

**Computerbasierte Modellierung und Analyse der Gestalt und Verteilung von Partikeln  
zur Optimierung des Reinheitsgrades von Stahlwerkstoffen – Konzeption und  
Implementierung eines Rahmenwerks**

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften  
Abteilung Informatik und Angewandte Kognitionswissenschaft  
der Universität Duisburg-Essen

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften

genehmigte Dissertation

von

Christoph Buck  
aus  
Duisburg

1. Gutachter: Prof. Dr. Wolfram Luther
  2. Gutachter: Prof. Dr. Josef Pauli
- Tag der mündlichen Prüfung: 04.05.2016



COMPUTERBASIERTE MODELLIERUNG UND ANALYSE DER  
GESTALT UND VERTEILUNG VON PARTIKELN ZUR  
OPTIMIERUNG DES REINHEITSGRADES VON  
STAHLWERKSTOFFEN

Konzeption und Implementierung eines Rahmenwerks

CHRISTOPH BUCK

Christoph Buck: *Computerbasierte Modellierung und Analyse der Gestalt und Verteilung von Partikeln zur Optimierung des Reinheitsgrades von Stahlwerkstoffen*, Konzeption und Implementierung eines Rahmengerüts

## ABSTRACT

---

Statistical analysis of particle systems is a crucial part of many applications in materials science. Within this context, the analysis of the individual particle morphology as well as the analysis of the spatial and size distribution of whole particle systems are relevant. In the past years, research focused increasingly on these topics, presenting various processes for analysing particle systems. However, there is no holistic approach integrating these isolated analytical techniques. By providing a complete theoretical framework for analysing particle systems and implementing it into a use case, this dissertation faces the challenges arising with statistical particle analysis on three dimensional systems. The use case was defined within the project Silenos<sup>1</sup>, which is funded by the Ziel2 program of the European Union. During the course of Silenos, the partners conducted research on a method for fast quantification and characterisation of defects in steel samples, e.g. non-metallic inclusions or pores. The detection of these impurities is carried out by the use of image capturing and processing methods on milled steel samples. Parallel to the milling process, the defects are incrementally segmented in cross sections, reconstructed assuming a three dimensional spatial extent, classified, and statistically evaluated. This process, called online-system, allows to control the milling based on statistic results after each captured image. In order to implement these methods, the framework must allow for incremental operation. The segmented images provide a basis for the development of these methods used within the framework. Therefore, this dissertation commences with a formal definition of the particle concept. This step allows to derive algorithms for an efficient reconstruction of a three dimensional particle morphology during the image grabbing and processing. Based on the reconstruction, the particle morphology can be statistically quantified using suitable descriptors, and the distribution can be investigated. This dissertation aims at defining applicable models that adequately describe the size and spatial distribution, focusing on an extensive analysis of these aspects. In accordance to this aim, methods of exploratory data analysis are introduced that support the modelling process. Subsequently, estimation procedures for model parametrisation are discussed based on observed data. To ensure the consistency between model parameters and observed data, model validation techniques are defined. In summary, these preliminarily introduced generic methods establish a framework, which is used to implement the three main goals of the online-system, namely the reconstruction, classification and statistic evaluation of non-metallic inclusions and other defects. Furthermore, the framework is used to establish a model for the distribution of non-metallic inclusions in the inclusion band. Using this model one can generate artificial steel samples, which are used to validate the runtime requirements of framework algorithms.

---

<sup>1</sup> <http://www.scg.inf.uni-due.de/silenos.php>

## ZUSAMMENFASSUNG

---

Die statistische Analyse von Partikelsystemen spielt in vielen Anwendungskontexten der Materialwissenschaften eine wichtige Rolle. Dabei ist sowohl die statistische Analyse der Gestalt der individuellen Partikel als auch die Analyse der Verteilungseigenschaften des gesamten Partikelkollektivs von Bedeutung. Eine Vielzahl wissenschaftlicher Veröffentlichungen der letzten Jahre fokussierte diese Themengebiete. Darin wurden diverse Verfahren zur Analyse von Partikelsystemen vorgestellt. Eine Integration dieser Techniken zu einem einheitlichen Analysesystem für dreidimensionale Partikelsysteme steht aber nach wie vor aus. Diese Lücke wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit durch das Bereitstellen eines theoretischen Rahmenwerks zur vollständigen statistischen Analyse von dreidimensionalen Partikelsystemen nebst prototypischer Implementierung geschlossen. Die Entwicklung dieses Rahmenwerks wurde dabei maßgeblich durch das von der Europäischen Union geförderte Ziel2-Projekt Silenos<sup>2</sup> beeinflusst. Im Zuge dieses Projekts wurde an einer Methode zur schnellen Quantifizierung und Charakterisierung von Defekten, wie nichtmetallischen Einschlüssen und Poren, in Stahlproben geforscht. Die Detektion dieser Verunreinigungen erfolgt mittels Methoden der Bildverarbeitung in Bildern schichtweise abgefräster Werkstoffproben. Parallel zum Fräs- und Bildaufnahmeprozess werden die Bilder inkrementell segmentiert, die detektierten Defekte unter der Annahme einer dreidimensionalen Ausdehnung rekonstruiert, klassifiziert und schließlich statistisch ausgewertet. Dieser als Online-System bezeichnete Betriebsmodus erlaubt das Steuern des Fräsprozesses auf Basis der Ergebnisse der statistischen Auswertung nach jeder verarbeiteten Schicht und muss demnach von Rahmenwerk unterstützt werden. Die vorsegmentierten Schichtbilder des durch die Verunreinigungen geformten Partikelsystems bilden dabei die Grundlage für die im Rahmenwerk entwickelten Methoden. Ausgangspunkt ist die formale Definition des Partikelbegriffs, auf Basis derer Algorithmen zur effizienten Rekonstruktion der dreidimensionalen Morphologie der Partikel inkrementell aus den Schichtbildern abgeleitet werden. Anhand der Rekonstruktion lässt sich dann die Gestalt der Partikel statistisch, durch geeignete Deskriptoren, quantifizieren und die Verteilung dieser untersuchen. Im Zentrum der Arbeit steht die Analyse der Größenverteilung und der räumlichen Verteilung mit dem Ziel, geeignete Modelle zu definieren, welche die Verteilungen adäquat beschreiben. Dazu werden zunächst explorative Datenanalysewerkzeuge zur Unterstützung des Modellbildungsprozesses eingeführt. Anschließend werden Schätzverfahren zur Parametrisierung der Modelle aus den beobachteten Daten besprochen und in einem letzten Schritt Modellvalidierungstechniken definiert, mit welchen die Übereinstimmung von Modell und beobachteten Da-

<sup>2</sup> <http://www.scg.inf.uni-due.de/silenos.php>

ten überprüft werden kann. Zusammengenommen bilden diese, zunächst generisch eingeführten Methoden das Rahmenwerk. Dieses Rahmenwerk wird im weitem Verlauf der Arbeit verwendet, um die im Online-System definierten Operationen, nämlich Rekonstruktion, Klassifikation und statistische Auswertung umzusetzen. Des Weiteren werden die Methoden des Rahmenwerks eingesetzt, um ein Modell für die Verteilung von nichtmetallischen Einschlüssen in Stahlproben zu konstruieren. Dieses Modell liefert die Grundlage für eine Simulationssoftware, mit der künstliche Stahlproben generiert werden. Anhand dieser lassen sich schließlich die Laufzeitanforderungen der im Rahmenwerk definierten Methoden für das Online-System validieren.





## PUBLIKATIONEN

---

- [1] C. Buck, F. Bürger, J. Herwig und M. Thureau. „Rapid Inclusion and Defect Detection System for Large Steel Volumes“. In: *ISIJ International* 53.11 (2013), S. 1927–1935.
- [2] C. Buck, T. Pilz und W. Luther. „Personalized Fuzzy Search in Historical Texts with Non Standard Spelling“. In: *Linguistic Studies of Human Language*. 2013, S. 325–337.
- [3] F. Bürger, J. Herwig, C. Buck, W. Luther und J. Pauli. „An Auto-adaptive Measurement System for Statistical Modeling of Non-metallic Inclusions through Image-based Analysis of Milled Steel Surfaces“. In: *11th International Symposium on Measurement Technology and Intelligent Instruments*. 2013.
- [4] J. Herwig, C. Buck, M. Thureau, J. Pauli und W. Luther. „Real-time characterization of non-metallic inclusions by optical scanning and milling of steel samples“. In: *Optical Micro- and Nanometrology IV*. 2012.
- [5] M. Thureau, C. Buck und W. Luther. „IPFViewer – A Visual Analysis System for Hierarchical Ensemble Data“. In: *Proceedings of the 5th International Conference on Information Visualization Theory and Applications*. 2014, S. 259–266.
- [6] M. Thureau, C. Buck und W. Luther. „IPFViewer: Incremental, Approximate Analysis of Steel Samples“. In: *Proceedings of the 13th SIGRAD*. 2014.



## DANKSAGUNG

---

Die Erstellung dieser Arbeit erfolgte in wesentlichen Teilen im Rahmen des durch die Europäische Union geförderten Ziel-Projekts Silenos. An erster Stelle danke ich Herrn Prof. Dr. Wolfram Luther, der als Lehrstuhlinhaber die Durchführung des Forschungsvorhabens ermöglichte und unterstützte. Herzlichen Dank auch an Herrn Prof. Dr. Josef Pauli für die Übernahme des Korreferats. Des Weiteren möchte ich der Firma Hüttenwerke Krupp Mannesmann GmbH und namentlich Herrn Dr. Thomas Schlüter für die gute Zusammenarbeit und das Bereitstellen der in der Dissertation verwendeten Daten danken. Mein besonderer Dank geht an meinen Onkel Ludger Buck und an meine Freundin Anna Kötteritzsch für die Übernahme des Lektorats. Zudem danke ich den Mitarbeitern des Lehrstuhls für Computergraphik und Wissenschaftliches Rechnen für die stets kollegiale Atmosphäre und das freundliche Arbeitsumfeld. Und nicht zuletzt ein großes Dankeschön an meine Familie, die mich in jeglicher Hinsicht unterstützt.



# INHALTSVERZEICHNIS

---

1	EINLEITUNG	1
1.1	Ziele . . . . .	2
1.2	Silenos . . . . .	4
1.3	Anforderungen an das Rahmenwerk . . . . .	5
1.4	Stand der Technik . . . . .	7
1.5	Umsetzung und Struktur der Arbeit . . . . .	13
2	EINZELPARTIKELANALYSE	17
2.1	Partikelrekonstruktion . . . . .	18
2.1.1	Partikeldefinition . . . . .	18
2.1.2	Connected Component Labeling . . . . .	20
2.1.3	Laufzeit . . . . .	28
2.2	Gestaltanalyse . . . . .	33
2.2.1	Boundingbox . . . . .	35
2.2.2	Konfigurationshistogramme . . . . .	36
2.2.3	Minkowskifunktionale . . . . .	38
2.2.4	Momente . . . . .	46
2.2.5	Konvexität . . . . .	48
2.2.6	Fraktale Dimension . . . . .	51
2.3	Zusammenfassung . . . . .	54
3	STATISTISCHE METHODEN	57
3.1	Grundbegriffe . . . . .	57
3.2	Größenverteilung . . . . .	60
3.2.1	Schätzung der Verteilungs- und Dichtefunktion	61
3.2.2	Schätzen der Verteilungsparameter . . . . .	63
3.2.3	Überprüfung des Modells . . . . .	66
3.3	Räumliche Verteilung . . . . .	67
3.3.1	Punktprozess . . . . .	68
3.3.2	Homogener Poisson Punktprozess . . . . .	69
3.3.3	Schätzen der Intensitätsfunktion . . . . .	71
3.3.4	Modellparametrisierung und Validierung . . . . .	75
3.4	Zusammenfassung . . . . .	81
4	ANWENDUNGSFALL	83
4.1	Motivation . . . . .	83
4.1.1	Nichtmetallische Einschlüsse . . . . .	84
4.1.2	Charakterisierungsmerkmale . . . . .	85
4.1.3	Statistische Eigenschaften . . . . .	87
4.1.4	Detektionsverfahren . . . . .	88
4.2	Makroeingchluss-Detektion . . . . .	91
4.2.1	Fräsprozess und Bildaufnahme . . . . .	92
4.2.2	Bildverarbeitung . . . . .	93
4.2.3	Morphologische und statistische Analyse . . . . .	93

4.3	Zusammenfassung . . . . .	94
5	KLASSIFIKATION VON DEFEKTEN IN STAHL	95
5.1	Einführungsbeispiel . . . . .	95
5.2	Maschinelles Lernen . . . . .	98
5.2.1	Bewertung eines Klassifizierers . . . . .	99
5.2.2	Lernalgorithmus . . . . .	101
5.3	Auswertung . . . . .	104
5.3.1	Risse, Artefakte und globulare Defekte . . . . .	105
5.3.2	Poren und nichtmetallische Einschlüsse . . . . .	109
5.4	Zusammenfassung . . . . .	112
6	STATISTISCHE UNTERSUCHUNG VON DEFEKTEN IN STAHL	113
6.1	Größenverteilung . . . . .	113
6.1.1	Modellauswahl . . . . .	114
6.1.2	Explorative Datenanalyse . . . . .	115
6.1.3	Modellparametrisierung und Validierung . . . . .	121
6.1.4	Hierarchisches Modell . . . . .	125
6.2	Räumliche Verteilung . . . . .	127
6.2.1	Modellauswahl . . . . .	128
6.2.2	Modellparametrisierung und Validierung . . . . .	134
6.3	Simulation von Stahlproben . . . . .	143
6.4	Evaluation verschiedener Frässhzenarien . . . . .	146
6.4.1	Optimierung der Spanabnahme . . . . .	146
6.4.2	Abbruchkriterium . . . . .	147
6.5	Zusammenfassung . . . . .	150
7	IMPLEMENTATION	153
7.1	Particle Detection System . . . . .	153
7.1.1	Pipeline Stufen . . . . .	155
7.1.2	Vorverarbeitung . . . . .	157
7.1.3	Rekonstruktion . . . . .	158
7.1.4	Klassifikation . . . . .	158
7.1.5	Statistische Auswertung . . . . .	160
7.1.6	Archivierung . . . . .	161
7.1.7	Zusammenfassung . . . . .	163
7.2	Particle Analysis System . . . . .	164
7.2.1	Aufbau . . . . .	165
7.2.2	Sichtprüfung der Partikel . . . . .	168
7.2.3	Statistische Analyse . . . . .	173
7.3	Zusammenfassung . . . . .	176
8	ZUSAMMENFASSUNG	177
A	ANHANG	181
A.1	Konfigurationstabellen . . . . .	181
	LITERATUR	185

## ABBILDUNGSVERZEICHNIS

---

Abbildung 1	Laufzeit des OZP. . . . .	31
Abbildung 2	Laufzeit und Speedup Messungen. . . . .	32
Abbildung 3	Binärcodierung von $2 \times 2 \times 2$ Voxelblöcken. . .	37
Abbildung 4	Diskrete konvexe Hülle eines Risses. . . . .	51
Abbildung 5	Auswirkung der Kantenkorrektur bei Kerndich- teschätzung der Intensität. . . . .	74
Abbildung 6	Kumulierter Anteil der Eigenwerte an der Ge- samtstreuung. . . . .	96
Abbildung 7	Histogramm der Ladungen. . . . .	97
Abbildung 8	Streudiagramm der ersten beiden Hauptkompo- nenten. . . . .	98
Abbildung 9	Auswirkung von der Anzahl der Deskriptoren auf die Korrekturklassifikationsrate. . . . .	106
Abbildung 10	Beispiele für Objekte der einzelnen Klassen. .	108
Abbildung 11	Auswirkung von der Anzahl der Deskriptoren auf die Korrekturklassifikationsrate. . . . .	109
Abbildung 12	Erstes Beispiel der explorativen Analyse. . . .	117
Abbildung 13	Zweites Beispiel der explorativen Analyse. . .	118
Abbildung 14	Explorative Analyse nach Bereinigung. . . . .	120
Abbildung 15	Drittes Beispiel der explorativen Datenanalyse.	121
Abbildung 16	Aufbau des Modells. . . . .	122
Abbildung 17	A-posteriori Verteilung der Parameter. . . . .	123
Abbildung 18	Posteriori-prädiktiver Test. . . . .	124
Abbildung 19	Aufbau des hierarchischen Modells. . . . .	126
Abbildung 20	Posteriori-Verteilung der Gruppenparameter. .	127
Abbildung 21	Schätzung der Intensitätsfunktion. . . . .	129
Abbildung 22	Schätzung der Intensitätsfunktion im Einschluss- band. . . . .	130
Abbildung 23	Schätzung der Intensitätsfunktion in $y$ -Richtung.	132
Abbildung 24	Schätzung der Intensitätsfunktion nach Homo- genisierung. . . . .	134
Abbildung 25	Zerlegung des Einschlussbandes in Teilfenster.	134
Abbildung 26	Vergleich der A-posteriori Verteilung der In- tensität zwischen Teilfenstern. . . . .	135
Abbildung 27	Test der CSR-Eigenschaft für nichtmetallische Einschlüsse. . . . .	136
Abbildung 28	Schätzung von $L(r)$ . . . . .	137
Abbildung 29	Schätzung von $g(r)$ . . . . .	138
Abbildung 30	Schätzung der Intensitätsfunktion entlang ver- schiedener Raumrichtungen. . . . .	141

Abbildung 31	Schätzung von $D(r)$ . . . . .	142
Abbildung 32	Schätzung der Intensitätsfunktion in simulierter Probe. . . . .	145
Abbildung 33	Optimierung des Fräsprozesses. . . . .	147
Abbildung 34	Abbruchkriterium auf Basis des HDI. . . . .	149
Abbildung 35	Aufbau des PDS. . . . .	155
Abbildung 36	Aufbau der Pipeline Stufen. . . . .	156
Abbildung 37	Laufzeit der Deskriptorberechnung und der Klassifikation. . . . .	159
Abbildung 38	Referenzmodell der Informationsvisualisierung. . . . .	165
Abbildung 39	Screenshot des Hauptfensters vom PAS. . . . .	169
Abbildung 40	Raycasting-Ansicht eines Einschlusses. . . . .	171
Abbildung 41	Raycasting-Ansicht eines Einschlusses mit eingeblendeten Segmentierungsergebnisses. . . . .	172
Abbildung 42	Auswahlwerkzeug zur Generierung von räumlichen Filteranfragen. . . . .	174
Abbildung 43	Report-Modul für statistische Auswertungen. . . . .	175

## TABELLENVERZEICHNIS

---

Tabelle 1	Laufzeiten der CCL-Algorithmen. . . . .	30
Tabelle 2	Minkowskifunktionale bis zur dritten Dimension. . . . .	39
Tabelle 3	Beispiel einer Kontingenztabelle. . . . .	99
Tabelle 4	Zusammensetzung der Datensätze. . . . .	104
Tabelle 5	Zur Klassifikation verwendete Deskriptoren. . . . .	105
Tabelle 6	Die ersten 20 Deskriptorsätze beim Klassifizieren von Defekten. . . . .	107
Tabelle 7	Gemittelte Sensitivität und Genauigkeit beim Klassifizieren von Defekten. . . . .	107
Tabelle 8	Relative Häufigkeit der ersten 1000 Deskriptoren beim Klassifizieren von Defekten. . . . .	109
Tabelle 9	Die ersten 20 Deskriptorsätze beim Klassifizieren von Poren. . . . .	110
Tabelle 10	Gemittelte Sensitivität und Genauigkeit beim Klassifizieren von Poren. . . . .	110
Tabelle 11	Relative Häufigkeit der ersten 1000 Deskriptoren beim Klassifizieren von Poren. . . . .	111
Tabelle 12	A-posteriori Verteilung der Intensität. . . . .	135
Tabelle 13	Die 22 Kongruenzklassen zur Reduktion der Voxelkonfigurationshistogramme. . . . .	182



Tabelle 14	Die 22 Kongruenzklassen zur Reduktion der Voxelkonfigurationshistogramme dargestellt als Piktogramm. . . . .	183
Tabelle 15	Tabelle mit den Minkowskifunktionalen für die $2 \times 2 \times 2$ Voxelblöcke. . . . .	184

## ALGORITHMENVERZEICHNIS

---

1	Multiphasen Algorithmus. . . . .	22
2	Zwei-Phasen Algorithmus. . . . .	24
3	Online Zwei-Phasen Algorithmus. . . . .	26
4	Paralleler Zwei-Phasen Algorithmus. . . . .	28
5	Generiert Tabelle mit allen 22 Kongruenzklassen und ihren Elementen. . . . .	37
6	Berechnung der lokalen Minkowskifunktionale. . . . .	43
7	Simulator. . . . .	144

## ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS

---

<b>CCL</b>	Connected Component Labeling
<b>CSR</b>	Complete Spatial Randomness
<b>CT</b>	Computertomographie
<b>EBNF</b>	Extended Backus-Naur Form
<b>HDI</b>	Highest Density Interval
<b>LIPS</b>	Laserinduzierte Plasmaspektroskopie
<b>MCMC</b>	Markov-Ketten-Monte-Carlo
<b>MCT</b>	Mikro-Computertomographie
<b>MIDAS</b>	Mannesmann Inclusion Detection by Analysing Surfboards
<b>MP</b>	Multi-Phasen Algorithmus
<b>MRT</b>	Magnetresonanztomographie

<b>OZP</b>	Online Zwei-Phasen Algorithmus
<b>PAS</b>	Particle Analysis System
<b>PCF</b>	Paar-Korrelationsfunktion
<b>PDS</b>	Particle Detection System
<b>PHOT</b>	Phase-Only Transformation
<b>PP-Plot</b>	Probability-Probability-Plot
<b>PPP</b>	homogener Poisson Punktprozess
<b>PZP</b>	Paralleler Zwei-Phasen Algorithmus
<b>QQ-Plot</b>	Quantile-Quantile-Plot
<b>REM</b>	Rasterelektronenmikroskop
<b>STL</b>	Standard Template Library
<b>SVM</b>	Support Vector Machine
<b>UML</b>	Unified Modeling Language
<b>ZP</b>	Zwei-Phasen Algorithmus

## SYMBOLVERZEICHNIS

---

$\mathbb{R}$	Menge der reellen Zahlen
$\mathbb{R}^3$	dreidimensionaler euklidischer Raum
$\mathbb{Z}$	Menge der natürlichen Zahlen
$\mathbb{N}$	Menge der positiven natürlichen Zahlen
$\mathbb{L}^3$	dreidimensionales Gittersystem
$\mathbb{K}$	Klasse der konvexen, beschränkten und abgeschlossenen Mengen
$\mathfrak{K}$	Konvexer Ring
$\delta_1$	Gitterabstand in $x$ -Richtung
$\delta_2$	Gitterabstand in $y$ -Richtung
$\delta_3$	Gitterabstand in $z$ -Richtung
$\delta$	Gitterabstand eines kubisch primitiven Gittersystem
$C$	Elementarzelle des Gitters
$\mathcal{X}$	Partikelsystem
$\Xi$	disperse Phase des Partikelsystems
$\Xi^c$	kontinuierliche Phase des Partikelsystems
$\tilde{\Xi}$	Gaußsche Diskretisierung der dispersen Phase $\Xi$

$\mathfrak{X}$	Partikel, disjunkte zusammenhängende Teilmenge von $\tilde{\Xi}$
$b_{\mathfrak{X}}(i, j, k)$	Funktion die einem Voxel $(i, j, k) \in \mathbb{L}^3$ den Wert 1 zuordnet, wenn $(i, j, k) \in \mathfrak{X}$ ist
$SE^{(6)}$	Strukturelement zur Beschreibung der 6er Nachbarschaft
$SE^{(18)}$	Strukturelement zur Beschreibung der 18er Nachbarschaft
$SE^{(26)}$	Strukturelement zur Beschreibung der 26er Nachbarschaft
$SE^{(\hat{26})}$	Strukturelement zur Beschreibung der 26er Nachbarschaft bei lexikographischer Sortierung
$\mathcal{N}_{SE^{(s)}}(x)$	Menge der Nachbarn von $x \in \tilde{\Xi}$ bezüglich $SE^{(s)}$ mit $s \in \{6, 18, 26\}$
$T_{Rec}$	Laufzeit der Bildaufnahme
$T_{Seg}$	Laufzeit der Bildsegmentierung
$T_{Pre}$	Laufzeit der Vorverarbeitung
$T_{Ccl}$	Laufzeit der dreidimensionalen Rekonstruktion
$T_{Clas}$	Laufzeit der Klassifikation
$T_{Sta}$	Laufzeit der statistischen Auswertung
$T_{Arch}$	Laufzeit der Archivierung
$T_{Ges}$	Laufzeit des gesamten Auswerteprozess
$BB_{\mathfrak{X}_{min}}$	Minimaler Eckpunkt der Boundingbox
$BB_{\mathfrak{X}_{max}}$	Maximaler Eckpunkt der Boundingbox
$BB_{\mathfrak{X}}$	Voxel der Boundingbox
$h_l^{(256)}$	Konfigurationshistogramm aller 256 Voxelblöcke eines Partikels
$h_l^{(22)}$	Reduziertes Konfigurationshistogramm im Falle eines kubisch-primitiven Gittersystems
$\mathcal{M}$	Menge der isometrischen Abbildungen
$V$	Volumen eines Partikels
$S$	Oberfläche eines Partikels
$B$	Mittlere Breite eines Partikels
$\chi$	Euler-Charakteristik eines Partikels
$M$	Mittlere Krümmung eines Partikels
$K$	Totale Krümmung eines Partikels
$V_V$	Verhältnis aus Volumen $V$ zum Volumen der Boundingbox $BB_{\mathfrak{X}}$ eines Partikels
$S_V$	Verhältnis aus Oberfläche $S$ zum Volumen der Boundingbox $BB_{\mathfrak{X}}$ eines Partikels
$B_V$	Verhältnis aus der mittleren Breite $B$ zum Volumen der Boundingbox $BB_{\mathfrak{X}}$ eines Partikels
$M_V$	Verhältnis aus der mittlere Krümmung $M$ zum Volumen der Boundingbox $BB_{\mathfrak{X}}$ eines Partikels
$K_V$	Verhältnis aus der totalen Krümmung $K$ zum Volumen der Boundingbox $BB_{\mathfrak{X}}$ eines Partikels

$F_1, F_2, F_3$	Isoperimetrischen Gestaltdeskriptoren
$J_1, J_2, J_3$	Translation-, rotation-, und skaleninvariante Momente
$DIM$	Deskriptor über das Verhältnis der kürzesten zur längsten und mittleren zur längsten Hauptachse eines Partikels
$ECC$	Deskriptor über das Verhältnis der längsten zur kürzesten Hauptachse eines Partikels
$CONV$	Verhältnis aus dem Volumen der konvexen Hülle zum Volumen eines Partikels
$dim_B F$	Boxdimension, empirische Approximation der Hausdorffdimension
$X$	Zufallsvariable
$(x_1, \dots, x_n)$	Stichprobe vom Stichprobenumfang $n$
$f(\cdot)$	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
$F(\cdot)$	Verteilungsfunktion
$\hat{F}_n(\cdot)$	Empirische Verteilungsfunktion einer Stichprobe
$\hat{f}(\cdot)$	Kerndichteschätzung von $f$
$\theta$	Parametervektor einer Dichtefunktion
$p(x \theta)$	Likelihood-Funktion
$p(\theta)$	A-priori Dichte von $\theta$
$p(\theta x)$	A-posteriori Dichte
$\tilde{x}_1^{(i)}, \dots, \tilde{x}_n^{(i)}$	Simulierte Stichprobe der posteriori-prädiktiven Verteilung für Parameter $\theta^{(i)}$
$\Delta^{(i)}$	Posteriori-prädiktive Verteilung der Differenzen
$N$	Punktprozess
$N(B)$	Anzahl der Punkte in einer Teilmenge $B \subset \mathbb{R}^d$
$\Lambda(B)$	Intensitätsmaß
$\lambda(\cdot)$	Intensitätsfunktion
$\hat{\lambda}(\cdot)$	Schätzung der Intensitätsfunktion
$\lambda$	Intensität
$D(r)$	Nächste-Nachbarschafts Funktion
$K(r)$	Ripleys K-Funktion
$L(r)$	L-Funktion
$g(r)$	Paar-Korrelationsfunktion

## NOTATION

---

Bei der Wahl von Symbolen wird wie folgt vorgegangen. Symbole, die kapitelübergreifend in der Arbeit verwendet werden, sind eindeutig definiert und werden in das Symbolverzeichnis aufgenommen. Dazu

gehören zum Beispiel alle Gestaltdeskriptoren aus Abschnitt 2.2. Symbole die hingegen nur verwendet werden, um weitere Definitionen abzuleiten, sind nur in dem Abschnitt eindeutig, in dem sie definiert sind. Sie können in Definitionen aus anderen Abschnitten in wechselnder Bedeutung Verwendung finden. Dazu gehören zum Beispiel Symbole für Zufallsvariablen, Mengen und Indizes.



## EINLEITUNG

---

In vielen wissenschaftlichen Disziplinen und Industriezweigen, insbesondere den Materialwissenschaften und der Verfahrenstechnik, beschäftigt man sich mit der Verarbeitung und Analyse von dispersen Stoffsystemen. Disperse Stoffsysteme sind heterogene Gemische aus mindestens zwei Stoffen, die sich nicht ineinander lösen. Dabei ist ein Stoff, bezeichnet als die disperse Phase, in einem anderen Stoff in feinsten Form verteilt. Der zweite Stoff umgibt den ersten vollständig und wird kontinuierliche Phase genannt. Abhängig von dem Aggregatzustand der beiden Stoffe lassen sich solche Systeme in verschiedene Klassen einteilen. Liegen beide Stoffe in Form von Flüssigkeiten vor, spricht man von Emulsionen. Bei einer festen dispersen Phase in einem flüssigen Medium spricht man hingegen von Suspensionen. Besteht die disperse Phase hauptsächlich aus Körnern, Tröpfchen oder Gasbläschen und ist die kontinuierliche Phase im festen Aggregatzustand, dann wird ein solches System als Partikelsystem bezeichnet [132, S. 17 ff.]. Luftblasen in Eis, poröse Gesteinsarten aber auch Mineralien mit eingeschlossenen Fremdstoffen, wie Erdöl oder Tonerde, sind Beispiele für solche Partikelsysteme natürlichen Ursprungs. In den Materialwissenschaften werden aber auch gezielt künstliche disperse Systeme erzeugt, um Produkte und Werkstoffe zu erstellen, die gewisse anwendungsrelevante Eigenschaften besitzen. Durch das Anwenden von verfahrenstechnischen Prozessen versucht man das disperse System in einen definierten Zustand zu überführen, in dem gewünschte Produkteigenschaften und Qualitätskriterien des zu erzeugenden Materials erfüllt sind. Dabei beeinflusst der Prozess direkt quantitative Eigenschaften sowohl der Einzelpartikel als auch des gesamten Partikelkollektivs. Um also die Auswirkungen des Prozesses und damit die Qualität des erzeugten Produkts oder des Werkstoffs beurteilen zu können, ist das Erfassen und Analysieren dieser quantitativen Eigenschaften des Partikelsystems unabdingbar.

*Disperse  
Stoffsysteme*

*Partikelsysteme*

Als konkretes Anwendungsbeispiel sei hier die Stahlerzeugung genannt. Stahl wird aus Roheisen hergestellt und bezeichnet Eisen mit einem Kohlenstoffgehalt von unter 2.06 %. Um den Stahl auf den erforderlichen Kohlenstoffgehalt zu bringen, wird im Laufe des verfahrenstechnischen Prozesses zunächst der überschüssige Kohlenstoff durch Zugabe von Sauerstoff oxidiert und anschließend wird durch Zugabe von Desoxidationsmittel der im flüssigen Stahl verbleibende

*Stahl*

*Nichtmetallische  
Einschlüsse*

Sauerstoff gebunden. Normalerweise wird der so gebundene Sauerstoff in die Schlacke abgeschieden. Ein kleiner Teil dieser Desoxidationsprodukte verbleibt aber in der flüssigen Schmelze und wird von der fortschreitenden Erstarrungsfront beim Erhärten des Stahls eingeschlossen. Diese, als nichtmetallische Einschlüsse bezeichneten Partikel, beeinflussen die Qualität und die mechanischen Eigenschaften des fertigen Stahlwerkstoffs. Um den Herstellungsprozess also optimieren zu können, so dass weniger dieser Verunreinigungen im Produkt verbleiben, ist es zunächst nötig die quantitativen Eigenschaften sowohl der Einzelpartikel als auch des durch die Partikel geformten Partikelsystems zu bestimmen. Anhand dieser Auswertungen kann dann der Reinheitsgrad des Stahls festgelegt werden, der als Vergleichsmaß für die Qualität von Stahlwerkstoffen herangezogen wird.

*Silenos*

Im Rahmen des durch die Europäische Union geförderten Ziel2-Projekts Silenos<sup>1</sup> wurde in Zusammenarbeit mit zwei Projektpartnern aus der Stahlindustrie an einer solchen Methode zur schnellen Charakterisierung und Quantifizierung der nichtmetallischen Einschlüsse in Bildern schichtweise abgefräster Stahlproben. In diesen Schichtbildern werden die nichtmetallischen Einschlüsse mittels Verfahren der Bildverarbeitung identifiziert und segmentiert. Die segmentierten Schichtbilder werden dann übereinandergelegt und die einzelnen Einschlüsse durch die Schichten verfolgt. Auf diese Weise lässt sich ihre dreidimensionale Morphologie rekonstruieren, und es entsteht ein computergestütztes Modell der gesamten Stahlprobe. Dies erlaubt die statistische Analyse sowohl ihrer Größenverteilung und räumlichen Verteilung als auch die Klassifikation nach ihrer dreidimensionalen Form.

*Rahmenwerk*

Die Erkenntnisse aus diesem Projekt bilden die Grundlage der vorliegenden Arbeit, die zum Ziel hat, ein Rahmenwerk für die Analyse von Partikelsystemen zu entwickeln. Im Fokus stehen die Techniken zur dreidimensionalen Rekonstruktion auf Basis von computerbasierten Modellen der Phasen, zur statistischen Quantifizierung und zur Klassifikation individueller Partikel. Dabei werden alle Techniken zunächst generisch für Partikelsysteme eingeführt und anschließend anhand des gerade beschriebenen Szenarios konkrete Anwendungsfälle aufgezeigt.

**1.1 ZIELE**

Ziel dieser Arbeit ist es, ein Rahmenwerk zur vollständigen statistischen Analyse polydispenser Partikelsysteme zur Verfügung zu stel-

<sup>1</sup> <http://www.scg.inf.uni-due.de/silenos.php>



len. Dabei wird im Rahmen dieser Arbeit unter der vollständigen Analyse in Anlehnung an Saltykov [118, S. 245 ff.] die Untersuchung folgender drei Aspekte eines Partikelsystems verstanden.

*Vollständige  
statistische Analyse*

1. Einzelpartikelanalyse: Bei der Einzelpartikelanalyse werden den individuellen Partikeln des Partikelsystems quantitative Merkmale zugeordnet, die es erlauben, eine ordnende Unterscheidung zwischen ihnen zu treffen. Das wichtigste Unterscheidungsmerkmal ist die Gestalt eines Partikels, welche sowohl die Größe als auch die Form umfasst. Für diese Merkmale werden verschiedene Deskriptoren festgelegt, die später dazu verwendet werden, verschiedene Gestaltklassen zu definieren, systematische Gestaltveränderungen zu detektieren und die Größenverteilung sowie die räumliche Verteilung des gesamten Partikelkollektivs zu untersuchen. Eine Analyse von Texturen findet allerdings nicht statt. Die Modellierung von kristallinen Verbänden oder Substrukturen ist nicht Ziel der Arbeit.
2. Partikelgrößenverteilung: Bei der Untersuchung der Partikelgrößenverteilung wird ein stochastisches Modell ausgewählt und anhand der beobachteten Partikel parametrisiert. Dieses Modell beschreibt die Größenverteilung der Partikel in Bezug auf das in der Einzelpartikelanalyse festgelegte Merkmal. Bei kugelförmigen Partikeln kann hier beispielsweise der Durchmesser herangezogen werden, während bei unregelmäßig geformten Partikeln die Länge der längsten Achse am aussagekräftigsten ist. Die Modellauswahl wird dabei entweder von einem Experten vorgenommen oder unter Anwendung von explorativen Methoden aus den Daten abgeleitet.
3. Räumliche Verteilung: Bei der Untersuchung der räumlichen Verteilung steht die Frage im Mittelpunkt, ob die Partikel zufällig und regellos im Raum verteilt sind oder ob sie sich gegenseitig beeinflussen. Auch hier wird die Analyse wieder mittels eines stochastischen Modells vorgenommen, welches auf Basis der erhobenen Daten parametrisiert wird. Durch den Vergleich zwischen Modellvorhersagen und den realen Daten kann dann eine Aussage über die Art der räumlichen Verteilung der Partikel getroffen werden. Bestimmte Annahmen, die zur Anwendbarkeit des Modells erfüllt sein müssen, können mittels explorativer Methoden überprüft werden.

Im Gegensatz zu Saltykov [118, S. 245 ff.], der unter vollständiger Analyse eines Partikelsystems nur das Erheben der Anzahl der Partikel in der Volumeneinheit und das Schätzen der Parameter der Normalverteilung in Bezug auf die Partikelgröße versteht, wird das Verständnis des Begriffs in der vorliegenden Arbeit also um die Einzelpartikelanalyse und die Untersuchung der räumlichen Verteilung

erweitert. Außerdem wird keine Einschränkung bezüglich des verwendeten Modells zur Beschreibung der Größenverteilung vorgenommen. Dem Autor dieser Arbeit ist kein vergleichbares Rahmenwerk bekannt, welches diese drei Aspekte bei der Analyse von Partikelsystemen berücksichtigt.

Im Hinblick auf das im Silenos-Projekt entworfene Online-Auswertesystem soll dieses Rahmenwerk eingesetzt werden, um statistisch gesicherte Informationen über den Gehalt von nichtmetallischen Einschlüssen in Stahl in ausgewählten Proben aus der laufenden Produktion abzuleiten. Dabei ergeben sich aus dieser konkreten Problemstellung verschiedene Anforderungen an die drei Aspekte der statistischen Analyse von Partikelsystemen, die im Folgenden genauer herausgearbeitet werden sollen. Dafür ist es aber zunächst nötig, die grobe Funktionsweise des angesprochenen Auswertesystems näher zu erläutern. Dies soll im folgenden Abschnitt geschehen. Eine genauere Betrachtung des Auswertesystems erfolgt dann in Abschnitt 4.2. Anschließend werden die Anforderungen in einem separaten Abschnitt besprochen.

## 1.2 SILENOS

### *Optisches Auswertesystem*

In Zusammenarbeit mit den Hüttenwerken Krupp Mannesmann und der Salzgitter Mannesmann Forschung GmbH wurde im Ziel2-Projekt Silenos ein optisches Auswertesystem zur Detektion von nichtmetallischen Einschlüssen in Stahl entwickelt. Ausgangspunkt ist ein direkt aus der Bramme geschnittener Stahlblock mit einer maximalen Abmessung von  $300 \times 120 \times 90 \text{ mm}^3$ . Dieser wird auf ein Verfahrenssystem gespannt, und durch kontinuierliches Abfräsen und Abfotographieren werden Schichtbilder der Stahloberfläche generiert. Die verwendete Optik ist dabei in der Lage, Grauwertbilder mit einer Auflösung von  $20 \mu\text{m}$  bis zu  $10 \mu\text{m}$  pro Pixel zu erzeugen. Die Spanabnahme der Fräse beträgt im Normalfall  $10 \mu\text{m}$ . Damit ergeben sich pro Schicht Rohdaten im Umfang von ca. 350 MB. Wird der Stahlblock vollständig abgefräst, fallen bei angenommen 9000 Schichtbildern bis zu 3 TB an Daten an. In diesen Schichtbildern wird dann versucht, mittels Methoden der Bildverarbeitung die angesprochenen nichtmetallischen Einschlüsse zu identifizieren und zu segmentieren. Neben den nichtmetallischen Einschlüssen sollen aber auch weitere Defekte wie Risse und Poren detektiert werden. Sind die möglichen Defekte in einem Schichtbild segmentiert, lassen sich die Teilsegmente inkrementell in den darauf folgenden Schichten verfolgen. So wird es möglich, die dreidimensionale Morphologie der Defekte zu rekonstruieren. Für vollständig abgefräste Defekte erfolgt dann eine automatische Klassifikation anhand ihrer Morphologie in die Defektclassen Riss, Pore und nichtmetallischer Einschluss. Über die Men-

ge der nichtmetallischen Einschlüsse wird schließlich mittels statistischer Methoden der Reinheitsgrad bestimmt.

Wichtig bei dem hier beschriebenen Prozess ist, dass alle Auswertungen inkrementell, parallel zum Fräsprozess, durchgeführt werden. Das heißt, dass die Ergebnisse der statistischen Auswertungen über die Menge der vollständig abgefrästen Einschlüsse nach jeder Schicht abgeschlossen sein müssen, bevor das Abfräsen der übernächsten Schicht beginnt. Man erlaubt also einen Versatz von einer Schicht. Daraus ergibt sich ein Zeitfenster von ca. 30 Sekunden, um die Analyse einer Schicht abzuschließen. Der Grund für diese Vorgehensweise besteht darin, dass man beim Erkennen von auffälligen Strukturen in der Frässhicht den Prozess rechtzeitig stoppen kann, ohne die Struktur durch weiteres Abfräsen zu zerstören. So bleibt eine chemische Analyse mittels Spektralaufnahmen der angefrästen Defekte möglich. Des Weiteren erlaubt die statistische Online-Auswertung parallel zum Fräsprozess das Evaluieren eines Abbruchkriteriums, welches auslösen soll, wenn der Reinheitsgrad der Probe mit einer vorgegebenen statistischen Sicherheit erfasst wurde. Dadurch wird die Anzahl der zu fräsenden Schichten reduziert, was zu weniger Verschleiß bei dem eingesetzten Fräswerkzeug führt. Im weiteren Verlauf wird dieser Betriebsmodus als Online-Betrieb bezeichnet. Er stellt den Normalbetrieb des Auswertesystems dar. Daneben gibt es einen Offline-Betrieb, bei dem alle Schichtbilder bereits vor der Auswertung vorliegen. Solche Datensätze dienen vor allem dazu, die Daten von bereits gefrästen Proben neu auszuwerten. Dies kann hilfreich sein, um beispielsweise neue Parameter für die Klassifikation oder das Abbruchkriterium zu kalibrieren. Erklärtes Ziel beim Offline-Betrieb ist also, die oben beschriebenen Auswertungen möglichst schnell durchzuführen, damit die Ergebnisse zeitnah vorliegen.

*Online-Betrieb*

*Offline-Betrieb*

### 1.3 ANFORDERUNGEN AN DAS RAHMENWERK

Aus dem im obigen Abschnitt vorgestellten Verfahren lassen sich konkrete Anforderungen für das in dieser Arbeit entwickelte Rahmenwerk zur Analyse von Partikelsystemen ableiten. Ausgangspunkt bei den folgenden Betrachtungen sind dabei vorsegmentierte Schichtaufnahmen von Partikelsystemen, wie sie im Silenos-Projekt durch schichtweise abgefräste Werkstoffproben erzeugt werden. Theoretisch lassen sich aber auch andere bildgebende Verfahren verwenden, wie beispielsweise die Magnetresonanztomographie (MRT). Die Segmentierung selbst wird in der vorliegenden Arbeit allerdings nicht betrachtet, sondern das Problem als gelöst vorausgesetzt. Eine Unterscheidung zwischen kontinuierlicher und disperser Phase in den Schichtbildern ist also bereits erfolgt. Für mehr Informationen, wie

dieses Problem im Kontext des Silenos-Projekts gelöst wurde, werden auf die einschlägigen Veröffentlichungen des Lehrstuhls für Intelligente Systeme an der Universität Duisburg-Essen verwiesen [21, 55, 56]. Da aber die Segmentierung Teil der Online-Auswertung ist, muss diese bei der Laufzeituntersuchung sehr wohl beachtet werden. Im weiteren Verlauf wird die Laufzeit der Segmentierung deshalb als unbekannte Variable modelliert. Je früher die Rekonstruktion, Klassifikation und statistische Auswertung abgeschlossen sind, umso mehr Zeit bleibt für diesen Prozess. Dabei wird ein Zeitfenster von 10 s für die Segmentierung als realistisch angesehen.

*Rekonstruktion*

Um die Gestalt der einzelnen Partikel eines Partikelsystems quantifizieren zu können, ist es zunächst nötig, diese in den Schichtbildern zu rekonstruieren. Dies verlangt nach einer formalen Definition des Begriffs Partikel auf Basis derer dann Algorithmen zur Rekonstruktion angegeben werden können. Dabei sollen sowohl bei der Definition des Partikelbegriffs als auch bei der Entwicklung der Algorithmen die in Abschnitt 1.2 beschriebenen Anforderungen bezüglich Speicherverbrauch und Laufzeit beachtet werden. Die aus der Partikeldefinition abgeleiteten Algorithmen müssen trotz der immensen Datenmengen den inkrementellen Echtzeitbetrieb gewährleisten. Des Weiteren soll ein möglichst allgemeiner Partikelbegriff eingeführt werden, der zum einen die Rekonstruktion unterschiedlicher Partikeltypen erlaubt und zum anderen tolerant gegenüber Segmentierungsfehlern ist.

*Selektive  
Deskriptoren*

Über die rekonstruierten Partikel werden dann die Deskriptoren berechnet, welche die Quantifizierung der Gestalt erlauben. Bei der Auswahl dieser Deskriptoren steht wieder die Effizienz bezüglich der Laufzeit im Vordergrund, da auch der Quantifizierungs- und Klassifizierungsprozess Teil des Online-Betriebs des Auswertesystems aus Abschnitt 1.2 ist. Zusätzlich soll bei der Auswahl darauf geachtet werden, möglichst selektive und unterscheidende Deskriptoren zu verwenden, damit verschiedene Charakteristiken der Partikel erfasst werden können. Dies soll sicherstellen, dass das in Abschnitt 1.2 beschriebene Klassifizierungsproblem mit ausreichend hoher Genauigkeit gelöst werden kann.

*Inkrementelle  
statistische  
Auswertung*

Die klassifizierten und quantifizierten Partikel bilden schließlich die Grundlage für die statistische Auswertung. Wie bereits angesprochen, soll das Partikelsystem statistisch vollständig beschrieben werden. Im Rahmen dieser Arbeit ist damit die Analyse sowohl der räumlichen Verteilung als auch der Größenverteilung gemeint. Für beide Verteilungen sollen entsprechende Modelle entwickelt werden, die dann mittels der beobachteten Daten parametrisiert werden. Auch hier müssen wieder die speziellen Anforderungen beachtet werden, die sich aus dem in Abschnitt 1.2 beschriebenen inkrementellen Auswerteprozess ergeben. So ist die Stichprobengröße beim Beginn des

Prozesses nicht bekannt. Dies erfordert die Definition eines Maßes zur Quantifizierung der statistischen Unsicherheit. Damit lässt sich dann feststellen, ab welchem Zeitpunkt genügend Material abgefräst wurde, um die Modelle mit den geschätzten Parametern bei vorgegebener Genauigkeit zu akzeptieren oder zu verwerfen. Dieser Vorgang wird auch als optimales Stoppen und das Maß als Abbruchkriterium bezeichnet.

#### 1.4 STAND DER TECHNIK

Sowohl für den in Abschnitt 1.2 beschriebenen Anwendungsfall der Detektion von nichtmetallischen Einschlüssen, als auch für die Analyse von Partikeln allgemein sind bereits zahlreiche Systeme und Rahmenwerke auf dem Markt verfügbar. In diesem Abschnitt sollen die gängigsten Systeme mit dem in der vorliegenden Arbeit bereitgestellten Rahmenwerk verglichen, Vor- und Nachteile herausgearbeitet und damit die Neuerungen des entwickelten Rahmenwerks hervorgehoben werden. Begonnen wird mit der Beschreibung der Systeme zur Analyse von nichtmetallischen Einschlüssen in Stahlproben. Bei diesen Systemen handelt es sich fast ausschließlich um kommerzielle Produkte, die keinen Einblick in die verwendeten Algorithmen erlauben. Deshalb wird sich bei der Untersuchung dieser Produkte auf die Frage konzentriert, inwieweit die in Abschnitt 1.1 herausgearbeiteten Ziele, also die Einzelpartikelanalyse und die Analyse der räumlichen Verteilung und Größenverteilung, unterstützt werden. Dabei werden als Quelle häufig die Produktbroschüren der Hersteller herangezogen, da auch die Dokumentation nicht öffentlich zugänglich ist. Des Weiteren werden nur optische Verfahren zur Einschlussdetektion erörtert, da diese am ehesten mit Silenos und dem in der vorliegenden Arbeit entwickelten Rahmenwerk vergleichbar sind. In Abschnitt 4.1.4 werden dann weitere Verfahren zur Detektion von nichtmetallischen Einschlüssen eingeführt und entsprechende Vor- und Nachteile gegenüber Silenos herausgearbeitet. Nach den Verfahren zur Detektion von nichtmetallischen Einschlüssen werden anschließend allgemeinere Systeme und Rahmenwerke zur Partikelanalyse betrachtet.

Die bekanntesten kommerziellen Systeme zur Analyse des nichtmetallischen Reinheitsgrades von Stahlwerkstoffen werden von den Firmen Zeiss [150], Leica [78] und Olympus [100] hergestellt. Bei diesen Systemen werden nichtmetallische Einschlüsse in Mikroskopaufnahmen polierter Schnittflächen von Stahlproben detektiert, segmentiert, klassifiziert und anschließend der Reinheitsgrad ausgerechnet. Laut Herstellerangaben erfüllen dabei alle genannten Systeme den europäischen Standard EN10247 [92] und die DIN-Norm 50602 [34] beziehungsweise die amerikanische Norm ASTM E45 [8]. Diese Stan-

*Stand der Technik*

*Standardkonforme  
Systeme zur  
Analyse  
nichtmetallischer  
Einschlüsse*

dards legen sowohl Probenentnahme und Probengröße, als auch die Klassifikation der Einschlüsse nach ihrer Morphologie und die Berechnung des Reinheitsgrades fest. Die genaue Durchführung unterscheidet sich zwar von Standard zu Standard, die grundlegende Idee ist aber dieselbe. In polierten Schnittflächen von mindestens  $160 \text{ mm}^2$  Größe [8] werden nichtmetallische Einschlüsse zunächst mittels eines Mikroskops detektiert. Die detektierten Einschlüsse werden dann anhand ihrer Morphologie in vier Basistypen unterteilt. Laut DIN-Norm 50602 [34] unterscheidet man zwischen sulfidischen Einschlüssen in Strichform, oxidischen Einschlüssen in aufgelöster Form (auch als Einschlusszeile bezeichnet), oxidischen Einschlüssen in Strichform und oxidischen Einschlüssen in globularer Form. Für eine manuelle Klassifizierung in diese Basistypen werden entsprechende Bildreihentafeln bereitgestellt, mit welcher die detektierten Einschlüsse verglichen werden. Für eine automatische Klassifizierung werden hingegen in EN10247 [92] formale Kriterien angegeben, welche eine Unterscheidung zwischen einer Einschlusszeile und einem Einschluss als Einzelereignis erlauben. Ist eine eindeutige Einteilung nicht möglich, kann die Farbe als zusätzliches Kriterium herangezogen werden. Anschließend werden den klassifizierten Einschlüssen Größenkennziffern zugeordnet. Der Reinheitsgrad ergibt sich schließlich entweder aus dem maximalen Größenswert der unterschiedlichen Einschlussstypen (Verfahren M, siehe DIN-Norm 50602 [34]) oder aus dem Verhältnis der gesamten Einschlussfläche je Einschlussstyp zur Probenfläche, wobei auf  $1000 \text{ mm}^2$  hochgerechnet wird (Verfahren K). Allerdings wird bei keiner der angegebenen Normen berücksichtigt, dass nichtmetallische Einschlüsse eine dreidimensionale Ausdehnung besitzen. Zumindest für globulare Partikel sind seit längerem stereologische Verfahren bekannt, die das Hochrechnen der Durchmesser-Verteilung auf das Volumen anhand zweidimensionaler Profile erlauben [143]. Sogar für die konkrete Problemstellung der Berechnung des nichtmetallischen Reinheitsgrades wurden solche Verfahren bereits angewendet [118, S. 245] und sind immer noch Gegenstand der aktuellen Forschung [140]. Sowohl in den angegebenen Normen als auch in den jeweiligen Broschüren der Hersteller wird diese Problematik nicht berücksichtigt. Insgesamt wird das Thema dreidimensionale (räumliche) Verteilung, soweit ersichtlich, nicht behandelt. Die vorgestellten Systeme scheinen nur die Mindestanforderungen der Standards zu erfüllen. Es stellt sich die Frage, ob mit dem in der vorliegenden Arbeit entwickelten Rahmenwerk im Anwendungsfall (siehe Abschnitt 1.2) standardkonforme Auswertungen durchgeführt werden können. Diese Frage lässt sich nicht ohne weiteres beantworten, da die in den Standards definierten Methoden trotz ähnlicher Ansätze sehr unterschiedlich sind. Zunächst einmal ist es im Vorhaben Silenos das Ziel, den Meso- und Makroreinheitsgrad (siehe auch Abschnitt 4.1.2) zu untersuchen, während die in den Normen beschriebenen Verfahren

die Analyse des Mikroreinheitsgrades zum Ziel haben. Für die Klassifikation der verschiedenen Einschlusstypen ist es nach EN10247 [92] nötig, Abstände von unter  $40\ \mu\text{m}$  und teilweise sogar bis unter  $10\ \mu\text{m}$  zwischen detektierten Einzelpartikeln zu messen. Anhand dieser Messwerte wird dann bestimmt, ob die detektierten Partikel einzelne Einschlüsse darstellen oder Teil einer Einschlusszeile sind. Das Vermessen solcher kleinen Abstände ist mit der verwendeten Optik im Silenos-Projekt (siehe Abschnitt 4.2.1) auf Grund der geringen Auflösung nicht möglich. Aber selbst bei Verwendung einer besseren Optik, mit der die Kriterien in Standard EN10247 [92] umgesetzt werden können, ist eine Übertragung der Vorgehensweise auf das Silenos-System nicht ohne weiteres möglich. In den Standards ist die Entnahme und Vorverarbeitung der Proben genau definiert. So wird beispielsweise festgelegt, wo die Probe zu entnehmen ist und wie die Oberfläche bearbeitet und poliert werden muss. Damit soll sichergestellt werden, dass nichtmetallische Einschlüsse während der Probenvorverarbeitung auf der Probenoberfläche nicht zerstört oder herausgebrochen werden. Beim Silenos-Verfahren wird aber nicht poliert, sondern gefräst. Die Probenoberfläche ist also starker mechanischer Beanspruchung ausgesetzt. Bei der Detektion von Meso- oder Makroeinschlüssen in kontinuierlich gefrästen Schichtbildern ist die Manipulation der Morphologie in einer Schicht vernachlässigbar. Bei Mikroinschlüssen, die aber, wenn überhaupt, nur in sehr wenigen aufeinander folgenden Schichten präsent sind, führt das Fräsen dazu, dass sie entweder in die falsche Einschlussklasse eingeordnet oder erst gar nicht detektiert werden. Als letzter Punkt bleibt noch zu erwähnen, dass die in den Standards beschriebenen Methoden nur für gewalztes Material definiert sind, da sich erst durch das Walzen weiche Einschlüsse zu einem Strich beziehungsweise spröde Einschlüsse zu einer Einschlusszeile umformen. Im Normalbetrieb von Silenos wird die Probe hingegen ohne Walzen direkt aus der Bramme geschnitten. Zusammenfassend kann also festgehalten werden, dass die hier vorgestellten Systeme und Silenos verschiedene Problemstellungen lösen und nur bedingt vergleichbar sind. Während die standardkonformen Systeme der drei Hersteller Leica [78], Zeiss [150] und Olympus [100] den Mikroreinheitsgrad anhand zweidimensionaler polierter Schnittflächen berechnen, wird bei Silenos der Einschlussgehalt im Volumen mittels kontinuierlich gefräster Schichtbilder bestimmt. Das in der vorliegenden Arbeit erarbeitete Rahmenwerk wird dabei eingesetzt, um die dreidimensionale Morphologie der Einzelpartikel zu rekonstruieren (siehe Abschnitt 2.1.2). Dazu ist keines der genannten Systeme in der Lage. Des Weiteren können die im Rahmenwerk definierten statistischen Methoden dazu verwendet werden stochastische Modelle sowohl für die räumliche Verteilung (siehe Abschnitt 3.3) als auch für die Größenverteilung (siehe Abschnitt 3.2) zu bestimmen und zu parametrisieren. Dies geht weit über die in

den Standards definierten Verfahren M und K hinaus, bei denen es sich um einfache Zählstatistiken handelt. Inwieweit solche Modelle auch mit den genannten Systemen erstellt werden können, lässt sich anhand der zugänglichen Dokumentation nicht erörtern.

*Zweidimensionale  
Systeme zur  
Partikelanalyse*

Neben kommerziellen Systemen, die für den spezifischen Anwendungsfall aus Abschnitt 4.2 konzipiert wurden, gibt es auch zahlreiche kommerzielle und quelloffene Systeme und Rahmenwerke, die zur Analyse von Partikelsystemen allgemein eingesetzt werden können. Zweidimensionale Analysewerkzeuge sind von den Firmen MediaCybernetics [91], Paxit [105], ImageMetrology [63] und Oxford Lasers [77] verfügbar. Der Funktionsumfang ist bei diesen Werkzeugen in etwa derselbe. In zweidimensionalen Schichtbildern beliebigen Ursprungs werden Profile von Partikeln semi-automatisch segmentiert, klassifiziert und statistisch ausgewertet. Semi-automatisch heißt dabei, dass der Nutzer durch das Festlegen des verwendeten Segmentierungsalgorithmus und entsprechender Schwellwerte in den Segmentierungsprozess eingreifen kann. Soweit es aus der bereitgestellten Dokumentation ersichtlich ist, werden die üblichen morphologischen Parameter, nämlich der Flächeninhalt, der Umfang, die Rundheit, der Feret-Durchmesser und das Achsenverhältnis zur Klassifikation und Auswertung für den zweidimensionalen Fall verwendet. Diese Parameter, neben zahlreichen weiteren, werden auch in dem Rahmenwerk der vorliegenden Arbeit (siehe Abschnitt 2.2) bereitgestellt, allerdings für den dreidimensionalen Fall. Konkrete Angaben zu den statistischen Auswertungen lassen sich hingegen nur sehr wenige finden. Zwar stellen alle genannten Werkzeuge ein Report-Modul zur Verfügung, es fehlt aber die Angabe, welche konkreten statistischen Auswertungen angewendet werden können. Anhand von Bildschirmfotos der Software lässt sich erkennen, dass Standardmethoden der deskriptiven Statistik, wie die Berechnung vom Mittelwert, Median und Modus der Größenverteilung und einfache explorative Datenanalysewerkzeuge, wie Histogramme, unterstützt werden. Ob das Parametrisieren von statistischen Modellen sowohl für die Größenverteilung als auch für die räumliche Verteilung unterstützt wird, bleibt hingegen unerwähnt. Der Hersteller Oxford Lasers [77] verneint dies sogar explizit bei seinem Produkt. Als Begründung wird angeführt, dass die Daten im Rohzustand ohne weitere Aufbereitung angezeigt werden sollen, damit besondere Charakteristiken der Daten erhalten bleiben. Nach Meinung des Autors dieser Arbeit schließen sich aber die Rohdatendarstellung und die Bereitstellung von Modellparametrisierungs- und Validierungsverfahren nicht gegenseitig aus. So werden die in Abschnitt 7.2 beschriebenen explorativen Datenanalysewerkzeuge zur Visualisierung der Rohdaten mit Modellierungswerkzeugen kombiniert, um den Nutzer bei der Modellauswahl und Validierung zu unterstützen. Dabei werden zunächst alle gemessenen Daten berücksichtigt, wobei sich diese entsprechend filtern las-



sen, um beispielsweise Ausreißer von der Berechnung auszuschließen (für einen konkreten Anwendungsfall siehe auch Abschnitt 6.1.2). Dies geschieht aber immer nur auf Anweisung des Nutzers. Automatisch werden keine Daten verworfen. Insgesamt kann, wie schon bei den Produkten zur Analyse von nichtmetallischen Einschlüssen, festgehalten werden, dass in den besprochenen Systemen nur eine rein zweidimensionale Analyse von Partikelsystemen vorgenommen wird. Eine Hochrechnung der Partikeldurchmesser von Profilen auf das Volumen findet nicht statt. Die bereitgestellten statistischen Auswertungen sind soweit ersichtlich nur deskriptiver Natur und die räumliche Verteilung wird nicht betrachtet.

Neben zweidimensionalen Verfahren sind auch dreidimensionale Systeme zur Partikelanalyse verfügbar. Verschiedene Messmethoden wurden vorgeschlagen. Im Folgenden soll sich aber auf Verfahren beschränkt werden, welche die Analyse von eingebetteten Partikeln in einer festen kontinuierlichen Phase erlauben. Messmethoden, wie die Laser-Diffraktions-Analyse oder Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen (REM), die im Nanometerbereich das Vermessen von dreidimensionalen Partikeln ermöglichen, bleiben außen vor. Die erhobenen Daten sind nicht mit den im Rahmenwerk definierten Methoden, welche auf das Auswerten von Schichtbildern hin konzipiert wurden, kompatibel. Stattdessen wird auf den Artikel von Pirard [106] verwiesen, der eine ausführliche Literaturrecherche zu diesem Thema durchgeführt hat. Eine Messmethode, welche zur Analyse von Mikrostrukturen in Festkörpern eingesetzt werden kann und starke Parallelen zu dem im Silenos-Projekt entworfenen System aufweist, ist das Robo-Met.3D [113] System. Dabei handelt es sich um ein vollautomatisches Messsystem für das Erstellen von Schnittbildern mittels kontinuierlichem Fräsen und Polieren des zu verarbeitenden Festkörpers. Unter Einsatz der Robo-Met.3D Analytics Software [5] lassen sich die Schichtbilder zu einem virtuellen dreidimensionalen Abbild der untersuchten Probe zusammensetzen und Mikrostrukturen, wie Korngrenzen und verschiedene Defekte, analysieren. Ein möglicher Anwendungsfall ist beispielsweise die Analyse von sogenannten Freckle-Defekten, die beim Gießen von Superlegierungen entstehen können [126]. Laut Herstellerangaben können Proben mit einer maximalen Abmessung von  $2\text{ mm} \times 1.5\text{ mm} \times 15\text{ mm}$  verarbeitet werden. Die Spanabnahme der Fräse liegt zwischen  $0.20\text{ }\mu\text{m}$  und  $10\text{ }\mu\text{m}$ . Im Vergleich zum Silenos-Projekt ist die maximal unterstützte Probengröße zu klein, um das angestrebte Projektziel, also die Analyse des Meso- und Makroreinheitsgrades, umzusetzen. Leider hält sich der Hersteller auch bezüglich der unterstützten Auswertungen der Software Robo-Met.3D Analytics [5] sehr bedeckt, so dass nicht weiter erörtert werden kann, ob die drei definierten Ziele in Abschnitt 1.1 damit umgesetzt werden können.

*Dreidimensionale  
Systeme zur  
Partikelanalyse*

Neben solchen voll integrierten Systemen zur dreidimensionalen Analyse von Partikelsystemen gibt es zahlreiche Softwareprodukte, die sich auf die Auswertung von Schichtbildern spezialisiert haben. Als Quelle für solche Schichtbilder dient dabei häufig die Computertomographie (CT) oder Mikro-Computertomographie (MCT), aber auch andere bildgebende Verfahren, wie beispielsweise das kontinuierliche Fräsen und Fotografieren von Schnittflächen können als Quelle verwendet werden. Eine bekannte Open-Source Implementierung, die einen ähnlichen Funktionsumfang wie das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Rahmenwerk liefert, ist die Erweiterung Particle Analyser [4] der Software BoneJ [16]. BoneJ ist wiederum eine Erweiterung der Bildverarbeitungssoftware ImageJ [62] und wird verwendet, um die Geometrie und Form von Knochen zu untersuchen. Der Particle Analyser wurde entwickelt, um Osteozyten, einkernige Zellen die in der Knochenmatrix eingebettet sind, in MCT-Aufnahmen von Knochen zu analysieren. Ähnlich wie nicht-metallische Einschlüsse besitzen diese Zellen eine dreidimensionale Ausdehnung und lassen sich anhand ihrer Größe und Morphologie klassifizieren. Der Particle Analyser [4] kann aber auch verwendet werden, um Partikelsysteme allgemein zu untersuchen. Der Ablauf sieht dabei wie folgt aus. Ausgangspunkt sind vorsegmentierte Schichtbilder. Die dreidimensionale Morphologie der segmentierten Partikel wird mittels Connected Component Labeling (CCL) (siehe Abschnitt 2.1.2) rekonstruiert. Über die rekonstruierten Partikel werden dann verschiedene Deskriptoren, wie der Feret-Durchmesser, das Volumen, die Oberfläche, die Eulerzahl und die invarianten Momente berechnet. Zusätzlich können die rekonstruierten Partikel mittels des Marching-Cube-Algorithmus in Dreiecksnetze umgewandelt und visualisiert werden. Damit ist der bereitgestellte Umfang durchaus vergleichbar mit der in Abschnitt 2 vorgestellten Einzelpartikelanalyse und dem Particle Analysis System (PAS) aus Abschnitt 7.2. Ein wichtiger Unterschied besteht aber darin, dass die im Rahmenwerk bereitgestellten Methoden die kontinuierliche Rekonstruktion von Partikeln parallel zum Bildaufnahme- und Segmentierungsprozess erlauben. Damit wird der Einsatz in einem Online-Auswertesystem erst möglich. Auch scheint der Particle Analyser nicht auf das Verarbeiten von großen Schichtbildern optimiert zu sein. In der Dokumentation werden Bilder mit einer Abmessung von  $512 \times 512 \times 512$  Pixeln als Referenzwert angegeben. Beim Silenos-Projekt kommen Bilder mit einer Auflösung von bis  $15000 \times 7000 \times 3000$  Pixeln vor. Zwar wurde kein Benchmark durchgeführt, es ist aber davon auszugehen, dass die in C++ implementierten Algorithmen des Rahmenwerks im Vergleich zu dem in Java implementierten BoneJ in Bezug auf Geschwindigkeit und Speicherverbrauch deutlich effizienter sind. Gerade Zeigeroperationen auf kontinuierlichen Datenblöcken, wie sie bei Bildverarbeitungsalgorithmen häufig vorkommen, werden durch moderne C++

Compiler in sehr effizienten Maschinencode übersetzt. Dies wurde zum Beispiel von Hundt [60] in einem sehr ausführlichen Benchmark bestätigt. Auch die Geschwindigkeitsmessungen aus Abschnitt 2.1.3 lassen dies vermuten. Ein weiterer Nachteil im Vergleich zu dem entwickelten Rahmenwerk ist die fehlende Unterstützung von statistischen Methoden. Wie bereits bei den anderen hier vorgestellten Systemen werden nur sehr einfache deskriptive statistische Methoden angeboten, wie beispielsweise die Berechnung der Partikel mit minimalem, mittlerem und maximalem Volumen. Methoden zur Untersuchung der räumlichen Verteilung sind nicht implementiert. Genau andersherum ist der Fall bei Spatstat [125] gelagert, einem in der Programmiersprache R [108] implementierten statistischen Rahmenwerk zur Analyse von Punktmustern. Hier sind zwar die gängigsten Methoden zur Analyse zwei- und dreidimensionaler Punktmuster implementiert (siehe Abschnitt 3.3), allerdings fehlt die komplette Unterstützung der Einzelpartikelanalyse.

Insgesamt muss also konstatiert werden, dass keines der hier vorgestellten Systeme alle geforderten Ziele aus Abschnitt 1.1 umsetzt. Aus diesem Grund wird in der vorliegenden Arbeit eine eigene Implementierung vorgenommen. Die Methoden der Einzelpartikelanalyse werden dabei von Grund auf entwickelt, da diese möglichst effizient in Bezug auf die Laufzeit und den Speicherverbrauch sein müssen, um einen echtzeitfähigen Betrieb gewährleisten zu können. BoneJ [16] und der Particle Analyser [4] werden im Zuge der Entwicklung dazu verwendet die Ergebnisse der Algorithmen zur Berechnung der Eulerzahl und der invarianten Momente zu validieren. Für die statistischen Methoden wird hingegen auf die Programmierumgebung R [108] zurückgegriffen und die einzelnen Auswertungen in Form von R-Skripten zur Verfügung gestellt. Dabei wird R [108] in den C++-Kern des Rahmwerks eingebettet, so dass die Auswertungen über eine einheitliche Schnittstelle ausgeführt werden können. Die Methoden zur Analyse der räumlichen Verteilung werden von Spatstat [125] bereitgestellt, da damit bereits ein etabliertes Rahmenwerk zur Auswertung von Punktmustern zur Verfügung steht. Die Kombination und Integration dieser verschiedenen Techniken bilden das Rahmenwerk, mit welchem die in Abschnitt 1.1 definierten Ziele umgesetzt werden können. Weitere Details zur konkreten Implementierung sind in Kapitel 7 aufgeführt. Soweit dem Autor bekannt, ist derzeit kein System verfügbar, welches einen vergleichbaren Umfang zur Analyse dreidimensionaler Partikelsysteme bereitstellt.

*Fazit*

## 1.5 UMSETZUNG UND STRUKTUR DER ARBEIT

Aus den definierten Anforderungen aus Abschnitt 1.3 ergibt sich folgender Aufbau für die vorliegende Arbeit. In Kapitel 2 wird zunächst

*Partikeldefinition*

die formale Definition des Partikelbegriffs erarbeitet. Dabei wird zunächst ein Nachbarschaftskriterium definiert, welches die Grundlage für den Partikelbegriff bildet. Ein Partikel wird dann als zusammenhängende Menge von volumetrischen Pixeln eingeführt. Zugelassen werden verschiedene Nachbarschaftskriterien, um diese zusammenhängenden Mengen zu bestimmen. Damit wird sichergestellt, dass bei der Rekonstruktion möglichst flexibel auf Segmentierungsfehler reagiert werden kann. Auf Basis dieser Definition wird dann ein Algorithmus entwickelt, der die zusammenhängenden Mengen in den Schichtbildern detektiert. Im Gegensatz zu den üblicherweise in der Literatur besprochenen Algorithmen wird das in der vorliegenden Arbeit verwendete Verfahren aber nicht für Bilder, sondern für die diskretisierte disperse Phase eingeführt. Dieser Schritt erlaubt eine drastische Reduktion der Daten, da die Pixel der kontinuierlichen Phase in jedem Schichtbild vor der Verarbeitung verworfen werden können. Erst damit ist es möglich, mit den in Abschnitt 1.2 angesprochenen Datenmengen umzugehen. Der Algorithmus wird dann schrittweise erweitert, um den inkrementellen Betrieb des Online-Auswertesystems zu unterstützen. Zusätzlich wird ein zweiter Algorithmus angegeben, der für den Offline-Betrieb optimiert ist. Beide Algorithmen werden dann anhand von simulierten Daten (siehe unten) extrem verunreinigter Stahlproben evaluiert. Damit soll sichergestellt werden, dass die in Abschnitt 1.2 definierten Laufzeitanforderungen erfüllt sind. Im gleichen Kapitel werden schließlich die Gestaltdeskriptoren eingeführt, die eine Quantifizierung der Form und Größe der individuellen Partikel erlauben. Hauptaugenmerk liegt auf den Minkowskifunktionalen. Sie bilden die Grundlage für eine Reihe weiterer Deskriptoren. Außerdem lässt sich zeigen, dass sie eine Basis im Vektorraum der bewegungsinvarianten, stetigen und additiven Funktionale bilden. Für die Berechnung wird ein effizienter Algorithmus mittels vorberechneter Tabellen angegeben, der eine direkte Erweiterung des von Michielsen und De Raedt [94] propagierten Verfahrens darstellt.

*Rekonstruktions-  
Algorithmus*

*Gestaltdeskriptoren*

Nach der Beschreibung der Methoden der Einzelpartikelanalyse werden in Kapitel 3 dann geeignete statistische Verfahren eingeführt, die sowohl die Analyse der räumlichen Verteilung als auch der Partikelgrößenverteilung erlauben. Ziel ist es, für beide Verteilungen ein Modell zu konstruieren, welches mittels der beobachteten Daten parametrisiert wird. Dabei wird rigoros auf die Methoden der bayesischen Statistik gesetzt. Dies hat im Zusammenhang mit dem in Abschnitt 1.2 beschriebenen Online-Auswertesystem mehrere Vorteile. Zunächst lässt sich etwaiges Vorwissen über die Parameter adäquat in Form einer A-priori Verteilung modellieren. Des Weiteren kann der iterative Ablauf des Auswertesystems direkt abgebildet werden. So kann nach jeder Schicht aus der A-priori Verteilung, dem postulierten Modell und den beobachteten Daten die A-posteriori Verteilung

*Bayessche Statistik*

lung bestimmt werden. Diese codiert das Wissen über die Modellparameter nach Beobachtung der neuen Daten. Im nächsten Iterationsschritt wird dann die A-posteriori Verteilung zur neuen A-priori Verteilung, da sich mit den neu beobachteten Daten auch das Wissen über die Parameter aktualisiert hat. Schließlich lässt sich mittels der bayesschen Methoden die statistische Unsicherheit bei der Schätzung adäquat quantifizieren. Damit ist also auch die Grundlage für das Abbruchkriterium geschaffen. Nach Einführen dieser grundlegenden statistischen Methoden folgt dann die Definition von Modellvalidierungsverfahren und explorativen Datenanalysewerkzeugen, um einen Experten bei der Auswahl eines passenden Modells zu unterstützen. Dabei werden sowohl Methoden für die Analyse der räumlichen Verteilung als auch der Größenverteilung definiert.

Damit werden die theoretischen Grundlagen für das in dieser Arbeit entwickelte Rahmenwerk gelegt. In den nächsten Kapiteln wird dann exemplarisch anhand von Daten aus dem Auswertesystem von Abschnitt 1.2 gezeigt, wie die dort definierten Anforderungen mittels der Methoden aus dem Rahmenwerk umgesetzt werden können. Zunächst werden dafür in Kapitel 4 die wichtigsten optischen, chemischen, morphologischen und statistischen Eigenschaften von nichtmetallischen Einschlüssen zusammengefasst und verschiedene Detektionsverfahren vorgestellt. Im Zuge dessen werden auch das im Silenos-Projekt entwickelte Detektionsverfahren genauer eingeführt und die Vorteile gegenüber den klassischen Verfahren herausgearbeitet. Die in Kapitel 4 erarbeiteten Erkenntnisse werden in den darauf folgenden Kapiteln als Expertenwissen für die Modellbildung herangezogen. Mittels der Methoden aus der Einzelpartikelanalyse und Verfahren des maschinellen Lernens wird dann in Kapitel 5 gezeigt, wie das in Abschnitt 1.2 angesprochene Klassifizierungsproblem gelöst wird. Dazu wird aus allen definierten Deskriptoren ein optimaler Deskriptorsatz bestimmt und dieser verwendet, um die detektierten Defekte in globulare Defekte, Risse und Artefakte aufzuteilen. Die Klasse der Artefakte enthält dabei fälschlich als Defekt erkannte zusammenhängende Mengen, die auf Grund von Segmentierungs- oder Bildaufnahmefehlern entstanden sind. Die Aufteilung der Klasse der globularen Defekte wird anschließend nochmals verfeinert, und zwar in Poren und nichtmetallische Einschlüsse. Im Kapitel 6 werden dann anhand dieser Defektmenge die verschiedenen Möglichkeiten der statistischen Auswertung aufgezeigt. Als Modell für die Größenverteilung von nichtmetallischen Einschlüssen wird, wie in Kapitel 4 beschrieben, die logarithmische Normalverteilung angenommen. Mittels der in Kapitel 6 definierten explorativen Methoden wird diese Annahme zunächst auf Plausibilität geprüft. Anschließend erfolgt die Parametrisierung und Validierung auf Basis der erhobenen Daten. Gleiches Prozedere wird für die räumliche Verteilung durchgeführt, wobei hier der homogene Poisson-Prozess das favorisierte

*Expertenwissen*

*Defektklassifikation*

*Statistische  
Modellbildung*

Modell ist. Die Erkenntnisse aus diesem Prozess bilden die Grundlage für die Implementierung einer Simulationssoftware. Mittels dieser lassen sich synthetische Probandaten generieren, die wiederum dazu genutzt werden, einige der in Abschnitt 1.2 aufgestellten Anforderungen zu überprüfen.

*Implementierung  
und Anforderungs-  
evaluation*

In Kapitel 7 wird schließlich erfolgreich gezeigt, wie das in Kapitel 2 und 3 definierte Rahmenwerk dazu verwendet werden kann, das in Abschnitt 1.2 beschriebene Online-Auswertesystem mit den gegebenen Anforderungen zu implementieren. Die Implementierung setzt bei den vorsegmentierten Schichtbildern an und führt alle Operationen, also Rekonstruktion, Klassifikation und die statistische Auswertung inkrementell durch. Die Implementierung ist dabei so generisch wie möglich gehalten, so dass theoretisch auch andere bildgebende Verfahren unterstützt werden, die schichtweise Bilder erzeugen. Das System wird in der vorliegenden Arbeit als Particle Detection System (PDS) bezeichnet. Auf Basis simulierter Stahlproben mit extremem Verunreinigungsgrad wird überprüft, ob die Laufzeitanforderungen für Segmentierung, Rekonstruktion, Klassifikation und statistische Auswertung von 30 s pro Schicht eingehalten werden können. Zusätzlich wird ein zweites System Namens Particle Analysis System (PAS) entwickelt. Dieses stellt die in Kapitel 3 entwickelten explorativen Datenanalysewerkzeuge bereit. Es wird unter anderem dazu verwendet, die vorklassifizierten Trainingsdaten für die Klassifikation aus Kapitel 5 zu erstellen. In Kapitel 8 wird dann eine Zusammenfassung der erreichten Ergebnisse präsentiert.

Die mathematische Beschreibung der Gestalt von Partikeln, also ihrer Form und Größe, hat eine lange Historie. So werden in der Literatur zahlreiche Beispiele für empirische und analytische Deskriptoren angegeben, mit denen sich diese Merkmale quantifizieren lassen [14]. Dabei arbeiten viele dieser Deskriptoren auf zweidimensionalen Projektionen dreidimensionaler Partikel oder auf Partikelprofilen, die mittels Schnitten durch Festkörper mit eingebetteten Partikeln gewonnen wurden [134, S. 72 ff., 132, S. 11 ff.]. Unter Anwendung stereologischer Techniken versucht man dann, die an Stichproben erhobenen Werte dieser Deskriptoren auf das ganze Partikelkollektiv hochzurechnen [118, S. 273 ff., 133, S. 412 ff.]. Im Allgemeinen ist es aber nicht möglich, nur anhand des Profils eine Aussage über die Form oder Größe eines individuellen Partikels des Systems zu treffen. Mit dem Aufkommen moderner bildgebender Verfahren, wie der MRT, stehen aber immer häufiger auch volumetrische Datensätze ganzer Partikelsysteme zur Verfügung, die eine dreidimensionale Rekonstruktion einzelner Partikel erlauben. Diese dreidimensionalen Modelle sind der Ausgangspunkt, um mittels geeigneter dreidimensionaler Deskriptoren Merkmale, wie die spezifische Form, die Größe oder das Volumen, zu quantifizieren. Oft kann man im weiteren Verlauf der Untersuchungen anhand dieser Merkmale Rückschlüsse auf bestimmte Charakteristiken der einzelnen Partikel ziehen und diese entsprechend der Charakteristiken klassifizieren. Darüber hinaus lassen sich aber auch systematische Gestaltveränderungen erfassen und Schwankungen innerhalb verschiedener Gestaltklassen statistisch beschreiben.

