

Lösung eines inversen Problems aus der Biomechanik via Finite Elemente

- Diplomarbeit -
am
Mathematischen Institut
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von

Christian Clason¹

18. Juli 2001

Erstgutachter und Betreuer : Prof. Dr. W. Richert
Zweitgutachter : Prof. Dr. A. Sachs

Mathematisches Institut
Universität München
D-80333 München

¹e-mail: clason@appl-math.tu-muenchen.de

Zusammenfassung

Aufgrund der Komplexität des Kausystems gestaltet sich die chirurgische Versorgung von Defekten im Unterkieferbereich als schwierig. Eine wesentliche Rolle bei der Entwicklung und Anwendung von Osteosyntheseverfahren soll die experimentelle Analyse an einem biomechanischen Prüfstand spielen. Da aus verschiedenen Gründen Humanpräparate für diese Tests nicht zur Verfügung stehen, besteht die Notwendigkeit für einen künstlichen Standardkiefer, der in seinen elastomechanischen Eigenschaften menschlichem Knochengewebe möglichst nahe kommt. Zur Bestimmung der (in erster Näherung homogenen und isotropen) Materialparameter des Unterkiefers wurden die Meßdaten aus einer Versuchsreihe mit den Ergebnissen einer mathematischen Modellierung verglichen; dabei wurde die Geometrie aus einem Computertomographie-Scan des Präparats übernommen und die Lösung der linearen Elastizitätsgleichungen mit der Methode der Finiten Elemente bestimmt. Ein nichtlinearer Ausgleich der berechneten Verschiebungen auf die experimentell bestimmten durch ein Levenberg-Marquardt-Verfahren lieferte eine Näherung für die gesuchten Parameter. Diese war konsistent mit den aus der Literatur bekannten Schätzungen und gibt damit Hinweis auf das für den Standardkiefer benötigte Material. Eine anschließende Validierung der Simulation mit den so bestimmten Materialdaten durch biomechanische Versuche zeigte gute Übereinstimmungen.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Mathematisches Modell der Biomechanik des Unterkiefers | 5 |
| 2.1 | Überblick über die mathematische Elastizitätstheorie | 6 |
| 2.1.1 | Kinematik | 6 |
| 2.1.2 | Gleichgewichtsbedingungen | 8 |
| 2.1.3 | Materialgesetze | 13 |
| 2.2 | Problemstellung | 21 |
| 2.2.1 | Anatomie des Unterkiefers und Kiefergelenks | 21 |
| 2.2.2 | Kausystem und Muskelkräfte | 22 |
| 2.2.3 | Aufbau von Knochengewebe | 23 |
| 2.3 | Vereinfachtes Modell | 28 |
| 3 | Mathematische Lösung des Modells | 33 |
| 3.1 | Schwache Formulierung des Randwertproblems | 33 |
| 3.2 | Die allgemeine Variationsaufgabe | 37 |
| 3.3 | Existenz der Lösung | 39 |
| 3.4 | Diskretisierte Fassung der Variationsaufgabe | 43 |
| 3.5 | Wahl des Finite-Elemente-Raums | 44 |
| 3.6 | Aufstellen des linearen Gleichungssystems | 47 |
| 3.7 | Konvergenzabschätzungen | 49 |
| 4 | Experimente | 53 |
| 4.1 | Beschreibung des biomechanischen Prüfstands | 53 |
| 4.2 | Durchführung der Experimente | 56 |
| 5 | Numerische Lösung mit der Finite-Elemente-Methode | 59 |
| 5.1 | Beschreibung der Finite-Elemente-Umgebung FeliCs | 59 |
| 5.2 | Gittergenerierung | 61 |
| 5.3 | Lösung des linearen Gleichungssystems: Block-orientiertes Crout-Verfahren . | 64 |
| 6 | Identifizierung der Materialparameter | 67 |
| 6.1 | Regularisierung inverser Probleme | 67 |
| 6.2 | Numerische Behandlung: Die Methode von Levenberg-Marquardt | 70 |
| 6.2.1 | Tikhonov-Regularisierung mit dem Levenberg-Marquardt-Verfahren | 70 |
| 6.2.2 | Numerische Realisierung | 71 |

| | |
|---|-----------|
| 7 Resultate | 73 |
| 7.1 Linearität der Kraft-Deformationskurve | 74 |
| 7.2 Materialdaten | 75 |
| 7.3 Vergleich von Experiment und Simulation | 75 |
| 8 Diskussion | 77 |
| Literaturverzeichnis | 81 |
| Index | 85 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|-----|--|----|
| 1.1 | Osteosyntheseplatten | 2 |
| 2.1 | Kraft-Deformationskurve | 5 |
| 2.2 | Mandibula | 21 |
| 2.3 | Kiefergelenk | 22 |
| 2.4 | Schematische Ansicht der Kaumuskulatur | 24 |
| 2.5 | Aufbau von Knochengewebe | 25 |
| 2.6 | Lamellenstruktur der Corticalis | 26 |
| 4.1 | Prüfstand (Gesamtansicht) | 54 |
| 4.2 | Prüfstand (Erfassung) | 55 |
| 4.3 | Versuchsaufbau | 57 |
| 5.1 | Segmentierung der CT-Aufnahme | 61 |
| 5.2 | Oberflächengitter | 63 |
| 5.3 | Tetraedernetz | 64 |
| 7.1 | Meßpunkte | 73 |
| 7.2 | Linearität der Kraft-Deformationskurve | 74 |
| 7.3 | Vergleich von Experiment und Simulation | 76 |
| 7.4 | Visualisierung der Simulationsergebnisse | 76 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Muskelkräfte | 24 |
| 2.2 | Materialdaten von kortikalem Knochen | 27 |
| 2.3 | Materialdaten der Spongiosa | 28 |
| 7.1 | Linearität der Kraft-Deformationskurve | 75 |
| 7.2 | Berechnete Materialparameter | 75 |

Kapitel 1

Einleitung

Motivation

In der Traumatologie und rekonstruktiven Chirurgie des Unterkiefers kommen sogenannte *Osteosyntheseplatten* zur Fixierung von Defekten zum Einsatz. Dabei stoßen die Anwender auf verschiedene Probleme. Die topologischen und morphologischen Unterschiede erschweren das Anpassen des Implantats an den Knochen, der wiederum nur sehr schwer zugänglich ist. Bei der Befestigung müssen neben Weichteilen wie Muskeln und Sehnen hauptsächlich Nerven unversehrt bleiben. Für eine schnelle Kontaktheilung¹ ist es wichtig, daß die Frakturstellen bewegungsfrei fixiert werden. Die Erfolgsquote liegt dabei deutlich unter der der Versorgung z. B. unterer Extremitäten, was durch die wenig optimale Dimensionierung und Oberflächengestaltung begründet ist. Abbildung 1.1 zeigt eine Auswahl verschiedener in der Praxis verwendeter Osteosyntheseplatten.

Hinzu kommt, daß etliche grundlegende Fragen über die Biomechanik des Unterkiefers noch immer nicht zufriedenstellend beantwortet sind. So sind die meisten Parameter des Kauvorgangs, z. B. die exakten Muskelkräfte, ebensowenig bekannt wie die genauen mechanischen Eigenschaften des Unterkiefers. Daher beruht die Entwicklung und Anwendung neuer Osteosyntheseverfahren traditionell auf empirischen Trial-and-Error-Verfahren oder hochinvasiven Techniken wie Tierversuchen, die schon aufgrund morphologischer Unterschiede in ihrer Aussagekraft stark eingeschränkt bleiben.

Eine weitere Möglichkeit zur Prüfung von Osteosyntheseverfahren stellen biomechanische Experimente mit Humanpräparaten dar. Diese sind jedoch mit erheblichen Problemen hinsichtlich Verfügbarkeit, Umgang, Präparation und Haltbarkeit verbunden. Zusätzlich sind durch die interindividuellen Unterschiede, die bis zu 100% des Durchschnitts betragen können, enorme Stichprobengrößen notwendig. Im Bereich der unteren Extremitäten haben sich deshalb synthetische Ersatzmodelle bewährt, die gleichzeitig eine Standardisierung der Experimente und damit eine unabhängige Validierung ermöglichen. Eine Diskussion des Einsatzes von Ersatzpräparaten findet sich am Beispiel des Unterschenkelknochens bei [CrVi00].

¹primäre Heilung, d. h. das direkte Verwachsen des Knochens an den Kontaktstellen. Im Gegensatz dazu wird bei der sekundären Knochenheilung der Spalt mit Hilfe von Knorpelgewebe überbrückt, das sich im Laufe von Monaten zu Knochen umbaut.



Abbildung 1.1: Verschiedene Modelle von Osteosyntheseplatten für die Versorgung von Kieferdefekten.

