß den Ausführungen des letzten Abschnitts mit der Methode der konjugierten Gradienten in parallelisierter Form vor.

Der Speicherbedarf des Algorithmus hängt außer von der Matrixdimension n nur von der Anzahl der zu berechnenden Eigenwerte und zugehörigen Vektoren ab. Der Bedarf an Speicher zur Berechnung von k Eigenwerten ist in der Größenordnung $n \cdot O(k) + O(k^2)$. Über typische Rechenzeiten von Schwingungsanalysen wird in Abschnitt 5.3 berichtet.

4.5 Die dynamische Analyse

Als weitere Möglichkeit, die Systemantwort von FE-Netzen des Kopfes zu untersuchen, soll die dynamische Analyse vorgestellt werden. Ziel dieser Analyseart ist es, das zeitliche Verhalten der Deformationen bzw. der Knotenverschiebungen infolge von ihrerseits zeitabhängigen Krafteinflüssen zu bestimmen. Da das Gleichungssystem

$$\mathbf{K}\mathbf{U}(t) + \mathbf{C}\dot{\mathbf{U}}(t) + \mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}}(t) = \mathbf{R}(t), \quad (4.54)$$

das die physikalischen Vorgänge modelliert, die Zeit als kontinuierlichen Parameter enthält, muß vor der Anwendung eines Lösungsverfahrens eine Diskretisierung der Zeitachse vorgenommen werden. Aus der modalen Analyse läßt

sich mit Gleichung (5.5) eine obere Schranke für den Zeitschritt Δt bestimmen. Nach dieser Wahl, die sicherstellt, daß keine Schwingungsmoden während der dynamischen Analyse ausgelassen werden, gilt es, einen geeigneten Algorithmus zur Lösung von (3.28) zu finden. Zu diesem Zwecke wurde ein direktes numerisches Schritt-für-Schritt-Verfahren benutzt. Direkt heißt in diesem Falle, daß keine Transformation der Gleichungen durchgeführt werden muß. Weite Verbreitung wegen seiner Stabilität hat das iterative Newmark-Schema gefunden. Die Anzahl der Newmark-Iterationen ergibt sich einfach als Quotient aus gesamter Zeitspanne und gewähltem Zeitschritt. Für jeden Zeitschritt wird im Prinzip das statische Gleichgewicht der Elemente-Gruppierung unter Einbeziehung von Trägheits- und Dämpfungseffekten ermittelt. Der rechenintensivste Schritt dieses Algorithmus liegt, wie auch bei statischer und modaler Analyse, in der Lösung eines linearen Gleichungssystems. Auch an dieser Stelle wird wieder die Methode der konjugierten Gradienten verwendet. Im folgenden Abschnitt soll die mathematische Grundlage von Newmarks Verfahren dargestellt und seine Implementierung beschrieben werden.

4.5.1 Die Newmarksche Methode

Im Rahmen einer dynamischen Analyse sind nicht nur die Verschiebungen aller Knoten, zusammengefaßt im Vektor $\mathbf{U}(t)$, zu ermitteln, sondern auch deren Geschwindigkeiten $\dot{\mathbf{U}}(t)$ und Beschleunigungen $\ddot{\mathbf{U}}(t)$ für jeden Zeitschritt. Daher müssen zur Bestimmung der drei Unbekannten $U_i^{(n)}$, $\dot{U}_i^{(n)}$ und $\ddot{U}_i^{(n)}$ des n -ten Zeitschritts in der i -ten Gleichung des Systems (3.28) zwei zusätzliche Bestimmungsgleichungen aufgestellt werden. Mithilfe der Taylor-Entwicklung nähert man die Werte für den $(n+1)$ -ten Schritt durch

$$\begin{aligned} U_i^{(n+1)} &= U_i^{(n)} + \Delta t \dot{U}_i^{(n)} + \frac{\Delta t^2}{2} (1 - \beta_2) \ddot{U}_i^{(n)} + \frac{\Delta t^2}{2} \beta_2 \ddot{U}_i^{(n+1)} \\ \dot{U}_i^{(n+1)} &= \dot{U}_i^{(n)} + \Delta t (1 - \beta_1) \ddot{U}_i^{(n)} + \Delta t \beta_1 \ddot{U}_i^{(n+1)} \end{aligned} \quad (4.55)$$

an. Diese Taylor-Entwicklung zweiter Ordnung enthält zudem die skalaren Größen β_1 und β_2 , für die im Newmarkschen Verfahren die Ungleichungen

$$\beta_1 \geq 0.5 \quad \text{und} \quad \beta_2 \geq 0.25 (0.5 + \beta_1)^2 \quad (4.56)$$

gelten müssen. Werden diese Schranken für beide Parameter berücksichtigt, wird eine gute Integrationsgenauigkeit und Stabilität des Verfahrens gewährleistet. Für das Wertepaar $\beta_1 = 0.5$ und $\beta_2 = 0.25$ erhält man ein unbedingt

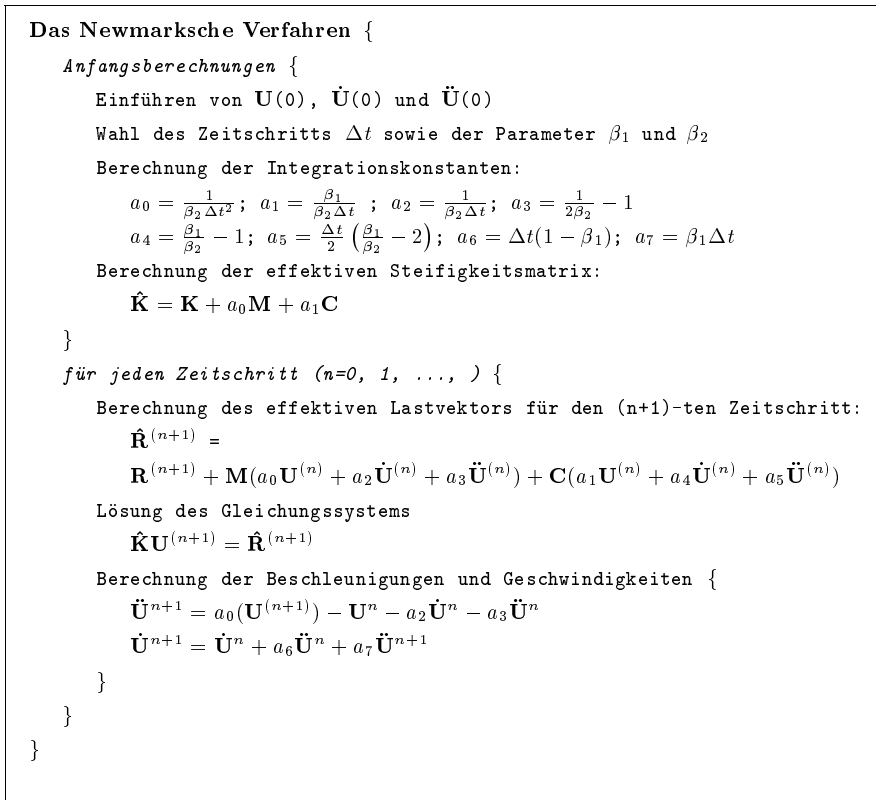


Abbildung 4.8: Implementierung des Newmarkschen Verfahrens.

stabiles Schema, das auch als Methode der konstanten mittleren Beschleunigung bezeichnet wird, da die Beschleunigung zwischen zwei Zeitpunkten als Mittelwert der Beschleunigungen zu den Zeitpunkten angenähert wird. In der weiteren Herleitung seien die Vektoren $\mathbf{U}(0)$, $\dot{\mathbf{U}}(0)$ und $\ddot{\mathbf{U}}(0)$ gegeben und das Gleichungssystem (3.28) nur an den Endpunkten eines Intervalls Δt befriedigt:

$$\mathbf{K}\mathbf{U}^{(n+1)} + \mathbf{C}\dot{\mathbf{U}}^{(n+1)} + \mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}}^{(n+1)} = \mathbf{R}^{(n+1)}. \quad (4.57)$$

Wird (4.55) in (4.57) eingesetzt, läßt sich \mathbf{U}_{n+1} aus den zuvor berechneten Vektoren des n-ten Zeitschritts bestimmen zu

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^{n+1} &= \left(\mathbf{M} + \mathbf{C}\beta_1 \Delta t + \frac{\mathbf{K}\beta_2 \Delta t^2}{2} \right)^{-1} \\ &\times \left\{ \frac{-\beta_2 \Delta t^2}{2} \mathbf{R}^{n+1} \right. \\ &\left. - \mathbf{C} \left[\frac{\beta_2 \Delta t^2}{2} (\dot{\mathbf{U}}^n + \Delta t(1 - \beta_1) \ddot{\mathbf{U}}^n) \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \beta_1 \Delta t \left(\mathbf{U}^n + \Delta t \dot{\mathbf{U}}^n + \frac{\Delta t^2}{2} (1 - \beta_2) \ddot{\mathbf{U}}^n \right) \Big] \\ & + \mathbf{M} \left[\mathbf{U}^n + \Delta t \dot{\mathbf{U}}^n + \frac{\Delta t^2}{2} (1 - \beta_2) \ddot{\mathbf{U}}^n \right] \Big\}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Die Vektoren $\dot{\mathbf{U}}^{n+1}$ und $\ddot{\mathbf{U}}^{n+1}$ werden durch einfache Vektoroperationen mittels (4.55) berechnet. Ein Beispiel für eine Implementierung des Newmarkschen Verfahrens zeigt Abbildung 4.8.

Kapitel 5

Anwendungen

Nachdem in den letzten Kapiteln die Methode der finiten Elemente und numerische Techniken zu ihrer effizienten Implementierung vorgestellt wurden, werden im folgenden klinisch-relevante Fragestellungen mithilfe des hier vorgestellten Modells untersucht. Bevor zu jeder der in den vorangehenden Kapiteln vorge-

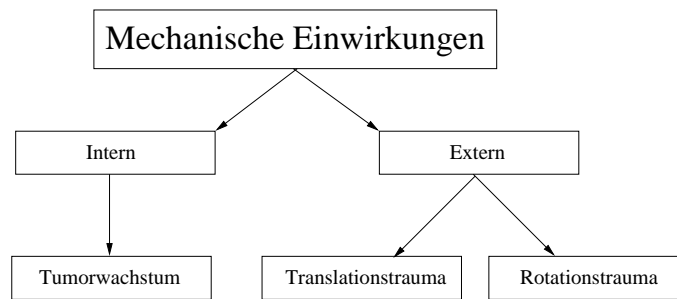


Abbildung 5.1: *Dieses Schaubild zeigt die Klassifikation mechanischer Einwirkungen auf den Kopf. Jedem mechanischen Einfluß ist jeweils eine bestimmte FE-Analysemethode zugeordnet. Ziel aller Untersuchungen ist ein besseres Verständnis der Pathomechanismen von Gehirnverletzungen.*

stellten Analysemethoden (statisch, dynamisch, modal) eine klinisch-motivierte Simulationsrechnung präsentiert wird, sollen die mechanischen Ursachen von Gehirnschädigungen stark vereinfachend klassifiziert werden (siehe Abb. 5.1).

Wie eingangs (siehe Abschnitt 1.1) erklärt, bezieht sich das in dieser Arbeit beschriebene Modell auf das Studium der biomechanischen Auswirkungen *externer* und *interner* Krafteinflüsse. Unter die Rubrik “interne Einwirkungen“

kann man jegliche Massenzunahme innerhalb des Schädels (*Craniums*) summieren. Als Beispiele derartiger Massenzunahmen sind Gehirnblutungen, Anschwellen der Ventrikel (vgl. Abb. 2.8) und das Wachstum von Tumoren zu nennen. In Abschnitt 5.4 soll der Vorgang des Metastasenwachstums mit der nichtlinearen statischen Analyse studiert werden.

Gehirnverletzungen können über die Art der externen Krafteinwirkung klassifiziert werden. Ein Schädel-Hirntrauma (SHT) entsteht durch eine stumpfe (z.B. Schlag oder Stoß) oder scharfe (z.B. Stich oder Schuß) mechanische Einwirkung auf den Schädel und führt zu einer zeitlich begrenzten oder dauerhaften zerebralen Funktionsstörung. Die Bewegung des Kopfes nach der Krafteinwirkung ist sehr komplex. Die über den Schädel auf das Gehirn übertragene Druckwelle und die Beschleunigung des gesamten Kopfes führen zur Ausbildung von intrakraniellen Druckgradienten, die eine Gehirnschädigung zur Folge haben können. Diese Druckänderungen werden in Abschnitt 5.2 als physikalisches Korrelat des sogenannten Coup-Contrecoup-Phänomens erklärt. Verläuft die Stoßachse der Kraft annähernd durch den Schwerpunkt des Kopfes, entsteht aufgrund der angesprochenen Effekte ein sogenanntes *Translationstrauma*. Im Rahmen der Simulation des Schädel-Hirn-Traumas mit der dynamischen FE-Analyse werden Translationstraumata für frontale, okzipitale und parietale Schläge simuliert und die resultierenden Druckverteilungen diskutiert [103, 104].

Trifft die mechanische Einwirkung eher tangential auf den Kopf, tritt eine Winkelbeschleunigung ein, und es resultiert ein *Rotationstrauma*, bei dem vorwiegend Scherwellen zum Tragen kommen [105]. Beim Rotationstrauma beobachtet man infolge einer starken Beschleunigung, wie sie z.B. bei einem Autounfall auch ohne direkten mechanischen Kontakt mit einem Gegenstand auftreten kann, ein breites Spektrum von Gehirnverletzungen, von einer einfachen Bewußtlosigkeit bis hin zur Diffusen Axonalen Gehirnschädigung (DAI). Dem Pathomechanismus von Rotationstraumata kann man sich mithilfe der modalen FE-Analyse nähern. Während in Abschnitt 5.3.3 der Zusammenhang zwischen Rotationen des Kopfes und resultierenden Scherspannungen modellhaft und exemplarisch dargestellt wird, soll ein möglicher Ansatz zum besseren Verständnis des Pathomechanismus der DAI im Unterkapitel 5.3.4 vorgestellt werden. Die Trennung von Translations- und Rotationstrauma ist anschaulich und für das separate Studium der dabei auftretenden Effekte sehr nützlich. Es sei aber angemerkt, daß in der Realität zumeist eine Überlagerung beider Typen auftritt.

Bevor die Simulationsrechnungen der angesprochenen Pathomechanismen

ausführlich dargestellt werden, muß ein wichtiger Aspekt bei der Modellierung der Biomechanik des Gehirns diskutiert werden: die Wahl der Materialparameter von Kopf- und Gehirngewebe. Im Anschluß daran soll zunächst die Anwendung der dynamischen Analyse auf das Schädel-Hirn-Trauma ausführlich beschrieben werden. Die in diesem Zusammenhang durchgeführten Simulationsrechnungen werden mit externen Daten verglichen, die mithilfe von Kadaverexperimenten akquiriert wurden [5]. Ein weiterer Vergleich von Simulationsergebnisse mit experimentell ermittelten Daten wird in Abschnitt 5.3.2 vollzogen. Messungen an Probanden [27] liefern Abschätzungen der niedrigsten Eigenfrequenzen des Kopfes, die mit Resultaten des hier vorgestellten Modells weitgehend übereinstimmen. Die damit vollzogene Validierung des Modells ist die Voraussetzung für die Verlässlichkeit der weiteren in diesem Abschnitt präsentierten klinisch-relevanten Berechnungen.