*Gestalt von  
Partikeln*

In diesem Kapitel sollen verschiedene dreidimensionale Deskriptoren vorgestellt werden, mit denen sich die Gestalt von Partikeln quantifizieren lässt. Ausgangspunkt sind dabei vorsegmentierte Schichtbilder von Partikelsystemen, wie sie von bildgebenden Verfahren, wie der CT oder dem Fräsen und Abfotografieren von Werkstoffproben, erzeugt werden. In diesen Schichtbildern sind die einzelnen Partikel bereits eindeutig detektiert und segmentiert, sie müssen aber noch zu einem vollständigen Modell zusammengesetzt werden. Dafür werden in diesem Kapitel effiziente Verfahren eingeführt. Ergebnis des Einsatzes dieser Verfahren ist eine Menge von volumetrischen Pixeln (im weiteren Verlauf als Voxel bezeichnet) pro Partikel. Über die Voxelmenge werden dann Deskriptoren definiert, welche die Gestalt,

*Dreidimensionale  
Deskriptoren*

also die Größe und die Form, quantifizieren. Nicht behandelt werden zweidimensionale Deskriptoren oder Deskriptoren, die auf Texturen basieren.

## 2.1 PARTIKELREKONSTRUKTION

Um die Rekonstruktion von Partikeln durchführen zu können, wird zunächst eine formale Definition des Begriffs Partikel benötigt. In den folgenden Abschnitten wird eine solche Definition erarbeitet und anschließend ein Verfahren vorgestellt, welches die dreidimensionale Rekonstruktion von Partikeln aus den segmentierten Schichtbildern unter Verwendung dieser Definition erlaubt. Die verwendete Notation orientiert sich dabei an der von Ohser und Schladitz [99, S. 110 ff.] und Torquato [139, S. 26 ff.].

### 2.1.1 Partikeldefinition

Indikatorfunktion

Gegeben sei ein Partikelsystem  $\mathcal{X}$ , welches eine wohldefinierte Teilmenge des dreidimensionalen euklidischen Raums  $\mathbb{R}^3$  ist. Für jeden Punkt  $x \in \mathcal{X}$  des Systems lässt sich mittels der Indikatorfunktion

$$\mathbb{1}_{\mathcal{X}}(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \in \Xi \\ 0 & \text{für } x \notin \Xi \end{cases} \quad (1)$$

bestimmen, ob der Punkt  $x$  innerhalb der dispersen Phase  $\Xi$  oder der kontinuierlichen Phase  $\Xi^c = \{x \in \mathcal{X} : x \notin \Xi\}$  liegt. Weiter definiert man ein räumliches Gitter  $\mathbb{L}^3$  als

$$\mathbb{L}^3 = \left\{ x \in \mathbb{R}^3 : x = \sum_{i=1}^3 z_i u_i, z_i \in \mathbb{Z} \right\} = U\mathbb{Z} \quad (2)$$

Gittersystem

wobei  $u_1, \dots, u_3 \in \mathbb{R}^3$  eine Basis des  $\mathbb{R}^3$  formen und  $U = (u_1, \dots, u_3)$  die Matrix der Spaltenvektoren ist. Die Minkowski-Summe (siehe Formel 20)  $C = [0, u_1] \oplus \dots \oplus [0, u_3]$  der Segmente  $[0, u_i]$  zwischen dem Ursprung 0 und dem Gitterpunkt  $u_i$  wird dabei als abgeschlossene Elementarzelle  $C$  des Gitters bezeichnet. Das Volumen von  $C$  ergibt sich aus der Determinanten von  $U$ . Die Menge  $\{C + x : x \in \mathbb{L}^3\}$  überdeckt schließlich den gesamten  $\mathbb{R}^3$  [99, S. 44].

Orthorhombisch und  
kubisch primitive  
Gittersysteme

In den nachfolgenden Betrachtungen sind nur Gittersysteme von Interesse, bei denen  $U$  eine Diagonalmatrix ist. Solche Gitter bezeichnet man auch als orthorhombische primitive Gittersysteme. Die Gitterzellen eines solchen Systems bestehen jeweils aus acht Vertices, zwölf Kanten und sechs Flächen und haben die Form eines Quaders. Gilt zusätzlich  $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3$ , wobei  $\delta_i = |u_i|$  ist, spricht man von einem



kubisch primitiven Gittersystem mit Gitterabstand  $\delta$ . In diesem Fall sind die Gitterabstände entlang der Raumrichtungen gleich lang, und die einzelnen Gitterzellen haben die Form eines Würfels.

Sei nun  $C_0$  die auf den Ursprung zentrierte Elementarzelle eines Gitters  $\mathbb{L}^3$ . Dann bezeichnet

$$\tilde{\Xi} = \bigcup_{x \in \Xi \cap \mathbb{L}^3} (C_0 + x) \quad (3)$$

*Gaußsche  
Diskretisierung*

die gaußsche Diskretisierung der dispersen Phase  $\Xi$  [99, S. 46, 70, S. 56], wobei die Elemente  $x$  der Menge  $\tilde{\Xi}$  volumetrische Pixel oder auch Voxel der dispersen Phase genannt werden. Die individuellen Partikel eines Partikelsystems werden nun auf Basis von Nachbarschaftsbeziehungen zwischen Voxeln definiert und ergeben sich aus der Menge aller disjunkten Teilmengen von  $\tilde{\Xi}$ .

*Voxel*

Dazu definiert man

$$SE^{(6)} = \{ (0, 0, 0) (-1, 0, 0) (1, 0, 0) \\ (0, -1, 0) (0, 1, 0), (0, 0, -1) \\ (0, 0, 1) \} \quad (4)$$

als das Strukturelement zur Beschreibung der 6er Nachbarschaft,

$$SE^{(18)} = \{ (-1, 0, -1) (0, 0, -1) (1, 0, -1) \\ (0, -1, -1) (0, 1, -1), (-1, -1, 0) \\ (0, -1, 0) (1, -1, 0) (-1, 0, 0) \\ (0, 0, 0) (1, 0, 0) (-1, 1, 0) \\ (0, 1, 0) (1, 1, 0) (-1, 0, 1) \\ (0, 0, 1) (1, 0, 1) (0, -1, 1) \\ (0, 1, 1) \} \quad (5)$$

als das Strukturelement zur Beschreibung der 18er Nachbarschaft und

$$SE^{(26)} = \{ (-1, -1, -1) (0, -1, -1) (1, -1, -1) \\ (-1, 0, -1) (0, 0, -1) (1, 0, -1) \\ (-1, 1, -1) (0, 1, -1) (1, 1, -1) \\ (-1, -1, 0) (0, -1, 0) (1, -1, 0) \\ (-1, 0, 0) (0, 0, 0) (1, 0, 0) \\ (-1, 1, 0) (0, 1, 0) (1, 1, 0) \\ (-1, -1, 1) (0, -1, 1) (1, -1, 1) \\ (-1, 0, 1) (0, 0, 1) (1, 0, 1) \\ (-1, 1, 1) (0, 1, 1) (1, 1, 1) \} \quad (6)$$

Nachbarschaftskriterium

als das Strukturelement zur Beschreibung der 26er Nachbarn für den dreidimensionalen Fall. Weiter ist  $SE_h^{(s)}$  die Translation des Strukturelements der Nachbarschaft  $s \in \{6, 18, 26\}$  um den Punkt  $h \in \mathbb{L}^3$ , also  $SE_h^{(s)} = \{t \in SE^{(s)} : h + t\}$ . Die Nachbarn eines Voxels  $x \in \tilde{\Xi}$  bezüglich der 6er, 18er, oder 26er Nachbarschaft sind dann gegeben durch

$$\mathcal{N}_{SE^{(s)}}(x) = SE_x^{(s)} \cap \tilde{\Xi} \quad (7)$$

Zwei Voxel  $x, y \in \tilde{\Xi}$  werden als wechselseitig benachbart bezeichnet, wenn sowohl  $x \in \mathcal{N}_{SE^{(s)}}(y)$  als auch  $y \in \mathcal{N}_{SE^{(s)}}(x)$  ist. Es lässt sich zeigen, dass wechselseitige Nachbarschaft eine Äquivalenzrelation ist, da die Eigenschaften Reflexivität, Symmetrie, sowie Transitivität erfüllt sind [70, S. 9 ff.].

Partikeldefinition

Aufbauend auf diesen Definitionen lässt sich nun der Begriff des Partikels formal einführen. Ein Partikel wird definiert als endliche Voxelmengung  $\mathfrak{X} \subset \tilde{\Xi}$ , für die gilt, dass zwei beliebige Voxel  $x, y \in \mathfrak{X}$  durch einen Pfad verbunden sind, der selbst komplett in  $\mathfrak{X}$  liegt. Ein Pfad besteht dabei aus  $n + 1$  Voxeln  $p_i$  mit  $p_0 = x$  und  $p_n = y$ , so dass jedes  $p_{i+1}$  wechselseitig benachbart mit  $p_i$  im Sinne des oben eingeführten Nachbarschaftsbegriffs ist. Wird jedem Voxel der Menge  $\mathfrak{X}$  mittels der Funktion  $f : \mathfrak{X} \rightarrow \mathbb{N}$  der Bezeichner  $l \in \mathbb{N}$  zugewiesen, so dass  $\{x \in \mathfrak{X} : f(x) = l\}$  gilt, nennt man diesen Vorgang Connected Component Labeling (CCL).

Im nächsten Abschnitt wird nun ein Verfahren vorgestellt, mit dem alle disjunkten Teilmengen von  $\tilde{\Xi}$  bestimmt werden können, indem für jeden Voxel dieser als Partikel bezeichneten Mengen ein eindeutiger Bezeichner zugewiesen wird.

### 2.1.2 Connected Component Labeling

Connected Component Labeling

Aufbauend auf dem Partikelbegriff und der Definition des CCL stellt sich die Frage nach der konkreten Umbesetzung dieses Verfahrens. Es wird von folgender Situation ausgegangen. Gegeben ist die Diskretisierung  $\tilde{\Xi}$  einer dispersen Phase eines Partikelsystems. Vorausgegangen ist also die Diskretisierung durch ein geeignetes Gittersystem und die Trennung des Partikelsystems in die disperse und kontinuierliche Phase mittels der Indikatorfunktion. Dieser Vorgang wird auch als Segmentierung bezeichnet. Es gilt nun die individuellen Partikel zu identifizieren, die disjunkte zusammenhängende Voxelmengen in  $\tilde{\Xi}$  bilden. Zahlreiche Algorithmen sind bekannt, die dieses Problem lösen. Im Folgenden wird zunächst das grundlegende Prinzip am Beispiel des Multi-Phasen Algorithmus (MP) erläutert. Wie der Name bereits andeutet, muss hier die Eingabemenge mehrfach durchlaufen (gerastert) werden, bevor alle Partikel eindeutig bezeichnet sind. Die

Anzahl der Durchläufe ist dabei vorher nicht bekannt und hängt von der Form der Voxelkonfigurationen ab. Anschließend wird gezeigt, wie dieser Algorithmus durch das Speichern von Äquivalenzklassen optimiert werden kann, so dass unabhängig von den Eingabedaten nur noch zwei Durchläufe nötig sind. Durch die Wahl einer geeigneten Datenstruktur zum Speichern der Äquivalenzklassen kann lineares Laufzeitverhalten in Bezug auf die Größe der Eingabemenge erreicht werden. Schließlich wird dieser Algorithmus schrittweise erweitert, so dass er speziellen Anforderungen des Anwendungsfalls aus Abschnitt 4 genügt.

### 2.1.2.1 Multi-Phasen Algorithmus

Es folgt die Beschreibung des MP, wie er zum Beispiel von Haralick [50] eingeführt wird. Allerdings wird hier eine modifizierte Version vorgeschlagen. Statt, wie üblich, auf Binärbildern, wird der Algorithmus an dieser Stelle für die diskrete Voxelmenge  $\tilde{\Xi}$  definiert. Diese enthält, im Gegensatz zu Binärbildern, keine Voxel der kontinuierlichen Phase. Unter der Annahme, dass Partikel im Vergleich zu dem Material, in dem sie eingebettet sind, sehr klein sind, führt dieser Schritt zu einer drastischen Reduzierung des Speicherbedarfs. Als Nachbarschaftskriterium wird exemplarisch die 26er Nachbarschaft benutzt. Für andere Nachbarschaften muss das Strukturelement entsprechend angepasst werden.

Gegeben sei also die diskrete disperse Phase  $\tilde{\Xi}$  eines Partikelsystems. Neben den bisherigen Eigenschaften wird von der Menge zusätzlich gefordert, dass sie lexikographisch geordnet ist. Dabei genügen zwei Elemente  $x, y \in \tilde{\Xi}$  mit  $x = (x_i, x_j, x_k)$  und  $y = (y_i, y_j, y_k)$  der lexikographischen Ordnung  $x \leq y$  genau dann, wenn  $(x_k \leq y_k) \vee ((x_k = y_k) \wedge (x_j \leq y_j)) \vee ((x_k = y_k) \wedge (x_j \leq y_j) \wedge (x_i \leq y_i))$  ist. Weiter sei mit  $h_{\tilde{\Xi}}$  eine Datenstruktur gegeben, die jedem Voxel  $x \in \tilde{\Xi}$  einen Bezeichner  $l \in \mathbb{N}$ , geschrieben  $h_{\tilde{\Xi}}(x) \leftarrow l$ , zuordnet. Üblicherweise wird für  $h_{\tilde{\Xi}}$  eine Hashtabelle verwendet. Zu Beginn ist  $h_{\tilde{\Xi}}$  für alle Voxel mit 0 initialisiert. Schließlich sei

*Lexikographische  
Ordnung*

$$SE^{(26)} = \{ (0, 0, 0) (-1, 0, 0) (1, -1, 0) \\ (0, -1, 0) (-1, -1, 0) (0, 0, -1) \\ (-1, -1, -1) (0, -1, -1) (1, -1, -1) \quad (8) \\ (-1, 0, -1) (1, 0, -1) (-1, 1, -1) \\ (0, 1, -1) (1, 1, -1) \}$$

das Strukturelement der 26er Nachbarschaft, welches durch die festgelegte Verarbeitungsreihenfolge, basierend auf der lexikographischen Ordnung, optimiert wurde. Der Algorithmus lautet nun wie in Listing 1 angegeben. Die sortierte Voxelmenge  $\tilde{\Xi}$  wird Voxel für Vo-

---

**Algorithmus 1** Multiphasen Algorithmus.

---

```

1:  $l \leftarrow 1$ 
2: repeat
3:   for  $\forall x \in \tilde{\Xi}$  do
4:      $N \leftarrow \mathcal{N}_{SE(26)}(x)$ 
5:     if  $N = \{x\}$  and  $h_{\tilde{\Xi}}(x) = 0$  then
6:        $h_{\tilde{\Xi}}(x) \leftarrow l, l \leftarrow l + 1$ 
7:     else
8:       for  $\forall n \in N$  do
9:          $h_{\tilde{\Xi}}(n) \leftarrow \min_{\forall \hat{n} \in N} (h_{\tilde{\Xi}}(\hat{n}))$ 
10:      end for
11:    end if
12:  end for
13: until Keine Änderungen in  $h_{\tilde{\Xi}}$ 

```

---

*Multi-Phasen  
Algorithmus*

xel in lexikographischer Reihenfolge durchlaufen. Für jedes Element  $x \in \tilde{\Xi}$  wird überprüft, ob es entsprechend dem Strukturelement Nachbarn in  $\tilde{\Xi}$  gibt. Ist dies nicht der Fall, wird ein neuer provisorischer Bezeichner in  $h_{\tilde{\Xi}}$  eingetragen und ein neuer eindeutiger Bezeichner generiert. Falls es Nachbarn gibt, wird für jeden dieser Nachbarn der aktuelle Bezeichner auf den minimalen Bezeichner aller Nachbarn gesetzt. Der Algorithmus wird solange fortgesetzt, bis keine Änderungen in  $h_{\tilde{\Xi}}$  mehr vorgenommen werden. Dann ist jeder Partikel in  $\tilde{\Xi}$  mit einem eindeutigen Bezeichner versehen. Die Anzahl der Durchläufe hängt dabei von der Form der Partikel ab und ist vorher nicht bekannt.

### 2.1.2.2 *Zwei-Phasen Algorithmus*

Wie in Abschnitt 2.1.1 beschrieben, ist die Nachbarschaft zwischen Voxeln eine Äquivalenzrelation. Alle Voxel eines Partikels liegen in der gleichen Äquivalenzklasse. Ziel des in diesem Abschnitt beschriebenen Zwei-Phasen Algorithmus (ZP) ist es, diese Äquivalenzklassen zu bestimmen und dann auf Basis dieser eindeutige Bezeichner zu vergeben. Im Gegensatz zu dem MP, werden bei diesem Algorithmus lediglich zwei volle Durchläufe der diskreten Voxelmenge benötigt. Im ersten Durchgang werden provisorische Bezeichner vergeben und Äquivalenzbeziehungen festgehalten und im zweiten Durchgang dann die finalen Partikel bestimmt. Die Idee dieses Algorithmus geht dabei auf Rosenfeld und Pfaltz [115] zurück, wobei im Laufe der Zeit zahlreiche Verbesserungen vorgeschlagen wurden. So wurden unter anderem verschiedene Datenstrukturen [127, 52] eingeführt, die das Speichern der Äquivalenzklassen in Bezug auf Laufzeitverhalten und Speicherverbrauch optimieren. Im Folgenden wird eine für dreidimensionale Datensätze erweiterte Version des Algorithmus von Wu,

Otoo und Suzuki [149] auf Basis von Voxelmengen vorgestellt. Die Äquivalenzklassen werden in einer Datenstruktur Namens Union-Find festgehalten.

Mit der Union-Find Datenstruktur werden disjunkte Partitionen von Mengen verwaltet. Üblicherweise werden drei Operationen, nämlich  $\text{MAKE-SET}(x)$ ,  $\text{UNION}(x,y)$  und  $\text{FIND}(x)$  unterstützt. Die Operation  $\text{MAKE-SET}(x)$  erstellt eine neue Menge mit einem Element  $x$ , wobei  $x$  auch gleichzeitig das repräsentative Element der Menge ist. Über das repräsentative Element wird später eine disjunkte Partition der Menge identifiziert. Die Operation  $\text{FIND}(x)$  liefert das repräsentative Element derjenigen Menge, die das Element  $x$  enthält. Schließlich vereinigt die Operation  $\text{UNION}(x,y)$  diejenigen Mengen, die  $x$  beziehungsweise  $y$  als Element enthalten [28]. Das neue repräsentative Element der Menge wird dabei das kleinste Element der Menge. Mittels dieser Datenstruktur werden nun im nachfolgenden Algorithmus die Äquivalenzbeziehungen von Voxeln auf Basis der vergebenen Bezeichner verwaltet. Zur Verdeutlichung der Funktionsweise folgt ein einfaches Beispiel. Gegeben sind zwei Mengen  $B_1 = \{7,4,9,3\}$  und  $B_2 = \{5,10,2\}$  von Bezeichnern. Die zu den Bezeichnern zugehörigen Voxel liegen also in derselben Äquivalenzklasse. Das repräsentative Element von  $B_1$  ist gleich 3 und von  $B_2$  gleich 2. Es gilt also  $\forall x \in B_1 : \text{FIND}(x) = 3$  beziehungsweise  $\forall x \in B_2 : \text{FIND}(x) = 2$ . Stellt sich nun heraus, dass das Voxel mit dem Bezeichner 4 aus Menge  $B_1$  mit dem Voxel mit dem Bezeichner 10 aus der Menge  $B_2$  benachbart ist, dann existiert nach der Definition aus Abschnitt 2.1.1 auch ein Pfad zwischen allen anderen Voxeln der Mengen  $B_1$  und  $B_2$ , der komplett in  $B_1 \cup B_2$  liegt. Diese Beziehung wird durch  $\text{UNION}(4,10)$  abgebildet. Das neue repräsentative Element von  $B_1 \cup B_2$  ist dann 2. Es gilt also  $\forall x \in B_1 \cup B_2 : \text{FIND}(x) = 2$ . Auf die Implementierung dieser drei Operationen soll an dieser Stelle nicht eingegangen werden, sondern stattdessen auf den Artikel von Wu, Otoo und Suzuki [149] verwiesen werden, in dem eine detaillierte Beschreibung mit Pseudocode der Operationen zu finden ist.

*Union-Find  
Datenstruktur*

Unter Verwendung der Union-Find Datenstruktur kann nun der ZP, wie in Listing 2 dargestellt, angegeben werden. Zunächst werden in Phase 1 (Zeile 2) die Voxel mit provisorischem Bezeichner versehen und die Äquivalenzen zwischen diesen Bezeichnern erfasst. Dazu wird die sortierte Voxelmenge  $\tilde{\Xi}$  Voxel für Voxel in lexikographischer Reihenfolge durchlaufen. Für jedes Element  $x \in \tilde{\Xi}$  wird überprüft, ob es entsprechend dem Strukturelement Nachbarn in  $\tilde{\Xi}$  gibt. Ist dies nicht der Fall, wird ein neuer provisorischer Bezeichner in  $h_{\tilde{\Xi}}$  eingetragen und eine neue Menge in der Union-Find Struktur mit dem provisorischen Bezeichner als repräsentatives Element angelegt. Falls aber Nachbarn vorhanden sind, wird für  $x$  der minimale Bezeichner aller Nachbarn in  $h_{\tilde{\Xi}}$  eingetragen. Da alle Nachbarn von  $x$

*Zwei-Phasen  
Algorithmus*

**Algorithmus 2** Zwei-Phasen Algorithmus.

---

```

1: procedure TwOPHASE( $\tilde{\Xi}$ )
2:   for  $\forall x \in \tilde{\Xi}$  do ▷ Phase 1
3:      $N \leftarrow \mathcal{N}_{SE(2\delta)}(x)$ 
4:     if  $N = \{x\}$  then
5:        $h_{\tilde{\Xi}}(x) \leftarrow l, l \leftarrow l + 1$ 
6:       MAKE-SET( $h_{\tilde{\Xi}}(x)$ )
7:     else
8:        $h_{\tilde{\Xi}}(x) \leftarrow \min_{\forall \hat{n} \in N} (h_{\tilde{\Xi}}(\hat{n}))$ 
9:       for  $\forall n \in N$  do
10:        UNION( $h_{\tilde{\Xi}}(x), h_{\tilde{\Xi}}(n)$ )
11:      end for
12:    end if
13:  end for
14:  for  $\forall x \in \tilde{\Xi}$  do ▷ Phase 2
15:     $h_{\tilde{\Xi}}(x) \leftarrow \text{FIND}(h_{\tilde{\Xi}}(x))$ 
16:  end for
17:  return  $h_{\tilde{\Xi}}(x)$ 
18: end procedure

```

---

in der gleichen Äquivalenzklasse sind, wird diese Beziehung mittels der UNION-Operation in der Union-Find Datenstruktur festgehalten. Sind alle Voxel in  $\tilde{\Xi}$  durchlaufen, beginnt Phase 2 (Zeile 14). In dieser Phase werden alle provisorischen Bezeichner durch die zugehörigen repräsentativen Elemente ersetzt. Bezeichner, die äquivalent zueinander sind, werden also auf den gleichen Bezeichner gesetzt. Dazu wird die FIND-Operation der Union-Find Datenstruktur verwendet. Sind alle Voxel durchlaufen, sind die Partikel im Datensatz eindeutig bestimmt. Voxel mit dem gleichen Bezeichner gehören zu einem Partikel. Mittels der Hashtabelle  $h_{\tilde{\Xi}}$  lassen sich dann die Partikel in einzelne Mengen partitionieren.

2.1.2.3 *Modifikationen*

*Kontinuierliche  
Rekonstruktion*

Damit steht ein leistungsfähiger Algorithmus zur Verfügung, um Partikel nach der Definition aus Abschnitt 2.1.1 zu rekonstruieren. Durch die Definition des Algorithmus für die diskrete disperse Phase eines Partikelsystems, in der nur während der Segmentierung als eindeutige Teile eines Partikels identifizierte Voxel enthalten sind, findet eine starke Reduktion der Datenmenge statt. Allerdings können die rekonstruierten Partikel erst weiterverarbeitet werden, wenn die zweite Phase des Algorithmus komplett abgeschlossen ist. In gewissen Anwendungsszenarien kann es aber sinnvoll sein Partikel schon während der Datengewinnung kontinuierlich zu rekonstruieren und

zu analysieren, insbesondere wenn auf Basis statistischer Auswertungen der rekonstruierten Partikel der Bildgewinnungsprozess gesteuert werden soll. Beispiele für solche Anwendungsszenarien sind Verfahren, bei denen die Bildgewinnung sequentiell erfolgt, wie bei der MRT oder dem sequentiellen, kontinuierlichen Abfräsen und Fotografieren von Werkstoffproben. Bei solchen Verfahren kann die Bildsegmentierung und Partikelrekonstruktion zeitlich parallel, um eine Schicht versetzt, zur Bildaufnahme durchgeführt werden. Sobald dann ein Partikel vollständig rekonstruiert ist, werden seine Form und Größe statistisch quantifiziert und in die Menge der auswertbaren Daten aufgenommen. Auf der anderen Seite ist der ZP nicht effizient, wenn bereits der komplette segmentierte Bilddatensatz vorliegt, in dem die Partikel rekonstruiert werden sollen. So nutzt die präsentierte Version des Algorithmus nur einen Prozessorkern und schöpft nicht die Möglichkeiten moderner Multiprozessor-Architekturen aus. Für diese beiden Szenarien werden in diesem Abschnitt entsprechende Erweiterungen vorgestellt, begonnen mit dem Verfahren zur kontinuierlichen Rekonstruktion von Partikeln parallel zur Bildaufnahme. Das Verfahren wird als Online Zwei-Phasen Algorithmus (OZP) bezeichnet.

*Online Zwei-Phasen  
Algorithmus*

Der OZP ist nach dem Erzeuger-Verbraucher Muster zu implementieren. Der Erzeuger-Prozess ist die Bildaufnahme und Bildsegmentierung, welche die diskrete disperse Phase des Partikelsystems bestimmt und diese Daten schichtweise an das Ende einer Warteschlange schreibt. Der OZP selbst ist der Verbraucher, der die Daten Schicht für Schicht aus der Warteschlange entgegennimmt und die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Voxeln berechnet. Sobald ein Partikel als vollständig rekonstruiert erkannt wurde, wird die entsprechende Voxelmenge an den nachfolgenden Prozess weitergegeben. Bleibt die Frage, wie man überprüfen kann, wann ein Partikel vollständig rekonstruiert ist. Folgende Definition wird verwendet. Ein Partikel ist vollständig rekonstruiert, wenn es auf der aktuellen Schicht keine Voxel gibt, die mit Voxeln des betrachteten Partikels der vorherigen Schicht benachbart sind. Angenommen der OZP ist bis Schicht  $t - 1$  gelaufen. Ein Partikel, welches bis zu Schicht  $t - 1$  identifiziert wurde, ist eine Menge  $\mathfrak{X} \subset \tilde{\mathfrak{E}}$  von Voxeln, so dass  $\forall x \in \mathfrak{X} : \text{FIND}(x) = r$  gilt, wobei  $r$  das konstante repräsentative Element des Partikels ist. Wird nun der Zwei-Phasen Algorithmus für Schicht  $t$  fortgesetzt, dann ändert sich die Anzahl der Voxel, deren Bezeichner auf das repräsentative Element  $r$  verweisen, nicht, wenn  $\mathfrak{X}$  vollständig erfasst wurde. Um also alle vollständig erfassten Partikel zwischen zwei Schichten zu detektieren, müssen jeweils die Anzahl aller Voxel mit gleichem repräsentativen Element der vorherigen Schicht  $t - 1$  und der aktuellen Schicht  $t$  verglichen werden. Im folgenden Algorithmus wird die Anzahl der Voxel mit gleichem repräsentativen Element in einer weiteren Hashtabelle, genannt  $r_{t-1}$  für die vorherige und  $r_t$ , für

*Erzeuger-  
Verbraucher*

*Vollständig erfasstes  
Partikel*

die aktuelle Schicht, gespeichert. Die Operation  $\text{COMP}(r_{t-1}, r_t)$  liefert dann die Menge der repräsentativen Elemente zurück, bei denen sich die Anzahl der zugehörigen Voxel nicht geändert hat. Um den Algorithmus komplett angeben zu können, wird an dieser Stelle noch die threadsichere Warteschlange mit ihren Operationen definiert. Auf die konkrete Implementierung wird aber nicht eingegangen, sondern auf die einschlägige Literatur verwiesen [145, 54]. Die Warteschlange, bezeichnet als  $Q$ , besitzt folgende Operationen.  $\text{POP}$  entfernt das oberste Element der Schlange und gibt dieses zurück. Im Unterschied dazu gibt  $\text{TOP}$  das oberste Element nur zurück, ohne es zu entfernen. Schließlich liefert  $\text{SIZE}$  die Anzahl der Elemente in der Schlange. Der Algorithmus in Pseudocode ist in Listing 3 abgebildet.

---

**Algorithmus 3** Online Zwei-Phasen Algorithmus.
 

---

```

1: while NOTDONE do
2:   if SIZE(Q) < 2 then
3:     WAIT
4:   end if
5:    $\tilde{\Xi}_{t-1} \leftarrow \text{POP}(Q), \tilde{\Xi}_t \leftarrow \text{TOP}(Q)$ 
6:    $\tilde{\Xi} \leftarrow \tilde{\Xi} \cup \tilde{\Xi}_t$ 
7:   for  $\forall x \in \tilde{\Xi}_{t-1} \cup \tilde{\Xi}_t$  do
8:      $N \leftarrow SE_x^{(2\delta)} \cap (\tilde{\Xi}_{t-1} \cup \tilde{\Xi}_t)$ 
9:     if  $N = \{x\}$  then
10:       $h_{\tilde{\Xi}}(x) \leftarrow l, l \leftarrow l + 1$ 
11:      MAKE-SET( $h_{\tilde{\Xi}}(x)$ )
12:     else
13:       $h_{\tilde{\Xi}}(x) \leftarrow \min_{\forall \hat{n} \in N} (h_{\tilde{\Xi}}(\hat{n}))$ 
14:      for  $\forall n \in N$  do
15:        UNION( $h_{\tilde{\Xi}}(x), h_{\tilde{\Xi}}(n)$ )
16:      end for
17:     end if
18:   end for
19:   for  $\forall x \in \tilde{\Xi}_{t-1} \cup \tilde{\Xi}_t$  do
20:      $r_t(\text{FIND}(h_{\tilde{\Xi}}(x))) \leftarrow r_t(\text{FIND}(h_{\tilde{\Xi}}(x))) + 1$ 
21:   end for
22:   for  $\forall r \in \text{COMP}(r_{t-1}, r_t)$  do
23:     for  $\forall x \in \tilde{\Xi}$  do
24:       if  $\text{FIND}(h_{\tilde{\Xi}}(x)) = r$  then
25:          $h_{\tilde{\Xi}}(x) \leftarrow r$ 
26:       end if
27:     end for
28:   end for
29:    $r_{t-1} \leftarrow r_t$ 
30: end while

```

---



Der Algorithmus läuft so lange, bis der Erzeuger-Prozess ein definiertes Stop-Signal sendet, mit dem angezeigt wird, dass alle Daten verarbeitet sind. Sobald mehr als zwei Schichten in der Warteschlange  $Q$  sind, beginnt das Bestimmen der provisorischen Bezeichner. Dafür werden zunächst alle Voxel der diskreten dispersen Phase der vorherigen Schicht, bezeichnet als  $\tilde{\Xi}_{t-1}$ , und der aktuellen Schicht, bezeichnet als  $\tilde{\Xi}_t$ , aus der Schlange geladen. Die vorherige Schicht  $\tilde{\Xi}_{t-1}$  wird dabei durch die POP Operation aus der Schlange entfernt, so dass im nächsten Durchlauf  $\tilde{\Xi}_t$  zu  $\tilde{\Xi}_{t-1}$  wird. Die vollständige diskrete disperse Phase bis zur aktuellen Schicht ergibt sich aus der Vereinigung von  $\tilde{\Xi}$  und  $\tilde{\Xi}_t$ , wobei  $\tilde{\Xi}$  beim ersten Durchlauf mit der leeren Menge initialisiert ist. Auf  $\tilde{\Xi}_t \cup \tilde{\Xi}_{t-1}$  wird dann in Zeile 7 bis 18 der bereits bekannte ZP aus Abschnitt 2.1.2.2 ausgeführt. Ist dieser abgeschlossen, wird die Anzahl der Voxel für jedes der bis zum jetzigen Zeitpunkt bestimmten Partikel berechnet und in der Tabelle  $r_t$  festgehalten (siehe Zeile 20). Durch den Vergleich mit der Tabelle der vorherigen Schicht  $r_{t-1}$ , die beim ersten Durchlauf ebenfalls für alle Bezeichner mit 0 initialisiert ist, werden dann die repräsentativen Elemente der vollständig rekonstruierten Partikel bestimmt und schließlich jedem Voxel der fertigen Partikel der finale Bezeichner in  $h_{\tilde{\Xi}}$  zugewiesen. In der letzten Operation wird die Tabelle  $r_{t-1}$  mit  $r_t$  überschrieben, und der nächste Durchlauf startet. Die zweite Phase des Algorithmus findet also nicht mehr am Ende des kompletten Durchlaufs statt, sondern wird nach jeder Schicht ausgeführt (siehe Zeile 19 bis 28). Um den Algorithmus zu beschleunigen, können die Voxel, die zu einem fertigen Partikel gehören, aus der Menge der zu verarbeiteten Voxel gelöscht werden, so dass in  $\tilde{\Xi}$  nur Voxel übrigbleiben, die zu unfertigen Partikeln gehören.

*Beschreibung des  
OZP*

In einem letzten Szenario, welches im Folgenden betrachtet werden soll, liegt die diskrete disperse Phase  $\tilde{\Xi}$  in Form von  $n$  Schichtbildern vor dem Start des Algorithmus vollständig vor. Im Gegensatz zum oben beschriebenen OZP muss der Algorithmus also nicht auf neue Daten warten, sondern kann den kompletten Datensatz auf einmal in den Speicher laden. Dabei macht man sich wieder zunutze, dass nur die Voxel der diskreten dispersen Phase  $\tilde{\Xi}$  verarbeitet werden müssen. Voxel der kontinuierlichen Phase werden erst gar nicht eingelesen, so dass der Algorithmus auch bei sehr großen Partikelsystemen anwendbar bleibt. Wenn also im Folgenden von Schichtbildern die Rede ist, sind damit die Voxel der diskreten dispersen Phase gemeint, die in einem Schichtbild identifiziert und segmentiert wurden. In einem solchen Fall lässt sich der ZP stark beschleunigen, indem der gesamte Datensatz  $\tilde{\Xi}$  in  $b + 1$  Datenblöcke  $B_0$  bis  $B_b$  mit jeweils  $k = n / (b + 1)$  Schichten aufgeteilt und diese dann parallel verarbeitet werden. Der eigentliche Ablauf des parallelen Zwei-Phasen Algorithmus (PZP) ist in Listing 4 grob skizziert. Für jeden Block  $B_i$  mit  $i = 0, \dots, b$  wird der normale ZP parallel gestartet (siehe Zeile 2 bis 4) und an der

*Paralleler  
Zwei-Phasen  
Algorithmus*

**Algorithmus 4** Paralleler Zwei-Phasen Algorithmus.

---

```

1: procedure PARALLELTWOPHASE( $B_0, \dots, B_b$ )
2:   parallel for  $i \leftarrow 0, b$ 
3:      $h_{B_i} \leftarrow$  TWOPHASE( $B_i$ )
4:   end parallel for
5:   barrier
6:   for  $i \leftarrow 0, b$  do
7:      $h_B \leftarrow$  MERGE( $h_B, h_{B_i}$ )
8:   end for
9:   for  $i \leftarrow 1, b$  do
10:    for  $\forall x \in B_{(i-1)k} \cup B_{i0}$  do
11:       $N \leftarrow SE_x^{(26)} \cap (B_{(i-1)k} \cup B_{i0})$ 
12:      for  $\forall n \in N$  do
13:        UNION( $\min_{\forall \hat{n} \in N} (h_B(\hat{n})), h_B(n)$ )
14:      end for
15:    end for
16:  end for
17:  for  $\forall x \in \bigcup_{i=0, \dots, b} B_i$  do
18:     $h_B(x) \leftarrow$  FIND( $h_B(x)$ )
19:  end for
20:  return  $h_B$ 
21: end procedure

```

---

Speicherbarriere gewartet, bis alle Instanzen des Algorithmus beendet sind. Die vorläufigen Ergebnisse  $h_{B_i}$  mit den eindeutigen Bezeichnern der Partikel im jeweiligen Block  $B_i$  werden dann in eine große Tabelle  $h_B$  kopiert. Diese Operation wird durch die in Zeile 7 angegebene MERGE-Operation zusammengefasst. Anschließend wird der Zusammenhang zwischen der letzten Schicht  $B_{(i-1)k}$  des Blocks  $B_{i-1}$  und der ersten Schicht  $B_{i0}$  des Blocks  $B_i$  mit  $i = 1, \dots, b$  detektiert. Die Äquivalenzen werden in der bereits vorgestellten Union-Find Datenstruktur gespeichert (Zeile 9 bis 16). Schließlich werden in einem letzten Schritt die endgültigen Bezeichner für alle Voxel  $\bigcup_{i=0, \dots, b} B_i$  in die Tabelle  $h_B$  eingetragen.

## 2.1.3 Laufzeit

Abschließend soll an dieser Stelle die Laufzeit der vorgestellten Verfahren empirisch evaluiert werden. Dabei steht besonders der OZP im Fokus, da dieser beim Einsatz zur Steuerung des Bildgewinnungsprozesses echtzeitfähig sein muss. Stellt sich die Frage, wie Echtzeit in diesem Zusammenhang definiert wird. Wie noch genauer in Abschnitten 4.2 und 7.1 besprochen, ist das gesamte Analysesystem,

welches im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wird, nach dem Pipes- und Filter-Design Muster modelliert. Jede Komponente des Systems verarbeitet die Ergebnisse der vorherigen Pipeline-Stufe und leitet das Ergebnis an die nachfolgende Stufe weiter. Jede Stufe besitzt dabei eine eigene Warteschlange, in der die Ergebnisse der vorherigen Stufe zwischengespeichert werden, falls der jeweilige Verarbeitungsschritt noch nicht abgeschlossen ist. Trotz des sequentiellen Aufbaus des Systems laufen die einzelnen Komponenten also parallel zueinander. Dabei führen die einzelnen Komponenten, also die Bildgewinnung, die Bildsegmentierung, die Datenvorverarbeitung, die dreidimensionale Rekonstruktion, die Klassifizierung und die statistische Auswertung, ihre jeweiligen Operationen mit einer Laufzeit von  $T_{Rec}$  für die Bildgewinnung,  $T_{Seg}$  für die Bildsegmentierung,  $T_{Pre}$  für die Vorverarbeitung  $T_{Ccl}$  für die dreidimensionale Rekonstruktion,  $T_{Clas}$  für die Klassifizierung und  $T_{Sta}$  für die statistische Auswertung durch. Echtzeit bedeutet in diesem Zusammenhang, dass das Ergebnis für eine Schicht  $i - 1$  spätestens dann vorliegt, wenn die Bildgewinnungsoperation für die nachfolgende Schicht  $i$  abgeschlossen ist. Konkret muss also für eine Probe mit  $n + 1$  Schichten  $T_{Seg_{i-1}} + T_{Pre_{i-1}} + T_{Ccl_{i-1}} + T_{Clas_{i-1}} + T_{Stat_{i-1}} < T_{Rec_{i-1}} + T_{Rec_i}$  für alle  $i = 1, \dots, n$  gelten. Das heißt, dass die Ergebnisse der statistischen Auswertung, auf Basis derer die weitere Vorgehensweise entschieden wird, spätestens nach Beendigung der Bildgewinnungsoperation der darauf folgenden Schicht verfügbar sein müssen. Bei zerstörungsfreien Bildgewinnungsprozessen, wie beispielsweise der MRT, ist eine Verletzung dieses Kriteriums nicht kritisch, da eine bestimmte Schicht erneut verarbeitet werden kann. Bei einem nicht-zerstörungsfreien Bildgewinnungsprozess, wie dem Fräsen und Abfotografieren von Werkstoffproben, wird durch das Einhalten des Echtzeitkriteriums aber sichergestellt, dass zwischen einer Entscheidung über die weitere Vorgehensweise und der Umsetzung dieser Entscheidung nur eine Schicht liegt. Im Folgenden wird die Laufzeit der dreidimensionalen Rekonstruktion  $T_{Ccl}$  für den ZP, OZP und PZP untersucht. Die anderen Komponenten werden in Abschnitt 7.1 analysiert.

*Echtzeit*

Um möglichst reale Bedingungen abzubilden, wurde wie folgt vorgegangen. Die Messungen wurden anhand von Daten durchgeführt, die im Rahmen des in Abschnittes 4.2 beschriebenen Anwendungsszenarios gewonnen wurden. Insgesamt 59 Stahlproben wurden auf Verunreinigungen, wie nicht-metallische Einschlüsse oder Gasporen, untersucht und sowohl der durchschnittliche als auch der maximale Verunreinigungsgrad ausgerechnet. Der Verunreinigungsgrad ist dabei das Verhältnis von Partikelvolumen zu kontinuierlicher Phase pro Liter. Diese Werte wurden dann dazu verwendet, den in Abschnitt 6.3 beschriebenen Simulator zu parametrisieren, um Proben mit einem leichten, einem mittlerem und einem schweren Verunreinigungsgrad zu generieren. Die Analyse der Laufzeit erfolgt am

*Simulierte Proben*

Laufzeitergebnis

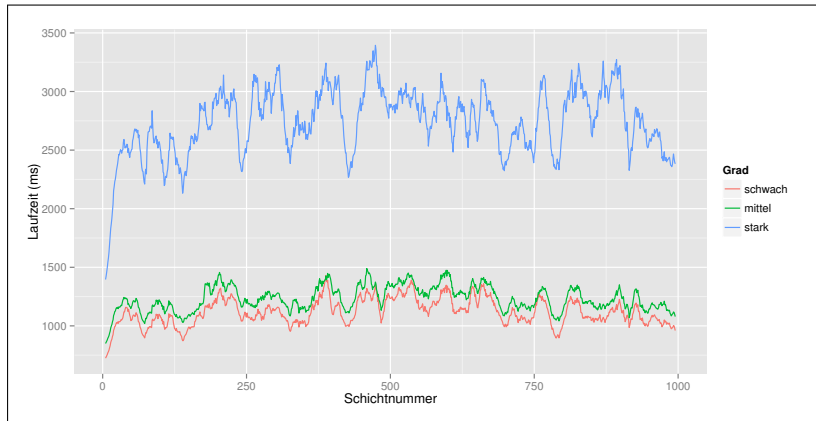
Beispiel dieser synthetischen Proben. Der durchschnittliche und maximale Verunreinigungsgrad der 59 Proben beträgt  $66.51 \text{ mm}^3 \text{ L}^{-1}$  und  $131.49 \text{ mm}^3 \text{ L}^{-1}$ . Diese Werte wurden jeweils zur Simulation der Proben mit leichtem und mittlerem Verunreinigungsgrad verwendet. Für die Probe mit einer extremen Verunreinigung wurde das doppelte des maximal gemessenen Verunreinigungsgrades, also  $229.01 \text{ mm}^3 \text{ L}^{-1}$ , angenommen. Alle simulierten Proben haben eine Dimension von  $244 \text{ mm} \times 100 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ , wobei für das bei der Diskretisierung gewählte Gittersystem  $\delta_1 = 20 \mu\text{m}$ ,  $\delta_2 = 20 \mu\text{m}$  und  $\delta_3 = 10 \mu\text{m}$  angenommen wurde. Gemessen wurde bei den Algorithmen die durchschnittliche Laufzeit pro Schicht in Millisekunden. Da beim ZP und beim PZP das Messen der Laufzeit pro Schicht nicht direkt möglich ist, wurde die Gesamtlaufzeit gemessen und durch die Anzahl der Schichten geteilt. Beim OZP hingegen wurde die Laufzeit pro Schicht gemessen und dann über alle Schichten gemittelt. Für den PZP wurde die Messung jeweils mit 2, 8 und 16 Threads wiederholt. Alle Messungen wurden auf einem Testsystem mit Intel Xeon CPU E5-2680 mit jeweils acht 2.70 GHz Kernen und 64 Gigabyte Arbeitsspeicher durchgeführt. Tabelle 1 fasst die Ergeb-

**Tabelle 1.:** Laufzeiten der CCL-Algorithmen.

Grad	ZP	PZP <sub>2</sub>	PZP <sub>8</sub>	PZP <sub>16</sub>	OZP
Schwach	64.10 ms	38.11 ms	16.47 ms	15.91 ms	1115.69 ms
Mittel	134.20 ms	78.92 ms	34.69 ms	35.86 ms	1237.06 ms
Stark	242.41 ms	142.36 ms	58.94 ms	60.72 ms	2734.59 ms

nisse zusammen. Dabei gibt „Grad“ den Grad der Verunreinigung an, wobei „Schwach“ der ersten, „Mittel“ der zweiten und „Stark“ der dritten Probe entspricht. Man sieht, dass der OZP ca. 10 mal langsamer ist als der normale ZP. Wie bereits erwähnt, liegt es vor allem daran, dass die eigentliche zweite Phase des Algorithmus nach jeder Schicht durchlaufen werden muss, um die komplett rekonstruierten Defekte zu detektieren (siehe Algorithmus 3 Zeile 19 bis 28). Trotzdem liegt die Laufzeit pro Schicht bei der stark verschmutzten Probe für den OZP immer noch unter 3000 ms. Schaut man sich die Laufzeit aller 1000 Schichten des OZPs an (siehe Abbildung 1), sieht man, dass die Laufzeiten pro Schicht für die stark verunreinigte Probe mit einer Standardabweichung von ca. 500 ms um einen Wert von ca. 2700 ms schwanken. Dabei wird für keine Schicht eine Laufzeit von 3500 ms überschritten. Unter den gegebenen Umständen kann die Laufzeit des  $T_{Ozp}$  also, wenn man konservativ vorgeht und einen Sicherheitspuffer berücksichtigt, auf das Doppelte der maximalen Laufzeit für die Verarbeitung einer Schicht bei der Probe mit extremem Verunreinigungsgrad gesetzt werden. Es ergibt sich ein Wert von  $T_{Ozp} = 7000 \text{ ms}$ .

Abbildung 1.: Laufzeit des OZP pro Schicht aufgetragen.



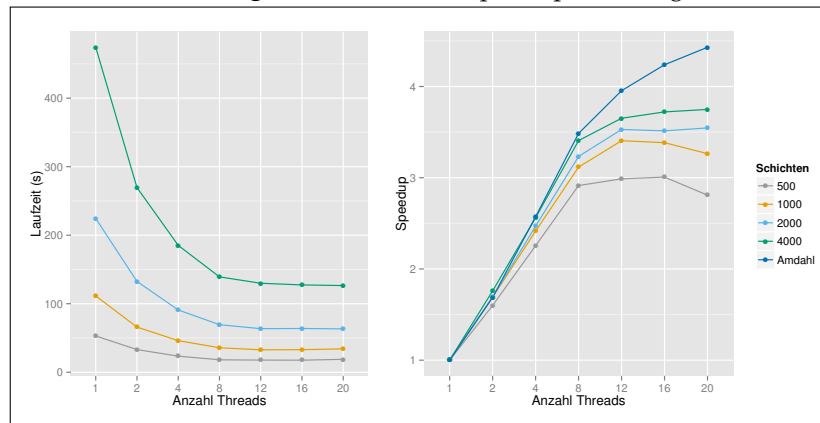
Ist das Detektieren von fertigen Partikeln zur Laufzeit nicht notwendig, kann die Situation drastisch verbessert werden. Für die stark verschmutzte Probe lässt sich beim ZP die Laufzeit auf unter 300 ms pro Schicht bringen. Liegen alle Daten vor der Auswertung vor (Offline-Betrieb), lässt sich durch Verwendung des PZP die Geschwindigkeit nochmals steigern. Dies soll im Folgenden genauer untersucht werden. Dazu wird zunächst der Begriff Speedup als

*Speedup*

$$S(p) = \frac{T_1}{T_p} \quad (9)$$

definiert, wobei  $T_p$  jeweils die Laufzeit des Algorithmus mit  $p$  Threads ist [54, S. 13 ff.]. Wenn der Algorithmus linear skaliert, dann gilt  $S(p) = p$ . Untersucht werden soll nun der Speedup des PZP im Vergleich zum ZP für einen kompletten Probendurchlauf. Dazu wird ein neuer Testdatensatz, bestehend aus vier Proben, erstellt. Folgende Parameter wurden bei der Simulation verwendet. Der Grad der Verunreinigung wurde für alle vier Proben auf  $131.49 \text{ mm}^3 \text{ L}^{-1}$  gesetzt. Für die Abmessung und das Gittersystem wurden die gleichen Werte wie für die Untersuchung des OZP verwendet. Lediglich die Abmessung in z-Richtung unterscheidet sich. Hier wurden für die vier Proben jeweils 5 mm, 10 mm, 20 mm und 40 mm angesetzt. Es ergeben sich also bei dem verwendeten Gitter Proben mit 500, 1000, 2000 und 4000 Schichten. Abbildung 2 fasst die Ergebnisse der Auswertung zusammen. Auf der linken Seite ist die Laufzeit in Sekunden für alle Proben gegen die Anzahl der verwendeten Threads aufgetragen. Für die Messung mit einem Thread wird dabei der ZP verwendet, für alle anderen der PZP mit der jeweiligen Anzahl an Threads. Für alle Proben scheint das Problem, wenn auch nicht linear, bis zur Verwendung von 8 Threads zu skalieren. Ab dann fällt die Laufzeitoptimierung für jeden weiteren Thread sehr gering aus. Genauer lässt sich dieser Sachverhalt in der rechten Graphik erkennen. Hier wird der Speedup gegen die Anzahl der verwendeten Threads aufgetragen. Ab 12 Threads bleibt der Speedup im Vergleich zu den vorherigen Mes-

Abbildung 2.: Laufzeit und Speedup Messungen.



sungen konstant und nimmt im weiteren Verlauf für die Proben mit 500 beziehungsweise 1000 Schichten sogar wieder ab. Das liegt zum einen daran, dass das Testsystem nur mit 8 physikalischen Prozessoren ausgestattet ist. Zum anderen wird ab 12 Threads der Einfluss des sequentiellen Anteils des PZP an der Laufzeit immer größer. Unter Anwendung des Gesetzes von Amdahl [3] lässt sich dieser Effekt genauer untersuchen und schließlich sogar eine obere Abschätzung für den maximalen Speedup angeben. Schreibt man die Zeit  $T_p$ , die ein Algorithmus bei einer Ausführung von  $p$ -Threads benötigt, als

*Gesetz von Amdahl*

$$T_p = T_1 \left( (1 - f) + \frac{f}{p} \right) , \quad (10)$$

ergibt sich für den Speedup

$$S(p) = \frac{1}{(1 - f) + \frac{f}{p}} . \quad (11)$$

Dabei ist  $f$  der Anteil des Algorithmus, der parallel und  $1 - f$  der Anteil, der seriell ausgeführt wird. Wie in Abschnitt 2.1.2.3 beschrieben, besteht der PZP aus einem parallelen und einem sequentiellen Teil. Im parallelen Teil wird pro Thread ein dreidimensionaler Block verarbeitet. Im sequentiellen Teil werden dann die Schnittstellen der einzelnen Blöcke auf Nachbarschaft untersucht. Es gilt nun den Anteil  $f$  am Algorithmus konkret zu beziffern. Dazu wird der Speedup zwischen einem und zwei Threads  $S(2) = T_1/T_2$  ausgerechnet, in 11 eingesetzt und nach  $f$  aufgelöst. Es ergibt sich

$$f = \frac{2(S(2) - 1)}{S(2)} . \quad (12)$$

Für  $S(2)$  wird der Mittelwert des Speedups aller Testproben herangezogen. Dieser liegt bei 1.685. Mit diesem Wert beträgt der parallele Anteil am Algorithmus  $f = 0.813$  und der serielle Anteil

$1 - f = 0.187$ . Der maximale theoretische Speedup beträgt also, wenn die Anzahl der Threads  $p$  gegen unendlich läuft,

$$\begin{aligned}\lim_{p \rightarrow \infty} S(p) &= \frac{1}{(1 - f) + \frac{f}{p}} \\ &= \frac{1}{(1 - f)} \\ &= \frac{1}{0.187} \\ &= 5.346.\end{aligned}$$

In Abbildung 2 ist in der rechten Graphik der theoretische Speedup für die ersten 20 Threads zusätzlich eingezeichnet (Amdahl). Man kann gut erkennen, dass ab ca. 12 Threads bei einem Speedup von 4 eine Sättigung stattfindet. Dieses Verhalten deckt sich mit dem Verhalten der Messdaten.

*Maximaler Speedup*

## 2.2 GESTALTANALYSE

Nachdem im vorherigen Abschnitt gezeigt wurde, wie einzelne Partikel innerhalb der diskreten Phase eines Partikelsystems detektiert und rekonstruiert werden können, sollen nun statistische Merkmale eingeführt werden, mit denen sich die Form und Größe dieser Partikel quantifizieren lassen. Diese Merkmale werden im Folgenden als Gestaltdeskriptoren oder auch einfach nur als Deskriptoren bezeichnet.

Allgemein sind Gestaltdeskriptoren mathematische Funktionale, die spezifische Eigenschaften eines Partikels in numerische Werte überführen. Je nachdem, welche Eigenschaften erfasst werden und für welche Dimension die Deskriptoren definiert sind, kann man sie in verschiedene Klassen unterteilen. Man unterscheidet grob zwischen Deskriptoren, die auf zweidimensionalen und solchen, die auf dreidimensionalen Partikeln definiert sind. Die Untersuchung von zweidimensionalen Deskriptoren hat dabei eine lange wissenschaftliche Tradition, und zahlreiche Veröffentlichungen sind zu dem Thema erschienen. Einen Überblick über die verschiedenen Verfahren liefern Beddow [14] und Zhang und Lu [151]. Die Gestaltanalyse von dreidimensionalen Partikeln ist hingegen eine jüngere wissenschaftliche Disziplin. Erst mit dem Aufkommen von leistungsfähigeren volumetrischen bildgebenden Verfahren, wie dem CT oder der MRT, ist das Interesse an diesen Techniken gestiegen. Eine ausführliche Zusammenfassung der gängigen Verfahren ist in der Dissertation von Martinues-Ortiz [89, S. 22 ff.] und dem Artikel von Kazmi, You und Zhang [69] zu finden. Abgesehen von der Dimensionalität kann man

*Klassen von  
Deskriptoren*

Gestaltdeskriptoren auch dadurch unterscheiden, ob bei der Berechnung die Kontur oder aber die gesamte Region des Partikels berücksichtigt wird [151]. Dabei sind konturbasierte Methoden in der Regel sensibler für kleine Änderungen. Sie sind also besser dafür geeignet, kleine Variationen der Form zu detektieren. Im Gegensatz dazu sind regionbasierte Verfahren robuster und weniger anfällig für Rauschen. Im zweidimensionalen Fall wird die Kontur als Rand und die Region als Innengebiet bezeichnet, während man im dreidimensionalen Fall von Oberfläche und Volumen spricht. Nach Zhang und Lu [151] lässt sich diese Unterteilung noch weiter verfeinern, indem man einbezieht, ob die Form als Ganzes untersucht wird, oder man die Partikel in Primitive aufteilt, über die dann jeweils distinktive Deskriptoren berechnet werden. Solche Deskriptoren werden als globale beziehungsweise strukturelle Deskriptoren bezeichnet.

*Invariant bezüglich  
Translation*

In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich dreidimensionale Deskriptoren beschrieben, wobei diese sowohl in der globalen als auch in der strukturellen Variante vorkommen. Es wird also implizit davon ausgegangen, dass alle betrachteten Partikel eine dreidimensionale räumliche Ausdehnung haben. Alle Deskriptoren sollen zudem invariant bezüglich Translation sein. Das heißt, dass der Wert des Deskriptors nicht von der Lage des Partikels im Raum abhängt. Erst dadurch wird es möglich, Deskriptoren verschiedener Partikel zu vergleichen. Teilweise sind die vorgestellten Deskriptoren sogar invariant bezüglich der Rotation und der Skalierung. Die Ausrichtung im Raum und die Größe des Partikels beeinflussen den Wert des Deskriptors also nicht. In manchen Fällen können aber Ausrichtung und Größe des Partikels selbst wichtige Charakteristika zum Klassifizieren darstellen. Deshalb werden diese Eigenschaften nicht strikt gefordert. Alle Deskriptoren werden dabei auf Basis diskreter Voxelmengen berechnet. Eine Umwandlung in andere Primitiven, wie Dreiecksnetze, findet nicht statt. Dadurch wird zum einen der Effizienzverlust durch die Transformation vermieden und zum anderen kein zusätzlicher Fehler durch einen weiteren Diskretisierungsschritt eingeführt. Im Folgenden wird zunächst mit der Definition einiger einfacher Deskriptoren begonnen. Anschließend werden die Minkowskifunktionale eingeführt. Dabei handelt es sich um ein Satz von bewegungsinvarianten, additiven und stetigen Funktionalen, mit denen sich alle Funktionalen mit diesen Eigenschaften als Linearkombination darstellen lassen. Die Minkowskifunktionale sind Berechnungsgrundlage weiterer Deskriptoren, wie beispielsweise der Sphärität. Abschließend werden die Konvexität, die zentralen Momente und der Begriff der fraktalen Dimension definiert und passende Methoden zur Berechnung vorgestellt. Diese Deskriptoren haben sich als besonders wirksam erwiesen, um Artefakte und Risse, die im eigentlichen Sinne keine Partikel darstellen, zu klassifizieren. In den nach-



folgenden Ausführungen ist  $\mathfrak{X} \subset \mathfrak{E}$  eine Menge von Voxeln, welche der Partikeldefinition aus Abschnitt 2.1.1 genügt.

### 2.2.1 Boundingbox

Die Boundingbox eines Partikels  $\mathfrak{X}$  bezeichnet das minimale, achsenparallele Rechteck, das alle Punkte in  $\mathfrak{X}$  einschließt. Die Boundingbox eines Partikels  $\mathfrak{X}$  wird in der vorliegenden Arbeit durch die beiden Eckpunkte  $BB_{\mathfrak{X}_{min}} = (i_{min}, j_{min}, k_{min})$  und  $BB_{\mathfrak{X}_{max}} = (i_{max}, j_{max}, k_{max})$  angegeben, wobei  $BB_{\mathfrak{X}_{min}}$  und  $BB_{\mathfrak{X}_{max}}$  so gewählt sind, dass für  $\forall(i, j, k) \in \mathfrak{X}$  die Ungleichungen  $i_{min} \leq i \leq i_{max}$ ,  $j_{min} \leq j \leq j_{max}$  und  $k_{min} \leq k \leq k_{max}$  erfüllt sind. Die inneren Punkte der Boundingbox ergeben sich dann aus dem kartesischen Produkt der Intervalle

Boundingbox

$$BB_{\mathfrak{X}} = [i_{min}, i_{max}] \times [j_{min}, j_{max}] \times [k_{min}, k_{max}] \quad (13)$$

Die Boundingbox an sich eignet sich nicht als Deskriptor, da sie von der Position des Partikels im Raum abhängt. Allerdings kann man anhand der Achsenlängen der Boundingbox einfache Informationen über die Form des Partikels ableiten. Dazu bestimmt man zunächst die minimale und maximale Koordinatenachse der Boundingbox durch

$$W_x = \min((i_{max} - i_{min})\delta_1, (j_{max} - j_{min})\delta_2, (k_{max} - k_{min})\delta_3)$$

$$W_z = \max((i_{max} - i_{min})\delta_1, (j_{max} - j_{min})\delta_2, (k_{max} - k_{min})\delta_3)$$

Ein einfacher globaler Deskriptor, der auch als Walz-Deskriptor bekannt ist, kann dann durch

$$W_{xz} = \frac{W_x}{W_z}, W_{yz} = \frac{W_y}{W_z} \quad (14)$$

angegeben werden, wobei  $W_y$  die Länge der mittleren Achse ist. Anhand der beiden Achsenverhältnisse  $W_{xz}$  und  $W_{yz}$  kann nun die ungefähre Form des Partikels abgeschätzt werden. Sind beispielsweise  $W_{xz} = W_{yz} \approx 1$  ist dies ein Hinweis auf ein regelmäßiges oder kugelförmiges Partikel [132, S. 18][141]. Anzumerken ist, dass der Deskriptor nicht rotationsinvariant ist, da die Ausrichtung des Partikels innerhalb der Boundingbox maßgeblich die Länge der Achsen beeinflusst. Deshalb wird in der vorliegenden Arbeit eine abgewandelte Form dieses Deskriptors verwendet. Statt das Verhältnis der Achsen der Boundingbox wird das Verhältnis der Hauptachsen verwendet (siehe Abschnitt 2.2.4).

Walz-Deskriptor

## 2.2.2 Konfigurationshistogramme

Diskrete  
Bildfunktion

Bis jetzt wurden Partikel als diskrete verbundene Voxelmengen betrachtet. Im Folgenden ist es jedoch hilfreich, das Partikel  $\mathfrak{X}$  als diskrete Funktion  $b_{\mathfrak{X}} : \mathbb{Z}^3 \rightarrow \{0, 1\}$  zu beschreiben. Dabei ist

$$b_{\mathfrak{X}}(i, j, k) = \begin{cases} 1 & \text{für } (i, j, k) \in \mathfrak{X} \\ 0 & \text{für } (i, j, k) \notin \mathfrak{X} \end{cases} \quad (15)$$

mit  $(i, j, k) \in \mathbb{L}^3$ .

Konfigurationshisto-  
gramm

Auf Basis dieser Definition lässt sich ein weiterer einfacher struktureller Deskriptor entwickeln, nämlich das sogenannte Voxelkonfigurationshistogramm. Bei diesem Deskriptor werden die Anzahl der 256 verschiedenen möglichen Konfigurationen von  $2 \times 2 \times 2$  Voxelblöcken in einem Partikel gezählt. Die Verwendung dieser Konfigurationshistogramme als Gestaltdeskriptoren wurde unter anderen von Ivanko und Perevalov [65] vorgeschlagen. Bei der Berechnung wird hier das von Ohser und Mücklich [98, S. 111 ff.] eingeführte Verfahren zur Codierung der Konfigurationen als binäre Zeichenkette verwendet. Dabei wird die  $2 \times 2 \times 2$  Nachbarschaft eines Voxels  $(i, j, k) \in \mathfrak{X}$  durch

$$\begin{aligned} g_{i,j,k} = & 2^0 b_{\mathfrak{X}}(i, j, k) + 2^1 b_{\mathfrak{X}}(i + 1, j, k) + 2^2 b_{\mathfrak{X}}(i, j + 1, k) + \\ & 2^3 b_{\mathfrak{X}}(i + 1, j + 1, k) + 2^4 b_{\mathfrak{X}}(i, j, k + 1) + \\ & 2^5 b_{\mathfrak{X}}(i + 1, j, k + 1) + 2^6 b_{\mathfrak{X}}(i, j + 1, k + 1) + \\ & 2^7 b_{\mathfrak{X}}(i + 1, j + 1, k + 1) \end{aligned} \quad (16)$$

beschrieben. Das Histogramm  $h_l^{(256)}$  mit  $l = 0, \dots, 255$  für die 256 verschiedenen Konfigurationsmöglichkeiten kann dann durch

$$h_l^{(256)} = \sum_{i=i_{\min}-1}^{i_{\max}} \sum_{j=j_{\min}-1}^{j_{\max}} \sum_{k=k_{\min}-1}^{k_{\max}} \zeta_l(g_{i,j,k}) \quad (17)$$

berechnet werden, wobei

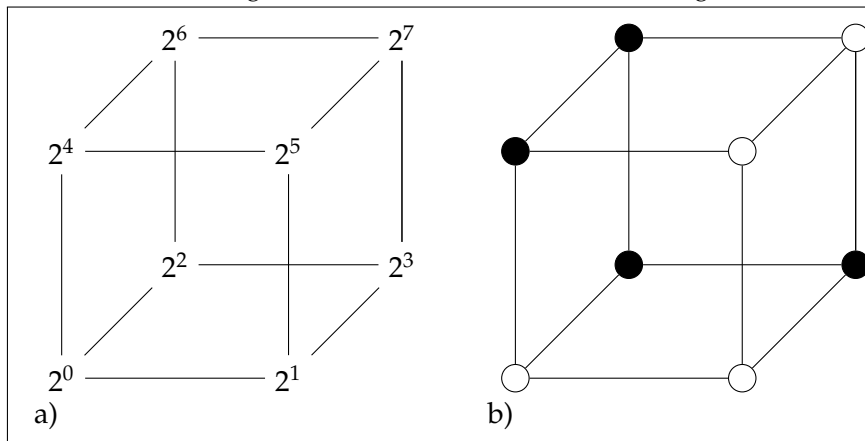
$$\zeta_l(g_{i,j,k}) \begin{cases} 1 & \text{für } g_{i,j,k} = l \\ 0 & \text{für } g_{i,j,k} \neq l \end{cases} \quad (18)$$

ist. Abbildung 3 zeigt die Kodierung am Beispiel der Elementarzelle.

Reduziertes Konfigu-  
rationshistogramm

Im Falle eines kubisch primitiven Gittersystems können die 256 möglichen Konfigurationen auf 22 symmetrische Fälle reduziert werden. Sei dazu  $\mathcal{M}$  die Menge der isometrischen Abbildungen (Translation, Rotation, Reflektion), welche das Gittersystem  $\mathbb{L}^3$  nicht verändern. Weiter definiert man mit  $D_0, \dots, D_{21}$  die 22 Kongruenzklassen für die

Abbildung 3.: a) Binärcodierung der  $2 \times 2 \times 2$  Konfiguration. b) Beispielkonfiguration für  $l = 92$ . Voxel, die zu einem Partikel gehören, sind als schwarze Kreise dargestellt.



256 verschiedenen Konfigurationen  $l$  unter  $\mathcal{M}$ . Eine Konfiguration  $l$  ist genau dann Element der Kongruenzklasse  $D_j$ , wenn es ein  $\mathcal{T} \in \mathcal{M}$  gibt, so dass  $\mathcal{T}l = n_j$  ist. Dabei ist  $n_j$  ein repräsentatives Element der Klasse  $D_j$ . Als repräsentatives Element wird im Folgenden die Konfiguration mit der kleinsten Codierung gewählt. Listing 5 skizziert einen Algorithmus, um eine Tabelle der 22 Klassen und ihrer Elemente zu generieren. Dabei werden für jede mögliche Konfiguration alle isometrischen Abbildungen durchgeführt und die Äquivalenzen mittels der in Abschnitt 2.1.2.2 definierten UNION-Operation gespeichert. Die Operation FIND( $l$ ) liefert dann das repräsentative Element der zu  $l$  zugehörigen Klasse zurück. Im Anhang sind zwei Tabellen zu finden, in denen alle 22 Klassen und ihre Elemente aufgeführt sind. In Tabelle 13 sind die Konfigurationen mit ihren numerischen Codierungen dargestellt, während in Tabelle 14 die Darstellung über Piktogramme nach dem Schema aus Abbildung 3 b) erfolgt. Die Ergebnisse stimmen mit denen von Ohser und Schladitz [99, S. 49 ff.] und Toriwaki und Yoshida [138, S. 86 ff.] überein, wobei dort nur die repräsentativen Elemente aufgelistet sind und nicht die Elemente der Menge  $D_j$  selbst. Mittels der angeführten Tabellen kann nun das Histogramm

---

**Algorithmus 5** Generiert Tabelle mit allen 22 Kongruenzklassen und ihren Elementen.

---

```

1: procedure CONFIGURATIONLOOKUPTABLE
2:   for  $l \leftarrow 0, 255$  do
3:     for  $\forall \mathcal{T} \in \mathcal{M}$  do
4:       UNION( $l, \mathcal{T}l$ )
5:     end for
6:   end for
7: end procedure

```

---

$h_l^{(256)}$  eines Partikels  $\mathfrak{X}$  auf das Histogramm  $h_l^{(22)}$  mit 22 Elementen durch simples Nachschlagen reduziert werden. Dieses eignet sich auf Grund der geringeren Dimension besser zum Klassifizieren.

Die eigentliche Idee bei diesem Deskriptor besteht nun darin, dass sich spezifische Eigenschaften der Oberfläche eines Partikels durch entsprechend starke Ausprägungen bestimmter Voxelkonfigurationen im Histogramm niederschlagen. Bei sehr porösen Partikeln mit rauher Oberfläche sind beispielsweise mehr Konfigurationen mit diagonalen Voxelbelegungen zu erwarten als bei kompakten, kugelförmigen Partikeln. Darüber hinaus werden die Histogramme im nächsten Abschnitt dazu verwendet die Minkowskifunktionale zu berechnen.

### 2.2.3 Minkowskifunktionale

In diesem Abschnitt werden die Minkowskifunktionale eingeführt. Zunächst werden sie für die Menge der konvexen Körper anhand der Steiner-Formel definiert. Anschließend erfolgt die Erweiterung auf den konvexen Ring.

Dazu betrachtet man zunächst folgendes Beispiel. Gegeben sei ein Würfel  $C$  der Kantenlänge  $a$  im dreidimensionalen Raum. Setzt man nun den Mittelpunkt  $m$  des Balls

$$b_r = \{y \in \mathbb{R}^3 : \|y - m\| \leq r\} \quad (19)$$

mit Radius  $r$  auf jeden Punkt des Würfels  $C$  und bildet die Vereinigung aller Punkte durch

$$C_r = C \oplus b_r = \{x + y : x \in C, y \in b_r\} \quad (20)$$

*Parallele Menge*

dann ergibt sich die parallele Menge  $C_r$ . Dabei wird die Operation  $\oplus$  Minkowski-Summe genannt. Das Volumen  $V(C_r)$  von  $C_r$  lässt sich dann durch

$$V(C_r) = a^3 + 6a^2r + 3a\pi r^2 + \frac{4\pi}{3}r^3 \quad (21)$$

also der Summe aus dem Volumen des ursprünglichen Würfels, der sechs Quader mit Dicke  $r$  über die Seitenflächen, der drei Zylinder über jeweils vier gegenüberliegenden Kanten mit der Grundfläche  $\pi r^2$  und Höhe  $h$  und der acht Kugelausschnitte an den Ecken berechnen. Mit gewissen Einschränkungen lässt sich das Ergebnis auf beliebige Mengen  $K \in \mathbb{R}^3$  verallgemeinern. Man kann zeigen, dass für eine parallele Menge  $K_r \in \mathbb{R}^3$  einer Menge  $K$  das Volumen  $V$  durch

$$V(K_r) = V(K) + S(K)r + 2\pi B(K)r^2 + \frac{4\pi}{3}r^3 \quad (22)$$

berechnet werden kann, wobei  $V(K)$  das Volumen,  $S(K)$  die Oberfläche und  $B(K)$  die mittlere Breite von  $K$  ist [94]. Stellt sich die Frage, wie die Restriktionen für die Menge  $K$  konkret aussehen. Gleichung 22 gilt für alle konvexen, beschränkten und abgeschlossenen Mengen in  $\mathbb{R}^3$ , deren Inneres nicht leer ist. Dabei ist eine Menge konvex, wenn das Liniensegment zweier beliebiger Punkte dieser Menge selbst in der Menge liegt. Eine Menge mit solchen Eigenschaften bezeichnet man auch als konvexen Körper. Für die Menge aller konvexen Körper wird im Folgenden  $\mathbb{K}$  geschrieben. Bis jetzt wurde nur der dreidimensionale Fall betrachtet. Formel 22 lässt sich aber für beliebige Dimensionen  $d \geq 0$  erweitern. Das  $d$ -dimensionale Volumen  $V^{(d)}$  für einen parallelen Körper  $K_r$  mit Radius  $r$  eines konvexen Körpers  $K \in \mathbb{K}$  ist nämlich durch die sogenannte Steiner-Formel gegeben [47, S. 214]. Es gilt

*Konvexe Menge*

$$V^{(d)}(K_r) = \sum_{v=0}^d \binom{d}{v} W_v^{(d)}(K) r^v, \tag{23}$$

*Steiner-Formel*

wobei  $W_v^{(d)}(K)$  die sogenannten Minkowskifunktionale oder auch Quermaßintegrale sind. Für  $0 < d \leq 3$  sind diese in Tabelle 2 aufgeführt. Wie man erkennen kann, entsprechen die Minkowskifunktionale bis auf einen konstanten Proportionalitätsfaktor bis zur dritten Dimension bekannten Maßen, wie dem Volumen, der Oberfläche, der Länge, dem Flächeninhalt und der mittleren Breite.

*Minkowskifunktionale*

**Tabelle 2.:** Minkowskifunktionale bis zur dritten Dimension. Dabei ist  $V$  das Volumen,  $S$  die Oberfläche,  $L$  die Länge,  $A$  die Flächeninhalt,  $U$  der Umfang,  $B$  die mittlere Breite und  $\chi$  die Euler-Charakteristik (siehe von Formel 26 ) von  $K$

$d = 3$	$d = 2$	$d = 1$	$d = 0$
$W_0^{(3)}(K) = V(K)$	$W_0^{(2)}(K) = A(K)$	$W_0^{(1)}(K) = L(K)$	$W_0^{(0)}(K) = \chi(K)$
$W_1^{(3)}(K) = \frac{1}{3}S(K)$	$W_1^{(2)}(K) = \frac{1}{2}U(K)$	$W_1^{(1)}(K) = 2\chi(K)$	
$W_2^{(3)}(K) = \frac{2\pi}{3}B(K)$	$W_2^{(2)}(K) = \pi\chi(K)$		
$W_3^{(3)}(K) = \frac{4\pi}{3}\chi(K)$			

Nach Hadwiger [47, S. 221 ff.] gelten für die Minkowskifunktionale folgende wichtige Eigenschaften, die im sogenannten Vollständigkeitssatz zusammengefasst sind. Sei  $\varphi$  eine über die Klasse  $\mathbb{K}$  der konvexen Körper definierte Funktion, welche jedem Körper  $K \in \mathbb{K}$  eine reelle Zahl  $\varphi(K)$  zuordnet. Sind für  $\varphi$  folgende Eigenschaften erfüllt:

*Vollständigkeitssatz*

- **Bewegungsinvariant:**  $\varphi(\mathcal{T}K) = \varphi(K)$ , wobei  $\mathcal{T}K$  mit  $\mathcal{T} \in \mathcal{M}$  dem beliebig bewegten Körper entspricht,
- **Stetig:** Für eine Sequenz von kompakten Mengen  $\{K_i\}$  ist  $\varphi$  stetig, wenn der Abstand im Sinne der Hausdorff Distanz zwischen  $K_i$  und  $K$  gegen 0 läuft, falls  $i \rightarrow \infty$ ,

- **C-additiv:**  $\varphi(K_1 \cup K_2) = \varphi(K_1) + \varphi(K_2) - \varphi(K_1 \cap K_2)$  mit  $K_1, K_2 \in \mathbb{K}$  und  $K_1 \cup K_2 \in \mathbb{K}$ ,

dann gilt

$$\varphi(K) = \sum_{v=0}^d a_v W_v^{(d)}(K) \quad (24)$$

mit passenden Koeffizienten für  $a_v \in \mathbb{R}$ . Das heißt jedes bewegungs-invariante, C-additive und stetige Funktional  $\varphi$  lässt sich durch  $d + 1$  Linearkombinationen der Minkowskifunktionale darstellen. Für ein konvexes Partikel muss also nach dem Berechnen der  $d + 1$  Funktionale auf nicht-additive beziehungsweise bewegungsabhängige Funktionale gewechselt werden, um weitere Charakteristiken des Partikels zu erfassen. Leider ist ein Partikel in der Praxis nicht zwangsläufig konvex, so dass das Ergebnis in der jetzigen Form wenig brauchbar ist. Es hat sich aber gezeigt, dass sich der Funktionalsatz auf den konvexen Ring erweitern lässt. Der konvexe Ring  $\mathfrak{K}$  ist dabei die Klasse aller Teilmengen  $A \subset \mathbb{R}^d$ , die sich als Vereinigung endlich vieler konvexer Körper

*Konvexer Ring*

$$A = \bigcup_{i=1}^n K_i \quad (25)$$

mit  $K_i \in \mathbb{K}$  darstellen lassen. Partikel sind im Sinne der Definition aus Abschnitt 2.1.1 Elemente des konvexen Rings, da sie eine endliche Vereinigung konvexer Körper, nämlich der Voxel, darstellen. Der Funktionalsatz kann also angewendet werden, wenn die Erweiterung auf den konvexen Ring gelingt. Diese soll im Folgenden vorgenommen werden.