Zielsetzung

Auch für die experimentelle Analyse von Osteosyntheseverfahren im Mund-Kiefer-Gesichtsbereich ist deshalb ein synthetischer *Standardkiefer* wünschenswert, der in seinen elastomechanischen Eigenschaften dem humanen Unterkiefer gleicht.

Für die Spezifikation dieses Ersatzkiefers ist die Kenntnis sowohl der Geometrie des Kiefers als auch seiner Materialparameter notwendig. Erstere kann aus geeigneten Computertomographieaufnahmen von Unterkiefern *in vivo* bzw. repräsentativen Präparaten entnommen werden. Die Bestimmung der Materialdaten ist jedoch mit erheblichen Schwierigkeiten verbunden. Die Angaben in der Literatur (vgl. [NaMe88]) weisen eine beträchtliche Unsicherheit auf und sind zum Teil widersprüchlich; insbesondere was die Abhängigkeit des elastischen Verhaltens von der Belastungsrichtung und dem Ort angeht. Hinzu kommt, daß die experimentelle Bestimmung destruktive Prüfungen erfordert. Aufgrund der Anisotropie des Knochens sind drei mechanische Versuche an verschiedenen Präparaten erforderlich, die wegen der Inhomogenität unterschiedliche Eigenschaften haben können. Zusätzlich kann durch kleine Ausrichtungsfehler bei diesen Prüfungen ein Materialparameter von einem anderen völlig überdeckt werden, z. B. wenn ein Biegemoment während einer Axiallast auftritt.

Deshalb soll in dieser Arbeit die Bestimmung der Materialdaten aus Experimenten erfolgen, die den tatsächlichen, physiologischen, Belastungen *in vivo* nachempfunden sind.

Dazu soll durch eine Parameteridentifikation aus dem Vergleich experimenteller Daten mit einer numerischen Simulation auf die gesuchten Materialkonstanten geschlossen werden. Dieses Vorgehen zeichnet sich auch dadurch aus, daß es zerstörungsfrei ist; die Experimente sind also reproduzierbar. Die Vergleichbarkeit von Experiment und Simulation wird dabei durch eine gemeinsame Durchführung gewährleistet.

Frühere Arbeiten

Kritisch für das Vorgehen ist die numerische Simulation des elastischen Verhaltens des Unterkiefers. Wegen ihrer Eignung für irreguläre und inhomogene Gebiete sowie ihrer Flexibilität in Bezug auf Randbedingungen bietet sich dafür die Methode der Finiten Elemente an. Sie wird schon lange für einfachere Knochen wie Ober- und Unterschenkel eingesetzt. Die Modellierung des Kiefers ist jedoch aufgrund der extrem komplexen Morphologie und der komplizierten Randbedingungen schwierig.

Aus diesem Grund basierten die ersten Finite-Elemente-Modelle des Unterkiefers auf zweidimensionalen Betrachtungen oder behandelten ihn als gebogenen Balken. Dementsprechend waren die Ergebnisse wenig aussagekräftig. Als erste komplett dreidimensionale Modellierung kann die Arbeit von Koriath et al. [KoRH92] gelten, die immer noch zu den am weitesten fortgeschrittenen Modellen zählt. Das von Hand erstellte Gitter, basierend auf Schichtbildern aus einem Computertomographen, wurde mit Hilfe der CAD/CAE-Software I-DEAS analysiert. Es zeichnet sich vor allem aus durch eine umfassende Berücksichtigung sämtlicher Gewebetypen des Unterkiefers, inklusive Knochenhäute, Zähne und Zahnschmelz. Insbesondere wurde das Knochengewebe als orthotropes Material, d. h. mit drei aufeinander senkrecht stehenden Symmetrieebenen, modelliert. Das Gitter ist jedoch mit ca. 5500 Knoten zu grob, um die Geometrie des Kiefers hinreichend zu repräsentieren.

Im Gegensatz dazu wurde von Hart et al. [HHTB⁺92] der Knochen als (lokal) transvers isotrop angesehen, d. h. das Material verhält sich symmetrisch senkrecht zu einer ausgezeichneten Symmetrieachse. Auch beschränkt man sich auf die Modellierung von kompaktem und spongiösem Knochen. Dafür lag ein besonderer Schwerpunkt auf der Geometrie des Unterkiefers; ausgehend wieder von Schichtbildern wurde mit der Finite-Elemente-Software PATRAN durch Kantenerkennung ein Gitter aufgestellt, daß 10000 Knoten umfaßt. Durch eine Konvergenzanalyse wurde diese Knotenzahl auch als günstig ermittelt.

Beide Modelle zeichnen sich durch eine relativ gute Wiedergabe einfacher Belastungssituationen aus, jedoch werden durch die schichtorientierte Gittererzeugung wichtige Details der Geometrie ignoriert. Hinzu kommt, daß die Übernahme der Materialdaten aus der Literatur mit erheblicher Unsicherheit verbunden ist. Deshalb soll in der vorliegenden Arbeit die exakte Geometrie aus einem Volumendatensatz eines Computertomographen extrahiert werden. Die Materialparameter sollen durch die Lösung eines inversen Problems aus biomechanischen Experimenten gewonnen werden. Dafür beschränkt man sich auf ein homogenes Knochenmaterial, das in erster Näherung als lineares, isotropes Material angenommen wird.

Vorgehen

Zunächst sollen experimentelle Daten über die Verformung eines humanen Unterkieferpräparats unter verschiedenen Belastungen gewonnen werden. Der hierfür verwendete bio-

mechanische Prüfstand wird in Kapitel 4 beschrieben. Dort werden auch Aufbau und Durchführung der Versuche dargestellt.

Diese Experimente werden dann in einer numerischen Simulation nachgebildet. Das zugrundeliegende mathematische Modell ist Gegenstand von Kapitel 2. Aufbauend auf den Grundlagen der mathematischen Elastizitätstheorie, sowie den anatomischen und physiologischen Gegebenheiten, die speziell bei der Modellierung des Unterkiefers eine Rolle spielen, wird auf das zu behandelnde elliptische Randwertproblem zweiter Ordnung hingeführt. Insbesondere wird auf die vereinfachenden Annahmen, die in dieses Modell einfließen, eingegangen.

Die numerische Lösung dieses Randwertproblems erfolgt mit der Methode der Finiten Elemente. In Kapitel 3 wird dazu zuerst die Existenz der zugrundeliegenden schwachen Lösung gezeigt und das diskretisierte Problem über den Galerkin-Ansatz formuliert. Daran schließen sich die Darstellung des verwendeten Finite-Elemente-Raums, des resultierenden Gleichungssystems sowie einige Konvergenzbetrachtungen an.

Kapitel 5 beschreibt die numerische Realisierung der Lösung mit der Finite-Elemente-Umgebung FeliCs. Besonderer Schwerpunkt ist dabei die erforderliche Gittergenerierung und die Lösung des dünnbesetzten Gleichungssystems.

Die Identifizierung der Materialparameter als inverses Problem wird in Kapitel 6 diskutiert. Zur Lösung und Regularisierung des Problems wird das Verfahren von Levenberg-Marquard eingesetzt. Dieses Regularisierungsverfahren wird in Abschnitt 6.2 besprochen und seine numerische Durchführung erläutert.

Zur Validierung der Ergebnisse wurde schließlich ein Experiment durch eine numerische Simulation mit den so ermittelten Materialparametern nachvollzogen und die berechneten Verschiebungen mit den experimentell bestimmten verglichen. Die Resultate werden in Kapitel 7 dargestellt. Eine Diskussion des Vorgehens und der Ergebnisse erfolgt dann in Kapitel 8.

Kapitel 2

Mathematisches Modell der Biomechanik des Unterkiefers

Das mathematische Modell für die Aufgabe, das Verhalten eines Körpers unter Belastung zu berechnen, liefert die Festkörpermechanik. Eine einfache Möglichkeit, die mechanischen Eigenschaften eines Körpers zu beschreiben, ist, sie durch ein Kraft-Deformations-Diagramm auszudrücken (2.1). Dabei wird der Körper in passender Weise (Zug, Druck, Torsion, Biegung) belastet, und die Verformung in Abhängigkeit der aufgebrachten Kraft aufgezeichnet. Typischerweise sind dabei Kraft und Verformung anfangs linear proportional zueinander, und man spricht von *elastischem* Verhalten. Nach Erreichen der *proportionalen Grenze* reduziert sich die Steigung der Kurve. Wenn die Last nach Überschreiten dieses Punkts entfernt wird, beobachtet man gewöhnlich eine Hysterese; ab der *elastischen Grenze* gibt das Material nach, es verformt sich *plastisch*. Bei weiterer Belastung versagt das Material, und es kommt zu Rissen oder Brüchen. Die Kraft, die zum Erreichen dieser *Bruchgrenze* nötig ist, wird als *Festigkeit* des Körpers bezeichnet.