5.1 Modellierung des Materialverhaltens

5.1.1 Allgemeine Betrachtungen

Allgemein lassen sich einige grundlegende Materialeigenschaften von Kopf- und Gehirngewebe formulieren. Nach Holbourns [2] biophysikalischen Untersuchungen ergeben sich fünf grundsätzliche Beobachtungen:

1. Die Dichte der Materialien innerhalb des Schädels schwankt kaum. Nervenzellen, Gehirnflüssigkeit und Blut weisen eine wasserähnliche Dichte auf.
2. Die Gehirnmasse ist extrem inkompressibel.
3. Die Hirnsubstanz weist eine sehr niedrige Steifigkeit auf, d.h sie leistet sehr wenig Widerstand gegen von außen auferlegte Veränderungen ihrer Gestalt.
4. Aus den letzten beiden Bemerkungen folgt implizit, daß Gehirngewebe einen sehr kleinen Schubmodul aufweist und somit gegenüber angreifenden Scherkräften kaum Widerstand leisten kann (siehe Abschnitt 5.3.3).
5. Die Steifigkeit des Schädelknochens ist dagegen sehr hoch.

Fast alle der in Abschnitt 1.2 beschriebenen Kopfmodelle berücksichtigen Holbourns Beobachtungen, wenn auch bei ihrer Umsetzung Unterschiede gemacht

werden. Bei der Modellierung der Materialeigenschaften von Gehirngewebe wird für die meisten Modelle linear elastisches und isotropes Verhalten angenommen. Die Ausnahme bilden die Modelle von DiMasi [30] und Margulies [106], die Gehirngewebe viskoelastische Eigenschaften zuschreiben. Sie berufen sich auf Studien von Galford und McElhaney [107], die mit einer speziellen Apparatur das mechanische Verhalten von Kopfhaut, Gehirngewebe und Dura mater bestimmten. In den Modellen von DiMasi und Margulies wird zur Modellierung der Viskoelastizität das lineare Standardmodell nach Flügge genutzt, das als zeitlich exponentiell abfallendes Schubmodul G formuliert werden kann. Der jeweilige Wert des Schubmoduls gibt den Widerstand eines Körpers gegen winkelverändernde Scherkräfte an:

$$G(t) = G_\infty + (G_0 - G_\infty) e^{-\beta t}. \quad (5.1)$$

G_∞ steht in dieser Gleichung für den Wert des Schubmoduls nach unendlich langer Einwirkung einer konstanten Kraft, G_0 für seinen Wert zu Beginn der Krafteinwirkung und β für die Abklingkonstante. In [20] findet man eine Auflistung dieser Parameter für die zitierten Modelle.

In einer vergleichenden Studie von Kuijpers [24] zeigt sich, daß die mechanische Systemantwort bei der Simulation des Coup-Contrecoup-Phänomens (siehe Abschnitt 5.2) kaum davon abhängt, ob elastisches oder viskoelastisches Materialverhalten postuliert wird. Daher sei hier den zahlreichen Autoren [11, 18, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 31, 34, 110] in der Annahme linear elastischen und isotropen Verhaltens von Kopf- und Gehirngewebe gefolgt. Wie in Kapitel 5.2 beim Vergleich von Simulationsergebnissen mit experimentellen Daten gezeigt wird, führt dieses Postulat zu zufriedenstellenden Resultaten.

Wie schon in Abschnitt 3.3.3 dargestellt, läßt sich unter den genannten vereinfachenden Annahmen das Materialverhalten eines Gewebetyps durch das Elastizitätsmodul E und die Poissonsche Zahl ν beschreiben. Bei der modalen FE-Analyse kommt aufgrund der Berücksichtigung der Trägheit die Dichte des Materials als weiterer Parameter hinzu. Aufgrund der Einbeziehung von Dämpfungseffekten benötigt man für die dynamische Analyse zusätzlich die sogenannten Rayleighkonstanten α und β (siehe Abschnitt 5.2).

Die geringe Steifigkeit des Gehirnmaterials kommt in einem niedrigen Wert für das Elastizitätsmodul zum Ausdruck, analog dazu die hohe Rigidität des Schädels in einem im Vergleich zum Gehirn um fünf Zehnerpotenzen größeren Zahlenwert. Die (wasserähnliche) Inkompressibilität (= hohes Kompressions-

modul) der Gehirnmasse [108] spiegelt sich in der Poissonschen Zahl ν wider. Der Zusammenhang

$$K = \frac{E}{3(1 - 2\nu)} \quad (5.2)$$

zwischen ν und dem Kompressionsmodul K eines Stoffes erklärt, warum eine hohe Inkompressibilität gleichbedeutend mit einem Wert von ν nahe bei 0.5 ist. Da das Kompressionsmodul nicht negativ werden kann, ergibt sich aus Gleichung (5.1.1) zudem, daß $\nu < 0.5$ sein muß.

Analysiert man eine von Sauren [20] vorgenommene Zusammenstellung von Materialparametern (E , ν und ρ) für mehrere FE-Kopfmodelle, so muß man feststellen, daß die Werte bemerkenswert unterschiedlich sind. Beispielsweise nimmt Willinger [21] in seinem Modell für das Gehirngewebe ein Elastizitätsmodul von 675 kPa an, wohingegen Ruan [22] ihm nur einen Wert von 66.7 kPa zuweist. Ähnliches gilt für die Materialeigenschaften von Schädel und Membranen. In einem engeren Bereich liegen aus dem oben ausgeführten Grund die Werte für die Poissonsche Zahl des Gehirngewebes. Sie variieren nur zwischen den Werten 0.475 und 0.49999. Für die Dichte von Gehirnmaterialien wird bei allen Modellen ein wasserähnlicher Wert angenommen.

Insgesamt muß man feststellen, daß die Parameter für Gehirnmaterialien schlecht definiert sind und somit innerhalb physikalischer Randbedingungen ein gewisser Freiraum in der Auswahl ihrer Werte besteht. Dieser Freiraum wird in vielen Fällen bei der Modellierung von Anwendungen genutzt, um Simulationsergebnisse mit experimentell bestimmten Werten zur besseren Deckung zu bringen. Bei der Suche nach den optimalen Werten für die Materialien des in dieser Arbeit vorgestellten FE-Modells (Kopfhaut, Schädel, Ventrikel, graue und weiße Gehirnschicht, Falx cerebri, Tentorium, vgl. Abb. 2.10) sind neben der Möglichkeit, einige Parameter mithilfe experimentell bestimmter Referenzdaten zu justieren, auch berücksichtigt

- Messungen der Materialeigenschaften von einzelnen Gewebsstrukturen [109],
- Erfahrungen aus Simulationsrechnungen mit vorangehenden FE-Modellen und
- Holbourns [2] biophysikalische Beobachtungen.

5.1.2 Festlegung der Parameter

Als Ausgangspunkt der Parametersuche dienen die Materialdaten von Zhou's Kopfmodell [34], die ihrerseits auf Experimenten von McElhaney [109] basieren. Zhou's Modell unterscheidet als einziges der in Abschnitt 1.2 vorgestellten Modelle zwischen weißer und grauer Gehirnschubstanz und berücksichtigt außerdem Gewebe außerhalb des Schädels (Muskeln, Haut, Unterhautfett, Bindegewebe). Zhou's Modell beschreibt anthropometrisch gesehen die Schädelgeometrie eines Durchschnittsmenschen. Seine Materialparameter sind für diesen speziellen Fall optimiert. Da das hier beschriebene Modell von variabler Geometrie ist und somit alle möglichen Kopfformen theoretisch einschließt, können Zhou's Materialwerte als gemittelt über alle Kopfformen interpretiert werden. Daher werden seine Werte für Kopfhaut und Schädel ohne Veränderung übernommen. Im Vergleich zu Zhou's Modell werden wegen der Vernachlässigung der das Gehirn umschließenden Membran (*dura mater*) im hier präsentierten Modell der weißen und grauen Substanz höhere Elastizitätsmoduln zugewiesen. Kumaresan et al. [110] haben in ihren FE-Untersuchungen den steifigkeitserhöhenden Effekt der *dura mater* auf die mechanische Systemantwort des Kopfes studiert. Die von Zhou vorgeschlagene Erhöhung des Elastizitätsmoduls von weißer Gehirnmaterie um 50 % relativ zu dem der grauen Substanz wird beibehalten. Das Argument für diese Erhöhung ist, daß graue Materie elastischer als weiße ist, da graue Materie aus Nervenzellen besteht, wohingegen weiße Materie aus Fasern zusammengesetzt ist. Die Kompressibilität der großen inneren mit Gehirnflüssigkeit (CSF) gefüllten Hohlräume des Gehirns ist nach Holbourn [2] noch geringer als die der Gehirnmasse. Daher wird den sogenannten Ventrikeln eine höhere Poissonsche Zahl als dem Gehirn zugewiesen. Die Materialwerte der Membran, die die Gehirnhemisphären voneinander trennt, der sogenannten Falx cerebri, werden von Kumaresan [110] übernommen. Die Falx teilt sich in der Höhe des Kleinhirns, um ein zeltähnliches Gebilde, das Tentorium, zu formen (siehe Abb. 5.9). Die Materialeigenschaften von Falx und Tentorium werden als identisch angenommen.

Die Dichtewerte für alle Materialien sind von Zhou's Modell übernommen. Das in Abb. 2.10 dargestellte Kopfmodell hat mit den in Tab. 5.1 aufgelisteten Dichtewerten eine Masse von 4.47 kg, wovon das Gehirn 1.45 kg beiträgt. Ergänzend zu diesen theoretischen Überlegungen wird im Verlaufe dieses Kapitels die Abhängigkeit der mechanischen Systemantwort des Kopfes von der

Gewebetyp	E [MPa]	ν	ρ [kg/m ³]
Kopfhaut	16.70	0.42	1200
Schädel	6500.00	0.22	1420
Weiße Substanz	0.12	0.499	1040
Graue Substanz	0.075	0.499	1040
Ventrikel	0.075	0.49995	1045
Membran	31.5	0.45	1133

Tabelle 5.1: Auflistung der Materialparameter.

Variation bestimmter Materialparameter erörtert.

Mögliche Fortschritte auf dem Weg zu einer verbesserten Bestimmung der Materialparameter werden im abschließenden Kapitel diskutiert.

5.2 Dynamische Simulationsrechnungen

5.2.1 Das Coup-Contrecoup-Phänomen

In der ersten klinischen Simulation wird das Coup-Contrecoup-Phänomen analysiert, das im weiteren Verlauf dieses Abschnitts vereinfachend als Folge eines Translationstraumas verstanden wird. Wirkt eine fokale Kraft auf den Kopf,

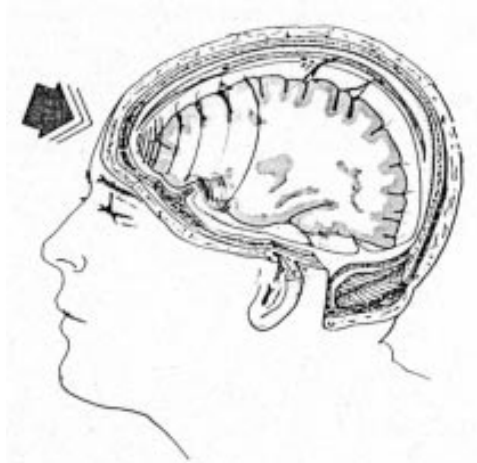


Abbildung 5.2: Schematische Darstellung der Ausbreitung einer Druckwelle in-
folge einer fokalen Kräfteinwirkung.

breitet sich von der Stelle der Krafteinwirkung eine Kompressionswelle (vgl. Abb. 5.2) und von der dem Schlag gegenüberliegenden Region eine Zugwelle aus (eine analytische Beschreibung dieses Effekts für eine mit Flüssigkeit gefüllte Schale ist in [14] gegeben). Die entstehenden Hirnverletzungen sind somit die Folge plötzlicher Druckveränderungen im Gehirn [111].

Die dynamische Analyse zum Studium des Coup-Contrecoup-Phänomens kann man mit dem linearen FE-Modell durchführen, weil große Deformationen und Starrkörperbewegungen innerhalb der ersten Millisekunden nach der Krafteinwirkung nicht vorhanden sind. Nach Beobachtungen von Nahum [5] bewegt sich der gesamte Kopf nur um 3 Winkelgrade während der Zeit, in der die Druckwelle durch den Kopf läuft. Die Deformationen des Gehirns befinden sich im Millimeterbereich, da der Schlag zum großen Teil vom Schädelknochen abgefangen wird.

5.2.2 Validierung des Kopfmodells I

Von Experimenten mit Kadavern [5], deren Köpfe definierten Stößen ausgesetzt wurden, kennt man die daraus resultierenden Druckveränderungen an vier verschiedenen Orten des Gehirns (siehe Abb. 5.3). Um das Modell zu validieren, wird eines dieser Experimente simuliert. Die für die dynamische Analyse notwendige Dämpfungsmatrix \mathbf{C} (siehe Gleichung 3.28) wird nicht mit Gleichung (3.29) bestimmt, da die Dämpfungskoeffizienten $\kappa^{(m)}$ nicht bekannt sind. Alternativ kann \mathbf{C} nach Rayleigh als Superposition

$$\mathbf{C} = \alpha \mathbf{M} + \beta \mathbf{K} \quad (5.3)$$

gewählt werden. Die sogenannten Rayleigh-Dämpfungskoeffizienten α und β werden von Kuijpers [24] übernommen. Die Herkunft der Koeffizienten ist in dieser Quelle leider nicht genannt. Ein weiterer wichtiger Punkt bei der Modellierung ist die Wahl geeigneter Randbedingungen für den Übergang Kopf-Nacken. Die Einflüsse verschiedener Randbedingungen auf die Systemantwort hat Kuijpers [24] untersucht. Da die Köpfe der Kadaver in Nahums Experimenten nicht fixiert waren und somit in der Phase direkt nach dem Schlag eine quasifreie Translation ausführen konnten, werden alle Netzknoten als frei beweglich gewählt. Diese Wahl wurde z.B. auch von Zhou [34] getroffen, da sie die beste Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den gemessenen Druckverteilungen liefert. Die Fixierung von Netzknoten im Halsbereich führt zu einer leichten Überschätzung der Druckwerte; qualitativ ändert sich an der

mechanischen Antwort jedoch nichts. Die intrakraniellen Druckveränderungen berechnet man an den gewünschten Orten aus den drei Hauptspannungen (siehe Gleichung 3.4) gemäß der von Ueno [31] vorgeschlagenen Formel

$$-\Delta P = \frac{(\tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz})}{3}. \quad (5.4)$$

Das hier gewählte Experiment erzeugt ein Translationstrauma, da die verlänger-

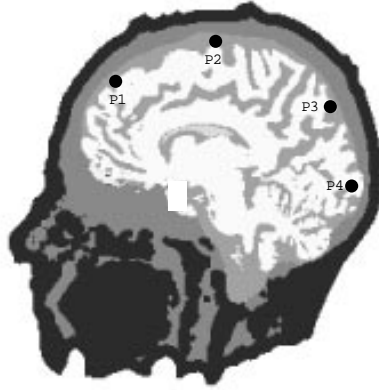


Abbildung 5.3: Die Markierungen $P1$ bis $P4$ zeigen die Orte im Gehirn an, an denen der Druckverlauf während einer mechanischen Einwirkung gemessen wurde. $P1$ befindet sich im Frontalhirn, $P2$ markiert einen parietalen Gehirnort, $P3$ ist im Okzipitallappen angesiedelt und $P4$ befindet sich an der Fossa posterior.