Dazu wird zunächst die Euler-Charakteristik  $\chi(K)$  für einen konvexen Körper  $K$  als

$$\chi(K) = \begin{cases} 1 & \text{für } K \neq \emptyset \\ 0 & \text{für } K = \emptyset \end{cases} \quad (26)$$

*Euler-Charakteristik*

definiert. Es lässt sich nun zeigen, dass die Euler-Charakteristik ein additives, bewegungsinvariantes Funktional über den konvexen Ring  $\mathfrak{K}$  ist (siehe Existenzbeweis Hadwiger [47, S. 237 ff.]). Unter Ausnutzung der Additivitäts-Eigenschaft kann die Euler-Charakteristik mittels des Prinzips von Inklusion und Exklusion für ein Element  $A \in \mathfrak{K}$  explizit durch

$$\begin{aligned} \chi(A) = & \sum_{i=1}^m \chi(K_i) - \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \chi(K_i \cap K_j) + \dots \\ & + (-1)^{m+1} \chi\left(\bigcap_{i=1}^m K_i\right) \end{aligned} \quad (27)$$

*Erweiterung auf  
konvexen Ring*

berechnet werden. Die übrigen Minkowskifunktionale lassen sich auf

Basis der Euler-Charakteristik für  $A \in \mathfrak{K}$  als

$$W_v^{(d)}(A) = \int_{\mathcal{G}} \chi(A \cap gE_v) dg \quad v = 0, \dots, d-1 \quad (28)$$

$$W_d^{(d)}(A) = w_d \chi(A) \quad w_d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(1 + \frac{d}{2})}$$

eingeführen, wobei  $E_v$  die  $v$ -dimensionale Ebene im  $\mathbb{R}^d$ ,  $dg$  die kinematische Dichte [119, S. 256 ff.] und  $\Gamma$  die Eulersche Gammafunktion ist, welche zur Berechnung des  $d$ -dimensionalen Volumens  $w_d$  der Einheitskugel verwendet wird. Die Integration erfolgt über alle Elemente der Gruppe  $\mathcal{G}$  der Rotationen und Translationen. Die Additivität wird von  $\chi$  an die übrigen Minkowskifunktionale vererbt. Es gilt also

$$W_v^{(d)}(A) = \sum_{i=1}^m W_v^{(d)}(K_i) - \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m W_v^{(d)}(K_i \cap K_j) + \dots$$

$$+ (-1)^{m+1} W_v^{(d)}\left(\bigcap_{i=1}^m K_i\right) \quad (29)$$

Damit sind die Minkowskifunktionale für den konvexen Ring definiert und die Grundlagen für die Berechnung eben dieser Funktionale für Voxelmengen geschaffen. Wie bereits erwähnt, kann ein Partikel als endliche Vereinigung von  $k$  konvexen Körpern  $K_i$  mit  $i = 1, \dots, k$  aufgefasst werden, wobei jeder Körper  $K_i$  ein Voxel des Partikels ist. Für einen einzelnen Voxel in einem kubisch primitiven Gittersystem sind die Minkowskifunktionale bekannt und lassen sich somit unter Ausnutzung der Additivitätseigenschaft und Formel 29 für das gesamte Partikel ausrechnen. Diese Vorgehensweise ist allerdings sehr mühsam, da die Anzahl der Terme in Formel 29 selbst für kleine Partikel schnell sehr groß wird. Da im Folgenden die Minkowskifunktionale aber nur für Partikel auf Gittersystemen ausgerechnet werden sollen, ist es einfacher, zunächst die Voxel der dispersen Phase selbst in disjunkte Teilmengen zu zerlegen. Jeder Voxel eines kubisch primitiven Gittersystems kann als die Vereinigung seiner disjunkten Ecken  $S^0$ , offenen Kanten  $S^1$ , offenen Flächen  $S^2$  und Inneren  $S^3$  aufgefasst werden [84]. Allgemein wird  $S^n$  mit  $n = 0, \dots, 3$  auch als das  $n$ -dimensionale Simplex bezeichnet. Nach Bieri und Nef [15] gilt nun für die Euler-Charakteristik des  $n$ -dimensionalen Simplex

Simplex

$$\chi(S^n) = (-1)^n \quad (30)$$

Die übrigen Minkowskifunktionale lassen sich dann wegen Formel 28 und der Additivitätseigenschaft durch

$$W_v^{(d)}(S^n) = (-1)^{d+n+v} \frac{\binom{v+n}{d}}{\binom{v+n}{n}} w_v \quad (31)$$

angeben, wobei  $w_v$  das  $v$ -dimensionale Volumen der Einheitskugel ist [15]. Zerlegt man also ein Partikel in seine  $n$ -dimensionalen Simplexe, können seine Minkowskifunktionale durch

$$W_v^{(d)}(\mathfrak{X}) = \sum_{n=0}^3 W_v^{(d)}(S^n) \mathfrak{N}^{(n)}(\mathfrak{X}) \quad (32)$$

berechnet werden, wobei  $\mathfrak{N}^{(n)}(\mathfrak{X})$  die Anzahl der  $n$ -dimensionalen Simplexe im Partikel  $\mathfrak{X}$  angibt. Das Volumen  $V(\mathfrak{X})$ , die Oberfläche  $S(\mathfrak{X})$ , die mittlere Breite  $B(\mathfrak{X})$  und die Euler-Charakteristik  $\chi(\mathfrak{X})$  des Partikels  $\mathfrak{X}$  ergeben sich schließlich unter Berücksichtigung der Proportionalitätsfaktoren (siehe Tabelle 2) durch Verwendung von Formel 32 aus:

$$\begin{aligned} V(\mathfrak{X}) &= W_0^{(3)}(\mathfrak{X}) = && \mathfrak{N}^{(3)}(\mathfrak{X}) \\ S(\mathfrak{X}) &= W_1^{(3)}(\mathfrak{X}) = && 2\mathfrak{N}^{(2)}(\mathfrak{X}) - 6\mathfrak{N}^{(3)}(\mathfrak{X}) \\ B(\mathfrak{X}) &= W_2^{(3)}(\mathfrak{X}) = && \frac{1}{2}\mathfrak{N}^{(1)}(\mathfrak{X}) - \mathfrak{N}^{(2)}(\mathfrak{X}) + \frac{3}{2}\mathfrak{N}^{(3)}(\mathfrak{X}) \\ \chi(\mathfrak{X}) &= W_3^{(3)}(\mathfrak{X}) = && \mathfrak{N}^{(0)}(\mathfrak{X}) - \mathfrak{N}^{(1)}(\mathfrak{X}) + \mathfrak{N}^{(2)}(\mathfrak{X}) - \mathfrak{N}^{(3)}(\mathfrak{X}) \end{aligned} \quad (33)$$

#### Zählen der Simplexe

Die vier Minkowskifunktionale eines dreidimensionalen Partikels lassen sich also durch einfaches Zählen seiner Ecken, Kanten, Flächen und seinem Inneren berechnen. Dabei muss lediglich darauf geachtet werden, dass die Simplexe von benachbarten Voxeln nicht doppelt gezählt werden. Michielsen und De Raedt [94] schlagen zur Lösung dieses Problems folgenden Algorithmus vor. Alle Voxel eines Partikels werden nacheinander durchlaufen und in eine anfangs leere Menge eingefügt. Bevor das Voxel eingefügt wird, wird es in seine Simplexe zerlegt und überprüft, welche sich mit denen der bereits in die Menge eingefügten Voxel überlappen. Daraus kann dann die Änderung der einzelnen Minkowskifunktionale berechnet werden, die beim Einfügen des Voxels entsteht. Die Änderungsraten werden gespeichert und der Vorgang solange wiederholt, bis alle Voxel eingefügt sind. Die Minkowskifunktionale ergeben sich dann durch das Aufsummieren der Änderungsraten. Das Verfahren hat zwar ein gutes Laufzeitverhalten, da jeder Voxel nur einmal betrachtet werden muss, allerdings müssen zwei Kopien pro Partikel im Speicher gehalten werden. Bei sehr großen Partikeln wird dementsprechend viel Speicher verschwendet. Aus diesem Grund wird in der vorliegenden Arbeit ein anderes Verfahren verwendet, welches auf den in Abschnitt 2.2.2 eingeführten Konfigurationshistogrammen basiert. Mittels Algorithmus 6 werden für jedes der 22 möglichen Voxelkonfigurationen von  $2 \times 2 \times 2$  Blöcken die Minkowskifunktionale vorberechnet. Dazu wird in Zeile 3 die an den Algorithmus übergebene Konfigurationsnummer durch konsekutives Shiften nach rechts in ein Bitfeld  $x_0 \dots x_7$  mit acht Einträgen zerlegt. Anschließend kann die Anzahl der  $n$ -dimensionalen Simplexe  $S^n$  im Block durch geeignete Kombinationen von bitweisen Orderverknüpfungen gezählt werden. Daraus werden



**Algorithmus 6** Berechnung der lokalen Minkowskifunktionale.


---

```

1: procedure GETLOCALMINKOWSKI26( $c$ )
2:   for  $i \leftarrow 0,7$  do
3:      $x_i \leftarrow (1 \& (c \gg i))$ 
4:   end for
5:    $S^0 \leftarrow 1$ 
6:    $S^1 \leftarrow (x_0|x_2|x_4|x_6)$ 
7:    $S^1 \leftarrow S^1 + (x_2|x_3|x_6|x_7)$ 
8:    $S^1 \leftarrow S^1 + (x_1|x_3|x_5|x_7)$ 
9:    $S^1 \leftarrow S^1 + (x_0|x_1|x_4|x_5)$ 
10:   $S^1 \leftarrow S^1 + (x_0|x_1|x_2|x_3)$ 
11:   $S^1 \leftarrow S^1 + (x_4|x_5|x_6|x_7)$ 
12:   $S^2 \leftarrow (x_0|x_4) + (x_1|x_5) + (x_2|x_6) + (x_3|x_7)$ 
13:   $S^2 \leftarrow S^2 + (x_0|x_2) + (x_1|x_3) + (x_4|x_6) + (x_5|x_7)$ 
14:   $S^2 \leftarrow S^2 + (x_0|x_1) + (x_2|x_3) + (x_4|x_5) + (x_6|x_7)$ 
15:   $S^3 \leftarrow x_0 + x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7$ 
16:   $V \leftarrow \frac{S^3}{8}$ 
17:   $S \leftarrow \frac{-6S^3}{8} + \frac{2S^2}{4}$ 
18:   $B \leftarrow \frac{3S^3}{16} - \frac{2S^2}{8} + \frac{S^1}{4}$ 
19:   $\chi \leftarrow \frac{-S^3}{8} + \frac{S^2}{4} - \frac{S^1}{2} + S^0$ 
20:  return  $V, S, B, \chi$ 
21: end procedure

```

---

dann mittels Formel 33 die einzelnen Funktionale berechnet. Da beim Bestimmen des Histogramms eines Partikels jede Kante zweimal, jede Fläche viermal und jeder Voxel achtmal gezählt wird, müssen die Werte aber entsprechend normalisiert werden. Des Weiteren ist in Algorithmus 6 nur der Fall für die 26er Nachbarschaft dargestellt. Die Berechnung für die 6er Nachbarschaft kann ebenfalls mittels Algorithmus 6 erfolgen. Dabei muss der Algorithmus lediglich mit der Komplementärkonfiguration, gebildet durch Negieren aller Bits des Bitfeldes, aufgerufen werden [87]. Auch für die 18er Nachbarschaft bleibt Algorithmus 6 nahezu identisch. Lediglich für die Konfiguration  (Konfigurationsnummer 24) gilt zu beachten, dass die beiden Voxel im Sinne der 18er Nachbarschaft nicht benachbart sind. Es gilt also in diesem Fall  $S^0 = 2$ . Um nun die Minkowskifunktionale für ein Partikel angeben zu können, wird zunächst das Voxelkonfigurationshistogramm dieses Partikels bestimmt. Die Anzahl jeder vorkommenden  $2 \times 2 \times 2$  Konfiguration im Partikel wird zu den normalisierten Minkowskifunktionalen des jeweiligen Blocks, berechnet mit Algorithmus 6, multipliziert und alle Werte aufaddiert. Dabei lassen sich die Werte der einzelnen Blöcke vorberechnen und in einer Tabelle speichern. Im Anhang sind in Tabelle 15 für alle 22 Konfigurationen die Werte für die 6er, 18er und 26er Nachbarschaft aufgeführt. Ähnliche Verfahren, allerdings nur für die Euler-Charakteristik wurden

auch von Lobregt, Verbeek und Groen [87], Ohser und Schladitz [99, S. 52 ff.] und Toriwaki und Yoshida [138, S. 94 ff.] beschrieben und decken sich mit den Ergebnissen in Tabelle 15.

*Erwartungstreuer  
Schätzer*

Das beschriebene Verfahren ist sehr schnell, da die Berechnung der Funktionale im Prinzip durch das Nachschlagen der 22 möglichen Voxelkonfigurationen in einer vorberechneten Tabelle geschieht. Auch der Speicherverbrauch kann vernachlässigt werden. Für jedes Partikel wird zusätzlich lediglich das aus 22 Integerwerten bestehende Voxelkonfigurationshistogramm abgespeichert. Allerdings hat das hier vorgestellte Verfahren zwei Nachteile. Zum einen können die mittlere Breite und die Oberfläche nur für Partikel in einem kubisch primitiven Gittersystem berechnet werden und zum anderen sind die Schätzungen für die Oberfläche und die mittlere Breite nicht erwartungstreu, da die glatten Oberflächen der Partikel nur durch Voxel mit vertikalen und horizontalen Flächen approximiert werden. Zahlreiche erwartungstreue Verfahren zur Schätzung der Oberfläche und der mittleren Breite werden in der Literatur diskutiert [85, 94, 146, 153, 120]. In der vorliegenden Arbeit wird das oben beschriebene Verfahren um die Methode von Schladitz, Ohser und Nagel [120] erweitert. Ausgangspunkt sind dabei wieder die im Abschnitt 2.2.2 eingeführten Konfigurationshistogramme. Aber an Stelle der Formel 33, werden im Falle eines kubisch primitiven Gittersystems die von Schladitz, Ohser und Nagel [120] veröffentlichten 22 Gewichte verwendet. Diese liefern, wenn sie zu der Anzahl der vorkommenden Konfigurationen in einem Partikel multipliziert werden, eine erwartungstreue Schätzung für die Oberfläche beziehungsweise die mittlere Breite. Abgeleitet wurden sie mittels einer Diskretisierung der Croftonschen Formeln [121, S. 104]. Für 256 Fälle bei einem orthorhombischen Gittersystem können die Gewichte dagegen mittels dem von Lang, Ohser und Hilfer [76] vorgeschlagenen Algorithmus vorberechnet werden. In der vorliegenden Arbeit wird auf Grund der Effizienz eine von Matlab<sup>1</sup> nach C++ portierte Version des Algorithmus verwendet.

*Krümmung*

Auf Basis der Minkowskifunktionale lassen sich nun weitere Gestaltdeskriptoren ableiten. Zunächst kann gezeigt werden, dass die mittlere Breite  $B(A)$  und die Euler-Charakteristik  $\chi(A)$  eines Elements  $A \in \mathfrak{K}$  proportional zu dem aus der Differentialgeometrie bekannten Integral der mittleren Krümmung  $M(A)$  [47, S. 212 ff.] und dem Integral der Totalkrümmung  $K(A)$  [99, S. 29] ist. Und zwar gilt

$$\begin{aligned} M(A) &= 2\pi B(A) \\ K(A) &= 4\pi \chi(A) \end{aligned} \tag{34}$$

<sup>1</sup> <https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/33690-geometric-measures-in-2d-3d-images>

Man beachte dabei, dass die integralgeometrischen Größen immer wohl definiert sind und nicht nur für Elemente mit regulärer Fläche gelten. Das Volumen, die Oberfläche und die mittlere Krümmung können dann dazu verwendet werden, die isoperimetrischen Gestaltdeskriptoren zu definieren. Für  $A \in \mathfrak{R}$  mit Volumen  $V(A)$ , Oberfläche  $S(A)$  und mittlerer Krümmung  $M(A)$  ergeben sich diese durch

*Isoperimetrischen  
Gestaltdeskriptoren*

$$F_1 = 6\sqrt{\pi} \frac{V(A)}{\sqrt{S(A)^3}}, \quad F_2 = 48^2 \frac{V(A)}{M(A)^3}, \quad F_3 = 4\pi \frac{S(A)}{M(A)^2}, \quad (35)$$

wobei  $F_1, F_2$  und  $F_3$  für ein kugelförmiges  $A$  den Wert 1 annehmen. Bei Abweichungen von der Kugelform ergeben sich Werte zwischen  $0 \leq F_1, F_2, F_3 < 1$ . Schließlich soll an dieser Stelle noch die Dichte der Minkowskifunktionale für ein Partikel  $\mathfrak{X}$  eingeführt werden. Dabei handelt sich um das Verhältnis der Minkowskifunktionale eines Partikels  $\mathfrak{X}$  und dem Volumen der umgebenen minimalen Boundingbox  $BB_{\mathfrak{X}}$ . Es gilt also

*Dichte der Minkow-  
skifunktionale*

$$\begin{aligned} V_V(\mathfrak{X}) &= \frac{V(\mathfrak{X})}{V(BB_{\mathfrak{X}})} \\ S_V(\mathfrak{X}) &= \frac{S(\mathfrak{X})}{V(BB_{\mathfrak{X}})} \\ B_V(\mathfrak{X}) &= \frac{B(\mathfrak{X})}{V(BB_{\mathfrak{X}})} \\ M_V(\mathfrak{X}) &= \frac{M(\mathfrak{X})}{V(BB_{\mathfrak{X}})} \\ K_V(\mathfrak{X}) &= \frac{K(\mathfrak{X})}{V(BB_{\mathfrak{X}})} \\ \chi_V(\mathfrak{X}) &= \frac{\chi(\mathfrak{X})}{V(BB_{\mathfrak{X}})}. \end{aligned} \quad (36)$$

Dadurch erreicht man eine Normalisierung der Funktionale und kann im direkten Vergleich interessante Informationen zur Struktur der Partikel ableiten. Die Dichte der Oberfläche eines Partikels  $\mathfrak{X}_1$  mit gleichem Boundingboxvolumen wie ein zweites Partikel  $\mathfrak{X}_2$  erhöht sich zum Beispiel, je „wilder“ seine Oberflächenstruktur ist. Eine „wilde“ Oberfläche zeichnet sich dabei durch eine Vielzahl von Konfigurationen mit diagonalen Nachbarn im Voxelkonfigurationshistogramm aus. Für fraktale Partikel würde sie, bei unbegrenztem Auflösungsvermögen der Kamera, schließlich gegen unendlich streben (siehe auch Abschnitt 2.2.6).

Damit ist die Menge der additiven, bewegungsinvarianten und streitigen Funktionale vollständig beschrieben. In den nächsten Abschnitten werden Deskriptoren beschrieben, welche eine oder mehrere dieser Eigenschaften nicht erfüllen.

## 2.2.4 Momente

In diesen Abschnitt werden Deskriptoren eingeführt, die auf Basis von Momenten berechnet werden. Momente sind skalare Größen, um Funktionen zu charakterisieren. Verwendung finden sie vor allem in der Statistik und der Mechanik, um die Form von Dichtefunktionen oder die Massenverteilungen starrer Körper zu beschreiben. An dieser Stelle werden die Momente für den dreidimensionalen Fall eingeführt.

Sei  $f : R^3 \rightarrow R$  eine stetige dreidimensionale Funktion. Nach Flusser, Zitova und Suk [40, S. 13] ist das Moment  $m_{pq}$  vom  $(p + q + r)$ -ten Grades mit  $p, q, r \geq 0$  gegeben durch

$$m_{pqr} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^p y^q z^r f(x, y, z) dx dy dz \quad (37)$$

Zentrales Moment

Besonderes Interesse besteht an den Momenten, die invariant unter Translation, Skalierung und Rotation sind, da sie sich als Formdeskriptoren eignen. Translationsvarianz wird über die sogenannten zentralen Momente erreicht. Sie sind definiert als

$$\mu_{pqr} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^p (y - \bar{y})^q (z - \bar{z})^r f(x, y, z) dx dy dz \quad (38)$$

mit

$$\bar{x} = \frac{m_{100}}{m_{000}}, \bar{y} = \frac{m_{010}}{m_{000}} \text{ und } \bar{z} = \frac{m_{001}}{m_{000}} .$$

Wird  $f(x, y, z)$  als Massenverteilung eines Objektes aufgefasst, kann man  $\bar{x}, \bar{y}$  und  $\bar{z}$  als Schwerpunkte des Objekts und die zentralen Momente  $m_{200}, m_{020}, m_{002}, m_{110}, m_{011}$  und  $m_{101}$  als Trägheitsmomente der entsprechenden Richtungen interpretieren. Die Translationsinvarianz wird dann durch eine Verschiebung des Ursprungs des Koordinatensystems auf den Objektschwerpunkt erreicht. Fasst man hingegen  $f(x, y, z)$  als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion auf, stellen  $\bar{x}, \bar{y}$  und  $\bar{z}$  die Mittelwerte und  $m_{200}, m_{020}, m_{002}$  die Varianzen beziehungsweise  $m_{110}, m_{011}, m_{101}$  die Kovarianzen von  $x, y$  und  $z$  dar.

Skaleninvarianz

Skaleninvarianz bei gleichförmiger Skalierung wird durch geeignete Normalisierung erreicht. In dieser Arbeit wird, wie in den meisten Veröffentlichungen, das Moment  $\mu_{000}$  verwendet [40, S. 45]. Für den dreidimensionalen Fall ergibt sich die Skaleninvarianz durch Normalisierung der zentralen Momente 38 mit

$$\eta_{pqr} = \frac{\mu_{pqr}}{\mu_{000}^{\frac{p+q+r}{3}+1}} . \quad (39)$$

Schließlich bleibt noch die Invarianz unter Rotation. Für den zweidimensionalen Fall wurden rotationsinvariante Momente auf Basis von

algebraischen Invarianten bereits 1962 von Hu [59] abgeleitet. Erst 1980 folgte dann die Erweiterung für die dritte Dimension von Sadjadi und Hall [117]. An dieser Stelle werden die Momente nur angegeben. Die Herleitung ist in [59] und [86] beschrieben. Nach Flusser, Zitova und Suk [40, S. 45] sind die rotationsinvarianten Momente bis zum zweiten Grad gegeben durch

$$\begin{aligned} J_1 &= \eta_{200} + \eta_{020} + \eta_{002} \\ J_2 &= \eta_{020}\eta_{002} + \eta_{200}\eta_{002} + \eta_{200}\eta_{020} - (\eta_{011}^2 + \eta_{101}^2 + \eta_{110}^2) \\ J_3 &= \eta_{200}\eta_{020}\eta_{002} + 2\eta_{110}\eta_{101}\eta_{011} - \eta_{200}\eta_{011}^2 - \eta_{020}\eta_{101}^2 - \eta_{002}\eta_{110}^2 \end{aligned} \quad (40)$$

*Rotationsinvarianz*

Neben den invarianten Momenten lassen sich auf Basis der zentralen Momente noch weitere Deskriptoren ableiten. Stellt man die Kovarianzmatrix aus den zentralen Momenten bis zum zweiten Grad auf, nämlich

$$Cov = \begin{pmatrix} \mu'_{200} & \mu'_{110} & \mu'_{101} \\ \mu'_{110} & \mu'_{020} & \mu'_{011} \\ \mu'_{101} & \mu'_{011} & \mu'_{002} \end{pmatrix} \quad (41)$$

*Kovarianzmatrix*

wobei

$$\mu'_{pqr} = \frac{\mu_{pqr}}{\mu_{000}} \text{ mit } 0 \leq p \leq 2, 0 \leq q \leq 2, 0 \leq r \leq 2$$

ist, ergeben sich die Länge der drei Hauptachsen eines Partikels aus den Eigenwerten  $e_1, e_2$  und  $e_3$  der Kovarianzmatrix  $Cov$ . Dabei wird die Belegung der  $e$ 's so gewählt, dass  $e_1$  dem betragsmäßig größten Eigenwert und  $e_3$  dem betragsmäßig kleinsten Eigenwert entspricht. Aus dem Verhältnis der so bestimmten Hauptachsen des Objektes lassen sich zum Beispiel mit dem im Abschnitt 2.2.1 beschriebenen Walz-Deskriptor Aussagen über die Form treffen. Weitere einfache Deskriptoren sind die Exzentrizität, definiert durch

*Exzentrizität und Dimensionalität*

$$ECC = \sqrt{1 - \frac{e_3}{e_1}} \quad (42)$$

und die Dimensionalität, definiert durch

$$DIM = \frac{e_3}{e_1} + \frac{e_2}{e_1} \quad (43)$$

Das Verfahren zur Bestimmung der Hauptachsen findet auch in der Statistik bei der Untersuchung von multivariaten Datensätzen in Form der Hauptkomponentenanalyse Anwendung. Bei der Hauptkomponentenanalyse wird nach einer neuen Basis gesucht, in der die ursprünglichen Daten maximale Varianz besitzen. Dafür wird der Datensatz durch eine Hauptachsentransformation, gebildet aus der orthogonalen Matrix der Eigenvektoren, in einen Raum niedriger Dimension transformiert. Die Wahl der zu verwendenden Eigenvektoren wird dabei anhand der Beträge der zugehörigen Eigenwerte getroffen. Im Vergleich zu Eigenvektoren mit betragsmäßig großen

*Hauptkomponentenanalyse*

Eigenwerten können Eigenvektoren mit betragsmäßig kleinen Eigenwerten weggelassen werden, da sie sich zumeist auf Rauschen zurückführen lassen. Die so neu gebildeten Variablen sind Linearkombinationen der Variablen des ursprünglichen Datensatzes. Die Hauptkomponentenanalyse wird im Rahmen dieser Arbeit verwendet, um hoch dimensionale Datensätze vor der Klassifizierung zu komprimieren und gegebenenfalls vorhandenes Rauschen zu entfernen. Das Verfahren selbst wird allerdings nicht noch einmal explizit eingeführt. Für weitere Informationen wird auf das Buch von Handl und Niermann [48, S. 107 ff.] verwiesen.

Da im Rahmen dieser Arbeit nur mit diskreten Datensätzen (Voxelmengen) gearbeitet wird, können Formel 37 und 38 für ein Partikel  $\mathfrak{X}$  auch als

$$m_{pqr} = \sum_x \sum_y \sum_z x^p y^q z^r b_{\mathfrak{X}}(x, y, z) \quad (44)$$

und

$$\mu_{pqr} = \sum_x \sum_y \sum_z (x - \bar{x})^p (y - \bar{y})^q (z - \bar{z})^r b_{\mathfrak{X}}(x, y, z) \quad (45)$$

*Diskrete Momente*

geschrieben werden, wobei über alle Voxel  $(x, y, z)$  der Boundingbox  $BB_{\mathfrak{X}}$  von  $\mathfrak{X}$  iteriert wird.

### 2.2.5 Konvexität

Die Konvexität eines Partikels  $\mathfrak{X}$  ist definiert als

$$CONV(\mathfrak{X}) = \frac{V(\mathfrak{X})}{CH(\mathfrak{X})}, \quad (46)$$

*Konvexe Hülle*

also dem Verhältnis des Volumens eines Partikels  $\mathfrak{X}$  zu dem Volumen seiner konvexen Hülle  $CH(\mathfrak{X})$ . Stellt sich die Frage, wie die konvexe Hülle  $CH(\mathfrak{X})$  für ein Partikel  $\mathfrak{X}$  definiert ist und berechnet werden kann. Allgemein wird eine euklidische Menge als konvex bezeichnet, wenn die kürzeste Verbindungsstrecke von je zwei beliebigen Punkten der Menge selbst in der Menge liegt. Die konvexe Hülle ist dann die kleinste konvexe Menge, welche die Ausgangsmenge enthält. Zahlreiche Algorithmen sind bekannt, um die konvexe Hülle von euklidischen Mengen zu berechnen. Die bekanntesten Vertreter sind der Q-Hull Algorithmus [13] und der Giftwrapping Algorithmus [68]. Allerdings lassen sich diese Algorithmen nicht ohne weiteres auf den in der vorliegenden Arbeit verwendeten Partikelbegriff übertragen, da die oben angegebene Definition von Konvexität bei diskreten Mengen problematisch ist. So kann es bei diskreten Mengen vorkommen, dass es mehrere kürzeste Pfade gibt, die zwei Punkte verbinden. Alternativ besteht die Möglichkeit, das durch Voxel beschriebene Partikel zunächst in ein Dreiecksgitter zu überführen und die konvexe

Hülle mit einem der oben vorgeschlagenen Algorithmen zu berechnen. Die konvexe Hülle wird dann als Polygonzug zurückgeliefert. In dieser Arbeit wird allerdings ein anderer Ansatz gewählt. Die konvexe Hülle wird direkt aus der diskreten Voxelmenge berechnet und selbst als diskrete Voxelmenge angegeben, welche die Ausgangsmenge als Teilmenge enthält. Damit bleibt die Möglichkeit bestehen, die bisher besprochenen Formdeskriptoren auf die konvexe Hülle anzuwenden. Dies ist insbesondere dann sinnvoll, wenn man Systeme untersucht, bei denen im Vorhinein bekannt ist, dass die Partikel eine konvexe Form haben. In solchen Fällen berechnet man für alle Partikel die konvexe Hülle und kann damit sichergehen, dass die Annahme der Konvexität erfüllt ist und nicht durch Fehler bei Bildaufnahme, der damit einhergehenden Diskretisierung oder der Segmentierung verletzt wird.

Es gibt mehrere Möglichkeiten, die oben angesprochenen Probleme bei der Definition von konvexen diskreten Voxelmengen zu umgehen [123]. Mit folgenden Definitionen lässt sich überprüfen, ob eine Voxelmenge diskret konvex ist:

*Diskret Konvex*

1. Ein Partikel  $\mathfrak{X}$  ist diskret konvex, wenn für zwei beliebige Elemente  $x, y \in \mathfrak{X}$  alle kürzesten Pfade zwischen  $x$  mit  $y$  selbst in  $\mathfrak{X}$  liegen (starke Konvexität).
2. Ein Partikel  $\mathfrak{X}$  ist diskret konvex, wenn für zwei beliebige Elemente  $x, y \in \mathfrak{X}$  mindestens ein kürzester Pfad zwischen  $x$  und  $y$  existiert, der selbst in  $\mathfrak{X}$  liegt (schwache Konvexität).

Zwar lässt sich mit diesen Definitionen bereits ein Verfahren angeben, um die diskret konvexe Hülle einer Voxelmenge zu bestimmen, allerdings liefern beide Definitionen im Vergleich zur euklidischen konvexen Hülle nur eine sehr grobe Approximation. Alternativ schlägt Soille [123, S. 44] für diskrete Mengen folgende Definition vor, die als Grundlage für die Berechnung der diskret konvexen Hülle dienen soll. Ein Partikel  $\mathfrak{X}$  wird als diskret konvex bezeichnet, wenn seine Voxel in den Schnitt aller geschlossenen Halbebenen fallen, die  $\mathfrak{X}$  enthalten. Bevor der Algorithmus zur Berechnung der diskret konvexen Hülle mittels dieser Definition aufgestellt wird, ist es hilfreich zunächst die grundlegenden morphologischen Operationen, nämlich Erosion, Dilatation, Closing und Opening einzuführen. Diese werden nicht nur für den nachfolgenden Algorithmus verwendet, sondern im weiteren Verlauf der Arbeit auch dazu benutzt, Segmentierungsfehler, wie beispielsweise Hohlstellen, zu bereinigen.

Die Erosion eines Partikels  $\mathfrak{X}$  mit dem Strukturelement  $SE$  ist durch

*Morphologische Operatoren*

$$\epsilon_{SE}(\mathfrak{X}) = \bigcap_{b \in SE} \mathfrak{X}_{-b} \quad (47)$$

und die Dilatation durch

$$\eta_{SE}(\mathfrak{X}) = \bigcup_{b \in SE} \mathfrak{X}_{-b} \quad (48)$$

gegeben. Aufbauend auf diesen Definitionen gilt für das Opening

$$\gamma_{SE}(\mathfrak{X}) = \eta_{\hat{SE}}(\epsilon_{SE}(\mathfrak{X})) \quad (49)$$

und für das Closing

$$\phi_{SE}(\mathfrak{X}) = \epsilon_{\hat{SE}}(\eta_{SE}(\mathfrak{X})) \quad (50)$$

wobei  $\hat{SE} = \bigcup_{b \in SE} \{-b\}$  das am Ursprung gespiegelte Strukturelement ist.

Sei nun  $E_\omega$  die Halbebene mit Orientierung  $\omega$  und  $\hat{E}_\omega$  die gespiegelte Halbebene. Die konvexe Hülle eines Partikels  $\mathfrak{X}$  kann dann durch

$$CH(\mathfrak{X}) = \bigcap_{\omega} \left( \underbrace{\left( \bigcap_x \{E_{x\omega} : \mathfrak{X} \subseteq E_{x\omega}\} \right)}_{\phi_{\hat{E}_\omega}} \cap \underbrace{\left( \bigcap_x \{\hat{E}_{x\omega} : \mathfrak{X} \subseteq \hat{E}_{x\omega}\} \right)}_{\phi_{E_\omega}} \right) \quad (51)$$

berechnet werden, wobei die beiden inneren Ausdrücke

$$\bigcap_x \{E_{x\omega} : \mathfrak{X} \subseteq E_{x\omega}\}$$

und

$$\bigcap_x \{\hat{E}_{x\omega} : \mathfrak{X} \subseteq \hat{E}_{x\omega}\}$$

der Schnitt aller Translationen der Halbebenen in Richtung  $\omega$  ist, welche das Partikel  $\mathfrak{X}$  enthalten. Dieses ist aber, wie Soille [123, S. 116] zeigt, gleich dem Closing der jeweils gespiegelten Halbebene. Die konvexe Hülle kann also aus dem Schnitt der Closings aller Halbebenen über alle Richtungen  $\omega$  berechnet werden.

*Zweidimensionaler  
Algorithmus*

Um das Closing der Halbebene  $E_\omega$  mit einem zweidimensionalen Bild zu berechnen, schlägt Soille [123, S. 133] nun folgendes Verfahren vor. Es wird zunächst mittels Bresenham-Algorithmus eine Gerade, die senkrecht zur Richtung  $\omega$  einer bliebigen Halbene  $E_\omega$  steht, berechnet und so am Rand des Bildes positioniert, dass der Schnitt zwischen dem Bild und der Geraden leer ist. Anschließend wird die Gerade Pixel für Pixel in Richtung  $\omega$  verschoben und für jedes Pixel auf der Geraden getestet, ob der Pixel zum Partikel gehört, also den Wert 1 hat. Für Pixel außerhalb des Bildes wird der Wert 0 angenommen. Sobald ein Wert auf der Geraden im Partikel liegt, werden auch alle übrigen Pixel auf der Geraden und alle Pixel, welche die Gerade

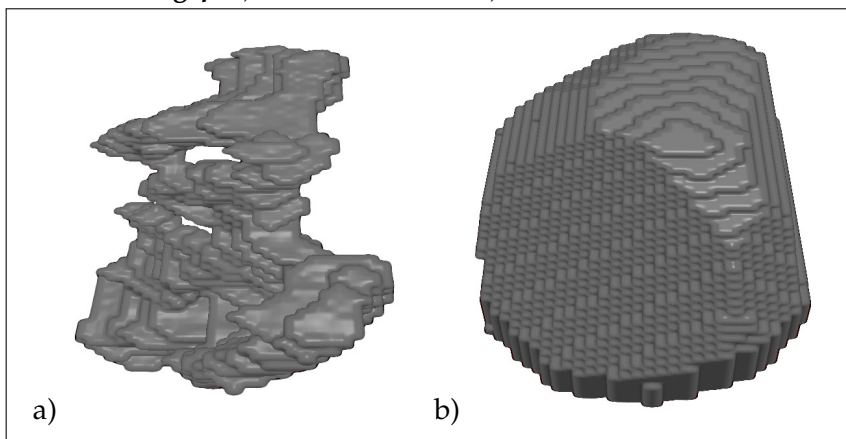


noch schneiden wird, auf 1 gesetzt. Daraus ergibt sich das Closing der Halbebene  $E_\omega$ . Durchgeführt für alle Richtungen  $\omega$  und anschließender Schnittbildung liefert dieser Algorithmus die diskret konvexe Hülle eines Partikels im zweidimensionalen Fall.

Soille [123] gibt allerdings keinen Algorithmus für den dreidimensionalen Fall an. In der vorliegenden Arbeit wird die von Hans u. a. [49] beschriebene Variante des oben beschriebenen Algorithmus verwendet, um die diskret konvexe Hülle eines dreidimensionalen Partikels zu berechnen. Der Ablauf ist wie folgt. Zunächst werden eine Reihe von normierten Richtungsvektoren  $\omega$  vom Ursprung des Koordinatensystems bestimmt, welche die Einheitskugel mit dem Mittelpunkt im Koordinatenursprung gleichmäßig schneiden. Für jede Richtung  $\omega$  wird dann eine Gerade bestimmt, die senkrecht zum Richtungsvektor  $\omega$  steht. Die Gerade wird nun mit fester Schrittweite durchlaufen und alle Voxel in Richtung  $\omega$  auf die Gerade projiziert. Liegen mehrere Voxel übereinander, werden diese für jeden Schritt in einer Liste gespeichert. Diese Listen werden anschließend für jede Gerade Voxel für Voxel durchlaufen. Sobald einer der projizierten Voxel in dem Partikel liegt, wird dieser und auch alle nachfolgenden Voxel auf 1 gesetzt. Der Schnitt zwischen allen auf diese Weise bestimmten Voxelmengen aller Geraden ergibt dann die diskret konvexe Hülle. Abbildung 4 zeigt die Aufsicht auf einen Riss und seine mittels dem hier vorgestellten Verfahren berechnete konvexe Hülle.

*Dreidimensionaler  
Algorithmus*

**Abbildung 4.:** a) Aufsicht auf Riss. b) Konvexe Hülle des Risses.



### 2.2.6 Fraktale Dimension

Nach Meinung von Mandelbrot [88, S. 1 f.] sind viele Muster und Objekte der Natur so irregulär und komplex, dass sie sich nur unzureichend durch die Idealisierungen der traditionellen euklidischen Geometrie beschreiben lassen. Naheliegende Beispiele für solche Ob-

jekte sind Küstenlinien, Gebirgszüge, Blitze oder Flussläufe. Bei näherer Betrachtung dieser Objekte fällt auf, dass sie oft ein hohes Maß an Selbstähnlichkeit aufweisen, also bei Vergrößerung immer wieder dieselben oder ähnliche Strukturen auftreten wie im Anfangszustand. Auch lässt sich für diese Objekte oft keine ganzzahlige Dimension angeben. Mandelbrot bezeichnet diese Objekte als Fraktale und ihre nicht ganzzahlige Dimension als fraktale Dimension. Mit dem Konzept der fraktalen Geometrie führt er Techniken zum Beschreiben dieser komplexen Systeme ein.

In der vorliegenden Arbeit werden vor allen Dingen die Techniken zur Messung der fraktalen Dimension von Objekten verwendet. Dabei wird der Wert der fraktalen Dimension als Formdeskriptor interpretiert, der die Rauigkeit und Irregularität von Partikeln, die nicht zwangsläufig fraktales Verhalten aufweisen, beschreibt. In zahlreichen Anwendungen kann man allerdings auch Partikel beobachten, die fraktale Strukturen besitzen. Oft entstehen diese Partikel auf Grund von Wachstumsprozessen, bei denen sich größere Teilchen durch Anlagerung von kleineren Teilchen bilden. Ist die Bewegung der Teilchen dabei zufällig, bezeichnet man diese Prozesse als diffusionsbegrenztes Wachstum [148]. Die fraktale Dimension kann bei solchen Prozessen als physikalische Größe interpretiert werden. Im Kontext der Stahlerzeugung lässt sich beispielsweise das dendritische Wachstum von nichtmetallischen Mikroeinschlüssen mittels eines solchen Prozesses beschreiben [36, 82].

Um den Begriff Fraktal und fraktale Dimension formal zu definieren, wird im Folgenden zunächst die Hausdorff Dimension eingeführt. Auf Basis dieser erfolgt dann die Definition des Begriffs Fraktal. Anschließend werden empirische Messmethoden vorgestellt, die eine Approximation der fraktalen Dimension für Partikel erlauben.

*$\delta$ -Überdeckung*

Sei  $U$  eine nichtleere Teilmenge von  $\mathbb{R}^n$ . Der Durchmesser von  $U$  wird als  $|U| = \sup \{|x - y| \mid x, y \in U\}$ , also der größte Abstand zwischen zwei beliebigen Punkten der Menge, definiert. Weiter sei  $F \subset \mathbb{R}^n$  gegeben und  $\{U_i\}$  eine Folge abzählbarer Mengen mit  $F \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} U_i$ , wobei  $|U_i| \leq \delta$  für alle  $i \in I$  ist. Man bezeichnet  $\{U_i\}$  als  $\delta$ -Überdeckung von  $F$ . Dann ist

$$\mathcal{H}_\delta^s = \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} |U_i|^s : \{U_i\} \text{ ist eine } \delta\text{-Überdeckung} \right\} \quad (52)$$

diejenige Überdeckung von  $F$  mit Mengen eines Durchmessers von höchstens  $\delta$  deren Summe aus der  $s$ -ten Potenz der Durchmesser minimal ist. Lässt man  $\delta$  immer kleiner werden, nimmt die Anzahl der möglichen Überdeckungen ab, während sich der Wert von  $\mathcal{H}_\delta^s$  erhöht und für  $\delta \rightarrow 0$  gegen einen Grenzwert läuft. Man bezeichnet

$$\mathcal{H}^s(F) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{H}_\delta^s(F) \quad (53)$$

als  $s$ -dimensionales Hausdorff-Maß [38, S. 75 f.]. Die Grenze aus Formel 53 existiert dabei für jede Teilmenge  $F \subset \mathbb{R}^n$ , wobei der Grenzwert 0 oder  $\infty$  annehmen kann. Für eine beliebige Menge  $F$  und  $\delta < 1$  gilt nun nach Formel 52

*Hausdorff-Maß*

$$\sum_i |U_i|^t = \sum_i |U_i|^{t-s} |U_i|^s \leq \delta^{t-s} \sum_i |U_i| \quad (54)$$

mit  $t > s$  und nach Bilden des Infimums

$$\mathcal{H}_\delta^t(F) \leq \delta^{t-s} \mathcal{H}_\delta^s(F) \quad (55)$$

Im Grenzübergang  $\delta \rightarrow 0$  ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^s(F) < \infty &\Rightarrow \mathcal{H}^t(F) = 0 \\ \mathcal{H}^t(F) > 0 &\Rightarrow \mathcal{H}^s(F) = \infty \end{aligned}$$

Dass heißt, es gibt einen kritischen Wert für  $s$ , bei dem  $\mathcal{H}^s(F)$  von  $\infty$  auf 0 springt. Diesen Wert bezeichnet man als Hausdorff Dimension. Formal lässt sich die Hausdorff Dimension für eine Menge  $F$  als

*Hausdorff-Dimension*

$$\dim_H^F = \inf \{s : \mathcal{H}^s(F) = 0\} = \sup \{s : \mathcal{H}^s(F) = \infty\} \quad (56)$$

schreiben [38, S. 29 f.]. Ein Fraktal kann schließlich als Menge definiert werden, bei der die Hausdorff Dimension die topologische Dimension überschreitet [88, S. 15 f.].

*Fraktal*

Aus dem oben eingeführten Dimensionsbegriff lässt sich nicht ohne weiteres ein Formalismus ableiten, der die Berechnung der fraktalen Dimension für beliebige Mengen erlaubt. Zwar rechnet Falconer [38, S. 31 f.] die Hausdorff Dimension für einige Beispiele explizit aus, nutzt dabei aber immer spezielle Eigenschaften der betrachteten Menge, welche die Berechnung vereinfachen. Da für die automatische Klassifizierung ein diskreter Algorithmus unabdingbar ist, wird für die Berechnung der fraktalen Dimension auf eine andere Definition, nämlich die sogenannten Boxdimension, zurückgegriffen. Im Folgenden wird der Algorithmus zur Berechnung der fraktalen Dimension unter Verwendung von Voxelmengen für den dreidimensionalen Fall beschrieben.

Gegeben sei ein Partikel  $\mathfrak{X}$ , welches mit einem kubisch primitiven Gittersystem mit Kantenlänge  $\delta$  geschnitten wird. Sei nun  $N_\delta(\mathfrak{X})$  die Anzahl der Würfel, die  $\mathfrak{X}$  schneidet. Die Dimension von  $\mathfrak{X}$  lässt sich dann aus dem Potenzgesetz von  $N_\delta(\mathfrak{X})$  ableiten, wenn  $\delta \rightarrow 0$  strebt. Hat  $\mathfrak{X}$  die Dimension  $s$ , so ist  $N_\delta(\mathfrak{X})$  proportional zu  $c\delta^{-s}$ , wobei  $c$  eine Konstante ist. Durch Anwenden des Logarithmus auf beiden Seiten und Auflösen nach  $s$  ergibt sich im Grenzübergang für  $\delta \rightarrow 0$

*Boxdimension*

$$s = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\log N_\delta(\mathfrak{X})}{-\log \delta} \quad (57)$$

Da die Potenzgesetz-Eigenschaft von  $N_\delta(\mathfrak{X})$  aber nicht zwangsläufig erfüllt sein muss, wird die Boxdimension durch den Limes superior und Limes inferior definiert. Die obere beziehungsweise untere Boxdimension sind gegeben durch

$$\overline{dim}_B F = \overline{\lim}_{\delta \rightarrow 0} \frac{\log N_\delta(\mathfrak{X})}{-\log \delta} \quad (58)$$

und

$$\underline{dim}_B F = \underline{\lim}_{\delta \rightarrow 0} \frac{\log N_\delta(\mathfrak{X})}{-\log \delta} , \quad (59)$$

wobei  $\overline{\lim}$  der Limes superior und  $\underline{\lim}$  der Limes inferior ist. Wenn  $\overline{dim}_B F$  gleich  $\underline{dim}_B F$  ist, bezeichnet man

$$dim_B F = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\log N_\delta(\mathfrak{X})}{-\log \delta} \quad (60)$$

als Boxdimension [38, S. 38 f.]. Man kann zeigen, dass

$$dim_H F \leq \underline{dim}_B F \leq \overline{dim}_B F \quad (61)$$

gilt [38, S. 43 f.], also die Boxdimension eine obere Schranke für die Hausdorff Dimension darstellt. Ein Verfahren zur Bestimmung der Boxdimension ergibt sich jetzt direkt aus Formel 60. Man überdeckt das Partikel  $\mathfrak{X}$  mit einem Gittersystem der Kantenlänge  $\delta$  und zählt die Überschneidungen  $N_\delta(\mathfrak{X})$ . Die Boxdimension ergibt sich aus der logarithmischen Rate, um die sich  $N_\delta(\mathfrak{X})$  erhöht, wenn  $\delta \rightarrow 0$  läuft. Konkret ergibt sie sich aus der Ausgleichsgeraden durch die Messpunkte für die verschiedenen Auflösungen von  $\delta$  im Graph von  $\log N_\delta(\mathfrak{X})$  gegen  $-\log \delta$ . Die Auflösung von  $\delta$  ist dabei in der Praxis natürlich durch den verwendeten Bildaufnahmesensor nach unten hin begrenzt. Interpretiert wird die Boxdimension dabei als Maßzahl, wie irregulär das Partikel  $\mathfrak{X}$  bei einer Auflösung von  $\delta$  erscheint und wie sich diese Irregularität entwickelt, wenn die Auflösung geringer wird.

### 2.3 ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Kapitel wurde zunächst der im Kontext dieser Arbeit verwendete Begriff des Partikels definiert. Aufbauend auf dieser Definition wurden Algorithmen für verschiedene Anwendungsszenarien vorgestellt, um Partikel aus vorsegmentierten Datensätzen zu rekonstruieren. Die Anwendungsszenarien unterteilen sich grob in zwei Klassen. Bei dem ersten Szenario läuft die Rekonstruktion und Weiterverarbeitung parallel zur Bildaufnahme (Online-System), während beim zweiten Szenario alle Daten vor der Auswertung bereits zur Verfügung stehen. Für beide Klassen wurden passende Algorithmen vorgestellt und das Laufzeitverhalten dieser untersucht. Anschließend

wurden Deskriptoren vorgestellt, mit denen sich die Gestalt von Partikeln quantifizieren lässt. Aufbauend auf diesen Deskriptoren können später Gestaltklassen festgelegt und eine automatische Klassifizierung der Partikel vorgenommen werden. Auch die im Folgenden beschriebenen statistischen Untersuchungen basieren auf den in diesem Kapitel beschriebenen Merkmalen. Konkret werden im nächsten Kapitel anhand des Durchmessers und des Schwerpunkts statistische Verfahren eingeführt, mit denen sich die Größenverteilung und die räumliche Verteilung von Partikeln beschreiben lässt.



Während in Kapitel 2 Methoden beschrieben wurden, um die Form und Morphologie einzelner individueller Partikel zu erfassen, sollen nun statistische Methoden erarbeitet werden, welche die Eigenschaften von Partikelsystemen als Ganzes quantifizieren. Konkret sollen die Größenverteilung und die räumliche Verteilung von Partikeln untersucht werden. Im Folgenden werden dafür zunächst einfache graphische Werkzeuge vorgestellt, die im weiteren Verlauf dieser Arbeit als Hilfsmittel für den Modellbildungsprozess verwendet werden. Anschließend werden Methoden eingeführt, um die Parameter dieser Modelle aus den Daten zu schätzen, welche mit Hilfe von Expertenwissen und ebendieser Werkzeuge abgeleitet wurden. In einem letzten Schritt wird dann gezeigt, wie die parametrisierten Modelle gegen die erhobenen Daten validiert werden können. Es wird mit der Beschreibung der Verfahren zur Analyse der Größenverteilung begonnen. Anschließend folgen die Methoden zur Analyse der räumlichen Verteilung. Insgesamt wird sich bei der Beschreibung auf ein System von polydispersen Kugeln beschränkt. Für den Anwendungsfall aus Abschnitt 4.2, in dem die hier erarbeiteten Techniken eingesetzt werden, stellt dies keine Einschränkung dar. Die dort untersuchten Poren und nichtmetallischen Einschlüsse sind annähernd kugelförmig (siehe Kapitel 5). Risse werden bei der statistischen Auswertung nicht betrachtet, da sie im eigentlichen Sinne keine Partikel darstellen und viel zu selten auftreten, als dass gesicherte statistische Aussagen über sie erhoben werden können.

### 3.1 GRUNDBEGRIFFE

Im Folgenden werden zunächst die Grundbegriffe stochastischer Modellierung eingeführt. Begonnen wird mit der Definition von sogenannten Zufallsexperimenten, da sich die in Abschnitt 4.2 beschriebene Messmethode für Partikelsysteme als solches modellieren lässt. In den darauf folgenden Abschnitten werden dann statistische Verfahren vorgestellt, die es erlauben, anhand von beobachteten Daten solcher Zufallsexperimente Schlussfolgerungen zu ziehen. Bei allen Ausführungen in diesem Abschnitt wird auf Beweise verzichtet und stattdessen auf die einschlägige Literatur zum Thema verwiesen. Die nachfolgenden Ergebnisse orientieren sich an Arens u. a. [7, S. 1286 ff.] und Henze [53].

Zufallsexperiment

Ein Zufallsexperiment ist ein beliebig oft wiederholbarer Vorgang, der nach einer bestimmten festgelegten Vorschrift ausgeführt wird und dessen Ergebnis im Vorhinein nicht eindeutig bestimmt werden kann, sondern vom Zufall abhängt. Der wiederholte Wurf einer Münze oder eines Würfels kann beispielsweise als Zufallsexperiment aufgefasst werden. Die Menge aller möglichen Ergebnisse, die bei einem solchen Zufallsexperiment auftreten können, bezeichnet man als die Ergebnismenge  $\Omega$ . Im Allgemeinen ist man aber nicht an dem genauen Ergebnis des Zufallsexperiments interessiert, sondern an der Frage, ob der Ausgang zu einer gewissen Menge von Ergebnissen, den sogenannten Ereignissen, gehört. Ereignisse sind Teilmengen der Grundmenge  $\Omega$ . Man sagt, ein Ereignis  $A$  ist eingetreten, wenn der Ausgang eines Experiments zur Teilmenge  $A \subset \Omega$  gehört. Spezielle Ereignisse sind hierbei das sichere Ereignis  $A = \Omega$  und das unmögliche Ereignis  $A = \Omega = \emptyset$ . Jede einelementige Teilmenge  $\{\omega\}$  von  $\Omega$  bezeichnet man als Elementarereignis. Zwei Ereignisse  $A, B \subset \Omega$  lassen sich durch die aus der Mengenlehre bekannten Operationen zu neuen Ereignissen zusammensetzen. So ist die Vereinigung  $A \cup B$  das Ereignis, dass mindestens eines der beiden Ereignisse eingetreten ist, der Schnitt  $A \cap B$  das Ereignis, dass  $A$  und  $B$  gemeinsam auftreten und  $A^C$  das Komplement von  $A$ , also das Ereignis, dass  $A$  nicht aufgetreten ist. Um hinreichend komplexe Zufallsexperimente modellieren zu können, fordert man zusätzlich von Ereignissen, dass sie unter Komplement und abzählbarer Vereinigung abgeschlossen sind. Man sagt, die Gesamtheit der Ereignisse muss eine  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{S}$  bilden. Formal ist  $\mathcal{S}$  definiert als System von Teilmengen von  $\Omega$ , für die gilt:

Ereignis

 $\sigma$ -Algebra

1.  $\Omega \in \mathcal{S}$
2. Wenn  $A \in \mathcal{S}$ , dann ist auch  $A^C \in \mathcal{S}$
3. Sind  $A_i \in \mathcal{S}, i \in \mathbb{N}$ , dann ist auch  $\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{S}$

Den Ereignissen in  $\mathcal{S}$  sollen nun in konsistenter Weise Wahrscheinlichkeiten zugeordnet werden. Die Zuordnung erfolgt mittels der reellwertigen Abbildung  $P : \mathcal{S} \rightarrow [0, 1]$ , die folgende Bedingungen erfüllt (Axiome nach Kolmogorov):

Axiome nach  
Kolmogorov

1.  $P(A) \geq 0$  für  $A \in \mathcal{S}$
2.  $P(\Omega) = 1$
3.  $P\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) = \sum_{j=1}^{\infty} P(A_j)$  für eine abzählbare Folge von disjunkten Teilmengen  $A_j \in \mathcal{S}$

Das Tripel  $(\Omega, \mathcal{S}, P)$  bezeichnet man dann als Wahrscheinlichkeitsraum.



Um nun Wahrscheinlichkeiten für konkrete Probleme berechnen zu können, wird der abstrakte Raum  $\Omega$  in  $\mathbb{R}$  abgebildet, so dass auch dort Ereignisse und Wahrscheinlichkeiten definiert sind, die der Struktur des Wahrscheinlichkeitsraums  $(\Omega, \mathcal{S}, P)$  entsprechen. Dazu legt man zunächst die  $\sigma$ -Algebra für  $\mathbb{R}$  fest. Man kann zeigen, dass das System der Borelmengen  $\mathcal{B}$  das kleinste System von Teilmengen von  $\mathbb{R}$  darstellt, die den im Axiomensystem von Kolmogorov beschriebenen Eigenschaften genügt und damit eine  $\sigma$ -Algebra über  $\mathbb{R}$  ist. Die Menge  $\mathcal{B}$  enthält dabei alle abgeschlossenen Intervalle der Form  $[a, b] = \{x \in \mathbb{R} : a \leq x \leq b\}$  mit  $a, b \in \mathbb{R}$  und jedes Intervall der Form  $(a, b), (a, b], [a, b), (-\infty, a], (-\infty, a), (a, \infty), [a, \infty)$  ist ebenfalls eine Borelmenge. Für eine Abbildung  $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  kann man nun ein Wahrscheinlichkeitsmaß  $P_X$  definieren, das jedem Ereignis  $B \in \mathcal{B}$  eine Wahrscheinlichkeit zuordnet. Und zwar wird das Ereignis  $B$  für alle  $w \in \Omega$  mit  $X(w) \in B$  ausgelöst, welches dem Urbild von  $X$ , bezeichnet als  $X^{-1}(B)$  entspricht. Dem Ereignis  $B$  wird nun also die Wahrscheinlichkeit seines Verursachers zugeordnet, nämlich

*Zufallsvariable*

$$P_X(B) = P(X \in B) = P(X^{-1}(B)) \quad (62)$$

Damit  $X^{-1}$  aber eine Wahrscheinlichkeit besitzt, muss es ein Ereignis sein, das heißt Element der auf  $\Omega$  erklärten  $\sigma$ -Algebra  $\mathcal{S}$ . Ist diese Eigenschaft erfüllt, bezeichnet man  $X$  als Zufallsvariable und den neuen Wahrscheinlichkeitsraum  $(\mathbb{R}, \mathcal{B}, P_X)$  als den von  $X$  induzierten Wahrscheinlichkeitsraum. Die Zufallsvariable  $X$  bildet  $\Omega$  also in  $\mathbb{R}$  ab und überträgt die Wahrscheinlichkeiten der Ereignisse. Ist nun  $X$  eine Zufallsvariable, so heißt die durch

*Verteilungsfunktion*

$$F(u) = P(X \leq u) \quad (63)$$

definierte Funktion  $F : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$  mit  $u \in \mathbb{R}$  die Verteilungsfunktion von  $X$ .

In der vorliegenden Arbeit wird zwischen zwei Klassen von Zufallsvariablen unterschieden, nämlich diskrete Zufallsvariablen und stetige Zufallsvariablen. Eine Zufallsvariable  $X$  heißt diskret verteilt, wenn sie endliche oder abzählbar unendliche Realisierungen  $x_i$  besitzt, so dass

*Diskrete  
Zufallsvariable*

$$\sum_{i=1}^{\infty} P(X = x_i) = 1 \quad (64)$$

gilt. Die Angabe aller Wahrscheinlichkeiten  $p_i = P(X = x_i) > 0$  mit  $i = 1, \dots, \infty$  heißt dabei Wahrscheinlichkeitsverteilung. Eine Zufallsvariable wird hingegen als stetig bezeichnet, wenn es eine nicht negative integrierbare Funktion  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit der Eigenschaft

*Stetige  
Zufallsvariable*

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt = 1 \quad (65)$$

gibt, so dass die Verteilungsfunktion  $F$  von  $X$  die Darstellung

$$F(u) = P(X \leq u) = \int_{-\infty}^u f(t) dt \leq 1 \quad (66)$$

Wahrscheinlichkeits-  
dichte

mit  $u \in \mathbb{R}$  besitzt. Die Funktion  $f$  wird dabei auch als Wahrscheinlichkeitsdichte bezeichnet.

Zusammenfassend führt die Einführung von Zufallsvariablen zu folgendem Ergebnis. Um für einen Wahrscheinlichkeitsraum  $(\Omega, \mathcal{S}, P)$  das Wahrscheinlichkeitsmaß  $P$  auf  $\mathcal{S}$  zu bestimmen, muss für jedes Ereignis  $A \in \mathcal{S}$  eine Wahrscheinlichkeit  $P(A)$  festgelegt werden. Besteht  $\Omega$  aus endlich vielen Elementarereignissen, wie beispielsweise beim Wurf einer Münze oder eines Würfels, lässt sich die Wahrscheinlichkeit noch einfach explizit ausrechnen. Wenn  $\Omega$  aber nicht nur aus endlich vielen Elementen besteht, enthält  $\mathcal{S}$  überabzählbar viele Ereignisse. Die Bestimmung von  $P(A)$  ist nicht ohne weiteres möglich. Bei dem durch  $X$  induzierten Wahrscheinlichkeitsraum  $(\mathbb{R}, \mathcal{B}, P_X)$  genügt dagegen die Angabe der Verteilungsfunktion  $F(u)$ , da mittels dieser die Wahrscheinlichkeit jedes Intervalls und damit auch jeder Borelmenge bestimmt werden kann.

### 3.2 GRÖSSENVERTEILUNG

Gegeben sei nun ein Partikelsystem  $\mathcal{X}$  aus polydispersen Kugeln. Zufällig wird eine Kugel aus dem Partikelsystem ausgewählt und die Größe dieser Kugel bestimmt. Für das Maß der Größe kann dabei einer der in Abschnitt 2.2 beschriebenen Deskriptoren, wie die mittlere Breite, die im Falle von Kugeln gleich dem Durchmesser ist, oder das Volumen verwendet werden. Diese Vorgehensweise beschreibt ein Zufallsexperiment. Die Grundmenge  $\Omega$  besteht aus den Kugeln im System, während mittels der Zufallsvariable  $X$  das Merkmal Größe einer Kugel  $w \in \Omega$  durch  $X(w) = x$  bestimmt wird, wobei  $x$  die Realisierung von  $X$  ist. Der Vorgang wird  $n$ -mal wiederholt und das Ergebnis in Form eines Vektors  $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ , der sogenannten Stichprobe der  $X_1, \dots, X_n$  unabhängig und identisch verteilten Zufallsvariablen zusammengefasst. Dabei ist  $x_i$  die Realisierung der Zufallsvariable  $X_i$  mit  $i = 1, \dots, n$ . Die Verteilungsfunktion der Zufallsvariablen wird in diesem Zufallsexperiment auch als Größenverteilung bezeichnet.

Stichprobe

Im Folgenden soll nun gezeigt werden, wie anhand der Stichprobenwerte ein geeignetes Modell zur Beschreibung der Größenverteilung bestimmt und parametrisiert werden kann. Der Begriff Modell wird dabei als Synonym für die Wahrscheinlichkeitsdichte  $f$  verwendet. Implizit wird also davon ausgegangen, dass die Zufallsvariablen bei dem gerade beschriebenen Zufallsexperiment stetig sind.

## 3.2.1 Schätzung der Verteilungs- und Dichtefunktion

Gegeben ist eine Stichprobe  $(x_1, \dots, x_n)$ , die bei der Durchführung des in Abschnitt 3.2 beschriebenen Zufallsexperimentes gewonnen wurde. Stellt sich die Frage, wie anhand der Stichprobe die theoretische Größenverteilung  $F$  geschätzt werden kann. Dazu führt man zunächst die empirische Verteilungsfunktion  $\hat{F}_n$  ein. Diese ergibt sich für eine Stichprobe mit Umfang  $n$  aus

$$\hat{F}_n(u) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{\{x_i \leq u\}}, \quad (67)$$

wobei  $\mathbf{1}_{\{x_i \leq u\}}$  gleich 1 für  $x_i \leq u$  ist. Laut Satz von Glivenko-Cantelli[137] kann nun gezeigt werden, dass  $\hat{F}_n$  in der Supremumsnorm

$$d_n = \sup_{u \in \mathbb{R}} |\hat{F}_n(u) - F(u)| \quad (68)$$

mit Wahrscheinlichkeit 1 gegen  $F(u)$  konvergiert. Aus dieser Erkenntnis lässt sich bereits ein einfaches graphisches Werkzeug definieren, mit dem überprüft werden kann, wie gut eine theoretische Verteilungsfunktion mit der empirischen Verteilungsfunktion übereinstimmt. Dazu trägt man die Werte der gewählten theoretischen Verteilungsfunktion  $F(u)$  gegen die Werte der empirischen Verteilungsfunktion  $\hat{F}_n(u)$  mit  $u \in \mathbb{R}$  auf. Stimmen beide Verteilungen überein, ergibt sich eine Diagonale. Dieses Verfahren wird als Probability-Probability-Plot (PP-Plot) bezeichnet. Ein ähnliches Verfahren, mit dem überprüft werden kann, wie gut eine gewählte Verteilungsfunktion zu den beobachteten Daten passt, ist der Quantile-Quantile-Plot (QQ-Plot). Dieser verwendet die sogenannten Quantile. Um die Quantile zu berechnen, wird die Stichprobe  $(x_1, \dots, x_n)$  zunächst in aufsteigender Reihenfolge, geschrieben als

$$x_{(1)} \leq x_{(2)} \leq \dots \leq x_{(n)}, \quad (69)$$

angeordnet. Dabei wird  $x_{(i)}$  als die  $i$ -te Ordnungsstatistik der Stichprobe bezeichnet. Das empirische  $\alpha$ -Quantil ist nun definiert als

$$q_\alpha = \begin{cases} x_{[n\alpha]+1} & , \text{ falls } n\alpha \notin \mathbb{N} \\ \frac{1}{2}(x_{[n\alpha]} + x_{[n\alpha]+1}) & , \text{ falls } n\alpha \in \mathbb{N} \end{cases} \quad (70)$$

wobei  $\alpha \in (0, 1)$  ist und die eckigen Klammern in diesem Fall für die Gaußklammer stehen. Die theoretischen Quantile für eine Zufallsvariable  $X$  mit Verteilungsfunktion  $F$  werden stattdessen mittels der Quantilfunktion

$$Q(\alpha) = \inf\{u \in \mathbb{R} : F(u) \geq \alpha\} \quad (71)$$

berechnet. Trägt man nun die empirischen und theoretischen Quantile gegeneinander auf, liegen die Werte auf einer Geraden, wenn

Empirische  
Verteilungsfunktion

PP-Plot und  
QQ-Plot

die Stichprobenwerte gut durch die gewählte Verteilungsfunktion beschrieben werden. Beide Verfahren stellen explorative Werkzeuge dar, mit denen eine von einem Experten getroffene Annahme über die Verteilungsfunktion graphisch, durch visuelle Inspektion, anhand von Stichprobenwerten überprüft werden kann.

*Histogramm*

Geht man von einer stetig verteilten Zufallsvariable  $X$  aus, ist man nicht nur an der Verteilungsfunktion  $F$ , sondern auch an der Wahrscheinlichkeitsdichte  $f$  interessiert. Zwar kann im Allgemeinen die Dichte  $f$  durch die Ableitung von  $F$  bestimmt werden, wenn aber nur die empirische Verteilungsfunktion  $\hat{F}_n$  einer Stichprobe  $(x_1, \dots, x_n)$  vorliegt, ist dies nicht möglich, da  $\hat{F}_n$  nicht differenzierbar ist. Im Folgenden werden deshalb zwei Verfahren vorgestellt, mit denen man die Dichte  $f$  anhand von einer Stichprobe eines Zufallsexperiments schätzen kann. Im weiteren Verlauf werden diese Verfahren als graphisches Hilfsmittel verwendet, um anhand der Form der geschätzten Dichte auf ein adäquates Modell zu schließen. Das bekannteste und älteste Verfahren, um eine solche Schätzung vorzunehmen, ist das Histogramm. Für diese Methode werden die Stichprobenwerte zunächst in Intervalle konstanter Breite aufgeteilt. Dann wird die relative Häufigkeit für jedes dieser Intervalle berechnet. Diese ergibt sich aus der Anzahl der Werte am Gesamtumfang der Stichprobe, die in das jeweilige Intervall fallen. Schließlich ergibt sich die Häufigkeitsdichte eines Intervalls aus dem Quotienten der relativen Häufigkeit und der Intervallbreite. Werden Intervallbreite und Häufigkeitsdichte der einzelnen Intervalle als Breite und Höhe von Rechtecken interpretiert und in einem Koordinatensystem eingezeichnet, kann das auf diese Weise konstruierte Histogramm als stückweise konstante Schätzung der stetigen Dichtefunktion interpretiert werden [19, S. 252]. Dieser Ansatz liefert eine erste Vermutung über die Form der gesuchten Dichtefunktion. Problematisch dabei ist, dass das Ergebnis stark von der gewählten Intervallbreite abhängt und nur eine diskrete Approximation der stetigen Dichte  $f$  liefert. Letzteres kann aber in der Praxis oft vernachlässigt werden, da durch Messungen gewonnene Stichproben häufig diskret erfasst werden. Gerade bei dem in dieser Arbeit beschriebenen Anwendungsfall, bei dem die Durchmesser der polydispersen Kugeln in digitalisierten Schnittbildern gemessen werden, kommt dies zum Tragen. Alternativ erlaubt die Anwendung eines Kerndichteschätzers die stetige Schätzung der Dichtefunktion. Der Kerndichteschätzer hat dabei die Form

*Kerndichteschätzer*

$$\hat{f}(v) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n k\left(\frac{v - x_i}{h}\right), \quad (72)$$

wobei  $k$  der Kern des Schätzers und die Bandbreite  $h$  ein frei wählbarer Parameter ist. In der vorliegenden Arbeit wird für  $k$  ein durch

$$k(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}t^2\right) \quad (73)$$

definierter Gaußkern verwendet [19, S. 260]. Histogramm und Kern-dichteschätzer werden bei der späteren Modellbildung zusammen mit Expertenwissen dafür verwendet, eine passende Dichtefunktion auszuwählen.

### 3.2.2 Schätzen der Verteilungsparameter

Angenommen, für die Verteilung der polydispersen Kugeldurchmesser wurde eine geeignete Dichtefunktion ausgewählt. Gemeinhin hängt diese von weiteren Parametern, beschrieben durch den Parametervektor  $\theta$ , ab. Auf Grund der stochastischen Unabhängigkeit ergibt sich die gemeinsame Dichte der Stichprobe aus

$$p(x|\theta) = f(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n|\theta) = \prod_{i=1}^n f(x_i|\theta) \quad (74)$$

Formel 74 lässt sich als die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Stichprobe mit den Stichprobenwerten  $x = (x_1, \dots, x_n)$  bei gegebenem Parameter  $\theta$  interpretieren. Man bezeichnet  $p(x|\theta)$  auch als die Likelihood-Funktion. Der Parametervektor  $\theta$  lässt sich nun ebenfalls als Zufallsvariable auffassen, dessen Dichte durch  $p(\theta)$  angegeben wird. Dabei wird  $p(\theta)$  als A-priori Dichte bezeichnet und modelliert das Vorwissen über die Verteilung des Parameters  $\theta$ . Nun ist man aber weniger an der Verteilung für das Auftreten einer beliebigen Stichprobe bei festen  $\theta$  interessiert, sondern an der Verteilung von  $\theta$  bei einer beobachteten Stichprobe mit Stichprobenwerten  $x$ . Diese, als A-posteriori Dichte bezeichnete Funktion, lässt sich unter Anwendung des Satzes von Bayes [102, S. 313 ff.] aus der A-priori Dichte und der Likelihood-Funktion berechnen. Es gilt

$$p(\theta|x) = \frac{p(\theta)p(x|\theta)}{p(x)}, \quad (75)$$

wobei  $p(x)$  die totale Wahrscheinlichkeit für das Auftreten der Stichprobe  $x$  ist und durch das Integral

$$p(x) = \int p(x|\theta)p(\theta)d\theta \quad (76)$$

über den Parameterraum  $\theta$  berechnet werden kann. Formel 75 beschreibt also die Verteilung des Parameters  $\theta$  nach Beobachtung einer Stichprobe und Beachtung des Vorwissens und gibt an, welche Werte für  $\theta$  relativ zu den anderen am glaubwürdigsten sind. Ist die durch die A-posteriori Dichte beschriebene Verteilung sehr eng, liegen also die Werte mit der höchsten Wahrscheinlichkeit auf engem Raum, besteht eine hohe Sicherheit gegenüber den möglichen Werten von  $\theta$ . Bei einer stark gestreckten Verteilung mit hoher Varianz ist die Schätzung von  $\theta$  dagegen mit hoher Unsicherheit behaftet. Diese Unsicherheit soll im Folgenden genauer quantifiziert werden, um damit später

Likelihood-Funktion

A-priori Dichte

Satz von Bayes

A-posteriori Dichte

*Highest Density  
Interval*

das Abbruchkriterium für den Anwendungsfall konstruieren zu können. In dieser Arbeit werden dazu die Intervalle der höchsten Dichte (im Englischen Highest Density Interval (HDI)) verwendet. Das HDI fasst die Verteilung durch ein Intervall  $I = [t_a, t_b]$  zusammen, in dem  $1 - \alpha$  Prozent aller Punkte liegen, die mindestens eine so hohe Dichte haben wie die Punkte außerhalb des Intervalls. Formal ist das HDI gegeben durch

$$\int_{t_a}^{t_b} p(\theta|x)d\theta = 1 - \alpha \quad , \quad (77)$$

wobei zusätzlich für alle  $\theta \in I$  und alle  $\hat{\theta} \notin I$  die Ungleichung  $p(\theta|x) \geq p(\hat{\theta}|x)$  gelten muss [44, S. 49 ff.]. Je enger das Intervall  $I$  ist, umso genauer ist die Schätzung des Parameters  $\theta$ . Bei einer fortlaufenden Messung kann das HDI kontinuierlich parallel zur Messung berechnet werden. Ist ein Intervall mit einer vorgegebenen Zielbreite unter der Angabe der Genauigkeit  $\alpha$  erreicht, wird der Prozess gestoppt. Diese Art der Datensammlung wird auch in anderen wissenschaftlichen Disziplinen angewandt [73, S. 590 ff.] und bildet den Grundbaustein des Abbruchkriteriums aus Abschnitt 6.4.2.

*Metropolis-  
Algorithmus*

In der Praxis ist es auf Grund des Integrals im Nenner von Formel 75 häufig schwierig, die A-posteriori Dichte direkt anzugeben. Zwar gehören die A-posteriori und A-priori Dichten für bestimmte A-priori Dichten derselben Familie an (die sogenannten konjugierten A-priori Dichten), für die wiederum geschlossene Formen bekannt sind, im Allgemeinen existiert aber nicht für jede Likelihood-Funktion ein konjugiertes Prior. Auch numerische Integration mit Standardverfahren stößt schnell an die Grenzen, wenn es sich bei  $\theta$  um einen hochdimensionalen Parametervektor handelt. Alternativ versucht man deshalb, die A-posteriori Dichte durch Stichproben diskret zu approximieren. Eine Möglichkeit, dies zu tun, besteht in der Verwendung des Metropolis-Algorithmus [93], der zur Klasse der Markov-Ketten-Monte-Carlo (MCMC)-Verfahren gehört. Unter der Voraussetzung, dass A-priori und die A-posteriori Dichte für jeden spezifizierten Parameter  $\theta$  und eine Stichprobe mit Stichprobenwerten  $x$  auswertbar sind, lässt sich der Algorithmus wie folgt angeben. Sei  $\theta^{(1)}$  ein festgelegter Startwert im Parameterraum und  $h(x|\theta^{(t)})$  eine beliebige Dichtefunktion, die vom aktuellen Zustand  $\theta^{(t)}$  abhängt und Vorschlagsdichte genannt wird. In der vorliegenden Arbeit wird eine symmetrische Dichtefunktion als Vorschlagsdichte verwendet und zwar die Normalverteilung. In diesem speziellen Fall ist  $h(x|\theta^{(t)}) = h(\theta^{(t)}|x)$ . Gesucht wird nun die Stichprobe der Zufallsvariablen  $\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(l)}$ , die eine Verteilung mit Dichte  $p(\theta|x)$  haben. Um diese zu berechnen wird iterativ für  $t < l$  eine neue Zufallszahl  $\hat{\theta}$  aus der Vorschlagsdich-

te  $h(x|\theta^{(t)})$  gezogen. Ob  $\hat{\theta}$  als neuer Zustand und damit als Zufallsvariable  $\theta^{(t+1)}$  der Stichprobe akzeptiert wird, ergibt sich aus

$$\theta^{(t+1)} = \begin{cases} \hat{\theta} & \text{mit Wahrscheinlichkeit } \min\left(1, \frac{p(\hat{\theta}|x)}{p(\theta^{(t)}|x)}\right) \\ \theta^{(t)} & \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1 - \min\left(1, \frac{p(\hat{\theta}|x)}{p(\theta^{(t)}|x)}\right) \end{cases} .$$

Die A-posteriori Dichte  $p(\theta|x)$  geht in die Berechnung lediglich im Verhältnis  $\frac{p(\hat{\theta}|x)}{p(\theta^{(t)}|x)}$  ein. Der konstante Nenner von Formel 75 kürzt sich also raus und muss nicht bekannt sein. Für die auf diese Weise generierte Stichprobe kann gezeigt werden, dass  $p(\theta|x)$  die stationäre Verteilung von  $\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(l)}$  ist [112, S. 231 ff.]. Je mehr Zufallszahlen also erzeugt werden, umso besser wird die Verteilung  $p(\theta|x)$  approximiert. In der Praxis müssen aber die ersten Stichprobenwerte verworfen werden, da der Algorithmus eine Zeit benötigt, bis er in den stationären Zustand übergeht. Außerdem müssen Startparameter  $\theta^{(1)}$  und Vorschlagsdichte  $h(x|\theta^{(t)})$  adäquat gewählt und parametrisiert werden. In der vorliegenden Arbeit wird auf die Software JAGS<sup>1</sup> zurückgegriffen, um eine Stichprobe der A-posteriori Dichte zu generieren. Passende Vorschlagsdichten und Startwerte werden für den Nutzer dann automatisch gewählt.

Auf Basis der Stichprobe  $\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(l)}$  lassen sich dann die zusammenfassenden Statistiken wie Mittelwert, Varianz und das HDI berechnen, die später zum Vergleich verschiedener Messungen dienen und Basis des Abbruchkriteriums sind. Der Mittelwert  $\bar{\theta}$  ergibt sich aus

$$\begin{aligned} E(\theta|x) &= \int \theta p(\theta|x) d\theta \\ &\approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^l \theta^{(i)} = \bar{\theta} \end{aligned} \quad (78)$$

Mittelwert und  
Varianz

und die Varianz  $s^2$  aus

$$\begin{aligned} \text{Var}(\theta|x) &= \int (p(\theta|x) - E(\theta|x))^2 d\theta \\ &\approx \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^l (\theta^{(i)} - \bar{\theta})^2 = s^2 \end{aligned} \quad (79)$$

Das HDI wird mittels dem von Chen und Shao [25] vorgeschlagenen Algorithmus berechnet. Dafür werden die Stichprobenwerte zunächst aufsteigend sortiert und anschließend alle Intervalle der Form

$$I_j = \left( \theta^{(j)}, \theta^{(j+((1-\alpha)n))} \right) \quad (80)$$

mit  $j = 1, \dots, n - ((1-\alpha)n)$  berechnet, wobei  $\alpha$  die Wahrscheinlichkeitsmasse für das Intervall festlegt. Das Intervall  $I_j$  mit der geringsten Breite ist dann das HDI.

<sup>1</sup> <http://mcmc-jags.sourceforge.net/>

Maximum-  
Likelihood

Nicht unerwähnt soll an dieser Stelle das Maximum-Likelihood Verfahren bleiben, mit dem ebenfalls Schätzungen der Verteilungsparameter gewonnen werden können. Die Idee dabei ist, die Likelihood-Funktion aus Formel 74 für einen gegebenen Datensatz  $x$  in Bezug auf  $\theta$  zu maximieren. Im Gegensatz zum oben vorgestellten bayesschen Ansatz wird  $\theta$  aber nicht als Zufallsvariable betrachtet. Das Maximum-Likelihood Verfahren liefert also nur eine Punktschätzung für den Parameter und nicht eine vollständige Verteilung. Das Verfahren wird in dieser Arbeit verwendet, um beim Modellbildungsprozess schnell die Parameter für die ausgewählte Dichte zu berechnen. Das so parametrisierte Modell kann dann direkt mit dem Histogramm und der Kerndichteschätzung verglichen werden.

### 3.2.3 Überprüfung des Modells

Gesetzt den Fall, eine passende Dichtefunktion wurde ausgewählt, die die Durchmesserverteilung der polydispersen Kugeln beschreibt, und die A-posteriori Dichte der Verteilungsparameter wurden mittels des im vorherigen Abschnitt beschriebenen Verfahrens geschätzt, dann soll im nächsten Schritt überprüft werden, inwieweit das so spezifizierte Modell wirklich zu den erhobenen Daten passt. Dieser Test soll einerseits den Modellbildungsprozess unterstützen, andererseits später im Anwendungsfall dafür sorgen, dass keine Daten, die grob die getroffenen Annahmen verletzen, mit in die Auswertung eingehen. Für die letztere Anforderung muss der Test nach Kalibrierung möglichst autonom ablaufen.

Das Verfahren verwendet die Dichte der posteriori-prädiktiven Verteilung. Diese beschreibt die Verteilung von bis Dato unbeobachteten Daten  $\tilde{x}$  in Abhängigkeit der schon beobachteten Daten  $x$ . Sie ist definiert durch

$$p(\tilde{x}|x) = \int p(\tilde{x}|\theta)p(\theta|x)d\theta \quad (81)$$

Posteriori-prädiktive  
Verteilung

ergibt sich also aus dem Produkt der Likelihood-Funktion für  $\tilde{x}$  und der A-posteriori Dichte für alle möglichen Werte von  $\theta$  [43, S. 8 ff.]. In der Praxis wird die posteriori-prädiktive Verteilung durch Simulation berechnet. Dafür werden für jeden der durch das MCMC-Verfahren bestimmten Parameter  $\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(l)}$  jeweils  $n$  Stichproben aus der Likelihood-Funktion gezogen. Für jede der  $i = 1, \dots, l$  auf diese Weise generierten Stichproben  $\tilde{x}^{(i)} = \tilde{x}_1^{(i)}, \dots, \tilde{x}_n^{(i)}$  mit Stichprobenumfang  $n$  wird dann die posteriori-prädiktive Verteilung der Differenzen

$$\Delta^{(i)} = T(x, \theta^{(i)}) - T(\tilde{x}^{(i)}, \theta^{(i)}) \quad (82)$$

Teststatistik

über die gemessenen und simulierten Daten berechnet, wobei  $T$  eine Teststatistik ist. Üblicherweise verwendet man als Teststatistik Mini-



imum, Maximum, Mittelwert oder Quantile, aber auch komplexere Kriterien, wie beispielsweise der  $\chi^2$  Test können angewendet werden [43, S. 163 ff.]. Ist nun die 0 ein Extremwert der posteriori-prädiktiven Verteilungen der Differenzen  $\Delta^{(1)}, \dots, \Delta^{(l)}$ , so ist dies ein Hinweis auf eine große Diskrepanz zwischen Modell und erhobenen Daten. Ein einfacher graphischer Test lässt sich wie folgt konstruieren. Man berechnet das Histogramm und das HDI über  $\Delta^{(1)}, \dots, \Delta^{(l)}$  und überprüft, ob 0 innerhalb des HDIs liegt. Ist dies nicht der Fall, kann die Abweichung zwischen Daten und Modell nicht mehr als statistisches Rauschen interpretiert werden [43, S. 172]. Alternativ lässt sich auch ein zum  $p$ -Wert der Inferenzstatistik äquivalenter Wert, der sogenannte posteriori-prädiktive  $p_B$ -Wert, berechnen [43, S. 163 ff.]. Dieser gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass die generierten Daten bezogen auf die Teststatistik extremer ausfallen als die gemessenen Daten. Wenn die Daten die Modellannahme verletzen, ist  $T(x, \theta^{(i)})$  signifikant verschieden von  $T(\tilde{x}, \theta^{(i)})$ , der  $p_B$ -Wert wird also je nach gewählter Teststatistik einen extremen Wert nahe 0 oder 1 annehmen. Damit lässt sich der oben besprochene graphische Test nach entsprechender Kalibrierung automatisieren. Vorzugsweise wird in der vorliegenden Arbeit aber der graphische Test verwendet.