Da man sich bei den in dieser Arbeit betrachteten Kräften im linearen Bereich der Kurve befindet (siehe auch 7.1), läßt sich das Deformationsverhalten allein mit den Mitteln der Elastizitätstheorie beschreiben. Deshalb soll in diesem Kapitel zuerst eine kurze Einführung in die mathematische Elastizitätstheorie geben werden (Abschnitt 2.1). Neben den konstitutiven Gleichungen und wichtigsten Definitionen sind vor allem die Annahmen, die auf die *lineare* Theorie hinführen, von Interesse. Für eine ausführlichere Darstellung und insbesondere Beweise der zitierten Sätze wird auf die umfassende Darstellung von Ciarlet ([Ciar88]) verwiesen. In Abschnitt 2.2 soll dann auf die physiologischen Hinter-

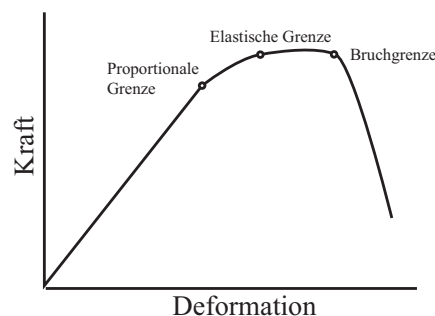


Abbildung 2.1: Kraft-Deformationskurve (schematisch)

gründe eingegangen werden, die für eine Modellierung des menschlichen Unterkiefers von Bedeutung sind. Das in dieser Arbeit verwendete, vereinfachte, Modell wird schließlich in Abschnitt 2.3 dargestellt und gerechtfertigt.

2.1 Überblick über die mathematische Elastizitätstheorie

In der dreidimensionalen Elastizitätstheorie betrachtet man einen im Raum ausgedehnten, materiellen, unbewegten Körper, auf den Volumen- und Oberflächenkräfte wirken. Sind diese zeitkonstant, so kann sich ein neuer Gleichgewichtszustand einstellen. Das Grundproblem ist nun, diesen Zustand, d. h. die auftretenden Verformungen und inneren Kräfte (Spannungen), zu beschreiben. Die dafür nötigen Gleichungen lassen sich ableiten aus der Kinematik, den Gleichgewichtsbedingungen und den Materialgesetzen.

2.1.1 Kinematik

In der Regel identifiziert man den Körper mit der Teilmenge $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, die er im spannungsfreien Zustand einnimmt. Der verformte Zustand dieses Körpers kann dann durch die Abbildung $\varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ beschrieben werden; insbesondere beschreibt $\varphi(x)$ den Ort des Punktes, der sich im spannungsfreien Zustand am Ort x befindet:

Definition 2.1 (Deformation, Verschiebung, Referenzkonfiguration) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein Gebiet¹. Eine Abbildung $\varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ heißt C^1 -Deformation, falls gilt:

- φ ist auf Ω injektiv,
- φ ist in Ω differenzierbar, $\nabla \varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ stetig auf $\bar{\Omega}$ fortsetzbar,
- φ ist orientierungserhaltend, d. h. $\det(\nabla \varphi(x)) > 0 \ \forall x \in \Omega$

Dabei ist $\nabla \varphi$ der Deformationsgradient, seine Matrixdarstellung ist

$$\nabla \varphi = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_2} & \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_2} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial \varphi_3}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_3}{\partial x_2} & \frac{\partial \varphi_3}{\partial x_3} \end{bmatrix}.$$

Die durch

$$\varphi = \text{id} + \mathbf{u} \tag{2.1}$$

definierte Abbildung $\mathbf{u} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ heißt Verschiebung zu φ , ihre Ableitung $\nabla \mathbf{u} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ Verschiebungsgradient. Ω wird auch als Referenzkonfiguration, $\varphi(\Omega)$ als deformierte Konfiguration bezeichnet. Es gilt:

$$\nabla \varphi(x) = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}(x), \quad x \in \Omega \tag{2.2}$$

Sei im folgenden $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein Gebiet und $\varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ eine C^1 -Deformation mit zugehöriger Verschiebung \mathbf{u} .

Betrachten wir jetzt die durch φ hervorgerufene Längenänderung eines Linienelements. Sei $\gamma : [0, 1] \rightarrow \Omega$ eine C^1 -Kurve. Ihre Länge ist bekanntlich gegeben durch:

$$\mathcal{L}(\gamma) = \int_0^1 \|\gamma'(t)\|_2 \, dt = \int_0^1 \sqrt{\gamma'(t)^T \gamma'(t)} \, dt.$$

¹Ein $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ heißt *Gebiet*, wenn Ω offen, beschränkt und zusammenhängend ist.

Wird jetzt Ω durch φ deformiert, ändert sich die Länge zu

$$\mathcal{L}(\varphi \circ \gamma) = \int_0^1 \|(\varphi \circ \gamma)'(t)\|_2 dt = \int_0^1 \sqrt{\gamma'(t)^T \nabla \varphi(\gamma(t)) \nabla \varphi(\gamma(t)) \gamma'(t)} dt .$$

Die Matrix

$$\mathbf{C}(x) := \nabla \varphi(x)^T \nabla \varphi(x), \quad x \in \Omega ,$$

enthält also Informationen über das lokale Deformationsverhalten.

Definition 2.2 (Verzerrungstensor) Die Abbildung $\mathbf{C} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$, definiert durch

$$\mathbf{C}(x) = \nabla \varphi(x)^T \nabla \varphi(x), \quad x \in \Omega , \quad (2.3)$$

heißt (der zu φ gehörende) rechte Cauchy-Green-Verzerrungstensor. Die durch

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (2.4)$$

definierte Abweichung von der Identität heißt Greenscher (oder Green-St. Vernants-) Verzerrungstensor

Die *Verzerrung* \mathbf{E} ist einer der zentralen Begriffe der Elastizitätstheorie. Um zu sehen, daß (2.3) in der Tat ein gültiges Maß für die — in der Anschauung als „Änderung in Form oder Größe“ verstandene — Verzerrung ist, betrachten wir eine Klasse von Deformationen, die diese Eigenschaften erhalten sollen.

Definition 2.3 (Starre Deformation) Eine Deformation φ heißt starr, wenn es ein $a \in \mathbb{R}^3$ und ein $Q \in \mathbb{R}^{3,3}$ orthogonal mit $\det(Q) = 1$ gibt, so daß

$$\varphi(x) = Qx + a .$$

Dies sind offensichtlich alle Deformationen, die sich aus einer Rotation Q um den Ursprung und einer Translation um den Vektor a zusammensetzen. Für eine starre Deformation φ ist also $\nabla \varphi(x) = Q$ für alle $x \in \bar{\Omega}$. Damit folgt aus (2.3):

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\nabla \varphi^T \nabla \varphi - I) = \frac{1}{2}(Q^T Q - I) = \frac{1}{2}(I - I) = 0 .$$

Durch Einsetzen von (2.1) in (2.3) und (2.4) erhält man sofort folgende

Definition 2.4 Für die zur Deformation φ gehörende Verschiebung \mathbf{u} gilt:

$$\mathbf{C} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u} , \quad (2.5)$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u}) . \quad (2.6)$$

Diese Matrizen sind offensichtlich symmetrisch. Häufig wird auch die Komponentenschreibweise benötigt:

$$\mathbf{E}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} , \quad 1 \leq i, j, k \leq 3 . \quad (2.7)$$

Ist der Verschiebungsgradient $\nabla \mathbf{u}$ klein, so können die quadratischen Terme vernachlässigt werden; dies führt zur *geometrisch linearen* Theorie.

Definition 2.5 (Linearisierter Verzerrungstensor) Die durch

$$\varepsilon = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}) \quad (2.8)$$

definierte Abbildung $\varepsilon : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ heißt der (zu φ bzw. \mathbf{u} gehörende) linearisierte Verzerrungstensor. In Komponentenschreibweise lautet er

$$\varepsilon_{ij}(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad 1 \leq i, j \leq 3. \quad (2.9)$$

2.1.2 Gleichgewichtsbedingungen

Wenn auf einen Körper in der Referenzkonfiguration $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ statische äußere Kräfte einwirken, nehmen wir an, daß sich ein neuer Gleichgewichtszustand einstellt. In diesem befindet sich der Körper in der deformierten Konfiguration $\varphi(\Omega)$. Wir unterscheiden jetzt:

- **Volumenkräfte**, die beschrieben werden durch eine *räumliche Kraftdichte* $\mathbf{f}^\varphi : \varphi(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^3$. Die auf einem Teilgebiet $A \subset \varphi(\Omega)$ wirkende Kraft F ist also gegeben durch

$$F = \int_A \mathbf{f}^\varphi(x) dx.$$

- **Flächenkräfte**, die beschrieben werden durch eine *flächenhafte Kraftdichte* $\mathbf{g}^\varphi : \varphi(\Gamma_1) \rightarrow \mathbb{R}^3$, $\Gamma_1 \subset \Gamma := \partial\Omega$. Die auf einem Teil $\Delta \subset \varphi(\Gamma_1)$ des Randes $\varphi(\partial\Omega)$ wirkende Kraft G ist also gegeben durch

$$G = \int_\Delta \mathbf{g}^\varphi dS.$$

Nach dem zentralen Axiom der Mechanik müssen sich im Gleichgewichtszustand diese Kräfte (und alle Drehmomente) zu Null addieren. Dazu bilden sich in jedem Punkt $x \in \varphi(\Omega)$ *innere Flächenkräfte* $\mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n})$ als Funktion von x und der Flächennormalen \mathbf{n} aus. Nach dem Fundamentalprinzip der Kontinuumsmechanik kann man sich dabei auf die Betrachtungen beliebig kleiner Teilgebiete beschränken:

Axiom 2.1 (Prinzip von Euler und Cauchy) Die auf die deformierte Konfiguration $\varphi(\Omega)$ im Gleichgewicht wirkenden Kräfte seien gegeben durch $\mathbf{f}^\varphi : \varphi(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^3$ und $\mathbf{g}^\varphi : \varphi(\Gamma_1) \rightarrow \mathbb{R}^3$, wobei $\varphi(\Gamma_1) \subset \partial\varphi(\Omega)$. Dann existiert eine Funktion

$$\mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n}) : \varphi(\bar{\Omega}) \times S^2 \rightarrow \mathbb{R}^3,$$

wobei S^2 die Einheitskugel im \mathbb{R}^3 ist, so daß gelten:

- (i) Gleichgewicht der Kräfte: Für jedes Gebiet $A \subset \varphi(\Omega)$ gilt

$$\int_A \mathbf{f}^\varphi(x) dx + \int_{\partial A} \mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n}(x)) dS = 0,$$

wobei $\mathbf{n}(x)$ die äußere Normale an ∂A in $x \in \partial A$ ist.

- (ii) Gleichgewicht der Drehmomente: Für jedes Gebiet $A \subset \varphi(\Omega)$ gilt

$$\int_A x \times \mathbf{f}^\varphi(x) dx + \int_{\partial A} x \times \mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n}(x)) dS = 0.$$

(iii) Randbedingungen: Für jedes $x \in \varphi(\Gamma_1)$, für das die äußere Normale $\mathbf{n}(x)$ an $\partial\varphi(\Omega)$ existiert, gilt

$$\mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n}(x)) = \mathbf{g}^\varphi(x).$$

Das Axiom postuliert also elementare Oberflächenkräfte $\int_{\partial A} \mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n}) dS$ zu allen Rändern aller Teilgebiete $A \subset \varphi(\Omega)$, die nur von der Normalen \mathbf{n} an ∂A in x abhängen. Diese sind dadurch bestimmt, daß jedes Teilgebiet (inklusive $\varphi(\bar{\Omega})$ selbst) sich in statischem Gleichgewicht befinden.

Aus Axiom 2.1 folgen einige fundamentale Aussagen. Erstens ist die Abhängigkeit der Vektoren $\mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n})$ von $\mathbf{n} \in S^2$ linear, d.h. für jeden Punkt $x \in \varphi(\bar{\Omega})$ existiert ein Tensor $\mathbf{T}^\varphi(x) \in \mathbb{R}^{3,3}$, so daß $\mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n}) = \mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{n}$ für alle $\mathbf{n} \in S^2$ gilt. Dieser Tensor ist dazu symmetrisch. Schließlich sind das Tensorfeld $\mathbf{T}^\varphi : \varphi(\bar{\Omega}) \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ und die Vektorfelder $\mathbf{f}^\varphi : \varphi(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^3$, $\mathbf{g}^\varphi : \varphi(\Gamma_1) \rightarrow \mathbb{R}^3$ durch eine partielle Differentialgleichung auf $\varphi(\Omega)$ bzw. eine Randbedingung auf Γ_1 verbunden. Dies faßt der folgende Satz zusammen.

Für seinen Beweis wird die Greensche Formel benötigt; ihre Gültigkeit wird gewährleistet durch die Beschränkung auf Lipschitzgebiete:

Definition 2.6 (Lipschitzgebiet) Ein Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ heißt Lipschitzgebiet, wenn $\partial\Omega$ lokal durch lipschitz-stetige Abbildungen parametrisiert werden kann, d.h. wenn für jedes $x \in \partial\Omega$ eine Umgebung $U \in \mathbb{R}^n$ und eine bijektive Abbildung $\alpha : B_1(0) \rightarrow U$ existiert, so daß α und α^{-1} Lipschitz-stetig sind und

$$\begin{aligned} \alpha^{-1}(U \cap \partial\Omega) &= B^1(0) \cap \{(x_1, \dots, x_n) : x_n = 0\}, \\ \alpha^{-1}(U \cap \Omega) &= B^1(0) \cap \{(x_1, \dots, x_n) : x_n > 0\}, \\ \alpha^{-1}(U \cap \{\mathbb{R}^n \setminus \bar{\Omega}\}) &= B^1(0) \cap \{(x_1, \dots, x_n) : x_n < 0\}. \end{aligned}$$

Dabei ist $B_1(0)$ die offene Einheitskugel im \mathbb{R}^n .

Satz 2.1 (Greensche Formel für Lipschitzgebiete) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein Lipschitzgebiet, $u : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar. Dann gilt:

$$\int_{\Omega} \partial_i u(x) dx = \int_{\partial\Omega} u n_i dS, \quad 1 \leq i \leq n. \quad (2.10)$$

Insbesondere existiert die äußere Flächennormale $\mathbf{n}(x) = (n_1(x), \dots, n_n(x))$ für fast alle $x \in \partial\Omega$ (im Sinne des Oberflächenmaßes), und das Oberflächenintegral ist wohldefiniert.

Lemma 2.1 (Divergenzsatz) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ Lipschitzgebiet.

(i) Ist $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar, so gilt

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} u(x) dx = \int_{\partial\Omega} u \cdot \mathbf{n} dS. \quad (2.11)$$

(ii) Ist $A : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n,n}$ stetig differenzierbar, so gilt

$$\int_{\Omega} \mathbf{div} A(x) dx = \int_{\partial\Omega} A \cdot \mathbf{n} dS. \quad (2.12)$$

Dabei ist

$$(\mathbf{div} A(x))_i = \sum_{j=1}^n \partial_j A_{ij}(x), \quad 1 \leq i \leq n. \quad (2.13)$$

Insbesondere ist $\varphi(\Omega)$ wieder ein Lipschitzgebiet, wenn Ω Lipschitzgebiet und $\varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ eine C^1 -Deformation ist.

Satz 2.2 (Satz von Cauchy) *Es gelte Axiom 2.1. Sei weiterhin*

- $\varphi(\Omega)$ ein Lipschitzgebiet,
- $\mathbf{f}^\varphi : \varphi(\bar{\Omega}) \rightarrow \mathbb{R}^3$ stetig,
- $x \mapsto \mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n})$ stetig differenzierbar auf $\varphi(\bar{\Omega})$ für alle $\mathbf{n} \in S^2$,
- $\mathbf{n} \mapsto \mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n})$ stetig auf S^2 für alle $x \in \varphi(\bar{\Omega})$.

Dann existiert eine stetig differenzierbare Funktion

$$\mathbf{T}^\varphi : \varphi(\bar{\Omega}) \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$$

mit

$$\mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n}) = \mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{n}, \quad x \in \varphi(\bar{\Omega}), \quad \mathbf{n} \in S^2,$$

und es gelten die Gleichgewichtsgleichungen:

$$-\operatorname{div} \mathbf{T}^\varphi(x) = \mathbf{f}^\varphi(x), \quad x \in \varphi(\Omega), \quad (2.14)$$

$$\mathbf{T}^\varphi(x) = \mathbf{T}^\varphi(x)^T, \quad x \in \varphi(\bar{\Omega}), \quad (2.15)$$

$$\mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{n}(x) = \mathbf{g}^\varphi, \quad x \in \partial\varphi(\bar{\Omega}) \quad (2.16)$$

Definition 2.7 (Cauchyscher Spannungstensor) *Die Matrix $\mathbf{T}^\varphi(x)$ aus Satz 2.2 heißt Cauchyscher Spannungstensor im Punkt x . Ist $\mathbf{n} \in S^2$, so heißt $\mathbf{t}^\varphi(x, \mathbf{n}) = \mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{n}$ Cauchyscher Spannungsvektor im Punkt x für die Richtung \mathbf{n} .*

Der Satz 2.2 liefert die Gleichungen der Elastizität in der Form des Randwertproblems (2.14), (2.16). Insbesondere existiert für das Randwertproblem dank seiner Divergenzstruktur eine Variationsformulierung, wie in Abschnitt 3.1 dargestellt werden wird.