te Achse der Krafteinwirkung annähernd durch den Schwerpunkt des Kopfes verläuft. Der zeitliche Verlauf der einwirkenden Kraft, der auch von Nahum gemessen wurde, entspricht einer halben Sinusschwingung mit einer Schwingungsdauer von 20 ms und einem Offset von 2 ms. Die mechanische Einwirkung wird als “worst case“- Szenario durch das Applizieren des gemessenen Kraftverlaufs an einen Knoten im Bereich der Stirn modelliert. Der Kraftvektor zeigt in Richtung Schwerpunkt des Kopfes. Die Simulationsrechnungen werden mit dem in Abb. 2.10 dargestellten FE-Netz des Kopfes durchgeführt. Bei frontalen und okzipitalen “Impacts“ wird die Gehirnmembran nicht berücksichtigt, da in Experimenten gezeigt wurde [113], daß sie bei fronto-okzipitalen Schlägen praktisch keine Veränderung der intrakraniellen Druckverteilung herbeiführt. Ihr Einfluß wird jedoch bei der Simulation lateraler Krafteinwirkungen (siehe Abschnitt 5.2.3) untersucht. Die Abbildungen 5.4 und 5.5 zeigen die zeitlichen

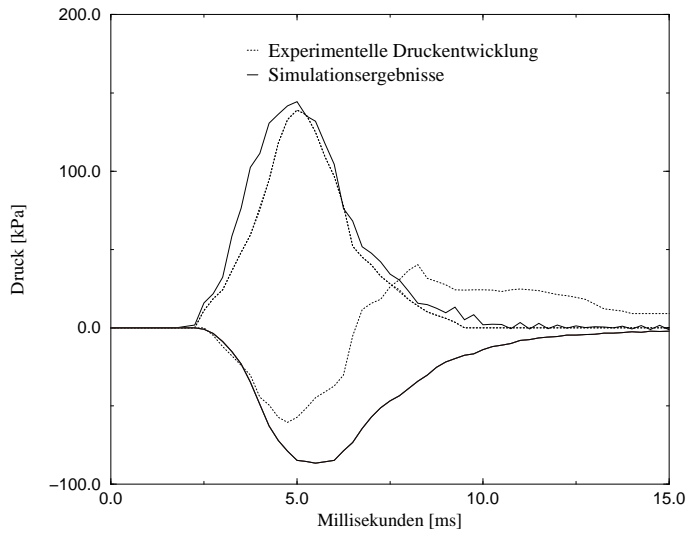


Abbildung 5.4: Zeitliche Druckentwicklung an den Orten P_1 und P_4 infolge einer frontalen Krafteinwirkung.

Entwicklungen des intrakraniellen Drucks für die in Abb. 5.3 markierten Gehirnorte. Die Übereinstimmung zwischen den von Nahum gemessenen Werten und den Simulationsergebnissen ist für die ersten sechs Millisekunden zufriedenstellend. Die Feinjustierung für die Druckverläufe an hinteren Gehirnorten erreicht man durch Variation der Poissonschen Zahl des Gehirngewebes. Khalil [19] beweist mit seinen FE-Simulationen, daß dieser Parameter entscheidenden Einfluß auf die negative Druckentwicklung nimmt. Die vorgestellte FE-Analyse zeigt, daß das Modell auch quantitative Aussagen zuläßt und die Modellannahmen (Materialverhalten, Dämpfung, Randbedingungen) vernünftig sind. In den folgenden Simulationen beschränken sich die Untersuchungen auf den Zeitbereich der Schlagphase (bis zu 5 ms), da das Modell hier die höchste Validität aufweist.

Um die Ergebnisse von FE-Spannungs- und Druckanalysen darzustellen, schreibt man die an den Netzknoten berechneten Werte zurück in den Voxelraum \mathcal{V} . Dieses Vorgehen ist besonders einfach bei der Verwendung von isotropen Würfelnetzen. In einem finiten Würfelement lassen sich acht Spannungstensoren mit geringem Fehler berechnen. Benutzt man FE-Würfelnetze mit 2 mm Kantenaufösung, die aus acht Voxeln zusammengesetzt sind, kann somit jedem Voxel eine Komponente des Spannungstensors als Markierung l zugewiesen werden. Für Netze geringerer Auflösung lassen sich die Spannungswerte innerhalb eines Elements leicht interpolieren. Da innerhalb eines Tetraeders

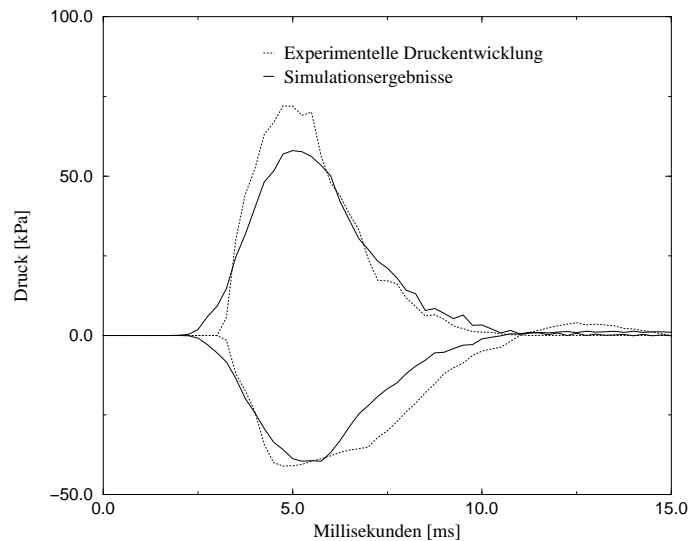


Abbildung 5.5: Zeitliche Druckentwicklung an den Orten $P2$ und $P3$ infolge einer frontalen Krafteinwirkung.

die Spannung konstant ist, müßte ein Würfel theoretisch in acht Tetraeder unterteilt werden, um eine den Würfелеlementen vergleichbare Auflösung bei den Spannungsanalysen zu erzielen. Auch aufgrund dieser Vorteile werden die Simulationen mit Würfelnetzen durchgeführt. Die in Abschnitt 5.2.1 beschriebene Ausbreitung einer Kompressions- und Zugwelle im Gehirn beobachtet man auch im Modell (vgl. Abb. 5.6). Das im Modell abgebildete physikalische Geschehen ist anhand eines axialen Beispielschnittes durch das Gehirn mit der oben beschriebenen Technik visualisiert. Die drei Bilder zeigen die intrakranielle Druckverteilung zu drei verschiedenen Zeitpunkten nach einem frontalen Schlag. Im Bild links ($t=3$ ms) erkennt man, wie sich die Deformation im Schädel aufgrund der im Vergleich zum Hirngewebe höheren Schallgeschwindigkeit c ($c \propto \sqrt{E}$) zuerst ausbreitet. Im mittleren Bild ($t=4$ ms) wird deutlich, wie vom frontalen Einwirkungsort eine Kompressionswelle propagiert und vom gegenüberliegenden (okzipitalen) Bereich eine Zugwelle ausgeht. Im rechten Bild ($t=5$ ms) sind die Areale negativen und positiven Drucks sehr deutlich umschrieben. Der Druck hat sowohl im frontalen als auch im okzipitalen Bereich seinen maximalen Wert erreicht.

Im folgenden Abschnitt werden die Systemantworten bei frontaler und okzipitaler Einwirkung verglichen und ein Verletzungsmechanismus vorgestellt, der für das Entstehen von Kontusionen (Prellungen des Gehirns) verantwortlich sein

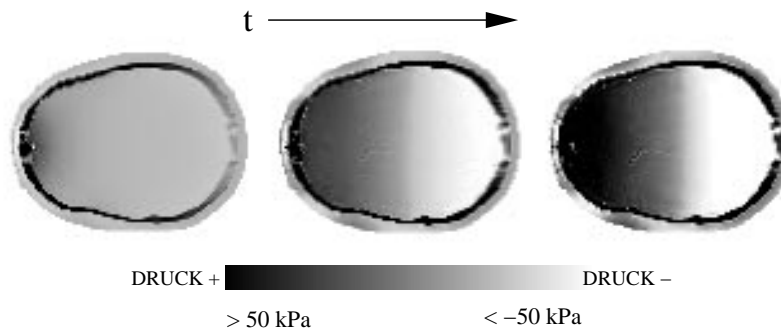


Abbildung 5.6: Zeitliche Druckentwicklung dargestellt anhand eines axialen Schnittes durch den Kopf in Höhe der Ventrikel (Ausführliche Erläuterung siehe Text).

könnte. Darüberhinaus wird der Einfluß der Falx cerebri und des Tentoriums auf die Druckverteilung nach parietalen Schlägen diskutiert.

5.2.3 Okzipitale Krafteinwirkungen

Zur mechanischen Anregung des Kopfes wird ein in Richtung Kopfschwerpunkt wirkender Kraftvektor appliziert, dessen zeitlicher Verlauf dem einer halben Sinusschwingung mit einer Schwingungsdauer von 20 ms entspricht und einen Betrag von maximal 8000 N aufweist. Damit ähnelt die Gewalteinwirkung der des Validationsexperiments des vorangehenden Abschnitts. Alle anderen Modellannahmen (Randbedingungen, Materialparameter) werden ohne Veränderung übernommen. Abb. 5.7 zeigt in sagittaler Schnittführung die nach 5 ms (= maximaler Betrag der Kraft) resultierenden Druckverteilungen nach frontaler (Bild I) und okzipitaler (Bild II) Applikation des Kraftverlaufs. Es kommt zu sehr ähnlichen Verteilungen mit unterschiedlichem Vorzeichen. Bei intensiver Betrachtung der Bilder I und II erkennt man, daß im Falle okzipitaler Einwirkung ein größerer Bereich negativen Drucks entsteht als bei frontalem Krafteinfluß. Physikalisch läßt sich diese Beobachtung mit der Asymmetrie der Kopfform bezüglich der koronaren Ebene erklären.

Die Kavitationstheorie nach Gross [3] erklärt Kontusionszonen im Contrecoup-Areal als Folge abrupt kollabierender Blasen, die durch Unterdruck entstehen. Gestützt wird Gross' Theorie durch Experimente von Lubock und Goldsmith [114], die das Entstehen von Blasen in einer wassergefüllten kugelförmigen Schale nach einer Krafteinwirkung beobachteten. Folgt man der Kavitati-

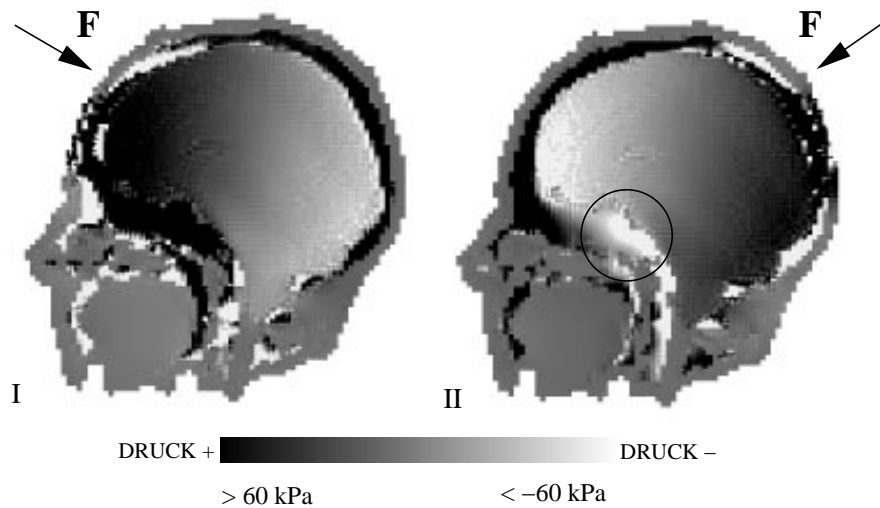


Abbildung 5.7: Druckverteilung nach frontaler (Bild I) und okzipitaler (Bild II) mechanischer Einwirkung. Die Verteilungen zeigen große Übereinstimmungen (bei umgekehrtem Vorzeichen), die Bereiche hohen negativen Drucks (hell) sind jedoch beim okzipitalen "Impact" größer.

onstheorie und interpretiert dann Areale hohen negativen Drucks als Gebiete hoher Verletzungswahrscheinlichkeit, so lautet die Aussage des Modells, daß man bei okzipitalen Gewalteinwirkungen mit ausgedehnteren Gehirnverletzungen zu rechnen hat als bei frontalen, da der Unterdruckbereich im okzipitalen Fall größer ist. Daher ist bei okzipitaler Einwirkung auch die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Hirnverletzungen erhöht. Dieses Phänomen läßt sich mit der allgemeinen klinischen Beobachtung korrelieren, daß Verletzungen im Frontalhirn vergleichsweise oft auftreten. Bei der Autopsie 72 verunfallter Personen [4] stellte man eine Häufung der Kontusionen im fronto-temporalen Bereich fest. Diese Häufung kann natürlich auch die Konsequenz einer höheren Anzahl okzipitaler Gewalteinwirkungen innerhalb der Stichprobe sein. Leider wird in der genannten Untersuchung auf die Mechanogenese der Hirnverletzungen nicht eingegangen. Trotz dieser Einschränkungen ist die Aussage des Modells von Interesse, da in der fronto-temporalen Gehirnregion (dieses Gebiet ist in Bild II von Abb. 5.7 mit einem Kreis grob umschrieben) ein deutlich abgesetztes Areal negativen Drucks erkennbar ist. Diese Beobachtung kann ein Hinweis auf eine Bestätigung der Theorie von Gross durch das hier präsentierte Modell sein, zu ihrer Verifikation bedürfte es einer umfangreichen klinischen Studie mit Simu-

lationsrechnungen zum jeweiligen Einzelfall.