### 3.3 RÄUMLICHE VERTEILUNG

Nachdem geeignete Methoden vorgestellt wurden, um die Größenverteilung von Partikeln zu analysieren, soll nun ihre räumliche Verteilung genauer untersucht werden. Dabei stehen folgende Aspekte im Mittelpunkt. Zunächst stellt sich die Frage, ob die Partikel homogen, also gleichförmig, im Material verteilt sind. Der Begriff der Homogenität wird im Folgenden exakt definiert und aufbauend auf dieser Definition ein Verfahren abgeleitet, um diese Annahme zu überprüfen. Die Annahme ist von großer Bedeutung für das in Abschnitt 4.2 beschriebene Messverfahren. Ist nämlich die Homogenität der Defektverteilung in der Bramme nicht gegeben, können keine gesicherten statistischen Erkenntnisse über den Reinheitsgrad aus zufällig der Bramme entnommen Materialproben abgeleitet werden. Weiter soll untersucht werden, ob und inwieweit zwischen den einzelnen Partikeln Interaktion stattfindet. Hängt also die Position eines einzelnen Partikels von Partikeln in seiner Nachbarschaft ab oder sind sie zufällig und unabhängig voneinander im Raum verteilt? Um diese Frage zu beantworten, wird das durch die Partikelpositionen gebildete Punktmuster als Realisierung eines Modells, konkret eines Punktprozesses, interpretiert. Dieses Modell dient, zusammen mit den aus den Daten geschätzten Modellparametern, dann als Grundlage für die Simulation weiterer Punktmuster, die unter Verwendung geeigneter Statistiken gegen das beobachtete Punktmuster verglichen werden

und Aufschluss über Verteilungseigenschaften liefern. Die Form des Modells, die Methode zur Parameterschätzung und die Statistiken werden in den folgenden Abschnitten erläutert. Begonnen wird mit der Definition der grundlegenden Begriffe.

### 3.3.1 Punktprozess

*Punkte* Gegeben ist, wie bereits im vorherigen Abschnitt eingeführt, ein Partikelsystem  $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$  aus polydispersen Kugeln, wobei deren Position im Raum durch eine Sequenz von Zufallsvariablen  $\{X_1, X_2, \dots\}$  beschrieben wird. Formal ist eine Zufallsvariable  $X_i$  der Sequenz also eine Abbildung  $X_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ . Dabei wird in der vorliegenden Arbeit die Position der Kugel durch ihren Schwerpunkt angegeben und in der Regel der Fall  $d = 3$  untersucht. Die einzelnen Zufallsvariablen werden auch als Punkte bezeichnet.

*Punktprozess* Sei nun  $N(B) = \#\{i : X_i \in B\}$  mit  $i \in \mathbb{N}$  die Anzahl der Punkte  $X_i$  in einer Teilmenge  $B \subset \mathbb{R}^d$ . Wenn  $N(B) < \infty$  für alle beschränkten Mengen  $B$  gilt, dann wird  $\{X_1, X_2, \dots\}$  als zufälliger Punktprozess bezeichnet und man schreibt  $N = \{X_1, X_2, \dots\}$  [61, S. 24 ff.]. In Übereinstimmung mit der gängigen Literatur zum Thema räumlicher Statistik wird  $N$  also als Symbol für zwei unterschiedliche Konzepte verwendet. Zum einen bezeichnet  $N$  ein Zählmaß auf zufälligen Mengen, zum anderen wird damit die zufällige Menge der Punkte selbst bezeichnet.

Weiter definiert man

$$P(N(B) = n) \quad (83)$$

als die Wahrscheinlichkeit, dass in der Menge  $B$  exakt  $n$  Punkte des Prozesses  $N$  liegen und

$$P(N(B_1) = n_1, \dots, N(B_k) = n_k) \quad (84)$$

als die Wahrscheinlichkeit, dass in den Mengen  $B_1, \dots, B_k$  jeweils exakt  $n_1, \dots, n_k$  Punkte liegen. Die mittlere Anzahl der Punkte von  $N$  in  $B$  wird schließlich als

$$\Lambda(B) = E(N(B)) \quad (85)$$

*Intensitätsmaß* geschrieben, wobei  $E$  der Erwartungswert ist und die Funktion  $\Lambda$  als Intensitätsmaß bezeichnet wird. Wenn  $\Lambda$  absolut stetig ist, dann gibt es eine Lebesgue integrierbare Funktion  $\lambda(u)$ , so dass

$$\Lambda(B) = \int_B \lambda(u) du \quad (86)$$

*Intensität* gilt. Die Dichtefunktion  $\lambda(u)$  wird auch als Intensität bezeichnet. Formel 86 lässt sich als Volumenintegral in  $\mathbb{R}^d$  interpretieren, das heißt

$\lambda(u)du$  ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Punkt in der Kugel mit infinitesimalem Volumen  $du$  mit Mittelpunkt  $u$  liegt [61, S. 28 ff.].

Ein Punktprozess  $N$  wird als homogen (oder auch stationär) bezeichnet, wenn  $N$  die gleiche Verteilung wie  $N_u$  für alle  $u \in \mathbb{R}^d$  hat. Dabei ist  $N_u$  der um  $u$  verschobene Punktprozess  $N$ , also  $N_u = \{X_1 + u, \dots, X_n + u\}$ . Die gleiche Verteilung liegt dann vor, wenn

Homogenität

$$\begin{aligned} & P(N(B_1) = n_1, \dots, N(B_K) = n_k) \\ &= P(N_u(B_1) = n_1, \dots, N_u(B_k) = n_k) \\ &= P(N(B_1 - u) = n_1, \dots, N(B_k - u) = n_k) \end{aligned} \quad (87)$$

gilt. Dabei ergibt sich die letzte Zeile aus  $N_u(B) = N(B - u)$  für alle  $B$  und  $u$  mit  $B - u = \{y - u : y \in B\}$ , also die um den Vektor  $-u$  verschobene Menge  $B$ , auch als  $B_{-u}$  bezeichnet. Anders ausgedrückt ist die Anzahl der Punkte für eine feste Menge  $B$  und einen um  $u$  verschobenen Punktprozess  $N_u$  gleich der Anzahl der Punkte der um  $-u$  verschobenen Menge  $B$  und einem festen Punktprozess  $N$  [61, S. 37 ff.]. Man bezeichnet deshalb auch den Punktprozess  $N$  als translations-invariant. Aus der Translations-Invarianz ergibt sich eine weitere wichtige Eigenschaft. Für einen homogenen Punktprozess gilt für das Intensitätsmaß

$$\Lambda(B) = E(N(B)) = E(N_u(B)) = E(N(B_{-u})) = \Lambda(B_{-u}) \quad (88)$$

Es ist also ebenfalls translations-invariant. Daraus folgt

$$\Lambda(B) = \lambda v(B) \quad (89)$$

oder anders ausgedrückt, das Intensitätsmaß  $\Lambda(B)$  ist bis auf eine multiplikative Konstante  $\lambda$  gleich dem Lebesgue-Maß  $v(B)$  (für  $\mathbb{R}^2$  die Oberfläche und  $\mathbb{R}^3$  das Volumen) [133, Satz 1.83, 31 ff.]. Wird für das Volumen von  $B$  das Einheitsvolumen gewählt, kann  $\lambda$  als die durchschnittliche Anzahl von Punkten in  $N$  interpretiert werden.

Neben der Homogenität wird in der Praxis häufig die Annahme getroffen, dass der Punktprozess isotrop, also invariant unter Rotation, ist. Ein homogener, isotroper Punktprozess wird auch als bewegungs-invariant bezeichnet.

### 3.3.2 Homogener Poisson Punktprozess

Nachdem im vorherigen Abschnitt die grundlegenden Begrifflichkeiten definiert wurden, wird nun ein Modell vorgestellt, bei dem die Verteilung der Punkte sehr starken Unabhängigkeitsbedingungen unterliegt. Bei diesem Modell sollen sowohl die Anzahl der Punkte innerhalb disjunkter Teilmengen, als auch die Position der Punkte

Complete Spatial  
Randomness

im Raum stochastisch unabhängig voneinander sein. Zusätzlich sollen die Punkte zufällig, das heißt im Sinn einer Gleichverteilung im Raum verteilt, sein. Diese Eigenschaft von Punktprozessen wird in der englischsprachigen Literatur als Complete Spatial Randomness (CSR) bezeichnet und lässt sich grob mit *rein zufällige Anordnung* (der Punkte) übersetzen. Begonnen wird, in Übereinstimmung mit Stoyan, Kendall und Mecke [133, S. 37] sowie Illian u. a. [61, S. 59 ff.] mit der Definition des binomialen Punktprozesses. Bei diesem ist die CSR-Eigenschaft noch nicht erfüllt. Er dient aber als Basis zur Konstruktion des homogenen Poissonpunktprozess, der die gewünschten Eigenschaften besitzt.

Angenommen, in einer begrenzten Menge  $W \subset \mathbb{R}^d$  liegen  $n$  Punkte, die jeweils gleichverteilt und unabhängig voneinander auftreten. Ein einzelner Punkt  $X$  wird dabei als gleichverteilt in  $W$  angesehen, wenn

$$P(X \in B) = \frac{v(B)}{v(W)} \quad (90)$$

für alle Teilmengen  $B$  von  $W$  gilt. Für  $n$  unabhängige Punkte  $X_1, \dots, X_n$  gilt dann

$$\begin{aligned} & P(X_1 \in B_1, \dots, X_n \in B_n) \\ &= P(X_1 \in B_1) \dots P(X_n \in B_n) \\ &= \frac{v(B_1) \dots v(B_n)}{v(W)^n} \end{aligned} \quad (91)$$

Binomialer  
Punktprozess

Die Punkte  $X_1, \dots, X_n$  bilden einen binomialen Punktprozess mit fester Anzahl  $n$  an Punkten. Der Name ergibt sich dabei aus der Eigenschaft, dass die Anzahl der Punkte  $k$  in einer Teilmenge  $B \subset W$  der Binomialverteilung folgt. Konkret gilt

$$P(N(B) = k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \quad (92)$$

mit  $k = 0, \dots, n$  und  $p = \frac{v(B)}{v(W)}$ . Für die Binomialverteilung ist der Mittelwert gleich  $np$  [72, S. 111]. Somit ist die durchschnittliche Anzahl von Punkten in  $B$  gleich

$$np = n \frac{v(B)}{v(W)} = \lambda v(B) \quad (93)$$

wobei  $\lambda = \frac{n}{v(W)}$  ist. Die Intensität  $\lambda$  bezeichnet also die durchschnittliche Anzahl von Punkten im Einheitsvolumen. Man beachte, dass beim binomialen Punktprozess die Anzahl der Punkte in disjunkten Teilmengen von  $W$  nicht unabhängig voneinander ist, da aus  $N(B) = m$  direkt  $N(W \setminus B) = n - m$  folgt. Daher ist diese kein geeignetes Modell für CSR. Eine Verteilung, bei der die zufällige Anzahl der Punkte in einer Teilmenge nicht die Anzahl in einer anderen Teilmenge beeinflusst, kann aber wie folgt konstruiert werden. Vergrößert man das Beobachtungsfenster  $W$ , so dass es den gesamten  $\mathbb{R}^d$

einnimmt, dann strebt  $p$  gegen 0, während  $n$  gegen unendlich läuft. Für ein fixes Verhältnis  $\frac{n}{v(W)} = \lambda$  gilt dann, wegen des Poissonschen Grenzwertsatzes [72, S. 115], für alle Teilmengen  $B$  von  $W$ , dass die Anzahl  $k$  der Punkte in  $N(B)$  einer Poisson-Verteilung mit Mittelwert  $\lambda v(B)$  folgt. Die Wahrscheinlichkeit, dass in einer Teilmenge  $B$  also exakt  $m$  Punkte liegen, ist durch

$$P(N(B) = m) = \frac{(\lambda v(B))^m}{m!} e^{-\lambda v(B)} \quad (94)$$

*Homogener Poisson  
Punktprozess*

gegeben. Für die disjunkten Teilmengen  $B_1, \dots, B_k$  sind bei einem solchen Prozess  $N(B_1), \dots, N(B_k)$  unabhängige Zufallsvariablen, die CSR-Eigenschaft ist also erfüllt [61, S. 60 ff.]. Ein solcher Prozess wird als homogener Poisson Punktprozess (PPP) bezeichnet.

Zusammengefasst sind die wichtigsten Eigenschaften eines homogenen PPPs:

*Eigenschaften eines  
homogenen PPPs*

1. Die Anzahl der Punkte in einem homogenen PPP folgt für jede Teilmenge  $B$  der Poisson Verteilung mit dem Mittelwert  $\lambda v(B)$ .
2. Die Anzahl der Punkte in  $k$  disjunkten Teilmengen  $B_1, \dots, B_k$  eines homogenen PPP sind unabhängige Zufallsvariablen.
3. Ein homogener PPP ist bewegungs-invariant.

Damit der PPP aber als adäquates Modell für die Beschreibung der räumlichen Verteilung von Partikeln in Betracht gezogen werden kann, müssen die Punkte homogen im Material verteilt, beziehungsweise die Intensitätsfunktion  $\lambda(u)$  konstant sein. Wie man diese Annahme überprüft, wird im nächsten Abschnitt gezeigt.

### 3.3.3 Schätzen der Intensitätsfunktion

Angenommen, mittels einer nicht näher spezifizierten Messmethode wurden in einem Beobachtungsfenster  $W \subset \mathbb{R}^d$  die Schwerpunkte von  $n$  Kugeln gemessen. Das Ergebnis lässt sich als Matrix

$$\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{nd} \end{pmatrix} \quad (95)$$

schreiben, wobei der Vektor

$$x_i = \begin{pmatrix} x_{i1} \\ \vdots \\ x_{id} \end{pmatrix} \quad (96)$$

mit  $i = 1, \dots, n$  dem Schwerpunkt der  $i$ -ten Kugel entspricht und aus den Zeilen der Matrix 95 gebildet wird. Weiter bezeichnet  $x_{ij}$

mit  $j = 1, \dots, d$  die  $j$ -te Koordinate des Schwerpunktes der  $i$ -ten Kugel. Dann kann die Matrix  $(x_1, \dots, x_n)^T$  als konkrete Realisierung des Punktprozesses  $N$  interpretiert werden und wird als Punktmuster bezeichnet. Ausgangspunkt für die statistische Untersuchung von Punktmustern ist nun die Frage, ob die räumliche Verteilung der beobachteten Punkte gemäß der Definition in Abschnitt 3.3.1 homogen ist. Lässt sich diese Annahme bestätigen, kann als nächstes überprüft werden, ob zwischen den Punkten Interaktion stattfindet oder ob die Punkte, gemäß der CSR-Eigenschaft, rein zufällig im Raum verteilt sind. Dazu wird der im vorherigen Abschnitt beschriebene PPP entsprechend der beobachteten Daten parametrisiert und das theoretische Muster mit dem beobachteten Muster verglichen. Liegt keine homogene Verteilung vor, muss ein anderes Modell für weitere Untersuchungen herangezogen werden. Die Annahme von Homogenität hat damit großen Einfluss auf den Modellierungsprozess.

In der Literatur zum Thema räumliche Statistik wird übereinstimmend berichtet, dass der statistische Nachweis, ob ein Punktmuster einem homogenen Punktprozess entspringt, im Allgemeinen nicht möglich ist [134, S. 220, 61, S. 38]. Üblicherweise stehen nur wenige Muster, die in begrenzten Beobachtungsfenstern gemessen wurden, zur Verfügung, um den Nachweis zu führen. In einem begrenzten Fenster ist es aber durchaus möglich, dass ein homogener Punktprozess eine inhomogene Verteilung besitzt. Auf der anderen Seite kann, wenn das Beobachtungsfenster beispielsweise zu klein gewählt wurde, ein eigentlich inhomogener Punktprozess in dem betrachteten Ausschnitt eine homogene Verteilung aufweisen. Aus diesem Grund müssen immer fachliche Argumente und Expertenwissen herangezogen werden, um die Homogenität von Punktverteilungen zu begründen. Dennoch wurden Verfahren vorgestellt (siehe zum Beispiel Illian u. a. [61, S. 87]), um zumindest die Plausibilität der Annahme anhand von beobachteten Daten zu überprüfen. In der vorliegenden Arbeit wird ein Verfahren auf Basis der bereits in Abschnitt 3.2.1 beschriebenen Kerndichteschätzer verwendet. Konkret geht es darum, die Intensitätsfunktion  $\lambda(u)$  aus Formel 86 in dem Beobachtungsfenster  $W$  zu schätzen. Entspringt das Punktmuster einem homogenen Punktprozess und wurde  $W$  ausreichend groß gewählt, um die Charakteristiken der Daten zu erfassen, dann sollte  $\lambda(u)$ , bis auf kleine Abweichungen, die mittels lokaler Fluktuationen der Intensität erklärt werden können, um einen konstanten Wert schwanken. Dies ergibt sich direkt aus der Definition der Homogenität aus Abschnitt 3.3.1. Ist hingegen ein eindeutiger Trend auszumachen, muss die Ursache für diesen durch genauere Untersuchung der Daten festgestellt werden.

Die Schätzung von  $\lambda(u)$  funktioniert analog, wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben, außer dass der univariate Kern durch einen multivaria-

ten ersetzt werden muss, da die Intensitätsfunktion von mehreren Parametern abhängt. Der Schätzer für ein Punktmuster hat die Form

*Kerndichteschätzer*

$$\begin{aligned}\hat{\lambda}(u)_h &= \frac{1}{h^d} \sum_{i=1}^n k\left(\frac{u - x_i}{h}\right) \\ &= \frac{1}{h^d} \sum_{i=1}^n k\left(\frac{u_1 - x_{i1}}{h}, \dots, \frac{u_d - x_{id}}{h}\right),\end{aligned}\quad (97)$$

wobei  $k$  der multivariate Kern mit  $d$  Parametern,  $h$  die Bandbreite für alle Komponenten und  $u = (u_1, \dots, u^d) \in \mathbb{R}^d$  ein Punkt im  $W$  ist. Wenn der Kern  $k$  separierbar ist, also als Produkt von univariaten Kernen dargestellt werden kann, lässt sich Formel 97 auch als

$$\hat{\lambda}(u) = \frac{1}{h^d} \sum_{i=1}^n \left( \prod_{j=1}^d k\left(\frac{u_j - x_{ij}}{h}\right) \right) \quad (98)$$

schreiben. In der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich der Gauß-Kern benutzt, der die gewünschten Eigenschaften besitzt. Die Schätzung von  $\lambda(u)$  wird also mittels Formel 98 vorgenommen. Problematisch an Formel 98 ist allerdings, dass Randeffekte nicht beachtet werden. Das Beobachtungsfenster  $W$  ist üblicherweise nur ein Ausschnitt eines Punktmusters, welches wiederum als Realisierung eines Punktprozesses mit möglicherweise unendlicher Ausdehnung interpretiert wird. Für Punkte, die nahe am Rand von  $W$  liegen, wird der Einfluss von Punkten, die außerhalb von  $W$  liegen, nicht beachtet. Um dieses Problem zu beheben, wird die Kantenkorrektur von Diggle [33] verwendet. Für einen multivariaten und symmetrischen Kern ist das Verfahren durch

*Kantenkorrektur*

$$\hat{\lambda}(u) = \frac{1}{q(u)h^d} \sum_{i=1}^n \left( \prod_{j=1}^d k\left(\frac{u_j - x_{ij}}{h}\right) \right) \quad (99)$$

gegeben, wobei

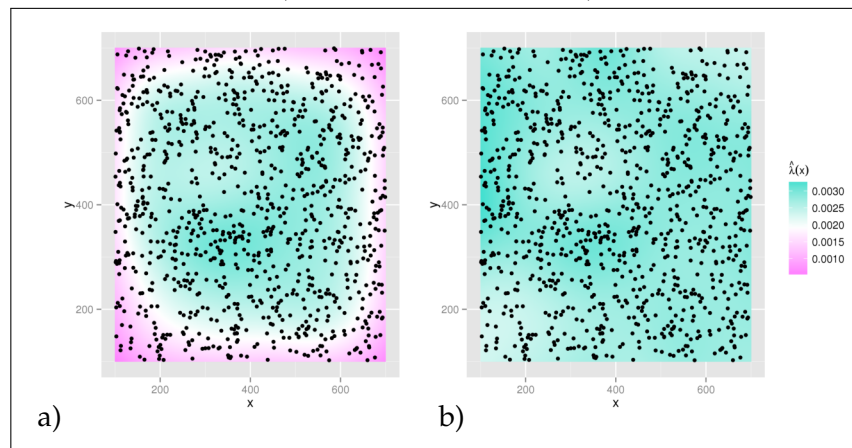
$$q(u) = \int_W \frac{1}{h^d} k\left(\frac{u - a}{h}\right) da \quad (100)$$

gilt. Die Idee dabei ist, dass Punkte, für die der Kern  $k$  aus dem Fenster  $W$  ragt, entsprechend dem überstehenden Anteil normalisiert werden. Dies führt dazu, dass Randpunkte stärker gewichtet werden als Punkte, die in der Mitte des Fensters liegen und beugt dem Effekt vor, dass die Intensität am Rand auf Grund fehlender Informationen auf 0 gezogen wird. In Abbildung 5 ist die Auswirkung der Kantenkorrektur zu sehen. In den beiden Bildern a) und b) ist die mittels Kerndichteschätzung berechnete Intensitätsfunktion  $\hat{\lambda}(u)$  für einen simulierten PPP (siehe Abschnitt 6.3) mit Intensität  $\lambda = 0.00275$  in einem Beobachtungsfenster mit der Abmessung  $[100, 700] \times [100, 700]$  eingezeichnet. Die Werte für  $\hat{\lambda}(u)$  sind dabei durch eine Falschfarbentransformation kodiert. Die schwarzen Kreise sind Positionen der eigentlichen Punkte des Prozesses. Die Bandbreite  $h$  des Gauß-Kerns

*Beispiel*

$k$  beträgt 75. In Abbildung 5 a) wurde  $\hat{\lambda}(u)$  ohne Kantenkorrektur berechnet. In der Mitte des Bildes ist die Intensität nahezu konstant und schwankt um den erwarteten Wert von 0.00275. An den Rändern allerdings bricht der Wert auf Grund der fehlenden Information ein und geht gegen 0. Mit eingeschalteter Kantenkorrektur entsteht hingegen, wie in Abbildung 5 b) zu sehen ist, ein homogener Farbverlauf, welcher auf eine konstante Intensität hindeutet. Das fehlerhafte Verhalten an den Rändern ist beseitigt. Entscheidend für die Schätzung von

**Abbildung 5.:** Kerndichteschätzung der Intensität eines simulierten PPPs. a) ohne Kantenkorrektur b) mit Kantenkorrektur



$\lambda(u)$  ist die Wahl der Bandbreite  $h$ . Wird  $h$  zu klein gewählt, schlägt  $\hat{\lambda}(u)$  schon bei lokalen Schwankungen von  $\lambda(u)$  stark aus. Wird  $h$  hingegen zu groß gewählt, gehen gegebenenfalls wichtige lokale Eigenschaften von  $\lambda(u)$  verloren. Die Frage, wie  $h$  konkret gewählt werden muss, wird auch in der Fachliteratur intensiv diskutiert [29, S. 654]. Eine einfache Daumenregel besteht darin,  $h$  auf  $1/\sqrt{n}$  zu setzen [61, S. 115]. Alternativ schlägt Diggle [33] vor, die mittlere quadratische Abweichung des Schätzers zu minimieren. Konsens ist, dass eine allgemeingültige Vorgehensweise nicht angegeben werden kann. In der vorliegenden Arbeit wird das Verfahren von Diggle [33] gewählt, um einen ersten Wert für  $h$  zu erhalten. Ausgehend von diesem Wert wird das Verhalten von  $\hat{\lambda}(u)$  für kleine Änderungen von  $h$  untersucht.

#### Wahl der Bandbreite

Es sei an dieser Stelle noch darauf hingewiesen, dass in der vorliegenden Arbeit am häufigsten dreidimensionale Punktmuster untersucht werden. Für dreidimensionale Punktmuster ist es zwar ohne weiteres möglich,  $\lambda(u)$  mit dem vorgestellten Verfahren zu schätzen, allerdings ist das explorative Auswerten eines solchen hochdimensionalen Datensatzes schwierig. Aus diesem Grund wird in der vorliegenden Arbeit bei dreidimensionalen Punktmustern  $\lambda(u)$  anhand von Schnitten und Projektionen entlang der Raumrichtungen geschätzt.



## 3.3.4 Modellparametrisierung und Validierung

Unter der Voraussetzung, dass die Punktdichte homogen im Material ist, kann der oben beschriebene PPP als sogenanntes Nullmodell herangezogen werden. Das heißt, man stellt die Hypothese auf, dass für das beobachtete Punktmuster die CSR-Eigenschaft gilt. Der PPP wird also anhand der geschätzten Parameter aus den erhobenen Daten parametrisiert. Anschließend können verschiedene Teststatistiken berechnet und mit den jeweiligen Statistiken der beobachteten Daten verglichen werden. Stimmen die Statistiken für das theoretische Modell und dem Punktmuster überein, deutet dies auf eine rein zufällige Anordnung der Punkte hin, während Abweichungen vom theoretischen Modell ein Hinweis auf etwaige Interaktion der einzelnen Partikel ist. Die Hypothese wird verworfen und ein anderes, komplexeres Modell muss betrachtet werden. Im Folgenden wird die Vorgehensweise genauer beschrieben und die Teststatistiken werden eingeführt. Es wird mit der Schätzung der Modellparameter aus den beobachteten Daten begonnen.

Wie in Abschnitt 3.3.2 beschrieben, hängt der PPP nur von einem Parameter ab, nämlich der Intensität  $\lambda$ . Die Anzahl der Punkte  $N(B)$  einer beliebigen Teilmenge  $B \subset \mathbb{R}^d$  folgt der Poisson-Verteilung mit  $\lambda v(B)$  als Parameter. Ein erwartungstreuer Schätzer des Parameters  $\lambda$  für ein Punktmuster  $x_1, \dots, x_n$  im Beobachtungsfenster  $W$  ist durch

Punktschätzer

$$\hat{\lambda} = \frac{N(W)}{v(W)} \quad (101)$$

gegeben [61, S. 189].

In der vorliegenden Arbeit soll aber  $\lambda$  nicht mittels Formel 101 geschätzt werden, sondern wieder mit dem aus Abschnitt 3.2.2 bekannten bayesschen Ansatz. Dieser erlaubt etwaiges Vorwissen über den Punktprozess zu berücksichtigen und die Sicherheit des geschätzten Parameters adäquat zu quantifizieren. Die Likelihood-Funktion eines PPPs wird dabei wie folgt konstruiert. Die zufällige Anzahl  $n$  der beobachteten Punkte  $x_1, \dots, x_n$  eines Punktprozesses  $N$  im Fenster  $W$  ist gemäß Formel 94 Poisson-verteilt mit dem Erwartungswert  $\lambda v(W)$ . Die zufälligen Positionen der Punkte im Raum sind hingegen gleichverteilt mit der Dichte  $f(x_1, \dots, x_n) = 1/v(W)^n$ . Unter Berücksichtigung dieser beiden Bedingungen lässt sich dann die Likelihood-Funktion eines Punktprozesses  $N$  als

Likelihood-Funktion

$$\begin{aligned} p(N|\lambda) &= p(x_1, \dots, x_n|\lambda) \\ &= [P(N(W) = n|\lambda)n!f(x_1, \dots, x_n)] \\ &= \left( \frac{(\lambda v(W))^n}{n!} e^{-\lambda v(W)} \right) \frac{n!}{v(W)^n} \\ &= e^{-\lambda v(W)} \lambda^n \end{aligned} \quad (102)$$

aufstellen [79, S. 5]. Dabei ist die Fakultät von  $n$  in Zeile 2 von Formel 102 dem Fakt geschuldet, dass die Reihenfolge der Punkte im Prozess  $N$  austauschbar ist. Die A-posteriori Verteilung kann nun wieder nach Wahl einer geeigneten A-priori Verteilung, wie in Abschnitt 3.2.2 beschrieben, mittels des MCMC-Verfahrens approximiert werden. Da der Punktprozess aber nur von einem Parameter abhängt, ist es in diesem Fall sinnvoller, die Schätzung der Intensität  $\lambda$  durch die Wahl einer zur Poisson-Verteilung konjugierten A-priori Verteilung durchzuführen, so dass die A-posteriori Verteilung in geschlossener Form vorliegt. Die Gamma-Verteilung besitzt für eine Poisson-Verteilung diese Eigenschaft. Die Dichte der Gamma-Verteilung mit Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  ist gegeben durch

*Gamma-Verteilung*

$$p(\lambda) = p(\lambda|\alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} \lambda^{\alpha-1} e^{-\beta\lambda} \quad (103)$$

wobei  $\Gamma$  die Eulersche Gammafunktion (siehe auch Formel 28) ist. Für eine beobachtete Realisierung eines Punktprozesses  $N$  in Fenster  $W$  mit  $n$  Punkten ergibt sich dann durch Anwenden der bayesschen Regeln 75 mit der Likelihood-Funktion aus Formel 102 und A-priori Verteilung aus Formel 103

$$\begin{aligned} p(\lambda|N) &= \frac{p(N|\lambda)p(\lambda)}{p(N)} \\ &\propto p(N|\lambda)p(\lambda) \\ &\propto \left( \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} \lambda^{\alpha-1} e^{-\beta\lambda} \right) \left( e^{-\lambda v(W)} \lambda^n \right) \\ &\propto \left( \lambda^{\alpha-1} e^{-\beta\lambda} \right) \left( e^{-\lambda v(W)} \lambda^n \right) \\ &= \lambda^{\alpha-1+n} e^{-(\beta+v(W))\lambda} \end{aligned} \quad (104)$$

Dabei ist  $p(N)$  die totale Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Punktprozesses  $N$  und ist durch das Integral

$$p(N) = \int p(N|\lambda)p(\lambda)d\lambda \quad (105)$$

*Konjugierte A-priori  
Verteilung*

gegeben, wobei die Integration über alle möglichen Werte von  $\lambda$  erfolgt. Für einen fixen Punktprozess  $N$  ist  $p(N)$  unabhängig von  $\lambda$  und kann als konstant angesehen werden. Daraus ergibt sich die Umformung von der ersten in die zweite Zeile in Formel 104, wobei das Symbol  $\propto$  Proportionalität bedeutet. Die letzte Zeile in Formel 104 hat wieder die Form einer Gamma-Verteilung mit den Parametern  $\alpha_\lambda = \alpha + n$  und  $\beta_\lambda = \beta + v(W)$  und ist die A-posteriori Verteilung von  $p(N|\lambda)$ . Eine uninformierte A-priori Verteilung kann durch die Wahl von sehr kleinen Werten für  $\alpha$  und  $\beta$  modelliert werden. Allgemein soll sich in der folgenden Betrachtungsweise aber nicht auf den Fall beschränkt werden, dass eine konjugierte A-priori Verteilung bekannt ist. Es wird davon ausgegangen, dass die A-posteriori Verteilung nur in Form von Zufallstichproben approximiert wird, wie sie

bei der Verwendung von MCMC-Verfahren entstehen. Im Falle der konjugierten Gamma-Verteilung müssen diese also durch das Ziehen von entsprechenden Stichproben aus der Verteilung generiert werden. Die Stichprobenwerte für  $\lambda$  werden im Folgenden als  $\hat{\lambda}^{(1)}, \dots, \hat{\lambda}^{(l)}$  bezeichnet, wobei  $l$  dem Stichprobenumfang entspricht. Diese Vorgehensweise ermöglicht es nun, die erwartete Anzahl von Punkten in einer beliebigen Teilmenge  $B \subset \mathbb{R}^d$  mit Volumen  $v(B)$  zu bestimmen. Dafür werden  $i = 1, \dots, l$  Stichprobenwerte  $\hat{N}(B)^{(1)}, \dots, \hat{N}(B)^{(l)}$  aus der Poisson-Verteilung von Formel 94, parametrisiert durch  $\hat{\lambda}^{(i)}v(B)$ , gezogen. Diese approximieren die posteriori-prädiktive Verteilung der Anzahl der Punkte in  $B$  [79, S. 17]. Durch die Berechnung des HDIs lassen sich dann die glaubwürdigsten Werte konkret quantifizieren. In einem letzten Schritt können zusätzlich  $l$  Punktmuster  $\hat{N}^{(1)}, \dots, \hat{N}^{(l)}$  in  $B$ , die sogenannten posteriori-prädiktiven Punktmuster, generiert werden. Dazu wird für jedes  $\hat{N}(B)^{(1)}, \dots, \hat{N}(B)^{(l)}$  ein PPP mit entsprechender Punktzahl simuliert. Die Positionen der Punkte folgen dabei gemäß den Eigenschaften des PPPs der Gleichverteilung im Intervall der Fenstergröße  $B$ . Das Punktmuster  $\hat{N}^{(i)}$  mit  $i = 1, \dots, l$  besitzt also  $n = \hat{N}(B)^{(i)}$  Punkte mit den jeweiligen Koordinaten  $x_1, \dots, x_n$ . Im Folgenden werden die posteriori-prädiktiven Punktmuster dazu verwendet, Abweichungen zwischen Modell und beobachteten Daten zu detektieren. Für diese Anwendung werden die im Folgenden eingeführten Teststatistiken benötigt.

*Simulation von  
Punktmustern*

Ein typischer Startpunkt bei der Analyse von Punktmustern ist die Berechnung der Nächste-Nachbarn Funktion

$$D(r) = P(N(b(o, r) \setminus \{o\}) > 0) \quad (106)$$

mit  $r \geq 0$ . Diese gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass mindestens ein Punkt in der Kugel  $b$  mit Radius  $r$  und dem Mittelpunkt  $o$  liegt. Der Punkt  $o$  wird dabei als typischer Punkt bezeichnet und wird zufällig aus dem Prozess ausgewählt. Eine empirische Schätzung von  $D(r)$  kann wie folgt berechnet werden. Gegeben sei ein Beobachtungsfenster  $W$ , in dem  $x_1, \dots, x_n$  Punkte eines Punktprozesses  $N$  beobachtet wurden. Für jeden der  $N(W) = n$  Punkte wird die Anzahl der nächsten Punkte  $t_i$  bestimmt, für die der Abstand zum aktuell betrachteten Punkt  $x_i$  kleiner als  $r$  ist. Die Summe  $\sum_{i=1}^n t_i/n$  ist dann eine Schätzung der Wahrscheinlichkeit, dass ein Punkt im Punktprozess seine nächsten Nachbarn in einem Abstand kleiner  $r$  hat [61, S. 177]. Natürlich ist das gerade beschriebene Verfahren nicht erwartungstreu, da Kanteneffekte nicht beachtet werden. Für eine ausführliche Behandlung dieses Themas wird auf Stoyan, Kendall und Mecke [133, S. 145 ff.] verwiesen. In der vorliegenden Arbeit werden zum Schätzen dieser und aller noch folgenden Teststatistiken das R-Rahmenwerk SpatStat<sup>2</sup> verwendet. Dort werden die gängigsten Verfahren zur Kantekorrektur implementiert.

*Nächste-Nachbarn  
Funktion*

<sup>2</sup> <http://www.spatstat.org>

*Interpretation*

Insgesamt eignet sich  $D(r)$  nur zur Analyse der lokalen Nachbarschaft im Punktmuster, da auf Grund der kumulativen Eigenschaft für mittlere und große Abstände  $r$  keine sinnvollen Informationen abgeleitet werden können. Eine interessante Anwendung von  $D(r)$ , die in der vorliegenden Arbeit Verwendung findet, ist das Bestimmen des minimalen Punktabstands  $r_0$  (in der englischen Literatur auch als hard-core Distanz bezeichnet). Wenn eine solche hard-core Distanz für einen Punktprozess existiert, dann gibt es ein positives  $r_0$ , so dass gilt

$$D(r) \begin{cases} = 0 & \text{mit } r < r_0 \\ > 0 & \text{mit } r \geq r_0 \end{cases} \quad (107)$$

Eine weitere interessante Eigenschaft von  $D(r)$  ist, dass für den PPP eine geschlossene Form bekannt ist. Es gilt nämlich für einen PPP mit Intensität  $\lambda$

$$D_{Pois}(r) = 1 - e^{-\lambda b_d r^d} \quad (108)$$

*Enveloppen*

wobei  $b_d$  das  $d$ -dimensionale Volumen der Einheitskugel ist [61, S. 75]. Stimmt also die empirisch geschätzte Funktion  $\hat{D}(r)$  mit der Funktion  $D_{Pois}(r)$  überein, ist dies ein Indiz, dass ein PPP ein passendes Modell ist, um das durch  $x_1, \dots, x_n$  gegebene Punktmuster zu beschreiben. Nun wird  $\hat{D}(r)$  aber auf Grund von statistischen Schwankungen und Kanteneffekten nie eins zu eins mit  $D_{Pois}(r)$  übereinstimmen. Um die Entscheidung zu erleichtern, ob es sich um ein adäquates Modell handelt, bietet sich folgende Vorgehensweise an. Dabei wird das Verfahren von der konkreten Funktion  $D(r)$  auf eine allgemeine Testfunktion  $S(r)$  erweitert, da es für die noch folgenden Teststatistiken ebenfalls angewendet werden kann. Man berechnet zunächst für die posteriori-prädiktiven Punktmuster  $\hat{N}^{(1)}, \dots, \hat{N}^{(l)}$  jeweils die oberen und unteren Enveloppen

$$\begin{aligned} E_L(r) &= \min_{i=1}^l \hat{S}^{(i)}(r) \\ E_U(r) &= \max_{i=1}^l \hat{S}^{(i)}(r) \end{aligned} \quad (109)$$

wobei  $\hat{S}^{(i)}$  der empirische Schätzer einer Funktion  $S(r)$  über dem posteriori-prädiktiven Punktmuster  $\hat{N}^{(i)}$  ist. Liegt nun der empirische Schätzer  $\hat{S}(r)$  des beobachteten Punktmusters in der Enveloppe zwischen  $E_L(r)$  und  $E_U(r)$ , kann der PPP als geeignetes Modell für das Punktmuster angesehen werden. Das Verfahren ist jedoch kein formaler statistischer Test, sondern ein exploratives Werkzeug zur Datenanalyse [144, S. 77]. Ein solcher lässt sich aber im Sinne der in Kapitel 3.2.3 eingeführten posteriori-prädiktiven Tests einfach konstruieren. Dazu wird die posteriori-prädiktive Verteilung der Differenzen

$$\Delta^{(i)}(r) = \hat{S}(r) - \hat{S}^{(i)}(r) \quad (110)$$

*Bayesscher Test*

mit  $i = 1, \dots, l$  und  $r > 0$  berechnet. Ist nun für einen Bereich

$[r, r + \epsilon]$  null ein Extremwert der posteriori-prädiktiven Verteilung  $\Delta^{(1)}(r), \dots, \Delta^{(l)}(r)$ , muss die CSR-Hypothese verworfen und ein anderes Modell als der PPP in Betracht gezogen werden. Folgendes exploratives Hilfsmittel erleichtert die Auswertung. Es wird das HDI für alle  $r > 0$  über die posteriori-prädiktiven Verteilungen  $\Delta^{(1)}(r), \dots, \Delta^{(l)}(r)$  berechnet und die Intervallgrenzen gegen  $r$  aufgetragen. Eine Modellverletzung liegt dann vor, wenn die 0 für einen Bereich  $[r, r + \epsilon]$  außerhalb des Intervalls liegt.

Neben der Nächste-Nachbarn Funktion  $D(r)$  gibt es eine Reihe weiterer Funktionen, um Punktmuster zu analysieren. Als mächtiges Werkzeug hat sich die  $K(r)$  Funktion von Ripley [111] erwiesen. Sie wird definiert als

$$K(r) = \frac{1}{\lambda} E(N(b(o, r) \setminus o)) \quad (111)$$

und gibt die durchschnittliche Anzahl von Punkten in einer Kugel  $b$  mit Radius  $r$  um den typischen Punkt  $o$  im Punkprozess  $N$  an. Für einen PPP ist die durchschnittliche Anzahl in einer Kugel  $b(o, r)$  gleich  $\lambda b_d r^d$  (siehe Abschnitt 3.3.1), deshalb gilt für einen PPP

$$K_{Pois}(r) = b_d r^d \quad (112)$$

Eine allgemeine Version des Schätzers für  $\lambda K(r)$  hat die Form

$$\lambda \hat{K}(r) = \frac{1}{n} \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{1}_{\{\|x_i - x_j\| \leq r\}} \quad (113)$$

wobei die Indikatorfunktion  $\mathbf{1}_{\{\|x_i - x_j\| \leq r\}}$  gleich 1 ist, wenn der euklidische Abstand zwischen zwei Punkten des Prozesses  $x_i$  und  $x_j$  kleiner gleich dem Radius  $r$  ist. Dieser Schätzer ist nicht erwartungstreu, da für Punkte dicht am Rand Punkte außerhalb des Randes nicht beachtet werden. Zahlreiche erwartungstreue Schätzer für  $K(r)$  wurden vorgeschlagen. Einen guten Überblick liefern Illian u. a. [61, S. 228]. Die grundlegende Idee bei den meisten Ansätzen dabei ist, die Punkte in Formel 113 in Abhängigkeit ihrer Position im Beobachtungsfenster entsprechend zu gewichten. In der vorliegenden Arbeit wird eine erwartungstreue Version für dreidimensionale Punktmuster von Baddeley u. a. [12] verwendet. Eine entsprechende Implementierung befindet sich in SpatStat. Wie schon bei der Funktion  $D(r)$  kann der Schätzer  $\hat{K}$  gegen  $K_{Pois}$  verglichen werden, um Informationen über die Struktur des betrachteten Musters abzuleiten. Allgemein gilt für regelmäßige Punktmuster  $\hat{K}(r) < K_{Pois}$  und  $\hat{K}(r) > K_{Pois}$  für Muster, bei denen die Punkte in Form von Clustern auftreten [61, S. 215]. Zur Berechnung des posteriori-prädiktiven Tests ist  $K(r)$  hingegen ungeeignet, da sich gezeigt hat, dass mit wachsendem  $r$  die Fluktuationen stark zunehmen. Besser geeignet ist hier die  $L(r)$  Funktion, welche als

$$L(r) = \sqrt[d]{\frac{K(r)}{b_d}} \quad (114)$$

Ripleys  $K(r)$   
Funktion

*L(r) Funktion* definiert ist. Die beiden Vorteile in der Verwendung von  $L(r)$  liegen darin, dass zum einen durch das Ziehen der Wurzel die Varianz stabilisiert und zum anderen der Vergleich gegen den PPP leichter wird, da für diesen  $L_{Pois}(r) = r$  gilt [61, S. 217].

*Paar-Korrelationsfunktion*

Abschließend soll als Methode zur Analyse von Punktmustern die Paar-Korrelationsfunktion (PCF)  $g(r)$  eingeführt werden. Diese besitzt den gleichen statistischen Informationsgehalt wie  $K(r)$  und  $L(r)$ , weist aber nicht die kumulative Eigenschaft auf. Eine Interpretation fällt somit leichter, da die Daten in einer zugänglicheren Art und Weise dargestellt werden. Deshalb wird die PCF in der Literatur häufig als eine der besten Methoden propagiert, um Punktmuster explorativ zu untersuchen [61, S. 218]. Die PCF steht in enger Beziehung mit der Produktdichte zweiter Ordnung. Die Produktdichte zweiter Ordnung  $\rho(x, y) = \rho(x, y) dx dy$  ist die Wahrscheinlichkeit, dass jeweils ein Punkt des Prozesses  $N$  in den infinitesimalen Kugeln  $dx$  und  $dy$  mit Mittelpunkt  $x$  und  $y$  liegt. Ist der betrachtete Punktprozess homogen und isotrop, hängt  $\rho(x, y)$  nur vom Abstand  $r$ , geschrieben  $\rho(r)$ , zwischen  $x$  und  $y$  ab. Die PCF  $g(r)$  ergibt sich dann durch Normalisierung mit  $\lambda^2$ , also

$$g(r) = \frac{\rho(r)}{\lambda^2} \quad (115)$$

Für einen PPP ist auf Grund der zufälligen und unabhängigen Verteilung der Punkte (CSR-Eigenschaft) wegen des Multiplikationssatzes von Wahrscheinlichkeiten die Punktdichte  $\rho(x, y) = \lambda^2$ . Für die PCF ergibt sich also im Falle eines PPP  $g_{Pois}(r) = 1$ . Bei einem Punktprozess, der zur Bildung von Clustern neigt, treten hingegen im Durchschnitt Punkte in direkter Nachbarschaft häufiger auf als bei einem PPP. Die Wahrscheinlichkeit von  $\rho(x, y)$  für kleines  $r$  ist somit größer und damit nimmt  $g(r)$  für kleines  $r$  Werte größer als 1 an. Auf der anderen Seite nimmt  $g(r)$  für regelmäßige Punktmuster Werte kleiner als 1 an, da in der direkten Nachbarschaft eines Punktes im Durchschnitt weniger Nachbarn liegen als bei einem PPP. Geschätzt wird  $g(r)$  mittels eines Kerndichteschätzers, welcher in SpatStat implementiert ist [61, S. 232].

Zusammenfassend werden die definierten Funktionen in der vorliegenden Arbeit wie folgt eingesetzt. Die Nächste-Nachbarn Funktion  $D(r)$  wird dazu verwendet, das Verhalten der lokalen Nachbarschaft im Muster zu analysieren. Insbesondere die Frage nach einem Mindestabstand zwischen den Punkten soll damit beantwortet werden. Aufbauend darauf wird das globale Verhalten des Musters mit der PCF untersucht. Als Interpretationshilfe werden die oberen und unteren Enveloppen aus den simulierten posteriori-prädiktiven Punktmustern, parametrisiert mit A-posteriori Verteilung der geschätzten Intensität aus den beobachteten Daten, eingezeichnet. Erhärtet sich bei dieser explorativen Datenanalyse der Verdacht, dass das beobach-

tete Punktmuster durch einen PPP beschrieben werden kann, wird schließlich der oben beschriebene Test auf Basis des HDIs und der  $L(r)$  Funktion durchgeführt. Die  $K(r)$  Funktion findet keine praktische Verwendung und dient in der obigen Ausführung lediglich zur Definition der  $L(r)$  Funktion.

### 3.4 ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Kapitel wurden Methoden vorgestellt, um Partikelsysteme bezüglich ihrer statistischen Eigenschaften zu untersuchen. Zwei große Themenfelder wurden behandelt und zwar die Analyse der Größenverteilung und die der räumlichen Verteilung. Der Aufbau beider Themenblöcke ist dabei weitestgehend kongruent. Zunächst wurden explorative Methoden vorgestellt, um die Dichtefunktion (im Falle der Größenverteilung) und die Intensität (im Falle der räumlichen Verteilung) zu analysieren. Anschließend wurde der Prozess der Modellbildung beschrieben, der auf den Erkenntnissen der explorativen Datenanalyse basiert. Dabei wurde gezeigt, wie die Parameter aus den beobachteten Daten geschätzt werden können und wie anschließend getestet werden kann, wie gut das parametrisierte Modell zu den Daten passt. Konsequenterweise wurde auf Methoden der bayesschen Statistik gesetzt, um zum einen Unsicherheit bei der Schätzung adäquat zu quantifizieren und zum anderen etwaiges Wissen über die statistischen Parameter des Modells bei der Modellierung berücksichtigen zu können. Die Methoden sind so flexibel, dass sich akquiriertes Wissen über die Parameter jederzeit in das Modell aufnehmen lässt. In Kapitel 6 werden die hier präsentierten Methoden dazu verwendet, die Verteilung von nichtmetallischen Einschlüssen und anderen Defekten in Stahl zu modellieren.





## ANWENDUNGSFALL

---

In diesem Kapitel wird ein Anwendungsfall vorgestellt, bei dem das in der vorliegenden Arbeit eingeführte Rahmenwerk verwendet werden kann, um statistische Aussagen über Partikelsysteme abzuleiten. Konkret wird ein Beispiel aus der Stahlerzeugung besprochen und zwar die Analyse von Defekten, wie nichtmetallischen Einschlüssen, Poren und Risse, die während der Stahlerzeugung entstehen und unter gewissen Umständen im fertigen Produkt verbleiben. Diese können dazu führen, dass zugesicherte Materialeigenschaften bestimmter Legierungen nicht mehr erfüllt sind und in drastischen Fällen die Rissbildung begünstigen und Materialbrüche hervorrufen. Eine genaue statistische Analyse der nichtmetallischen Einschlüsse und Poren in Hinblick auf die Optimierung des Produktionsprozesses, so dass weniger dieser Verunreinigungen im Produkt zurückbleiben, ist daher wünschenswert.

Der Aufbau des Kapitels gestaltet sich wie folgt. Zunächst wird beschrieben, wie nichtmetallische Einschlüsse und Poren im Produkt entstehen, wie sie anhand unterschiedlicher Kriterien unterschieden werden und welche statistischen Eigenschaften sie besitzen. Danach werden bekannte Detektionsverfahren besprochen, die in der stahlerzeugenden Industrie eingesetzt werden, um den Einschlussgehalt in Stahlproben zu bestimmen. Anschließend wird ein neues System vorgestellt, welches in Zusammenarbeit mit zwei Projektpartnern aus der Industrie im Zuge des Silenos-Projekts entwickelt wurde. Mit diesem System ist es erstmals möglich sowohl die dreidimensionale Morphologie einzelner Defekte als auch die räumliche Verteilung dieser zu untersuchen. Unter Nutzung von Daten aus diesem System werden dann in den Kapiteln 5 und 6 exemplarische Auswertungen mittels des in dieser Arbeit entwickelten Rahmenwerks vorgenommen. Die Ergebnisse dieser Auswertungen bilden schließlich die Basis des in Kapitel 7 entwickelten automatischen Analysesystems.

### 4.1 MOTIVATION

Nichtmetallische Einschlüsse haben einen großen Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften und damit auf die Qualität von Stahl. Zwar kommen nichtmetallische Einschlüsse immer im fertigen Produkt vor, aber bei zu hoher Konzentration können sie die Rissfortsetzung und

damit einhergehende Ermüdungsbrüche begünstigen [97, S. 75]. Dies kann im schlimmsten Fall katastrophale Folgen haben, wie man am Beispiel des am 09.07.2008 entgleisten ICE 518 erkennen kann. Dieser war auf Grund eines Achsenbruchs kurz hinter dem Kölner Hauptbahnhof verunglückt. Laut eines Prüfungsberichtes des Bundesamtes für Materialforschung [71] ist der Achsenbruch mit hoher Wahrscheinlichkeit auf einen Materialfehler in Form von nichtmetallischen Einschlüssen zurückzuführen. Dieses Beispiel zeigt, wie wichtig es ist, dass der zugesicherte Reinheitsgrad des verwendeten Werkstoffs eingehalten wird. Um aber Produkte mit solchen Anforderungen erstellen zu können, müssen sowohl die Entstehung als auch der Ursprung von nichtmetallischen Einschlüssen detektierbar sein. Mit diesem Wissen lässt sich dann der Produktionsprozess dahingehend optimieren, dass weniger dieser Verunreinigungen im fertigen Produkt verbleiben. In diesem Abschnitt werden deshalb die gängigsten Detektionsverfahren für nichtmetallische Eigenschaften vorgestellt. Diese können verwendet werden, um gesicherte statistische Informationen über die Verteilung von Einschlüssen zu erheben und Qualitätskriterien festzulegen. Zunächst wird aber besprochen, wie genau nichtmetallische Einschlüsse definiert sind, wie sie entstehen und wie sie sich unterscheiden lassen.

#### 4.1.1 Nichtmetallische Einschlüsse

##### Definition

##### Endogene und Exogene

Allgemein definiert man nichtmetallische Einschlüsse als Teilchen, die bereits im flüssigen Stahl vorgelegen haben und bei der Erstarrung eingeschlossen wurden oder die auf Grund des Löslichkeitsprunges bei der Erstarrung entstanden sind [109]. Diese Definition ist sehr weit gefasst und deutet bereits an, dass der Begriff „nichtmetallischer Einschluss“ eine Vielzahl unterschiedlicher Partikel unterschiedlichster Form und chemischer Zusammensetzung beschreibt. Verschiedene Unterscheidungskriterien wurden vorgeschlagen, um den Begriff weiter zu spezifizieren. Grob lassen sie sich zunächst in zwei Klassen nach ihrer Herkunft unterteilen. Man unterscheidet zwischen exogenen und endogenen Einschlüssen. Exogene Einschlüsse sind Einschlüsse die von außen in die Schmelze gelangen. Sie entstehen beispielsweise durch abgetragenes Feuerfestmaterial aus abgebrochenen Ansätzen im Gießsystem oder durch das Einspülen von Schlacken. Exogene Einschlüsse sind zwar vergleichsweise selten, können aber mitunter sehr groß sein [101, S. 12 f.]. Endogene Einschlüsse hingegen bilden sich aus chemischen Reaktionen, zum Beispiel während der Stahldesoxidation. Stahl wird aus Roheisen hergestellt und bezeichnet Eisen mit einem Kohlenstoffgehalt von unter 2.06 % [45, S. 107 f.]. Um den Stahl auf den erforderlichen Kohlenstoffgehalt zu bringen, wird der Kohlenstoff durch die Zufuhr von

Sauerstoff oxidiert. Bei der Oxidation bleibt allerdings Sauerstoff im flüssigen Stahl zurück, der sich während der Erstarrung mit Kohlenstoff zu Kohlenstoffmonoxid verbindet. Das Kohlenstoffmonoxid steigt auf und wird in die Luft abgeschieden. Ein Teil davon bleibt aber im erstarrten Block in Form von kleinen Gasbläschen zurück. Dies ist unerwünscht, da es die Schweißseigenschaften des Stahls beeinflusst. Deshalb wird während des Desoxidationsprozesses durch Hinzugabe eines Desoxidationsmittels versucht den überschüssigen Sauerstoff zu binden. Die dabei entstehenden Oxidverbindungen werden meist in die Schlacke abgeschieden [45, S. 110 f.]. Einige dieser Oxidverbindungen werden aber auf Grund der Erstarrungsfront am Aufsteigen gehindert und verbleiben als nichtmetallische Oxideinschlüsse im festen Stahl zurück. Der größte Teil der Einschlüsse entsteht auf diese Weise [101, S. 12 f.]. In Abhängigkeit des verwendeten Desoxidationsmittels können Einschlüsse mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung entstehen. Häufig zu beobachten sind Silikate, Korunde und Spinelle. Neben der Unterteilung nach ihrer chemischen Zusammensetzung schlagen Plöckinger und Straube [107] eine Klassifizierung dieser Oxideinschlüsse nach ihrem Entstehungszeitpunkt vor. Direkt nach der Zugabe des Desoxidationsmittels gebildete Einschlüsse werden demnach als primäre Desoxidationsprodukte bezeichnet. Sie sind am größten, da sie die meiste Zeit zum Wachsen haben, werden aber auch fast vollständig in die Schlacke abgeschieden. Sekundäre Desoxidationsprodukte bilden sich, während der Stahl auf seine Liquidustemperatur abkühlt. Auf Grund der steigenden Viskosität werden diese Einschlüsse nur noch schlecht in die Schlacke abgeschieden. Im Allgemeinen sind sie kleiner als die primären Desoxidationsprodukte. Schließlich gibt es Desoxidationsprodukte, die während des Übergangs von der Liquidus- zur Solidustemperatur entstehen. Bei diesen Einschlusstypen ist ein Verbleiben im fertigen Produkt sehr wahrscheinlich, da sie an der fortschreitenden Erstarrungsfront an dem Aufstieg in die Schlacke gehindert werden. Man nennt sie die tertiären Desoxidationsprodukte. Neben der Gruppe der Oxideinschlüsse gibt es in der Klasse der endogenen Einschlüsse noch weitere Einschlüsse, die sich ebenfalls durch ihre chemische Zusammensetzung unterscheiden. Dabei handelt es sich zu meist um chemische Verbindungen aus den Eisenbegleitern Schwefel oder Stickstoff, die sich in Form von Sulfid- und Nitrideinschlüssen manifestieren [109].

*Entstehung*

*Chemische  
Zusammensetzung*

*Entstehungszeit-  
punkt*

#### 4.1.2 Charakterisierungsmerkmale

Viele Veröffentlichungen beschäftigen sich mit der Frage, ob es möglich ist, Einschlüsse auf Basis von messbaren physikalischen Eigenschaften in die oben aufgestellte Klassenhierarchie einzuordnen. Ein

<i>Mikroeingüsse</i>	<p>einfaches und gängiges Verfahren besteht in der Unterteilung anhand ihrer Größe. Bei Einschlüssen kleiner als 5 µm spricht man von Mikroeingüssen. In dieser Gruppe häufig anzutreffen sind Sulfid- und Oxideinschlüsse [110], wobei letztere auf Grund ihrer kleinen Größe erst recht spät entstanden sind, also wahrscheinlich zu den sekundären oder tertiären Desoxidationsprodukten gehören. Als Makroeingüsse bezeichnet man hingegen Einschlüsse mit einer Größe von mehr als 100 µm. Sie sind selten anzutreffen, da sie mehr Zeit hatten in die Schlacke abgeschieden zu werden. Sie entstehen oft durch Koaleszenz von flüssigen Teilchen oder durch Agglomeration von festen Teilchen. Ersteres führt auf Grund der Minimierung der Oberfläche zu kugelförmigen Partikeln [31, S. 110 f.], letzteres zu clusterartigen Gebilden, wie sie bei diffusionbegrenzten Wachstumsprozessen entstehen [110, 31, S. 116 f.]. Es wird angenommen, dass Makrooxideinschlüsse in diesem Bereich zu den primären Desoxidationsprodukten gehören. Auch die endogenen Einschlüsse, wie Schlackeeinschlüsse, sind in diesem Größenbereich anzutreffen. Schließlich liegen in dem Bereich zwischen 5 µm und 100 µm die sogenannten Mesoeingüsse, bei denen eine genaue Einteilung schwer fällt.</p>
<i>Makroeingüsse</i>	
<i>Mesoeingüsse</i>	
<i>Morphologie</i>	<p>Neben ihrer Größe werden weitere Eigenschaften zur Unterscheidung betrachtet. Für Mikrooxid- und teilweise auch Sulfideinschlüsse wurde die Morphologie sehr ausführlich untersucht [129, 130, 131, 128]. Dabei wurde festgestellt, dass das Oxidwachstum stark von den örtlichen Aktivitätsverhältnissen des Sauerstoffs und des Desoxidationsmittels abhängt. Je nach Sauerstoffgehalt werden kugelige, korallenartige und dendritische Formen beobachtet.</p>
<i>Verformbarkeit</i>	<p>Eine weitere Unterscheidungsmöglichkeit, die eine chemische Klassifizierung von Einschlüssen möglich macht, ist die Verformbarkeit [109]. Verformbare Einschlüsse werden bei der Warmumformung in Umformrichtung gestreckt. Die Verformbarkeit ist dabei ein Hinweis, dass der betrachtete Einschluss der Klasse der Sulfide oder Silikate angehört. Nicht verformbare Einschlüsse sind so hart, dass sie ihre ursprüngliche Form beibehalten oder zertrümmert und zu einer Zeile aus unverformten Einzelpartikeln gestreckt werden. Dieses Verhalten ist ein Hinweis auf Tonerdeeingüsse (Aluminiumoxid).</p>
<i>Farbe</i>	<p>Abschließend kann die Farbe von Einschlüssen als Kriterium herangezogen werden, um ihre chemische Zusammensetzung zu analysieren. In der Industrienorm [92, S. 37 f.] wird folgender Zusammenhang proklamiert. Sulfideinschlüsse erscheinen grau, Oxideinschlüsse schwarz und Nitrideinschlüssen haben gelbliche bis rosa Farbtöne.</p> <p>All diese Kriterien wurden entweder empirisch überprüft oder aus theoretischen Überlegungen abgeleitet. Eine eindeutige Klassifizierung anhand dieser Merkmale ist im Allgemeinen nicht möglich. In</p>

der Praxis verwendet man häufig spektrale Untersuchungsmethoden, um die genaue chemische Zusammensetzung bestimmen zu können. Damit kann dann auch die Frage beantwortet werden, ob die analysierten Einschlüsse eher endogenen oder exogenen Ursprungs sind. Den exakten Entstehungszeitpunkt zu bestimmen (primär, sekundär oder tertiär) ist aber nach wie vor ein offenes Problem. Insgesamt bieten die aufgestellten Kriterien aber bereits einige Hinweise, wie nichtmetallische Einschlüsse anhand ihrer Morphologie oder Textur klassifiziert werden können.

#### 4.1.3 Statistische Eigenschaften

Die bisher erwähnten Eigenschaften bezogen sich auf einzelne Einschlüsse. Häufig ist man aber an statistischen Werten interessiert, welche die Eigenschaften aller im Stahl vorkommenden Einschlüsse beschreiben. Die gebräuchlichsten Angaben, um ein solches Einschlusskollektiv statistisch zu erfassen, sind die Anzahl von Einschlüssen im Volumen, die Größenverteilung dieser Einschlüsse sowie deren morphologische Eigenschaften. Als qualitätsbeschreibende Größe dient darüber hinaus der Reinheitsgrad, der als das Verhältnis zwischen der Gesamtgröße aller Einschlüsse und dem untersuchten Probenvolumen definiert ist. Sind Größenverteilung und Anzahl bekannt, kann der Reinheitsgrad direkt ausgerechnet werden. In der Praxis besteht aber das Problem, dass viele Prüfverfahren nur die Oberfläche von zweidimensionalen Schnitten durch die Stahlproben berücksichtigen. Die Anzahl von Einschlüssen pro Volumen und die Größenverteilung muss also aus den in zweidimensionalen Schnitten beobachteten Profilen der Einschlüsse geschätzt werden. Um diese Schätzung durchzuführen, müssen Annahmen über die räumliche Verteilung und die Form der Einschlüsse getroffen werden. Die räumliche Verteilung in der Bramme muss homogen sein, während man die Form entweder auf kugelige Einschlüsse mit unterschiedlichen Durchmesser oder auf Einschlüsse mit konvexer Form und unterschiedlicher Größe beschränkt. Unter der Bedingung, dass diese Annahmen erfüllt sind, wurden von Saltykov [118, S. 273 ff.] und Ohser und Mücklich [98, S. 199 ff.] Methoden zur Schätzung der Werte vorgestellt. Die Grundlage lieferte dabei Wicksell [143] mit der Formulierung des Korpuskel Problems. In der einschlägigen Literatur über nichtmetallische Einschlüsse lassen sich nur wenig Informationen über Eigenschaften der räumlichen Verteilung finden. Bekannt ist, dass sich auf Grund der Erstarrungseigenschaften von Stahl die Einschlüsse in einem schmalen Band unterhalb der Brammenoberseite sammeln [66, 41]. Das Erstarren der Bramme beginnt an den Außenseiten. Einschlüsse steigen im flüssigen Stahl nach oben hin auf, bis sie an der Erstarrungsfront hängen bleiben. Es bildet sich das sogenannte Einschlussband.

*Reinheitsgrad*

*Stereologische  
Methoden*

*Einschlussband*

Das heißt, dass die räumliche Verteilung innerhalb der Bramme keineswegs homogen ist. Weite Teile weisen nur eine geringe Konzentration an Einschlüssen auf, während die Konzentration innerhalb des Einschlussbandes sprunghaft ansteigt. Bleibt die Frage, ob die räumliche Verteilung innerhalb des Einschlussbandes homogen ist. Man geht davon aus, dass die Aufstiegs geschwindigkeit von kugelförmigen Einschlüssen dem stockesschen Gesetz entspricht [67]. Das heißt, dass größere Einschlüsse schneller im flüssigen Stahl aufsteigen als kleine. Dementsprechend müsste die Konzentration von großen Einschlüssen im oberen Bereich des Einschlussbandes größer sein als im unteren. Jacobi und Wünnenberg [67] geben an, diesen Effekt in ihren Messdaten beobachtet zu haben, auch wenn die Abweichungen in den präsentierten Kurven minimal ist. In Abschnitt 6.2 wird die räumliche Verteilung von Einschlüssen und Poren im Einschlussband anhand dreidimensionaler Daten genauer untersucht.

*Logarithmisch  
Normalverteilt*

Auch über die erwartete Größenverteilung von nichtmetallischen Einschlüssen lassen sich wenig Informationen finden. Übereinstimmend wird berichtet, dass sich die Größenverteilung von Einschlüssen durch die logarithmische Normalverteilung beschreiben lässt [118, S. 314 ff.][9, 41]. Allerdings werden keine verlässlichen Wertebereiche für die Verteilungsfunktion angegeben oder eine Erklärung geliefert, warum sich gerade dieses Modell zur Beschreibung der Daten eignet. In Abschnitt 6.1 wird eine mögliche Begründung geliefert und gezeigt, dass die logarithmische Normalverteilung ein geeignetes Modell darstellt. Zunächst werden aber im nächsten Abschnitt mehrere Detektionsverfahren vorgestellt, welche die Quantifizierung der in diesem Abschnitt besprochenen statistischen Eigenschaften erlauben.

#### 4.1.4 Detektionsverfahren

*Direkte und  
indirekte Methoden*

Eine Vielzahl verschiedener Detektionsmethoden für nichtmetallische Einschlüsse wurde vorgeschlagen. Man unterteilt sie grob in zwei Klassen, die direkten und indirekten Methoden [152]. Bei den indirekten Methoden wird versucht, den Einschlussgehalt anhand indirekter Parameter bei der Stahlerzeugung abzuschätzen. Eine Möglichkeit ist zum Beispiel, den Einschlussgehalt durch Sauerstoffmessungen im flüssigen Stahl zu bestimmen. Bei den direkten Methoden hingegen versucht man die Einschlüsse als solche zu detektieren. Die Untersuchungen werden oft auf kleinen Proben durchgeführt und die Ergebnisse über den Einschlussgehalt dann auf die gesamte Bramme hochgerechnet. Im nachfolgenden Abschnitt werden nur die bekanntesten direkten Methoden mit ihren Vor- und Nachteilen beschrieben. Auf die indirekten Methoden wird nicht weiter eingegangen, da diese in der vorliegenden Arbeit nicht relevant sind.

Eine der am häufigsten angewandten Methoden, die durch zahlreiche Industrienormen standardisiert ist [92, 34, 8], ist die Einschlussdetektion in polierten Schnitten. Die genaue Durchführung unterscheidet sich von Standard zu Standard, die grundlegende Idee ist aber überall dieselbe. Aus der Bramme wird nach einem fest vorgegebenen Verfahren eine Probe herausgetrennt und so zerschnitten, dass eine Oberfläche von ca.  $160 \text{ mm}^2$  entsteht. Auf dieser Oberfläche werden Einschlüsse mittels eines Mikroskops detektiert, vermessen und klassifiziert. Die Klassifizierung erfolgt dabei nach im Standard vorgegebenen Richtreihen und schließt die in Abschnitt 4.1.2 genannten Kriterien, wie Form, Farbe und Verformbarkeit ein. Anschließend wird mittels statistischer Verfahren versucht, den Reinheitsgrad auf die gesamte Bramme hochzurechnen. Wenn manuell durchgeführt, ist das Verfahren sehr aufwendig. Allerdings gibt es Systeme auf dem Markt, die unter Nutzung von Bildverarbeitungsverfahren vollautomatisch arbeiten. Die Firma Leica vertreibt beispielsweise ein solches vollautomatisches System Namens Leica Steel Expert. Der Nachteil bei diesem Verfahren ist, dass nur zweidimensionale Daten erhoben werden. Zwar gibt es Techniken, um den aus zweidimensionalen Schnitten geschätzten Reinheitsgrad auf das Volumen hochzurechnen, dafür müssen aber Annahmen über die Partikelform getroffen werden [118, S. 273 f.]. In den Standards wird dieses Problem gar nicht thematisiert und die Durchmesser- und Verteilung der zweidimensionalen Schnitte als Reinheitsgrad angenommen. Auch eignet sich das Verfahren nicht für die Bestimmung des Makroreinheitsgrads, da die Proben viel zu klein sind, um gesicherte statistische Aussagen über die sehr seltenen Makroeinschlüsse zu treffen [109].

*Mikroskopuntersuchungen polierter Oberflächen*

Ein weiteres, auf zweidimensionalen Schnitten arbeitendes Verfahren, ist die Einschlussdetektion mittels Rasterelektronenmikroskop (REM). Zunächst wird mittels Lichtmikroskop eine Vorauswahl von Einschlüssen erstellt. Diese Auswahl wird dann mit dem REM angefahren und genau vermessen. Dabei entstehen hochauflösende Bilder der Einschlüsse. Gleichzeitig kann, unter Nutzung der charakteristischen Röntgenstrahlung, die chemische Zusammensetzung analysiert werden. Das Verfahren ist sehr genau und kann genutzt werden, um die Morphologie von Mikroinschlüssen zu analysieren, wie zahlreiche Veröffentlichungen zeigen [74, 32, 129, 130, 131, 128]. Allerdings lassen sich Einschlüsse nur als einzelne Ereignisse untersuchen. Für die statistische Untersuchung des gesamten Einschlusskollektivs ist das Verfahren zu langsam.

*Rasterelektronenmikroskop*

Ein weiteres Verfahren zur Bestimmung der chemischen Zusammensetzung ist die Funkenspektrometrie. Dabei wird Material mittels auf die Schnittflächen gefeuerter Funken verdampft und die freigesetzten Atome und Ionen an ein optisches System geleitet, wo sie in ihre einzelnen spektralen Komponenten zerlegt werden. Auch hier können

*Spektrometrie*

Einschlüsse wieder nur als einzelne Ereignisse untersucht werden, da das Verfahren insgesamt sehr langsam ist. Außerdem ist die Flugbahn der Funken zufällig, es kann also nicht das Spektrum für einen bestimmten Punkt angegeben werden. Stattdessen wird das Spektrum über eine vorher festgelegte Fläche gemittelt. Abhilfe schafft hier die nach einem ähnlichen Prinzip arbeitende laserinduzierte Plasmaspektroskopie (LIPS). Dabei wird das Material nicht mit einem Funken, sondern einem Laser verdampft. Die lokale Auflösung pro Messpunkt beträgt dabei ca. 20 µm. Durch kontinuierliches Abfahren einer Fläche oder Linie lässt sich dann die genaue chemische Zusammensetzung eines Einschlusses bestimmen. In mehreren Veröffentlichungen wurde LIPS bereits für die Detektion von nichtmetallischen Einschlüssen evaluiert [90, 23, 75]. Um das System aber erfolgreich betreiben zu können, bedarf es immer noch einer Vorauswahl der zu untersuchenden Einschlüsse. Auch sind beide hier genannten Systeme zu langsam, um statistische Eigenschaften für ganze Partikelkollektive zu bestimmen.

*Computertomographie*

Neben zweidimensionalen Verfahren, die auf Schnittoberflächen arbeiten, gibt es auch Verfahren, die Einschlüsse im soliden Stahlvolumen detektieren können. Eine sehr verbreitete Technik ist die Mikro-Computertomographie (MCT) [103, 51, 83]. Die Funktionsweise ist wie folgt. Eine Röntgenröhre emittiert mit einer bestimmten Intensität Röntgenstrahlung in Form eines Kegelstrahls. Der Röntgenstrahl durchdringt die Probe und wird je nach Schwächungskoeffizient des durchdrungenen Materials unterschiedlich stark absorbiert. Der Strahl fällt dann auf einen Detektor, und es entsteht ein zweidimensionales Projektionsbild. Nun wird die Probe rotiert und erneut aufgenommen. Nach einer vollen Umdrehung kann ein Voxelmodell aller in der Probe vorhandenen nichtmetallischen Einschlüsse erstellt werden. Im Gegensatz zu den zweidimensionalen Verfahren kann man nun die Morphologie der Einschlüsse untersuchen und versuchen, diese mit statistischen Verfahren zu quantifizieren. Von Parra-Denis u. a. [103] wurden entsprechende Untersuchungen von nichtmetallischen Einschlüssen [104] mittels MCT vorgenommen. Ein weiterer Vorteil ist, dass das Verfahren, im Gegensatz zu allen bisher eingeführten, zerstörungsfrei arbeitet. Es lassen sich also auch fertige Bauteile untersuchen. Allerdings funktioniert das Verfahren nur für sehr dünne Proben, da sonst keine Röntgenstrahlung mehr auf dem Detektor ankommt. Deshalb eignet sich das Verfahren nur für die Detektion von Mikroeingüssen in sehr kleinen Proben.

Ein anderes dreidimensionales Detektionsverfahren erlaubt es ebenfalls, Makroeingüsse im Stahlvolumen zu detektieren. Dabei nutzt man Verformungseigenschaften von Einschlüssen aus. Es werden zunächst Proben, die direkt aus der Bramme geschnitten werden, in einem speziellen Walzverfahren in sogenannte „Surbrettproben“



umgewandelt. Mögliche Einschlüsse werden dabei ausgewalzt und für die Reflexion von Ultraschall sensibilisiert. Die Proben werden dann mit einem Ultraschallsensor verfahren und anhand des Echos lassen sich Einschlüsse detektieren und vermessen. Das Verfahren wurde von Mannesmann entwickelt [41, 66] und trägt den Namen Mannesmann Inclusion Detection by Analysing Surfboards (MIDAS). Mit diesem Verfahren können sehr große Proben mit mehreren Litern Probenvolumen untersucht werden. Einschlüsse können bis zu einer Größe von 50  $\mu\text{m}$  detektiert werden. Allerdings kann man keine Aussage mehr über ihre Morphologie treffen, da diese beim Walzen zerstört wird und der Sensor auch nicht in der Lage ist, diese zu detektieren. Die ursprüngliche Lage der Einschlüsse im Volumen kann ebenfalls nur sehr grob, durch Rücktransformation der „Surfbrettproben“ auf das Ausgangsvolumen, bestimmt werden [66]. Eine Untersuchung der räumlichen Verteilung mit statistischen Techniken ist nicht ohne weiteres möglich.

MIDAS

Zusammenfassend kann an dieser Stelle festgehalten werden, dass im Moment kein Verfahren verfügbar ist, welches sowohl die dreidimensionale Analyse der Morphologie als auch die dreidimensionale Analyse der räumlichen Verteilung von nichtmetallischen Einschlüssen in Stahlproben erlaubt. Die gängigen Verfahren liefern entweder nur Informationen über die zweidimensionale Gestalt und Verteilung oder sie sind zu langsam, um große Probenvolumina zu verarbeiten. Diese sind aber nötig, um auch gesicherte statistische Aussagen über Makroeinschlüsse treffen zu können. Eine umfassendere Studie zu verschiedenen Verfahren zur Berechnung des Reinheitsgrades und zum Detektieren von Einschlüssen wurde von Zhang und Thomas [152] durchgeführt. Insbesondere die indirekten Methoden und Methoden, bei denen Einschlüsse noch im flüssigen Stahl detektiert werden, sind dort ausführlicher beschrieben. Aber auch hier ist kein Verfahren aufgeführt, welches die beiden Anforderungen der dreidimensionalen Analyse von Form und Verteilung erfüllt.

#### 4.2 MAKROEINSCHLUSS-DETEKTION

Wie im vorherigen Abschnitt festgestellt, gibt es zur Zeit kein Analyseverfahren, mit dem sowohl dreidimensionale Gestalt als auch die dreidimensionale räumliche Verteilung nichtmetallischer Einschlüsse in sehr großen Stahlproben detektiert werden können. In diesem Abschnitt soll nun ein solches präsentiert werden. Es kombiniert die Vorteile der MCT und MIDAS und erlaubt es, sowohl die Morphologie von Einschlüssen als auch deren Größenverteilung und räumliche Verteilung zu untersuchen. Neben nichtmetallischen Einschlüssen können auch andere Defekte, wie Risse, Poren oder Lunker

analysiert werden. Entwickelt wurde das Verfahren im Rahmen des Silenos-Projekts mit zwei Partnern aus der Stahlindustrie.

*Silenos*

Das Verfahren funktioniert ähnlich wie die Bestimmung des Reinheitsgrades in zweidimensionalen polierten Schnittproben, erweitert das Prinzip aber auf die dritte Dimension. Dabei werden aufeinanderfolgende Schnittbilder einer Stahlprobe durch kontinuierliches Abfräsen und Abfotografieren erzeugt. Durch Stapeln dieser zweidimensionalen Bilder lässt sich dann ein virtuelles dreidimensionales Bild des Probenvolumens erstellen und die Morphologie der detektierten Defekte rekonstruieren. Das System an sich besteht dabei aus einer Reihe von lose gekoppelten Komponenten, welche die einzelnen Verarbeitungsschritte wie in einer Pipeline nacheinander abarbeiten. Im Folgenden werden die einzelnen Komponenten kurz beschrieben, wobei das Augenmerk auf der Bildaufnahme- beziehungsweise Bildverarbeitungseinheit liegt. Die konkrete Implementierung der anderen Komponenten, welche die dreidimensionale Rekonstruktion, automatische Klassifikation und statistische Auswertung übernehmen und den thematischen Schwerpunkt dieser Arbeit darstellt, wird detailliert in Kapitel 7 erläutert.

#### 4.2.1 Fräsprozess und Bildaufnahme

*Positioniersystem*

Der Bildgewinnungsprozess läuft bei dem hier beschriebenen Verfahren wie folgt ab. Ein direkt aus dem Strangguss geschnittener Stahlblock mit maximaler Abmessung von  $300 \times 120 \times 90 \text{ mm}^3$  wird auf ein lineares Positioniersystem gespannt. Das Positioniersystem besteht aus zwei separaten Achsen, der  $x$ -Achse, auf der die Probe eingespannt ist, und einer kombinierten  $y/z$ -Achse, die über der  $x$ -Achse montiert ist und auf welcher sich die Kamera und die Beleuchtung befinden. Während der Bildaufnahme wird nur die  $x$ -Achse bewegt und die Probe unter der Kamera verschoben. Ist eine Bahn aufgenommen, wird die Kamera mittels der  $y$ -Achse verschoben und die nächste Bahn abgescannt. Die  $z$ -Achse wird benutzt, um die Kamera zu fokussieren. Für die Bildaufnahme wird entweder ein Flächensensor oder ein Zeilensensor verwendet. Die Einzelbilder werden anschließend zu einem Bild der gesamten Oberfläche zusammengefügt. Die übliche lokale Auflösung pro Pixel beträgt  $10 \mu\text{m}$  oder  $20 \mu\text{m}$  pro Pixel in  $x, y$ -Richtung. Ist die Stahloberfläche vollständig abfotografiert, wird mit einer Spanabnahme von bis zu  $10 \mu\text{m}$  die Oberfläche abgefräst und der Bildaufnahmeprozess wiederholt. Das fertige Bild wird an die nächste Stufe der Pipeline weitergereicht. Eine umfangreichere Darstellung des Bildaufnahmesystems ist in Herwig u. a. [55] beschrieben.