Der Cauchysche Spannungstensor liefert einige weitere wichtige Informationen:

Definition 2.8 (Hauptspannungen) *Die Eigenwerte τ_1, τ_2, τ_3 des Cauchyschen Spannungstensors $\mathbf{T}^\varphi(x)$ in $x \in \varphi(\bar{\Omega})$ heißen Hauptspannungen, die zugehörigen Eigenvektoren heißen Hauptspannungsrichtungen.*

Erwähnenswert sind drei „elementare“ Formen des Cauchyschen Spannungstensors:

Definition 2.9 *Sei $x \in \mathbb{R}$.*

- *Sei*

$$\mathbf{T}^\varphi(x) = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Für $\alpha > 0$ handelt es sich um eine reine Zugspannung in Richtung der ersten Koordinatenachse. Stellt man sich einen kleinen Würfel um den Mittelpunkt x parallel zu den Koordinatenachsen vor, so zeigt $\mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{n}$ auf beiden Seiten mit $\mathbf{n} = \mathbf{e}_1$ bzw. $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_1$ nach außen; die anderen vier Seiten sind kräftefrei, d. h. es gilt $\mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{n} = 0$. Ist $\alpha < 0$, so spricht man von reiner Druckspannung.

- Hat der Cauchysche Spannungstensor die Form

$$\mathbf{T}^\varphi(x) = -\pi \mathbf{I} = \begin{pmatrix} -\pi & 0 & 0 \\ 0 & -\pi & 0 \\ 0 & 0 & -\pi \end{pmatrix}, \quad \pi > 0, \quad (2.18)$$

so spricht man von einem gleichförmigen Druck aus jeder Normalenrichtung.

- Ist

$$\mathbf{T}^\varphi(x) = \begin{pmatrix} 0 & \tau & 0 \\ \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

so gilt

$$\mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{e}_1 = \tau\mathbf{e}_2, \quad \mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{e}_2 = \tau\mathbf{e}_1, \quad \mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{e}_3 = 0, \quad (2.20)$$

es wird also auf die rechte Seite des Würfels eine Kraft senkrecht nach oben, auf die obere Seite eine Kraft horizontal nach rechts; entsprechendes gilt für die linke und untere Seite. Die beiden übrigen Seiten sind kräftefrei. Man nennt dies eine Schubspannung.

Transformation in die Referenzkonfiguration

Die Gleichgewichtsbedingungen wurden im deformierten (auch *räumlichen*, *Euler*-) Koordinatensystem definiert. Da diese Koordinaten erst berechnet werden müssen, ist es von Vorteil, die betrachteten Größen in das (insbesondere nicht von der Lösung des Problems abhängigen) Referenzsystem (auch *materielle* oder *Lagrangekoordinaten* genannt) zu transformieren. Dafür ist folgende Definition hilfreich:

Definition 2.10 (Kofaktor) Sei $A \in \mathbb{R}^{3,3}$. Dann heißt die durch

$$(\text{Cof } A)_{ij} = (-1)^{i+j} \det A'_{ij}$$

definierte $\text{Cof}(A) \in \mathbb{R}^{3,3}$ Kofaktor von A . Dabei stellt A'_{ij} die aus A durch Streichen der i -ten Zeile und j -ten Spalte entstehende Matrix dar.

Für den Übergang von der deformierten in die Referenzkonfiguration wird die Piola-Transformation definiert.

Definition 2.11 (Piola-Transformation) Sei $\mathbf{T}^\varphi : \varphi(\bar{\Omega}) \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$. Dann heißt die durch

$$\mathbf{T}(x) = (\det \nabla \varphi(x)) \mathbf{T}^\varphi(x^\varphi) \nabla \varphi(x)^{-T} = \mathbf{T}^\varphi(x^\varphi) \text{Cof } \varphi(x), \quad x^\varphi = \varphi(x) \quad (2.21)$$

definierte Abbildung $\mathbf{T} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ die Piola-Transformierte von \mathbf{T}^φ .

Aus der *Piola-Identität* $\text{div } \text{Cof } \nabla \varphi = \mathbf{0}$ folgen wichtige Eigenschaften der Piola-Transformation.

Satz 2.3 Sei φ eine C^2 -Deformation und $\mathbf{T}^\varphi : \varphi(\bar{\Omega}) \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ stetig differenzierbar. Dann gilt für die Piola-Transformierte \mathbf{T} von \mathbf{T}^φ

$$\text{div } \mathbf{T}(x) = (\det \nabla \varphi(x)) (\text{div } \mathbf{T}^\varphi)(\varphi(x)), \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (2.22)$$

$$\mathbf{T}(x)da = \mathbf{T}^\varphi(\varphi(x))\mathbf{n}^\varphi da^\varphi, x \in \partial\Omega. \quad (2.23)$$

Insbesondere sind die Flächenelemente da und da^φ in den Punkten $x \in \partial\Omega$ und $\varphi(x) \in \partial\varphi(\Omega)$, mit den Einheitsnormalen \mathbf{n} und \mathbf{n}^φ , verbunden durch

$$\det \nabla \varphi(x) \|\nabla \varphi(x)^{-T} \mathbf{n}\|_2 da = \|\text{Cof } \nabla \varphi(x) \mathbf{n} da\|_2 = da^\varphi.$$

Die Divergenz-erhaltende Eigenschaft im Besonderen erlaubt uns auch für die transformierten Cauchy-Gleichungen eine Variationsformulierung (siehe 3.1). Damit kann jetzt der Cauchysche Spannungstensor in das Referenzsystem transformiert werden.

Definition 2.12 (Erster Piola-Kirchhoff-Spannungstensor) Die Piola-Transformierte \mathbf{T} des Cauchyschen Spannungstensor \mathbf{T}^φ ,

$$\mathbf{T}(x) = \mathbf{T}^\varphi(x^\varphi) \text{Cof } \varphi(x), x \in \bar{\Omega}, \quad (2.24)$$

heißt der erste Piola-Kirchhoff-Spannungstensor.

Der erste Piola-Kirchhoff-Spannungstensor ist im allgemeinen nicht symmetrisch; es gilt

$$\mathbf{T}(x)^T = \nabla \varphi(x)^{-1} \mathbf{T}(x) \nabla \varphi(x)^{-T}$$

Deshalb definiert man den (offensichtlich symmetrischen) zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor.

Definition 2.13 (Zweiter Piola-Kirchhoff-Spannungstensor) Es sei φ eine C^1 -Deformation mit $\det(\nabla \varphi(x)) > 0 \forall x \in \bar{\Omega}$, \mathbf{T}^φ der Cauchysche Spannungstensor und \mathbf{T} der erste Piola-Kirchhoff-Spannungstensor. Dann heißt die durch

$$\boldsymbol{\Sigma}(x) = \nabla \varphi(x)^{-1} \mathbf{T}(x) = (\det \nabla \varphi(x)) \nabla \varphi(x)^{-1} \mathbf{T}^\varphi(\varphi(x)) \nabla \varphi(x)^{-T} \quad x \in \bar{\Omega} \quad (2.25)$$

definierte Abbildung der zweite Piola-Kirchhoff-Spannungstensor.

Um die Gleichgewichtsbedingungen in der Referenzkonfiguration darstellen zu können, müssen auch die Normalen sowie die Kraftdichten in diesem System bekannt sein.

- Ist $\mathbf{n}(x)$ die äußere Normale in $x \in \partial\Omega$, so gilt für die äußere Normale in $\varphi(x) \in \partial\varphi(\Omega)$:

$$\mathbf{n}(\varphi(x)) = \frac{\nabla \varphi(x)^{-T}(\mathbf{n})(x)}{\|\nabla \varphi(x)^{-T}(\mathbf{n})(x)\|_2} = \frac{\text{Cof } \nabla \varphi(x)(\mathbf{n})(x)}{\|\text{Cof } \nabla \varphi(x)(\mathbf{n})(x)\|_2},$$

- Die transformierte Volumenkraft $\mathbf{f} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ ist

$$\mathbf{f}(x) = (\det \nabla \varphi(x)) \mathbf{f}^\varphi(\varphi(x)),$$

- Die transformierte Flächenkraft $\mathbf{g} : \Gamma_1 \rightarrow \mathbb{R}^3$ ist

$$\mathbf{g}(x) = \|\text{Cof } \nabla \varphi(x) \mathbf{n}\|_2 \mathbf{g}^\varphi(\varphi(x)).$$

Satz 2.4 (Satz von Cauchy in der Referenzkonfiguration) Sei $\varphi(\Omega)$ ein Lipschitzgebiet, φ eine C^1 -Deformation mit $\det(\nabla\varphi(x)) > 0$ in $\bar{\Omega}$ und alle beteiligten Funktionen hinreichend regulär. Es gelte Axiom 2.1. Dann gilt für den zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor

$$-\operatorname{div}(\nabla\varphi(x)\Sigma(x)) = \mathbf{f}(x), \quad x \in \Omega, \quad (2.26)$$

$$\Sigma(x)^T = \Sigma(x), \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (2.27)$$

$$\nabla\varphi(x)\Sigma(x)\mathbf{n}(x) = \mathbf{g}(x), \quad x \in \Gamma_1 \quad (2.28)$$

Dabei sind \mathbf{f}, \mathbf{g} die oben genannten Volumen- bzw. Flächenkräfte.