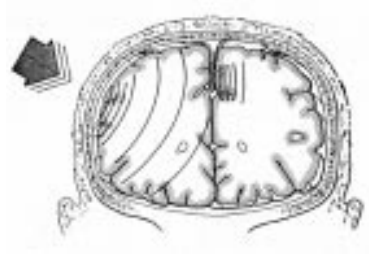


Abbildung 5.8: *Schematische Darstellung der Ausbreitung einer Kompressionswelle infolge einer parietalen Krafteinwirkung. Der mechanische Einfluß der Falx cerebri, die die Gehirnhemisphären voneinander trennt, und des Tentoriums wird im Text beschrieben.*

5.2.4 Einfluß von Gehirnmembranen bei lateralen Schlägen

Nun sollen Auswirkungen von lateralen Kräften auf den Kopf und der Einfluß von Gehirnmembranen (vgl. Abschnitt 5.1) auf die intrakranielle Druckverteilung untersucht werden. Die Membran wird “von Hand“ modelliert, indem im segmentierten Datensatz Voxel mit einer speziellen Materialnummer markiert werden. Das Ergebnis dieser Modellierung zeigt Abb. 5.9 als Verbund finiter Würfelemente. Wie Abb. 5.10 für den Zeitpunkt maximaler Krafteinwirkung

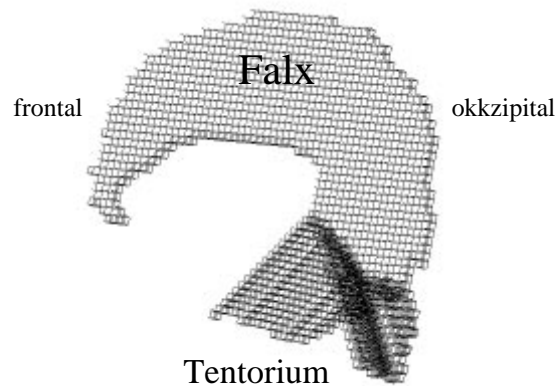


Abbildung 5.9: *Finite-Elemente-Repräsentation der Falx cerebri und des Tentoriums. Das Tentorium ist ein zeltähnliches Gebilde, das Kleinhirn und Großhirn trennt.*

exemplarisch zeigt, ist der mechanische Einfluß der Membranen relativ gering. Die Vergleichsrechnung ohne Berücksichtigung der Gehirnmembranen (jeweils rechts in der Abbildung) liefert fast identische Druckverteilungen. Ein axialer Schnitt in der Höhe der Stirn zeigt besonders deutlich, daß die Falx cerebri einem komplizierten Muster von Druck und Unterdruck ausgesetzt ist (Reihe I, Abb. 5.10). Zum einen werden die sich im Schädel ausbreitenden Deformationen auf sie übertragen, zum anderen liegt sie in dem Bereich des Gehirns, der als Ort des Zusammentreffens der Kompressions- und Zugwelle zu betrachten ist. Die Falx überträgt die im Gehirn propagierenden Druckwellen, ohne sie nennenswert abzuschwächen. Sie bietet folglich kaum Widerstand gegenüber

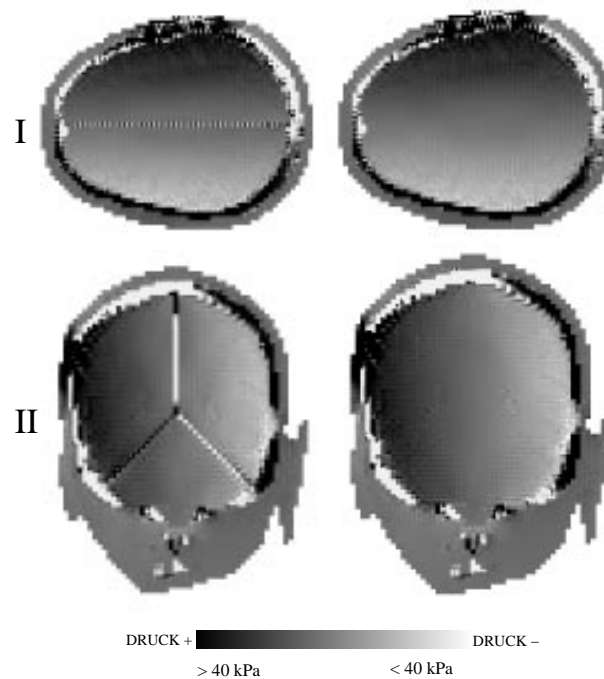


Abbildung 5.10: *Druckverteilungen zum Zeitpunkt maximaler Krafteinwirkung; die linke Spalte zeigt das Ergebnis bei Berücksichtigung der Gehirnmembranen, die rechte das Simulationsergebnis ohne Einbeziehung von Falx und Tentorium. Die Rechnungen liefern außer im Bereich des Kleinhirns sehr ähnliche Ergebnisse.*

Energietransport, hat jedoch großen Einfluß bei Materietransport, wie er z.B. beim Wachstum von Tumoren auftritt (siehe Abschnitt 5.4). Die mechanische Wirkung des Tentoriums tritt deutlicher hervor als die der Falx. Reihe II in

Abb. 5.10 zeigt in parasagittaler Schnittführung die sich einstellende Druckverteilung nach 5 ms. Aufgrund der speziellen Gestalt des Tentoriums kommt es zu einem Effekt auf die Druckverteilung im Bereich des Kleinhirns. Abb. 5.11

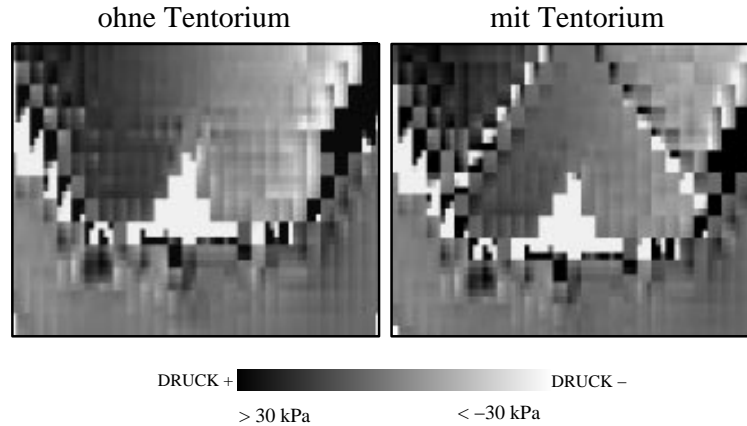


Abbildung 5.11: Vergrößerter Ausschnitt eines koronaren Schnitts durch den okzipitalen Gehirnbereich. Der mechanische Einfluß des Tentoriums auf mechanische Systemantwort im Kleinhirn wird durch eine relativ homogene Druckverteilung deutlich (Bild links ohne Membranen, rechts mit Tentorium).

zeigt einen vergrößerten Ausschnitt eines koronaren Schnitts im Bereich des Okzipitalhirns. Das linke Bild stellt den Druck ohne Einbeziehung der Membranen dar, das rechte zeigt das Simulationsergebnis mit Berücksichtigung von Falx und Tentorium. Man erkennt, daß die Druckverteilung im Kleinhirn bei Berücksichtigung der Membranen homogener ist. Auch die Anzahl heller Pixel (=hoher Unterdruck) ist geringer. Daher läßt sich vermuten, daß das Tentorium einen Teil der Wellenenergie absorbiert bzw. auf den Schädelknochen weiterleitet und somit den Druck im Kleinhirn reduziert. Da Druck im letzten Abschnitt als möglicher physikalischer Verletzungsindikator genannt wurde, wäre also im Cerebellum mit einer geringeren Häufigkeit an Verletzungen zu rechnen. Dies wird durch die klinische Erfahrung bestätigt. Dem Tentorium könnte somit eine Schutzfunktion für das Kleinhirn zugeschrieben werden. Um diese Aussage zu untermauern, sind allerdings umfangreichere Simulationsrechnungen in Zusammenhang mit klinischen Studien nötig.

5.3 Modale Simulationsrechnungen

5.3.1 Einführung

Bevor die Ergebnisse der modalen FE-Analyse des Kopfmodells präsentiert werden, sollen einige allgemeine Anmerkungen zum Zweck modaler Simulationsrechnungen zusammengestellt werden:

- Die Kenntnis der Eigenfrequenzen des Kopfes kann eine wichtige Rolle bei der Konstruktion von Schutzvorrichtungen spielen. Bei der Entwicklung von Fahrrad- oder Motorradhelmen ist dafür zu sorgen, daß Anregungen im Eigenfrequenzbereich des Kopfes stark gedämpft werden, die sonst in Zusammenhang mit Resonanzphänomenen zu großen Gewebsdeformationen führen. Berechnungen zur Verbesserung von Schutzvorrichtungen sind von Saczalski [12] angestellt worden.
- Der Vergleich der Eigenfrequenzen des hier dargestellten Kopfmodells mit denen eines analytischen Modells [112] und mit Experimenten an Probanden liefert weitere Möglichkeiten, die Verlässlichkeit der Simulationsergebnisse zu überprüfen (siehe Abschnitt 5.3.2).
- Da die Eigenschwingungen eines Objekts mathematisch gesehen ein vollständiges Basissystem darstellen, kann jegliche Schwingungsmode aus ihnen superponiert werden. Diese elementare Eigenschaft motiviert dazu, ausgewählte Eigenschwingungen auch in Hinblick auf Verletzungsmechanismen intensiv zu studieren. Unter der vereinfachenden Annahme, daß bei einer Rotation bestimmter Winkelbeschleunigung eine einzige Eigenmode angeregt wird, kann man exemplarisch untersuchen, welches Scherspannungsmuster sich aufgrund der Schwingung ergibt. Scherspannungen innerhalb des Kopfes werden von vielen Autoren [2, 7, 23, 105] als Ursache von Zerreißungsverletzungen des Gehirngewebes ausgemacht (siehe Abschnitte 5.3.3, 5.3.4).
- Für eine zuverlässige Lösung einer dynamischen FE-Analyse muß man von der Größe des Zeitschritts Δt

$$\Delta t \leq \Delta t_{kritisch} = \frac{T_n}{\pi} \quad (5.5)$$

fordern, wobei T_n die kleinste Schwingungsperiode der Finite-Elemente-Gruppierung mit n Freiheitsgraden ist (vgl. Abschnitt 4.5). Die Wahl

von Δt für die Rechnungen des vorangehenden Abschnitts wird mit den Ergebnissen des Abschnitts 5.3.5 vorgenommen, in dem die Eigenmode des Gehirns mit der höchsten Frequenz vorgestellt wird.

Die modale Analyse ist für FE-Netze mit hoher Elementanzahl sehr rechenintensiv und stellt damit hohe Anforderungen an Soft- und Hardware. Für die Bestimmung der zwei kleinsten Eigenwerte und Eigenvektoren eines FE-Kopfes mit 3 mm Auflösung (≈ 140000 Elemente) benötigt der Lanczos-Algorithmus in der ARPACK-Implementierung 120 Iterationen (siehe Abschnitt 4.4). Dies entspricht einer Rechenzeit von 92 h. Die Ergebnisse dieser Analyse werden im folgenden Abschnitt diskutiert.

5.3.2 Validierung des Kopfmodells II

Nur drei Autoren [25, 27, 36] führen eine modale Analyse für ihre 3D-Modelle durch. Bei Ward [25] handelt es sich um eines der ersten 3D-Modelle, das aus nur 200 Elementen zusammengesetzt ist. Die kleinste Eigenfrequenz seines Modells hat den Wert von 19 Hz ohne zerebrale Membranen und einen Wert von 23 Hz, wenn Falx und Tentorium berücksichtigt werden. Die niedrigste Eigenfrequenz des Modells von Shugar hat den Betrag von 43 Hz. Verglichen mit Stalnakers Messungen an Kadavern [8] und Tzengs Experimenten mit Freiwilligen [115], die beide einen Wert von 160 Hz bestimmten, sind ihre Ergebnisse zu niedrig. Willinger [27], der auch Experimente mit Probanden durchführte, berichtet einen Wert von 100 Hz bei seinen Messungen. Zusammenfassend kann man festhalten, daß die niedrigste Eigenfrequenz des Kopfes nicht exakt angegeben werden kann, eine obere Grenze jedoch bei 160 Hz zu liegen scheint. Einen Anhaltspunkt für eine untere Grenze liefert das mathematische Kopfmodell von Engin [112], das die Eigenfrequenzen einer mit Flüssigkeit gefüllten Kugel auf analytischem Wege berechnet. Als Lösung der Differentialgleichung erhält Engin die sphärischen Besselfunktionen. Nimmt man für den Radius der Kugel einen Wert von 8 cm an und schätzt die Schallgeschwindigkeit im Gehirn c_g mit den Werten aus Tabelle 5.1 auf

$$c_g = \sqrt{\frac{E_g}{\rho_g}} \approx 10m/s, \quad (5.6)$$

ergibt sich aus Engins Berechnungen ein Wert von ca. 15 Hz für die niedrigste Eigenfrequenz. Um die Ergebnisse des Modells mit der analytischen Lösung vergleichen zu können, wird die modale Analyse zuerst ohne Berücksichtigung

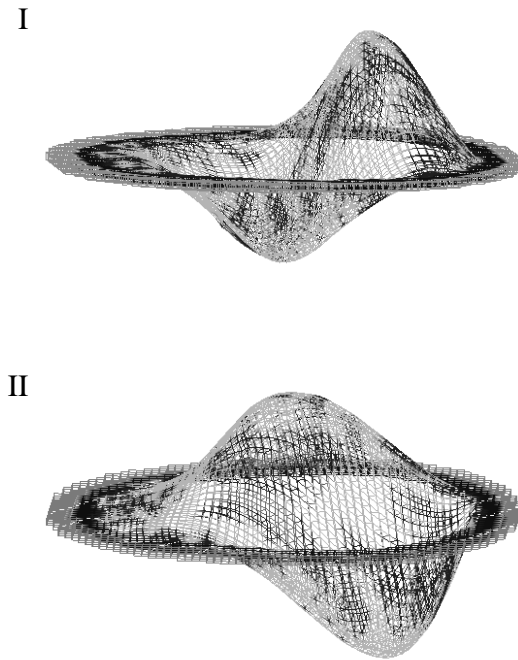


Abbildung 5.12: Visualisierung der beiden Eigenschwingungen mit den niedrigsten Frequenzen anhand eines axialen Schnittes durch das FE-Netz. Die Werte der Frequenzen betragen $f_1=70$ Hz (Bild I) und $f_2=77$ Hz (Bild II).

der Gehirnmembranen durchgeführt. Wie in Abschnitt 4.4 beschrieben, liefert die modale Analyse sowohl eine Eigenfrequenz ω_i als auch den zugehörigen Eigenvektor \mathbf{U}_i . Dieser Vektor stellt die zeitunabhängige Schwingungsamplitude dar. Um die Schwingungskomponenten in alle drei Raumrichtungen gleichzeitig visualisieren zu können, addiert man die Eigenvektorkomponenten auf die Koordinaten der Knoten des FE-Netzes, das in Abb. 2.10 präsentiert wurde. Da die Komponenten des Eigenvektors sehr klein sind, was auch für die modale Analyse den linearen Ansatz rechtfertigt, werden alle Komponenten mit dem Faktor 50 multipliziert. In Abb. 5.12 sind zwei axiale Schnitte durch derart modifizierte Netze zu sehen, die den Eigenmoden mit den Frequenzen von $f_1=70$ Hz (Bild I) und $f_2=77$ Hz (Bild II) entsprechen. Diese Schnitte wurden ausgewählt, da sie in der Region der größten Schwingungsamplitude liegen. Mit den genannten Werten liegen die hier präsentierten Ergebnisse innerhalb des oben abgesteckten Bereichs von 15 Hz bis 160 Hz. Man erkennt in Abb. 5.12 zudem, daß es sich bei

den Schwingungen um Bewegungen des Gehirns relativ zum Schädel handelt. Gerade solche Relativbewegungen, insbesondere wenn sie zu Scherungen des Gewebes führen, werden von einigen Autoren [2, 7, 23, 105] als Verletzungsmechanismus infolge von Rotationen des Kopfes identifiziert. Aus diesem Grund werden im folgenden Abschnitt Scherspannungen untersucht, die sich infolge von Eigenschwingungen einstellen. Dabei wird eine Beschränkung auf die in Abb. 5.12 Bild II präsentierte Mode vorgenommen, da sie in einem höheren Maße Gewebsscherungen aufweist als die in Bild I dargestellte. Es soll anhand dieser speziellen Eigenmode exemplarisch der Zusammenhang zwischen Rotationsanregung des Kopfes, resultierender Schwingung des Gehirngewebes und den damit verbundenen Scherspannungen studiert werden. Im Abschnitt 5.3.4 wird darauf aufbauend versucht, eine Korrelation von Eigenschwingungen aus dem mittleren Frequenzbereich und dem Auftreten der Diffusen Axonalen Gehirnschädigung herzustellen.