*Kamera*

### 4.2.2 Bildverarbeitung

In den Bildern müssen nun die zweidimensionalen Profile der Defekte detektiert und segmentiert werden. Dieser Prozess wird dadurch erschwert, dass auf der Oberfläche der Stahlprobe durch den Fräsprozess ein quasi periodisches Muster entsteht. Zwar kann man durch geeignete Wahl der Beleuchtung die Ausprägung dieses Fräsmusters in den Fotos abschwächen [55], gänzlich unterdrücken lässt es sich aber nicht. Zwei verschiedene Verfahren haben sich beim Segmentieren als erfolgreich erwiesen. Beide Verfahren arbeiten im Frequenzraum. Das Bild wird also zunächst mittels der Fouriertransformation in diesen überführt. Beim ersten Verfahren nutzt man aus, dass das periodische Fräsmuster im Frequenzraum die Form eines Keils besitzt. Schätzt man von diesem Öffnungswinkel und Richtung, dann kann ein Filter konstruiert werden, der alle Frequenzen des Keils unterdrückt. Dadurch wird im rücktransformierten Bild das Fräsmuster beseitigt und die Defekte können mittels eines einfachen Schwellwertverfahrens segmentiert werden [55, 21]. Das andere Verfahren basiert auf der von Aiger und Talbot [2] eingeführten Phase-Only Transformation (PHOT). Durch die PHOT werden alle regelmäßigen Strukturen, in diesem Fall also das Fräsmuster, eines Bildes entfernt und Defekte mit einem hohen Evidenzwert identifiziert. Durch zusätzliches Betrachten der direkten Nachbarschichten lässt sich mit hoher Genauigkeit ein Defekt von einem durch die Fräse entstandenen Artefakt unterscheiden. Dabei stützt man sich auf die Annahme, dass alle betrachteten Defekte eine dreidimensionale Ausdehnung haben [56, 21]. Alle Pixel, die zu den identifizierten Defekten gehören, werden dann mit ihren originalen Grauwerten an die nächste Stufe der Pipeline übergeben. Dadurch wird eine drastische Reduktion der Daten erreicht.

*Beleuchtung*

*Keilfilter*

*Phase-Only  
Transformation*

### 4.2.3 Morphologische und statistische Analyse

Die letzten beiden Stufen werden in einem Abschnitt zusammengefasst. Zunächst werden die zweidimensionalen Profile der Defekte mit den in Abschnitt 2.1.2 beschriebenen Algorithmen verarbeitet und die dreidimensionale Morphologie rekonstruiert. Die Defekte werden dabei so lange zwischengespeichert, bis sie gemäß der Definition aus Abschnitt 2.1.2.3 vollständig abgefräst wurden. Auf den vollständig abgefrästen Defekten werden dann die in Abschnitt 2.2 beschriebenen Verfahren der Einzelpartikelanalyse angewendet und ihre Gestalt statistisch quantifiziert. Anschließend werden die Defekte anhand der berechneten Deskriptoren in Risse, Poren und nichtmetallische Einschlüsse klassifiziert. Auch Artefakte, bei denen es sich um

*Rekonstruktion*

*Klassifikation*

fälschlich segmentierte Objekte, wie Fräsrillen oder Verschmutzungen der Probenoberfläche durch Späne und Öltropfen handelt, können so erkannt werden. Mittels der klassifizierten Datensätze wird dann der Reinheitsgrad kontinuierlich parallel zum Fräsprozess berechnet. Beim Erreichen einer ausreichend hohen statistischen Sicherheit wird ein Stoppsignal an die anderen Stufen der Pipeline propagiert und der gesamte Prozess beendet. Dies schont den Fräskopf und führt zu einem ökonomischeren Prozess mit weniger Materialverschleiß. Die gewonnenen Ergebnisse der statistischen Auswertung sowie die Ergebnisse der Klassifikation und die Werte der einzelnen Deskriptoren werden schließlich in einer Datenbank abgelegt.

#### 4.3 ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Kapitel wurde ein möglicher Anwendungsfall für das in dieser Arbeit entwickelte Rahmenwerk vorgestellt. Bei dem Anwendungsfall handelt es sich um die Analyse von Verunreinigungen in Stahlproben, die während der Stahlerzeugung entstehen und unter gewissen Umständen im fertigen Produkt verbleiben. Diese Verunreinigungen werden als nichtmetallische Einschlüsse bezeichnet und formen ein Partikelsystem im erstarrten Stahl, welches mit den in Kapitel 2 und 3 beschriebenen Verfahren untersucht werden kann. Ziel der Analyse ist dabei, gesicherte statistische Aussagen abzuleiten, so dass die Entstehung der Einschlüsse und der Einfluss auf die Qualität des Werkstoffs besser verstanden werden. Auf lange Sicht soll dann mit diesen Erkenntnissen der Produktionsprozess dahingehend optimiert werden, dass weniger dieser Verunreinigungen im Material zurückbleiben. Bevor die Analyse der nichtmetallischen Einschlüsse aber durchgeführt werden kann, müssen diese zunächst detektiert werden. In diesem Abschnitt wurden deshalb die gängigsten Detektionsverfahren vorgestellt, welche sich in der Industrie als Standard etabliert haben. Dabei wurde festgestellt, dass keines der bekannten Verfahren in der Lage ist sowohl die dreidimensionale Morphologie als auch die dreidimensionale räumliche Verteilung der Einschlüsse zu detektieren. Abhilfe schafft hier das im Rahmen des Silenos-Projekts entwickelte Verfahren, auf dessen Ergebnissen die Auswertungen in Kapitel 5 und 6 beruhen. Neben der Funktionsweise dieses Verfahrens wurden im weiteren Verlauf die wichtigsten bekannten statistischen Eigenschaften von nichtmetallischen Einschlüssen zusammengefasst. Diese werden in den nachfolgenden Kapiteln als Expertenwissen für die statistische Modellierung herangezogen.

## KLASSIFIKATION VON DEFEKTEN IN STAHL

---

Bei der Analyse von Stahlproben mittels des in Abschnitt 4.2 beschriebenen Verfahrens werden neben nichtmetallischen Einschlüssen auch andere Defekte, wie Risse und Poren detektiert. Aber auch Artefakte, bei denen es sich um fälschlich segmentierte Objekte wie Fräsrillen handelt, können in der Ergebnismenge landen. Um den Reinheitsgrad der untersuchten Probe bestimmen zu können, der als Gehalt an nichtmetallischen Einschlüssen definiert ist, müssen die erkannten Defekte also zunächst klassifiziert werden. Insbesondere eine Abgrenzung der Risse und Artefakte ist dabei von großer Bedeutung, da es sich bei diesen um singuläre Ereignisse mit möglicherweise sehr großer Ausdehnung handelt. Fließen diese in die Berechnung des Reinheitsgrades ein, kann es zu starken Verfälschungen des Ergebnisses kommen. Im vollautomatischen Verarbeitungsbetrieb kann es dann dazu kommen, dass das in Abschnitt 6.4.2 definierte Abbruchkriterium zum falschen Zeitpunkt auslöst und die erhobenen Ergebnisse für die weitere Analyse unbrauchbar sind. In diesem Kapitel wird deshalb evaluiert, wie anhand der in Abschnitt 2.2 beschriebenen Gestaltdeskriptoren eine automatische Klassifizierung durchgeführt werden kann und welcher Satz von Deskriptoren zum besten Ergebnis führt. Zwei Szenarien werden dabei untersucht. Zunächst werden die Defekte in globulare Defekte, Artefakte und Risse unterteilt. Anschließend werden die globularen Defekte in einem zweiten Durchgang feiner aufgeteilt, und zwar in nichtmetallische Einschlüsse und Poren. Die Klassifikation erfolgt auf Basis von Algorithmen aus dem Bereich des maschinellen Lernens. Im Folgenden wird ein Überblick über die wichtigsten Methoden aus diesem Bereich gegeben und begründet, warum welche Methoden für die automatische Klassifikation ausgesucht wurden. Begonnen wird mit einem Einführungsbeispiel, welches die Verwendung maschinellen Lernens motiviert.

### 5.1 EINFÜHRUNGSBEISPIEL

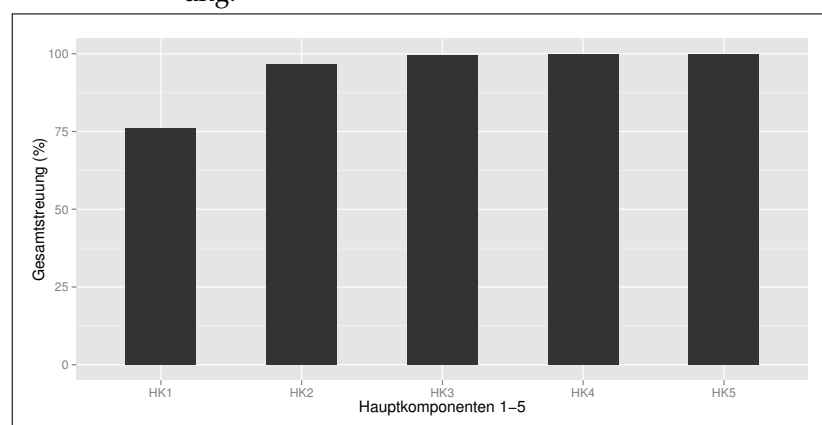
Man betrachtet dazu folgendes Beispiel. Eine Menge von Defekten, welche mit der in Abschnitt 4.2 beschriebenen Technik in einer Stahlprobe detektiert wurde, soll in drei Kategorien unterteilt werden. Bei den drei Kategorien handelt es sich um Risse, die auf Grund von Spannungen während der Abkühlung im Material auftreten können,

*Trainingsmenge*

*Hauptkomponenten-  
analyse*

um globulare Defekte, bei denen es sich höchstwahrscheinlich um Poren oder nichtmetallische Einschlüsse handelt und um die schon beschriebenen Artefakte. Weiter soll für eine zweite Menge von Defekten die Klassifikation für jeden Defekt dieser Menge bereits bekannt sein. Diese Einteilung kann beispielsweise von einem Experten durch visuelle Sichtprüfung vorgenommen worden sein. Man bezeichnet diese Menge als Trainingsmenge. Anhand der in Abschnitt 2.2 beschriebenen Deskriptoren sollen nun mittels der Trainingsmenge Regeln abgeleitet werden, mit denen die noch nicht klassifizierten Defekte in eine der drei Klassen eingeordnet werden können. Im folgenden Beispiel werden dazu die symmetrischen Konfigurationshistogramme aus Abschnitt 2.2.2 verwendet. Für jeden Defekt der Trainingsmenge werden also die Histogramme berechnet, wobei diese durch das Volumen der jeweiligen Boundingbox normalisiert werden. Man erhält pro detektiertem Defekt einen Vektor mit 22 Komponenten. Da der Umgang mit einem so hochdimensionalen Deskriptorraum schwierig und für den Menschen wenig intuitiv ist, kann man als nächstes versuchen, mittels der in Abschnitt 2.2.4 vorgestellten Hauptkomponentenanalyse die Anzahl der Dimensionen zu reduzieren. Nach Aufstellen der empirischen Varianz-Kovarianz-Matrix und Lösen des Eigenwertproblems ergeben sich die 22 Hauptkomponenten absteigend sortiert nach ihren Eigenwerten aus den Eigenvektoren. Aus den Eigenwerten lässt sich der Anteil an der Gesamtstreuung der jeweiligen Hauptkomponente ablesen. In Abbildung 6 ist der kumulierte Anteil der Gesamtstreuung für die ersten fünf Hauptkomponenten aufgetragen. Man erkennt, dass bereits die ersten beiden Hauptkomponenten mehr als 95 Prozent der Gesamtstreuung erklären. Damit kann man sich bei der weiteren Analyse auf die ersten

**Abbildung 6.:** Kumulierter Anteil der Eigenwerte an der Gesamtstreuung.

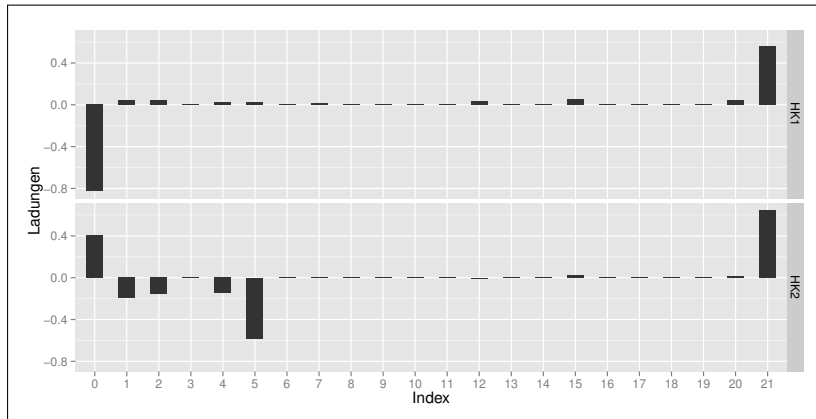


beiden Hauptkomponenten beschränken, ohne einen zu großen Informationsverlust hinnehmen zu müssen. Konkret überführt man die Koordinaten der Defekte mittels der aus den ersten zwei Hauptkom-

ponenten mit den größten Eigenwerten gebildeten Transformationsmatrix in ein neues Koordinatensystem. Um zu analysieren, welche Konfigurationen des Histogramms besonders viele Informationen in sich tragen, kann man sich die durch die Hauptkomponenten beschriebenen Gewichtungen, auch Ladungen genannt, anschauen. In Abbildung 7 sind die Werte für die ersten beiden Hauptkomponenten aufgetragen. Die  $x$ -Achse gibt dabei den Index der jeweiligen Voxelkonfiguration an. Bei beiden Hauptkomponenten sind die Indizes 0

*Ladungen*

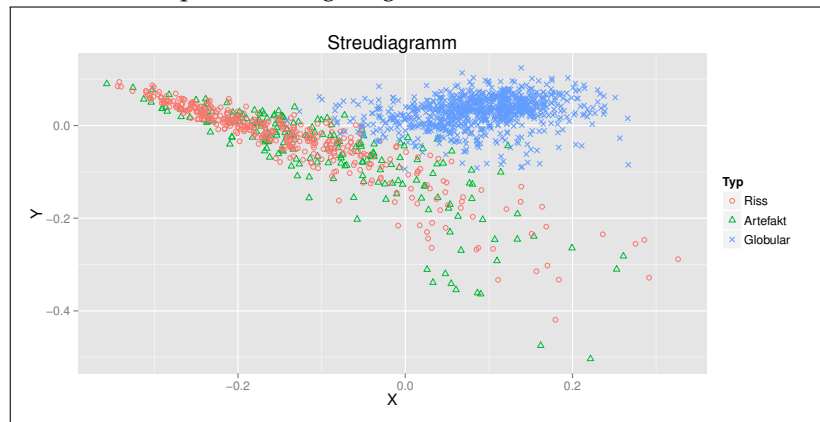
Abbildung 7.: Histogramm der Ladungen.



und 21 stark abweichend von 0 gewichtet. Durch einen Blick auf Tabelle 13 erfährt man, dass es sich dabei um die Konfigurationen für die leere und die komplett gefüllte  $2 \times 2 \times 2$  Voxelnachbarschaft handelt. Vor dem Hintergrund, dass das Histogramm vorher durch das Volumen der Boundingbox normalisiert wurde, lassen sich die Werte als eine Art Kompaktmaß der Defekte interpretieren. Bei dünn besetzten Defekten mit großer räumlicher Ausdehnung ist das Verhältnis zwischen der Anzahl der vollbesetzten Konfigurationen und dem Volumen der Boundingbox sehr klein. Bei globularen Defekten hingegen wird das Verhältnis eher groß sein, da das Boundingboxvolumen im Vergleich zur Anzahl der vollen Belegungen klein ist. Die Auswirkungen dieser Gewichtung kann man in Abbildung 8 sehen. In dem Streudiagramm sind die transformierten Koordinaten der Defekte der Trainingsmenge gegeneinander aufgetragen und jeweils mit den entsprechenden bekannten Bezeichnern versehen. Die globularen Defekte liegen relativ dicht beieinander und lassen sich gut von den Rissen und Artefakten trennen. Schwieriger sieht es bei den Artefakten und Rissen aus. Hier ist im Streudiagramm keine klare Clusterbildung erkennbar. Dies ist darauf zurückzuführen, dass das oben beschriebene Kompaktmaß auf Grund der ähnlichen Struktur von Rissen und Artefakten keine eindeutige Trennung erlaubt. Während man also globulare Defekte gut von den übrigen Strukturen trennen und eventuell sogar statische Regeln in Form von festen Schwellwerten aus Abbildung 8 ableiten kann, ist eine Unterscheidung zwischen Rissen und

*Streudiagramm*

**Abbildung 8.:** Streudiagramm nach Dimensionsreduktion mittels der ersten beiden Hauptkomponenten. Dabei werden auf der  $x$ -Achse die Werte der ersten Hauptkomponente und auf der  $y$ -Achse die Werte der zweiten Hauptkomponente aufgetragen.



Artefakten mit dem ausgewählten Deskriptor nicht möglich. Weitere Deskriptoren aus Abschnitt 2.2 müssen also herangezogen werden, was die Verwendung von statischen Regeln zunehmend erschwert und für den Menschen nahezu unmöglich macht. Alternativ zum manuellen Aufstellen von Klassifizierungsregeln können Verfahren aus dem Bereich des maschinellen Lernens verwendet werden, um solche Regeln aus vorklassifizierten Daten zu schätzen.

## 5.2 MASCHINELLES LERNEN

*Zielfunktion*

Die Idee beim maschinellen Lernen wird im Folgenden beschrieben. Gegeben sei eine unbekannte Zielfunktion  $f : X \rightarrow Y$ , wobei  $X$  die Menge aller möglichen Eingaben beschreibt, also im konkreten Fall die in Abschnitt 2.2 definierten Deskriptoren, und  $Y$  die Menge aller möglichen Ausgaben, also entweder wie im ersten Szenario Artefakt, Riss und globularer Defekt oder wie im zweiten Szenario Pore und nichtmetallischer Einschluss.

*Trainingsmenge*

Zusätzlich gegeben ist eine Trainingsmenge  $D$  der Größe  $n$  mit der Form

$$D = \{(x_i, y_i), x_i \in X, y_i \in Y : y_i = f(x_i)\} \quad (116)$$

*Hypothesen*

wobei  $i = 1, \dots, n$  ist. Ziel des an dieser Stelle nicht näher spezifizierten Lernalgorithmus ist es nun, mittels der Trainingsmenge  $D$  eine Funktion  $g : X \rightarrow Y$  aus einer Menge von Hypothesen  $H$  zu wählen, die  $f$  möglichst gut approximiert [1, S. 20 ff.]. Da die Zielfunktion  $f$  aber unbekannt ist, kann als Kriterium zur Auswahl der Hypothese nur die Trainingsmenge herangezogen werden. Üblicherweise wählt man diejenige Hypothese  $h \in H$  aus, die den Fehler über



die Trainingsmenge minimiert. Nun kann es aber vorkommen, dass es eine alternative Hypothese  $h' \in H$  gibt, die zwar einen größeren Fehler gegenüber von  $h$  auf den Trainingsdaten aufweist, aber einen kleineren bezogen auf alle möglichen Eingabedaten. Man spricht in diesem Fall auch von Überanpassung. Die entscheidende Frage ist also, wie gut sich der gelernte Zusammenhang aus den Trainingsdaten generalisieren lässt. Um dies zu testen, verwendet man das Kreuzvalidierungsverfahren. Bei der Kreuzvalidierung wird die Trainingsmenge  $D$  zufällig in  $k$  möglichst gleich große Teilmengen  $D_1, \dots, D_k$  aufgeteilt. Aus diesen  $k$  Teilmengen wird eine Teilmenge  $D_i$  als Testmenge deklariert, während die  $k - 1$  Teilmengen  $\{D_1, \dots, D_k\} \setminus \{D_i\}$  die neue Trainingsmenge darstellen. Der Lernalgorithmus wird also mit  $k - 1$  Mengen trainiert und mit der Testmenge  $D_i$  anschließend validiert. Der Prozess wird  $k$  mal wiederholt, wobei jede Teilmenge genau einmal als Testmenge fungiert. Lässt sich der angelernte Algorithmus gut generalisieren, liefert der Algorithmus im Durchschnitt für jeden der  $k$  Durchläufe ein gutes Ergebnis.

Kreuzvalidierung

### 5.2.1 Bewertung eines Klassifizierers

Stellt sich die Frage, wie genau man quantifizieren kann, ob ein Klassifizierer ein gutes Ergebnis liefert. Das Ergebnis eines Klassifizierers lässt sich als Datensatz mit zwei qualitativen Merkmalen mit jeweils  $n$  Merkmalsausprägungen auffassen, wobei  $n$  der Anzahl der Klassen entspricht. Das erste Merkmal, genannt  $A$  mit  $A_j$  Merkmalsausprägungen, wobei  $j = 1, \dots, n$  gilt, beschreibt, welcher Klasse das betrachtete Objekt wirklich angehört, während das zweite Merkmal, genannt  $B$  mit  $B_i$  Merkmalsausprägungen, wobei  $i = 1, \dots, n$  gilt, die vom Klassifizierer zugewiesene Klasse angibt. Daraus lässt sich eine Häufigkeitstabelle aller Merkmalskombinationen, auch Kontingenztabelle oder Konfusionsmatrix genannt, aufstellen [48, S. 37 ff.]. Tabelle 3 zeigt eine solche Matrix. Dabei ist  $h_{ij}$  die Häufigkeit eines Objektes mit Merkmalsausprägung  $B_i$  und  $A_j$ , oder anders ausgedrückt, die Häufigkeit, wie oft ein Objekt vom Klassifizierer der Klasse  $B_i$  zugeordnet wurde, obwohl es der Klasse  $A_j$  angehört. Die Diagonale der

Kontingenztabelle

**Tabelle 3.:** Beispiel einer Kontingenztabelle.

		A			
		$A_1$	$A_2$	$\dots$	$A_n$
B	$B_1$	$h_{11}$	$h_{12}$	$\dots$	$h_{1n}$
	$B_2$	$h_{21}$	$h_{22}$	$\dots$	$h_{2n}$
	$\vdots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
	$B_n$	$h_{n1}$	$h_{n2}$	$\dots$	$h_{nn}$

Matrix gibt die Häufigkeit der richtig klassifizierten Objekte an. Die

Korrektklassifikationsrate

Korrektklassifikationsrate oder Akkuratheit (im Englischen Accuracy)  $ACC$  ergibt sich dann aus

$$ACC = \frac{\sum_{i=1}^n h_{ii}}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n h_{ij}} \quad (117)$$

*Kappa-Koeffizient*

Bei der Berechnung der Korrektklassifikationsrate wird aber nicht berücksichtigt, dass ein gewisses Maß an Übereinstimmung auch dann zu erwarten wäre, wenn der Klassifizierer per Zufall entscheidet. Mittels des Kappa-Koeffizienten lässt sich die Korrektklassifikationsrate um den Anteil der zufälligen Übereinstimmung bereinigen. Definiert ist der Kappa-Koeffizient als

$$\kappa = \frac{ACC - e}{1 - e} \quad (118)$$

wobei  $e$  die Korrektklassifikationsrate bei zufälliger Klassifikation ist. Man kann  $e$  mittels

$$e = \frac{\sum_{k=1}^n \left( \sum_{i=1}^n h_{ik} \sum_{j=1}^n h_{kj} \right)}{\left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n h_{ij} \right)^2} \quad (119)$$

berechnen.

*Sensitivität und Genauigkeit*

Des Weiteren lassen sich für jede Klasse die Kenngrößen Sensitivität (im Englischen Recall) und die Genauigkeit (im Englischen Precision) ausrechnen. Die Sensitivität ist die Anzahl der korrekt klassifizierten Objekte einer Klasse geteilt durch die Gesamtheit aller Objekte dieser Klasse, während die Genauigkeit die Anzahl der korrekt klassifizierten Objekte einer Klasse geteilt durch die Anzahl aller als diese Klasse klassifizierten Objekte ist. Aus der Kontingenztabelle 3 ergibt sich die Sensitivität  $R_k$  und die Genauigkeit  $P_k$  einer Klasse  $k$  durch

$$R_k = \frac{h_{kk}}{\sum_{i=1}^n h_{ik}} \quad (120)$$

und

$$P_k = \frac{h_{kk}}{\sum_{j=1}^n h_{kj}} \quad (121)$$

*Makrosensitivität und Makrogenauigkeit*

Für die Berechnung der Gesamtsensitivität und der Gesamtgenauigkeit gibt es verschiedene Definitionen [124]. Eine Möglichkeit besteht darin, den Mittelwert der Sensitivität und Genauigkeit über alle Klassen zu berechnen. Diese Methode wird auch als Makrodurchschnitt bezeichnet und entsprechend die Sensitivität als Makrosensitivität

$R_M$  und die Genauigkeit als Makrogenauigkeit  $P_M$ . Sie sind definiert als

$$R_M = \frac{\sum_{k=1}^n R_k}{n} \quad (122)$$

und

$$P_M = \frac{\sum_{k=1}^n P_k}{n} \quad (123)$$

Bei dieser Methode werden Klassen mit wenig Objekten stärker gewichtet als Klassen mit vielen. Wenn die Anzahl von Objekten innerhalb der einzelnen Klassen sich also stark voneinander unterscheidet, wird das Ergebnis verfälscht. Abhilfe kann hier der Mikrodurchschnitt schaffen, der alle Klassen gleich gewichtet. Die Mikrosensitivität  $R_\mu$  und Mikrogenauigkeit  $P_\mu$  sind definiert als

*Mikrosensitivität  
und  
Mikrogenauigkeit*

$$R_\mu = \frac{\sum_{k=1}^n h_{kk}}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n h_{ij}} \quad (124)$$

und

$$P_\mu = \frac{\sum_{k=1}^n h_{kk}}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n h_{ij}} \quad (125)$$

Für den hier dargestellten Fall, in dem jedes Objekt immer einer Klasse zugewiesen wird, sind Mikrosensitivität, Mikrogenauigkeit und Korrektklassifikationsrate gleich.

Schließlich wird häufig das  $F_1$ -Maß verwendet, bei dem die Sensitivität und Genauigkeit zu einem Wert zusammengefasst werden. Es kann sowohl klassenweise als auch für die Gesamtsensitivität und Gesamtgenauigkeit berechnet werden. Allgemein ist das  $F_1$ -Maß durch

*$F_1$ -Maß*

$$F_1 = \frac{2RP}{R + P} \quad (126)$$

definiert, wobei  $R$  und  $P$  den oben angegebenen Definitionen für die Genauigkeit beziehungsweise die Sensitivität entsprechen.

Für die in Abschnitt 5.3 beschriebene Auswertung werden alle hier definierten Maße berechnet.

### 5.2.2 Lernalgorithmus

Bleibt die Frage, welchen Lernalgorithmus man konkret verwendet. Zahlreiche Algorithmen wurden im Bereich des überwachten Lernens, also beim Lernen einer Funktion aus einem Paar von Ein-

*Naiver  
Bayes-Klassifikator*

*Entscheidungsbäume*

*Neuronale  
Netzwerke*

und Ausgabedaten, vorgestellt. Die bekanntesten Vertreter sind die probabilistischen Klassifizierer, wie beispielsweise der naive Bayes-Klassifikator, die auf Entscheidungsbäumen oder auf künstlichen neuronalen Netzwerken basierenden Klassifikatoren und schließlich die Support Vector Machine (SVM). Beim naiven Bayes-Klassifikator lässt sich, unter der Voraussetzung, dass die einzelnen Deskriptoren zum gleichen Teil zur Entscheidung beitragen und voneinander unabhängig sind, die Klassenzugehörigkeit eines Objektes durch Ausrechnen der bedingten Wahrscheinlichkeiten bestimmen. Dazu muss die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der einzelnen Deskriptoren bekannt sein. Bei kontinuierlichen Daten geht man üblicherweise davon aus, dass die Deskriptoren normalverteilt sind. Die Verteilungsparameter lassen sich dann mittels der jeweiligen Schätzfunktion aus der Trainingsdatenmenge schätzen und ein neuer Datensatz durch Aufstellen der bedingten Wahrscheinlichkeit klassifizieren [147, S. 88 ff.]. Entscheidungsbäume sind geordnete, gerichtete Bäume, deren Knoten logische Regeln beschreiben und in deren Blättern die einzelnen Klassen hinterlegt sind. Um ein unbekanntes Objekt zu klassifizieren, steigt man beginnend von Wurzelknoten den Baum entlang abwärts. Bei jedem Knoten wird die logische Regel auf das Objekt beziehungsweise einen Deskriptor angewendet und entschieden, in welchen Teilbaum abgestiegen werden soll. Erreicht man einen Blattknoten, ist das Objekt klassifiziert. Die Entscheidungsregeln des Baums werden dabei entweder von Experten definiert oder aus Trainingsmengen induziert [114, S. 8 ff.]. Eine Erweiterung der Entscheidungsbäume sind Random Forests. Dabei werden mehrere Entscheidungsbäume aus zufällig gewählten Teilmengen aller Deskriptoren der Trainingsmenge gebildet und zum Klassifizieren verwendet. Dadurch wird eine verbesserte Generalisierung erreicht [57, 17]. Künstliche neuronale Netzwerke sind Modelle zum Lernen von Funktionen, die durch die Funktionsweise des zentralen Nervensystems von Menschen oder Tieren inspiriert sind. Ein sehr einfacher Vertreter dieser Gattung ist das Perzeptron. Das einlagige Perzeptron besteht aus einer Reihe von gewichteten Eingängen, welche bei der Lösung eines Klassifizierungsproblems der Menge der Deskriptoren entspricht. Die Eingänge sind über die Eingangsfunktion, welche die gewichtete Summe der Eingabewerte berechnet, mit einem Ausgang verbunden. Am Ausgang wird nun im Falle eines Klassifizierungsproblems mittels einer Schwellwertfunktion überprüft, zu welcher Klasse das zu identifizierende Objekt gehört. Um das Perzeptron anzulernen, müssen die Gewichte so gewählt werden, dass der Klassifizierungsfehler über der Trainingsmenge minimiert wird [95, S. 86]. Das einlagige Perzeptron eignet sich nur für die Klassifizierung von linear separierbaren Datensätzen. Wie bereits festgestellt, ist die Unterscheidung von globularen und nicht globularen Defekten unter Verwendung der dimensionsreduzierten symmetrischen Konfi-

gurationshistogramme, wie man in Abbildung 8 sieht, linear separierbar, da sich die Daten durch eine Ebene voneinander trennen lassen. Möchte man auch nicht linear separierbare Daten voneinander trennen, wie beispielsweise in Abbildung 8 Risse und Artefakte, muss das einlagige Perzeptron durch das Hinzufügen von weiteren versteckten Schichten zwischen Eingängen und Ausgängen zu einem mehrschichtigen Perzeptron erweitert werden. Angelernt wird das mehrschichtige Perzeptron mittels des von Rumelhart, Hinton und Williams [116] entwickelten Verfahrens der Fehlerrückführung (Backpropagation genannt). Bei den SVMs schließlich wird das Klassifikationsproblem gelöst, indem für die Objekte der Trainingsmenge eine Hyperebene bestimmt wird, welche die Objekte entsprechend ihrer Klassenzugehörigkeit voneinander trennt. Dabei wird der Abstand der Objekte, die der Ebene am nächsten liegen, maximiert. Die Ebene hängt also nur von diesen Objekten ab und kann durch diese exakt beschrieben werden. Man bezeichnet diese als Stützvektoren. Ein unbekanntes Objekt wird dann klassifiziert, indem seine Lage bezüglich der durch die Stützvektoren beschriebenen Ebene analysiert wird. Um bessere Generalisierungseigenschaften zu erreichen, kann die sogenannte Schlupfvariable gesetzt werden. Die Schlupfvariable erlaubt es, dass eine bestimmte Anzahl von Objekten falsch klassifiziert werden darf. Dies kann beispielsweise sinnvoll sein, wenn die Daten zwar linear separierbar sind, aber auf Grund von Rauschen keine eindeutige Ebene gefunden werden kann. Prinzipiell arbeitet die so beschriebene SVM aber nur optimal, wenn das Klassifikationsproblem linear ist. Um auch nicht linear separierbare Datensätze zu klassifizieren, kann man versuchen den Trainingsdatensatz durch eine nicht lineare Transformation  $\Phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{H}$  in einen möglicherweise unendlich dimensionalen Vektorraum abzubilden. In diesem wird nach dem oben beschriebenen Verfahren die Hyperebene bestimmt, welche den Datensatz in zwei Klassen separiert. Im ursprünglichen Raum stellt sich diese Hyperebene als gekrümmte Trennfläche dar. Wie beispielsweise von Burges [22] gezeigt wurde, lässt sich die optimierende Zielfunktion zur Bestimmung der Hyperebene so formulieren, dass  $\Phi$  nur als Skalarprodukt vorkommt. Damit muss  $\Phi$  nicht explizit angegeben werden, sondern lässt sich durch eine Funktion

$$K(x_i, x_j) = \Phi(x_i) \cdot \Phi(x_j) \quad (127)$$

für zwei Elemente  $x_i$  und  $x_j$  der Trainingsmenge berechnen. Man bezeichnet die Funktion  $K$  als Kernelfunktion. Häufig verwendete Kernel sind die Radiale Basisfunktion (auch als Gauß-Kernel bezeichnet) und der polynomiale Kernel. Da in der vorliegenden Arbeit sowohl linear wie nicht linear separierbare Datensätze klassifiziert werden müssen, wird auf Grund dieser Eigenschaften im Nachfolgenden ausschließlich eine SVM zur Klassifikation verwendet. Für die Klassifizierung von Poren und nichtmetallischen Einschlüssen wurde von Bür-

ger u. a. [20] bereits gezeigt, dass die SVM im direkten Vergleich zu den anderen Methoden sehr gute Ergebnisse liefert. Im Gegensatz zu den veröffentlichten Ergebnissen wird im Folgenden aber kein heuristisches Verfahren verwendet, um den optimalen Deskriptorsatz zu bestimmen, sondern, wie später noch beschrieben wird, eine erschöpfende Suche durchgeführt. Dieser Ansatz ist zwar rechenintensiver, da die Bestimmung des optimalen Parametersatzes aber nur einmal während der Trainingsphase durchgeführt werden muss, gibt es keine Einschränkungen für den Echtzeitbetrieb. Für die Implementierung der SVM wird auf die von Chang und Lin [24] entwickelte libSVM zurückgegriffen.

### 5.3 AUSWERTUNG

*Datensätze* Sowohl für das Klassifizieren von Artefakten, Rissen und globularen Defekten als auch für das Klassifizieren von nichtmetallischen Einschlüssen und Poren stehen per Hand vorklassifizierte Datensätze zur Verfügung, die als Grundwahrheit dienen. Beim ersten Szenario besteht der Datensatz aus insgesamt 1462 Defekten, die durch manuelle Sichtung mehrerer Proben mittels des in Abschnitt 7.2 vorgestellten Werkzeugs erstellt wurden. Durch direkten Vergleich der segmentierten Daten mit den Originalbildern lässt sich ihre Klassenzugehörigkeit schnell bestimmen. Schwieriger ist die Datenerfassung beim zweiten Szenario. Hier wurde der Datensatz erstellt, indem parallel zum Fräsprozess per visueller Inspektion nach markanten Defekten auf der Stahloberfläche gesucht wurde. Hat man einen vermeintlichen Defekt entdeckt, wird die Probe aus der Fräse genommen und per Mikroskop überprüft, ob es sich bei dem entdeckten Defekt um eine Pore oder einen nichtmetallischen Einschluss handelt. Die Entscheidung stützt sich darauf, dass Poren von innen hohl sind. Nichtmetallische Einschlüsse hingegen weisen eine innere Struktur auf. Anschließend wird die Probe wieder in die Fräse gespannt und weiter gefräst. Insgesamt umfasst der Datensatz für das zweite Szenario 464 Defekte. Die genaue Zusammensetzung der Datensätze ist der Tabelle 4 zu entnehmen. Wie bereits erwähnt, wird zur Klassi-

*Klassen*

**Tabelle 4.:** Zusammensetzung der Datensätze.

Szenario	Riss	Artefakt	globularer Defekt	Pore	Einschluss
Szenario 1	404	204	854		
Szenario 2				253	211

fizierung eine SVM mit Gauß-Kernel und gesetzter Schlupfvariable  $C$  verwendet. Dabei werden bei der Parametrisierung des Kernel-Parameters  $\gamma$  und der Schlupfvariable  $C$  die von Hsu, Chang und Lin [58] aufgestellten Richtlinien umgesetzt. Konkret bedeutet dies,

dass die Parameter mittels einer Gittersuche optimiert werden. Die verwendeten 18 Deskriptoren sind mit Verweis auf das jeweilige Unterkapitel aus Tabelle 5 zu entnehmen. Die symmetrischen Konfigurationshistogramme sind, wie im Einführungsbeispiel in Abschnitt 5.1 beschrieben, mittels Hauptkomponentenanalyse auf zwei Dimensionen reduziert. Bei 18 Deskriptoren ergeben sich  $2^{18}$  verschiedene

Deskriptoren

Tabelle 5.: Zur Klassifikation verwendete Deskriptoren.

Deskriptor	Beschreibung	Verweis
$h^{(22)}.PC1$	1. Hauptkomponente des Konfigurationshistogramms	2.2.2
$h^{(22)}.PC2$	2. Hauptkomponente des Konfigurationshistogramms	2.2.2
$dim_B F$	Empirische Approximation der fraktalen Dimension	2.2.6
$J_1$	1. Translation-, rotation-, und skaleninvariantes Moment	2.2.4
$J_2$	2. Translation-, rotation-, und skaleninvariantes Moment	2.2.4
$J_3$	3. Translation-, rotation-, und skaleninvariantes Moment	2.2.4
$DIM$	Maß über das Verhältnis der Hauptachsen	2.2.4
$ECC$	Exzentrizität	2.2.4
$CONV$	Verhältnis aus Partikelvolumen zum Volumen der konvexen Hülle	2.2.5
$F_1$	1. Isoperimetrische Ungleichung	2.2.3
$F_2$	2. Isoperimetrische Ungleichung	2.2.3
$F_3$	3. Isoperimetrische Ungleichung	2.2.3
$\chi_8$	Eulerzahl der 8er-Nachbarschaft	2.2.3
$\chi_{26}$	Eulerzahl der 26er-Nachbarschaft	2.2.3
$V_V$	Verhältnis aus Partikelvolumen zum Volumen der Boundingbox	2.2.3
$S_V$	Verhältnis aus Partikeloberfläche zum Volumen der Boundingbox	2.2.3
$M_V$	Verhältnis aus der mittleren Krümmung zum Volumen der Boundingbox	2.2.3
$K_V$	Verhältnis aus der totalen Krümmung zum Volumen der Boundingbox	2.2.3

Kombinationen, für die jeweils jede Kombination aus Schlupfvariable und Kernparameter mittels  $k$ -facher Kreuzvalidierung getestet wird. Die Wertebereiche für den Kernel-Parameter  $\gamma$  und die Schlupfvariable  $C$  werden dabei für die Gittersuche auf 0.25, 0.50, 1.00, 2.00 und 0.5, 1.0, 2.0, 4.0, 256.0, 512.0 gesetzt. Die Kreuzvalidierung wird mit 10facher Faltung durchgeführt. Für jeden Deskriptorsatz ergeben sich also 240 Trainings- und Validierungsdurchläufe. Nach jedem Kreuzvalidierungsschritt werden die in Abschnitt 5.2.1 beschriebenen Maße zur Beurteilung der Klassifizierung über alle Faltungen gemittelt und zur späteren Auswertung gespeichert. Ziel ist es dann, den Deskriptor- und Parametersatz zu bestimmen, der bei dem gestellten Klassifizierungsproblem die höchste Korrektklassifikationsrate erzielt. Durch die Kreuzvalidierung wird dabei sichergestellt, dass es nicht zur Überanpassung kommt. Implementiert wurde das Auswerteskript mittels der Programmiersprache R.

Parametrisierung

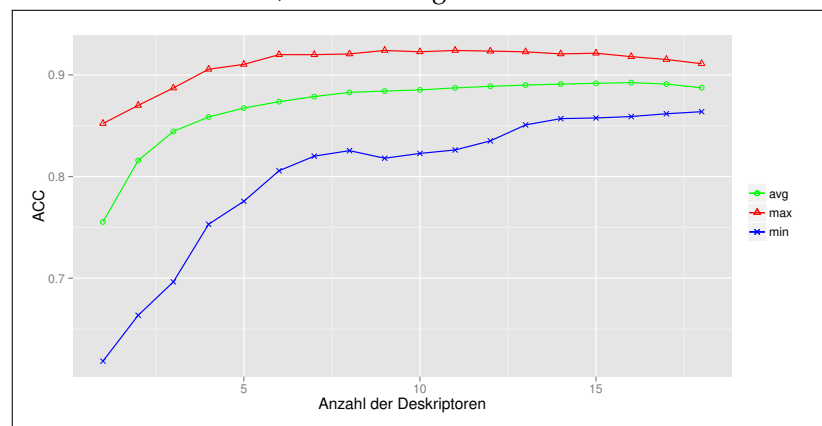
### 5.3.1 Risse, Artefakte und globulare Defekte

Zunächst betrachtet man, wie sich die Anzahl der Deskriptoren auf die Korrektklassifikationsrate auswirkt. In Abbildung 9 sind der Durchschnitt (grüne Linie), die maximale (rote Linie) und die minimale (blaue Linie) Korrektklassifikationsrate gegen die Anzahl der verwendeten Deskriptoren aufgetragen. Mit steigender Anzahl von Deskriptoren verbessert sich auch das Klassifizierungsergebnis bis schließlich bei 6 Deskriptoren eine Sättigung erfolgt. Hinzuziehen

Anzahl der Deskriptoren

von weiteren Deskriptoren führt nur noch zu einer geringfügigen Verbesserung. Ab ca. 12 Deskriptoren ist dann das Maximum erreicht. Jeder weitere Deskriptor führt jetzt zu einer Verschlechterung des Ergebnisses. Die Abbildung 9 macht auch deutlich, warum eine manuelle Bestimmung des optimalen Parametersatzes bei einer großen Ausgangsmenge von Deskriptoren schwierig ist. Während für einen kleinen Parametersatz das beste Ergebnis noch durch manuelles sukzessives Ausprobieren bestimmt werden kann, wird hier das beste Ergebnis mit 12 von 18 möglichen Deskriptoren erzielt. Selbst wenn diese Tatsache im Vorhinein bekannt wäre, müssten immer noch  $\binom{18}{12} = 18564$  Kombinationen getestet werden, um den besten Satz zu finden. In Tabelle 6 sind nun die ersten 20 Deskriptorsätze mit der

**Abbildung 9.:** Auswirkung der Anzahl der Deskriptoren auf die Korrektklassifikationsrate ACC beim Klassifizieren von Artefakten, Rissen und globularen Defekten.



Auswertung  
Korrektklassifikationsrate

höchsten Korrektklassifikationsrate ACC aufsteigend sortiert angegeben. Zusätzlich sind die Makrogenauigkeit  $P_M$ , die Makrosensitivität  $R_M$  und das Makro-F1 Maß  $F1_M$  aufgeführt. Die Korrektklassifikationsrate liegt für diese 20 Deskriptorkombinationen bei 0.92, also 92 Prozent der untersuchten Objekte werden korrekt in eine der Klassen Riss, Artefakt oder globularer Defekt eingeteilt. Die besten Ergebnisse wurden dabei mit einem Kernel-Parameter von  $\gamma = 2$  und einer Schlupfvariable von  $C = 256$  oder  $C = 512$  erzielt. Auffällig sind die starken Abweichungen von Makrogenauigkeit und Makrosensitivität zur Korrektklassifikationsrate. Um diese zu erklären, muss man sich die Sensitivität und Genauigkeit der einzelnen Klassen anschauen. Gemittelt über die 20 Deskriptorkombinationen mit der höchsten Korrektklassifikationsrate liegt die Sensitivität für die Klasse der globularen Defekte bei 0.992 und die Genauigkeit bei 0.990. Eine Sensitivität von 0.992 bedeutet, dass ca. 99 Prozent aller globularen Defekte im Datensatz vom Klassifizierer auch als solche erkannt wurden, während eine Genauigkeit von 0.99 angibt, dass die Entscheidung der Zugehörigkeit eines Objekt zur Klasse der globularen Defekte zu 99

Auswertung  
Sensitivität und  
Genauigkeit



**Tabelle 6.:** Die ersten 20 Deskriptorsätze mit der höchsten Korrekturklassifikationsrate ACC beim Klassifizieren von Rissen, Artefakten und globularen Defekten.

Deskriptoren	$\gamma$	C	ACC	$R_M$	$P_M$	$F1_M$
$h^{(22)}.PC2,dim_B F,CONV,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,K_V$	2	256	0.924	0.852	0.88	0.865
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_2,F_1,F_3,ECC,K_V$	2	512	0.924	0.856	0.875	0.865
$h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,M_V,\chi_6$	2	256	0.923	0.852	0.877	0.865
$dim_B F,CONV,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V,V_V,K_V$	2	256	0.923	0.849	0.877	0.863
$dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,\chi_6$	2	512	0.923	0.848	0.879	0.863
$h^{(22)}.PC1,dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V$	2	512	0.923	0.854	0.878	0.865
$dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,K_V,\chi_6$	2	512	0.923	0.851	0.876	0.863
$h^{(22)}.PC2,dim_B F,CONV,J_1,J_2,J_3,F_1,F_2,F_3,ECC,V_V,K_V$	2	256	0.923	0.851	0.876	0.863
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,K_V,\chi_6$	2	256	0.923	0.851	0.872	0.861
$h^{(22)}.PC2,dim_B F,CONV,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V,V_V,K_V$	2	256	0.923	0.849	0.877	0.862
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V,M_V$	2	256	0.923	0.85	0.874	0.861
$dim_B F,CONV,J_1,J_2,J_3,F_1,F_2,F_3,ECC,V_V,K_V,\chi_6$	2	256	0.923	0.85	0.876	0.863
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_2,F_3,ECC$	2	256	0.923	0.845	0.879	0.861
$h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V$	2	512	0.923	0.851	0.879	0.865
$dim_B F,CONV,J_1,J_2,J_3,F_1,F_2,F_3,ECC,S_V,V_V,K_V,\chi_6$	2	256	0.923	0.849	0.875	0.862
$h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,\chi_{26},\chi_6$	2	512	0.923	0.851	0.877	0.864
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_2,J_3,F_1,F_3,ECC$	2	512	0.923	0.848	0.88	0.864
$h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_3,F_1,F_2,F_3,ECC,V_V,M_V$	2	256	0.923	0.851	0.877	0.863
$h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,F_1,F_2,F_3,ECC,V_V,K_V$	2	512	0.923	0.855	0.872	0.863
$h^{(22)}.PC2,dim_B F,J_1,J_3,F_1,F_3,ECC,M_V,\chi_6$	2	512	0.923	0.854	0.869	0.862

Prozent richtig ist. Globulare Defekte werden also fast immer erkannt und es kommt selten vor, dass ein als globularer Defekt erkanntes Objekt nicht dieser Klasse angehört. Dies bestätigt die im Einführungsbeispiel gewonnene Erkenntnis, dass sich die Klasse der globularen Defekte mit den vorhandenen Deskriptoren gut linear von den anderen beiden Klassen separieren lässt. Auffallend an den Ergebnissen sind aber die Werte für die Sensitivität und Genauigkeit der anderen Klassen. Gemittelt über die besten 20 Kombinationen ergeben sich für die Klasse der Artefakte eine Sensitivität von 0.623 und eine Genauigkeit von 0.794, während sich für die Klasse der Risse die Werte 0.917 für Sensitivität und 0.828 für Genauigkeit ergeben. Tabelle 7 fasst die Ergebnisse zusammen. Während Risse noch recht zuverlässig im

**Tabelle 7.:** Sensitivität und Genauigkeit gemittelt über die 20 besten Deskriptorkombinationen von Rissen, Artefakten und globularen Defekten.

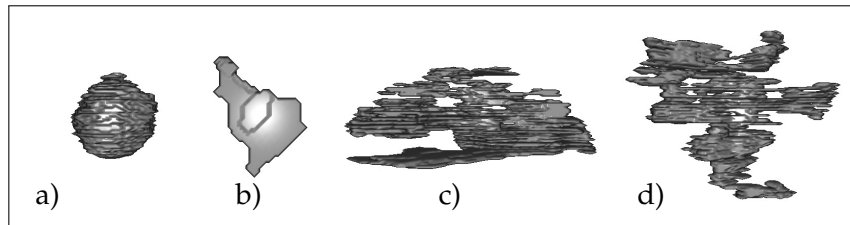
	Sensitivität	Genauigkeit
Globular	0.992	0.990
Artefakt	0.623	0.794
Riss	0.917	0.828

Datensatz gefunden werden (zu 91.7 Prozent) und die Zuordnung recht genau ist, werden nur 62.3 Prozent aller Artefakte detektiert. Die Ursache dafür ist bei dem verwendeten Trainingsdatensatz zu suchen. Die üblichen Artefakte sind Objekte mit einer geringen Ausdehnung entlang der z-Achse. Sie entstehen beispielsweise durch Verunreinigungen der Fräsoberfläche durch Öltropfen oder Metallspäne, die von der Kamera aufgenommen und im weiteren Prozess segmentiert wurden. Auch fälschlicherweise segmentierte Teile von Fräsrillen

*Interpretation*

gehören dieser Klasse an. Neben diesen Artefakten enthält der Trainingsdatensatz aber auch sogenannte Randartefakte. Dabei handelt es sich um Verunreinigungen, die während des Produktionsprozesses der Bramme entstehen und in die Metallmatrix gedrückt werden. Sie treten nur dicht an der Oberfläche auf. Schaut man sich einige dieser Randartefakte an, wird deutlich, dass sie sich von ihrer Struktur kaum von Rissen unterscheiden. In Abbildung 10 sind, zusammen mit Beispielen für Objekte aus anderen Klassen, ein Riss (Objekt d) und ein Randartefakt (Objekt c) gegenübergestellt. Der Klassifizierer ordnet diese Randartefakte also sehr wahrscheinlich den Rissen zu, was dazu führt, dass die Sensitivität für Artefakte stark abnimmt. Gleichzeitig steigt aber die Anzahl der falsch klassifizierten Risse. Die Genauigkeit dieser sinkt also ebenfalls ab.

**Abbildung 10.:** Beispiele für Objekte der Trainingsmenge: a) globularer Defekt, b) Aufsicht auf Artefakt, c) Randartefakt, d) Riss.



Häufigkeit der  
Deskriptoren

Abschließend soll untersucht werden, wie oft ein gewisser Deskriptor unter den ersten 1000 Kombinationen mit höchster Korrekturklassifikationsrate verwendet wird. Daraus lässt sich ablesen, wie destinktiv sich ein Deskriptor im gestellten Klassifizierungsproblem verhält. Tabelle 8 zeigt die relativen Häufigkeiten für alle 18 Deskriptoren. Sowohl die Boxdimension  $\dim_B F$  als auch die Maße für die Sphärität  $F_1$  und  $F_2$  werden für fast jede Kombination von Deskriptoren verwendet. Dies ist nicht sonderlich überraschend, da diese Deskriptoren für die verschiedenen auftretenden Strukturen, insbesondere für die sehr zerklüfteten, kompakten und fast zweidimensionale, distinktive Werte zurückliefern. Ebenfalls häufig verwendet wird die erste Hauptkomponente der reduzierten, symmetrischen Konfigurationshistogramme  $h^{(22)}.PC$  und die Dimensionalität  $DIM$ . Das Konfigurationshistogramm kann, wie in Abschnitt 5.1 besprochen, als sehr effektives Kompaktmaß interpretiert werden, während die Dimensionalität sich insbesondere dafür eignet, die fast zweidimensionalen Artefakte von den restlichen Objekten zu unterscheiden. Die Eulerzahlen  $\chi_6$  und  $\chi_{26}$  und die Konvexität hingegen scheinen für das besprochene Klassifizierungsproblem keine große Rolle zu spielen.

**Tabelle 8.:** Relative Häufigkeit der Deskriptoren unter den ersten 1000 Kombinationen mit höchster Korrektclassifikationsrate bei der Klassifizierung von globularen Defekten, Rissen und Artefakten.

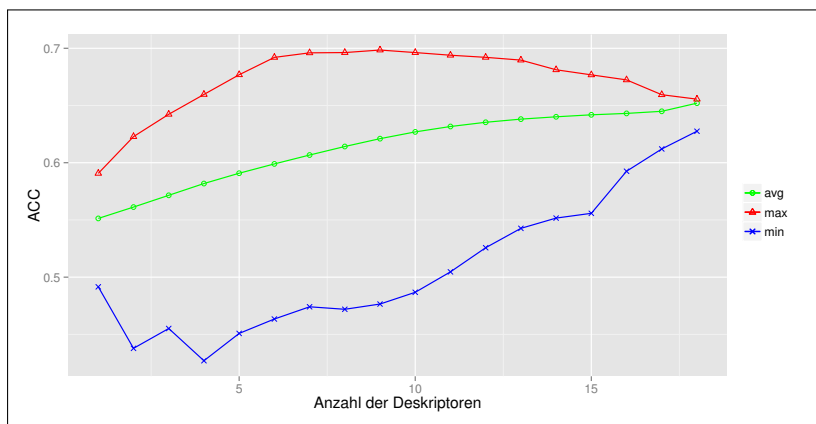
Deskriptor	Häufigkeit
$dim_B F$	1
$F_1$	0.992
$F_3$	0.874
$DIM$	0.759
$h^{(22)}.PC1$	0.683
$J_1$	0.674
$ECC$	0.475
$M_V$	0.421
$K_V$	0.348
$h^{(22)}.PC2$	0.346
$S_V$	0.306
$V_V$	0.288
$J_3$	0.231
$J_2$	0.189
$\chi_6$	0.124
$CONV$	0.123
$F_2$	0.123
$\chi_{26}$	0.008

### 5.3.2 Poren und nichtmetallische Einschlüsse

Die in Abschnitt 5.3.1 klassifizierten globularen Defekte sollen nun in einem weiteren Schritt in Poren und nichtmetallische Einschlüsse unterteilt werden. Zunächst betrachtet man dafür, wie im vorherigen Abschnitt, die Auswirkung der Anzahl der verwendeten Deskriptoren auf die Korrektclassifikationsrate. Laut Abbildung 11 wird das

Anzahl der  
Deskriptoren

**Abbildung 11.:** Auswirkung der Anzahl der Deskriptoren auf die Korrektclassifikationsrate ACC beim Klassifizieren von Poren und nichtmetallischen Einschlüssen.



beste Ergebnis mit einer Kombination von 9 Deskriptoren erzielt, wo-

**Tabelle 9.:** Die ersten 20 Deskriptorsätze mit der höchsten Korrektklassifikationsrate ACC beim Klassifizieren von Poren und nichtmetallischen Einschlüssen.

Deskriptoren	$\gamma$	C	ACC	$R_M$	$P_M$	$F1_M$
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V,V_V,K_V$	2	512	0.698	0.7	0.699	0.7
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,CONV,J_1,J_3,F_1,F_2,ECC,V_V$	2	512	0.696	0.696	0.695	0.696
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V,V_V,M_V,K_V$	2	512	0.696	0.695	0.695	0.695
$h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,M_V,K_V$	2	512	0.696	0.699	0.695	0.696
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,CONV,J_1,J_3,F_2,F_3,V_V,K_V$	2	256	0.696	0.696	0.694	0.695
$h^{(22)}.PC2,J_2,J_3,F_3,S_V,V_V,M_V$	2	512	0.696	0.694	0.692	0.693
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V,V_V$	2	512	0.694	0.694	0.692	0.693
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,M_V,\chi_{26}$	2	512	0.694	0.698	0.698	0.698
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_1,J_3,F_1,F_3,V_V,M_V,K_V,\chi_{26}$	2	512	0.694	0.692	0.694	0.693
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,K_V,\chi_{26}$	2	512	0.694	0.697	0.696	0.696
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_2,J_3,F_2,F_3,ECC,S_V,M_V,K_V,\chi_{26}$	2	512	0.694	0.692	0.692	0.692
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V$	2	512	0.692	0.696	0.693	0.694
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,\chi_{26}$	2	512	0.692	0.695	0.693	0.694
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V,V_V,\chi_{26}$	2	256	0.692	0.694	0.69	0.692
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V,V_V,M_V,\chi_{26}$	2	512	0.692	0.691	0.691	0.691
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,CONV,J_2,J_3,F_1,F_2,F_3,S_V,V_V,M_V,K_V$	1	512	0.692	0.692	0.688	0.69
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_3,F_1,F_3,ECC,V_V,\chi_{26},\chi_6$	2	512	0.692	0.695	0.693	0.694
$h^{(22)}.PC1,CONV,J_2,J_3,S_V,M_V$	2	512	0.692	0.695	0.693	0.694
$h^{(22)}.PC2,dim_B,F,DIM,J_3,F_1,F_3,ECC,S_V,V_V,M_V$	2	512	0.692	0.688	0.686	0.687
$h^{(22)}.PC1,h^{(22)}.PC2,J_2,J_3,F_3,S_V,\chi_{26},\chi_6$	2	512	0.692	0.691	0.694	0.692

bei schon nach 6 Deskriptoren eine Sättigung erreicht wird. Im weiteren Verlauf ändert sich die Korrektklassifizierungsrate nur noch geringfügig und nimmt dann ca. ab 12 Deskriptoren stark ab. Tabelle 9 zeigt die 20 Kombinationen mit höchster Korrektklassifikationsrate ACC. Das Ergebnis fällt nicht so eindeutig aus wie bei der Klassifizierung von Rissen, Artefakten und globularen Defekten. Die Korrektklassifikationsrate für die beste Kombination beträgt ca. 70 Prozent. Um das Ergebnis genauer aufzuschlüsseln, lassen sich wieder die Sensitivität und die Genauigkeit der einzelnen Klassen betrachten. In Tabelle 10 sind beide Werte, gemittelt über die 20 besten Kombinationen, dargestellt. Es scheint, als würde der Klassifizierer Poren gegenüber nichtmetallischen Einschlüssen bevorzugen. Stellt sich die Frage, wodurch sich Poren und nichtmetallische Einschlüsse genau unterscheiden. Poren entstehen durch eingeschlossenes Gas. Sobald der Fräskopf die Pore anschneidet entweicht das Gas und eine Hohlstelle verbleibt in der Stahlmatrix. In den Schichtbildern erscheinen Poren als runde schwarze Kreise, da bei der Bildaufnahme kein Licht mehr aus ihrem Inneren zurück ins Objektiv reflektiert wird. Einschlüsse sind zwar ebenfalls kugelige Objekte, sie erscheinen also auch als Kreise auf den Schichtbildern, allerdings sind sie nicht hohl, sondern beste-

#### Interpretation

**Tabelle 10.:** Sensitivität und Genauigkeit von Poren und nichtmetallischen Einschlüssen gemittelt über die 20 besten Deskriptorkombinationen.

	Sensitivität	Genauigkeit
Pore	0.725	0.721
Einschluss	0.664	0.666

hen im Gegensatz zu Poren aus nichtmetallischem Material. Dieses Material weist, je nach Einschlusstyp, unterschiedliche Eigenschaften auf. Oxideinschlüsse sind zum Beispiel sehr spröde und hart (siehe 4.1.2). Wird ein solcher Einschluss angefräst, entsteht eine sehr raue Oberfläche, die bei der Bildaufnahme zu einem Grauwertprofil mit hoher Dynamik führt. Bei der Segmentierung kann es dann vorkommen, dass helle Bereiche des Einschlusses unterhalb des Schwellwertes liegen und nicht mitsegmentiert werden. Dadurch entsteht die paradoxe Situation, dass hohle Poren gegenüber den Deskriptoren als sehr kompakt erscheinen, während eigentlich mit Material gefüllte Einschlüsse porös wirken. Dies schlägt sich auch bei der Häufigkeit der verwendeten Deskriptoren der ersten 1000 Kombinationen mit höchster Korrektklassifikationsrate nieder. So liegen Deskriptoren zur Beschreibung der Kompaktheit, wie beispielsweise die Volumendichte  $V_V$  oder die ersten beiden Hauptkomponenten der symmetrischen Konfigurationshistogramme  $h^{(22)}.PC1$  und  $h^{(22)}.PC2$  auf den ersten Plätzen (siehe Tabelle 11). Insgesamt sind die Unterschiede zwischen

**Tabelle 11.:** Relative Häufigkeit der Deskriptoren unter den ersten 1000 Kombinationen mit höchster Korrektklassifikationsrate bei der Klassifizierung von Poren und nichtmetallischen Einschlüssen.

Deskriptor	Häufigkeit
$J_3$	0.977
$h^{(22)}.PC2$	0.976
$V_V$	0.918
$h^{(22)}.PC1$	0.745
$F_3$	0.69
$M_V$	0.608
$S_V$	0.606
$F_2$	0.57
$F_1$	0.564
CONV	0.437
$K_V$	0.427
ECC	0.417
$J_2$	0.4
$J_1$	0.323
$\chi_{26}$	0.299
DIM	0.07
$dim_B F$	0.067
$\chi_6$	0.023

Poren und nichtmetallischen Einschlüssen aber nicht so groß, dass mit den verwendeten Deskriptoren eine sichere Entscheidung getroffen werden kann. Das Ergebnis kann aber drastisch verbessert werden, wenn man zusätzlich zu morphologischen Deskriptoren noch auf Textur basierende Deskriptoren verwendet. Neben einfachen Deskriptoren, wie dem mittleren Grauwert oder der Varianz der Grauwerte, ist besonders der sogenannte Schweifdeskriptor hervorzuhe-

*Schweifdeskriptor*

ben. Das harte Einschlussmaterial führt nämlich auch dazu, dass die Ränder der Einschlüsse keine harte Kante bilden, sondern sehr stark ausfransen. Der Fräskopf bricht Teile des Einschlusses heraus und verschmiert diese über die Oberfläche. Tabelle 11 bestätigt dies, da auf den vorderen Plätzen viele Deskriptoren sind, die bei verrauschten Strukturen ausschlagen. Dazu zählen zum Beispiel die Oberflächendichte, die mittlere Krümmung und das dritte TSR-Moment. Das parallel zur Fräsrichtung verteilte Einschlussmaterial führt in den Bildern dazu, dass Grauwerte in Richtung der Fräskopfbewegung dunkler sind als in entgegengesetzter Richtung. Ein Einschluss kann also, im Gegensatz zu einer Pore, einen „Schweif“ ausbilden. Der Schweifdeskriptor berechnet sich nun aus dem Helligkeitsunterschied vor und hinter dem vermeintlichen Einschluss (bezogen auf die Fräsrichtung) und gibt bei Werten nahe 0 an, dass der Einschluss einen Schweif aus Einschlussmaterial nach sich zieht. Mit diesen zusätzlichen Deskriptoren kann die Korrektklassifikationsrate auf über 90 Prozent gebracht werden [20].

#### 5.4 ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Kapitel wurde gezeigt, wie auf Basis der in Kapitel 2 eingeführten morphologischen Deskriptoren Defekte in Stahlproben klassifiziert werden. Zunächst wurden die Defekte mittels einer angelerneten SVM grob in drei Klassen unterteilt, nämlich Risse, Artefakte und globulare Defekte. Durch automatische Auswahl eines optimalen Deskriptorsatzes wurde eine maximale Korrektklassifikationsrate von ca. 92 Prozent erreicht. Anschließend wurde mittels von Experten zusammengestellter Trainingsdaten die Klassifikation von globularen Defekten weiter verfeinert und zwar in die Klassen Poren und nichtmetallische Einschlüsse. Auch in diesem Anwendungsfall konnte eine Klassifizierung mit morphologischen Deskriptoren erfolgreich durchgeführt werden. Die beste Deskriptorkombination erzielte eine Korrektklassifikationsrate von ca. 70 Prozent.

In den folgenden Kapiteln wird gezeigt, wie anhand der klassifizierten Datensätze statistische Untersuchungen durchgeführt werden können. Dabei wird es insbesondere um die Größenverteilung und räumliche Verteilung von Defekten gehen. Die klassifizierten Daten werden vor der Auswertung gefiltert, so dass singuläre Ereignisse wie Risse und Artefakte nicht in die Auswertungen einfließen.

## STATISTISCHE UNTERSUCHUNG VON DEFEKTEN IN STAHL

---

Nachdem im vorherigen Kapitel gezeigt werden konnte, dass mittels der in Abschnitt 2.2 definierten Gestaltdeskriptoren eine präzise Klassifikation von Defekten in Stahl möglich ist, sollen in diesem Kapitel die klassifizierten Datensätze statistisch untersucht werden. Im Vordergrund steht dabei die Frage, ob sich für die Größenverteilung und die räumliche Verteilung ein stochastisches Modell entwickeln lässt, mit dem verschiedene Stahlsorten verglichen und Vorhersagen über den Einschlussgehalt getroffen werden können. Die Untersuchungen werden dabei exemplarisch anhand von realen Daten durchgeführt, die mittels des in Abschnitt 4.2 beschriebenen Systems gewonnen wurden. Die Vorgehensweise sieht wie folgt aus. Zunächst wird das in der Literatur propagierte Modell zur Beschreibung der Größenverteilung einer rigorosen statistischen Untersuchung unterzogen. In gleicher Weise wird dann nach einem Punktprozess gesucht, der die räumliche Verteilung von Defekten in Stahl beschreibt. In der Fachliteratur lassen sich zu diesem Thema nur wenig Informationen finden. Deshalb dient das einfachste stochastische Modell zur Beschreibung von Punktmustern, der PPP, als Ausgangspunkt. Beide Modelle werden dann, nach erfolgreicher Validierung, in einem Algorithmus zusammengefasst, mit dem synthetische Defektverteilungen generiert werden. Dies erlaubt schließlich die Evaluation unterschiedlicher Frässzenarien des in Abschnitt 4.2 vorgestellten Detektionsverfahrens für Makroeinschlüsse.

### 6.1 GRÖSSENVERTEILUNG

Wie bereits in Abschnitt 4.1.3 beschrieben, wird übereinstimmend in der Literatur berichtet, dass die Durchmesser von Einschlüssen logarithmisch normalverteilt [118, S. 314 ff.] [9, 41] sind. Allerdings werden weder konkrete Verteilungsparameter angegeben, noch eine Erklärung geliefert, warum sich gerade dieses Modell zur Beschreibung der Größenverteilung eignet. Dies soll im Folgenden nachgeholt werden. Anschließend wird für real gemessene Daten die Plausibilität der Annahme mittels der in Abschnitt 3.2.1 eingeführten explorativen Methoden überprüft und aufbauend auf diesen Erkenntnissen die Modellfunktion parametrisiert. Dazu werden die in Abschnitt 3.2.2 beschriebenen bayesschen Methoden verwendet. Mittels

des posteriori-prädiktiven Tests erfolgt dann die Validierung des Modells. Abgeschlossen wird der Abschnitt mit einem Anwendungsfall, der zeigt, wie das gewonnene Modell verwendet werden kann, um konkrete Aussagen aus den Messdaten abzuleiten.

### 6.1.1 Modellauswahl

Logarithmische  
Normalverteilung

Eine stetige Zufallsvariable  $X$  unterliegt der logarithmischen Normalverteilung, wenn sie die Dichtefunktion

$$f(x) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (128)$$

mit  $x > 0$  besitzt, wobei  $\mu$  und  $\sigma$  die beiden Parameter der Verteilung sind. Anders ausgedrückt ist eine Zufallsvariable  $X$  logarithmisch normalverteilt, wenn  $Y = \ln(X)$  normalverteilt ist [30, S. 2], wobei die Dichtefunktion der Normalverteilung durch

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (129)$$

gegeben ist.

Wachstumsprozess

Stellt sich die Frage, warum die Größe von nichtmetallischen Einschlüssen ausgerechnet durch diese Verteilung beschrieben werden kann. Eine mögliche Erklärung ergibt sich, wenn man Koaleszenz als Mechanismus für das Wachstum der Einschlüsse zu Grunde legt. Koaleszenz beschreibt das Verschmelzen flüssiger Teilchen bei Zusammenstoß. Das auf diese Art neu gebildete Teilchen ist bestrebt seine Oberfläche zu minimieren, und nimmt die Form einer Kugel an, da diese von allen geometrischen Körpern die mit der geringsten Oberfläche ist. Gegeben sei nun ein Teilchen  $x$ , dessen Volumen nach  $i = 0, \dots, n$  Zusammenstößen gemessen wird. Der Anstieg im Volumen lässt sich dabei als

$$x_i = x_{i-1}(1 + \epsilon_i) \quad (130)$$

schreiben, wobei  $\epsilon_i$  unabhängige Zufallsvariablen sind, die der gleichen unbekanntem Verteilung genügen. Mit anderen Worten nimmt das Volumen des neuen Teilchens um einen zufälligen Bruchteil des Volumens des alten Teilchens zu. Nach  $n$  Zusammenstößen beträgt das Volumen von Teilchen  $x$  dann

$$x_n = \left( \prod_{i=1}^n (1 + \epsilon_i) \right) x_0 \quad (131)$$

Wendet man nun auf beiden Seiten den Logarithmus an, ergibt sich für kleine zufällige Zuwachsraten  $\epsilon_i$

$$\ln(x_n) = \sum_{i=1}^n \ln(1 + \epsilon_i) + \ln(x_0) \approx \sum_{i=1}^n \epsilon_i + \ln(x_0) \quad (132)$$



Man kann nach Anwendung des zentralen Grenzwertsatzes der Wahrscheinlichkeitsrechnung [102, S. 436] dann folgern, dass  $\ln(x_n)$  asymptotisch normalverteilt ist. Wenn aber  $\ln(x_n)$  normalverteilt ist, dann genügt  $x_n$  der logarithmischen Normalverteilung. Die obige Argumentation geht auf Crow und Shimizu [30, S. 4 ff.] zurück und wurde beispielsweise dazu verwendet, das logarithmische Wachstum von Organismen [96] oder feinen Metallpartikeln in Gasen [46] zu begründen. Ob sich der beschriebene Prozess auf die Entstehung von nichtmetallischen Einschlüssen übertragen lässt, kann im Rahmen dieser Arbeit nicht ergründet werden. Die Detektion von vornehmlich kugelförmigen Einschlüssen und Defekten (siehe Kapitel 2) ist zumindest ein Hinweis, dass Koaleszenz bei der Bildung bestimmter Einschlusstypen eine Rolle spielt. Auch in der Literatur werden ähnliche Erfahrungen beschrieben [31, S. 110]. Wichtigste Erkenntnis aus der obigen Ausführung ist, dass bei der Bildung logarithmischer Verteilungen ein multiplikativer Mechanismus wirkt. Die Entstehung von Normalverteilungen geht hingegen auf die Summierung vieler kleiner zufälliger Schwankungen zurück.

Grenzwertsatz

Wegen dieser Ausführungen aber insbesondere auch wegen des in Abschnitt 4.1.3 herausgearbeiteten Expertenwissens fällt die Entscheidung für ein Modell zur Beschreibung der Größenverteilung von nichtmetallischen Eigenschaften auf die logarithmische Normalverteilung mit der Dichte aus Formel 128. Im nächsten Abschnitt wird untersucht, inwieweit das theoretische Modell zu den empirisch erhobenen Daten passt.

### 6.1.2 Explorative Datenanalyse

In diesem Abschnitt wird untersucht, inwieweit das im vorherigen Abschnitt festgelegte Modell zu real gemessenen Daten passt. Als Messverfahren wird die in Abschnitt 4.1.4 beschriebene Methode verwendet. Die Datensätze werden dabei entsprechend dem in Kapitel 5 eingeführten Verfahrens klassifiziert. Dabei wird allerdings nur die Vorklassifikation angewandt, also eine Entscheidung zwischen globularen Defekten, Artefakten und Rissen vorgenommen. Die Klassifikation zwischen Poren und nichtmetallischen Einschlüssen nur auf Basis morphologischer Deskriptoren ist bei der verwendeten Optik noch zu ungenau. Die Statistiken werden über alle globularen Defekte, im Folgenden nur noch als Defekte bezeichnet, berechnet. Die Annahme dabei ist, dass die Bildung von Einschlüssen und Poren unabhängig voneinander passiert und dass ähnliche Wachstumsprozesse zu Grunde liegen. Ein Indiz dafür ist, dass beide Defekttypen eine kugelige Form ausbilden. Das erhobene Merkmal ist der Durchmesser der Defekte. Diese Vorgehensweise ist Standard bei der Analyse von

Globulare Defekte

Durchmesser

nichtmetallischen Einschlüssen [34, 35], auch wenn die Erhebung normalerweise nur in zweidimensionalen Schnitten erfolgt. Die dreidimensionale Durchmesserverteilung wird dann auf das Volumen mittels geeigneter Verfahren hochgerechnet. Da eine dreidimensionale Messtechnik eingesetzt wird, ist dieser Schritt nicht von Nöten. Der Durchmesser ergibt sich für kugelförmige Teilchen aus der mittleren Breite und wird mittels des in Abschnitt 2.2.3 beschriebenen Verfahrens berechnet. Die Verwendung der mittleren Breite hat den Vorteil, dass Abweichungen von der Kugelform beispielsweise durch Versatz zweier aufeinanderfolgender Schichten in der  $x, y$ -Ebene durch die Mittelung keinen Einfluss auf den Durchmesser haben. In Anlehnung an Kapitel 3 beschreibt im Folgenden die Zufallsvariable  $X$  den Durchmesser. Für eine Stichprobe  $X_1, \dots, X_n$  werden mittels des beschriebenen Messsystems die Stichprobenwerte  $x_1, \dots, x_n$  erhoben, wobei  $n$  die Anzahl der detektierten Defekte ist.

*Erste Probe*

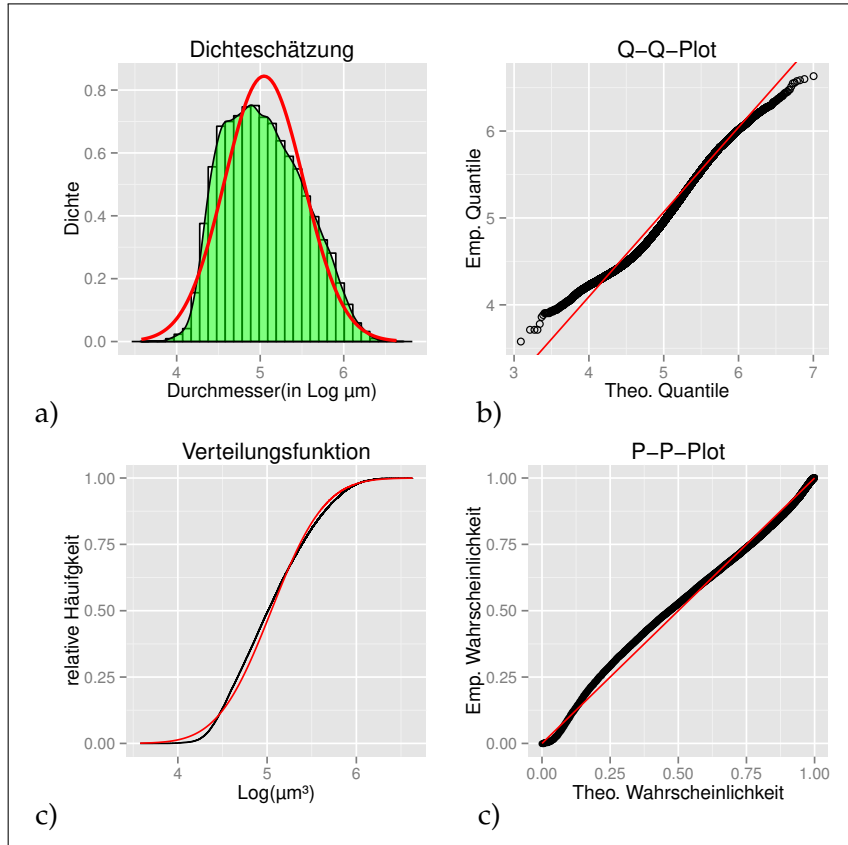
Die erste untersuchte Probe hat eine Abmessung von  $286 \text{ mm} \times 140 \text{ mm} \times 37 \text{ mm}$  und wurde mit einer Auflösung von  $20 \mu\text{m} \times 20 \mu\text{m}$  pro Pixel in  $x, y$ -Richtung fotografiert. Die Schichtabnahme der Fräse betrug  $10 \mu\text{m}$ . Nach der Klassifikation sind 28839 Objekte eindeutig als globulare Defekte erkannt. Der Durchmesser der Defekte wurde wie oben beschrieben aus der mittleren Breite berechnet, allerdings zusätzlich noch logarithmisch transformiert. Demnach wird erwartet, dass die Stichprobenwerte  $x_1, \dots, x_n$  annähernd normalverteilt sind. In Abbildung 12 wurden die Schätzer der Dichtefunktion und die verschiedenen Methoden zur explorativen Analyse des Modells mit den empirisch erhobenen Daten berechnet. In der Abbildung 12 a) ist das Histogramm mit einer Intervallbreite von 0.10 über alle Defekte eingezeichnet. Zusätzlich wurde mit einem Gauß-Kernel eine Kerndichteschätzung mit Bandbreite  $h = 0.054$  vorgenommen. Das Ergebnis ist als halb-transparente grüne Fläche über das Histogramm gelegt. Abschließend wurden die Modellparameter der Normalverteilung mittels der Maximum-Likelihood Methode aus den empirisch erhobenen Daten geschätzt und das parametrisierte Modell zusätzlich zum Histogramm und zum Kerndichteschätzer als rote Kurve eingezeichnet. Die empirischen Modellparameter sind  $\hat{\mu} = 5.047$  und  $\hat{\sigma} = 0.473$ . Das Histogramm beziehungsweise der Kerndichteschätzer nehmen die Gestalt der erwarteten Glockenfunktion der Normalverteilung an. Im direkten Vergleich zum Modell kann man erkennen, dass für Werte größer 5, das entspricht in etwa einem Durchmesser von  $150 \mu\text{m}$ , das Modell und die Dichteschätzer dicht beieinander liegen. Allerdings scheint die geschätzte Dichte nicht ganz symmetrisch zu sein, sondern weist eine leichte Rechtsschiefe auf. Dieser Zusammenhang wird noch deutlicher, wenn man sich den QQ-Plot anschaut. Wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben, trägt man bei diesem die theoretischen Quantile des Modells gegen die empirischen Quantile auf. Stimmen Modell und Daten überein, ergibt sich eine Gerade. Als visuelle Hilfe

*Kerndichteschätzung*

*QQ-Plot*

wurde durch das 5%- und 95%-Quantil eine rote Vergleichsgerade in den QQ-Plot eingezeichnet (siehe Abbildung 12 b)). Man erkennt

**Abbildung 12.:** a) Schätzen der Dichtefunktion, b) QQ-Plot, c) Verteilungsfunktion, d) PP-Plot.



deutlich, dass die Gerade für kleine Werte überschritten wird. Das heißt die kleinsten Werte in den Daten sind größer als man bei der angenommenen Normalverteilung erwarten würde. Auf der anderen Seite wird die Gerade für große Werte unterschritten. Die größten Durchmesser sind also nicht so groß (nicht so extrem), wie man bei Normalverteilung erwarten würde. Das Verhalten auf der linken Seite lässt sich einfach erklären. Die maximale Größe der Defekte ist auf Grund der physikalischen Eigenschaften des Bildaufnahmesensors nach unten hin begrenzt. Defekte mit weniger als  $100\ \mu\text{m}$  Durchmesser sind auf Grund von Sensorrauschen bei einer Auflösung von  $20\ \mu\text{m} \times 20\ \mu\text{m}$  pro Pixel nicht mehr sicher zu erkennen. Deshalb ist die Verteilung zur linken Seite hin beschnitten, was zur beobachteten Rechtsschiefe führt. Über den Grund für die Abweichungen auf der rechten Seite kann hingegen nur spekuliert werden. Eventuell war das abgefräste Probenvolumen zu gering, um die Verteilung korrekt zu approximieren. Die Abweichungen liegen aber noch in einem Rahmen, dass sie als statistisches Rauschen interpretiert werden können. Insgesamt zeigt der QQ-Plot für den mittleren Bereich der Verteilung

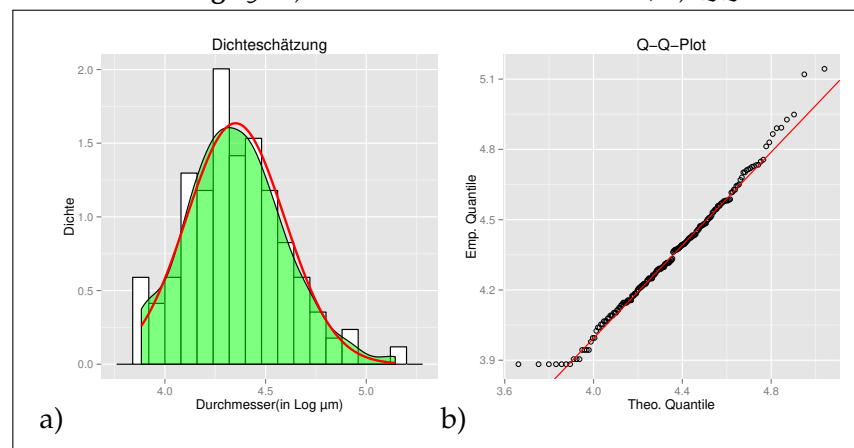
Verteilungsfunktion

eine gute Übereinstimmung zwischen Modell und Daten. Neben der Dichte und dem QQ-Plot sind in Abbildung 12 c) noch die empirische und die theoretische Verteilungsfunktion in einem Graph eingezeichnet, wobei die theoretische Verteilungsfunktion wieder rot dargestellt ist. Sie wurde mit den Werten der Punktschätzung, also  $\hat{\mu} = 5.047$  und  $\hat{\sigma} = 0.473$ , parametrisiert. Abschließend sind in Abbildung 12 d) die empirischen und theoretischen Wahrscheinlichkeiten in Form eines PP-Plots gegeneinander aufgetragen. Da es sich bei den zuletzt genannten Funktionen aber um Summenfunktionen handelt, ist die Interpretation eher schwierig. In den nachfolgenden Analysen werden deshalb nur die Dichteschätzer und der QQ-Plot verwendet.