Sind die Deformationen hinreichend klein, so kann man die Referenzkonfiguration mit der deformierten Konfiguration identifizieren; insbesondere sind dann die Unterschiede zwischen den drei Spannungstensoren \mathbf{T}^φ , \mathbf{T} und Σ vernachlässigbar.

2.1.3 Materialgesetze

Wenn man die Gleichgewichtsgleichungen (2.14), (2.16) als ein Randwertproblem betrachtet, dessen Unbekannte die 3 Komponenten der Deformation φ und die 6 Komponenten des — symmetrischen — Tensors \mathbf{T}^φ sind, so fällt auf, daß zu ihrer Bestimmung nur 3 Gleichungen zur Verfügung stehen. Die fehlenden 6 Gleichungen liefern die Materialgesetze, die Annahmen über die Materialeigenschaften des Körpers enthalten. Dies ist auch intuitiv klar; das Deformationsverhalten eines Körpers wird nicht nur durch dessen Geometrie (die Form des Gebiets Ω) und die angreifenden Kräfte, sondern auch durch dessen Substanz bestimmt. Die benötigten Gleichungen haben eine einfachere Form, falls man annimmt, daß der Cauchysche Spannungstensor $\mathbf{T}^\varphi(\varphi(x))$ an jedem Punkt $\varphi(x) \in \varphi(\bar{\Omega})$ vollständig durch den Deformationsgradienten $\nabla\varphi(x)$ an diesem Punkt festgelegt ist.

Definition 2.14 (Notation)

$$\begin{aligned} \mathbb{R}_+^{3,3} &= \{A \in \mathbb{R}^{3,3}, \det A > 0\}, \\ S^{3,3} &= \{A \in \mathbb{R}^{3,3}, A \text{ ist symmetrisch}\}, \\ S_{>}^{3,3} &= \{A \in \mathbb{R}^{3,3}, A \text{ ist symmetrisch und positiv definit}\}, \\ O_+^{3,3} &= \{A \in \mathbb{R}^{3,3}, A \text{ ist orthogonal, } \det A > 0\}. \end{aligned}$$

Definition 2.15 (Elastisches Material) Ein Material auf einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ heißt elastisch, wenn eine Funktion

$$\hat{\mathbf{T}}^D : \Omega \times \mathbb{R}_+^{3,3} \rightarrow S^{3,3} \quad (2.29)$$

existiert, so daß der Cauchysche Spannungstensor \mathbf{T}^φ für jede C^1 -Deformation $\varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ die Gleichung

$$\mathbf{T}^\varphi(\varphi(x)) = \hat{\mathbf{T}}^D(x, \nabla\varphi(x)), \quad x \in \bar{\Omega} \quad (2.30)$$

erfüllt. Die Funktion $\hat{\mathbf{T}}^D$ heißt Antwortfunktion des Cauchyschen Spannungstensors. Falls $\hat{\mathbf{T}}^D$ nur vom Deformationsgradienten (und nicht von x) abhängt, so heißt das Material homogen.

Diese Relation ist die konstitutierende Gleichung des Materials; sie kann auch äquivalent für den ersten und zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor aufgestellt werden.

Lemma 2.2 *Ist ein Material elastisch, so gelten für den ersten und den zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor die Gleichungen*

$$\mathbf{T}(x) = \hat{\mathbf{T}}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)), \quad \boldsymbol{\Sigma}(x) = \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)), \quad x \in \bar{\Omega} \quad (2.31)$$

mit den entsprechenden Antwortfunktionen²

$$\hat{\mathbf{T}}(x, F) = \hat{\mathbf{T}}^D(x, F) \operatorname{Cof} F, \quad \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(x) = F^{-1} \hat{\mathbf{T}}^D(x, F) \operatorname{Cof} F. \quad (2.32)$$

Auch in der Elastizitätstheorie ist die Forderung sinnvoll, daß die betrachteten Größen (in diesem Fall die Cauchyschen Spannungsvektoren) unabhängig von dem Beobachter sind, d. h. invariant unter Rotationen der deformierten Konfiguration. Diese *Objektivität* postuliert

Axiom 2.2 (Objektivität) *Sei $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^3$ ein Gebiet und $\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ seien C^1 -Deformationen mit $\boldsymbol{\psi} = Q\boldsymbol{\varphi}$ für ein $Q \in O_+^{3,3}$. Dann gilt für die Cauchyschen Spannungsvektoren*

$$\mathbf{t}^\varphi(\boldsymbol{\psi}(x), Q\mathbf{n}) = Q\mathbf{t}^\varphi(\boldsymbol{\varphi}(x), \mathbf{n}), \quad x \in \bar{\Omega}, \quad \mathbf{n} \in S^2. \quad (2.33)$$

Diese Forderung bedeutet eine Einschränkung der für die konstituierenden Gleichungen (2.30) zulässigen Antwortfunktionen:

Satz 2.5 *Die Antwortfunktion $\hat{\mathbf{T}}^D$ eines elastischen Materials genügt genau dann dem Axiom 2.2, wenn für alle $Q \in O_+^{3,3}$ und alle $F \in \mathbb{R}_+^{3,3}$*

$$\hat{\mathbf{T}}^D(x, QF) = Q\hat{\mathbf{T}}^D(x, F)Q^T \quad (2.34)$$

gilt. $\hat{\mathbf{T}}^D$ wird dann objektive Antwortfunktion genannt.

Für die Antwortfunktionen zu dem ersten und dem zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor gilt dann:

Satz 2.6 *Für ein elastisches Material mit den Antwortfunktionen $\hat{\mathbf{T}}^D$, $\hat{\mathbf{T}}$, $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ sind äquivalent:*

(i) $\hat{\mathbf{T}}^D$ ist objektiv, d. h.

$$\hat{\mathbf{T}}^D(x, QF) = Q\hat{\mathbf{T}}^D(x, F)Q^T, \quad \text{für alle } Q \in O_+^{3,3}, \quad F \in \mathbb{R}_+^{3,3}, \quad x \in \bar{\Omega},$$

(ii) $\hat{\mathbf{T}}(x, QF) = Q\hat{\mathbf{T}}(x, F)$, für alle $Q \in O_+^{3,3}$, $F \in \mathbb{R}_+^{3,3}$, $x \in \bar{\Omega}$,

(iii) $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}(x, QF) = \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(x, F)$, für alle $Q \in O_+^{3,3}$, $F \in \mathbb{R}_+^{3,3}$, $x \in \bar{\Omega}$,

(iv) Es gibt eine Funktion $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}} : \bar{\Omega} \times S_{>}^{3,3} \rightarrow S^{3,3}$ mit

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}(x, F) = \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(x, F^T F), \quad \text{für alle } F \in \mathbb{R}_+^{3,3}, \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (2.35)$$

Setzt man in (2.35) für F den Deformationsgradienten $\nabla \boldsymbol{\varphi}(x)$ ein, so sieht man sofort, daß ein Material genau dann objektiv ist, wenn der zweite Piola-Kirchhoff-Spannungstensor nur vom rechten Cauchy-Green-Verzerrungstensor $C(x) = \nabla \boldsymbol{\varphi}(x) \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)^T$ abhängt. Diese Beziehung wird oft als *Spannungs-Dehnungsgesetz* bezeichnet.

²Gleichungen, in denen die Matrix F auftaucht, werden in der Regel für den Fall $F = \nabla \boldsymbol{\varphi}$ gebraucht.

Isotrope Materialien

Die Form der zulässigen Antwortfunktionen läßt sich weiter einschränken, wenn man zusätzliche Forderungen an die Materialeigenschaften stellt. Die häufigste Annahme ist, daß sich das Material „in allen Richtungen gleich verhält“. Genauer gesagt soll der Cauchy-sche Spannungstensor im Punkt $x \in \Omega$ invariant unter Rotationen der Referenzkonfiguration um x sein.

Definition 2.16 (Isotropes Material) Die Antwortfunktion $\hat{\mathbf{T}}^D$ eines elastischen Materials heißt isotrop im Punkt $x \in \bar{\Omega}$, wenn gilt

$$\hat{\mathbf{T}}^D(x, FQ) = \hat{\mathbf{T}}^D(x, F), \quad \text{für alle } Q \in O_+^{3,3}, F \in \mathbb{R}_+^{3,3} \quad (2.36)$$

Die Antwortfunktion bzw. das Material heißen isotrop, wenn $\hat{\mathbf{T}}^D$ in jedem Punkt x isotrop ist.