5.3.3 Rotation und Scherspannungen

Im vorangehenden Abschnitt wurde auf die Berücksichtigung von Gehirnmembranen verzichtet, da sie auch in den zum Vergleich herangezogenen analytischen Modellen nicht berücksichtigt waren. An dieser Stelle soll kurz von den mechanischen Auswirkungen der Falx und des Tentoriums auf die Eigenanalyse berichtet werden. Ihre Einbeziehung schlägt sich in einer Erhöhung der Eigenfrequenzen nieder, genau wie es auch von Ward [25] und Ruan [22] beschrieben wurde. Relativ ist der Zuwachs bei niedrigeren Frequenzen größer als bei höheren. Hier erhöhte sich die Frequenz f_1 um ca. 22 % von 70 Hz auf 86 Hz und die Frequenz f_2 um 14 % von 77 Hz auf 88 Hz. Einfluß auf die Komponenten des Eigenvektors U_i hat die Berücksichtigung der Gehirnmembranen jedoch kaum. Ruan fand in seiner zweidimensionalen Studie zudem einen linearen Zusammenhang zwischen den Eigenfrequenzen und dem Wert des Elastizitätsmoduls E : mit abnehmenden E -Wert werden die Eigenfrequenzen kleiner.

Nachdem im Zusammenhang mit der Untersuchung des Coup-Contrecoup-Phänomens die physikalischen Abläufe eines Translationstraumas erörtert wurden, sollen in diesem Abschnitt die Konsequenzen einer Rotation des Kopfes modellhaft diskutiert werden. Mittels medizinischer Studien an Affen demonstrierten Ommaya [116] und Unterharnscheidt [117], daß nicht deformierende Winkelbeschleunigungen des Kopfes Bewußtlosigkeit (engl. *concussion*) zur Folge haben können. Ein mathematisches Modell von Bycroft versucht, diese Ge-

hirnschädigungen mit einem kritischen Wert für die Scherspannung an einem definierten Hirnort in Verbindung zu bringen. Nach seiner Analyse entsteht eine Scherwelle aufgrund der Kopplung der Konvexität des Gehirns mit dem Schädelknochen. Bei Beschleunigungen des gesamten Kopfes bewegt sich die Oberfläche des Gehirns mit dem Schädel, was zur Entstehung einer Scherwelle führt. Um eine exemplarische Studie zu ermöglichen, die den Zusammenhang zwischen Rotation und Scherkräften herstellt, soll vereinfachend angenommen werden, daß die durch Rotation des Kopfes angeregte Schwingung die Form der Eigenmode in Abb. 5.12 Bild II hat. Man könnte sich als Gedankenexperiment vorstellen, daß eine Fourieranalyse der von Bycroft beschriebenen Scherwelle mit den Eigenmoden als Basisfunktionen ergibt, daß der größte Beitrag von der 88 Hz-Eigenschwingung herrührt. Zu welchen Scherspannungsmustern führt eine derartige Wellenbewegung? Wie Kapitel 5.1.1 erläutert, führen schon kleine Scherkräfte zu großen Deformationen. Da kritische Werte für Scherspannungen in Gehirngewebe nicht bekannt sind, können die Ergebnisse der Scherspannungsanalyse nur qualitativ diskutiert werden. Die in Abb. 5.13 vorgestellten Schnitte durch den FE-Kopf zeigen die Scherspannungen, die sich ergeben, wenn man den Kopf zu einer Eigenschwingung anregt, wie sie in Abb. 5.12 Bild II zu sehen ist. Sowohl helle (= große negative Scherspannung) als auch dunkle (= große positive Scherspannung) Areale müssen in den präsentierten Bildern als Bereiche erhöhter Verletzungswahrscheinlichkeit interpretiert werden. Im axialen Schnitt ist deutlich eine hohe Scherspannung im Gebiet der Parietallappen auszumachen. Interessanterweise läßt sich die weiße von der grauen Gehirnmasse in Bezug auf die Scherspannung unterscheiden. Da beide in der beschriebenen Eigenmode ähnlichen Deformationen unterliegen (siehe Abb. 5.12 Bild II), sie aber mit unterschiedlichen Materialparametern versehen sind (vgl. Tabelle 5.1), bilden sich innerhalb der weißen Materie höhere Scherspannungen aus.

Der sagittale Schnitt durch den Kopf in Abb. 5.13 zeigt deutlich, daß die Ventrikel bei Anregung der 77 Hz-Schwingung hohen Scherspannungen unterworfen werden, die Komponente τ_{xz} des Spannungstensors weist hier einen scharfkantigen Übergang auf. Sollte bei einem Unfall tatsächlich diese Eigenschwingung zum Tragen kommen, müßte mit beträchtlichen Verformungen des Ventrikelpaares zu rechnen sein. Im unteren Schnitt wird eine gewisse Asymmetrie des Scherspannungsmusters sichtbar, die aber aus der Form der Eigenmode resultiert.

Eine abschließende medizinische Interpretation der Beobachtungen ist in

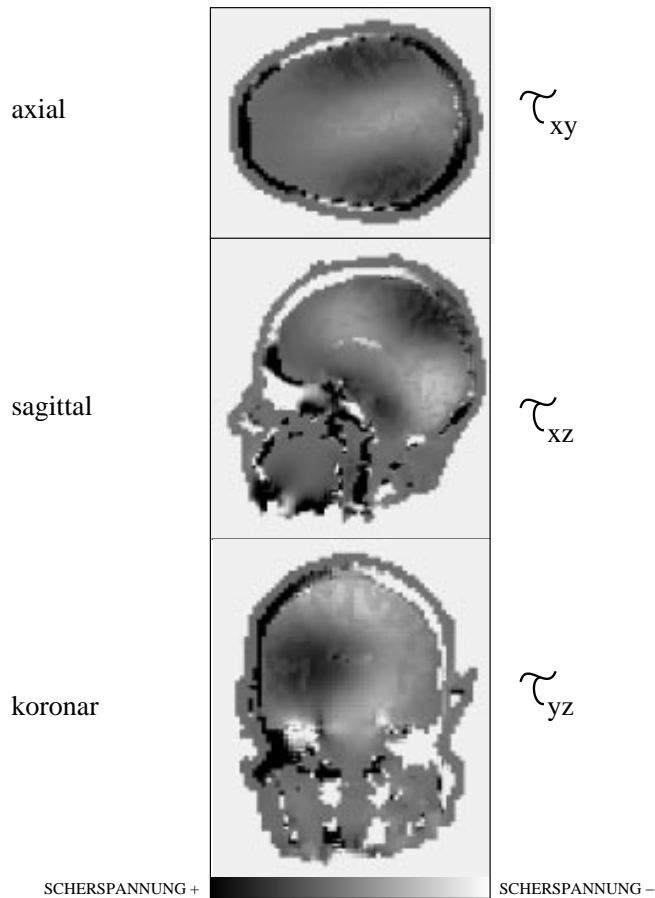


Abbildung 5.13: Visualisierung der Scherspannungen, die sich bei der 77 Hz-Eigenschwingung (vgl. Abb. 5.12) ergeben. Ausführliche Erläuterung siehe Text.

diesem Modellstadium und auch im Rahmen der Arbeit nicht möglich. Dieser Abschnitt dient vielmehr dazu, das physikalische Geschehen eines Rotations-traumas modellhaft zu beschreiben und einen möglichen Verletzungsindikator (die Höhe der Scherspannung) zu identifizieren. Nun soll ein Zusammenhang von mittelfrequenten Eigenschwingungen und dem Phänomen der “Diffusen Axonalen Gehirnschädigung“ gezogen werden.

5.3.4 Die Diffuse Axonale Gehirnschädigung (DAI)

Bei Rotations- und Schleudertraumen entstehen häufig diffuse Hirnverletzungen ohne die für Translationstraumen typischen Kontusionen [118]. Bei einer Winkelbeschleunigung des Kopfes treten dabei besonders in zentralen Hirnanteilen

Scherkräfte auf. Diese bewirken kleine Blutungen, Zerrungen und Zerreißen im Hirngewebe. Diese häufig regelmäßig angeordneten Verletzungsmuster betreffen besonders axonale Strukturen im Marklager. Die Schwere dieses als “Diffuse Axonale Gehirnschädigung (DAI)” bezeichneten Phänomens hängt unter anderem von der Größe der Winkelbeschleunigung ab. Diese spezifische Form von Gehirnschädigung konnte von Gennarelli [7] reproduzierbar bei Versuchsaffen erzeugt werden, indem er ihre Köpfe impulsartigen Rotationsbeschleunigungen aussetzte. Daraufhin wurde die DAI auch mithilfe eines physikalischen Modells untersucht [106], an dem die Affenexperimente nachvollzogen wurden. Das Modell erlaubt die Messung der Gewebedeformation als Funktion der aufgelegten Beschleunigungen.

Mittels der modalen Analyse des numerischen Modells soll in diesem Abschnitt ein Mechanismus präsentiert werden, der möglicherweise am Zustandekommen regelmäßiger Verletzungsmuster beteiligt sein könnte. Nachdem im vorangehenden Abschnitt die Eigenschwingungen kleinster Frequenz präsentiert wurden, sollen in diesem Abschnitt Schwingungen des Gehirns aus dem mittleren Frequenzbereich Gegenstand des Interesses sein. Wie im vorangehenden Abschnitt gilt auch diesmal die vereinfachende Annahme, daß eine bestimmte Eigenmode durch eine Rotationsbewegung des Kopfes angeregt wird. Stellvertretend für alle mittelfrequenten Eigenschwingungen wird aus dem Frequenzbereich um die 200 Hz eine Mode herausgegriffen, die nun näher untersucht wird. Abb. 5.14 stellt zwei Komponenten des Spannungstensors graphisch dar, die sich bei Anregung der 198 Hz-Eigenmode ergeben. Die Komponente τ_{xy} ist anhand eines axialen Schnittes aus dem subkortikalen Hirnbereich visualisiert und die Komponente τ_{xz} mithilfe eines sagittalen Schnitts durch den Kopf dargestellt. Es sei darauf hingewiesen, daß nur der Betrag der Scherspannungen visualisiert ist, da das Gewebe unabhängig von ihrer Richtung sehr empfindlich auf Scherspannungen reagiert. In den beiden Bildern von Abb. 5.14 erkennt man eine ausgeprägte Regelmäßigkeit der Scherspannungsmuster. Areale hoher Scherspannung (hell) werden von Scherspannungs-Nulllinien (dunkel) begrenzt. Besonders im unteren Bild wird eine annähernd äquidistante Anordnung der Bereiche hoher Scherspannung sichtbar. Diese Beobachtung legt die Vermutung nahe, daß die bei Patienten mit DAI auftretenden regelmäßigen Zerreißen mit Eigenschwingungen des Gehirns bzw. den damit verbundenen Scherungen in Zusammenhang stehen. Natürlich wird in der Realität nie eine einzelne Eigenmode angeregt, man wird vielmehr auf Überlagerungen von Eigenschwingungen

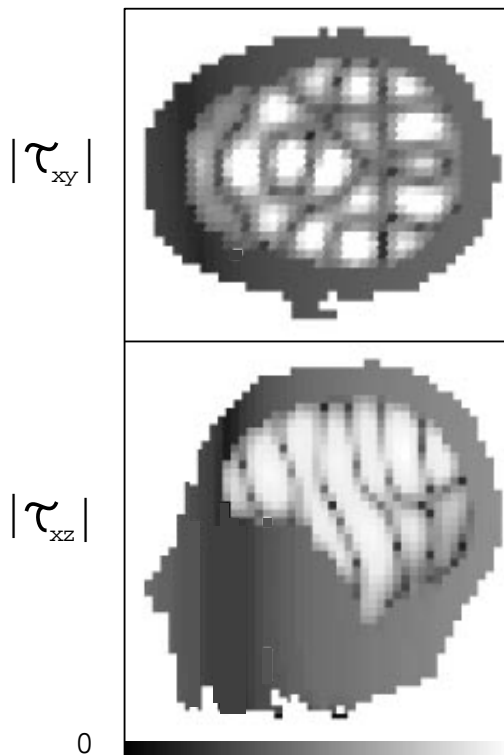


Abbildung 5.14: Scherspannungen zu einer Eigenschwingung mit $f=198$ Hz.

treffen. Trotzdem liefert die Analyse den wichtigen Hinweis, daß Eigenschwingungen aus dem mittleren Frequenzbereich Scherspannungsmuster von hoher Regelmäßigkeit generieren. Sollte der vermutete Zusammenhang zwischen DAI und den Eigenmoden durch klinische Studien erhärtet werden, wäre ein wichtiger Beitrag zum Verständnis der DAI und vielleicht auch zu ihrer Prävention gemacht.

5.3.5 Eine hochfrequente Eigenmode des Gehirns

Zum Abschluß dieses Abschnitts wird die Eigenschwingung des Gehirns mit der höchsten Frequenz vorgestellt. Alle weiteren Moden im hochfrequenten Bereich, die vom ARPACK-Algorithmus berechnet wurden, sind keine Schwingungen des Gehirns, sondern der Materialien mit größeren Elastizitätsmoduln (äußeres Gewebe, Schädelknochen). Wie schon in den Abschnitten 4.5.1 und 5.3.1 erörtert, ist die Kenntnis der höchsten Eigenfrequenz eines Objekts nötig, um die Feinheit der Zeitachsendiskretisierung beim Newmarkschen Verfahren

abzuschätzen. Abb. 5.15 zeigt die Eigenmode des Gehirns mit der größten Frequenz von 538 Hz. Es ist nur ein Schnitt durch das FE-Netz dargestellt. Es

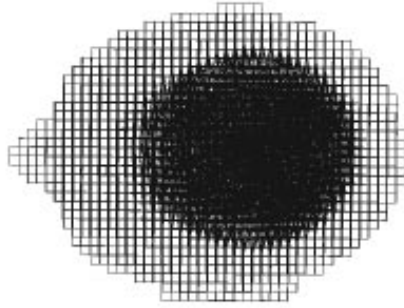


Abbildung 5.15: *Eigenschwingung des Gehirns mit einer Frequenz von 538 Hz.*

handelt sich um eine Schwingung mit annähernd kugelförmiger Begrenzungsfläche. Nach der Ungleichung (5.5) ergibt sich

$$\Delta t_{kritisch} = 0.59 \text{ ms} \quad (5.7)$$

als obere Schranke für Δt . Daher wird für die Simulationen in Abschnitt 4.5 ein Wert von 0.5 ms für Δt gewählt.

Der letzte Abschnitt dieses Kapitels ist der Simulation von Raumforderungen im Kopf gewidmet.

5.4 Nichtlinear-statische Simulationsrechnungen

In den vorangehenden Unterkapiteln wurden die mechanischen Auswirkungen externer Einflüsse (fokale Kräfte, Beschleunigungen) studiert. In diesem Abschnitt sollen strukturelle Veränderungen des Gehirns und damit verbundene Druckveränderungen untersucht werden, die aufgrund einer Massenzunahme innerhalb des Schädels zustandekommen.