Zweite Probe

Die zweite untersuchte Probe wurde aus einem Rundstab geschnitten. Der Durchmesser der Stahlprobe beträgt ca. 30 mm, wobei die einzelnen Schnittbilder mit einer Auflösung von  $20 \mu\text{m} \times 20 \mu\text{m}$  aufgenommen wurden. Insgesamt wurden 5 mm bei einer Spanabnahme von  $10 \mu\text{m}$  abgefräst. Nach erfolgreicher Segmentierung und Klassifikation bleiben 212 Objekte übrig, die als globulare Defekte identifiziert wurden. In Abbildung 13 a) sind wieder das Histogramm, der Kern-

Abbildung 13.: a) Schätzen der Dichtefunktion, b) QQ-Plot



Kerndichteschätzung

dichteschätzer und das parametrisierte Modell zu sehen. Die Intervallbreite des Histogramms beträgt dabei 0.08. Die Kerndichteschätzung wurde mittels Gauß-Kernel mit einer Bandbreite von  $h = 0.07$  vorgenommen. Die Schätzung der Modellparameter ergab schließlich  $\hat{\mu} = 4.35$  und  $\hat{\sigma} = 0.24$ . An dieser Probe erkennt man ebenfalls, dass die Verteilung nach links hin auf Grund der begrenzten Auflösung des Kamerasystems beschnitten ist. Defekte mit einem Wert unter 4, was einem Durchmesser von  $54.60 \mu\text{m}$  entspricht, werden im direkten Vergleich mit der Normalverteilung viel zu selten detektiert. Die Abweichung im QQ-Plot von der Geraden in Abbildung 13 b) bestätigen diese Beobachtung. Ein Unterschied ist aber an den rechten Ausläufern der Verteilung auszumachen. Im Gegensatz zur ersten Probe scheinen große Defekte viel häufiger beobachtet zu werden. Dies

QQ-Plot

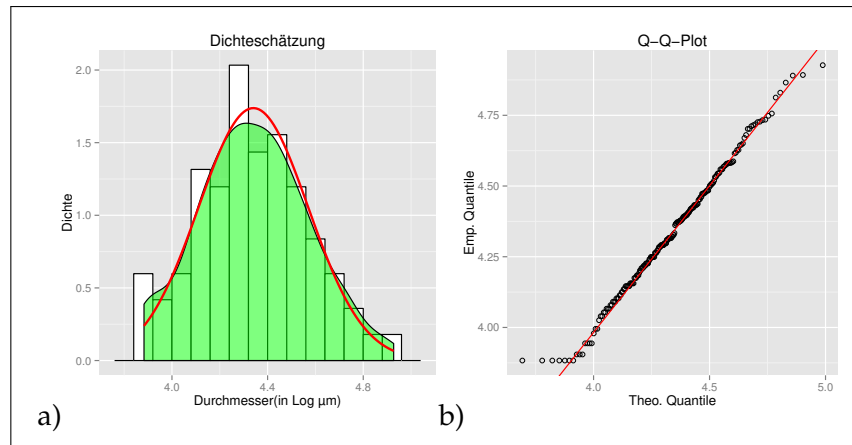
erkennt man sowohl an dem Ausschlag des letzten rechten Balkens im Histogramm als auch an dem Überschreiten der Normallinie für große Durchmesser im QQ-Plot. Die Häufigkeit von großen Defekten liegt also höher als man bei der angenommenen Normalverteilung erwarten würde. In der Literatur sind ähnliche Effekte bei der Verteilung von nichtmetallischen Einschlüssen beschrieben [9]. Es wird angenommen, dass für die Ausläufer der Verteilung die logarithmische Normalverteilung (oder die Normalverteilung bei logtransformierten Werten) nicht das geeignete Modell ist, da große Einschlüsse nicht so selten sind, wie durch die Verteilung vorhergesagt wird. Alternativ versucht man die Ausläufer mit einer anderen Verteilung zu modellieren. Ein sehr häufig eingesetztes Modell dafür ist die Pareto-Verteilung [6]. Diese gehört zu den endlastigen Verteilungen, besitzt also im Vergleich zur Normalverteilung mehr Masse in den Ausläufern und eignet sich besser zur Modellierung von seltenen Ereignissen, wie beispielsweise dem Auftreten von sehr großen nichtmetallischen Einschlüssen. Für Einschlüsse kleiner und mittlerer Größe ist aber nach wie vor die logarithmische Normalverteilung das geeignetere Modell. Man kann deshalb beide Verteilungen kombinieren. Dazu wird aus den Daten ein Schwellwert geschätzt, bei dem von der logarithmischen Normalverteilung auf die Pareto-Verteilung gewechselt wird [27]. Schaut man sich aber im konkreten Beispiel die dreidimensionalen Visualisierungen der Defekte der Rundprobe mittels der in Abschnitt 7.2 vorgeschlagenen Software genauer an, wird man feststellen, dass der gerade beschriebene Effekt nicht für die Abweichung verantwortlich ist. Stattdessen hat sich im Mittelpunkt ein für Rundproben charakteristischer Lunker gebildet. Lunker sind Hohlräume, die auf Grund der Volumenabnahme beim Erstarren der Stahlschmelze entstehen. Sie können um ein Vielfaches größer sein als nichtmetallische Einschlüsse und Poren. Wie es scheint, besteht der Lunker in der Probe aus mehreren, nicht zusammenhängenden Kammern, die fälscherlicherweise als globulare Defekte klassifiziert wurden, da sie ebenfalls eine kugelige Form aufweisen. Dies führt zu der beobachteten Abweichung zwischen Daten und dem Modell. Filtert man die als Defekt erkannten Teile des Lunkers heraus, die oberhalb des 95 %-Quantils liegen, ergibt sich für die Dichteschätzung und den QQ-Plot das in Abbildung 14 präsentierte Ergebnis. Anhand des QQ-Plots in Abbildung 14 b) sieht man, dass für den gefilterten Datensatz das Modell auch für die Ausläufer der Verteilung eine gute Übereinstimmung liefert. Insgesamt muss man aber sowohl für den ungefilterten als auch für den gefilterten Datensatz der zweiten Probe konstatieren, dass die Anzahl der detektierten Defekte zu klein ist, um das Modell adäquat mittels der Maximum-Likelihood Methode zu parametrisieren. Die Auswertung ist auf Grund der wenigen Daten nicht robust gegen Rauschen. Dies erkennt man an den starken Ausschlägen einzelner Balken im Histogramm. Im nächsten Abschnitt wird

*Modellierung der Ausläufer*

*Lunker*

*Gefilterter QQ-Plot*

**Abbildung 14.:** Explorative Analyse nach Bereinigung der Ausreißer. a) Schätzen der Dichtefunktion, b) QQ-Plot.



dieser Punkt behandelt und ein Schätzverfahren auf Basis der bayesschen Statistik verwendet, um das Modell zu parametrisieren. Dies erlaubt das Quantifizieren der statistischen Unsicherheit bei der Schätzung.

Zusammenfassend kann anhand dieser exemplarischen Untersuchungen geschlussfolgert werden, dass die logarithmische Normalverteilung ein probates Mittel ist, um die beobachteten Defektverteilungen zu beschreiben. Mit Vorsicht müssen allerdings die Ergebnisse an den Rändern der Verteilung betrachtet werden. Für die linken Ausläufer sind die Ergebnisse auf Grund der physikalischen Beschränkungen des Bildaufnahmesensors verfälscht. In den rechten Ausläufern kann es hingegen auf Grund statistischen Rauschens oder fälschlich als globular klassifizierter Artefakte zu Abweichungen kommen. Handelt es sich bei den Defekten um nichtmetallische Einschlüsse, muss berücksichtigt werden, dass nach Expertenmeinung die logarithmische Normalverteilung das Auftreten von sehr großen Einschlüssen nicht adäquat modelliert, da sie zu schnell auf 0 fällt. Abhilfe kann hier die Modellierung durch eine zusammengesetzte Dichtefunktion schaffen. Alternativ bietet sich die Verwendung von Methoden aus der Extremwert-Statistik an. In Bezug auf die Untersuchung von nichtmetallischen Einschlüssen bietet die Veröffentlichung von Atkinson und Shi [9] einen guten Überblick über den Einsatz dieser Techniken.

In den nachfolgenden Abschnitten werden diese Beobachtungen bei der Modellierung berücksichtigt, insbesondere wenn es darum geht, das mittels der bayesschen Methoden parametrisierte Modell anhand beobachteter Daten zu validieren. Die dazu verwendete Teststatistik soll so definiert werden, dass nur die mittleren Bereiche der Verteilung in die Berechnung einfließen. Die möglicherweise verfälschten Ränder bleiben außen vor. Falls zu einem späteren Zeitpunkt eine Ka-

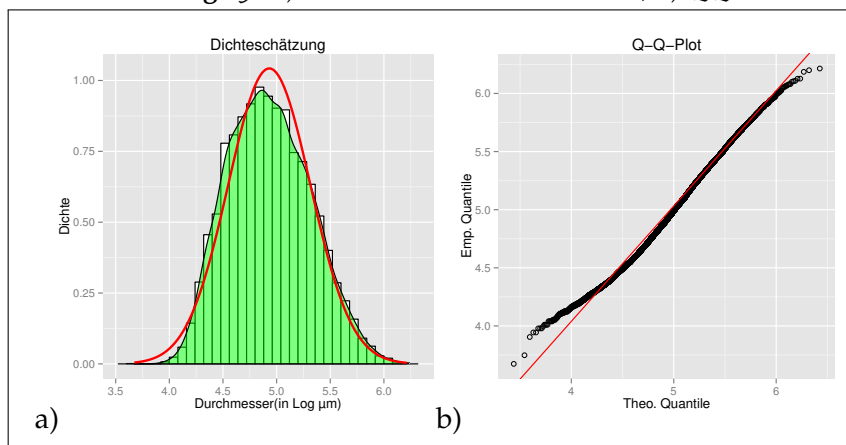
mera mit höherer Auflösung eingesetzt wird oder die Wahl auf ein anderes Modell fällt, welches die rechten Ausläufer besser beschreibt, reicht es aus, die Teststatistik entsprechend anzupassen. Die beschriebene Vorgehensweise bleibt identisch.

### 6.1.3 Modellparametrisierung und Validierung

In diesem Abschnitt soll statt der Punktschätzung mittels Maximum-Likelihood das in Abschnitt 3.2.2 vorgestellte bayessche Verfahren zur Schätzung der Verteilungsparameter eingesetzt werden. Anschließend wird mit Hilfe der posteriori-prädiktiven Verteilung das Modell anhand der empirisch erhobenen Daten validiert. Alle Berechnungen werden am Beispiel einer dritten Probe durchgeführt. Diese hat eine Abmessung von  $286 \text{ mm} \times 140 \text{ mm} \times 31 \text{ mm}$  und wurde wieder mit einer Auflösung von  $20 \mu\text{m} \times 20 \mu\text{m}$  aufgenommen. Die Spanabnahme der Fräse betrug ebenfalls  $10 \mu\text{m}$ . Nach der Klassifikation sind 10612 Objekte eindeutig als globulare Defekte erkannt. Abbildung 15

*Dritte Probe*

**Abbildung 15.:** a) Schätzen der Dichtefunktion, b) QQ-Plot.



zeigt das schon bekannte Histogramm und den QQ-Plot. Die Schätzung wurde dabei wieder anhand der logtransformierten Durchmesser der  $x_1, \dots, x_n$  detektierten Defekte vorgenommen. Es wird also davon ausgegangen, dass die logtransformierten Durchmesser normalverteilt sind, wobei die Parameter  $\mu$  und  $\sigma$  unbekannt sind und geschätzt werden müssen. Die Punktschätzung für die beiden Parameter, mit denen auch das in Abbildung 15 a) und b) dargestellte Modell parametrisiert wurde, ergab  $\hat{\mu} = 4.931$  und  $\hat{\sigma} = 0.382$ . Deutlich lässt sich am Histogramm wieder die Rechtsschiefe der Verteilung erkennen, die aus der begrenzten physikalischen Auflösung des Bildsensors resultiert. Ansonsten zeigt der QQ-Plot in Abbildung 15 b) für die Werte zwischen 4.5 und 6 eine gute Übereinstimmung zwischen

*Punktschätzung*

Modell und Daten. Lediglich an den rechten Ausläufern kommt es zu einer leichten Abweichung.

Die Likelihood-Funktion für eine Stichprobe  $X_1, \dots, X_n$  mit Stichprobenwerten  $x_1, \dots, x_n$  ergibt sich bei gegebener Normalverteilung gemäß Formel 74 und Formel 129 aus

Likelihood-Funktion

$$\begin{aligned}
 p(x|\mu, \sigma) &= f(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n|\mu, \sigma) \\
 &= \prod_{i=1}^n f(x_i|\mu, \sigma) \\
 &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}}
 \end{aligned} \tag{133}$$

Unter Anwendung des bayesschen Theorems gilt dann für die A-posteriori Verteilung

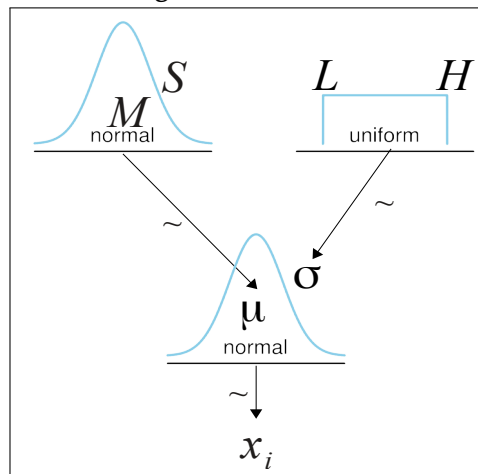
A-posteriori

$$p(\mu, \sigma|x) = \frac{p(x|\mu, \sigma)p(\mu, \sigma)}{\int \int p(x|\mu, \sigma)p(\mu, \sigma)d\mu d\sigma} \tag{134}$$

wobei  $p(\mu, \sigma)$  die A-priori Verteilung über den Parameterraum ist. Im Folgenden wird von der Unabhängigkeit der Parameter ausgegangen, es gilt also  $p(\mu, \sigma) = p(\mu)p(\sigma)$ . Die A-posteriori Dichte soll nun mittels des in Kapitel 3 beschriebenen MCMC-Verfahrens approximiert werden. Dafür müssen konkrete A-priori Dichten für  $\mu$  und  $\sigma$  festgelegt werden. Abbildung 16 zeigt die Vorgehensweise für diesen Schritt in der von Kruschke [73] eingeführten graphischen Konvention. Anhand der Graphik lässt sich folgender Zusammenhang

Graphische Modellierung

Abbildung 16.: Aufbau des Modells.



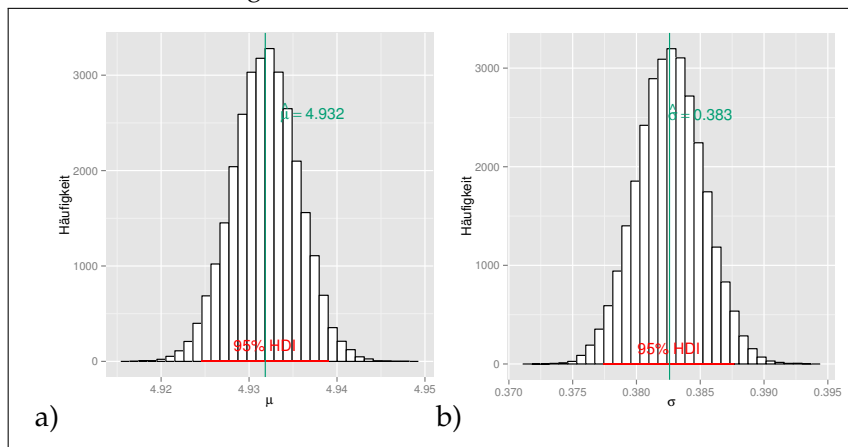
erkennen. Der Pfeil von der Normalverteilung zu  $x_i$  gibt an, dass der Durchmesser eines Partikels  $x_i$  der Normalverteilung mit den unbekanntem Parametern  $\mu$  und  $\sigma$  unterliegt. Symbolisch wird dies nach gängiger statistischer Konvention auch als  $x_i \sim Normal(\mu, \sigma)$



geschrieben. Daher wird dem Pfeil eine Tilde ( $\sim$ ) beige stellt. Für die A-priori Verteilung von  $\mu$  wird wieder die Normalverteilung mit den Parametern  $M$  und  $S$  für den Mittelwert und die Standardabweichung gewählt, da die Normalverteilung die konjugierte A-priori Verteilung zur Normalverteilung ist [73, S. 392 ff.]. Als A-priori Verteilung für  $\sigma$  wird die Gleichverteilung (in der Graphik Uniform genannt) angenommen. Diese hängt von den Parametern  $L$  und  $H$  ab. Konkret werden die Parameter der A-priori Verteilung so gewählt, als ob über die beiden Parameter  $\mu$  und  $\sigma$  keine Informationen vorliegen. Dafür wird für die A-priori Verteilung von  $\mu$  der Mittelwert  $M = 0$  und  $S = 1 \times 10^6$  gesetzt. Durch die hohe Standardabweichung wird die Unsicherheit über den Parameter  $\mu$  modelliert. Für die A-priori Verteilung wird nach dem gleichen Prinzip  $L = 0$  und  $H = 1 \times 10^6$  gesetzt. Der MCMC-Algorithmus wird schließlich so parametrisiert, dass 30000 Werte nach der Konvergenzphase von 1000 Schritten aus der A-posteriori Verteilung gezogen werden. Abbildung 17 zeigt die approximierten A-posteriori Verteilungen von den Parametern  $\mu$  (Bild a) und  $\sigma$  (Bild b). Neben der eigentlichen Verteilung sind jeweils das

Parametrisierung

**Abbildung 17.:** a) A-posteriori Verteilung von  $\mu$ , b) A-posteriori Verteilung von  $\sigma$ .



95% HDI als roter Balken auf der  $x$ -Achse und das Ergebnis der Punktschätzung aus dem vorherigen Abschnitt als senkrechter Balken zur  $x$ -Achse eingezeichnet. Das HDI für  $\mu$  erstreckt sich in einem Intervall von  $[4.925, 4.940]$ . Mit 95% Wahrscheinlichkeit liegt also der wahre Wert von  $\mu$  nach den bisher beobachteten Daten für die aktuell betrachtete Probe innerhalb dieses Intervalls. Das Ergebnis der Punktschätzung liegt, wie erwartet, ebenfalls in diesem Intervall. Das gleiche gilt für den Parameter  $\sigma$ . Hier erstreckt sich das HDI in einem Intervall von  $[0.377, 0.388]$ . Beide Intervalle sind relativ eng, was ein Hinweis darauf ist, dass die Schätzung nicht mit Unsicherheit behaftet ist. Diese Aussagen gelten immer nur unter der Voraussetzung, dass die propagierte Normalverteilung auch wirklich das geeignete Modell zur Beschreibung der Durchmesser ist. Im nächsten Schritt

Ergebnis

soll untersucht werden, inwieweit die beobachteten Daten wirklich zu dem Modell passen.

Posteriori-  
prädiktiver  
Test

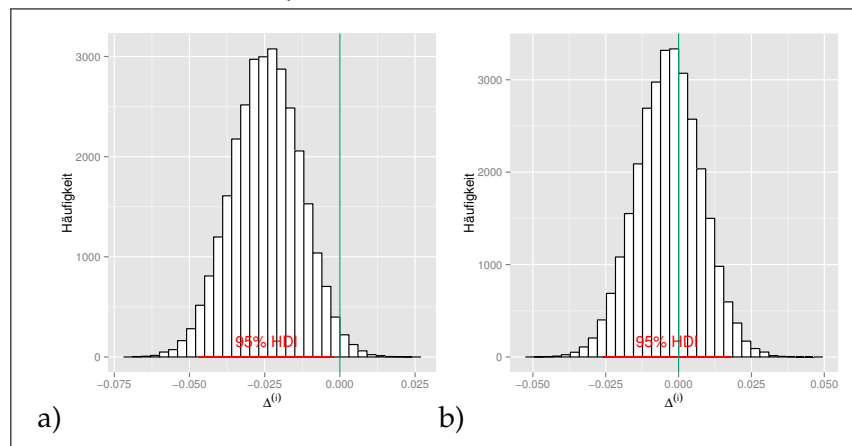
Um das Modell anhand der beobachteten Daten zu validieren, wird die in Abschnitt 3.2.3 beschriebene Methode durchgeführt. Zunächst werden zufällig jeweils  $l$  Parameterkombinationen  $\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(l)}$  mit  $\theta = (\mu, \sigma)$  aus den beiden per MCMC Verfahren generierten A-posteriori Verteilungen gezogen. Für jede dieser  $i = 1, \dots, l$  Parameterkombinationen werden dann  $n$  Stichprobenwerte  $\tilde{x}^{(i)} = \tilde{x}_1^{(i)}, \dots, \tilde{x}_n^{(i)}$  aus der Modellverteilung, in diesem Fall also der Normalverteilung, gezogen und die Teststatistik  $T(x, \theta)$  für jedes  $\theta^{(i)}$  sowohl über die beobachteten Daten  $x = x_1, \dots, x_n$  also auch die simulierten Daten  $\tilde{x}^{(i)}$  berechnet. Konkret wird als Teststatistik

Teststatistik

$$T(x, \mu) = |q_h - \mu| - |q_k - \mu| \quad (135)$$

gewählt, wobei  $q_h$  beziehungsweise  $q_k$  das  $h\%$ - und  $k\%$ -Quantil der Stichprobe  $x$  nach Definition aus Formel 70 ist. Für eine symmetrische Verteilung streut  $T(x, \mu)$  um den 0 Wert, wenn für die Wahl von  $h$  beziehungsweise  $k$  die Beziehung  $h = 1 - k$  gilt. Die Teststatistik ist demnach sensitiv gegenüber Asymmetrien in der Mitte der Verteilung, wobei die rechten und linken Ausläufer entsprechend der Wahl von  $h$  und  $k$  ignoriert werden. Abbildung 18 zeigt die nach Formel 82 berechnete posteriori-prädiktive Verteilung der Differenzen zwischen der Teststatistik der simulierten Daten und den beobachteten Daten. Dabei wurde in Abbildung 18 a) jeweils das 0.01 % Quantil und das

**Abbildung 18:** a) A-posteriori Verteilung von  $\Delta^{(i)}$  im 0% bis 100% Quantil, b) A-posteriori Verteilung von  $\Delta^{(i)}$  im 10% bis 90% Quantil.



Ergebnis

0.99 % Quantil gewählt. Man erkennt, dass die durch den grünen Balken parallel zur  $y$ -Achse markierte 0 knapp außerhalb des HDIs liegt. Der Unterschied zwischen erhobenen und simulierten Daten ist also zu groß, um noch als statistische Schwankung auf Grund der Unsicherheit bei der Parameterschätzung interpretiert werden zu können.

Allerdings werden durch die Wahl dieser spezifischen Quantile sowohl die linken, als auch die rechten Ausläufer der Verteilung bei der Berechnung der Teststatistik berücksichtigt, obwohl bereits bekannt ist, dass diese schlecht durch das gewählte Modell beschrieben werden. In Abbildung 18 b) ist die Untersuchung mit dem 10%- und 90%-Quantil wiederholt worden, die extremen Ausläufer der Verteilung werden also ignoriert. Man erkennt, dass die 0 nahe der Mitte des HDIs liegt. Dies ist ein Zeichen dafür, dass der mittlere Bereich zwischen Modell und Daten sehr ähnlich ist und durch eine symmetrische Verteilung beschrieben werden kann. Die Normalverteilung wird also für die logtransformierten Durchmesser der Defekte als Modell akzeptiert.

#### 6.1.4 Hierarchisches Modell

Bis zum jetzigen Zeitpunkt wurden alle Proben als individuelle Objekte ohne Bezug zueinander behandelt. In der Praxis liegt aber die Vermutung nahe, dass Proben, die aus der gleichen Stahlgüte erhoben und unter gleichen Produktionsbedingungen hergestellt wurden, auch ähnliche Defektverteilungen aufweisen. Lediglich im Rahmen von statistischen Schwankungen weichen die Verteilungsparameter solcher, in Gruppen zusammengefasster Proben, voneinander ab. Die Gruppenbildung muss dabei natürlich von einem Experten vorgenommen werden und ist abhängig von dem jeweiligen Anwendungsfall. Möchte man beispielsweise die Auswirkung eines bestimmten Produktionsparameters auf den durchschnittlichen Defektdurchmesser untersuchen, bietet sich folgende Vorgehensweise an. Stahlproben mit gleicher Güte werden in Abhängigkeit eines Produktionsparameters in zwei Gruppen unterteilt. Anschließend werden für beide Gruppen der Mittelwert aller Proben und aufbauend darauf der jeweilige Gruppenmittelwert mittels des bayesschen Ansatzes geschätzt. Dafür müssen sowohl für die Verteilung der Durchmesser der einzelnen Proben als auch für die Verteilung der mittleren Probendurchmesser der jeweiligen Gruppe ein passendes Modell gewählt und die A-priori Dichten definiert werden. Unter Anwendung des bayesschen Theorems und des MCMC Verfahrens können dann die A-posteriori Verteilungen approximiert werden. Schließlich lässt sich durch den Vergleich der A-posteriori Verteilung der Gruppenmittelwerte beurteilen, ob der Einfluss des Produktionsparameters auf den mittleren Durchmesser signifikant ist oder nur im Rahmen von statistischen Schwankungen liegt. Dazu bildet man die A-posteriori Verteilung der Differenzen der Gruppenmittelwerte und berechnet das HDI. Liegt die 0 außerhalb des HDIs an den Rändern der Verteilung, ist dies ein starker Hinweis darauf, dass der Produktionsparameter Einfluss auf den Defektdurchmesser hat. Liegt die 0 hingegen im HDI, sind die Unter-

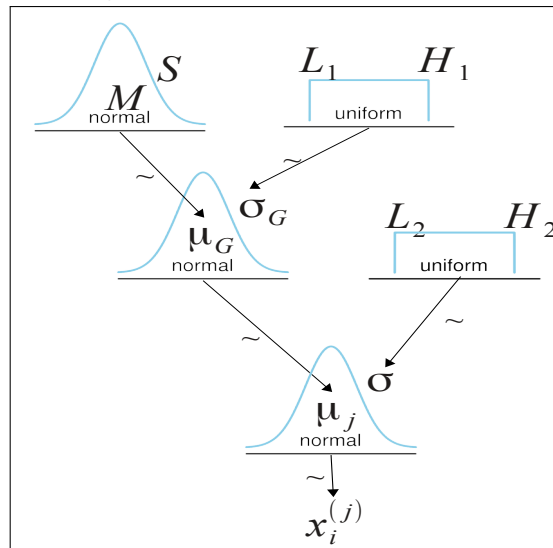
*Vorgehensweise*

schiede in den mittleren Defektdurchmessern nicht signifikant genug und könnten auch durch statistische Schwankungen auf Grund von Unsicherheit bei der Parameterschätzung erklärt werden. Ein direkter Einfluss des Produktionsparameters auf den Defektdurchmesser kann nicht postuliert werden.

### Modellaufbau

Wie man die A-posteriori Parameter der Gruppen konkret berechnet, soll nun exemplarisch gezeigt werden. Da bei der Erstellung der Arbeit aber keine Metainformationen zu den erhobenen Daten vorliegen, sind Auswertungen, wie der oben beschriebene Anwendungsfall, nicht möglich. Ohne weitere Informationen zu den Proben lassen sich keine sinnvollen Gruppen bilden. Stattdessen werden im Folgenden alle 59 vorliegenden Proben in einer Gruppe zusammengefasst, um zumindest einen Gesamtüberblick über die Verteilung der individuellen Defektdurchmesser zu erhalten. Nach wie vor wird angenommen, dass die logtransformierten Durchmesser  $x_1^{(j)}, \dots, x_n^{(j)}$  der  $j$ -ten Probe mit  $j = 1, \dots, 59$  normalverteilt mit den Parametern  $\mu_j$  und  $\sigma_j$  sind. Darüber hinaus wird zusätzlich angenommen, dass die einzelnen Probenmittelwerte  $\mu_j$  einer Gruppe ebenfalls normalverteilt sind und um einen Gruppenmittelwert  $\mu_G$  mit Standardabweichung  $\sigma_G$  streuen. Abbildung 19 zeigt den Aufbau des gesamten Modells und stellt dabei eine direkte Erweiterung von dem Modell aus Abbildung 16 dar. Um die Gruppenparameter  $\mu_G$  und  $\sigma_G$  berechnen

Abbildung 19.: Aufbau des hierarchischen Modells.



### Parametrisierung

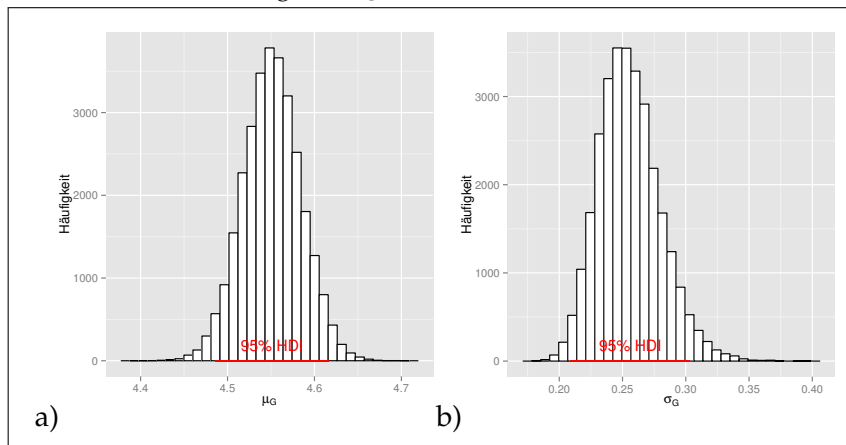
zu können, müssen für diese ebenfalls die A-priori Dichten festgelegt werden. Wie man an Abbildung 19 sieht, wird für  $\mu_G$  die Normalverteilung als A-priori Verteilung gewählt. Parametrisiert wird diese Verteilung mit  $M = 0$  und  $S = 1 \times 10^6$ , um auszudrücken, dass noch keine Informationen über den Gruppenmittelwert bekannt sind. Für die Streuung  $\sigma_G$  wird, wie bereits für die Streuung  $\sigma_j$  der einzelnen

Proben, die Gleichverteilung als A-priori Verteilung mit  $L_1 = 0$  und  $H_1 = 1 \times 10^6$  verwendet. Auf diese Weise wird auch hier modelliert, dass noch kein Wissen über die Verteilung von  $\sigma_G$  vorliegt. Die A-priori Dichte für den Parameter  $\sigma_j$  bleibt unverändert und wird wie in Abbildung 16 modelliert.

Abbildung 20 zeigt die A-posteriori Verteilungen von  $\mu_G$  und  $\sigma_G$  über alle 59 Proben. Das HDI für  $\mu_G$  in Abbildung 20 a) beträgt dabei

*Interpretation*

**Abbildung 20.:** a) A-posteriori Verteilung von  $\mu_G$ , b) A-posteriori Verteilung von  $\sigma_G$ .



[4.486, 4.617] bei einem A-posteriori Mittelwert von 4.551. Für  $\sigma_G$  hingegen ist das HDI laut Abbildung 20 b) gleich [0.210, 0.302] bei einem A-posteriori Mittelwert von 0.256. Die durchschnittliche Größe aller globularen Defekte aller 59 Proben beträgt also ca. 94.747  $\mu\text{m}$ .

## 6.2 RÄUMLICHE VERTEILUNG

Nachdem für die Größenverteilung von Defekten ein adäquates Modell definiert, parametrisiert und anhand erhobener Daten validiert wurde, soll in diesem Abschnitt der Prozess für die räumliche Verteilung von globularen Defekten wiederholt werden. Die Vorgehensweise ist dabei nahezu äquivalent zur Vorgehensweise aus Abschnitt 6.1. Zunächst wird auf Basis explorativer Datenanalyse und der Fachliteratur ein geeignetes Modell ausgesucht, welches sich zur Beschreibung der räumlichen Verteilung eignet. Anschließend wird gezeigt, wie das Modell parametrisiert und anhand erhobener Daten validiert werden kann.

6.2.1 *Modellauswahl**Annahmen*

Üblicherweise werden nichtmetallische Einschlüsse in zweidimensionalen polierten Schnitten von Stahlproben detektiert. Man ist nun aber nicht an der Größenverteilung der in den Schnitten beobachteten Profile interessiert, sondern vielmehr an der dreidimensionalen Größenverteilung im gesamten Stahlvolumen. Dieses Problem, also das Hochrechnen der Durchmesser der Profile auf eine dreidimensionale Größenverteilung, wird als Wicksells Korpuskelproblem bezeichnet [143]. Zahlreiche Lösungen sind für dieses Problem bekannt [133, S. 426 ff.]. Drei Annahmen werden in der Regel getroffen, um die Berechnung zu vereinfachen. Erstens sind die nichtmetallischen Einschlüsse kugelförmig. Zweitens unterliegen die Durchmesser der nichtmetallischen Einschlüsse der lognormalen Verteilung, wobei teilweise die Ausläufer durch andere Verteilungen beschrieben werden. Drittens sind die Schwerpunkte der nichtmetallischen Einschlüsse zufällig und unabhängig voneinander im Volumen verteilt und lassen sich mittels eines homogenen Poisson Punktprozesses (PPP) beschreiben [6]. Die erste Annahme stellt eine starke Vereinfachung der Wirklichkeit dar und ist in der Praxis nicht gegeben (siehe Kapitel 4). Sie erleichtert aber die Berechnung des Korpuskelproblems. Die zweite Annahme wurde bereits im Abschnitt 6.1 ausführlich untersucht und konnte anhand erhobener Daten exemplarisch validiert werden. Die dritte Annahme macht das Hochrechnen des Reinheitsgrades von Schnitten auf das Volumen erst möglich, da man postuliert, dass die Bedingungen im Schnitt repräsentativ für den ganzen Block sind. Während eine physikalische Begründung für dieses Verhalten von nichtmetallischen Einschlüssen im Rahmen dieser Arbeit nicht gegeben werden kann, ist es aber zumindest möglich, mittels der in Abschnitt 3.3 eingeführten statistischen Methoden diese Annahme anhand von erhobenen Daten zu validieren. Im Gegensatz zu den üblichen Messtechniken für die Detektion von nichtmetallischen Einschlüssen kann nämlich mittels des in Abschnitt 4.2 vorgestellten Verfahrens die dreidimensionale räumliche Verteilung der Schwerpunkte von Defekten rekonstruiert werden. Anhand dieser Rekonstruktion soll nun überprüft werden, ob der PPP ein geeignetes Modell für die räumliche Verteilung von globularen Defekten ist.

*Stichprobe*

In Anlehnung an Abschnitt 3.3.3 wird eine Stichprobe mit Stichprobenumfang  $n$  von Schwerpunkten in einer aus der Bramme geschnittenen Stahlprobe  $W \subset \mathbb{R}^3$  ( $W$  wird auch als Beobachtungsfenster bezeichnet) durch die Matrix

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & x_{n3} \end{pmatrix} \quad (136)$$

dargestellt, wobei der Vektor

$$x_i = \begin{pmatrix} x_{i1} \\ \vdots \\ x_{i3} \end{pmatrix} \quad (137)$$

mit  $i = 1, \dots, n$  dem Schwerpunkt des  $i$ -ten Defektes mit den Koordinaten  $(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}) \in \mathbb{R}^3$  entspricht und aus den Zeilen der Matrix 136 gebildet wird. Im Folgenden wird  $(x, y, z)$  als Synonym für  $(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$  verwendet.

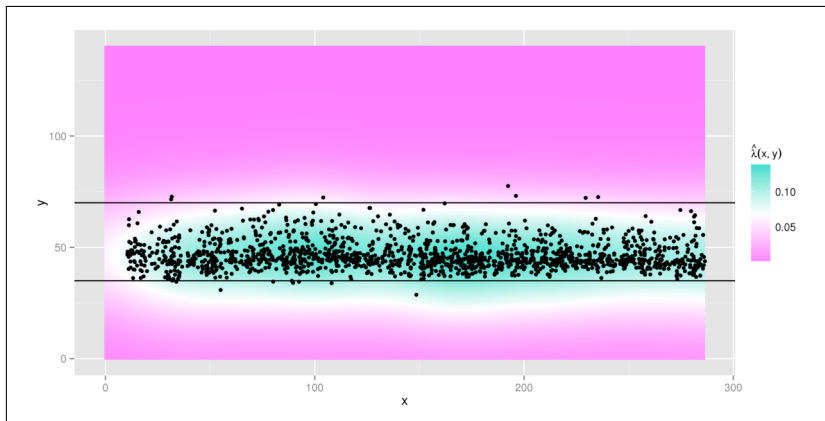
Zunächst soll die Intensitätsfunktion  $\lambda(u)$  mit  $u = (u_1, u_2, u_3) \in W$  aus Abschnitt 3.3.3 geschätzt werden, um zu überprüfen, ob es eine grobe Verletzung gegen die Annahme einer homogenen Verteilung der Defekte im Volumen gibt. Bei angenommener Homogenität sollte, bis auf kleine lokale Fluktuationen, die geschätzte Funktion  $\hat{\lambda}(u)$  im Probenvolumen konstant sein. Da die explorative Auswertung von  $\hat{\lambda}(u)$  im  $\mathbb{R}^3$  allerdings unhandlich ist, werden im Folgenden Schnitte zwischen einer Ebene und dem Volumen betrachtet. Dabei werden die Schwerpunkte aller durch die Ebene geschnittener Defekte auf diese projiziert und  $\hat{\lambda}(u)$  dann nur in dieser Ebene geschätzt. Für  $\hat{\lambda}(u)$  wird dann  $\hat{\lambda}(x, y)$  beziehungsweise  $\hat{\lambda}(x, z)$  und  $\hat{\lambda}(y, z)$  geschrieben, um anzugeben, auf welche Achse projiziert wird.

*Schätzung der Intensität*

Abbildung 21 zeigt  $\hat{\lambda}(u)$  für eine Schnittebene senkrecht zur Fräsrichtung bei einer Tiefe von ca.  $z = 18$  mm in der ersten Probe aus Abschnitt 6.1.2. Die schwarzen Punkte stellen dabei die Schwerpunkte der detektierten Defekte dar. Diese Probe wird auch für alle nachfolgenden Berechnungen verwendet. Man kann erkennen, dass ab-

*Interpretation*

**Abbildung 21.:** Schätzung der Intensität  $\hat{\lambda}(u)$  in der Schnittebene  $z = 18$  mm mit Bandbreite  $h = 4.375$ .

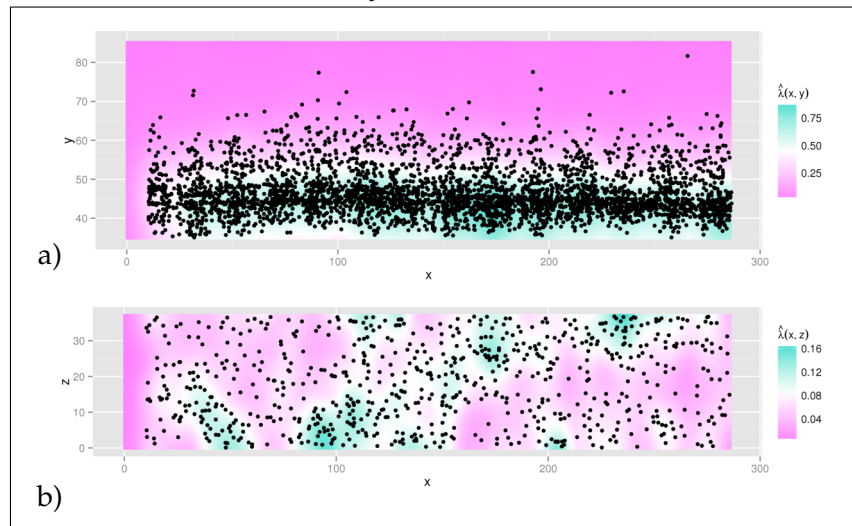


gesehen von einem schmalen Band mit einer Breite von ca. 35 mm, weite Teile der Probenoberfläche leer sind. Dies ist das in Abschnitt 4.1.3 beschriebene Band, das auf Grund der Erstarrungseigenschaften von flüssigem Stahl entsteht. Das Band liegt ca. 35 mm unterhalb

der Oberfläche, die sich in der Abbildung bei  $y = 0$  befindet. Die ungefähren Grenzen des Bandes sind durch die beiden schwarzen Linien bei 35 mm und 70 mm eingezeichnet. Es wurde senkrecht zu diesem Band gefräst, so dass es in jeder Schicht getroffen wird. Damit zeigt die Abbildung 21 deutlich, dass die Annahme einer homogenen Defektverteilung im gesamten Probenvolumen verletzt ist. Der homogene PPP scheint kein geeignetes Modell zur Beschreibung der Defektverteilung in der gesamten Stahlprobe zu sein. Eventuell lässt sich aber die Verteilung der Defekte im Band durch einen homogenen PPP modellieren, wenn dabei der restliche Teil der höchst wahrscheinlich leeren Probe ignoriert wird. Dazu betrachtet man die Schätzung Intensität  $\hat{\lambda}(u)$  begrenzt auf 35 mm bis 70 mm in  $y$ -Richtung. Wieder wird die Probe bei 18 mm in  $z$ -Richtung geschnitten, diesmal allerdings mit einer „dicken“ Ebene mit einer Breite von 4 mm. Die Schwerpunkte der getroffenen Defekte werden in eine Ebene projiziert und dort die Intensität geschätzt. Durch die Verwendung einer „dicken“ Ebene werden Defekte in direkter Nachbarschaft ebenfalls projiziert, so dass sich die totale Anzahl im Schnitt erhöht. Dies erleichtert es, einen Trend in der räumlichen Verteilung in  $x$ - oder  $y$ -Richtung auszumachen. Auf gleiche Weise wird eine Schnittebene durch  $y = 45$  mm gelegt, um die Intensität in  $z$ -Richtung zu untersuchen. Abbildung 22 zeigt beide Graphiken. Man betrachte zu-

Schätzung der  
Intensität im  
Einschlussband

**Abbildung 22.:** a) Intensität  $\hat{\lambda}(u)$  in der Schnittebene  $z = 18$  mm mit Bandbreite  $h = 4.375$  mm, b) Intensität  $\hat{\lambda}(u)$  in der Schnittebene  $y = 45$  mm mit Bandbreite  $h = 4.375$  mm.



Interpretation

nächst die Intensität in  $x$ -Richtung in der  $x, y$ -Ebene in Abbildung 22 a). Dabei fällt auf, dass in einem ca. 10 mm großen Streifen am linken Rand überhaupt keine Defekte liegen. Dieser Umstand ist einem Kalibrierungsfehler der Rohbilder geschuldet. Die Bilder enthalten auf der linken Seite noch ca. 10 mm vom Hintergrund der Aufnahmefläche. Weiter fällt auf, dass die Intensität in  $x$ -Richtung in regel-



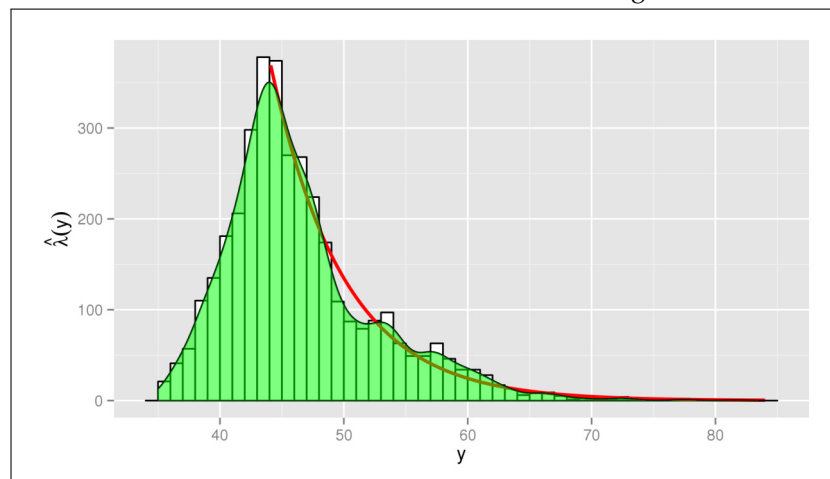
mäßigen Abständen von ca. 20 mm stark einbricht. Auch hierfür liegt der Grund an der verwendeten Messtechnik. Die Rohbilder werden in  $x$ -Richtung aus 14 Einzelbildern zusammengesetzt. Der Intensitätsabfall findet dabei genau an den Verbindungskanten der einzelnen Aufnahmen statt. Durch Inhomogenitäten in der Ausleuchtung kommt es anscheinend zu Problemen bei der Segmentierung, so dass an den Kanten weniger Defekte detektiert werden. Darüber hinaus sind in  $x$ -Richtung keine interessanten Eigenschaften zu entdecken. Mehr Aufschluss über die räumliche Verteilung lässt sich aber gewinnen, wenn man die  $y$ -Richtung betrachtet. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Defektverteilung hier keinesfalls homogen ist. Stattdessen liegen am unteren Rand des Ausschnittes bei ca. 80 mm nur sehr wenige Defekte. Je näher man aber der Probenoberfläche kommt, umso größer wird die Intensität und erreicht bei ca. 45 mm das Maximum. Bei geringeren Abständen zur Probenoberfläche treten Defekte wieder seltener auf, bis schließlich ab ca. 40 mm nur noch vereinzelte Defekte beobachtet werden können. In  $x, z$ -Projektion der Schnittebene  $y = 45$  mm in Abbildung 22 b) sieht es hingegen so aus, als ob die Intensität bis auf lokale Schwankungen nahezu homogen ist. Zusammenfassend muss also festgestellt werden, dass die Annahme der homogenen Verteilung der Defekte in  $x$ - und  $z$ -Richtung zwar plausibel ist, für die  $y$ -Richtung aber eine grobe Verletzung vorliegt. Dabei deckt sich das Ergebnis mit denen aus der Literatur (siehe Abschnitt 4.1.3) und hängt mit den Erstarrungseigenschaften von flüssigem Stahl zusammen. Die Erstarrung beginnt an den Außenseiten der Bramme und wandert nach innen. Sowohl Poren als auch nicht-metallische Einschlüsse sind aber bestrebt, im flüssigen Stahl nach oben aufzusteigen. Bei dem Übergang von der flüssigen zur festen Phase werden sie durch die nach innen wandernde Erstarrungsfront am Aufsteigen behindert und werden im aushärtenden Stahl eingeschlossen. Da anscheinend die nachrückenden Defekte schneller aufsteigen als die Erstarrungsfront vorrückt, kommt es in einem schmalen Bereich zu einer sehr hohen Konzentration, während mit größer werdendem Abstand zur Probenoberfläche diese stark abnimmt. Das charakteristische Bild in Abbildung 22 a) entsteht. Damit ist aber der homogene PPP kein adäquates Mittel, um die räumliche Defektverteilung zu beschreiben, da die Defekte nicht zufällig im Raum verteilt sind. Stattdessen nimmt die Wahrscheinlichkeit zu, dass ein Defekt detektiert wird, je näher man der Oberfläche kommt. Als Alternative kann auf die allgemeinere Variante des PPP, den sogenannten inhomogenen Poisson Punktprozess, zurückgegriffen werden. Bei diesem wird die konstante Intensität  $\lambda$  in Formel 94 durch die ortsabhängige Intensitätsfunktion  $\lambda(u)$  ersetzt. Entsprechend wurden abgewandelte Teststatistiken für einen solchen Prozess vorgestellt [11]. Da die Intensitätsfunktion  $\lambda(u)$  in dem hier präsentierten Fall anscheinend aber nur von einer Koordinate abhängt, wird eine andere Vorgehensweise

verwendet. Dazu wird zunächst versucht, das Verhalten der Intensität entlang der  $y$ -Richtung durch eine Funktion zu beschreiben. Die Parameter der Funktion werden dabei aus den Daten geschätzt. Anschließend werden die Daten dann mittels dieser Funktion homogenisiert, so dass die auf diese Weise transformierten Daten wieder durch einen homogenen PPP beschrieben werden können. Dies erlaubt es, die in Abschnitt 3.3.4 beschriebenen Verfahren zu verwenden, um die CSR-Eigenschaft zu testen. Zwar ist bereits bekannt, dass die Verteilung der Defekte im Stahl nicht zufällig, sondern ortsabhängig ist. Es bleibt aber immer noch die Frage bestehen, ob die Defekte unabhängig voneinander verteilt sind oder ob sie sich gegenseitig durch ihre Lage beeinflussen.

Schätzung der  
Intensität in  
 $y$ -Richtung

Um besser bewerten zu können, welche Funktion das Verhalten der Intensität in  $y$ -Richtung adäquat beschreibt, ist in Abbildung 23 die Intensität nur für diese Richtung geschätzt. Dazu wurde die Ebene in Abbildung 22 in 1 mm große, zur  $x$ -Achse parallele Streifen zerlegt und die Intensität in eben diesen Streifen berechnet. Das Ergebnis ist

**Abbildung 23.:** Intensitätsfunktion in  $y$ -Richtung berechnet für 1 mm breite Streifen, dargestellt als Histogramm. Das Ergebnis des Kerndichteschätzers mit einer Bandbreite von  $h = 1$  ohne Kantenkorrektur ist als grüne Fläche über das Histogramm gelegt. Die Exponentialfunktion  $\lambda(y) = ae^{-by}$  mit  $a = 28840.3$  und  $b = 0.147$ , geschätzt aus den Daten, ist als rote Kurve eingezeichnet.



als Histogramm dargestellt. Zusätzlich wurde die Intensität noch mittels Kerndichteschätzer mit einer Bandbreite von  $h = 1$  berechnet und als grüne Fläche über das Histogramm gelegt. Noch deutlicher als in Abbildung 22 ist der sprunghafte Anstieg der Intensität zu erkennen, je näher man der Oberfläche kommt. Der Anstieg bis zur maximalen Intensität bei ca.  $y = 45$  mm lässt sich, wie man an der roten Kurve

Exponentialfunktion

in Abbildung 23 sehen kann, sehr gut durch die Exponentialfunktion der Form

$$\lambda(u) = \lambda(x, y, z) = \lambda(y) = ae^{-by} \quad (138)$$

approximieren. Die Parameter wurden dabei aus den Daten geschätzt und sind  $a = 28840.3$  und  $b = 0.147$ . Eine physikalische Begründung für die Wahl genau dieser Funktion kann nicht angegeben werden. Allerdings ist die Exponentialfunktion ein häufig verwendetes Modell zur Beschreibung der Intensitätsfunktion und wurde unter anderem auch schon dafür benutzt, das inhomogene Verhalten von Poren in gegossenem Stahl zu beschreiben [122]. Natürlich wird auch nur das Verhalten von rechts kommend bis zum Punkt mit maximaler Intensität modelliert. Die linken Ausläufer wurden bei der Parameterschätzung ignoriert und lassen sich auch nicht durch die Exponentialfunktion beschreiben. Im Folgenden werden deshalb Defekte nur im Intervall  $[45, 85]$ mm betrachtet.

Da ein mögliches Modell zur Beschreibung des Verhaltens der Intensität in  $y$ -Richtung bekannt ist und parametrisiert wurde, kann nun die Homogenisierung vorgenommen werden. Die Idee dabei ist, den Abstand der Punkte des Musters in Abhängigkeit der Intensitätsfunktion in  $y$ -Richtung so zu verändern, dass die Intensität im gesamten Fenster konstant wird. Dabei werden für Bereiche mit hohen Intensitätswerten die Abstände vergrößert und für kleine Intensitätswerte die Abstände entsprechend komprimiert [39]. Konkret wird die Transformation für ein Beobachtungsfenster  $W$  mit den Maßen  $[x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}]$  mit

*Homogenisierung*

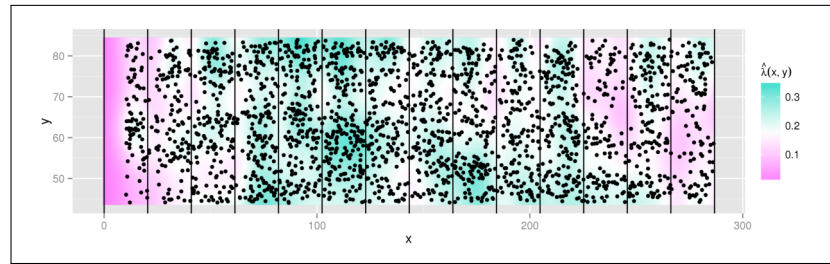
$$t(y) = b \int_{y_{min}}^y \lambda(u) du + y_{min} \quad (139)$$

durchgeführt, wobei

$$b = \frac{(y_{max} - y_{min})}{\int_{y_{min}}^{y_{max}} \lambda(t) dt} \quad (140)$$

ist. Die Schätzung der Intensität nach Transformation für die Schnittebene aus Abbildung 22 a) im Fenster  $[0, 286] \times [45, 85]$ mm ist in Abbildung 24 dargestellt. Man kann deutlich die viel gleichmäßigere Verteilung der Punkte im Fenster erkennen. Allerdings ist gleichzeitig die Untererkennung der Defekte an den Sensorkanten viel deutlicher auszumachen, da die Punkte nun über die gesamte Fläche verteilt sind. Die Sensorkanten sind in Abbildung 24 als schwarze Hilfslinien eingezeichnet. Dieser Effekt wird im Folgenden ignoriert und die Annahme einer homogenen Verteilung der transformierten Defekte im Einschlussband akzeptiert. Im nächsten Abschnitt wird nun versucht, die CSR-Eigenschaft mit den auf diese Weise transformierten Daten zu validieren.

**Abbildung 24.:** Intensität  $\hat{\lambda}(x, y)$  nach Transformation für die Schnittebene aus Abbildung 22 a) im Fenster  $[0, 286] \times [45, 85]$  mm. Die ca. 20 mm auseinander liegenden Sensorkanten sind als schwarze Linien eingezeichnet.



### 6.2.2 Modellparametrisierung und Validierung

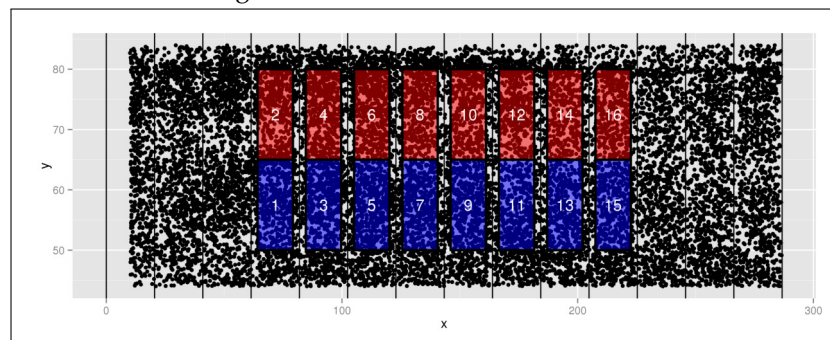
*Vorgehensweise*

Nachdem im vorherigen Abschnitt die Annahme der homogenen Verteilung der Defekte untersucht und nach entsprechender Transformation der Schwerpunkte auch akzeptiert werden konnte, soll nun überprüft werden, ob die Defekte unabhängig voneinander in der Probe verteilt sind (CSR-Eigenschaft). Dafür wird, wie in Abschnitt 3.3.4 beschrieben, der homogene PPP als Modell eingesetzt. Der Parameter des Modells, also die konstante Intensität  $\lambda$ , wird aus Teilfenstern der homogenisierten Probe im Bereich  $[0, 286] \times [45, 85] \times [0, 37]$  mm geschätzt. Die Teilfenster haben dabei die Form eines Würfels, um den Einfluss von Kanteneffekten zu verringern. Anschließend werden die in Abschnitt 3.3.4 beschriebenen Teststatistiken für die Punktmuster in den Teilfenstern berechnet und mit dem theoretischen Modell verglichen.

*Schätzung der Intensität*

Abbildung 25 zeigt die Projektion aller Defekte in die  $x, y$ -Ebene im Bereich  $[0, 286] \times [45, 85] \times [0, 37]$  mm und die entsprechenden Teilfenster nach der Homogenisierung. Insgesamt wurden 16 Teilfenster

**Abbildung 25.:** Projektion aller Defekte in die  $x, y$ -Ebene im Bereich  $[0, 286] \times [45, 85] \times [0, 37]$  mm nach der Homogenisierung. Teilfenster mit einer Abmessung von  $15 \times 15 \times 15$  mm<sup>3</sup> sind als rote beziehungsweise blaue Rechtecke eingezeichnet.

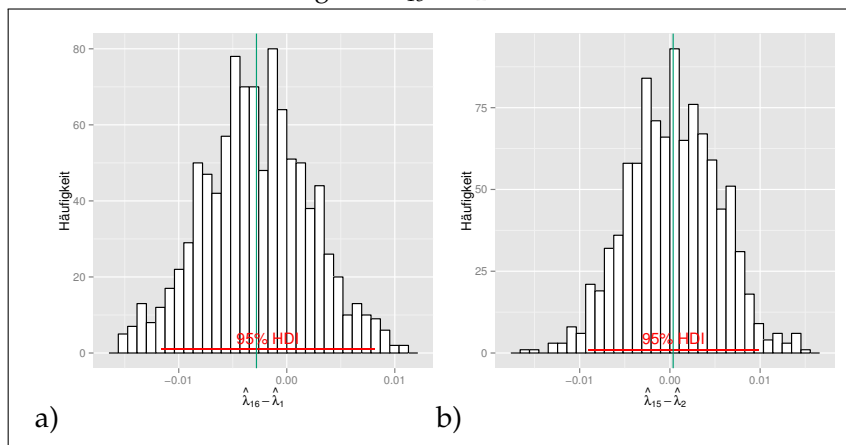


**Tabelle 12.:** Mittelwert und HDI der A-posteriori Verteilung von  $\lambda_i$  in den Teilfenstern  $i = 1, \dots, 16$ .

i	Position	Mittelwert	95 % HDI
1	[64.18, 79.18] × [50, 65] × [15, 30]mm	0.0404	[0.0331, 0.0464]
2	[64.18, 79.18] × [65, 80] × [15, 30]mm	0.0448	[0.0381, 0.0515]
3	[84.66, 99.66] × [50, 65] × [15, 30]mm	0.0489	[0.0413, 0.0558]
4	[84.66, 99.66] × [65, 80] × [15, 30]mm	0.0528	[0.0451, 0.0602]
5	[105.14, 120.14] × [50, 65] × [15, 30]mm	0.0549	[0.0477, 0.0638]
6	[105.14, 120.14] × [65, 80] × [15, 30]mm	0.0441	[0.0372, 0.051]
7	[125.62, 140.62] × [50, 65] × [15, 30]mm	0.0483	[0.0412, 0.0556]
8	[125.62, 140.62] × [65, 80] × [15, 30]mm	0.0409	[0.034, 0.0471]
9	[146.1, 161.1] × [50, 65] × [15, 30]mm	0.0513	[0.0435, 0.059]
10	[146.1, 161.1] × [65, 80] × [15, 30]mm	0.0412	[0.0341, 0.0483]
11	[166.58, 181.58] × [50, 65] × [15, 30]mm	0.0494	[0.0426, 0.0574]
12	[166.58, 181.58] × [65, 80] × [15, 30]mm	0.0413	[0.0337, 0.0479]
13	[187.06, 202.06] × [50, 65] × [15, 30]mm	0.0486	[0.0408, 0.0557]
14	[187.06, 202.06] × [65, 80] × [15, 30]mm	0.0359	[0.0292, 0.0419]
15	[207.54, 222.54] × [50, 65] × [15, 30]mm	0.0444	[0.0378, 0.0515]
16	[207.54, 222.54] × [65, 80] × [15, 30]mm	0.0432	[0.0365, 0.0504]

ter mit einer Abmessung von  $15 \times 15 \times 15$ mm festgelegt und so positioniert, dass sie zwischen den Sensoranten, markiert durch die schwarzen Linien, liegen. Damit soll der Einfluss der Untersegmentierung an eben diesen Kanten verringert werden. Die Teilfenster selbst sind als rote beziehungsweise blaue Rechtecke in Abbildung 25 eingezeichnet. Tabelle 12 zeigt den Mittelwert und das 95 % HDI der A-posteriori Verteilung für die Intensität  $\lambda_i$  des PPPs in den Teilfenstern  $i = 1, \dots, 16$ . Die Schätzung wurde mittels des in Abschnitt 3.3.4 beschriebenen Verfahrens durchgeführt. Man kann erkennen, dass die Intensitäten der einzelnen Teilfenster sehr dicht beieinander liegen. Um festzustellen, ob die Unterschiede signifikant oder nur auf Grund von statistischen Schwankungen entstanden sind, wurde in Abbildung 26 exemplarisch für jeweils 2 Teilfenster überprüft, ob die 0 in den Extremwerten der A-posteriori Verteilung der Differenzen liegt. Die Teilfenster wurden dabei so ausgewählt, dass eine Korrela-

Vergleich der  
A-posteriori  
Verteilungen

**Abbildung 26.:** a) A-posteriori Verteilung von  $\hat{\lambda}_{16} - \hat{\lambda}_1$ , b) A-posteriori Verteilung von  $\hat{\lambda}_{15} - \hat{\lambda}_2$ .

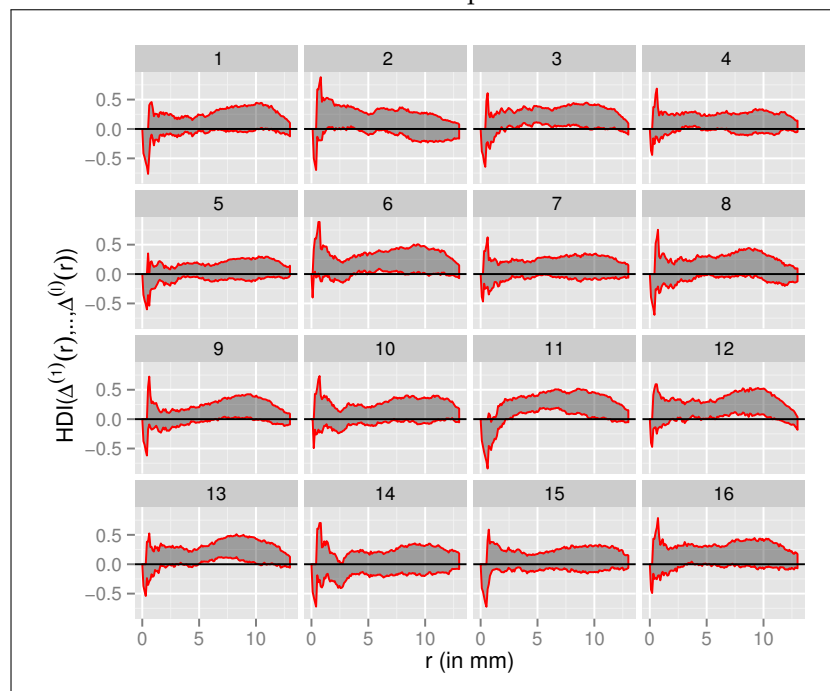
tion auf Grund der räumlichen Position ausgeschlossen werden kann. Abbildung 26 a) zeigt die A-posteriori Verteilung von  $\hat{\lambda}_{16} - \hat{\lambda}_1$  und

Abbildung 26 b) die von  $\hat{\lambda}_{15} - \hat{\lambda}_2$  mit dem jeweils als grünen Balken eingezeichneten Mittelwert. Bei beiden liegt die 0 im 95% HDI, die Variabilität der beiden Parameter ist also nicht groß genug, um als unterschiedlich angesehen werden zu können. Dies ist ein weiterer Hinweis darauf, dass nach der in Abschnitt 6.2.1 durchgeführten Transformation die Defektverteilung homogen ist.

Mittels der A-posteriori Verteilung von  $\lambda$  der 16 Teilfenster werden nun jeweils  $l$  posteriori-prädiktive Punktmuster  $\hat{N}^{(1)}, \dots, \hat{N}^{(l)}$  nach dem Verfahren aus Abschnitt 3.3.4 generiert und die Teststatistik nach Formel 110 berechnet. Für die resultierende posteriori-prädiktive Verteilung  $\Delta^{(1)}(r), \dots, \Delta^{(l)}(r)$  wird dann für alle  $r > 0$  das HDI berechnet und die oberen und unteren Intervallgrenzen gegen  $r$  aufgetragen. Abbildung 27 zeigt das Ergebnis für alle 16 Teilfenster, wobei für die Berechnungen  $l = 1000$  Punktmuster simuliert wurden. Das

Posteriori-  
prädiktiver  
Test

**Abbildung 27.:** Die Ober- und Untergrenze des 95% HDI berechnet über  $\Delta^{(1)}(r), \dots, \Delta^{(l)}(r)$  für alle  $r > 0$  in allen Teilfenstern  $i = 1, \dots, 16$  aufgetragen gegen  $r$  (rot umrandeter grauer Bereich). Für die Berechnung wurden jeweils  $l = 1000$  Punktmuster pro Teilfenster simuliert.



Resultat ist nicht ganz eindeutig. Für einige Teilfenster, beispielsweise Nummer 1, 5, 7, 14 oder 15, wird die 0 relativ mittig vom HDI eingeschlossen. Dies ist ein starker Hinweis darauf, dass die Hypothese der zufälligen und unabhängigen Verteilung der transformierten Defekte im Raum (CSR-Eigenschaft) zutrifft. Für andere Teilfenster hingegen liegt die 0 für einen signifikant großen Bereich von  $r$  außerhalb des HDIs. Als Beispiel sind hier die Teilfenster 3, 11 und 13 zu nennen.

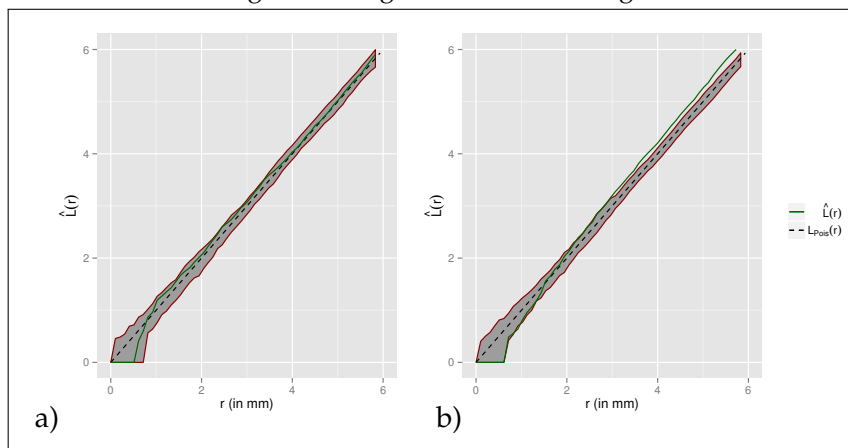
Interpretation

In allen Teilfenstern zusammengenommen liegt die 0 in 76.26 % der Fälle im HDI. Für die Mehrzahl der Fälle scheint der homogene PPP nach Transformation der  $y$ -Achse mittels der Exponentialfunktion also ein adäquates Modell zu sein.

Allerdings gibt es auch einige Fälle, in denen das Modell nicht zu den erhobenen Daten passt. Im Folgenden wird deshalb jeweils ein Punktmuster mit einer guten Übereinstimmung zwischen Modell und Daten und ein Punktmuster, bei dem es eine hohe Diskrepanz zwischen Modell und Daten gibt, genauer untersucht und miteinander verglichen. Konkret wird das Punktmuster aus Teilfenster 11 als Vertreter für eine schlechte Übereinstimmung und das Teilfenster 15 als Vertreter für eine gute Übereinstimmung zwischen Daten und Modell gewählt. Für beide Punktmuster werden zunächst  $L(r)$ -Funktionen aus Abschnitt 3.3.4 aus den Daten geschätzt. Abbildung 28 zeigt das Ergebnis. Dabei ist jeweils die  $\hat{L}(r)$ -Funktion dunkelgrün

$L(r)$  Funktion

**Abbildung 28.:** Funktionsgraph der Teststatistiken  $\hat{L}(r)$  als grüne Linie und  $L_{Pois}(r)$  als schwarz-gestrichelte Linie für Teilfenster 15 in Abbildung a) und Teilfenster 11 in Abbildung b). Zusätzlich wurden die Enveloppen nach Formel 109 als grau-rot begrenzte Bereiche eingezeichnet.



und  $L_{Pois}(r)$ , also der Verlauf der  $L(r)$ -Funktion für einen homogenen PPP mit gleicher Intensität wie das jeweilige Punktmuster, als schwarz-gestrichelte Linie eingezeichnet. Zusätzlich wurden die Enveloppen nach Formel 109 als grau-rot begrenzte Bereiche in die Abbildung aufgenommen. Bei beiden Abbildungen fällt auf, dass  $\hat{L}(r)$  für ca.  $r < 0.51$  mm in Teilfenster 15 und  $0.613$  mm in Teilfenster 11 gleich 0 ist. Es scheint also ein minimaler Punktabstand (hard-core Distanz, siehe Abschnitt 3.3.4) im Bereich  $r_0 = 0.51$  mm beziehungsweise  $0.613$  mm zu existieren. Eine Begründung dafür liegt in den vereinfachten Annahmen, die bei der Modellbildung getroffen wurden. So werden bei allen Defekten nur die Schwerpunkte betrachtet. In Wirklichkeit haben Defekte aber einen individuellen Durchmesser und können sich nicht überschneiden. Im Nahbereich weisen die

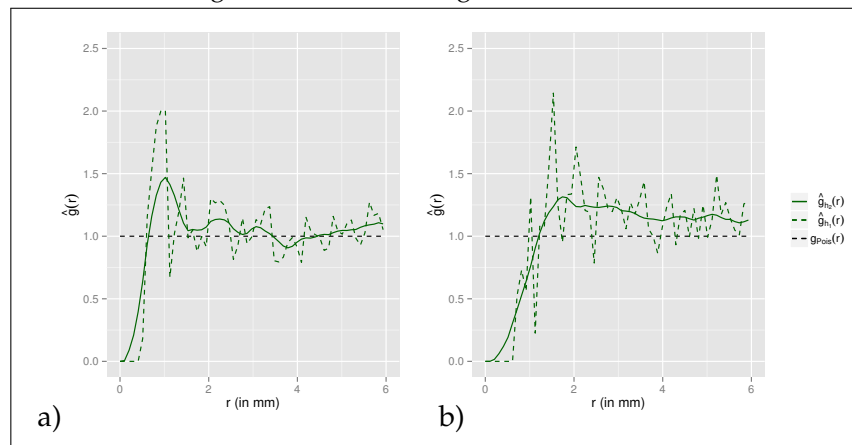
Interpretation

Schwerpunkte deshalb eine reguläre räumliche Verteilung auf, was sich in Abbildung 28 dadurch niederschlägt, dass  $\hat{L}(r) < L_{Pois}(r)$  für  $r \leq r_0$  ist. Für Werte  $r > r_0$  springt  $\hat{L}(r)$  dann sehr schnell auf das Niveau von  $L_{Pois}(r)$  und oszilliert in beiden Fällen bis ca.  $r < 2$  mm um diese. In dem Bereich von  $r_0 < r < 2$  mm scheinen beide Punktmuster die CSR-Eigenschaften aufzuweisen. Während aber  $\hat{L}(r)$  für das Punktmuster aus Teilfenster 15 in Abbildung 28 a) auch für  $r \geq 2$  mm sehr eng an  $L_{Pois}(r)$  und noch in der Enveloppe liegt, entfernt sich  $\hat{L}(r)$  von  $L_{Pois}(r)$  für Teilfenster 11 in Abbildung 28 b) nach oben. Für  $r > 2$  mm haben die Defekte im Punktmuster aus Teilfenster 11 im Vergleich zu einem homogenen PPP mit gleicher Intensität also mehr Nachbarn. Dies ein Hinweis darauf ist, dass die Defekte im Punktmuster in diesem Größenbereich ein clusterartiges Verhalten aufweisen.

Für eine genauere Analyse bietet sich die PCF  $g(r)$  an, da diese nicht die kumulative Eigenschaft von  $L(r)$  besitzt und somit besser dafür geeignet ist, das lokale Verhalten des Punktmusters zu beschreiben. In Abbildung 29 ist das Ergebnis der Schätzung für die Teilfenster 15 und Teilfenster 11 dargestellt. Für beide Teilfenster wurde  $g(r)$  jeweils

Paar-  
Korrelationsfunktion

**Abbildung 29.:** PCF geschätzt für Teilfenster 15 in Abbildung a) und für Teilfenster 11 in Abbildung b) für die zwei Bandbreiten  $h_1 = 0.1$  mm, bezeichnet als  $\hat{g}_{h_1}(r)$  und  $h_2 = 0.4$  mm, bezeichnet als  $\hat{g}_{h_2}(r)$ . Die Schätzung  $\hat{g}_{h_1}(r)$  wurde als grün-gestrichelte,  $\hat{g}_{h_2}(r)$  als grüne Linie eingezeichnet. Zusätzlich wurde wieder durch  $g_{Pois}(r)$  der Verlauf der PCF für einen homogenen PPP mit gleicher Intensität wie das jeweilige Punktmuster als schwarz-gestrichelte Linie eingezeichnet.



für zwei Bandbreiten, nämlich  $h_1 = 0.1$  mm, bezeichnet als  $\hat{g}_{h_1}(r)$  und  $h_2 = 0.4$  mm, bezeichnet als  $\hat{g}_{h_2}(r)$ , geschätzt. Die Schätzung  $\hat{g}_{h_1}(r)$  ist dabei als grün-gestrichelte Linie, die von  $g_{h_2}(r)$  als grüne Linie eingezeichnet. Zusätzlich wurde wieder durch  $g_{Pois}(r)$  der Verlauf der PCF für einen homogenen PPP mit gleicher Intensität wie das jeweili-



ge Punktmuster als schwarz-gestrichelte Linie eingezeichnet. Bei der Interpretation wird sich an der Vorgehensweise von Illian u. a. [61, S. 240 ff.] orientiert. Dafür werden für jedes Punktmuster eine Reihe von Distanzen definiert, an denen man das Verhalten des Musters charakterisieren kann. Diese sind:

*Interpretation*

- $r_0$ : Der minimale Punktabstand (hard-core Distanz, siehe Formel 107).
- $r_1$ : Distanz, an der  $\hat{g}(r)$  das erste Maximum hat. Kann als durchschnittlicher Abstand der Punkte zu den nächsten Nachbarn interpretiert werden.
- $r_2$ : Distanz, an der  $\hat{g}(r)$  mit  $\hat{g}(r) \leq 1$  das erste Minimum nach  $r_1$  hat. Kann als durchschnittlicher Abstand zu Regionen mit wenigen Punkten von den nächsten Nachbarn interpretiert werden.

Für Abbildung 29 a) ergeben sich  $r_0 = 0.512$  mm,  $r_1 = 0.920$  mm und  $r_2 = 3.784$  mm. Der minimale Punktabstand wurde dabei aus  $\hat{g}_{h_1}(r)$  berechnet, da bei zu großen Bandbreiten der Kerndichteschätzer positive Werte für  $\hat{g}(r) < r_0$  schätzt. Die Funktion würde in diesem Fall also an der Stelle  $r_0$  nicht direkt auf 0 fallen. Insgesamt wurde  $r_0$  bereits aus der  $\hat{L}(r)$ -Funktion abgelesen, wird hier aber nochmals explizit für beide Muster angegeben. Interessanter an dieser Stelle ist der Wert von  $r_1$ , welcher, wie auch  $r_2$ , aus  $\hat{g}_{h_2}(r)$  abgelesen wurde, da  $\hat{g}_{h_1}(r)$  auf Grund der gewählten Bandbreite sehr verrauscht ist. Dieser Wert gibt den Abstand zu den nächsten Nachbarn im Punktmuster an und beträgt, wie oben aufgeführt,  $r_1 = 0.920$  mm. Im Nahbereich zwischen  $r_0$  und  $r_1$  hat ein typischer Punkt im Punktmuster aus Teilfenster 15 also verhältnismäßig viele Nachbarn, was ein Hinweis darauf ist, dass im Nahbereich die Defekte zur Clusterbildung neigen. Schaut man sich aber den weiteren Verlauf von  $\hat{g}_{h_2}(r)$  an, wird man feststellen, dass die Funktion relativ schnell auf 1, also den Wert der PCF für einen homogenen PPP fällt. Ab ca. 2 mm oszilliert  $\hat{g}_{h_2}(r)$  nur noch in kleinen Abständen um  $\hat{g}_{Pois}(r)$ . Zwar wird bei  $r_2 = 3.784$  mm das Minimum von  $\hat{g}_{h_2}(r)$  erreicht, allerdings fällt dieses nicht signifikant genug aus, um als Hinweis für das Verhalten der Defekte in diesem Größenbereich interpretiert werden zu können. Insgesamt scheint, wie schon bei der Analyse der  $L(r)$ -Funktion vermutet, der homogene PPP für diese Punktmuster ein gutes Modell zu sein. Die Abweichungen im Nahbereich zwischen  $r_0 = 0.512$  mm und  $r_1 = 0.920$  mm vom Modell lassen sich mit der bereits angesprochenen Vereinfachung erklären. Da nur die Schwerpunkte der Defekte betrachtet werden, können im Bereich des durchschnittlichen Durchmessers keine Nachbarn liegen. Für Werte  $r > r_0$  steigt dann  $g(r)$  sprunghaft an und pendelt sich erst für Werte mit  $r > r_1$  wieder ein. Allgemein beobachtet man ein solches Verhalten bei sogenannten Softcore-Prozessen [61, S. 241]. Für einen bestimmten Grenzwert,

in diesem Fall der durchschnittliche Durchmesser, werden nur sehr wenig Punktpaare mit eben diesem oder einem kleineren Abstand detektiert. Für größere Abstände gibt es dann die Tendenz entsprechende Nachbarpunkte zu finden. Im Gegensatz zu einem Hardcore-Prozess, wie bei einem Parikelsystem mit konstantem Durchmesser, ist bei einem Softcore-Prozess  $r_0$  nicht fix, sondern hängt von der Größenverteilung der Partikel ab. Ein anderes Bild ergibt sich für das Punktmuster in Abbildung 29 b) aus Teilfenster 11. Für den Nahbereich ist wieder das Verhalten eines Softcore-Prozesses zu sehen, wobei der minimale Punktabstand  $r_0 = 0.613$  mm beträgt. Das Maximum erreicht die Funktion  $\hat{g}_{h_2}(r)$  bei  $r_1 = 1.738$  mm. Im Gegensatz zum ersten Punktmuster liegt die Funktion aber für alle  $r > r_1$  signifikant über 1. Konkret bedeutet dies, dass für ein bestimmtes  $r$  mit  $r > r_1$  mehr Paare von Punkten mit dem Abstand  $r$  existieren, als man bei einem Punktmuster mit CSR-Eigenschaft erwarten würde. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die Defekte im Punktmuster zur Clusterbildung neigen und damit ein klarer Verstoß gegen die CSR-Hypothese.