Analog zu der Rotation der deformierten Konfiguration im Falle der Objektivität gilt für Rotationen der Referenzkonfiguration:

Satz 2.7 Für ein elastisches Material mit den Antwortfunktionen $\hat{\mathbf{T}}^D$, $\hat{\mathbf{T}}$, $\hat{\Sigma}$ sind äquivalent:

(i) $\hat{\mathbf{T}}^D$ ist isotrop im Punkt x , d. h.

$$\hat{\mathbf{T}}^D(x, FQ) = \hat{\mathbf{T}}^D(x, F), \quad \text{für alle } Q \in O_+^{3,3}, F \in \mathbb{R}_+^{3,3}, x \in \bar{\Omega},$$

(ii) $\hat{\mathbf{T}}(x, FQ) = \hat{\mathbf{T}}(x, F)Q$, für alle $Q \in O_+^{3,3}$, $F \in \mathbb{R}_+^{3,3}$, $x \in \bar{\Omega}$,

(iii) $\hat{\Sigma}(x, FQ) = Q^T \hat{\Sigma}(x, F)Q$, für alle $Q \in O_+^{3,3}$, $F \in \mathbb{R}_+^{3,3}$, $x \in \bar{\Omega}$,

(iv) Es gibt eine Funktion $\tilde{\Sigma} : \bar{\Omega} \times S_{>}^{3,3} \rightarrow S^{3,3}$ mit

$$\hat{\Sigma}(x, F) = \tilde{\Sigma}(x, FF^T), \quad \text{für alle } F \in \mathbb{R}_+^{3,3}, x \in \bar{\Omega}, \quad (2.37)$$

Fordert man, daß die Objektivität eingehalten wird, und betrachtet man zusätzlich ein isotropes Material, so hat dessen Antwortfunktion eine besonders einfache Form. Dies folgt aus dem Darstellungssatz von Rivlin-Ericksen, der in diesem Fall eine Darstellung der Antwortfunktion durch die Invarianten erlaubt.

Definition 2.17 (Invarianten) Sei $A \in \mathbb{R}^{3,3}$ mit den Eigenwerten $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$. Die Koeffizienten I_1, I_2, I_3 des charakteristischen Polynoms

$$\chi_A(\lambda) = \det(\lambda I - A) = \lambda^3 - I_1 \lambda^2 + I_2 \lambda - I_3$$

sind gegeben durch

$$I_1 = \text{spur}(A) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3,$$

$$I_2 = \text{spur}(\text{Cof } A) = \lambda_1 \lambda_2 + \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_3 \lambda_1,$$

$$I_3 = \det(A) = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3.$$

Ist $A = \mathbf{T}^\varphi(x)$ der Cauchysche Spannungstensor in x , so heißen sie die Spannungsinvarianten von $\mathbf{T}^\varphi(x)$.

Satz 2.8 (Darstellungssatz von Rivlin-Ericksen) Eine Abbildung $T : \mathbb{R}_+^{3,3} \rightarrow S^{3,3}$ erfüllt die Eigenschaften

$$T(QF) = QT(F)Q^T \quad \text{für alle } Q \in O_+^{3,3}, F \in \mathbb{R}_+^{3,3}, \quad (2.38)$$

$$T(FQ) = T(F) \quad \text{für alle } Q \in O_+^{3,3}, F \in \mathbb{R}_+^{3,3}, \quad (2.39)$$

genau dann, wenn es eine Abbildung $\tilde{T} : S_{>}^{3,3} \rightarrow S^{3,3}$ der Form

$$\tilde{T}(S) = \beta_0(\iota_S)\mathbf{I} + \beta_1(\iota_S)S + \beta_2(\iota_S)S^2 \quad (2.40)$$

gibt mit

$$T(F) = \tilde{T}(FF^T), \quad \text{für alle } F \in \mathbb{R}_+^{3,3}. \quad (2.41)$$

Dabei sind β_i reellwertige Funktionen der Invarianten $\iota_S = (I_1, I_2, I_3)$ von S .

Wendet man Satz 2.8 auf die Antwortfunktion eines elastischen Materials an, so erhält man folgende Charakterisierung:

Satz 2.9 Die Antwortfunktion $\hat{\mathbf{T}}^D$ eines elastischen Materials ist genau dann objektiv und isotrop, wenn sie die Form

$$\hat{\mathbf{T}}^D(x, F) = \tilde{\mathbf{T}}^D(x, FF^T), \quad \tilde{\mathbf{T}}^D(x, S) = \sum_{i=0}^2 \beta_i(x, I_1, I_2, I_3) S^i, \quad (2.42)$$

hat, wobei I_i die Invarianten von S sind. Ist das Material homogen, so hängen die β_i nicht von x ab.

Damit kann das allgemeine Spannungs-Dehnungsgesetz für isotrope elastische Materialien in der Referenzkonfiguration formuliert werden:

Satz 2.10 (Spannungs-Dehnungsgesetz für isotropes Material) Unter der Annahme der Objektivität gilt für ein isotropes elastisches Material: Es existieren Funktionen $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$, so daß gilt:

$$\boldsymbol{\Sigma}(x) = \sum_{i=0}^2 \gamma_i(x, I_1, I_2, I_3) \mathbf{C}(x)^i. \quad (2.43)$$

Dabei ist $\mathbf{C}(x)$ der rechte Cauchy-Greensche Verzerrungstensor und die I_i sind die Spannungsinvarianten. Ist das Material zusätzlich homogen, so hängen die γ_i nicht von x ab.

Materialkonstanten

In der Nähe der Referenzkonfiguration kann der Spannungstensor $\boldsymbol{\Sigma}$ in \mathbf{E} entwickelt werden. Dann erhalten wir für die Antwortfunktion $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$ eine besonders einfache Darstellung.

Satz 2.11 Sei $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(x, C) = \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x))$ die Antwortfunktion eines isotropen, objektiven elastischen Materials in $\bar{\Omega}$. Falls die γ_i aus (2.43) stetig differenzierbar sind, so existieren Funktionen $\pi, \lambda, \mu : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$, so daß für alle $C = \mathbf{I} + 2\mathbf{E} \in S_{>}^{3,3}$ gilt.³

$$\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(x, C) = -\pi(x)\mathbf{I} + \lambda(x)(\text{spur } E)\mathbf{I} + 2\mu(x)\mathbf{E} + o(\mathbf{E}; x). \quad (2.44)$$

³Die Notation $f^\varepsilon = o(\varepsilon; x)$ soll bedeuten, daß $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \{ \|f^\varepsilon(x)\| / \varepsilon \} = 0$ für alle x .

Fordert man zusätzlich, daß in der Referenzkonfiguration alle Kräfte verschwinden (also $\mathbf{C} = \mathbf{I}$ ist), so ist die Antwortfunktion durch zwei Konstanten eindeutig bestimmt:

Satz 2.12 Sei $\tilde{\Sigma}(x, C) = \hat{\Sigma}(x, \nabla \varphi(x))$ die Antwortfunktion eines homogenen, isotropen, objektiven elastischen Materials in $\bar{\Omega}$. Ist $\hat{\Sigma}(\mathbf{I}) = 0$ (d.h. die Referenzkonfiguration ist spannungsfrei), so gilt für alle $C = \mathbf{I} + 2\mathbf{E} \in S_{>}^{3,3}$:

$$\tilde{\Sigma}(x, C) = \lambda(\text{spur } E)\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E} + o(\mathbf{E}; x). \quad (2.45)$$

mit geeigneten Konstanten $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$

Definition 2.18 (Lamé-Konstanten) Die Konstanten λ, μ aus Satz 2.12 heißen Lamé-Konstanten des (homogenen, isotropen elastischen) Materials.

Ausgehend von physikalischen Betrachtungen, kann man für die Lamé-Konstanten bestimmte Ungleichungen herleiten. Dafür studiert man drei „ideale“ Experimente, in denen ein einfacher geometrischer Körper einer infinitesimalen homogenen Deformation eines bestimmten Typs unterworfen wird.

Definition 2.19 (Homogene Deformation) Eine C^1 -Deformation $\varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ heißt homogen, falls der Deformationsgradient $\nabla \varphi$ in $\bar{\Omega}$ konstant ist. Ein deformierter Körper $\varphi(\bar{\Omega})$ ist in einem homogenen Spannungszustand, falls $\mathbf{T}^\varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ konstant ist.