Auf dem Gebiet der Biomechanik des Gehirns wurde der Modellierung pathologischer Strukturen bisher wenig Aufmerksamkeit geschenkt. Im Bereich der quasistatischen Gehirnmechanik werden ausschließlich 2D Finite-Elemente Modelle des Kopfes benutzt. Nagashima führte eine 2D FE-Analyse basierend auf der linearen Elastizitätstheorie durch, um die mechanischen Auswirkungen von Ödemen zu untersuchen [119, 120]. Subramaniam [121] und Mitarbeiter

nutzen vergleichbare 2D FE-Simulationen, um neurologische Konsequenzen des Hydrozephalus zu modellieren. Sie fanden in ihren FE-Berechnungen, in denen sie linear elastisches Materialverhalten und kleine Verschiebungen postulieren, daß die Expansion der Ventrikel mit medizinischen Beobachtungen übereinstimmt. Ein weiteres 2D FE-Modell zur Untersuchung raumfordernder Prozesse im Kopf wurde von Takizawa [122] im Jahre 1994 vorgestellt. Er entwickelte sein vollkommen lineares Modell auf der Grundlage eines einzelnen repräsentativen Schnittes durch das Gehirn, um Blutungen im Kopf studieren zu können.

Mit dem in dieser Arbeit beschriebenen 3D Kopfmodell werden im folgenden Abschnitt die Auswirkungen eines raumfordernden Prozesses am Beispiel des Tumorwachstums untersucht.

5.4.1 Simulation eines Hirntumors

Im Gegensatz zu den bisher diskutierten Einflüssen auf den Kopf sind Wachstumsprozesse langsam. Damit müssen bei der Simulation eines Hirntumors weder Trägheits- noch Dämpfungskräfte berücksichtigt werden. Daher benutzt man zum Studium des Tumorwachstums die statische FE-Analyse, die geometrisch-nichtlinear durchgeführt wird. Eine derartige Analyse (siehe Abschnitt

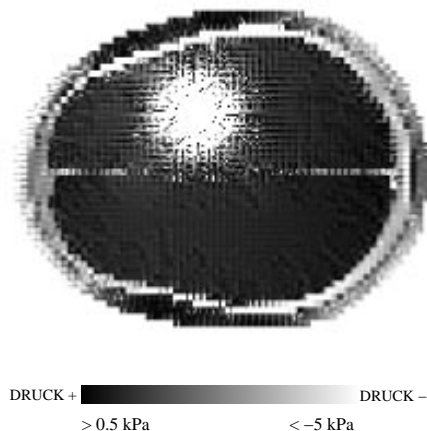


Abbildung 5.16: *Durch künstliches Ausweiten eines Würfelements wird das Wachstum eines Tumors simuliert. Der axiale Schnitt durch den Kopf zeigt die Druckverteilung in direkter Umgebung des Tumorkeims.*

4.3.1) wird notwendig, da die beim Tumorwachstum auftretenden Verschiebungen in der Größenordnung von Zentimetern liegen. Das Gehirngewebe wird als

sogenanntes St. Venant-Kirchhoff-Material [123] behandelt, was bedeutet, daß auch für große Verschiebungen linear-elastisches Verhalten angenommen werden kann. Diese Annahme basiert auf Untersuchungen von Ljung [124]. Bei seinen Messungen hat er festgestellt, daß Gehirngewebe großen quasistatischen Deformationen ausgesetzt werden kann, ohne zu zerreißen.

Als Tumorkeim dient ein einzelnes 8-Knoten-Würfelement aus dem FE-Netz des Kopfes (siehe Abb. 2.10). Das Wachstum des Tumors wird simuliert, indem an jedem Knoten des Würfelements Kräfte angreifen, die dazu führen, daß die Kantenlänge des Würfels sich von 3 mm auf ca. 15 mm erhöht. An der Stelle, an der der Tumor sitzt, ist eine Druckverminderung zu beobachten (siehe Abb. 5.16), die jedoch als Artefakt zu interpretieren ist. Die künstliche Ausweitung eines Würfelements hat in der näheren Umgebung dieses Elements positive Hauptspannungen zur Folge, die nach Gleichung (5.4) einem Unterdruck in diesem Gebiet entsprechen. Die Systemantwort in direkter Umgebung des "Tumors" wird daher im weiteren Verlauf dieses Abschnitts nicht berücksichtigt. Es entspricht der Vorgehensweise einer nichtlinear-statischen Analyse, die

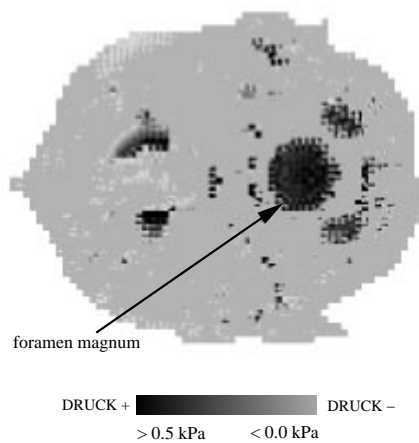


Abbildung 5.17: Aufgrund der Verdrängung von Gehirngewebe aus dem Schädelknochen entsteht im Bereich des Foramen magnum ein hoher Druck.

am Würfelement angreifenden Kräfte nicht auf einmal zu applizieren, sondern sie schrittweise an die Knoten anzulegen und bei jedem Schritt die Steifigkeitsmatrix neu zu berechnen. Hier hat sich eine Aufteilung der Gesamtlast auf zehn Schritte als effizient erwiesen. Eine nichtlineare Analyse zur Simulation eines Tumors dauert dann ungefähr sieben Stunden für ein Netz mit 150000 kubischen

Elementen. In Abschnitt 4.3.1 wurde das zur Lösung des statischen Gleichungssystems (3.16) angewandte iterative Newton-Raphson-Verfahren ausführlich beschrieben.

Wie nicht anders zu erwarten, führt das zusätzliche Volumen im Kopf zu einer intrakraniellen Druckerhöhung (siehe Abb. 5.16), die an einigen Gehirnorten auffällige Maxima aufweist. Die Werte der Druckzunahme im Bereich von



Abbildung 5.18: Die Berücksichtigung von Falx und Tentorium führt dazu, daß das Gehirn bei der Simulation eines Tumorwachstums in drei Kompartimente unterschiedlichen Drucks unterteilt wird.

durchschnittlich 0.2 kPa liegen in realistischer Größenordnung. Die folgende Abschätzung soll diese Aussage bestätigen: Durch das Aufblähen des Würfelement von 3 mm auf 15 mm Kantenlänge erhöht sich in erster Näherung das Gesamtvolumen V des Gehirns um ungefähr $\Delta V = 3000 \text{ mm}^3$. Stellt man sich nun vor, das Gehirn wäre vollständig umschlossen vom harten Schädelknochen, so würde diese Volumenvergrößerung ΔV , die aufgrund des Schädels nicht vollzogen werden kann, sich in einer Druckerhöhung ΔP äußern. Die Druckerhöhung berechnet sich zu

$$\Delta P = \frac{\Delta V}{V} \frac{E}{3(1-2\nu)} = 1.3 \text{ kPa}, \quad (5.8)$$

wobei die Werte für E und ν der Tabelle 5.1 entnommen wurden. Der Wert für ΔP ist höher als der Mittelwert der Simulationsergebnisse. Dieses Abweichung kann durch den Umstand erklärt werden, daß der Schädelknochen nicht voll-

kommen geschlossen ist, sondern eine Öffnung (das Foramen magnum) aufweist. Diese Öffnung macht es dem Gehirngewebe möglich, dem Tumordruck auszuweichen. In Abb. 5.17 ist zu erkennen, daß der Druck im Bereich des Foramen magnum dementsprechend hoch ist.

Bei einer koronaren Schnittführung durch den okzipitalen Hirnbereich wird der Einfluß der Gehirnmembranen auf die intrakranielle Druckverteilung infolge eines Tumorwachstums deutlich. Während bei der Modellierung seitlicher Schläge auf den Kopf nur ein Effekt im Bereich des Kleinhirns konstatiert werden konnte (vgl. Abschnitt 5.2.4), zeigen sich bei der Simulation eines Tumors deutliche Druckunterschiede in den durch Falx und Tentorium definierten Gehirnkompartmenten. In der Hemisphäre, in der der Tumor angesiedelt ist, ist der Druck im Vergleich mit den Werten in der durch die Falx abgeschirmte Hirnhälfte deutlich höher. Am geringsten ist die Druckzunahme im Bereich des Kleinhirns, das offenbar, wie im Falle des lateralen Schlages, einen besonderen Schutz durch das Tentorium erfährt.

Das letzte Kapitel dieser Arbeit gibt neben einer kurzen Zusammenfassung noch einen Ausblick auf zukünftige Anwendungen des Modells.

Kapitel 6

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein mechanisches Modell des menschlichen Kopfes vorgestellt. Ausgehend von MRT-Datensätzen des Gehirns wurde die Methode der Finiten Elemente genutzt, um Untersuchungen zur Biomechanik des Kopfes anzustellen. Die effiziente Implementierung der FEM auf einer parallelen Rechnerarchitektur ermöglicht es, Simulationsrechnungen mit hoher räumlicher Auflösung in relativ kurzer Rechenzeit durchzuführen. Beim Vergleich mit klinischen Untersuchungen und physikalischen Abschätzungen erwiesen sich die Simulationsergebnisse als qualitativ und quantitativ stimmig [125].

Dieses Modell unterscheidet sich in einigen Punkten grundlegend von seinen Vorgängern. Frühere FE-Simulationsrechnungen zur Biomechanik des Kopfes wurden mit Netzen vollzogen, die eine Durchschnittsform des menschlichen Kopfes repräsentieren (vgl. Abschnitt 1.2). Dagegen bietet das in dieser Arbeit beschriebene Modell die Möglichkeit, basierend auf *individuellen* MRT-Datensätzen, Simulationsrechnungen auszuführen. Ein weitere wichtige Eigenschaft dieses Modells ist seine hohe räumliche Auflösung, mit der sowohl eine realistische Repräsentation neuroanatomischer Strukturen als auch eine hohe numerische Genauigkeit der Berechnungen erreicht wird. Die Durchführung einer modalen Analyse auf der Grundlage hochaufgelöster 3D Netze stellt einen zusätzlichen Vorteil dar. Neben der Bestätigung der Ergebnisse lieferte die modale Analyse einen möglicherweise wichtigen Hinweis, um das Zustandekommen der Diffusen Axonalen Hirnschädigung besser zu verstehen.

Nachdem nun die Werkzeuge vorliegen, die zum Aufstellen eines mechanischen FE-Modells des menschlichen Kopfes nötig sind (vgl. Kapitel 2 und 4) und eine Validierung mit klinisch-relevanten Simulationsrechnungen erfolgt ist, ergeben sich auf klinischer Ebene weitere Entwicklungsmöglichkeiten.

Da die Modellrechnungen auf *individuellen* MRT-Datensätze basieren, können z.B. Krankheitsprozesse im Individualfall untersucht werden. Da das MPI für neuropsychologische Forschung eng mit der Tagesklinik für kognitive Neurologie zusammenarbeitet, sind Langzeitstudien an Patienten mit schwerer Hirnschädigung denkbar. Von besonderem Interesse ist die Entwicklung einer morphologischen Beschreibung der Rückbildungsmechanismen von Gehirngewebe nach strukturellen Veränderungen (z.B. nach der Strahlenbehandlung eines Tumors). Auf die Notwendigkeit, die allgemeinen Beobachtungen zu den Pathomechanismen von Hirnverletzungen durch zahlreiche Einzelfallstudien zu ergänzen, wurde schon in den Abschnitten 5.2 und 5.3 hingewiesen. Denn nur über den Abgleich von Simulationsergebnissen mit der klinischen Diagnose lassen sich Theorien zum Zustandekommen von Hirnschädigungen überprüfen.

Darüberhinaus besteht die Möglichkeit, daß dieses Modell ein neurochirurgisches Hilfsmittel werden kann [126]. Hier könnte es der präoperativen Planung neurochirurgischer Eingriffe dienen und bei der Abschätzung des sogenannten "Brain-Shifts" hilfreich sein. Nach der Öffnung des Schädels bewegt sich das Gehirn bis zu einigen Millimetern aus seiner ursprünglichen Lage. Damit verlieren präoperative Aufnahmen des Gehirns ihre Gültigkeit. Mit der Bestimmung des "Brain-Shifts" könnte folglich die Positioniergenauigkeit des Operationsinstruments erhöht werden.

Der Verwendung dieses Modells als neurochirurgisches Hilfsmittel steht zur Zeit noch der Mangel an verlässlichen Materialparametern entgegen. In den letzten beiden Jahren wurden jedoch neue Verfahren entwickelt, um Materialparameter von Geweben zu bestimmen. Hoffmeister [127] benutzte die Ultraschalltechnik, um das Elastizitätsmodul von Herzgewebe zu messen. Es ist geplant, das Verfahren auch auf Gehirngewebe anzuwenden [128]. Peters und Mitarbeiter [129] führten Schwingungsexperimente an Gehirnen von Schweinen durch, um deren Materialparameter zu ermitteln. Auch sie planen, ihr Verfahren auf menschliches Gehirngewebe zu übertragen.

Wenn genaue Materialparameter von Kopfgewebe vorliegen, können diese leicht in dem vorgestellten Modell berücksichtigt werden. Die Verlässlichkeit der Simulationsergebnisse wird damit weiter erhöht. Unter diesen Umständen ist es denkbar, daß sich das FE-Modell in der Zukunft zu einem wichtigen Hilfsmittel bei der Optimierung von Schutzvorrichtungen für den Kopf entwickelt oder auch Einfluß auf die Wahl der Therapieform nach Hirnverletzungen nimmt.