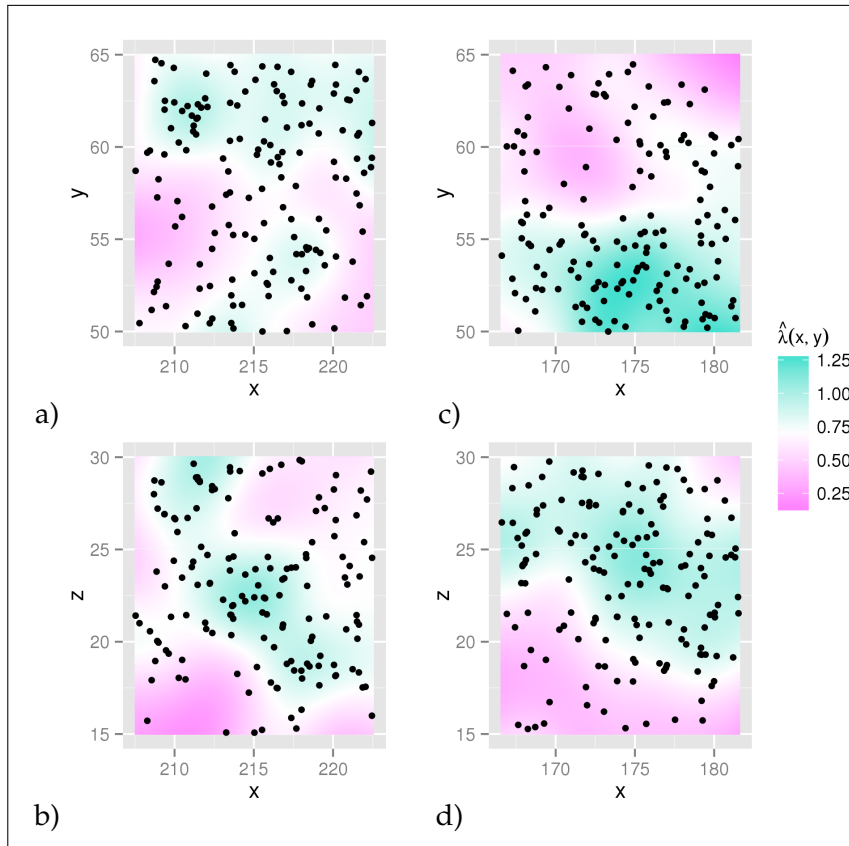
*Intensität entlang  
verschiedener  
Raumrichtungen*

Der Grund für dieses unterschiedliche Verhalten der Punktmuster ist in Abbildung 30 zu erkennen. Hier wurde die Intensitätsfunktion  $\hat{\lambda}(x, y)$  beziehungsweise  $\hat{\lambda}(x, z)$  für die Teilfenster 15 und 11 nach Projektionen der Defekte auf die  $x, y$ -Ebene (Abbildung 30 a) und c) und auf  $x, z$ -Ebene (Abbildung 30 b) und d) ) geschätzt. Während für Teilfenster 15 in Abbildung 30 a) und b) ein bis auf lokale Schwankungen homogener Verlauf der Intensität vorliegt, gibt es zumindest in der  $x, y$ -Projektion für Teilfenster 11 in Abbildung 30 c) trotz Homogenisierung einen starken Intensitätsgradienten in  $y$ -Richtung. Sehr wahrscheinlich ist der Einfluss der Sensorkanten auf die Defektverteilung doch größer als zunächst angenommen, so dass die Annahme einer homogenen Verteilung nach Transformationen nicht für jedes Teilfenster aufrecht erhalten werden kann. Wird für solche Teilfenster mit nicht konstanter Intensität trotzdem eine der in Abschnitt 3.3.4 eingeführten Teststatiken berechnet, kommt es zu dem in Abbildung 29 b) beobachteten Effekt. Das gleiche gilt auch, wie individuell überprüft werden kann, für die restlichen Teilfenster aus Abbildung 27, bei denen der Test fehlschlägt.

*Zusammenfassung  
der Ergebnisse*

Zusammenfassend können also folgende Erkenntnisse festgehalten werden. Die Intensität von Defekten ist nicht homogen im Stahl. Stattdessen sammeln sie sich in einem schmalen Band unterhalb der Probenoberseite. Auch in diesem Band ist die Verteilung nicht homogen, lässt sich aber annähernd mit einer Exponentialfunktion nach Formel 138 beschreiben. Aufbauend auf dieser Erkenntnis kann mit gewissen Einschränkungen gezeigt werden, dass die räumliche Verteilung der Defekte unabhängig voneinander (CSR-Eigenschaft) ist. Konkret wurde dafür das Band in 16 Teilfenster zerlegt, jedes der in den 16

**Abbildung 30.:** Die Intensität  $\hat{\lambda}(x, y)$  beziehungsweise  $\hat{\lambda}(x, z)$  für Teilfenster 15 und Teilfenster 11 nach Projektion in die  $x, y$ -Ebene in Abbildung a) und c) und nach Projektion in die  $x, z$ -Ebene in Abbildung b) und d).



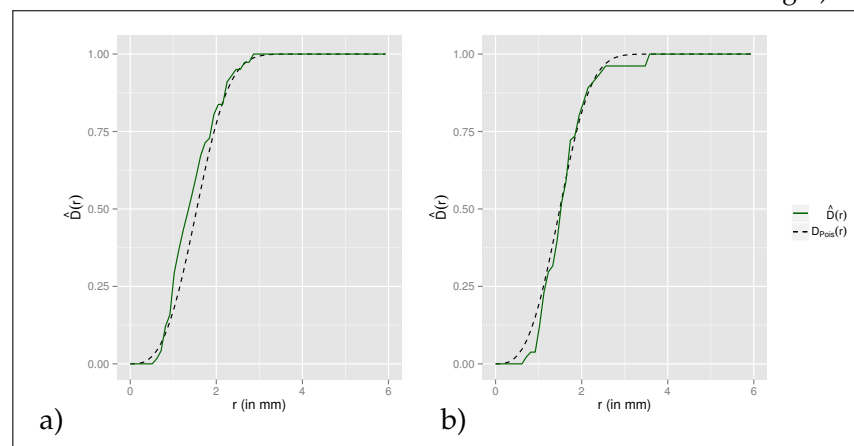
Teilfenster liegenden Punktmuster mit der in Formel 139 beschriebenen Transformation homogenisiert und die A-posteriori Verteilung der Intensität für jedes Punktmuster geschätzt. Anschließend wurde für jedes Punktmuster  $l = 1000$  Werte aus der A-posteriori Verteilung der Intensität gezogen und damit jeweils  $l$  homogene PPPs simuliert. Für das beobachtete Punktmuster und den entsprechenden simulierten  $l$  Punktmustern wurden eine Teststatistik in Form der  $L(r)$ -Funktion berechnet und der in Abschnitt 3.3.4 beschriebene posteriori-prädiktive Test durchgeführt. Dabei konnte in 76.26% aller Fälle eine gute Übereinstimmung zwischen Daten und Modell festgestellt werden. Im weiteren Verlauf wurde mittels der ebenfalls in Abschnitt 3.3.4 beschriebenen explorativen Methoden die Ursache für die Diskrepanz zwischen Daten und Modell für die restlichen 23.74% der Fälle untersucht. Zwei mögliche Gründe für die Abweichung wurden identifiziert. Zum einen ist der homogene PPP kein geeignetes Modell, um die Verteilung für sehr kleine Punktabstände zu beschreiben, da bei der Modellierung nicht berücksichtigt wurde, dass jeder Defekt einen Durchmesser besitzt, in dem kein ande-

rer Defekt liegen kann. Für sehr kleine Punktabstände ist die CSR-Eigenschaft also nicht erfüllt. Im Vergleich zur Größe des gesamten Bandes sind die Abstände aber so klein (unter 1 mm), dass dieser Effekt im Folgenden ignoriert wird. Als zweiter Grund für die Abweichung wurde festgestellt, dass der posteriori-prädiktive Test sehr fehleranfällig ist, wenn die Annahme der homogenen Verteilung verletzt wird. Im Anwendungsbeispiel kommt es insbesondere durch Sensorrauschen und Untersegmentierung an den Sensoranten zu einem nicht homogenen Intensitätsverlauf im Teilfenster. Dies führt zu den detektierten Abweichungen zwischen der Teststatistik der simulierten und beobachteten Punktmuster. Unter Berücksichtigung dieser Erkenntnisse wird das Ergebnis in Abbildung 27 als ausreichend betrachtet, um das Modell anzunehmen. Die räumliche Verteilung der Defekte ist also unabhängig voneinander, wobei die Position der einzelnen Defekte von der als Intensitätsfunktion  $\lambda(u)$  angenommenen Exponentialfunktion aus Formel 138 abhängt.

Abgeschlossen wird dieser Abschnitt mit der Betrachtung der Nächste-Nachbar Funktion  $D(r)$  (siehe Abschnitt 3.3.4), da in dieser der minimale Punktabstand abgelesen werden kann, ab dem jeder Punkt im Punktmuster mindestens einen Nachbarn hat. Abbildung 31 zeigt die Schätzung von  $D(r)$  für die schon bekannten Punktmuster aus Teilfenster 15 und 11. Beim Punktmuster aus dem Teilfenster

Nächste-Nachbar  
Funktion

**Abbildung 31.:** Schätzung der Nächste-Nachbar Funktion  $D(r)$  für das Punktmuster von Teilfenster 15 in Abbildung a) und das Punktmuster von Teilfenster 11 in Abbildung b).



15 in Abbildung 31 und dem Punktmuster aus Teilfenster 11 in Abbildung 31 nimmt die Funktion  $\hat{D}(r)$  jeweils ab  $r = 2.864$  mm beziehungsweise  $r = 3.580$  mm einen Wert von 1 an. Interpretiert man die Nächste-Nachbar Funktion als kumulative Verteilungsfunktion, dann beträgt an diesen Stellen die Wahrscheinlichkeit, dass ein Punkt im Punktmuster mindestens einen Nachbar mit der Entfernung  $r$  hat, 100 %.

Interpretation

Auf Basis der Erkenntnisse, die in diesem und im vorherigen Abschnitt 6.2.2 gewonnen wurden, wird nun im nächsten Teilabschnitt ein Algorithmus entworfen, mit dem künstliche Stahlproben mit Defekten generiert werden können. Anhand dieser künstlichen Stahlproben werden dann später verschiedene Frässzenarien evaluiert.

### 6.3 SIMULATION VON STAHLPROBEN

Mit den Erkenntnissen aus den vorherigen Abschnitten lässt sich nun ein Algorithmus angeben, mit dem synthetische Stahlproben generiert werden können. Der Algorithmus hängt dabei von 5 Parametern ab, nämlich dem Mittelwert  $\mu$  und der Standardabweichung  $\sigma$  der logarithmischen Normalverteilung, der Intensität  $\lambda$  des homogenisierten Punktmusters, den Parametern  $a$  und  $b$  der Intensitätsfunktion aus Formel 138, welche den Intensitätsgradienten in  $y$ -Richtung beschreiben und den Abmessungen des Fensters in der Stahlprobe der Form  $W = [x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}] \times [z_{min}, z_{max}]$ , in dem simuliert werden soll. Als Rückgabewert liefert der Algorithmus das simulierte Punktmuster mit zugehörigem Durchmesser für jeden Defekt zurück. Listing 7 zeigt den Algorithmus in Pseudocode. Grob lässt sich der Algorithmus in drei Teile aufteilen. Zunächst wird in Zeile 2 die Anzahl  $n$  der Punkte im Muster aus der Poissonverteilung, parametrisiert mit  $\lambda v(W)$ , gezogen. Anschließend werden die Listen, welche die  $x, y, z$  Koordinaten der Schwerpunkte der  $n$  Defekte enthalten und die Liste mit den jeweiligen Durchmessern mit 0 initialisiert. Dann beginnt die eigentliche Simulationsphase des Algorithmus. Dafür werden zunächst entsprechend der Eigenschaften eines homogenen PPPs die Koordinaten  $(x_t, y_t, z_t)$  eines potenziellen Defektes im Intervall der Fenstergröße aus der Gleichverteilung gezogen. Zusätzlich wird der Durchmesser des Defektes entsprechend der logarithmischen Normalverteilung bestimmt. Nun wurde aber im vorherigen Abschnitt festgestellt, dass die Schwerpunkte zwar unabhängig voneinander, aber nicht zufällig im Raum verteilt sind. Die Intensität steigt exponentiell an, je weiter man sich der Oberfläche nähert. Dies wird im Algorithmus ab Zeile 11 durch eine Ausdünnungsoperation nach Lewis und Shedler [81] umgesetzt. Für jeden möglichen Defekt wird nämlich die ortsabhängige Wahrscheinlichkeit

*Parameter*

*Funktionsweise*

$$p(y) = \frac{ae^{-by_t}}{ae^{-by_{min}}} \quad (141)$$

berechnet und auf Basis dieser entschieden, ob der temporär generierte Defekt Teil des Punktmusters ist oder verworfen wird (siehe Zeile 12). Gemäß Formel 141 hat dabei ein potenzieller Defekt mit Koordinate  $y_t$  eine höhere Wahrscheinlichkeit als Punkt des Musters angenommen zu werden, je näher er an  $y_{min}$  liegt. Dieser Vorgang

**Algorithmus 7** Simulator.

---

```

1: procedure SIMULATESTEELSAMPLE( $\mu, \sigma, \lambda, a, b, W$ )
2:    $n \sim \text{Poisson}(1, \lambda v(W))$  ▷ Initialisierung
3:    $x[n] \leftarrow 0, \quad y[n] \leftarrow 0, \quad z[n] \leftarrow 0$ 
4:    $d[n] \leftarrow 0$ 
5:    $c \leftarrow 1$ 
6:   while  $c \leq n$  do
7:      $x_t \sim \text{Uniform}(1, x_{\min}, x_{\max})$  ▷ Simulationsphase
8:      $y_t \sim \text{Uniform}(1, y_{\min}, y_{\max})$ 
9:      $z_t \sim \text{Uniform}(1, z_{\min}, z_{\max})$ 
10:     $d_t \sim \text{Lognormal}(1, \mu, \sigma)$ 
11:     $p \leftarrow \frac{ae^{-by_t}}{ae^{-by_{\min}}}$ 
12:    if  $p < \text{Uniform}(1, 0, 1)$  then ▷ Ausdünnungsphase
13:      continue
14:    else
15:      for  $i \leftarrow 1, c$  do
16:         $m \leftarrow \sqrt{(x[i] - x_t)^2 + (y[i] - y_t)^2 + (z[i] - z_t)^2}$ 
17:        if  $\left( b \leftarrow \left( m \leq \left( \frac{d[i]}{2} + \frac{d_t}{2} \right) \right) \right)$  then
18:          break
19:        end if
20:      end for
21:      if  $b = \text{false}$  then
22:         $x[c] \leftarrow x_t, \quad y[c] \leftarrow y_t, \quad z[c] \leftarrow z_t$ 
23:         $d[c] \leftarrow d_t$ 
24:         $c \leftarrow c + 1$ 
25:      end if
26:    end if
27:  end while
28:  return  $x, y, z, d$ 
29: end procedure

```

---

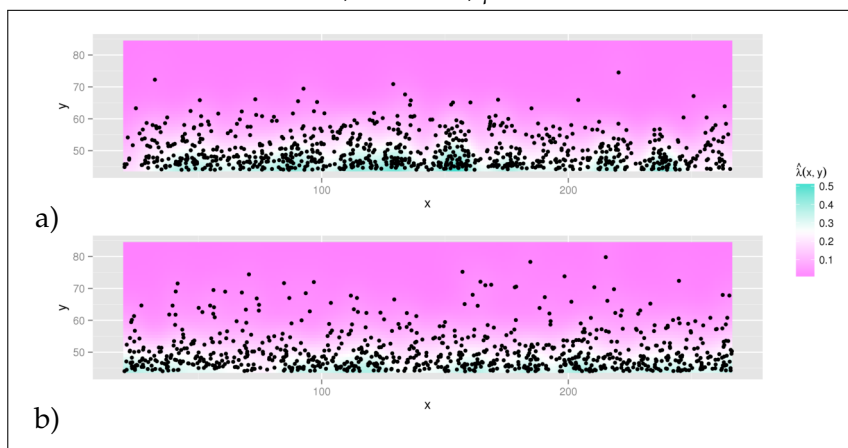
wird nun solange wiederholt, bis  $n$  Punkte im Muster sind. Allerdings wird so nicht berücksichtigt, dass ein Defekt für sehr kleine Abstände keine Nachbarn haben kann, da jeder Defekt einen individuellen Durchmesser hat und diese sich nicht überlappen können. Dieser Fall wird im Algorithmus in Zeile 15 bis 19 behandelt, indem für jeden Defekt mit Durchmesser  $d_t$  überprüft wird, ob in der Umgebung seiner finalen Position bereits ein anderer Defekt liegt, so dass es zu einer Überlappung kommt. Ist dies der Fall, wird der Defekt ebenfalls verworfen und der Algorithmus fortgesetzt. Man beachtet, dass die resultierenden Positionen der Defekte bei Verwendung dieses Kriteriums nicht mehr unabhängig voneinander sind. Allerdings tritt der Fall einer Überlappung zweier Defekte bei den in der vorliegenden Arbeit verwendeten Dimensionen so selten auf, dass in der Praxis kein messbarer Einfluss festgestellt werden kann.

Algorithmus 7 wurde speziell für den in Abschnitt 6.2.1 beschriebenen Fall angegeben, bei der der Intensitätsverlauf exponentiell in  $y$ -Richtung zur Oberfläche der Stahlprobe zunimmt. In der praktischen Implementierung können für die Intensitätsfunktion aber beliebige Wahrscheinlichkeitsdichten eingesetzt werden. Wird keine Intensitätsfunktion angegeben, erfolgt die Simulation eines klassischen homogenen PPP.

*Generische Variante*

In Abbildung 32 wird das beobachtete Punktmuster aus dem vorherigen Abschnitt in der Schnittebene  $z = 10$  in einem Fenster  $W = [20, 266] \times [44, 84] \times [5, 25]$  mm mit einem simulierten Punktmuster gleicher Abmessung gegenübergestellt. Die logarithmische Nor-

**Abbildung 32.:** Schätzung der Intensitätsfunktion  $\lambda(x, y)$  in der Schnittebene  $z = 10$  mm des beobachteten Punktmusters in Abbildung a) und des simulierten Punktmusters in Abbildung b) in einem Fenster mit Abmessung  $[20, 266] \times [44, 84] \times [5, 25]$  mm. Die Parameter des simulierten Punktmusters betragen dabei  $\lambda = 0.0453$ ,  $a = 28840.3$ ,  $b = 0.146$ ,  $\mu = 4.931$  und  $\sigma = 0.455$ .



malverteilung wurde mittels der in Abbildung 17 durchgeführten Punktschätzung mit  $\mu = 4.932$  und  $\sigma = 0.383$  parametrisiert. Für die Intensität und die Parameter der Exponentialverteilung wurden hingegen jeweils der Mittelwert der A-posteriori Mittelwerte der Teilfenster aus Tabelle 12, also  $\lambda = 0.0453$  und die in Abbildung 23 beschriebenen Parameter  $a = 28840.3$  und  $b = 0.146$  verwendet. Der Anteil der Defekte, die auf Grund von Kollisionen bei der Simulation verworfen werden mussten, betrug 0.26 % der Gesamtanzahl. Insgesamt besitzt das finale Punktmuster  $n = 8060$  Defekte. Wie man in Abbildung 32 sehen kann, ist kein großer Unterschied, von der Untersegmentierung an den Sensorkanten einmal abgesehen, zwischen dem beobachteten und simulierten Punktmuster auszumachen. Sowohl das beobachtete als auch das simulierte Punktmuster werden in dem nachfolgenden Abschnitt dazu verwendet, unterschiedliche Fräszszenarien zu evaluieren.

*Anwendungsbeispiel*

#### 6.4 EVALUATION VERSCHIEDENER FRÄSSZENARIEN

In diesem Abschnitt sollen nun anhand von simulierten Daten, die mittels des Algorithmus 7 generiert wurden, verschiedene Frässzenarien untersucht werden. Insbesondere der Einfluss verschiedener Spanabnahmen auf die Schätzung der Parameter der Durchmesser-Verteilung ist dabei von Interesse. Aber auch die Frage soll beleuchtet werden, ab wann genügend Material abgefräst wurde, um eine statistisch sichere Aussage über die Qualität der Bramme zu treffen.

##### 6.4.1 Optimierung der Spanabnahme

*Vorgehensweise*

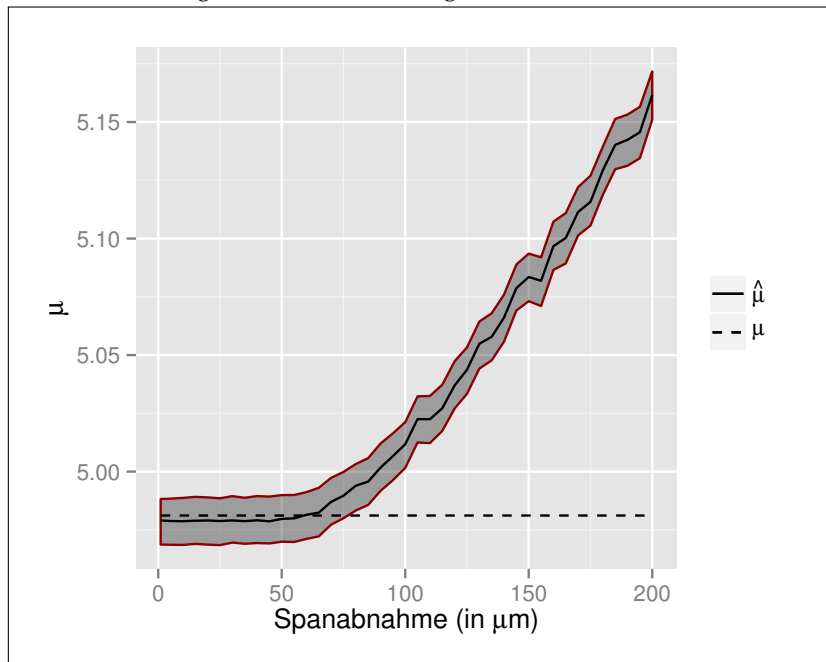
Um den Einfluss der Spanabnahme auf die Parameterschätzung bestimmen zu können, wird wie folgt vorgegangen. Zunächst wird eine Probe mit den in Abbildung 32 verwendeten Parametern generiert. Diese Probe wird dann verwendet, um verschiedene Fräsdurchläufe mit verschiedenen Spanabnahmen durchzuführen. Konkret wird die Spanabnahme pro Durchlauf in einem Intervall von  $[5, 200]\mu\text{m}$  um  $5\mu\text{m}$  erhöht. Die Ober- und Untergrenzen des Intervalls entsprechen dabei in etwa den minimalen beziehungsweise maximalen Betriebsparametern der realen Fräse. Für jeden Durchlauf wird dann eine Schnittebene im Abstand der aktuell gewählten Spanabnahme in  $z$ -Richtung durch den simulierten Stahlblock geschoben und die Durchmesser der Schnittkreise zwischen der Ebene und den geschnittenen Defekten bestimmt. Das Volumen der einzelnen Defekte ergibt sich durch Aufsummieren der Flächeninhalte der einzelnen Schnittkreise multipliziert mit der aktuell verwendeten Spanabnahme. Dieses als Cavalieri-Schätzer bezeichnete Verfahren ist ein erwartungstreuer Schätzer für das Volumen [10, S. 63 ff.]. Aus dem Volumen wird dann der Durchmesser der als kugelförmig angenommenen Defekte berechnet. Auf diese Weise wird also das in Abschnitt 4.2 beschriebene Verfahren simuliert, wobei Artefakte durch Diskretisierung bei der Bildaufnahme oder Segmentierung außen vorgelassen werden. In einem letzten Schritt erfolgt dann für jeden der 40 Simulationsdurchläufe die Berechnung der A-posteriori Verteilung der Durchmesser. Diese werden dann gegen Verteilungsparameter, die zur Simulation der Ausgangsprobe verwendet wurden, verglichen.

*Auswertung*

Abbildung 33 zeigt das Ergebnis für den Mittelwert  $\mu$  der logarithmischen Normalverteilung der Durchmesser. Dabei wurde der Mittelwert der A-posteriori Verteilung  $\hat{\mu}$  als schwarze Linie und das HDI als grau-rot begrenzter Bereich gegen die Spanabnahme aufgetragen. Zusätzlich wurde der Parameter  $\mu = 4.931$ , der zur Simulation des Punktmusters verwendet wurde, als schwarz-gestrichelte Linie eingezeichnet. Man kann deutlich erkennen, dass bei einer Spanabnah-



**Abbildung 33.:** Mittelwert  $\hat{\mu}$  als schwarze Linie und das HDI der A-posteriori Verteilung als grau-rot begrenzter Bereich aufgetragen gegen die Spanabnahme. Zusätzlich wurde der Parameter  $\mu = 4.931$  der Simulation als schwarzgestrichelte Linie eingezeichnet.



me im Bereich zwischen 5 und ca. 65  $\mu\text{m}$  der wahre Parameter vom HDI der A-posteriori Verteilung eingeschlossen wird. Erst für größere Spanabnahmen kommt es zu einer stetigen Überschätzung des Parameters, so dass sich dieser immer weiter vom wahren Wert entfernt. Dies liegt daran, dass Defekte mit kleinerem Durchmesser als die eingestellte Spanabnahme mit zunehmender Spanabnahme immer häufiger übersprungen werden, ohne dass sie von der Schnittebene getroffen werden. Die fehlenden Informationen auf der linken Seite der Verteilung führen dann dazu, dass der Mittelwert  $\mu$  immer größer wird. Für die simulierte Probe sind aber weniger als 1 % der Defekte kleiner als 50  $\mu\text{m}$  und somit haben Spanabnahmen kleiner als 50  $\mu\text{m}$  nur einen sehr kleinen Einfluss auf die Schätzung der Verteilungsparameter. Die Konsequenz daraus ist, dass Proben mit ähnlichen Verteilungseigenschaften wie die Simulierte mit einer Spanabnahme bis zu 50  $\mu\text{m}$  gefräst werden können, ohne die Schätzung der Verteilungsparameter stark zu verfälschen.

#### 6.4.2 Abbruchkriterium

Eine weitere Möglichkeit, den Fräsvorgang zu optimieren, besteht in der Einführung eines Abbruchkriteriums. Dieses wird parallel zum

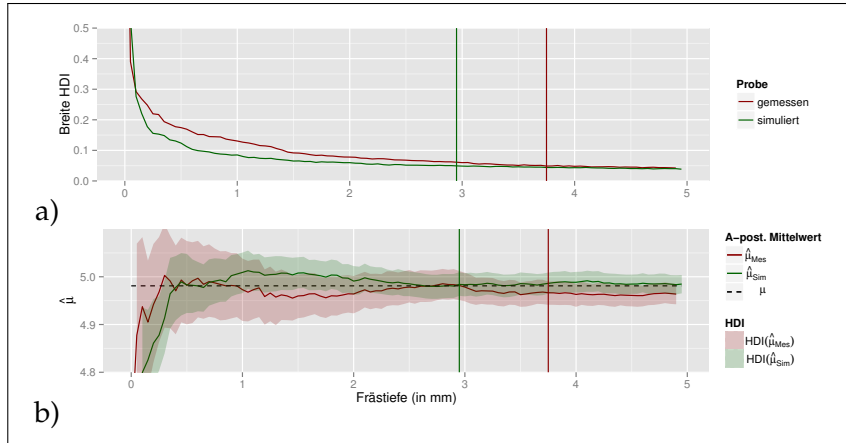
*Vorgehensweise*

Fräsvorgang überwacht und löst, sobald es erfüllt ist, ein Stoppsignal aus. Wie bereits in Abschnitt 3.2.2 erwähnt, wird die Breite des HDIs als konkretes Kriterium verwendet. Diese gibt an, wie unsicher die Parameterschätzung der Durchmesser-Verteilung bei der bis zum aktuell betrachteten Zeitpunkt erhobenen Datenmenge ist. Parallel zum Fräsprozess werden also für alle vollständig abgefrästen Defekte mittels MCMC-Verfahren die A-posteriori Verteilung der Parameter der logarithmischen Normalverteilung erhoben und das HDI berechnet. Sobald eine vorgegebene Zielbreite des HDIs erreicht ist, wird der Fräsvorgang angehalten. Abschließend kann dann mittels des posteriori-prädiktiven Tests überprüft werden, ob die erhobenen Daten wirklich zu dem parametrisierten Modell passen. Ist dies der Fall, werden die Daten archiviert. Andernfalls muss ein Experte entscheiden, warum es zu den Abweichungen gekommen ist. In jedem Fall muss die vorgegebene Zielbreite des HDIs im Vorhinein für die verschiedenen Stahlsorten kalibriert werden. Dazu müssen natürlich schon entsprechende Erfahrungswerte vorliegen. Da dies zum Zeitpunkt des Erstellens dieser Arbeit nicht der Fall war, wird im Folgenden das Abbruchkriterium anhand von simulierten Daten evaluiert. Dabei wird wie folgt vorgegangen. Wie schon in Abschnitt 6.4.1 beschrieben, wird eine Schnittebene mit vorgegebener Spanabnahme durch die simulierte Bramme getrieben und für jeden Schnitt die Menge der vollständigen Defekte (siehe Abschnitt 2.1.2.3) bestimmt. Für diese wachsende Liste von Defekten wird dann nach jedem Schnitt das Abbruchkriterium evaluiert. Zusätzlich zu der simulierten Probe wird das Abbruchkriterium auch für die Ausgangsprobe aus Abbildung 32 a) evaluiert, auf deren Basis die simulierte Probe parametrisiert wurde. Als Spanabnahme wurde eine Breite von  $10\ \mu\text{m}$  gewählt, da die Ausgangsprobe mit dieser Einstellung gefräst wurde.

*Auswertung*

Abbildung 34 zeigt die Auswertung des Abbruchkriteriums beider Proben für den Parameter  $\mu$  der logarithmischen Normalverteilung. In Abbildung 34 a) sind jeweils die Breiten der HDIs, berechnet aus den A-posteriori Verteilungen für alle vollständig abgefrästen Defekte bei einer Spanabnahme von  $10\ \mu\text{m}$  gegen die Frästiefen in mm für die simulierte Probe und die gemessene Probe aufgetragen. Wie zu erwarten, nimmt die Breite mit zunehmender Frästiefe ab, da immer mehr Defekte in die Schätzung der A-posteriori Verteilung einfließen. Wird als Zielbreite des HDIs  $h = 0.05$  gewählt, wird das Abbruchkriterium für die simulierte Probe bei 2.95 mm und für die gemessene Probe bei 3.75 mm ausgelöst. In der Abbildung ist das Auslösen des Abbruchkriteriums durch senkrechte Striche parallel zur  $y$ -Achse in der entsprechenden Farbe der jeweiligen Probe eingezeichnet. Um zu bewerten, wie sich das vorzeitige Abbrechen auf den geschätzten Parameter  $\hat{\mu}$  der logarithmischen Normalverteilung auswirkt, wurde in Abbildung 34 zusätzlich das HDI und der Mittelwert der A-posteriori Verteilung für die simulierte Probe, bezeichnet als  $\hat{\mu}_{Sim}$ , und für die

**Abbildung 34.:** a) Breite des HDIs für die gemessene Probe als rote Linie und für die simulierte Probe als grüne Linie aufgetragen gegen die Frästiefe, b) A-posteriori Mittelwert von  $\hat{\mu}$  und das HDI für die gemessene (rote Linie) und simulierte Probe (grüne Linie) gegen die Frästiefe aufgetragen.



gemessene Probe, bezeichnet als  $\hat{\mu}_{Mes}$ , gegen die Frästiefe aufgetragen. Als wahrer Wert für  $\mu$  wurde schließlich der Mittelwert der A-posteriori Verteilung der gemessenen Probe nach vollständigem Abfräsen mit  $\mu = 4.931$  angenommen und als gestrichelte Linie eingezeichnet. Dieser Wert wurde ebenfalls zur Parametrisierung der simulierten Probe verwendet, stellt also für diese den wahren Wert von  $\mu$  dar. Wird das Abbruchkriterium ausgelöst, ergibt sich für die simulierte Probe an der Stelle 2.95 mm ein Wert für die Schätzung des Parameters  $\mu$  von  $\hat{\mu}_{Sim} = 4.984$  und für die gemessene Probe an der Stelle 3.75 mm ein Wert von  $\hat{\mu}_{Mes} = 4.966$ . In beiden Fällen liegt die Abweichung vom wahren Wert also unter 5% bei gleichzeitiger Reduktion von 2000 auf unter 400 zu fräsenden Schichten für die aus Abbildung 32 verwendeten Maße.

Diese Auswertungen haben natürlich nur exemplarischen Charakter, da nicht genügend Probenmaterial vorhanden war, um das Abbruchkriterium ausreichend zu kalibrieren. Um das Abbruchkriterium in den realen Prozess integrieren zu können, sind folgende Schritte notwendig. Zunächst muss eine Datenbank aufgesetzt werden, in der sowohl die Schwerpunkte als auch die mittleren Breiten aller rekonstruierter Defekte der jeweils bearbeiteten Proben nach entsprechender Klassifizierung gespeichert werden. Dann müssen die Proben bezüglich der Stahlgüte gruppiert werden, da die Vermutung nahe liegt, dass unterschiedliche Stahlsorten auch unterschiedliche Verteilungsparameter besitzen. In diesen Gruppen werden dann mittels der in Abschnitt 6.1.4 eingeführten hierarchischen Modelle die Parameterintervalle in Form des HDIs, sowohl für die Größenverteilung als auch für die räumliche Verteilung, bestimmt. Aus den HDIs lassen

sich Zielbreiten für jede Stahlsorte ableiten, die als Abbruchkriterium für zukünftige Fräsvorgänge verwendet werden. Wird ein zukünftiger Fräsvorgang abgebrochen, wird überprüft, ob die ermittelten Parameter in dem Gruppen-HDI der jeweiligen Stahlsorte liegen und ob die neu erhobenen Daten zu den Modellannahmen passen. Für letzteres werden wieder die in Abschnitt 3.2.3 und 3.3.4 eingeführten Teststatistiken verwendet. Falls es schließlich zur Modellverletzung kommt, muss ein Experte zu Rate gezogen werden.

## 6.5 ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Kapitel wurde gezeigt, wie anhand der in Kapitel 3 eingeführten Methoden stochastische Modelle sowohl für die räumliche Verteilung als auch für die Durchmesser-Verteilung von Defekten in Stahl entwickelt, parametrisiert und validiert werden können. Konkret hat sich dabei herausgestellt, dass die Defektdurchmesser der logarithmischen Normalverteilung folgen, während die räumliche Verteilung adäquat durch einen PPP mit exponentieller Intensitätsfunktion in  $y$ -Richtung beschrieben werden kann. Die rigorose Verwendung von bayesschen Methoden zur Parameterschätzung erlaubt dabei, zukünftig erworbenes Wissen in Form einer geeigneten A-priori Verteilung zu modellieren. Da zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Arbeit keine Erfahrungswerte über die Parameter vorlagen, wurden lediglich uninformierte A-priori Verteilungen verwendet. Beide Modelle wurden dann in einem Algorithmus zusammengefasst, der die Generierung von synthetischen Stahlproben erlaubt. Anhand von solchen simulierten Proben konnten dann verschiedene Frässzenarien und ein automatisches Abbruchkriterium evaluiert werden. Exemplarisch ließ sich zeigen, dass unter den drei Annahmen, nämlich die Durchmesser der Defekte sind logarithmisch normalverteilt, die räumliche Verteilung folgt einem PPP und die Form der Defekte sind annähernd kugelförmig, die Anzahl der zu fräsenden Schichten um ca. das 5fache reduziert werden kann, ohne dass der Fehler zum wahren Wert des Parameters 5% überschreitet. Dieses Ergebnis konnte auch anhand von real gefrästen Proben nachvollzogen werden.

Alle Auswertungen in diesem Kapitel wurden nur exemplarisch für wenige Proben durchgeführt und erheben nicht den Anspruch, statistisch gesicherte Aussagen über die Qualität der untersuchten Stahlsorten zu treffen. Vielmehr sollte verdeutlicht werden, wie das in der vorliegenden Arbeit entwickelte theoretische Rahmenwerk eingesetzt werden kann, um den gesamten Prozess von der Modellbildung bis hin zur Modellvalidierung zu unterstützen. Um wirklich gesicherte statistische Aussagen zu treffen, müssen die vorgestellten Auswertungen für eine Vielzahl von Proben unterschiedlichster Güte durchgeführt werden. Erst dann kann das in Abschnitt 6.4.2 vorgestellte

Abbruchkriterium kalibriert werden. Dies war zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Arbeit nicht möglich, da nicht genügend Probandaten vorlagen. Im nächsten Kapitel wird gezeigt, wie die Methoden des Rahmenwerks zu einem kompletten Auswertesystem integriert werden können. Mit diesem ist es dann möglich, autonom Proben zu verarbeiten und das Abbruchkriterium sowie die Klassifikation der Defekte zu kalibrieren.



## IMPLEMENTATION

---

In diesem Kapitel sollen die in Kapitel 2 und 3 eingeführt Methoden zu einem vollständigen Analysesystem für Partikelsysteme integriert werden. Dabei lässt sich dieses System grob in zwei Teilsysteme zerlegen. Der erste Teil umfasst die bereits in Abschnitt 4.2 für den Anwendungsfall zur Detektion von Defekten in Stahl grob beschriebene Verarbeitungspipeline. Die einzelnen Komponenten sowie deren Implementierung sollen nun genauer erläutert werden. Hauptaugenmerk liegt dabei auf den morphologischen und statistischen Analysekomponenten, welche die dreidimensionale Rekonstruktion, Klassifikation und Parameterschätzung der stochastischen Modelle sowie die Evaluierung des Abbruchkriteriums durchführen. Auf die Bildaufnahme und Bildsegmentierung wird an dieser Stelle nicht eingegangen, sondern auf die entsprechende Literatur verwiesen [18, 21]. Das System wird als Particle Detection System (PDS) bezeichnet.

Das zweite große Teilsystem ist eine interaktive Auswertesoftware, welche es erlaubt, explorative Analysen auf den erhobenen Daten anzuwenden. Dieses wurde parallel zum PDS entwickelt und dazu verwendet, den Modellbildungsprozess des Anwendungsfalles zu unterstützen. So wurden beispielsweise alle statistischen Auswertungen aus Kapitel 6 mittels dieser Software durchgeführt. Auch für die Sichtprüfung der Klassifikationsergebnisse wurde diese Software verwendet. Zwar erfolgte die Entwicklung mit Blick auf den konkreten Anwendungsfall, die Umsetzung wurde aber so allgemein gehalten, dass auch Datensätze aus anderen Anwendungsfällen analysiert werden können. Das System wird als Particle Analysis System (PAS) bezeichnet.

### 7.1 PARTICLE DETECTION SYSTEM

Das PDS hat die Aufgabe, in segmentierten Schichtbildern Partikel zu detektieren, zu rekonstruieren und statistisch auszuwerten. Dafür werden die Schichtbilder sukzessiv übereinander gelegt und die Partikel mit dreidimensionaler Ausdehnung in den Schichten verfolgt. Sobald ein Partikel vollständig abgefräst wurde, also in der aktuellen Schicht kein Profil mehr erkennbar ist, wird es zu einem dreidimensionalen Modell zusammengesetzt und die Formdeskriptoren

*Funktionalität PDS*

über dieses Modell werden berechnet. Anhand dieser Formdeskriptoren erfolgt dann die Klassifikation. Der klassifizierte Datensatz kann entsprechend gefiltert werden, um beispielsweise Artefakte oder störende Einzelereignisse zu beseitigen. Mit dem gefilterten Datensatz werden schließlich die stochastischen Modelle parametrisiert und das Abbruchkriterium evaluiert. Grundsätzlich wird davon ausgegangen, dass der gesamte Prozess von Rekonstruktion, Klassifikation und statistischer Analyse parallel zur Bildaufnahme abläuft. Es liegt also kein vollständiger Datensatz vor, sondern neue Schichtbilder werden kontinuierlich parallel zur Auswertung erzeugt.

*Echtzeit*

Wie bereits in Abschnitt 2.1.3 beschrieben, muss der gesamte Prozess echtzeitfähig sein. Echtzeitfähig wurde in diesem Zusammenhang so definiert, dass alle Auswertungen der aktuellen Schicht fertig sein müssen, sobald ein neues Schichtbild aufgenommen wurde. Abhängig vom eingesetzten bildgebenden Verfahren kann sich die Zeit für die Aufnahme zweier aufeinanderfolgender Schichten stark unterscheiden. Für den Anwendungsfall aus Abschnitt 4.2 ergeben sich ca. 30 s. Dieser Wert soll auch in der nachfolgenden Betrachtung als Referenzwert angesehen werden, der nach Möglichkeit nicht überschritten werden soll.

*Architektur PDS*

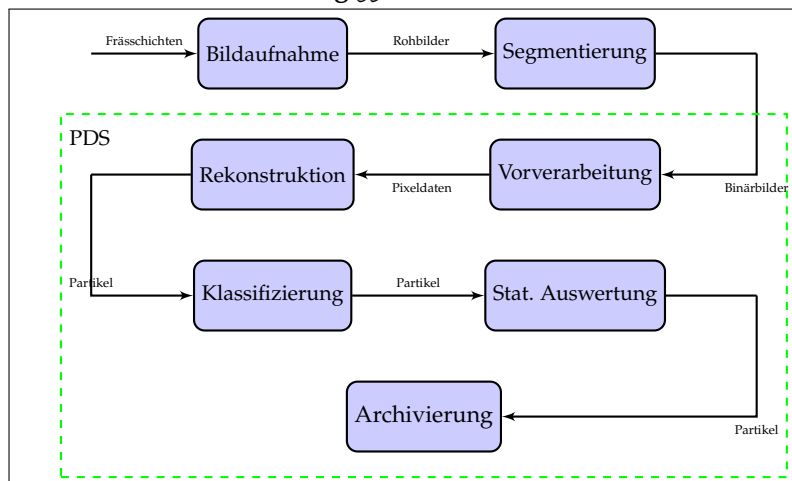
Um einen echtzeitfähigen Prozess mit einem Durchsatz von mehreren hundert Megabyte pro Schichtbild gewährleisten zu können, wurde die gesamte Verarbeitungspipeline nach dem Pipes und Filter Architekturmuster entworfen. Jede Komponente des Systems verarbeitet die Ergebnisse der vorherigen Pipeline-Stufe und leitet das Ergebnis an die nachfolgende Stufe weiter. Dabei besitzt jede Stufe eine eigene Warteschlange, in der die Ergebnisse der vorherigen Stufe zwischengespeichert werden, falls der jeweilige Verarbeitungsschritt noch nicht abgeschlossen ist. Dadurch ist es möglich, die einzelnen Komponenten unabhängig voneinander parallel auszuführen. Abbildung 35 zeigt den schematischen Aufbau der Pipeline. Der Vollständigkeit halber wurden in der Graphik auch die Bildaufnahme und die Segmentierung aufgenommen, obwohl auf diese Komponenten im weiteren Verlauf nicht eingegangen wird. Es ist lediglich darauf zu achten, dass gemäß der Definition von Echtzeit in Abschnitt 2.1.3 die Gesamtlaufzeit von Segmentierung, Rekonstruktion, Vorverarbeitung, Klassifizierung, statistischer Auswertung und Archivierung nicht größer ist als die Bildaufnahme eines Schichtbildes. Dabei wird ein eventuell vorhandener Prozess, der die Probe mechanisch verarbeitet, wie beispielsweise das Fräsen aus dem Anwendungsfall mit zur Bildaufnahme gezählt.

*Vorgehensweise  
PDS*

In den folgenden Abschnitten werden nun die Implementierung der einzelnen Komponenten und deren Laufzeitverhalten besprochen. Als Referenzprobe wird die schon in Abschnitt 2.1.3 angesprochene simulierte Probe mit höchstem Verunreinigungsgrad verwendet. Die



Abbildung 35.: Aufbau des PDS.



verwendete Probe wurde dabei mit Algorithmus 7 simuliert. Um allerdings die Verarbeitungspipeline ab der Vorverarbeitungstufe testen zu können, werden segmentierte Schichtbilder benötigt. Diese wurden wie folgt aus der simulierten Probe gewonnen. Mit der eingestellten Frästiefe von  $10\ \mu\text{m}$  wurde eine Schnittebene durch die Probe getrieben und alle Schnittkreise der getroffenen Partikel durch die größte Menge an Pixeln approximiert, die komplett im jeweiligen Schnittkreis liegen. Für die Größe eines Pixels wurde dabei  $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$  angenommen. Schicht für Schicht wurden dann alle Pixel aller getroffenen Partikel in Form von Rohbildern auf der Festplatte gespeichert. Bei einer Probe mit Standardabmessung beträgt die Größe eines auf diese Weise generierten Bildes ca. 350 MB. Die auf diese Weise diskretisierte Version der simulierten Probe wird im Folgenden zur empirischen Analyse der Laufzeit der einzelnen Pipelineinstufen verwendet. Das Ziel dabei ist es herauszufinden, ob zumindest für den Anwendungsfall die Verarbeitungspipeline schnell genug ist, um einen Echtzeitbetrieb gewährleisten zu können.

### 7.1.1 Pipeline Stufen

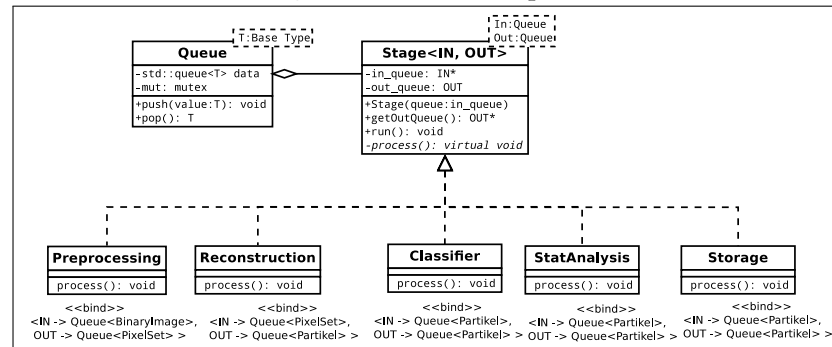
Basisdatentyp der Verarbeitungspipeline ist eine generische Klasse `Stage`. Jede spezifische Komponente der Pipeline ist als Spezialisierung dieser Klasse implementiert. Die `Stage`-Klasse besitzt zwei Attribute, nämlich einen Zeiger auf eine Warteschlange für eingehende Daten, bezeichnet als `inQueue` und eine Instanzvariable `outQueue`, in der die Ergebnisse der jeweiligen Pipeline-Stufe gespeichert werden. Dabei sind beide Attribute vom generischen Datentyp `Queue`, welcher eine thread-sichere Implementierung einer Warteschlange auf Basis der Standard Template Library (STL) von C++

*Stage*

Warteschlange

ist. Zwei Standardoperationen werden von Queue angeboten. Mittels `push` wird ein Datenobjekt vom Typ  $T$  in die Warteschlange einge-reiht. Mittels `waitAndPop` wird das vorderste Element der Schlan-ge hingegen entfernt und an den Aufrufer zurückgegeben. Ist die Warteschlange beim Aufruf von `waitAndPop` leer, legt der aufrufen-de Thread sich solange schlafen, bis ein neues Element mittels `push` eingefügt wird und gibt dieses dann zurück. Abbildung 36 zeigt bei-de Klassen in Unified Modeling Language (UML)-Notation. Wie man

Abbildung 36.: Aufbau der Pipeline Stufen.



erkennen kann, besitzt `Stage` zusätzlich noch einen öffentlichen Kon-  
struktor, mit dem der Zeiger `inQueue` initialisiert wird. Schließlich  
existiert noch eine öffentliche Methode namens `getOutQueue`, wel-  
che einen Zeiger auf `outQueue` zurückliefert. Damit ist der minima-  
le Funktionsumfang vorhanden, um verschiedene Pipelinestufen zu  
einer kompletten Verarbeitungspipeline zu verbinden. Dabei wird im-  
mer die Warteschlange mit den Ergebnissen `outQueue` einer Instanz  
von `Stage` per `getOutQueue` an den Konstruktor von `Stage` der neuen  
Instanz übergeben. Die neu angelegte Instanz ist nun mit der alten In-  
stanz verbunden, wobei die Verarbeitungsergebnisse der ersten Stufe  
die Eingaben für die zweite Stufe sind. Wie man in Abbildung 35  
sieht, können sich die Typen der Elemente, die in den Warteschlan-  
gen gespeichert sind, zwischen Eingabe und Ausgabe unterscheiden.  
So nimmt beispielsweise die Rekonstruktions-Stufe Pixeldaten entge-  
gen und leitet fertig rekonstruierte Partikel an die nächste Stufe wei-  
ter. Aus diesem Grund ist die `Stage`-Klasse eine Template-Klasse mit  
zwei Template-Parametern, mit denen die Typen von `inQueue` und  
`outQueue` festgelegt werden. Für jede der Stufen der Pipeline wird  
eine eigene Klasse implementiert, welche von `Stage` erbt und entspre-  
chend Template-Parameter Substitution vornimmt. In Abbildung 36  
ist dies beispielhaft für die 5 Stufen des PDS aus Abbildung 35 gezeigt  
(englische Namen verwendet). Die Template-Parameter Substitution  
ist dabei durch die in UML gängige Bind-Notation symbolisiert. Zwar  
ist damit der Datenfluss zwischen den einzelnen Stufen der Pipeline  
modelliert, allerdings fehlt der eigentliche Verarbeitungsschritt. Dieser  
wird mittels des klassischen Entwurfsmusters der Template-Methode

Datenfluss PDS

von Gamma u. a. [42, S. 360 ff.] umgesetzt. Die Basis-Klasse besitzt eine als privat markierte abstrakte Methode `process`, die von der öffentlichen `run` Methode aufgerufen wird. Die abgeleiteten Klassen von `Stage` implementieren nun die abstrakte Methode `process`, so dass die entsprechende Transformation von den Eingabedaten hin zu den Ausgabedaten durchgeführt wird. Aufgerufen wird die `run`-Methode jeder Stufe in einem eigenen Thread, so dass langsame Stufen im hinteren Teil der Pipeline nicht schnellere Stufen im vorderen Teil blockieren.

*Template-Methode*

Insgesamt besitzt diese Architektur mehrere Vorteile. Zum einen lässt sich die Pipeline sehr einfach fast beliebig verändern, solange die Datentypen der Ein- und Ausgabewarteschlange übereinstimmen. Soll beispielsweise ein Zwischenergebnis festgehalten werden, muss lediglich eine entsprechende Spezialisierung von `Stage` implementiert werden, welche den Eingabedatenstrom unverändert an die Ausgabe kopiert. In der `process`-Methode wird dann die entsprechende Protokollierung, zum Beispiel in eine Datenbank, vorgenommen. Zum anderen können einzelne Stufen genauso einfach aus der Pipeline entfernt werden, wenn man an deren Ergebnis nicht interessiert ist. Da die einzelnen Pipeline-Stufen nur sehr lose über die Warteschlange `Queue` gekoppelt sind, können die Stufen schließlich ohne größere Anpassung auf mehrere Rechner im Netzwerk verteilt werden. Eine Anpassung der `Stage`-Klasse ist dafür nicht notwendig, lediglich die Methoden von `Queue` müssen netzwerkfähig gemacht werden. Im Folgenden werden nun die einzelnen Stufen der Pipeline aus Abbildung 35 besprochen, die als Spezialisierung der `Stage`-Klasse implementiert sind.

*Vorteile PDS*

### 7.1.2 Vorverarbeitung

Die Vorverarbeitung bildet die Schnittstelle zwischen den bilderverarbeitenden Systemen und dem PDS. Üblicherweise werden hier die segmentierten Daten in ein für das PDS lesbares Format konvertiert. Dabei werden nur noch Pixel, die während der Segmentierung als zugehörig zu einem Partikel identifiziert wurden, gespeichert. Alle anderen Pixel werden verworfen, was zu einer drastischen Reduktion der Datenmenge führt. Wie in Abschnitt 2.1.2.3 beschrieben, ist das Übergabeformat als eine lexikographisch sortierte Menge der Pixelkoordinaten definiert, wobei zusätzlich die Schichtnummern als z-Koordinate gespeichert werden. Werden die Pixel aus Schichtbildern gelesen, ist die Sortierung implizit gegeben. Aus diesen Voxelmengen werden dann mittels des OZP-Algorithmus (siehe Abschnitt 2.1.2.3) disjunkte Teilmengen bestimmt, die als dreidimensionale Rekonstruktion der Partikel interpretiert werden. Abhängig davon, wie die Bilder

*Reduktion*

*Sortierung*

*Laufzeit  
Vorverarbeitung*

an das PDS übergeben werden, kann das Konvertieren der Daten unterschiedlich aufwändig sein. Für den Anwendungsfall aus Abschnitt 4.2 wurden drei unterschiedliche Szenarien vorgesehen und jeweils als austauschbare Pipeline-Stufe implementiert. Unterstützt wird die Übergabe über das Netzwerk, über das Dateisystem oder direkt im Arbeitsspeicher. Für die simulierte Probe werden zum Laden eines Schichtbildes von der Festplatte, Identifizieren der zu einem Partikel zugehörigen Pixel und der lexikographischen Sortierung im Mittel über alle Schichtbilder ca. 1524 ms pro Bild benötigt. Die Geschwindigkeit lässt sich weiter steigern, wenn das Bild von der Segmentierungstufe direkt über den Arbeitsspeicher an die Vorverarbeitung weitergeleitet wird. Bei Übergabe über das Netzwerk ist die Bandbreite der limitierende Faktor. Die Laufzeit der Vorverarbeitungsstufe wird somit inklusive eines Sicherheitspuffers auf  $T_{Prep} = 2000$  ms spezifiziert.

### 7.1.3 *Rekonstruktion*

*Laufzeit  
Rekonstruktion*

Die Rekonstruktionsstufe wurde bereits ausführlich im Rahmen des Abschnittes 2.1.2 besprochen. Der OZP (Algorithmus 3) wird in dieser Stufe verwendet, um die Partikel aus den Schichtbildern zu rekonstruieren. Sobald ein Partikel vollständig rekonstruiert wurde, wird es an die nächste Stufe der Pipeline weitergereicht. Die Laufzeit dieser Stufe wurde bei gegebener Hardware mit  $T_{Ccl} = 7000$  ms (siehe Abschnitt 2.1.3) spezifiziert. Wenn die statistische Analyse parallel zum Bildgewinnungsverfahren nicht benötigt wird und die Schichtbilder vor Beginn der Analyse bereits vollständig vorliegen, kann der Algorithmus durch einen anderen in Abschnitt 2.1.2 beschriebenen ausgetauscht werden. Für den ZP und PZP wurde jeweils eine eigene Pipeline-Stufe implementiert.

### 7.1.4 *Klassifikation*

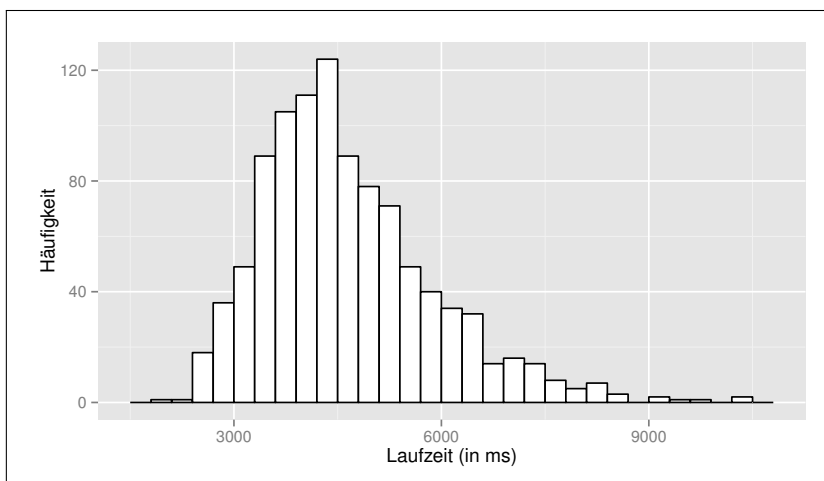
*Deskriptoren*

Um die vollständig rekonstruierten Partikel klassifizieren zu können, müssen zunächst die in Abschnitt 2.2 beschriebenen Formdeskriptoren berechnet werden. Die Berechnung der einzelnen Deskriptoren wird in dieser Pipelinestufe durchgeführt. Dabei wird sequentiell jeder Algorithmus zur Berechnung des spezifischen Deskriptors auf die vollständig abgefrästen Partikel aus der Warteschlange angewendet. Bei harten Echtzeitanforderungen lässt sich dieser Vorgang parallelisieren, da die einzelnen Algorithmen unabhängig voneinander laufen. So können für ein Partikel gleichzeitig mehrere Algorithmen, am besten abgestimmt auf die physikalische Anzahl der Prozessoren, berechnet werden. Abhängig von dem konkreten Klassi-

fizierungsproblem sind bestimmte Deskriptoren besser geeignet als andere. Für den Anwendungsfall wurden in Abschnitt 5.3 ausführliche Untersuchungen durchgeführt und der optimale Deskriptorsatz bestimmt, mit dem eine Klassifizierung zwischen globularen Defekten, Rissen und Artefakten sowie nichtmetallischen Einschlüssen und Poren möglich ist. Berechnet man also nur diesen optimalen Deskriptorsatz, lässt sich die Laufzeit der Pipelinestufe weiter verbessern. In der folgenden Betrachtung sollen allerdings alle Deskriptoren aus Abschnitt 2.2 berücksichtigt werden, um die Laufzeit  $T_{Clas}$  dieser Stufe abzuschätzen. Verwendet man wieder die simulierte Probe mit einem hohen Verunreinigungsgrad, die im Vergleich zu allen bisher real beobachteten Daten extreme Werte für Intensität und die Parameter der logarithmischen Normalverteilung aufweist, werden im Mittel pro Schicht 9.23 Partikel bei einer Standardabweichung von 3 als vollständig abgefräst identifiziert. Da das Worst-Case Szenario untersucht werden soll, wird die Anzahl der vollständig abgefrästen Partikel pro Schicht auf 19 festgelegt. Dies entspricht aufgerundet bei gegebener Konfiguration einer Abweichung von mehr als drei Standardabweichungen vom Mittelwert und kommt nur in weit unter 1 % der Fälle vor. Um die Laufzeit  $T_{Clas}$  zu schätzen, werden nun 19 Partikel zufällig aus der Probe gezogen und die Laufzeit der Berechnung der Deskriptoren und die Klassifizierung mittels einer bereits antrainierten SVM gemessen. Diese Messung wird über 1000 Durchgänge gemittelt, was der Anzahl der zu fräsenden Schichten entspricht. Abbildung 37 zeigt das Histogramm mit Intervallbreite  $h = 300$  ms der Laufzeiten für die Berechnung der Formdeskriptoren und Klassifikation. Es ist nicht überraschend, dass das Histogramm die Form

*Laufzeit*  
*Klassifikation*

**Abbildung 37.:** Laufzeiten der Deskriptorberechnung und der Klassifikation als Histogramm mit Intervallbreite  $h = 300$  ms für 1000 Schichten.



der logarithmischen Normalverteilung hat, da der Durchmesser der einzelnen Partikel direkt mit der Laufzeit der Formdeskriptoren kor-

reliert. Die maximale Laufzeit, die für eine Schicht benötigt wurde, beträgt 10 410 ms und wird als maximale Laufzeit  $T_{Clas}$  dieser Pipelinestufe festgelegt. Dabei ist zu beachten, dass dieser Wert die extreme Laufzeit bei einer simulierten Probe mit extremen Verteilungsparametern widerspiegelt. Für real erhobene Daten wird der Wert im Durchschnitt weit niedriger sein.

### 7.1.5 Statistische Auswertung

*Bibliothek Rcpp*

*Laufzeit*

In dieser Stufe werden die klassifizierten Partikel statistisch ausgewertet und das Abbruchkriterium evaluiert. Dafür wird in den Prozess der Pipeline eine Instanz der Statistiksoftware R<sup>1</sup> eingebettet. Die Berechnung der statistischen Auswertungen erfolgt dann in Form von R-Skripten, die für jede neue Schicht auf den bis zum aktuellen Zeitpunkt erhobenen Daten ausgeführt werden. Die Kommunikation zwischen der in C++ implementierten Pipelinestufe und der Instanz von R wird über die Rcpp-Bibliothek von Eddebuettel und Francois [37] abgewickelt. Sowohl für die Analyse der Größenverteilung als auch für die Analyse der räumlichen Verteilung sind alle Methoden aus Abschnitt 3 in Form solcher Skripte implementiert. Da aber einige Methoden, wie beispielsweise das MCMC-Verfahren zur Approximation der A-posteriori Verteilung oder die Testfunktionen für Punktprozesse, sehr rechenintensiv sind, wird in der Praxis vorerst nur das auf dem HDI basierende Abbruchkriterium evaluiert. Für den Anwendungsfall müssen dafür die Parameter des gewählten Modells, also wie in Abschnitt 6.1 beschrieben, der logarithmischen Normalverteilung, geschätzt werden. Wählt man die zur Likelihood-Funktion konjugierte A-priori Verteilung, liegt für die A-posteriori Verteilung ein geschlossener Ausdruck vor, der sich selbst für sehr große Datenmengen schnell auswerten lässt. Für die logarithmische Normalverteilung ist die Herleitung dieses Ausdruckes in Gelman u. a. [43, S. 78 ff.] beschrieben. Das HDI wird dann anhand von Stichprobenwerten berechnet, die aus der A-posteriori Verteilung gezogen wurden. Dieser Vorgang dauert selbst für mehrere Millionen Partikel nur wenige Millisekunden. Der Einfluss auf die Echtzeitfähigkeit der gesamten Pipeline kann also vernachlässigt werden. Die Laufzeit dieser Stufe wird also mit  $T_{Stat} = 0$  ms spezifiziert. Ist das Abbruchkriterium ausgewertet und das Ergebnis an die Bildaufnahmestufe propagiert, ist der echtzeitkritische Abschnitt der Pipeline für die aktuelle Schicht erfolgreich abgeschlossen. Die Ergebnisse aller nachfolgenden Operationen müssen nicht bis zum Ende der Bildaufnahme der nächsten Schicht vorliegen. Stattdessen können sich die Laufzeiten dieser Operationen über mehrere Schichten erstrecken. Alle komplexeren

<sup>1</sup> <http://www.r-project.org/>

statistischen Auswertungen werden also erst nach Evaluation des Abbruchkriteriums durchgeführt.

### 7.1.6 Archivierung

Die Archivierungsstufe stellt den letzten Abschnitt der Pipeline dar. Hier werden alle Ergebnisse, die in den anderen Stufen erhoben wurden, kanalisiert und in einem geeigneten Format auf die Festplatte geschrieben. Prinzipiell muss grob zwischen zwei verschiedenen Typen von Datensätzen mit verschiedenen Speicherstrategien unterschieden werden. Zum einen fallen die als Voxelmengen repräsentierten rekonstruierten Partikel an, die abhängig von der Größe des jeweiligen Partikels mehrere tausend Voxel pro Partikel beinhalten können. Diese Daten werden im Folgenden als Rohdaten bezeichnet. Zum anderen werden bei einem kompletten Durchlauf der Pipeline eine Vielzahl verschiedener statistischer Parameter, die sogenannten Metadaten, erhoben. Dazu gehören zum Beispiel die Formdeskriptoren, die für jedes Partikel der Probe berechnet werden, aber auch die Parameterschätzungen für die verwendeten Modelle. An beide Klassen von Daten sind unterschiedliche Anforderungen gestellt. Die Rohdaten werden hauptsächlich dafür verwendet, die Ergebnisse der statistischen Auswertung und der Klassifikation nachzuvollziehen. So kann beispielsweise mit dem in Abschnitt 7.2 vorgestellten Werkzeug ein dreidimensionales Modell der Voxelmengen erstellt und eine visuelle Inspektion des Klassifikationsergebnisses durchgeführt werden. Aller Voraussicht nach wird eine solche manuelle Inspektion aber eher selten und nur bei offensichtlichen Funktionsstörungen des Prozesses durchgeführt. Gleichzeitig müssen die Rohdaten gegebenenfalls mehrere Jahre abrufbar sein, um bei zweifelhaften Ergebnissen der statistischen Auswertung diese wiederholen zu können. Das Datenformat sollte also in Hinblick auf den Speicherverbrauch und nicht auf die Zugriffszeit optimiert werden. Anders sieht es bei den Metadaten aus. Diese werden bei einem regelmäßig angewendeten Prüfsystem immer wieder herangezogen, um das Ergebnis einer aktuellen Auswertung ins Verhältnis zu den bisher erhobenen Daten zu setzen. Als Beispiel ist hier der probenübergreifende Vergleich der Größenverteilung der Partikeldurchmesser mittels des in Abschnitt 6.1.4 beschriebenen hierarchischen Modells zu nennen. Im Gegensatz zu den Rohdaten müssen die Metadaten also möglichst schnell und gezielt zur Verfügung gestellt werden. Es ist naheliegend, für beide Datentypen unterschiedliche Speicherstrategien zu implementieren. Im Folgenden werden beide Strategien genauer erläutert.

*Rohdaten*

*Metadaten*

*HDF5-Format*

Die Wahl für das Speichern der Rohdaten fiel auf das HDF5-Format<sup>2</sup>. Das HDF5-Format ist ein universelles Datenformat, welches für das Speichern und Archivieren von großen Binärdatensätzen entworfen wurde. Der Aufbau einer HDF5-Datei ist vergleichbar mit dem Aufbau eines Dateisystems. Basiselement ist eine Gruppe (englisch Group), welche bei der Dateisystemanalogie einem Verzeichnis entspricht. Ausgehend von einer Vatergruppe lassen sich diese innerhalb der HDF5-Datei schachteln, so dass beliebige hierarchische Bäume definiert werden können. Der durch die Namen der einzelnen Gruppen gebildete Pfad, kann dazu benutzt werden, jede Gruppe im Baum gezielt zu adressieren. Die eigentlichen Daten werden dann in Form von sogenannten Datasets an beliebigen Punkten des Baumes eingehängt. Die für das PDS entworfene Struktur ist wie folgt aufgebaut. Jede Voxelmenge eines Partikels wird in einer eigenen Gruppe mit eindeutigem Bezeichner gespeichert und in einer gemeinsamen Vatergruppe eingehängt. Damit ist sichergestellt, dass die Voxeldaten jedes einzelnen Partikels individuell adressiert und geladen werden können. Die Speicherung der Voxel der einzelnen Partikel erfolgt in Form einer Tabelle, bei der die  $x, y, z$ -Koordinaten und Grauwerte spaltenweise eingetragen sind. Jede Zeile dieser Tabelle beschreibt also einen Voxel des betrachteten Partikels. Zusätzlich werden in einer gesonderten Tabelle in einer eigenen Gruppe die wichtigsten Formdeskriptoren wieder zeilenweise pro Partikel abgespeichert. In der ersten Spalte ist dabei der eindeutige Bezeichner des Partikels aufgeführt, so dass die zugehörigen Voxeldaten zu dem jeweiligen Deskriptoren innerhalb der HDF5-Datei identifiziert werden können. Alle Datensätze sind mittels LZW-Verfahren komprimiert, um den Speicherbedarf zu verringern. Die so definierte HDF5-Datei kann also als vollständiger Datensatz des Messsystems interpretiert werden, aus dem alle weiteren Ergebnisse durch Anwenden der entsprechenden Methoden rekonstruiert werden können. Der Speicherverbrauch der Testprobe mit höchstem Verunreinigungsgrad nach Kompression beträgt dabei ca. 300 MB. Eine Langzeitarchivierung mehrerer tausend Proben ist demnach ohne Einsatz spezieller Hardware möglich. Zusätzlich können externe Softwarelösungen, wie Matlab, Mathematica oder R verwendet werden, um die Ergebnisse weiterzuverarbeiten, da das HDF5-Format ein standardisiertes Format ist und für die angesprochenen Programme entsprechende Import-Funktionen existieren.

*Datenbank*

Die Metadaten der verarbeiteten Proben werden hingegen in einer relationalen Datenbank abgelegt. Vereinfacht sieht der Aufbau der Tabellen dabei wie folgt aus. Für jede verarbeitete Probe wird ein Eintrag in der Proben-Tabelle erzeugt. Dieser enthält neben einer eindeutigen Probenidentifikationsnummer (Proben-ID) und den Dateinamen der zugehörigen HDF5-Datei die probenübergreifenden statistischen Auswertungen, beispielsweise die geschätzten Parameter

<sup>2</sup> <http://www.hdfgroup.org/HDF5/>



der Modelle. Für jedes detektierte Partikel in der betrachteten Probe wird zusätzlich in der Partikel-Tabelle ein Eintrag mit den individuellen Formdeskriptoren angelegt. Dabei wird wieder jedem Partikel ein eindeutiger Bezeichner (Partikel-ID) zugewiesen, der mit dem Bezeichner aus der HDF5 Datei übereinstimmt. Die Relation, die schließlich einer bestimmten Probe die zugehörigen Partikel zuordnet, wird durch eine dritte Tabelle abgebildet. Hier wird für jedes Partikel ein Eintrag mit seiner Partikel-ID und der zugehörigen Proben-ID angelegt. Dieser Aufbau erlaubt es, sowohl Proben als auch individuelle Partikel nach den erhobenen statistischen Parametern zu durchsuchen und zu filtern. Der Einsatz eines standardisierten Datenbanksystems, im konkreten Fall wurde PostgreSQL<sup>3</sup> eingesetzt, erleichtert dabei die Anbindung von zusätzlichen Analysewerkzeugen. Für den Anwendungsfall wurde beispielsweise eine speziell auf die Bedürfnisse der Stahlindustrie zugeschnittene Software entwickelt, mit der Endanwender komplexe Suchanfragen in Form einfacher interaktiver Eingaben formulieren können. Diese werden dann in SQL-Anfragen transformiert und an die Datenbank gesendet. Die Ergebnisse werden in Form standardisierter graphischer Berichte nahezu in Echtzeit bereitgestellt [136, 135]. Mit ähnlicher Motivation wurde von Wehrbein [142] im Rahmen seiner Diplomarbeit ein Werkzeug erstellt, mit dem die in der Datenbank gespeicherten Auswertungen im Unternehmensnetzwerk bereitgestellt werden.

Implementiert werden beide Speicherstrategien in Form einer Pipeline-Stufe. Die Voxelmengen der Partikel und die Formdeskriptoren werden kontinuierlich, parallel zur Bildaufnahme, in das jeweilige Datenformat geschrieben. Sobald der Prozess beendet ist, werden dann die Probenmetadaten berechnet und ebenfalls abgespeichert. Diese Vorgehensweise erlaubt es, den Prozess zu pausieren und zu einem späteren Zeitpunkt fortzusetzen. Da diese Stufe, wie schon erwähnt, keinen Einfluss mehr auf die Echtzeitfähigkeit des gesamten Systems besitzt, wird sie mit einer Laufzeit von  $T_{Arch} = 0$  ms spezifiziert.

*Laufzeit  
Archivierung*

### 7.1.7 Zusammenfassung

In den vorherigen Abschnitten wurden alle Komponenten des PDS beschrieben und die Vorzüge der einzelnen Designentscheidungen erläutert. Anhand simulierter Daten von Stahlproben mit extremer Verunreinigung konnte außerdem gezeigt werden, dass das PDS im Anwendungsfall aus Abschnitt 4.2 die Anforderung bezüglich der Echtzeitfähigkeit erfüllt. Konkret liegt die Laufzeit beim kontinuierlichen Fräsen und Abfotografieren pro Schicht ohne Segmentierung bei

*Gesamtlaufzeit*

<sup>3</sup> <http://www.postgresql.org>

$T_{Ges} = 19\,410$  ms. Bei der maximal angesetzten Laufzeit von 30 s bleiben also ca. 10 s für die Bildsegmentierung, bis der Schichtwechsel erfolgt und das Abbruchkriterium evaluiert sein muss. Dieser Wert kann als realistisch angesehen werden, um die Segmentierung durchzuführen.

## 7.2 PARTICLE ANALYSIS SYSTEM

*Kalibrierung*

Bei dem im vorherigen Abschnitt beschriebenen PDS gibt es eine Vielzahl möglicher Fehlerquellen und Parameter, die das Gesamtergebn beeinflussen können. Schon im ersten Schritt der Bildaufnahme kann ein falsch eingestellter Parameter enorme Auswirkungen auf die nachfolgenden Auswertungen besitzen. Da die Ergebnisse der einzelnen Pipelinestufen aufeinander aufbauen, pflanzt sich ein solcher Fehler im gesamten System immer weiter fort. Als einfaches Beispiel sei hier eine zu kurz eingestellte Belichtungszeit der Kamera angeführt. Die unterbelichteten Bilder führen zu einer starken Übersegmentierung, welche sich nach der Rekonstruktion als Artefakte manifestieren. Werden diese nicht herausgefiltert, beeinflussen sie direkt die Parameterschätzung der Modelle und damit die Evaluation des Abbruchkriteriums. Die korrekte Wahl der entsprechenden Parameter ist also entscheidend für die Qualität der Auswertung. Für die einzelnen Pipelinestufen gibt es mehrere Parameter, die das Verhalten beeinflussen. Allein die Klassifizierung mittels einer SVM hängt von den gewählten Deskriptoren, dem verwendeten Trainingsdatensatz und den eigentlichen Parametern der SVM ab. Der optimale Parametersatz wird, wie in Abschnitt 5 beschrieben, automatisch per Kreuzvalidierung bestimmt. Eine solche trainierte SVM kann zwar im Durchschnitt eine sehr hohe Korrektklassifikationsrate besitzen, im Einzelfall ist es aber unmöglich, nur auf Basis der Werte der einzelnen Deskriptoren die Entscheidung der SVM nachzuvollziehen und zu bewerten. Aber gerade diese Einzelfallprüfung kann wichtig sein, um Fehler zu detektieren und die Klassifikationsrate weiter zu optimieren. Auch kann von der aktuellen Korrektklassifikationsrate nicht auf das zukünftige Verhalten des Klassifizierers geschlossen werden. So kann eine Änderung von bestimmten Betriebsbedingungen völlig andere Formen hervorbringen, die im Trainingsdatensatz gar nicht erfasst sind. Gleiches gilt für die statistischen Auswertungen. Sind die in Abschnitt 6.2.1 getroffenen Annahmen verletzt, können keine statistischen Aussagen getroffen werden. Zwar lässt sich mittels der in Abschnitt 6.2.2 beschriebenen Verfahren automatisch detektieren, ob die erhobenen Daten zu den Modellen passen, im Einzelfall muss aber trotzdem ein Experte die Daten manuell untersuchen, um die Abweichung erklären zu können. Für diese und ähnliche Aufgaben wurde ein spezielles Werkzeug namens PAS parallel zum PDS im-

*Expertenprüfung*

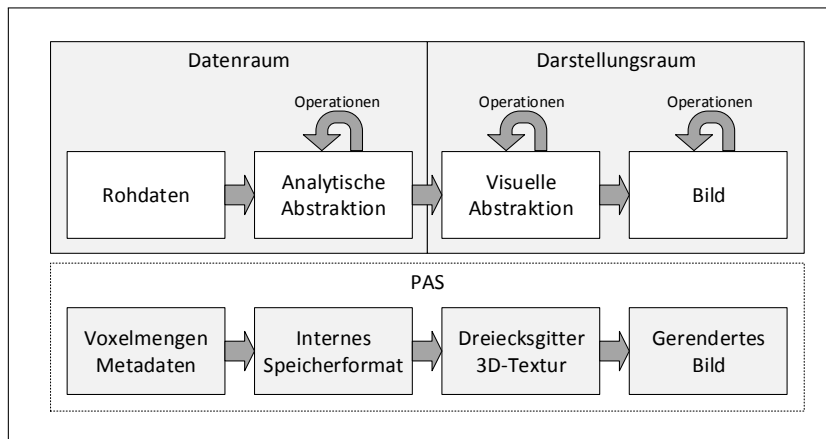
plementiert. Drei Ziele wurden bei der Entwicklung verfolgt, nämlich die Unterstützung des Modellbildungsprozesses, die Kalibrierung der Verarbeitungspipeline und die Ergebnisvalidierung der Pipeline im laufenden Betrieb. Im Folgenden wird gezeigt, wie diese drei Ziele mit dem PAS umgesetzt werden können. Dabei werden die Techniken zunächst unspezifisch für Partikelsysteme allgemein eingeführt. Exemplarisch werden dann mögliche Untersuchungen bezogen auf den Anwendungsfall aus Abschnitt 4.2 aufgezeigt. Zwar wurde das PAS speziell in Hinblick auf die Detektion, Klassifizierung und statistische Untersuchung von nichtmetallischen Einschlüssen und ähnlichen Defekten entworfen, die verwendeten Methoden sind aber generisch implementiert, so dass auch andere Anwendungsfälle mit ähnlichen Kontexten untersucht werden können. Im Folgenden wird zunächst der grobe Aufbau des Systems besprochen. Anschließend wird gezeigt, wie die drei definierten Ziele in Bezug auf die Klassifikation und in Bezug auf die statistische Auswertung umgesetzt werden können.

### 7.2.1 Aufbau

Der grobe Aufbau des PAS wird im Folgenden an dem Referenzmodell der Informationsvisualisierung von Chi [26] erläutert. Abbildung 38 zeigt den Aufbau des Referenzmodells mit den jeweiligen Entsprechungen im PAS. Prinzipiell beschreibt das Modell in abstrakter Wei-

*Referenzmodell der  
Informationsvisuali-  
sierung*

**Abbildung 38.:** Referenzmodell der Informationsvisualisierung nach Chi [26].



se den Datenfluss wie man ihn in allgemeiner Form in Visualisierungsanwendungen vorfindet. Ausgangspunkt sind die Rohdaten, in welchen der Anwender visuell Hypothesen überprüfen und neue Zusammenhänge aufdecken soll. Dazu werden auf den Rohdaten eine Reihe von Transformationsschritten angewendet, an deren Ende eine graphische Repräsentation der Daten in Form eines gerenderten

Bildes steht. Zunächst werden die Rohdaten im ersten Transformations-schritt in die sogenannte analytische Abstraktion überführt. Dabei handelt es sich um das interne Datenformat der Anwendung. Übliche Transformations-schritte sind das Laden und Entpacken von komprimierten Datensätzen. Im nächsten Transformations-schritt werden die Daten von der analytischen Abstraktion in ein speziell für den verwendeten Renderalgorithmus optimiertes Format gebracht. Im Modell wird dieses als die visuelle Abstraktion der Daten bezeichnet. Im letzten Schritt wird schließlich aus der visuellen Abstraktion mittels des Renderalgorithmus die eigentliche graphische Repräsentation der Daten erzeugt. Das Verhalten der einzelnen Transformations-schritte und damit die resultierende graphische Repräsentation kann der Nutzer durch Anwendung verschiedener Operationen beeinflussen. Das Ziel dabei ist, die Daten in eine Repräsentation zu überführen, welche die Bestätigung oder das Verwerfen der Arbeitshypothese erlaubt. Man unterscheidet grob zwischen den Operationen im Datenraum, die vor allem auf der analytischen Abstraktion angewendet werden und den Operationen im Darstellungsraum, die auf der visuellen Abstraktion und dem gerenderten Bild arbeiten. Typische Operationen im Datenraum sind Such- und Filteranfragen, um die Datenmenge gezielt zu verkleinern beziehungsweise auf Daten mit bestimmten Charakteristiken einzuschränken. Der Darstellungsraum beinhaltet beispielsweise Operationen zur Anpassung von Farbtransferfunktionen oder geometrische Transformationen, wie Rotation, Translation und Skalierung.