Literaturverzeichnis

- [1] Report of the European Transport Safety Council in Belgium (1993) Reducing Traffic Injuries through Vehicle Safety Improvements.
- [2] Holbourn, A.H.S. (1943) Mechanics of Head Injuries. *The Lancet* **2**, 438-441
- [3] Gross, A.G. (1958) A New Theory on the Dynamics of Brain Concussion and Brain Injury. *Journal of Neurosurgery* **15**, 548-561
- [4] Gurdjian, E.S., Lissner, H.R., Hodgson, V.R., Patrick, L.M. (1966) Mechanisms of Head Injury. *Clinical Neurosurgery* **12**, 122-128
- [5] Nahum, A.M., Smith, R., Ward, C.C. (1977) Intracranial Pressure Dynamics during Head Impact. *Proceedings 21st Stapp Car Crash Conference*, 339-367
- [6] Adams, J.H., Gennarelli, T.A., Graham, D.I. (1982) Brain Damage in Non-missile Head Injury: Observations in Man and Subhuman Primates. *Recent Advances in Neuropathology*, Chap. 7, edited by R. Smith und J. Cavanagh, Churchill, Edinburgh, 165-190
- [7] Gennarelli, T.A., Thibault, L. (1987) Directional Dependence of Axonal Brain Injury due to Centroidal and Non-centroidal Acceleration. *Proceedings 31st Stapp Car Crash Conference*, 49-54
- [8] Stalnaker, R.L., Fogle, J.L., McElhaney, J.H. (1971) Driving Point Impedance Characteristics of the Head. *Journal of Biomechanics* **4**, 127-139
- [9] Akkas, N. (1975) Dynamic Analysis of a Fluid-filled Spherical Sandwich Shell - a Model of the Human Head. *Journal of Biomechanics* **8**, 275-284

- [10] Engin, A.E. (1969) The Axisymmetric Response of a Fluid-filled Spherical Shell to a Local Radial Impulse - a Model for Head Injury. *Journal of Biomechanics* **2**, 325-341
- [11] Khalil, T.B. (1977) Parametric Study of Head Response by Finite Element Modeling. *Journal of Biomechanics* **10**, 119-132
- [12] Saczalski, K.J., Richardson, E.Q. (1978) Nonlinear Prediction of Human Head/Helmet Crash Impact Response. *Aviation, Space and Environmental Medicine* **49**(1), 114-119
- [13] Cheng, L.Y., Rifai, S., Khatua, T., Piziali, R.L. (1990) Finite Element Analysis of Diffuse Axonal Injury. *Proceedings 34th Stapp Car Crash Conference*, 141-154
- [14] Anzelius, A. (1943) The Effect of an Impact on a Spherical Liquid Mass. *Acta Pathologica et Microbiologica Scandinavica* (Supplementum XLVIII) **48**, 153-159
- [15] Goldsmith, W. (1970) Biomechanics of Head Injury. *Biomechanics: Its Foundations and Objectives* (Edited by Fung, Y.C., Perrone, N. and Anliker, M.), Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 231-241
- [16] Hickling, R., Wenner, M.L. (1973) Mathematical Model of a Head Subjected to an Axisymmetric Impact. *Journal of Biomechanics* **6**, 115-132
- [17] Advani, S.H., Owings, R.P. (1975) Structural Modeling of the Human Head. *Journal of Engineering Mechanics Division* **3**, 257-266
- [18] Shugar, A.T., Katona, M.G. (1975) Development of a Finite Element Head Injury Model. *Journal of the American Society of Computational Engineering (ASCE)* **101**, 223-239
- [19] Khalil, T.B., Viano, D.C. (1982) Critical Issues in Finite Element Modeling of Head Impact. *Proceedings 26th Stapp Car Crash Conference*, 87-102
- [20] Sauren, A.A.H.J., Claessens, M.H.A. (1993) Finite Element Modeling of Head Impact: The Second Decade. *Proceedings of the International Conference on the Biomechanics of Impact (IRCOBI)*, 241-254

- [21] Willinger, R., Kopp, C.M., Cesari, D. (1992) New Concept of Contrecoup Lesion Mechanism: Modal Analysis of a Finite Element Model of the Head. *Proceedings of the International Conference on the Biomechanics of Impact (IRCOBI)*, 283-297
- [22] Ruan, J.S., Khalil, T., King, A.I. (1991) Human Head Dynamic Response to Side Impact by Finite Element Modeling. *Journal of Biomechanical Engineering* **113**, 276-283
- [23] Chu, C.S., Lin, M.S., Lee, M.C. (1994) Finite Element Analysis of Cerebral Contusion. *Journal of Biomechanics* **27**, 187-194
- [24] Kuijpers, A.H.W.M., Claessens, M.H.A, Sauren, A.A.H.J. (1995) The Influence of Different Boundary Conditions on the Response of the Head to Impact: A Two-dimensional Finite Element Study. *Journal of Neurotrauma* **12** (4), 715-724
- [25] Ward, C.C., Thompson, R.B. (1975) The Development of a Detailed Finite Element Brain Model. *Proceedings 19th Stapp Car Crash Conference*, 641-674
- [26] Liu, K.Y. (1986) Finite Element Modeling of the Head and Spine. *Mechanical Engineering*, 60-64
- [27] Willinger, R., Taleb, L., Kopp, C.M. (1995) Modal and Temporal Analysis of Head Mathematical Models. *Journal of Neurotrauma* **12** (4), 743-754
- [28] Bandak, F.A., Van der Vorst, M.J., Stuhmiller, L.M., Mlakar, P.F., Chilton, W.E., Stuhmiller, J.H. (1995) An Imaging-Based Computational and Experimental Study of Skull Fracture: Finite Element Model Development. *Journal of Neurotrauma* **12**(4), 679-688
- [29] Mendis, K. (1992) Finite Element Modeling of the Brain to Establish Diffuse Axonal Injury Criteria. *PhD Dissertation*, Ohio State University
- [30] DiMasi, F.J., Eppinger R., Gabler, H.C., Marcus, J. (1991) Simulated Head Impacts with Upper Interior Structures Using Rigid and Anatomic Brain Models. *Auto & Traffic Safety*, 20-31
- [31] Ueno, K., Melvin, J.W., Li, L., Lighthall, J.W. (1995) Development of Tissue Level Brain Injury Criteria by Finite Element Analysis. *Journal of Neurotrauma* **12**(4), 695-706

- [32] Lighthall, J.W., Goshgarian, H.G., Pinderski, C.R. (1990) Characterization of Axonal Injury Produced by Controlled Cortical Impact. *Journal of Neurotrauma* **7**(2) 65-76
- [33] Ruan, J.S., Khalil, T., King, A.I. (1992) Finite Element Analysis of the Human Head to Impact. *Advances in Bioengineering ASME-BED* Vol. 22, 249-252
- [34] Zhou, C., Khalil, T.B., King, A.I. (1995) A New Model Comparing Impact Responses of the Homogenous and Inhomogenous Human Brain. *Proceedings 39th Stapp Car Crash Conference*, 121-138
- [35] Ward, C.C. (1978) Biodynamic Finite Element Models Used in Brain Injury Research. *Aviation, Space and Environmental Medicine* **49**(1), 136-142
- [36] Shugar, T.A. (1977) A Finite Element Head Injury Model - Vol. I: Theory, Development and Results. *U.S. Dept. Transportation Report No. DOT-HS-289-3-550-IA*
- [37] Hartmann, U., Kruggel, F. (1998) A Fast Algorithm for Generating Large Tetrahedral 3D Finite Element Meshes from Magnetic Resonance Tomograms. *Proceedings of the IEEE Workshop on Biomedical Image Analysis, St. Barbara*, IEEE Press, Los Alamitos, ISBN 0-8186-8460-7, 184-192
- [38] Bezdec, J.C., Hall, L.O., Clarke, L.P., Review of MR Image Segmentation Techniques Using Pattern Recognition. *Medical Physics* **20**(4), 1033-1048
- [39] Lohmann, G. (1997) Volumetric Image Analysis. *John Wiley & Sons*, Chichester, England
- [40] Lim, K.O., Pfefferbaum, A. (1989) Segmentation of MR Brain Images into Cerebrospinal Fluid Spaces, White and Gray Matter. *Journal of Computer Assisted Tomography* **13**(4), 588-593
- [41] Harris, G.J., Barta, P.E., Peng, L.W., Lee, S., Brettschneider, P.D., Shah, A., Henderer, J.D., Schlaepfer, T.E., Pearson, G.D. (1994) MR Volume Segmentation of Gray Matter and White Matter Using Manual Thresholding: Dependence on Image Brightness. *American Journal of Neuroradiology* **15**, 225-230

- [42] Mittelhäuser, G., Kruggel, F. (1995) Fast Segmentation of Brain Magnetic Resonance Tomograms. *Conference on Computer Vision, Virtual Reality and Robotics in Medicine (CVRMed95)*, Lecture Notes in Computer Science **905**, 237-241
- [43] Rajapakse, J.C., Giedd, J.N., Rapaport, J.L. (1997) Statistical Approach to Segmentation of Single-Channel Cerebral MR Images. *IEEE Transactions on Medical Imaging* **16** (2), 176-186
- [44] Samet, H., Tamminen, M. (1986) An Improved Approach to Connected-Component Labeling of Images. In *IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, Miami Beach, Fla., 312-318
- [45] Boender E. (1994) Reliable Delaunay-based Mesh Generation and Mesh Improvement. *Communications in Numerical Methods in Engineering* **10**, 773-783
- [46] Joe, B. (1991) Construction of Three-dimensional Delaunay Triangulations Using Local Transformations. *Computer Aided Geometric Design* **8**, 123-142.
- [47] Joe, B. (1992) Three-Dimensional Boundary-Constrained Triangulations. *Artificial Intelligence, Expert Systems, and Symbolic Computing*, (Edited by Houstis E.N., Rice J.R.) Elsevier Publishers Amsterdam, 215-222
- [48] Lo, S.H. (1991) Volume Discretization into Tetrahedra - I. Verification and Orientation of Boundary Surfaces. *Computer and Structures* **39**, 493-500
- [49] Lo, S.H. (1991) Volume Discretization into Tetrahedra - II. 3D Triangulation by Advancing Front Approach. *Computer and Structures* **39**, 501-511
- [50] Weatherill, N.P., Hassan, O. (1994) Efficient Three-Dimensional Delaunay Triangulation with Automatic Point Creation and Imposed Boundary Constraints. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* **37**, 1841-1861
- [51] Delaunay, B.N. (1934) Sur la sphère vide. *Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR: Science and Mathematics Class* **7**, 793-800
- [52] Edelsbrunner, H. (1987) Algorithms in Combinatorial Geometry. *Springer Berlin-Heidelberg*

- [53] Cignoni P., Montani C., Scopigno R. (1992) A Merge-First Divide and Conquer Algorithm for E^d Delaunay Triangulations. *Technical Report 92-16, Istituto CNUCE-C.N.R, Pisa, Italy*
- [54] Sachse, F., Werner, C., Müller, M., Meyer-Waarden, K. (1996) Segmentation and Tissue Classification of the Visible Man Dataset Using the Computertomographic Scans and Thin-Section Photos. *Proc. First Users Conference of the National Library of Medicine's Visible Human Project*, 67-80
- [55] Liu, A. (1994) Quality Local Refinement of Tetrahedral Meshes. *PhD thesis*, Department of Computing Science, University of Alberta.
- [56] Golias, N.A., Tsiboukis, T.D. (1994) An Approach to Refining Three-Dimensional Tetrahedral Meshes Based on Delaunay Transformations. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* **37**, 793-812
- [57] Schroeder, W.J., Shepard, M.S. (1990) A Combined Octree/Delaunay Method for Fully Automatic 3D Mesh Generation. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* **32**, 121-130
- [58] Shepard, M.S., Georges, M.K. (1991) Automatic Three-Dimensional Mesh Generation by the Finite Octree Technique. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* **32**, 709-749
- [59] Yuen, M.M.F., Tan, S.T., Hung, K.Y. (1991) A Hierarchical Approach to Automatic Finite Element Mesh Generation. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* **32**, 501-525
- [60] Perucchio, R., Saxena, M., Kela, A. (1989) Automatic Mesh Generation from Solid Models Based on Recursive Spatial Decompositions. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* **28**, 2469-2501
- [61] Mitchell, S.A., Vavasis, A. (1992) Quality Mesh Generation in Three Dimensions. *Proceedings of the Association of Computing Machinery (ACM) Computational Geometry Conference*, 212-221
- [62] Yerry, M.A., Shephard, M.S. (1984) Automatic Three-Dimensional Mesh Generation by the Modified-Octree Technique. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* **20**, 1965-1990

- [63] Schindler, F.R., Schneiders, R. (1996) Automatic Geometry-Adaptive Generation of Quadrilateral and Hexahedral Element Meshes for FEM. *5th Intern. Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations*, 43-51
- [64] Schmelzer I. (1995) Covariant Geometry Description. *WIAS-Preprint No. 152, Weierstraß Institut Berlin*,
<http://www.wias-berlin.de/pub/ibg/doc/ibg.html>
- [65] Bänsch, E. (1993) Adaptive Finite-Element Techniques for the Navier-Stokes Equations and other Transient Problems. in *Adaptive Finite and Boundary Element Methods*, Kap. 2, (Edited by Brebbia, C.A., Aliabadi, M.H.) Elsevier Applied Science, Amsterdam
- [66] Clarkson, K.L., Mehlhorn, K., Seidel, R. (1993) Four Results on Randomized Incremental Constructions. *Computational Geometry: Theory and Applications* **3**, 185-212
- [67] Gibbs, N.E., Poole, W.G., Stockmeyer, P.K. (1976) An Algorithm for Reducing the Bandwidth and Profile of a Sparse Matrix. *SIAM Journal of Numerical Analysis* **13**, 236-249
- [68] Cuthill, E., McKee, J. (1969) Reducing the Bandwidth of Sparse Symmetric Matrices. *Proceedings of the 24th National Conference of the Association for Computing Machinery (ACM)*, ACM Publ. P-69, New York, 157-172
- [69] Courant, R. (1943) Variational Methods for the Solution of Problems of Equilibrium and Vibrations. *Bulletin of the American Mathematical Society* **49**, 1-23
- [70] Synge, J.L. (1957) The Hypercircle in Mathematical Physics. *John Wiley and Sons Inc., New York*
- [71] Mikhlin, S.G. (1964) Variational Methods in Mathematical Physics. *Cambridge University Press, London*
- [72] Turner, M.J., Clough, R.W., Martin, H.C., Topp, L.J. (1956) Stiffness and Deflection Analysis of Complex Structures. *Journal of Aeronautical Science* **23**, 805-823

- [73] Argyris, J.H., Kelsey, S. (1955) Energy Theorems and Structural Analysis. *Aircraft Engineering* **26**, 121-133
- [74] Clough, R.W. (1960) The Finite Element in Plane Stress Analysis. *Proceedings 2nd ASCE Conference on Electronic Computation, Pittsburgh*, 67-75
- [75] Zienkiewicz, O.C. (1977) The Finite Element Method. 3rd ed., *McGraw-Hill Book Company, New York*
- [76] Lewis, P.E., Ward, J.P. (1991) The Finite Element Method: Principles and Applications. *Addison-Wesley, Reading*
- [77] Rechenberg, P. (1994) Was ist Informatik?, 2. Auflage, *Carl Hanser Verlag München Wien*
- [78] Koch, R.M. (1996) Simulating Facial Surgery Using Finite Element Models. *Computational Graphics Proceedings, SIGGRAPH 96*, 421-428
- [79] Cootes, T.F., Taylor, C. (1995) Combining Point Distribution Models with Shape Models Based on Finite Element Analysis. *Image and Vision Computing* **13** (5), 403-410
- [80] Huiskes, R., Boeklagen, P. (1989) Mathematical Shape Optimization of Hip Prosthesis Design. *Journal of Biomechanics* **22** (8-9), 793-804
- [81] Bathe, K.J. (1990) Finite-Elemente-Methoden. *Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg*
- [82] Segerlind, L.J. (1989) Applied Finite Element Analysis. *J. Wiley and Sons, New York*
- [83] Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T, Flannery, B.P. (1992) Numerical Recipes in C. Second Edition, *Cambridge University Press*, 71-89
- [84] Duff, I.S., Erisman, A.M., Reid, J.K. (1986) Direct Methods for Sparse Matrices. *Clarendon Press, Oxford*
- [85] Barrett, R. (1996) Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods. <http://www.netlib.org/templates/Templates.html>