Auf das PAS übertragen sieht das Modell wie folgt aus. Ausgangspunkt sind hier die erzeugten HDF5-Dateien mit den Partikeln als Voxeldaten und den Gestaltdeskriptoren sowie das Klassifizierungsergebnis als Metadaten. Diese werden von der Anwendung geladen, entpackt und in ein für die Anwendung optimales internes Format konvertiert. Das interne Datenformat ist sehr einfach aufgebaut. Die Voxelmengen der einzelnen Partikel werden jeweils als Listen gespeichert, wobei sukzessiv die  $x, y, z$ -Koordinaten und die Grauwerte im Speicher hintereinander liegen. Diese Speicherweise ist bei linearem Zugriff auf die Liste äußerst effizient, da der L2-Cache der CPU optimal genutzt wird. Die Metadaten werden hingegen in einer  $N \times M$  Matrix gespeichert, wobei  $N$  der Anzahl der Partikel und  $M$  der Anzahl der Deskriptoren zuzüglich der Klassifizierungsergebnisse und einer eindeutigen Identifikationsnummer entspricht. Über die eindeutige Identifikationsnummer werden Metadaten und Voxeldaten der Partikel miteinander verknüpft. Dazu werden in einer zweiten Liste Zeiger auf die Voxellisten gespeichert, wobei die Indexposition der Identifikationsnummer aus den Metadaten entspricht. Dieser Schritt entspricht im Modell in Abbildung 38 der Transformation in die analytische Abstraktion. Auf den Metadaten lassen sich mit einer speziell entwickelten Anfragesprache Such- und Filteroperationen ausführen.

*Internes  
Datenformat des  
PAS*

*Metadatenformat  
des PAS*

*Anfragesprache*

Die Syntax dieser Anfragesprache ist in der nachfolgenden Box mittels der Extended Backus-Naur Form (EBNF) [64] definiert.

```

Anfrage = ["!"], Ausdruck
         { BoolscherOperator Ausdruck };
Ausdruck = Test | Anfrage | "("Anfrage)";
Test = Platzhalter, VergleichsOperator, Konstanten;
Platzhalter = "%v" | "%cx" | "%cy" | "%cz" | ...;
BoolscherOperator = "&" | "!";
VergleichsOperator = ">" | "<" | "==" | "!=" | ">=" | "<=";

```

Das Hauptelement der Sprache ist ein *Test*. Ein *Test* evaluiert immer zu einem Wahrheitswert und wird zeilenweise auf die Metadaten-Matrix angewendet. Für jede Zeile, bei welcher der *Test* wahr ist, wird die Identifikationsnummer zur Ergebnismenge hinzugefügt. Sind alle Zeilen der Matrix durchlaufen, enthält die Ergebnismenge diejenigen Partikel, welche die durch den *Test* beschriebene Charakteristik erfüllen. Ein *Test* besteht dabei immer aus einem Platzhalter, einem Vergleichsoperator und einer Konstanten. Der Platzhalter ist ein Synonym für eine bestimmte Spalte in der Matrix, in welcher die Werte eines bestimmten Formdeskriptors der Partikel gespeichert sind. Für jede Zeile wird der Platzhalter durch den konkreten Wert ersetzt und mit dem Vergleichsoperator durch die vom Nutzer definierte Konstante verglichen. Das Verhalten der Vergleichsoperatoren entspricht dabei dem Verhalten der entsprechenden Operatoren in der Programmiersprache C++. Ein möglicher *Test* sieht zum Beispiel so aus: `%v >= 2000`. Der Platzhalter `%v` bezieht sich auf die Spalte mit dem Volumen der Partikel. Der *Test* wird also wahr, wenn das Volumen größer gleich  $2000 \mu\text{m}^3$  ist. Mehrere *Tests* lassen sich nun laut der oben definierten Syntax durch die boolschen Operatoren *Und*(&), *Oder*(|) und *Nicht*(!) zu komplexeren *Anfragen* kombinieren. Eine typische *Anfrage* sieht zum Beispiel so aus: `(%cy >= 44)&(%cy <= 84)`. Der Platzhalter `%cy` entspricht dabei der *y*-Koordinate des Schwerpunktes. Die *Anfrage* liefert also alle Partikel zurück, die im vermeintlichen Band zwischen 44 mm und 84 mm liegen. Man beachte, dass in der oben definierten Grammatik aus Platzgründen nur ein Auszug aus den möglichen Platzhaltern angegeben ist. Tatsächlich existiert für jeden in Abschnitt 2 beschriebenen Deskriptor ein entsprechender Platzhalter. Außerdem fehlt eine formale Definition des Nichtterminalsymbols *Konstante*. Die Anfragesprache entspricht im Referenzmodell den Operationen auf der analytischen Form der Daten. Im nächsten Transformationsschritt werden diese nun in die visuelle Abstraktion überführt. Bei den Metadaten unterscheidet sich die

Rendering

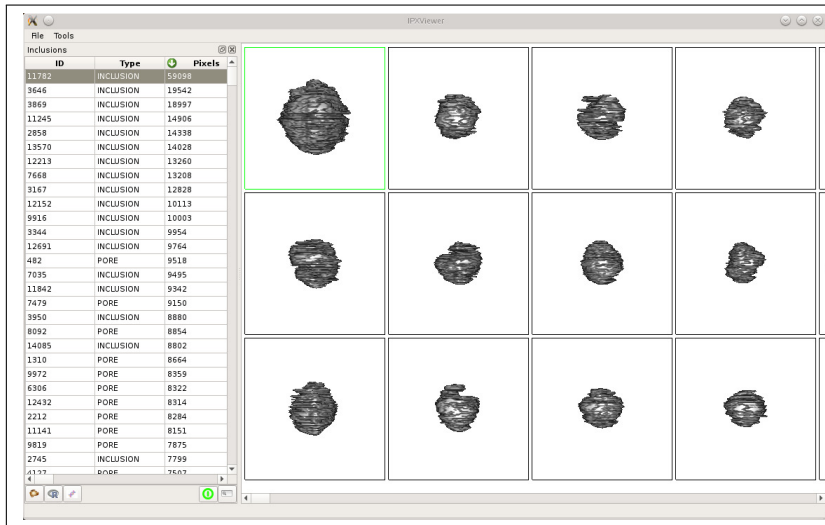
analytische Form kaum von der visuellen, da die Darstellung im Programm als Tabelle erfolgt. Lediglich in einigen Spalten findet eine Ersetzung der als Bitwerte kodierten Informationen in aussagekräftige Bezeichner statt. Bei den Voxeldaten hingegen werden je nach Anwendungsfall unterschiedliche Transformationen durchgeführt. Standardmäßig wird mittels des Marching Cubes Algorithmus ein Dreiecksnetz aus den Voxelmengen der Partikel berechnet. Diese Dreiecksnetze lassen sich sehr effizient auf modernen Graphikkarten rendern und erlauben es, mehrere hundert Partikel parallel darzustellen und deren Form zu analysieren. Für die Analyse der inneren Struktur einzelner Partikel ist diese Darstellungsweise aber ungeeignet, da die Dreiecksnetze nur eine hohle Hülle der Partikel beschreiben. Alternativ bietet sich für ausgewählte Partikel das Rendern mittels des Raycasting-Algorithmus [80] an. Dafür werden die Voxeldaten in eine dreidimensionale Textur umgewandelt und als Intensitätswerte interpretiert. Für jeden Punkt der Bildebene wird dann ein Strahl vom Auge des Betrachters durch diese Textur geschickt. In regelmäßigen Abständen werden die Intensitätswerte der Textur entlang dieses Strahls abgetastet und der Einfluss etwaiger Lichtquellen für jeden Wert berechnet. Anschließend werden mittels einer Transferfunktion die Intensitätswerte auf Farb- und Transparentwerte abgebildet und unter Berücksichtigung der Lichtquelle der finale Farbwert des Punktes auf der Bildebene abgemischt. Durchgeführt für alle Punkte der Bildebene ergibt sich so ein dreidimensionales Bild des Partikels. Dieses erlaubt aber, im Gegensatz zum Marching Cube Algorithmus, die Analyse der inneren Struktur. Dazu kann entweder die Transferfunktion angepasst werden, um innere Strukturen freizulegen, oder eine beliebig parametrisierte Schnittebene durch die dreidimensionale Textur gelegt werden, mit welcher ein Querschnitt des Partikels untersucht werden kann. In beiden Fällen entspricht das Rendern dem letzten Transformationsschritt im Referenzmodell aus Abbildung 38. Das Manipulieren der Transferfunktion und Parametrisieren des Marching Cube Algorithmus können hingegen als die Operationen auf der visuellen Abstraktion aufgefasst werden. Auf das gerenderte Bild können schließlich die oben bereits beschriebenen geometrischen Transformationen angewendet werden.

### 7.2.2 Sichtprüfung der Partikel

Hauptfenster des  
PAS

In Abbildung 39 ist ein Screenshot des Hauptfensters vom PAS nach dem Laden einer HDF5-Datei abgebildet. Das Fenster ist grob in zwei Teile aufgeteilt. Auf der linken Seite befindet sich die Tabelle mit den Metadaten, während auf der rechten Seite das als Partikelgalerie bezeichnete Übersichtsfenster angesiedelt ist. In der Partikelgalerie werden die mittels Marching Cube Algorithmus generierten Vorschau-

Abbildung 39.: Screenshot des Hauptfensters vom PAS.



bilder der in der Probe enthaltenen Partikel angezeigt. Die gewählte Monitoraufösung begrenzt dabei die Anzahl der gleichzeitig dargestellten Partikel. Es ist aber möglich, nahezu in Echtzeit durch die Probe zu blättern. Dazu werden die Vorschau-bilder der an das Übersichtsfenster angrenzenden Partikel bereits in eine Textur gerendert und müssen nur noch geladen werden, sobald die Position des Fensters weit genug verschoben wurde. Wie bereits erwähnt, sind Metadaten und die gerenderten Partikel über eine Identifikationsnummer miteinander verknüpft. Wird ein Partikel in der Partikelgalerie selektiert, wird auch die korrespondierende Zeile in der Metadaten-tabelle selektiert. Gleiches gilt für den umgekehrten Fall. Die Interaktion zwischen der Tabelle und dem Übersichtsfenster ist aber nicht nur auf die Selektion beschränkt, sondern umfasst sämtliche Sortier- und Filteroperationen. Die Sortierung der Tabelle kann spaltenweise für jeden Deskriptor sowohl aufsteigend als auch absteigend festgelegt werden. Filter hingegen lassen sich durch die Eingabe einer Filteranfrage in der im letzten Abschnitt definierten Sprache festlegen. Diese Operationen wirken sich direkt auf das Übersichtsfenster aus. Partikel, die nicht die mittels der Filteranfrage beschriebenen Charakteristiken erfüllen, werden sowohl in der Tabelle als auch in der Partikelgalerie ausgeblendet. Auch die Sortierung der Tabelle wirkt sich direkt auf die Sortierung der Partikelgalerie aus. Im Bild 39 wurde beispielsweise absteigend nach der Größe der Partikel sortiert. Damit stehen auch in der Partikelgalerie die größten Partikel vorne.

Mittels dieser drei einfachen Operationen, also Selektion, Sortierung und Filterung, sowie deren Verknüpfung lassen sich bereits die drei definierten Ziele in Abschnitt 7.2 bezogen auf die Partikelklassifikation umsetzen. In der Modellbildungsphase kann ein Experte das Werkzeug zunächst dazu nutzen, die Annahmen über die morpho-

*Kalibrierung**Ergebnisvalidierung*

logischen Eigenschaften der Partikel im jeweiligen Anwendungsfall zu bestätigen. Im konkreten Anwendungsfall aus Abschnitt 4.2 wurde zum Beispiel zunächst davon ausgegangen, dass alle detektierbaren Defekte annähernd kugelförmig sind. Bei genauerer Inspektion der Formen in der Partikelgalerie hat man aber festgestellt, dass auch rissartige Strukturen sehr häufig vorkommen und deshalb als eigene Klasse berücksichtigt werden müssen. Haben sich die Annahmen über die Partikeltypen bestätigt und ist man in der Lage, diese durch visuelle Inspektion ihrer Morphologie zu unterscheiden, kann das PAS im nächsten Schritt zur Bestimmung von Trainingsmengen für den Klassifizierer verwendet werden. Dazu ist es hilfreich, wenn bereits ein Deskriptor identifiziert wurde, mit dem eine distinktive morphologische Eigenschaft einer Partikelklasse erfasst wird. Im Anwendungsfall eignet sich beispielsweise der Deskriptor  $F_1$  für eine grobe Unterteilung zwischen Rissen und globularen Defekten. Durch das Setzen von Filtern und einer geeigneten Sortierung kann dann die Größe der möglichen Trainingsmenge stark reduziert werden. Der Experte entscheidet schließlich manuell von Fall zu Fall, um welchen Partikeltyp es sich konkret handelt. Dazu können im PAS alle Partikel einer Klasse selektiert und jeweils eine eindeutige Klassenbezeichnung zugewiesen werden. Im letzten Schritt wird die so erstellte Trainingsmenge als neue HDF5-Datei exportiert. Die Trainingsmenge zur Klassifikation von globularen Defekten, Rissen und Artefakten aus Abschnitt 5 wurde auf diese Weise bestimmt. Damit lässt sich auch das zweite große Ziel, nämlich die Kalibrierung der Verarbeitungspipeline in Bezug auf die Partikelklassifikation mit dem PAS umsetzen. Schließlich kann das PAS auch zur Ergebnisvalidierung verwendet werden. Dazu werden die klassifizierten Ergebnisse der Verarbeitungspipeline mittels des PAS geladen und durch visuelle Inspektion überprüft, ob die Zuordnung der Klassen plausibel ist. Eine mögliche Vorgehensweise sieht dabei wie folgt aus. Zunächst werden die Partikel in der Partikelgalerie mittels einer geeigneten Filteranfrage auf eine Klasse beschränkt. Ein Experte überprüft dann für jedes dargestellte Partikel, ob die Form in etwa der erwarteten Morphologie entspricht. Ist dies nicht der Fall, kann gegebenenfalls anhand der zugehörigen Deskriptoren herausgefunden werden, warum die Klassifikation fehlschlägt. Konkret auf den Anwendungsfall bezogen wurde so beispielsweise festgestellt, dass einige nichtmetallische Einschlüsse als Risse klassifiziert werden. Beim Fräsen kann es nämlich vorkommen, dass Material aus dem Einschluss herausgebrochen und entlang der Fräsrillen verschmiert wird. Die Einschlüsse prägen einen sogenannten Schweif aus, der dafür sorgt, dass Deskriptoren, welche die Sphärizität von Partikeln bewerten, falsche Werte liefern. Begrenzt man die Partikelgalerie nur auf Risstypen, sind solche Ausreißer schnell zu identifizieren. Da nur Einschlüsse einen Schweif ausbilden, konnte dieser im konkreten Fall selbst als Deskriptor heran-

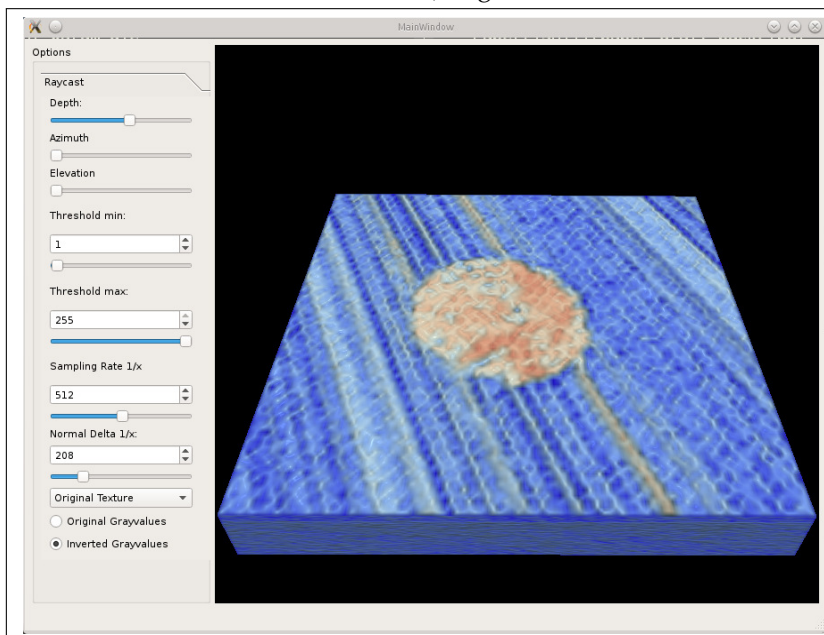


gezogen werden, um die Unterscheidung zwischen Poren und nicht-metallischen Einschlüssen zu verbessern [20].

In Hinblick auf die Partikelklassifikation lassen sich also die drei definierten Ziele in Abschnitt 7.2 mit dem PAS umsetzen. Darüber hinaus kann das PAS dazu verwendet werden, individuelle Partikel näher zu analysieren. Damit lässt sich einerseits die innere Struktur von Partikeln untersuchen, andererseits der Einfluss der Segmentierung auf die Form des Partikels beurteilen. Durchgeführt werden diese Untersuchungen mit dem in Abschnitt 7.2.1 beschriebenen Raycasting-Algorithmus. Dazu wird zunächst für ein ausgewähltes Partikel eine dreidimensionale Textur mit den Koordinaten der Boundingbox aus den Rohbildern der Kamera erzeugt. Diese wird dann auf die Graphikkarte übertragen und mittels des Raycasting-Algorithmus gerendert. Mit den bereits erwähnten Operationen, wie Querschnittsbildung und Anpassung der Transferfunktionen, kann dann der Aufbau des Partikels näher untersucht werden. Abbildung 40 zeigt dies am Beispiel eines Querschnitts durch einen nichtmetallischen Einschluss. Die Intensitätswerte wurden dabei mittels einer Transferfunk-

Strukturanalyse

**Abbildung 40.:** Mit Raycasting generierter Querschnitt durch einen nichtmetallischen Einschluss. Die Intensitätswerte wurden mittels einer Transferfunktion auf Farbwerte (hell = blau, dunkle = rot) abgebildet.



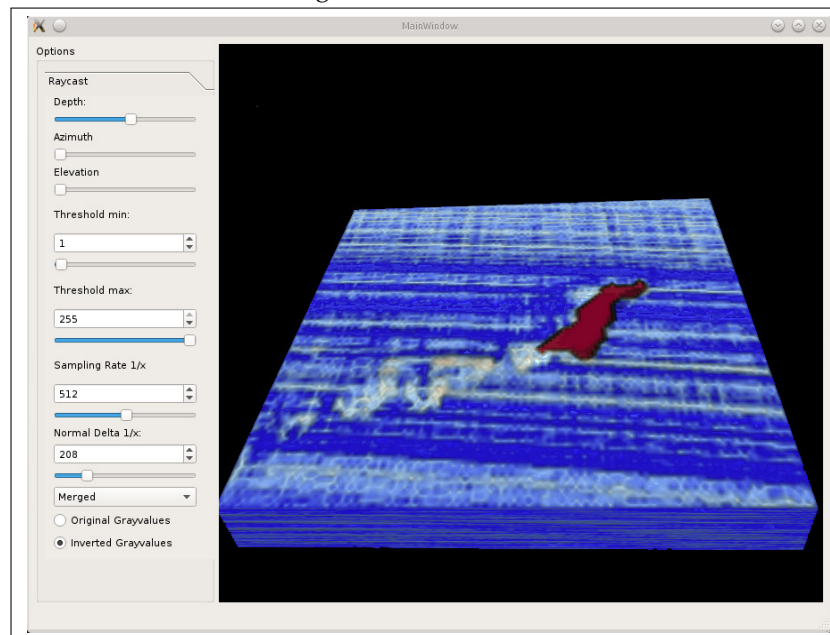
tion auf Farbwerte abgebildet, die üblicherweise zur Kodierung von Temperaturen verwendet werden. Deutlich kann man das kreisrunde Profil des nichtmetallischen Einschlusses in der  $x, y$ -Ebene erkennen. Des Weiteren fällt auf, dass das Innere des Einschlusses keineswegs homogen ist, sondern die Intensitätswerte stark schwanken. Wahr-

scheinlich führt das Abfräsen des im Vergleich zur Stahloberfläche sehr harten Einschlussmaterials zu einer zerklüfteten Schnittfläche, so dass Licht nur unregelmäßig ins Objektiv der Kamera reflektiert wird. Im Gegensatz dazu haben Poren eine homogene Intensitätswertverteilung in der Querschnittsoberfläche, da kaum Licht durch den von der Pore gebildeten Hohlraum reflektiert wird. Neben der Form sind also auch auf der Textur basierende Deskriptoren hilfreich, um zwischen Poren und nichtmetallischen Einschlüssen zu unterscheiden. Dieses Wissen wurde unter anderem in Bürger u. a. [20] dazu verwendet, die Korrekturklassifikationsrate zwischen Poren und nichtmetallischen Einschlüssen weiter zu steigern.

*Bewertung der Segmentierung*

Ein letzter Anwendungsfall des Raycasting-Algorithmus, der hier vorgestellt wird, ist die Bewertung des Segmentierungsergebnisses. Dazu können die Voxel der Rohbilder mit denen der durch die Segmentierung eindeutig als zum Partikel zugehörig identifizierten Voxel überlagert werden. Im Idealfall wird die Form des Partikels sehr genau durch die Voxel der Segmentierung approximiert. In Abbildung 41 ist eine solche Untersuchung am Beispiel eines Querschnitts durch einen Riss dargestellt. Dabei überlagern die durch die Segmen-

**Abbildung 41.:** Mit Raycasting generierter Querschnitt durch einen Riss. Die durch die Segmentierung identifizierten Voxel überlagern die Farbwerte der Rohbilder dunkel rot.



tierung identifizierten Voxel die Farbwerte der Rohbilder dunkel rot. Zwar wurde ein Teil des Risses identifiziert, der genaue Rissverlauf wurde aber nicht erfasst. Deutlich kann man erkennen, wie sich der Riss in ca.  $45^\circ$  senkrecht zu den Fräsrillen fortsetzt. Diese Untersegmentierung führt häufig dazu, dass Risse im Anwendungsfall zu Teil-

rissen zerfallen. Zwar können mit dem PAS solche Teilrisse manuell wieder zusammengefügt werden, aber trotzdem findet ein Informationsverlust in Form von nicht detektierten Voxeln statt. Untersuchungen wie in Abbildung 41 können hilfreich sein, um den Grund für die Untersegmentierung zu erkennen und den Segmentierungsalgorithmus zu optimieren.

### 7.2.3 Statistische Analyse

Neben der Modellbildung, Kalibrierung und Ergebnisvalidierung für die Partikelklassifikation können mit dem PAS diese drei Aufgaben auch in Bezug auf die statistische Auswertung gelöst werden. Dazu wurde wie schon bei der Verarbeitungspipeline die offene Statistiksoftware R<sup>4</sup> in das PAS eingebettet. Der Datenaustausch zwischen dem R-Prozess und dem PAS wird dabei über die Rcpp-Bibliothek [37] realisiert. Es findet eine Zwei-Wege-Kommunikation zwischen beiden Anwendungen statt, die vom Nutzer des PAS angestoßen wird. Zunächst wird, wie schon im vorherigen Abschnitt besprochen, mittels der Filter- und Sortieroperationen ein entsprechender Datensatz im Hauptbildschirm des PAS (siehe Abbildung 39) selektiert. Diese Daten werden dann in Form der in Abschnitt 7.2.1 beschriebenen  $N \times M$  Matrix an den R-Prozess übertragen. Zusätzlich werden der vollständige Pfad zur aktuell geöffneten HDF5-Datei und der vollständige Pfad zu einem R-Skript, welches auf die Daten angewendet werden soll, übermittelt. Damit besitzt der R-Prozess eine vollständige Kopie des selektierten Datensatzes und ist bei Bedarf dazu in der Lage, mittels der eindeutigen Identifikationsnummer die Voxeldaten zu individuellen Partikeln aus der HDF5-Datei nachzuladen. Das R-Skript wird dann selbständig von dem R-Prozess aus dem Pfad geladen und auf die übermittelten Daten angewendet. Das Ergebnis dieser Auswertung wird wiederum mittels der Rcpp-Bibliothek an das PAS zurückgeliefert. Zwei Formate werden dabei vom PAS unterstützt. Abhängig von der Komplexität der Auswertung wird das Ergebnis entweder als Bild im PNG-Format oder als HTML-Datei entgegengenommen. In beiden Fällen wird aber nicht die Datei selbst übertragen, sondern wieder nur der Pfad zur Datei, in der das Ergebnis im jeweiligen Format gespeichert ist. Die typische Anatomie eines R-Skriptes, welches im PAS eingebunden werden soll, sieht also wie folgt aus. Zunächst werden die Daten aus der übergebenen Matrix extrahiert und die jeweilige Auswertung durchgeführt. Kann das Ergebnis durch einen einfachen Graphen dargestellt werden, wird der Zeichenvorgang von R angestoßen und das resultierende Bild in eine Datei gespeichert. Üblicherweise wird als Zielpfad das temporäre

*R und  
Rcpp-Bibliothek*

*Datenfluss*

*R-Skript*

*Anatomie des  
R-Skriptes*

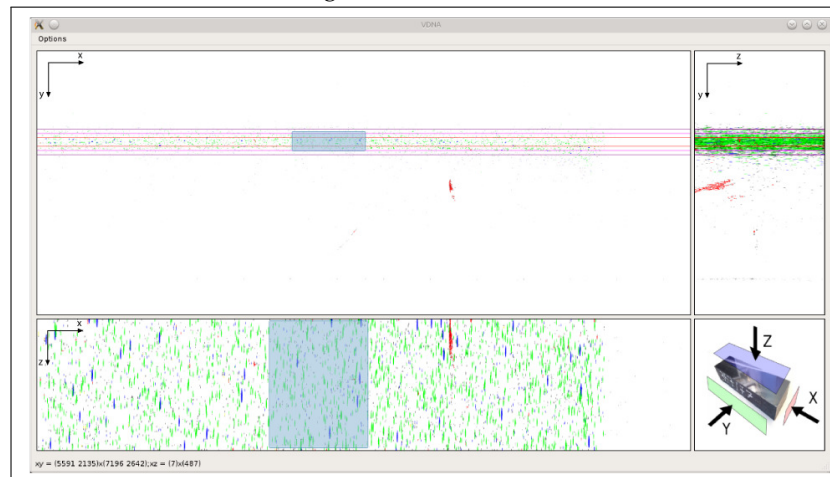
<sup>4</sup> <http://www.r-project.org/>

Verzeichnis des Betriebssystems gewählt. Bei komplexen Auswertungen mit mehreren Graphiken, viel Text und Tabellen wird stattdessen eine entsprechend formatierte HTML-Datei erzeugt und im temporären Verzeichnis gespeichert. Das PAS lädt dann die Datei und rendert das Ergebnis im sogenannten Report-Modul.

Um die Funktionsweise zu verdeutlichen wird im Folgenden ein mögliches Anwendungsszenario durchgespielt. Angenommen, man möchte anhand einer durch das PDS verarbeiteten Probe aus dem Anwendungsfall aus Abschnitt 4.2 überprüfen, ob eine grobe Verletzung der Modellannahme bezüglich der Durchmesser- und Verteilung der globularen Defekte vorliegt. Wie in Abschnitt 6.1 ausgeführt geht man davon aus, dass globulare Defekte der logarithmischen Normalverteilung folgen. Zunächst wird also die entsprechende HDF5-Datei der Proben in das PAS geladen. Da man nur an globularen Defekten interessiert ist, blendet man alle Defekte aus, die nicht dem Typ Pore oder Einschluss entsprechen. Zusätzlich macht es Sinn, die Auswahl der Defekte auf das schmale Band nahe der Stahloberfläche zu begrenzen (siehe dazu Abschnitt 6.2.1). Ein solcher Filter lässt sich manuell mittels der in Abschnitt 7.2.1 definierten Anfragesprache erstellen. Dieser Prozess ist aber sehr mühselig und fehleranfällig. Deshalb wurde im PAS ein passendes Werkzeug bereitgestellt, welches den Nutzer bei der Erstellung des Filterausdruckes unterstützt. *Abbildung 42* zeigt einen Screenshot dieses Werkzeugs. In jeweils drei

Räumliche Auswahl

**Abbildung 42.:** Auswahlwerkzeug zur Generierung von räumlichen Filteranfragen.

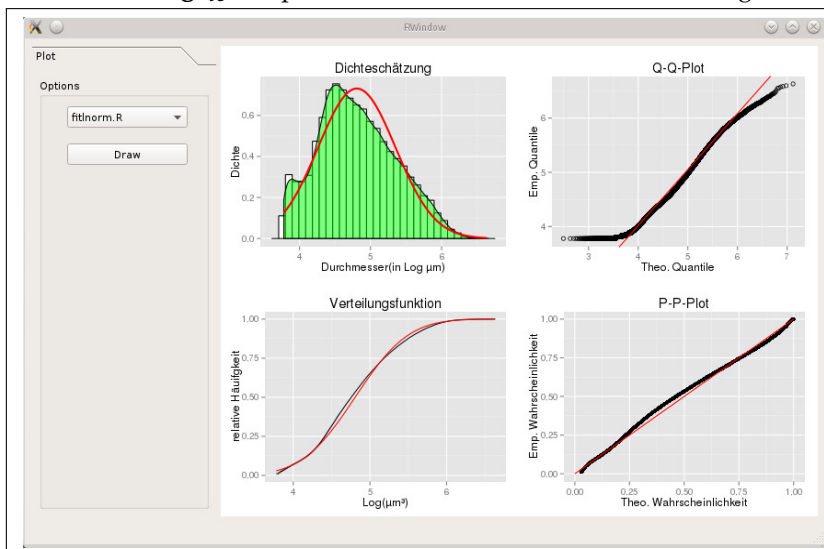


Teilfenstern ist die Projektion aller Voxel der in der Probe enthaltenen Defekte in der  $x, y$ -,  $x, z$ - und  $y, z$ -Ebene farblich codiert nach dem jeweiligen Typ dargestellt. Der Nutzer kann nun die Auswahl auf bestimmte Regionen in der Probe beschränken. Dafür zeichnet er in die entsprechenden Projektionsansichten ein Auswahlrechteck. Die Koordinaten dieses Rechtecks werden dann in einen Filterausdruck umge-

wandelt, so dass nur Defekte berücksichtigt werden, deren Schwerpunkte in dem durch die Rechtecke definierten Quader liegen. In Abbildung 42 kann man in der  $x, y$ -Ebene deutlich das schmale Band mit der höchsten Defektkonzentration erkennen. Als visuelles Hilfsmittel wurde anhand des Intensitätsabfalls in  $y$ -Richtung die Breite des Bandes geschätzt und das Ergebnis als Hilfslinie eingezeichnet. An diesen Hilfslinien kann sich der Nutzer bei der Konstruktion des Filters orientieren. Die Auswahl in Abbildung 42, dargestellt durch die blauen Rechtecke, erstreckt sich nur auf das Defektband. Der Rest der Probe wird ignoriert. Auf diesen gefilterten Datensatz können nun die verschiedenen statistischen Tests in Form von R-Skripten angewendet werden. Dazu wird vom Nutzer das Report-Modul aufgerufen, in dem die verschiedenen R-Skripte ausgewählt und ausgeführt werden können. Abbildung 43 zeigt ein Screenshot des Report-Moduls. Auf der linken Seite können in einer Liste die verschiedenen

Report-Modul

Abbildung 43.: Report-Modul für statistische Auswertungen.



Skripte ausgewählt werden. Diese liegen in einem fest definierten Verzeichnis auf der Festplatte und werden zur Laufzeit eingelesen. Soll ein neues Skript hinzugefügt werden, wird eine Datei mit dem entsprechenden Skript in dem Verzeichnis erstellt. Der Aufbau des R-Skriptes muss dabei natürlich der oben beschriebenen Anatomie entsprechen. In Abbildung 43 wurde das Skript *fitlnorm.R* vom Nutzer ausgewählt. Dieses implementiert die in Abschnitt 3.2.3 beschriebenen Methoden zur explorativen Analyse der Modellannahmen, wie sie während des Modellbildungsprozesses häufig verwendet werden. Konkret wird der QQ-Plot und PP-Plot für die übergebenen Daten berechnet. Dafür werden mittels der Maximum-Likelihood Methode die Verteilungsparameter über die log-transformierten Durchmesser der Defekte berechnet. Anschließend werden anhand dieser Parameterschätzung die theoretischen Quantile ermittelt und gegen die em-

pirischen Quantile, erhoben aus den beobachteten Daten, aufgetragen (siehe auch Abschnitt 3.2.3). Das Ergebnis wird als Bild zurückgeliefert und im rechten Teilfenster des Report-Moduls angezeigt. Für die verwendete Probe aus Abbildung 43 ergibt sich das aus Abschnitt 6.1.2 bekannte Verhalten. An den linken Ausläufern kommt es auf Grund der begrenzten Kameraauflösung zu Abweichungen, welche zu einer rechtsschiefen Verteilung führen.

Dieses Anwendungsbeispiel beschreibt nur eines von vielen verschiedenen Auswertungen, die mittels des PAS durchgeführt werden können. Faktisch lassen sich alle in Abschnitt 3 beschriebenen Methoden anwenden. Dies umfasst sowohl explorative Methoden zur Unterstützung des Modellbildungsprozesses, wie die schon erwähnten QQ-Plots für die Durchmesservertelung oder die Methoden zur Schätzung der Intensitätsfunktion (siehe Abschnitt 3.3.3) für die räumliche Verteilung, als auch die Methoden zur Modellvalidierung (Abschnitt 3.2.3 und 3.3.4). Auch das Abbruchkriterium aus Abschnitt 6.4.2 kann nachträglich für bereits verarbeitete Proben evaluiert und die Ergebnisse zur Parametrisierung der Verarbeitungspipeline verwendet werden. Somit können die drei definierten Ziele, welche die Motivation zur Entwicklung des PAS waren, auch in Bezug auf die statistische Auswertung umgesetzt werden.

### 7.3 ZUSAMMENFASSUNG

In diesem Kapitel wurden die beiden Systeme PDS und PAS vorgestellt, in denen die einzelnen Methoden aus den Kapiteln 2 und 3 zu einem vollständigen Analysesystem für Partikelsysteme integriert wurden. Zunächst wurde der Aufbau des PDS beschrieben und die Funktionsweise der einzelnen Pipelinestufen erläutert. Anhand von simulierten Daten, die mittels des Algorithmus 7 erzeugt wurden, konnte dann gezeigt werden, dass das PDS schnell genug ist, um die Echtzeitanforderungen des Anwendungsfalls aus Abschnitt 4.2 zu erfüllen. Anschließend wurden unter Verwendung des Referenzmodells der Informationsvisualisierung das PAS eingeführt und die Motivation für die Entwicklung dargelegt. Am Beispiel zweier Anwendungsfälle wurde schließlich gezeigt, dass die drei definierten Ziele, die Unterstützung des Modellbildungsprozesses, die Kalibrierung des PDS und die Modellvalidierung, sowohl für die Partikelklassifikation als auch für die statistische Auswertung der räumlichen Verteilung und der Durchmesservertelung mittels dem System umgesetzt werden können.

ZUSAMMENFASSUNG

---

In dieser Arbeit wurde ein Rahmenwerk zur vollständigen statistischen Analyse von Partikelsystemen entwickelt. Die vollständige statistische Analyse umfasst dabei die Analyse der Gestalt von individuellen Partikeln, die Analyse der Größenverteilung des Partikelkollektivs und die Analyse der räumlichen Verteilung des Partikelkollektivs. Zu jedem dieser drei Aspekte sind in den letzten Jahren zahlreiche Veröffentlichungen erschienen. Allerdings sind dem Autor der vorliegenden Arbeit keine Systeme oder Implementierungen bekannt, die diese drei Ansätze in einem einheitlichen Rahmenwerk für den dreidimensionalen Fall vereinen. Diese Lücke wurde mit der vorliegenden Arbeit geschlossen. Dabei war die Entwicklung des Rahmenwerks stark an die Anforderungen des Silenos-Projektes gekoppelt, welches die Zielsetzung hat, ein optisches Online-Auswertesystem zur Detektion von Defekten, wie nichtmetallischen Einschlüssen, Rissen und Poren, in Stahlproben zu entwickeln. Die Defekte sollen in Bildern schichtweise abgefräster Werkstoffproben mittels Verfahren der Bildverarbeitung identifiziert, segmentiert und unter der Annahme einer dreidimensionalen räumlichen Ausdehnung rekonstruiert werden. Anhand der rekonstruierten dreidimensionalen Morphologie soll schließlich eine automatische Klassifizierung in die jeweiligen Defekttypen und die statistische Auswertung vorgenommen werden. Dreidimensionale Rekonstruktion, Klassifikation und statistische Auswertungen wurden mittels der Methoden des in der vorliegenden Arbeit entwickelten Rahmenwerks umgesetzt. Folgende Anforderungen ergaben sich dabei für das Rahmenwerk. Hauptvorgabe war, dass alle Auswertungen parallel zum Fräsprozess inkrementell für jede Schicht mit einer maximalen Laufzeit von 30 s durchgeführt werden können. Des Weiteren verlangte die große Menge der zu erwarteten Rohdaten die Entwicklung effizienter Algorithmen in Bezug auf den Speicherverbrauch. Da das Fräsen von Stahl mit sehr hohen Kosten verbunden ist, sollte schließlich ein Abbruchkriterium festgelegt werden, welches nach Erreichen einer vorgegebenen statistischen Sicherheit den Prozess unterbricht.

*Anforderungen*

Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, wurde bei der Definition und Implementierung des Rahmenwerks wie folgt vorgegangen. Zunächst wurde der Begriff Partikel formal nach der Einführung von Nachbarschaftskriterien auf Basis von zusammenhängenden Voxelmenge definiert. Dabei wurden unterschiedliche Nachbarschafts-

*Umsetzung*

kriterien zugelassen, um möglichst flexibel auf Segmentierungsfehler reagieren zu können. Anhand dieser Definition erfolgte dann die Implementierung eines Algorithmus zur dreidimensionalen Rekonstruktion. Dazu wurde der von Wu, Otoo und Suzuki [149] propagierte Labeling-Algorithmus schrittweise erweitert, bis ein inkrementeller Betrieb möglich war. Anschließend erfolgte ebenfalls auf Basis des eingeführten Partikelbegriffs die Definition distinktiver Gestaltsdeskriptoren, welche die Quantifizierung unterschiedlicher Charakteristiken der individuellen Partikel erlauben soll. Deskriptoren für die Größe und die Position der Partikel im Raum bildeten wiederum die Grundlage für die statistische Analyse der Größenverteilung und der räumlichen Verteilung. Für beide Verteilungstypen wurden explorative Datenanalysewerkzeuge zur Plausibilitätsprüfung einer Modellannahme, Parameterschätzer und Modellvalidierungsverfahren eingeführt. Dabei wurde rigoros auf die Methoden der bayesschen Statistik gesetzt, da sie zum einen den intuitiven Umgang mit inkrementell erhobenen Daten erlauben und zum anderen einfach auswertbare Maße zum Bestimmen der statistischen Unsicherheit bei der Parameterschätzung anbieten. Außerdem kann Vorwissen über die Modellparameter adäquat in Form einer A-priori Verteilung modelliert werden.

*Rahmenwerk*

Zusammengefasst bilden diese Methoden das Rahmenwerk, welches die vollständige Analyse von Partikelsystemen erlaubt. Dieses Rahmenwerk wurde zunächst dazu verwendet, jeweils ein Modell für die Größenverteilung und die räumliche Verteilung von nichtmetallischen Einschlüssen festzulegen. So hat sich gezeigt, dass die Größenverteilung von nichtmetallischen Einschlüssen der logarithmischen Normalverteilung folgt, während sich die räumliche Verteilung nach Homogenisierung mit der Exponentialfunktion senkrecht zur Oberfläche mittels eines homogenen Poisson-Punktprozesses beschreiben lässt. Auf Basis dieser Erkenntnis wurde dann eine Software entwickelt, welche die Simulation von synthetischen Stahlproben erlaubt. Anschließend wurden die Methoden des Rahmenwerks dazu verwendet, ein Online-Auswertesystem Namens PDS zu entwickeln, welches die Anforderungen des Silenos-Projekts erfüllt. Ausgehend von segmentierten Schichtbildern führt dieses System die dreidimensionale Rekonstruktion, Klassifikation und statistische Auswertung inkrementell, also Schicht für Schicht, durch. Mittels der implementierten Deskriptoren konnte für den konkreten Anwendungsfall gezeigt werden, dass eine Klassifikation von Rissen, globularen Defekten und Artefakten mit ca. 92 % und die Klassifikation von Poren und nichtmetallischen Einschlüssen mit ca. 70 % Korrektklassifikationsrate gelingt. Auf Basis der getroffenen Modellannahmen und des HDIs konnte des Weiteren ein Abbruchkriterium implementiert und erfolgreich anhand real gemessener und simulierter Proben evaluiert werden. So war es im konkreten Testfall möglich, die Anzahl der zu fräsenden

*Ergebnisse*



Schichten um ca. 80 % zu reduzieren. Auch für das Laufzeitverhalten des gesamten Prozesses konnten unter Verwendung simulierter Stahlproben mit extremem Verunreinigungsgrad gezeigt werden, dass die Vorgaben des Projektes eingehalten werden können. Rekonstruktion, Klassifikation und statistische Auswertung benötigen für extreme Proben ca. 20s. Als letzter Schritt wurden alle Methoden des Rahmenwerks in einer einheitlichen Software bereitgestellt, die es auch dem unerfahrenen Nutzer möglich macht, testweise Auswertungen auf bereits gefrästen Proben durchzuführen. Diese als PAS bezeichnete Software implementiert alle explorativen Datenanalysewerkzeuge und statistischen Auswertungen und stellt komplexe Such- und Filtermechanismen in Form einer eigenen Anfragesprache zur Verfügung. Gepaart mit der Möglichkeit der Visualisierung rekonstruierter Defekte, kann das PAS unter anderem zur Erstellung von Trainingsmengen für die automatische Klassifikation verwendet werden.

Trotz der bereits vielversprechenden Ergebnisse lassen sich noch einige Optimierungen und Verbesserungen an den vorgestellten Methoden vornehmen. Dies betrifft insbesondere Kapitel 6, in dem anhand real gemessener Daten Modelle für die Größenverteilung und die räumlichen Verteilung parametrisiert wurden. Zunächst einmal stellt sich die Frage, ob die verwendeten Modelle adäquat gewählt wurden. Während in der Fachliteratur allgemeiner Konsens darüber herrscht, dass die logarithmische Normalverteilung ein geeignetes Modell zur Beschreibung der Größenverteilung von nichtmetallischen Einschlüssen ist [118, S. 314 ff.][9, 41], lassen sich Angaben über Modelle für die räumliche Verteilung kaum finden. Dies liegt vor allem daran, dass die meisten Detektionsverfahren nicht in der Lage sind die räumliche Position von Defekten in Stahlbrammen zu detektieren. Lediglich einige Untersuchungen der räumlichen Verteilung anhand zweidimensionaler Schnitte wurden durchgeführt [122]. Deshalb wurde in der vorliegenden Arbeit zunächst das einfachste Modell ausgewählt, nämlich der homogene PPP. Dieser wurde dann im weiteren Verlauf verwendet, um die CSR-Eigenschaft zu überprüfen. Schnell hat sich aber herausgestellt, dass die Verteilung der nichtmetallischen Einschlüsse im Einschlussband nicht homogen ist, sondern in Richtung der Oberfläche exponentiell zunimmt. Da die Inhomogenität nur in einer Raumrichtung auftritt, war es möglich, die Punktmuster zu homogenisieren und zu überprüfen, ob die Positionen der Defekte unabhängig voneinander sind. Diese Annahme konnte exemplarisch, abgesehen vom Nahbereich, bestätigt werden. In Zukunft macht es also Sinn, die räumliche Verteilung von nichtmetallischen Einschlüssen mit einem inhomogenen PPP mit geeigneter Intensitätsfunktion zu modellieren. Um die in Abschnitt 3.3.4 eingeführten Teststatistiken verwenden zu können, müssen diese aber auf einen inhomogenen PPP generalisiert werden. Baddeley und Møller [11] haben eine solche Generalisierung am Beispiel der  $K(r)$  Funktion

*Ausblick*

für den zweidimensionalen Fall durchgeführt. Die Erweiterung auf den dreidimensionalen Fall ist aber Gegenstand der aktuellen Forschung. Des Weiteren wurde die Parameterschätzung bisher nur exemplarisch an einigen wenigen Proben durchgeführt. Um wirklich statistisch verlässliche Aussagen über Parameterintervalle für beide Verteilungstypen treffen zu können, müssen diese Untersuchungen für eine Vielzahl von Proben unterschiedlicher Stahlsorten wiederholt werden. Erst dann kann auch das Abbruchkriterium adäquat kalibriert werden, da die Vermutung nahe liegt, dass unterschiedliche Stahlsorten auch unterschiedliche Verteilungsparameter besitzen. Gegebenenfalls muss also eine Datenbank erstellt werden, in der für jede vorkommende Stahlsorte eine eigene Zielbreite des HDIs hinterlegt ist. Dies war zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Arbeit nicht möglich, da zu wenig Proben vorlagen. Auch bei der Unterscheidung zwischen nichtmetallischen Einschlüssen und Poren besteht noch Optimierungspotenzial. Im Rahmen des Projektes wurde bereits von Bürger u. a. [20] gezeigt, dass durch Hinzuziehen von texturbasierenden Deskriptoren die Korrekturklassifikationsrate stark verbessert werden kann. Aber auch bei der Verwendung von Morphologie-basierten Deskriptoren sind noch Verbesserungen möglich. Insgesamt war die verwendete Trainingsmenge auf 464 Defekte beschränkt. Dies ist dem Fakt geschuldet, dass die Auswahl der Daten in der Trainingsmenge manuell per Sichtprüfung unter Verwendung eines Mikroskops erfolgt ist. In Zukunft plant der Projektpartner aber automatisch spektrale Aufnahmen angefräster Defekte zu erstellen. Damit ist es möglich, im großen Maßstab die Klasse einzelner Defekte zu bestimmen und somit große Trainingsmengen automatisiert zu erzeugen. Unter Verwendung dieser Trainingsmengen ist es sehr wahrscheinlich, dass auch die Ergebnisse der Klassifikation weiter verbessert werden können. Bei ausreichend hoher Korrekturklassifikationsrate kann dann das regelmäßige Erstellen von Spektralaufnahmen entfallen, da dieses im direkten Vergleich zur automatischen Klassifikation mittels maschinellen Lernens sehr zeitaufwändig ist.



## ANHANG

---

### A.1 KONFIGURATIONSTABELLEN























**Tabelle 13.:** Die 22 Kongruenzklassen mit ihren Elementen.  $n_j$  bezeichnet das repräsentative Element der Menge  $D_j$ . Dabei wird  $n_j$  so gewählt, dass es dem kleinsten Element der Menge entspricht.  $\#(D_j)$  ist die Anzahl der Elemente in der Klasse  $D_j$ .

$j$	$n_j$	$\#(D_j)$	$D_j$
0	0	1	{0}
1	1	8	{1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128}
2	3	12	{3, 5, 10, 12, 17, 34, 48, 68, 80, 136, 160, 192}
3	6	12	{6, 9, 18, 20, 33, 40, 65, 72, 96, 130, 132, 144}
4	7	24	{7, 11, 13, 14, 19, 21, 35, 42, 49, 50, 69, 76, 81, 84, 112, 138, 140, 162, 168, 176, 196, 200, 208, 224}
5	15	6	{15, 51, 85, 170, 204, 240}
6	22	8	{22, 41, 73, 97, 104, 134, 146, 148}
7	23	8	{23, 43, 77, 113, 142, 178, 212, 232}
8	24	4	{24, 36, 66, 129}
9	25	24	{25, 26, 28, 37, 38, 44, 52, 56, 67, 70, 74, 82, 88, 98, 100, 131, 133, 137, 145, 152, 161, 164, 193, 194}
10	27	24	{27, 29, 39, 46, 53, 58, 71, 78, 83, 92, 114, 116, 139, 141, 163, 172, 177, 184, 197, 202, 209, 216, 226, 228}
11	30	24	{30, 45, 54, 57, 75, 86, 89, 99, 101, 106, 108, 120, 135, 147, 149, 154, 156, 166, 169, 180, 198, 201, 210, 225}
12	31	24	{31, 47, 55, 59, 79, 87, 93, 115, 117, 143, 171, 174, 179, 186, 205, 206, 213, 220, 234, 236, 241, 242, 244, 248}
13	60	6	{60, 90, 102, 153, 165, 195}
14	61	24	{61, 62, 91, 94, 103, 110, 118, 122, 124, 155, 157, 167, 173, 181, 185, 188, 199, 203, 211, 217, 218, 227, 229, 230}
15	63	12	{63, 95, 119, 175, 187, 207, 221, 238, 243, 245, 250, 252}
16	105	2	{105, 150}
17	107	8	{107, 109, 121, 151, 158, 182, 214, 233}
18	111	12	{111, 123, 125, 159, 183, 190, 215, 222, 235, 237, 246, 249}
19	126	4	{126, 189, 219, 231}
20	127	8	{127, 191, 223, 239, 247, 251, 253, 254}
21	255	1	{255}

**Tabelle 14.:** Die 22 Kongruenzklassen mit ihren Elementen, dargestellt als Piktogramm mit der entsprechenden Belegung.  $n_j$  bezeichnet das repräsentative Element der Menge  $D_j$ . Dabei wird  $n_j$  so gewählt, dass es dem kleinsten Element der Menge entspricht.  $\#(D_j)$  ist die Anzahl der Elemente in der Klasse  $D_j$ .

$j$	$n_j$	$\#(D_j)$	$D_j$
0		1	{  }
1		8	{  }
2		12	{  }
3		12	{  }
4		24	{  }
5		6	{  }
6		8	{  }
7		8	{  }
8		4	{  }
9		24	{  }
10		24	{  }
11		24	{  }
12		24	{  }
13		6	{  }
14		24	{  }
15		12	{  }
16		2	{  }
17		8	{  }
18		12	{  }
19		4	{  }
20		8	{  }
21		1	{  }

**Tabelle 15.:** Tabelle mit den Minkowskifunktionalen der  $2 \times 2 \times 2$  Voxelblöcke für die 6er-, 18er- und 26er-Nachbarschaft.

	$n_j$	6er				18er				26er			
		8V	8S	16B	8 $\chi$	8V	8S	16B	8 $\chi$	8V	8S	16B	8 $\chi$
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	1	6	3	1	1	6	3	1	1	6	3	1
	3	2	8	2	0	2	8	2	0	2	8	2	0
	6	2	12	6	2	2	12	2	-2	2	12	2	-2
	7	3	10	1	-1	3	10	1	-1	3	10	1	-1
	15	4	8	0	0	4	8	0	0	4	8	0	0
	22	3	18	9	3	3	18	-3	-1	3	18	-3	-1
	23	4	12	0	-2	4	12	0	-2	4	12	0	-2
	24	2	12	6	2	2	12	6	2	2	12	6	-6
	25	3	14	5	1	3	14	1	-3	3	14	1	-3
	27	4	12	0	-2	4	12	0	-2	4	12	0	-2
	30	4	16	4	0	4	16	-4	0	4	16	-4	0
	31	5	10	-1	-1	5	10	-1	-1	5	10	-1	-1
	60	4	16	4	0	4	16	-4	0	4	16	-4	0
	61	5	14	-1	-3	5	14	-5	1	5	14	-5	1
	63	6	8	-2	0	6	8	-2	0	6	8	-2	0
	105	4	24	12	4	4	24	-12	4	4	24	-12	4
	107	5	18	3	-1	5	18	-9	3	5	18	-9	3
	111	6	12	-2	-2	6	12	-6	2	6	12	-6	2
	126	6	12	-6	-6	6	12	-6	2	6	12	-6	2
	127	7	6	-3	1	7	6	-3	1	7	6	-3	1
	255	8	0	0	0	8	0	0	0	8	0	0	0

## LITERATUR

---

- [1] Y. S. Abu-Mostafa, M. Magdon-Ismail und H.-T. Lin. *Learning From Data*. AMLBook, 2012.
- [2] D. Aiger und H. Talbot. „The phase only transform for unsupervised surface defect detection“. In: *2010 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. 2010, S. 295–302.
- [3] G. M. Amdahl. „Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large Scale Computing Capabilities“. In: *Proceedings of the Spring Joint Computer Conference*. 1967, S. 483–485.
- [4] Particle Analyser. *Particle Analyser*. 2015. URL: <http://bonej.org/particles> (besucht am 28.08.2015).
- [5] Robo-Met.3D Analytics. *A Multipurpose Optical Image Analysis Software*. 2015. URL: <http://www.ues.com/content/robomet3d> (besucht am 28.08.2015).
- [6] C. W. Anderson und S. G. Coles. „The Largest Inclusions in a Piece of Steel“. In: *Extremes* 5.3 (2003), S. 237–252.
- [7] T. Arens, F. Hettlich, C. Karpfinger, U. Kockelkorn, K. Lichtenegger und H. Stachel. *Mathematik*. Spektrum, 2010.
- [8] *Standard Test Methods for Determining the Inclusion Content of Steel*. Norm. 1985.
- [9] H. V. Atkinson und G. Shi. „Characterization of inclusions in clean steels: a review including the statistics of extremes methods“. In: *Progress in Materials Science* 48.5 (2002), S. 458–516.
- [10] A. Baddeley. *Stereology for Statisticians*. CRC Press, 2005.
- [11] A. Baddeley und J. Møller. „Non- and semi-parametric estimation of interaction in inhomogeneous point patterns“. In: *Statistica Neerlandica* 54.3 (2000), S. 329–350.
- [12] A. Baddeley, R. A. Moeed, C. V. Howard und A. Boyde. „Analysis of a Three-Dimensional Point Pattern with Replication“. In: *Journal of the Royal Statistical Society* 42.4 (1993), S. 641–668.
- [13] C. B. Barber, D. P. Dobkin und H. Huhdanpaa. „The Quickhull Algorithm for Convex Hulls“. In: *ACM Transactions on Mathematical Software* 22.4 (1996), S. 469–483.
- [14] J. K. Beddow. *Particle Characterization in Technology: Morphological Analysis*. CRC Press, 1984.

- [15] H. Bieri und W. Nef. „Algorithms for the euler characteristic and related additive functionals of digital objects“. In: *Computer Vision, Graphics, and Image Processing* 28.2 (1984), S. 166–175.
- [16] BoneJ. *A plugin for bone image analysis in ImageJ*. 2015. URL: <http://bonej.org> (besucht am 28.08.2015).
- [17] L. Breiman. „Random Forests“. In: *Machine Learning* 45.1 (2001), S. 5–32.
- [18] C. Buck, F. Bürger, J. Herwig und M. Thureau. „Rapid Inclusion and Defect Detection System for Large Steel Volumes“. In: *ISIJ International* 53.11 (2013), S. 1927–1935.
- [19] H. Büning und G. Trenkler. *Nichtparametrische statistische Methoden*. Walter de Gruyter, 1994.
- [20] F. Bürger, C. Buck, J. Pauli und W. Luther. „Image-based Object Classification of Defects in Steel using Data-driven Machine Learning Optimization“. In: *Proceedings of VISAPP 2014 - International Conference on Computer Vision Theory and Applications*. 2014.
- [21] F. Bürger, J. Herwig, C. Buck, W. Luther und J. Pauli. „An Auto-adaptive Measurement System for Statistical Modeling of Non-metallic Inclusions through Image-based Analysis of Milled Steel Surfaces“. In: *11th International Symposium on Measurement Technology and Intelligent Instruments*. 2013.
- [22] C. J. Burges. „A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition“. In: *Data Mining and Knowledge Discovery* 2.2 (1998), S. 121–167.
- [23] L. M. Cabalin, M. P. Mateo und J. J. Laserna. „Large area mapping of non-metallic inclusions in stainless steel by an automated system based on laser ablation“. In: *Spectrochimica Acta Part B* 59 (2004), S. 567–575.
- [24] C.-C. Chang und C.-J. Lin. „LIBSVM: A Library for Support Vector Machines“. In: *ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology* 2.3 (2011), S. 1–27.
- [25] M.-H. Chen und Q.-M. Shao. „Monte Carlo Estimation of Bayesian Credible and HPD Intervals“. In: *Journal of Computational and Graphical Statistics* 8.1 (1999), S. 69–92.
- [26] E. H. Chi. „A taxonomy of visualization techniques using the data state reference model“. In: *IEEE Symposium on Information Visualization*. 2000, S. 69–75.
- [27] K. Cooray und M. A. Ananda. „Modeling actuarial data with a composite lognormal-Pareto model“. In: *Scandinavian Actuarial Journal* 2005.5 (2005), S. 321–334.



- [28] T. H. Cormen, C. E. Leiserson, R. L. Rivest und C. Stein. *Introduction to algorithms*. MIT Press, 2009.
- [29] N. Cressie. *Statistics for Spatial Data*. Wiley, 1993.
- [30] E. Crow und K. Shimizu. *Lognormal Distributions: Theory and Applications*. CRC Press, 1987.
- [31] R. Dekkers. „Non-Metallic Inclusions in Liquid Steel“. Diss. Katholieke Universiteit Leuven, 2002.
- [32] R. Dekkers, B. Blanpain, F. Wollants, F. Haers, C. Vercruyssen und B. Gommers. „Non-metallic inclusions in aluminium killed steels“. In: *Ironmaking and Steelmaking* 29.6 (2002), S. 437–444.
- [33] P. Diggle. „A Kernel Method for Smoothing Point Process Data“. In: *Journal of the Royal Statistical Society* 34.2 (1985), S. 138–147.
- [34] *Mikroskopische Prüfung von Edeltählen auf nichtmetallische Einschlüsse mit Bildreihen*. Norm. 1985.
- [35] *Begriffsbestimmung für die Einteilung der Stähle*. Norm. DIN EN 10020. 2000.
- [36] W.-C. Doo, D.-Y. Kim, S.-C. Kang und K.-W. Yi. „Measurement of the 2-Dimensional Fractal Dimensions of Alumina Clusters Formed in an Ultra Low Carbon Steel Melt during RH Process“. In: *ISIJ International* 47.7 (2007), S. 1070–1072.
- [37] D. Eddelbuettel und R. Francois. „Rcpp: Seamless R and C++ Integration“. In: *Journal of Statistical Software* 40.8 (2011), S. 1–18.
- [38] K. Falconer. *Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications*. Wiley, 1990.
- [39] F. Fleischer, S. Eckel, I. Schmid, V. Schmidt und M. Kazda. „Point process modelling of root distribution in pure stands of *Fagus sylvatica* and *Picea abies*“. In: *Canadian Journal of Forest Research* 36.1 (2006), S. 227–237.
- [40] J. Flusser, B. Zitova und T. Suk. *Moments and Moment Invariants in Pattern Recognition*. Wiley, 2009.
- [41] A. Fuchs, H. Jacobi, K. Wagner und K. Wünnenberg. „Bestimmung des makroskopischen Reinheitsgrades an Stranggußbrammen durch eine Offline-Ultraschallprüfung“. In: *Stahl und Eisen* 113.11 (1993).
- [42] E. Gamma, R. Helm, R. E. Johnson und J. Vlissides. *Design Patterns. Elements of Reusable Object-Oriented Software*. Prentice Hall, 1994.
- [43] A. Gelman, J. B. Carlin, H. S. Stern, D. B. Dunson, A. Vehtari und D. B. Rubin. *Bayesian Data Analysis, Third Edition*. CRC Press, 2003.

- [44] J. K. Ghosh, M. Delampady und T. Samanta. *An Introduction to Bayesian Analysis: Theory and Methods*. Springer, 2007.
- [45] J. Gobrecht. *Werkstofftechnik - Metalle*. Oldenbourg, 2006.
- [46] C. Granqvist und R. A. Buhrman. „Ultrafine metal particles“. In: *Journal of Applied Physics* 47 (1976), S. 2200–2219.
- [47] H. Hadwiger. *Vorlesungen über Inhalt, Oberfläche und Isoperimetrie*. Springer, 1957.
- [48] A. Handl und S. Niermann. *Multivariate Analysemethoden*. Springer, 2010.
- [49] A. Hans, K. Krissian, J. Schoepf, R. Kikinis und C.-F. Westin. *Using 3D Convex Hulls to Detect Coronary Artery Stenoses and Atherosclerotic Vessel Wall Lesions in Contrast Enhanced MDCT Images*. Techn. Ber. Department of Radiology, Brigham und Women’s Hospital, Harvard Medical School, 2004.
- [50] R. M. Haralick. „Some Neighborhood Operators“. In: *Real-Time Parallel Computing*. Springer, 1981, S. 11–35.
- [51] B. Harrer und J. Kastner. „Charakterisierung von Inhomogenitäten in metallischen Gusswerkstoffen mittels 3D-Röntgen-Computertomographie“. In: *DGZfP Jahrestagung*. 2007.
- [52] L. He, Y. Chao und K. Suzuki. „Two Efficient Label-Equivalence-Based Connected-Component Labeling Algorithms for 3-D Binary Images“. In: *IEEE Transactions on Image Processing* 20.8 (2011), S. 2122–2134.
- [53] N. Henze. *Stochastik für Einsteiger: Eine Einführung in die faszinierende Welt des Zufalls*. Deutsch. Springer Spektrum, 2013.
- [54] M. Herlihy. *The art of multiprocessor programming*. Morgan Kaufmann, 2008.
- [55] J. Herwig, C. Buck, M. Thureau, J. Pauli und W. Luther. „Real-time characterization of non-metallic inclusions by optical scanning and milling of steel samples“. In: *Optical Micro- and Nanometrology IV*. 2012.
- [56] J. Herwig, S. Lessmann, Bürger F. und J. Pauli. „Adaptive anomaly detection within near-regular milling textures“. In: *International Symposium on Image and Signal Processing and Analysis*. 2013, S. 113–118.
- [57] T. K. Ho. „Random decision forests“. In: *Proceedings of the Third International Conference on Document Analysis and Recognition*. Bd. 1. 1995, S. 278–282.
- [58] C.-W. Hsu, C.-C. Chang und C.-J. Lin. *A practical guide to support vector classification*. 2010.
- [59] M.-K. Hu. „Visual pattern recognition by moment invariants“. In: *IRE Transactions on Information Theory* 8.2 (1962), S. 179–187.

- [60] R. Hundt. „Loop Recognition in C++/Java/Go/Scala“. In: *Proceedings of Scala Days 2011*. 2011.
- [61] J. Illian, A. Penttinen, H. Stoyan und D. Stoyan. *Statistical analysis and modelling of spatial point patterns*. Wiley, 2008.
- [62] ImageJ. *Image Processing and Analysis in Java*. 2015. URL: <http://rsbweb.nih.gov/ij/> (besucht am 28.08.2015).
- [63] ImageMetrology. *Particle and Pore Analysis*. 2015. URL: <http://www.imagemet.com/index.php?main=products&sub=modules&id=10> (besucht am 28.08.2015).
- [64] ISO/IEC 14977 *Information technology – Syntactic metalanguage – Extended BNF*. Norm. ISO/IEC 14977. 1996.
- [65] E. Ivanko und D. Perevalov. „Q-Gram Statistics Descriptor in 3D Shape Classification“. In: *Pattern Recognition and Image Analysis*. Bd. 3687. Springer, 2005, S. 360–367.
- [66] H. Jacobi, H.-J. Bähmann und J. Gronsfeld. „Neuartige Bestimmung des Makro-Reinheitsgrades am unkonventionell gewalzten Strangguß“. In: *Stahl und Eisen* 108 (1988), S. 946–958.
- [67] H. Jacobi und K. Wünnenberg. „Reinheitsgrad tiefentschwefelter calciumbehandelter Stähle“. In: *Stahl und Eisen* 107 (1987), S. 773–779.
- [68] R. A. Jarvis. „On the identification of the convex hull of a finite set of points in the plane“. In: *Information Processing Letters* 2.1 (1973), S. 18–21.
- [69] I. K. Kazmi, L. You und J. Zhang. „A Survey of 2D and 3D Shape Descriptors“. In: *Computer Graphics, Imaging and Visualization (CGIV)*. 2013, S. 1–10.
- [70] R. Klette und A. Rosenfeld. *Digital Geometry: Geometric Methods for Digital Picture Analysis*. Morgan Kaufmann, 2004.
- [71] C. Klinger, D. Bettge, R. Häcker, T. Heckel, D. Gohlke und D. Klingbeil. „Failure analysis on a broken ICE3 railway axle“. In: *Proceedings ESIS TC 24*. 2010.
- [72] E. Kreyszig. *Statistische Methoden und ihre Anwendungen*. Vandenhoeck & Ruprecht, 1979.
- [73] J. K. Kruschke. „Bayesian estimation supersedes the t test.“ In: *Journal of Experimental Psychology: General* 142.2 (2013), S. 573–603.
- [74] A. L. Kundu, K. M. Gupt und P. K. Rao. „Morphology of nonmetallic inclusions using silicon, aluminum, and calcium-silicon alloy in steel melt“. In: *Metallurgical Transactions B* 20.5 (1989).

- [75] H.-M. Kuss, H. Mittelstaedt und G. Mueller. „Inclusion mapping and estimation on inclusion contents in ferrous materials by fast scanning laser-induced optical emission spectrometry“. In: *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* 20 (2005), S. 730–735.
- [76] C. Lang, J. Ohser und R. Hilfer. „On the analysis of spatial binary images“. In: *Journal of Microscopy* 203.3 (2001), S. 303–313.
- [77] Oxford Lasers. *Visisize Particle Sizing Software*. 2015. URL: <http://www.oxfordlasers.com/imaging/particle-size-measurement/visisize-particle-sizing-software/> (besucht am 28.08.2015).
- [78] Leica. *Leica Steel Expert 2.0*. 2015. URL: <http://www.leica-microsystems.com/de/produkte/mikroskop-software/mikroskopsoftware-fuer-industrie-und-materialanalyse/details/product/leica-steel-expert-20/downloads> (besucht am 28.08.2015).
- [79] T. Leininger. „Bayesian Analysis of Spatial Point Pattern“. Diss. Duke University, 2014.
- [80] M. Levoy. „Display of Surfaces from Volume Data“. In: *IEEE Comput. Graph. Appl.* 8.3 (1988), S. 29–37.
- [81] P. Lewis und G. S. Shedler. „Simulation of nonhomogeneous poisson processes by thinning“. In: *Naval Research Logistics Quarterly* 26.3 (1979), S. 403–413.
- [82] H. Li, L. Ning, J. Zhang und Y. Sasaki. „Simulation research on monomer agglomeration of nonmetallic inclusions in steel with a diffusion limited aggregation model“. In: *Journal of University of Science and Technology Beijing, Mineral, Metallurgy, Material* 13.2 (2006), S. 117.
- [83] T. Li, S.-I. Shimasaki, S. Taniguchi, K. Uesugi und S. Narita. „Morphology of Nonmetallic-inclusion Clusters Observed in Molten Metal by X-ray Micro-Computed Tomography (CT)“. In: *ISIJ International* 53.11 (2013), S. 1943–1952.
- [84] C. N. Likos und K. R. Mecke. „Statistical morphology of random interfaces in microemulsions“. In: *Chemical Physics* 102.23 (1995), S. 9350–9361.
- [85] J. Lindblad und I. Nyström. „Surface Area Estimation of Digitized 3D Objects Using Weighted Local Configurations“. In: *Image and Vision Computing* 23.2 (2005), S. 111–122.
- [86] C. H. Lo und H. S. Don. „3-D Moment Forms: Their Construction and Application to Object Identification and Positioning“. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 11.10 (1989), S. 1053–1064.

- [87] S. Lobregt, P. W. Verbeek und Frans C. A. Groen. „Three-Dimensional Skeletonization: Principle and Algorithm“. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 2.1 (1980), S. 75–77.
- [88] B. B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry of Nature*. Spektrum, 1977.
- [89] C. Martinues-Ortiz. „2D and 3D Shape Descriptors“. Diss. University of Exeter, 2010.
- [90] M. P. Mateo, L. M. Cabalin und J. J. Laserna. „Automated Line-Focused Laser Ablation for Mapping of Inclusions in Stainless Steel“. In: *Applied Spectroscopy* (2006), S. 1461–1467.
- [91] MediaCybernetics. *Particle Detection and Analysis*. 2015. URL: <http://www.mediacy.com/index.aspx?page=ParticleAnalysis> (besucht am 28.08.2015).
- [92] *Metallographische Prüfung des Gehaltes nichtmetallischer Einschlüsse in Stählen mit Bildreihen*. Norm. DIN EN 10247. 2007.
- [93] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller und E. Teller. „Equation of State Calculations by Fast Computing Machines“. In: *The Journal of Chemical Physics* 21 (1953), S. 1087–1092.
- [94] K. Michielsen und H. De Raedt. „Integral-geometry morphological image analysis“. In: *Physics Reports* 347.6 (2001), S. 461–538.
- [95] T. M. Mitchell. *Machine Learning*. McGraw-Hill, 1997.
- [96] M. Mitzenmacher. „A Brief History of Generative Models for Power Law and Lognormal Distributions“. In: *Internet Mathematics* 1.2 (2004), S. 226–251.
- [97] Y. Murakami. *Metal fatigue*. Elsevier, 2002.
- [98] J. Ohser und F. Mücklich. *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*. Wiley, 2000.
- [99] J. Ohser und K. Schladitz. *3D Images of Materials Structures*. Wiley, 2006.
- [100] Olympus. *Non-Metallic Inclusion Analysis in Steel*. 2015. URL: <http://www.olympus-ims.com/de/applications/nmi-analysis/> (besucht am 28.08.2015).
- [101] S. Ovtchinnikov. „Kontrollierte Erstarrung und Einschlußbildung bei der Desoxidation von hochreinen Stahlschmelzen“. Diss. University of Freiberg, 2002.
- [102] L. Papula. *Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaftler Band 3*. German. Vieweg + Teubner, 2011.

- [103] E. Parra-Denis, C. Barat, D. Jeulin und C. Ducottet. „3D complex shape characterization by statistical analysis: Application to aluminium alloys“. In: *Materials Characterization* 59.3 (2008), S. 338–343.
- [104] E. Parra-Denis, C. Ducottet und D. Jeulin. „3D morphological analysis of non metallic inclusions“. In: *9th European congress on stereology and image analysis*. 2005, S. 111–122.
- [105] Paxit. *Particle Size Analysis*. 2015. URL: <http://www.paxit.com/particle-size-analysis/> (besucht am 28.08.2015).
- [106] E. Pirard. „3D IMAGING OF INDIVIDUAL PARTICLES: A REVIEW“. In: *Image Analysis & Stereology* 31.2 (2012), S. 65–77.
- [107] E. Plöckinger und H. Straube. „Die Desoxydation“. In: *Die physikalische Chemie der Eisen- und Stahlerzeugung*. Verein Deutscher Eisenhüttenleute, 1964.
- [108] The R Project. *The R Project for Statistical Computing*. 2015. URL: <https://www.r-project.org/> (besucht am 28.08.2015).
- [109] F. Rakoski. „Nichtmetallische Einschlüsse in Stählen“. In: *Stahl und Eisen* 114.7 (1994), S. 71–77.
- [110] F. Rakoski und H. Jacobi. „Hohe Reinheit der Stähle als Kriterium der Werkstoffentwicklung“. In: *Stahl und Eisen* 116 (1996), S. 59–68.
- [111] B. D. Ripley. „The Second-Order Analysis of Stationary Point Processes“. In: *Journal of Applied Probability* 13.2 (1976).
- [112] C. Robert und G. Casella. *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer, 2005.
- [113] Robo-Met.3D. *A Fully Automated, Serial Sectioning System For Three-Dimensional Microstructural Investigations*. 2015. URL: <http://www.ues.com/content/robomet3d> (besucht am 28.08.2015).
- [114] L. Rokach und O. Maimon. *Data Mining with Decision Trees: Theory and Applications*. World Scientific Pub Co, 2007.
- [115] A. Rosenfeld und J. L. Pfaltz. „Sequential Operations in Digital Picture Processing“. In: *Journal of the ACM* 13.4 (1966), S. 471–494.
- [116] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton und R. J. Williams. „Learning representations by back-propagating errors“. In: *Nature* 323.9 (1986), S. 533–536.
- [117] F. A. Sadjadi und E. L. Hall. „Three-Dimensional Moment Invariants“. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 2.2 (1980), S. 127–136.
- [118] S. A. Saltykov. *Stereometrische Metallographie*. VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 1974.

- [119] L. A. Santaló. *Integral Geometry and Geometric Probability*. Cambridge University Press, 2004.
- [120] K. Schladitz, J. Ohser und W. Nagel. „Measuring Intrinsic Volumes in Digital 3d Images“. In: *Discrete Geometry for Computer Imagery*. Bd. 4245. Springer, 2006, S. 247–258.
- [121] J. Serra. *Image Analysis and Mathematical Morphology*. Academic Press, 1982.
- [122] U. Siegel, J. Lambrecht und D. Stoyan. „Die Titaninhomogenität in Gußblöcken titanstabilisierter korrosionsbeständiger Stähle“. In: *Neue Huette* 35.1 (1990), S. 81–89.
- [123] P. Soille. *Morphological Image Analysis - Principles and Applications*. Springer, 2003.
- [124] M. Sokolova und G. Lapalme. „A systematic analysis of performance measures for classification tasks“. In: *Information Processing and Management* 45.4 (2009), S. 427–437.
- [125] SpatStat. *Analysing Spatial Point Patterns*. 2015. URL: <https://spatstat.github.io/> (besucht am 28. 08. 2015).
- [126] J. E. Spowart, H. Mullens und B. T. Puchala. „Collecting and analyzing microstructures in three dimensions: A fully automated approach“. English. In: *JOM* 55.10 (2003), S. 35–37. ISSN: 1047-4838.
- [127] D. I. Stefano und A. Bulgarelli. „A simple and efficient connected components labeling algorithm“. In: *International Conference on Image Analysis and Processing*. 1999, S. 322–327.
- [128] E. Steinmetz und H.-U. Lindberg. „Ausbildungsformen und Entstehung von Aluminiumoxiden in Rohblöcken und Stranggußbrammen“. In: *Stahl und Eisen* 97 (1977), S. 1154–1159.
- [129] E. Steinmetz und H.-U. Lindberg. „Oxidmorphologie bei Mangan- und Mangan-Silicium-Desoxidation“. In: *Archiv fuer deutsches Eisenhuettenwesen* 47 (1976), S. 71–76.
- [130] E. Steinmetz und H.-U. Lindberg. „Wachstumsformen von Aluminiumoxiden in Stählen“. In: *Archiv fuer deutsches Eisenhuettenwesen* 48 (1977), S. 569–574.
- [131] E. Steinmetz, H.-U. Lindenberg und F.-J. Wahlers. „Morphologie der Oxide und Sulfide bei der Desoxidation von Eisen-schmelzen mit Mangan und Silicium“. In: *Stahl und Eisen* 106 (1986), S. 611–618.
- [132] M. Stieb. *Mechanische Verfahrenstechnik - Partikeltechnologie 1*. Springer, 2007.
- [133] D. Stoyan, W. S. Kendall und J. Mecke. *Stochastic Geometry and Its Applications*. Wiley, 2013.

- [134] D. Stoyan und H. Stoyan. *Frakale Formen Punktfelder: Methoden der Geometrie - Statistik*. Akademie Verlag, 1992.
- [135] M. Thureau, C. Buck und W. Luther. „IPFViewer – A Visual Analysis System for Hierarchical Ensemble Data“. In: *Proceedings of the 5th International Conference on Information Visualization Theory and Applications*. 2014, S. 259–266.
- [136] M. Thureau, C. Buck und W. Luther. „IPFViewer: Incremental, Approximate Analysis of Steel Samples“. In: *Proceedings of the 13th SIGRAD*. 2014.
- [137] Flemming Topsøe. „On the Glivenko–Cantelli theorem“. In: *Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete* 14.3 (1970), S. 239–250.
- [138] J. Toriwaki und H. Yoshida. *Fundamentals of Three-Dimensional Digital Image Processing*. Springer, 2009.
- [139] S. Torquato. *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer, 2002.
- [140] M.-A. Van Ende, M. Guo, E. Zinngrebe, B. Blanpain und I.-H. Jung. „Evolution of Non-Metallic Inclusions in Secondary Steelmaking: Learning from Inclusion Size Distributions“. In: *ISIJ International* 53.11 (2013), S. 1974–1982.
- [141] K. Walz. „Die Bestimmung der Kornform der Zuschlagstoffe“. In: *Die Betonstraße* 11.2 (1936), S. 27–32.
- [142] T. Wehrbein. „Interaktive webbasierte Auswertung von nichtmetallischen Einschlüssen in Brammen“. University of Duisburg-Essen, 2012.
- [143] S. D. Wicksell. „The Corpuscle Problem: A Mathematical Study of a Biometric Problem“. In: *Biometrika* 17.12 (1925), S. 84–99.
- [144] T. Wiegand und K. A. Moloney. *Handbook of Spatial Point-Pattern Analysis in Ecology*. CRC Press, 2013.
- [145] A. Williams. *C++ concurrency: Pratical Multithreading*. Manning, 2011.
- [146] G. Windreich, N. Kiryati und G. Lohmann. „Surface Area Estimation in Practice“. In: *Discrete Geometry for Computer Imagery*. Bd. 2886. Springer, 2003, S. 358–367.
- [147] I. H. Witten, E. Frank und M. A. Hall. *Data mining : practical machine learning tools and techniques*. Morgan Kaufmann, 2011.
- [148] T. A. Witten und L. M. Sander. „Diffusion-limited aggregation“. In: *Physical Review B* 27.9 (1983).
- [149] K. Wu, E. Otoo und K. Suzuki. „Optimizing two-pass connected-component labeling algorithms“. In: *Pattern Analysis and Applications* 12.2 (2009), S. 117–135.



- [150] Zeiss. *The NMI System*. 2015. URL: [https://www.zeiss.com/microscopy/en\\_de/products/imaging-systems/non-metallic-inclusions.html](https://www.zeiss.com/microscopy/en_de/products/imaging-systems/non-metallic-inclusions.html) (besucht am 28.08.2015).
- [151] D. Zhang und G. Lu. „Review of shape representation and description techniques“. In: *Pattern Recognition* 37.1 (2004), S. 1–19.
- [152] L. Zhang und B. G. Thomas. „State of the Art in Evaluation and Control of Steel Cleanliness“. In: *ISIJ International* 43.3 (2003), S. 271–291.
- [153] J. Ziegel und M. Kiderlen. „Stereological estimation of surface area from digital images“. In: *Image Analysis & Stereology* 29.2 (2011), S. 99–110.