- [86] Demmel, W.J., Gilbert, J.R., Li, X.S. (1997) SuperLU User's Guide.
<http://www.cs.berkeley.edu/xiaoye/superlu.html>
- [87] Hestenes, M.R., Stiefel, E. (1952) Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards* **49**, 409 - 436
- [88] Schwarz, H.R., Rutishauser, H., Stiefel, E. (1972) Numerik symmetrischer Matrizen. 2. Aufl. *Teubner Verlag, Stuttgart*
- [89] Schwarz, H.R. (1993) Methode der Finiten Elemente. *Teubner Verlag, Stuttgart*, Kapitel 5
- [90] Bauer, F.L. (1963) Optimally Scaled Matrices, *Numerische Mathematik* **5**, 73-87
- [91] Axelsson, O., Kolotilina, L. (eds.) (1990) Preconditioned Conjugate Gradient Methods. *Springer Verlag, Berlin-Heidelberg*
- [92] Evans, D.J. (1973) The Analysis and Application of Sparse Matrix Algorithms in the Finite Element Method. (Edited by Whiteman, J.R.) The Mathematics of Finite Elements and Applications. Vol I, *Academic Press, London-New York*
- [93] Flynn, M.J. (1972) Some Computer Organizations and their Effectiveness. *IEEE Transactions on Computing* **C-21**, 948-960
- [94] Shadid, J.N., Tuminaro R.S. (1992) Sparse Iterative Algorithm Software for Large-Scale MIMD Machines: An Initial Discussion and Implementation. *Concurrency: Practice and Experience* **4**(6), 481-497
- [95] Shadid, J.N., Hutchinson, S.A., Moffat, H.K. (1994) Parallel Performance of a Preconditioned CG Solver for Unstructured Finite Element Applications. *Proceedings of the Colorado Conference on Iterative Methods*, Breckenridge, Colorado
http://www.cs.sandia.gov/CRF/Aztec_pubs.html
- [96] Skalicky, T. (1996) LAsPack Reference Manual.
<http://www.tu-dresden.de/mwism/skalicky/laspack/laspack.html>
- [97] Dongarra, J., Lumsdaine, A., Pozo, R., Remington, K. (1994) A Sparse Matrix Library in C++ for High Performance Architectures. *Proceedings*

- of the *Second Object Oriented Numerics Conference*, 214-218,
<http://math.nist.gov/sparselib/>
- [98] Snir, M., Otto, S., Huss-Lederman, S., Walker, D., Dongarra, J. (1996) DMPI: The Complete Reference. *The MIT Press, Cambridge (USA)*,
<http://www.netlib.org/utk/papers/mpi-book/mpi-book.html>
- [99] Amdahl, G.M. (1967) Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large-Scale Computing Capabilities. *Proceedings of the American Federation of Information Processing Societies (AFIPS) Conference New York*
- [100] Lehoucq, R.B., Sorensen, D.C., Yang, C. (1996) Arpack's User Guide: Solution of Large Scale Eigenvalue Problems by Implicitly Restarted Arnoldi Methods. http://www.caam.rice.edu/~kristyn/parpack_home.html
- [101] Golub, G., Van Loan, C. (1989) Matrix Computations. 2nd edition *Johns Hopkins University Press, Baltimore*
- [102] Ericsson, T., Ruhe, A. (1980) The Spectral Transformation Lanczos Method for the Numerical Solution of Large Sparse Generalized Symmetric Eigenvalue Problems. *Mathematics of Computation* **35**, 1251-1268
- [103] Hartmann, U., Kruggel, F. (1998) Transient Analysis of the Biomechanics of the Human Head with a High-Resolution 3D Finite Element Model. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, **2**(1), 49-64
- [104] Hartmann, U., Kruggel, F. (1997) Ein virtueller Dummy zur Simulation des Schädel-Hirn-Traumas. *Spektrum der Wissenschaft* **9**, 96-98
- [105] Bycroft, G.N. (1973) Mathematical Model of a Head Subjected to an Angular Acceleration. *Journal of Biomechanics* **6**, 487-495
- [106] Margulies, S.S. (1987) Biomechanics of Traumatic Coma in the Primate. *PhD Dissertation*, University of Pennsylvania
- [107] Galford, E.G., McElhaney, J.H. (1970) A Viscoelastic Study of Scalp, Brain and Dura. *Journal of Biomechanics* **3**, 211-221
- [108] Ommaya, A.K. (1968) Mechanical Properties of Tissue of the Nervous System. *Journal of Biomechanics* **1**, 127-138

- [109] McElhaney, J., Melvin, J., Roberts, V., Portnoy, H. (1973) Dynamic Characteristics of the Tissue of the Head. Perspectives of Biomedical Engineering. *MacMillan Press, London*, 215-222
- [110] Kumaresan, S., Radhakrishnan, S. (1996) Importance of Partitioning Membranes of the Brain and the Influence of the Neck in Head Injury Modelling. *Medical & Biological Engineering & Computing* **34**, 27-32
- [111] Sellier, K., Unterharnscheidt, F. (1963) Mechanik und Pathomorphologie der Hirnschäden nach stumpfer Gewalteinwirkung auf den Schädel. *Beitr. Hefte zur Unfallheilkunde* **76**, 1-140
- [112] Engin, A.E., Liu, K.Y. (1970) Axisymmetric Response of a Fluid-Filled Spherical Shell in Free Vibrations. *Journal of Biomechanics* **3**, 11-22
- [113] Roberts, V., Hodgson, V., Thomas, L.M. (1967) Fluid Pressure Gradients Caused by Impact to the Human Skull. *Biomechanics Mono of the American Society of Mechanical Engineers (ASME) New York*, 223-225
- [114] Lubock, P., Goldsmith, W. (1980) Experimental Cavitation Study in a Model Headneck System. *Journal of Biomechanics* **13**, 1041-1052
- [115] Tzeng, H.C., Tseng, S.W., Lee, M.C. (1992) Modal Testing of the Human Head. *Proceedings Annual Symposium of the Biomedical Engineering Society, ROC*, 313-316
- [116] Ommaya, A.K., Faas, F., Yarnell, P. (1968) Wiplash Injury and Brain Damage. *Journal of the American Medical Association* **204** (4), 285
- [117] Unterharnscheidt, F., Higgins, L.S. (1969) Traumatic Lesions of Brain and Spinal Cord due to Nondeforming Angular Acceleration of the Head. *University of Texas Reports Biology and Medicine* **27**(1)
- [118] Kunze, K. (Hrsg.) (1992) Lehrbuch der Neurologie. *G. Thieme Verlag, Stuttgart-New York*
- [119] Nagashima, T., Shirakuni, T., Rapoport, S.I. (1990) A Two-dimensional Analysis of Vasogenic Brain Edema. *Neurologica Medico-Chirurgica (Tokyo)* **30**, 1-9
- [120] Nagashima, T., Tada, S., Hamano, M., Shakakura, M., Masaoka, K., Tamaki, N., Matsumoto, S. (1990) The Finite Element Analysis of Brain

- Edema Associated with Intracranial Meningiomas. *Acta Neurochirurgica Suppl. (Wien)* **51**, 165-167
- [121] Subramaniam, R.P., Neff, S.R., Rahulkumar, P. (1994) A Numerical Study of the Biomechanics of Structural Neurologic Diseases. *High Performance Computing - Grand Challenges in Computer Simulation Society for Computer Simulations, San Diego*, 552-560
- [122] Takizawa, H., Sugiura, K., Baba, M., Miller, J.D. (1994) Analysis of Intracerebral Hematoma Shapes by Numerical Computer Simulation Using the Finite Element Method. *Neurologica Medico-Chirurgica* **34**, 65-69
- [123] Braess, D. (1996) Finite Elemente. *Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg*
- [124] Ljung, C. (1975) A Model for Brain Deformation Due to Rotation of the Skull. *Journal of Biomechanics* **8**, 263-274
- [125] Hartmann, U., Kruggel, F. (1998) Erste klinische Untersuchungen mit einem mechanischen Finite-Elemente-Modell des menschlichen Kopfes. *Ta-gungsband zum Aachener Workshop: Bildverarbeitung für die Medizin, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg*, 59-63
- [126] Hartmann, U., Kruggel, F. (1999) Modeling Brain Biomechanics. in *Navigated Brain Surgery*, Spetzger, U., Stiehl, H.S., Gilsbach, J.M., (Eds.), ISBN 3-89653-553-6, 183-192
- [127] Hoffmeister, B.K., Handley, S.M., Wickline, S.A., Miller, J.G. (1996) Ul-trasonic Determination of the Anisotropy of Young's modulus of Fixed Tendon and Fixed Myocardium. *Journal of the Acoustical Society of Ame-rica* **100** (6), 3933-3940
- [128] Miller, J.G. (1997) Private Communication
- [129] Peters, G.W.M., Meulman, J.H., Sauren, A.A.H.J. (1997) The Applica-bility of the Time/Temperature Superposition Principle to Brain Tissue. *Biorheology* **34** (2), 127-137

Danksagung

Mein ganz besonderer Dank gilt Herrn Dr. Frithjof Kruggel für die sehr angenehme und anregende Zusammenarbeit während der Zeit meiner Promotion. Die hervorragende Betreuung und die hilfreichen Diskussionen haben das Gelingen dieser Doktorarbeit ermöglicht.

Herrn Prof. D.Y. von Cramon danke ich sehr herzlich für die Erstellung des Gutachtens und Aufnahme in sein Institut, das mir ideale Arbeitsmöglichkeiten geboten hat. Die vielfältige Unterstützung und die intensive wissenschaftliche Begleitung taten ein Übriges, um die in dieser Arbeit behandelte Problemstellung erfolgreich bearbeiten zu können.

Bei Herrn Prof. H.S. Stiehl möchte ich mich für die Übernahme des externen Gutachtens bedanken. Außerdem habe ich die zahlreichen Gespräche und die wissenschaftliche Förderung der in dieser Arbeit entwickelten Ideen als sehr hilfreich und ermutigend empfunden.

Herrn Prof. D. Saupe danke ich für die Übernahme des Gutachtens.

Meinem Kollegen Dr. Christian Uhl gilt herzlicher Dank für die fortwährend freundliche und oft auch erheiternde Unterstützung beim Anfertigen der Arbeit. Auch an die sogenannten “Nachbesprechungen“ werde ich mich gerne erinnern. In diesem Zusammenhang bin ich auch den Kollegen Dr. Peter Bublak und Dr. Stefan Zysset zu Dank verpflichtet, die durch ihre Freundlichkeit und stete Hilfsbereitschaft eine kollegiale Arbeitsatmosphäre geschaffen haben.

Bei Frau Dr. Gabi Lohmann möchte ich mich für die vielen wissenschaftlichen

Anregungen und die interessanten Gespräche bedanken.

Meiner Frau Annette danke ich sehr für Ihre Geduld und Liebenswürdigkeit auch während der "heißen" Promotionsphasen. Natürlich hat sie auch das Manuskript gelesen und sprachlich verbessert.

Meinen Eltern bin ich zu großer Dankbarkeit verpflichtet, da sie mich während des Studiums und der Promotion immer unterstützt und ermuntert haben und durch ihre Großzügigkeit den schnellen und erfolgreichen Abschluß von Studium und Promotion ermöglicht haben.

Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Dissertation selbständig und ohne unerlaubte fremde Hilfe angefertigt zu haben. Ich habe keine anderen als die im Schriftenverzeichnis angeführten Quellen benutzt und sämtliche Textstellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten oder unveröffentlichten Schriften entnommen wurden, und alle Angaben, die auf mündlichen Auskünften beruhen, als solche kenntlich gemacht. Ebenfalls sind alle von anderen Personen bereitgestellten Materialien oder erbrachten Dienstleistungen als solche gekennzeichnet.

Leipzig, den 17. Juni 1999

Ulrich Hartmann

Lebenslauf

Ulrich Hartmann

geboren am 11. August 1969 in Oberhausen

Vater: Herbert Hartmann
Mutter: Kläre Hartmann, geb. Pusch
Bruder: Dr. Axel Hartmann
Familienstand: verheiratet

1975-1979	Grundschule in Oberhausen
1979-1988	Heinrich-Heine-Gymnasium in Oberhausen
Aug. 1988 - März 1990	Zivildienst
April 1990 - Sept. 1992	Grundstudium der Physik an der Universität Heidelberg
Mai 1992	Vordiplomsprüfung
Okt. 1992 - Nov. 1995	Hauptstudium der Physik an der Universität Göttingen
April 1994 - Okt. 1995	Externe Diplomarbeit in der Arbeitsgruppe medizinische Bildverarbeitung des Zentrums Radiologie im Klinikum Göttingen unter Anleitung von Herrn Prof. Dr. Dr. H. Luig. Thema der Arbeit: Ein neuer Erwartungswertschätzer für die szintigraphische Bildgebung.
November 1995	Diplomprüfung
Feb. 1996 - Mai 1998	Anfertigung der vorliegenden Doktorarbeit in der Arbeitsgruppe Bild- und Signalverarbeitung (Leiter: Dr. Kruggel) im Arbeitsbereich Neurologie (Direktor: Prof. Dr. von Cramon) des Max-Planck-Instituts für neuropsychologische Forschung in Leipzig.
ab Juni 1998	Wissenschaftlicher Mitarbeiter der NEC Research Laboratories in St. Augustin (Bonn)

Thesen

zur Dissertation

Ein mechanisches Finite-Elemente-Modell des menschlichen Kopfes

der Fakultät für Informatik
der Universität Leipzig

eingereicht von
Dipl. Phys. Ulrich Hartmann

angefertigt im Arbeitsbereich Neurologie (AG Bild- und Signalverarbeitung)
des Max-Planck-Instituts für neuropsychologische Forschung in Leipzig.

Mai 1998

1. In dieser Arbeit wird ein dreidimensionales Modell des menschlichen Kopfes beschrieben, das es erlaubt, mit der Methode der Finiten Elemente (FE) mechanische Einflüsse auf den Kopf zu modellieren. Eine exakte Geometriebeschreibung eines individuellen Modells wird aus einem Kernspintomogramm des Kopfes gewonnen. Ausgehend von diesen medizinischen Bilddaten wird die diskrete Darstellung des Kopfes als Verbund finiter Elemente mit einem für diesen Zweck entwickelten Gittergenerator gewonnen. Dieser schnelle und stabile Algorithmus ermöglicht die Erstellung von räumlich hochaufgelösten Finite-Elemente-Repräsentationen des Schädels und interner neuroanatomischer Strukturen. Es besteht die Auswahl zwischen anisotropen und isotropen Würfel- und Tetraedernetzen (vgl. Kapitel 2.3)

2. Auf der Basis dieser FE-Netze werden die dem physikalischen Geschehen zugrundeliegenden Differentialgleichungen mittels der Finite-Elemente-Methode numerisch gelöst. Die zur Durchführung der Simulationen nötigen numerischen Verfahren wurden optimiert und auf einer parallelen Rechnerarchitektur implementiert (vgl. Kapitel 4).
3. Jeder der implementierten Analysearten ist eine klinisch-relevante Anwendung zugeordnet. Mit der nichtlinearen statischen Analyse werden die mechanischen Konsequenzen von Tumorwachstum untersucht, die dynamische Analyse dient dem Studium der Auswirkungen von fokalen Gewalteinwirkungen auf den Kopf und die modale Analyse gibt Aufschluß über das Schwingungsverhalten des Kopfes. Die Validierung des Modells wird durch den Vergleich von Simulationsergebnissen mit experimentell ermittelten Daten erzielt (vgl. Kapitel 5).