Lemma 2.3 Man betrachte einen in der Referenzkonfiguration kräftefreien Körper aus homogenem isotropem elastischem Material. Sei φ^ε eine C^1 -Deformation der Form

$$\varphi^\varepsilon(x) = x + \varepsilon G + r(\varepsilon; x), \quad G \in \mathbb{R}_+^{3,3}. \quad (2.46)$$

Es gelte⁴

$$r(\varepsilon; x) = o(\varepsilon; x), \quad D_x r(\varepsilon; x) = o(\varepsilon; x), \quad D_x^2 r(\varepsilon; x) = o(\varepsilon; x). \quad (2.47)$$

Dann gilt

$$\mathbf{T}^{\varphi^\varepsilon}(\varphi^\varepsilon(x)) = \varepsilon [\lambda(\text{spur } G)\mathbf{I} + \mu(G + G^T)] + o(\varepsilon; x). \quad (2.48)$$

Ausgehend von den Betrachtungen in Definition 2.9 kann man dann die folgenden Überlegungen anstellen:

Lemma 2.4 (Experiment I) Sei $\Omega = (1, 1)^3$. Wir betrachten die Scherung

$$\mathbf{u}^\varepsilon = -\varepsilon(x_2, 0, 0) + o(\varepsilon). \quad (2.49)$$

Dann ist

$$G = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}^{\varphi^\varepsilon}(\varphi^\varepsilon(x)) = \varepsilon T + o(\varepsilon; x), \quad \mathbf{T} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

Aus $\mathbf{T}e_2 = \mu e_1$ folgt

$$\mu > 0. \quad (2.51)$$

Die Zahl μ heißt Schermodul und bezeichnet in erster Näherung das Verhältnis von Schubspannung und Scherung (dem Tangens des Scherwinkels).

⁴Dabei bezeichnet D_x die Fréchet-Ableitung nach x .

Lemma 2.5 (Experiment II) Sei $\Omega = B_1(0)$ die Einheitskugel und

$$\mathbf{u}^\varepsilon = -\varepsilon x + o(\varepsilon). \quad (2.52)$$

ein gleichförmiger Druck. Dann ist $G = -\mathbf{I}$ und

$$\mathbf{T}^{\varphi^\varepsilon}(\varphi^\varepsilon(x)) = \varepsilon \mathbf{T} + o(\varepsilon; x), \quad \mathbf{T} = -(3\lambda + 2\mu)\mathbf{I}. \quad (2.53)$$

Da für das Zusammendrücken der Kugel eine positive Druckkraft erforderlich ist, folgt aus (2.17):

$$3\lambda + 2\mu > 0. \quad (2.54)$$

Lemma 2.6 (Experiment III) Sei Ω ein Zylinder mit Längsachse in x_3 -Richtung. Wir betrachten die Verschiebung

$$\mathbf{u}^\varepsilon = -\varepsilon \begin{pmatrix} -\nu x_1 \\ -\nu x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + o(\varepsilon) \quad \nu \in \mathbb{R}. \quad (2.55)$$

Dann ist

$$G = \begin{pmatrix} -\nu & 0 & 0 \\ 0 & -\nu & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}^{\varphi^\varepsilon}(\varphi^\varepsilon(x)) = \varepsilon T + o(\varepsilon; x), \quad (2.56)$$

$$\mathbf{T} = \lambda(1 - 2\nu)\mathbf{I} + \mu \begin{pmatrix} -2\nu & 0 & 0 \\ 0 & -2\nu & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \quad (2.57)$$

Nehmen wir an, daß der Cauchysche Spannungstensor ein reiner Zug in x_3 -Richtung ist, also $T_{11} = T_{22} = 0$, so kann die Konstante

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} \quad (2.58)$$

bestimmt werden. Für einen Zug muß außerdem $\nu > 0$ sein. Die Zahl ν heißt Poissonzahl oder Querkontraktionszahl und gibt, in erster Näherung für $\varepsilon \rightarrow 0$, das Verhältnis von relativer Längenänderung und Querkontraktion an.

Mit (2.58) erhält man aus der Gleichung für T_{33} :

$$T_{33} = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad (2.59)$$

Die Zahl $E := T_{33}$ heißt Elastizitätsmodul (auch Steifigkeit) und gibt, wieder in erster Näherung, das Verhältnis von Spannung und relativer Längenänderung wieder. Wegen

$$\lambda + \mu = \frac{1}{3}(3\lambda + 2\mu) + \frac{1}{3}\mu > 0 \quad (2.60)$$

folgen aus (2.58) die Ungleichungen

$$\lambda > 0, \quad E > 0, \quad 0 < \nu < \frac{1}{2}. \quad (2.61)$$

Die Materialparameter E , ν und μ (manchmal auch mit G bezeichnet) werden auch technische Konstanten genannt.

Da die Lamé-Konstanten aus E und ν berechnet werden können, liefert dieses Experiment bereits alle wesentlichen Informationen über das Verhalten eines homogenen, isotropen elastischen Materials bei kleinen Verzerrungen. Tatsächlich ist es auch die Basis für die experimentelle Bestimmung der Materialparameter realer Stoffe.

Lineare Materialien

Ignoriert man in der Gleichung (2.45) die Terme höherer Ordnung, so erhält man das *lineare Materialgesetz*. Gilt dieses nicht nur für kleine Verzerrungen, so spricht man von St. Venant-Kirchhoff-Materialien.

Definition 2.20 (St. Venant-Kirchhoff-Material) *Ein elastisches Material heißt St. Venant-Kirchhoff-Material, wenn seine Antwortfunktion für den zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor die Form*

$$\hat{\Sigma}(\mathbf{E}) = \tilde{\Sigma}(\mathbf{I} + 2\mathbf{E}) = \lambda(\text{spur } E)\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E} \quad (2.62)$$

hat.

In der vollständig linearen Theorie nimmt man zusätzlich noch die geometrische Linearität an. Analog zu (2.8) bezeichnet man den linearisierten zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor mit σ und aus Satz 2.12 wird das Hookesche Gesetz.

Definition 2.21 (Hookesches Gesetz) *Die durch*

$$\sigma(\varepsilon) = \lambda(\text{spur } \varepsilon)\mathbf{I} + 2\mu\varepsilon \quad (2.63)$$

definierte Antwortfunktion heißt Hookesches Gesetz.

Läßt man die Annahme der Isotropie fallen, so ergibt sich das verallgemeinerte Hookesche Gesetz.

Definition 2.22 (Verallgemeinertes Hookesches Gesetz) *Die durch*

$$(\sigma(\varepsilon))_{ij} = \sum_{k,l} c_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad c_{ijkl} \in \mathbb{R}, \quad 1 \leq i, j, k, l \leq 3, \quad (2.64)$$

definierte Antwortfunktion heißt verallgemeinertes Hookesches Gesetz, wenn die Symmetriebedingungen

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}, \quad 1 \leq i, j, k, l \leq 3,$$

gelten.

Die Symmetriebedingungen sind dabei eine Folge der physikalischen Bedingungen (genauer, der Drehimpulserhaltung und der Form der freien Energiedichte). Deshalb läßt sich die lineare Abbildung $C : S^{3,3} \rightarrow S^{3,3}$ des verallgemeinerten Hookeschen Gesetzes als symmetrische 6×6 -Matrix

$$\sigma = C\varepsilon, \quad \sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{pmatrix}, \quad \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{23} \end{pmatrix} \quad (2.65)$$

auffassen.

Die Einträge der Matrix C können durch die technischen Konstanten des Materials ausgedrückt werden. Ein anisotropes elastisches Material besitzt natürlich mehr als zwei Konstanten, da seine Steifigkeit abhängig von der Belastungsrichtung ist. So kann man in Bezug auf die Hauptspannungsrichtungen verschiedene Elastizitäts- und Schermoduln unterscheiden:

$$E_1 = \frac{\sigma_{11}}{\varepsilon_{11}}, E_2 = \frac{\sigma_{22}}{\varepsilon_{22}}, E_3 = \frac{\sigma_{33}}{\varepsilon_{33}},$$

$$G_{23} = \frac{\sigma_{23}}{\varepsilon_{23}}, G_{13} = \frac{\sigma_{13}}{\varepsilon_{13}}, G_{12} = \frac{\sigma_{12}}{\varepsilon_{12}}.$$

Genauso existiert eine Vielzahl an Querkontraktionszahlen.

Die meisten anisotropen Materialien haben jedoch nur eine begrenzte Anisotropie; es existieren bestimmte $Q \in O_+^{3,3}$, so daß $\hat{\mathbf{T}}^D(x, FQ) = \hat{\mathbf{T}}^D(x, F)$ gilt. Ausgehend von diesen so definierten Symmetrieebenen lassen sich verschiedene anisotrope Materialtypen klassifizieren:

- (i) *Völlig anisotrop*: Es existieren keine Symmetrieebenen; die Matrix C hat 21 unabhängige Einträge.
- (ii) *Orthotrop*: Es existieren drei orthogonale Symmetrieebenen; die Matrix C hat 9 unabhängige Einträge und (falls die Hauptachsen des Koordinatensystems den Symmetrieachsen entsprechen) die Form

$$C = \begin{pmatrix} 1/E_1 & -\nu_{21}/E_2 & -\nu_{31}/E_3 & & & \\ -\nu_{12}/E_1 & 1/E_2 & -\nu_{32}/E_3 & & & \\ -\nu_{13}/E_1 & -\nu_{23}/E_2 & 1/E_3 & & & \\ & & & 1/G_{23} & & \\ & & & & 1/G_{31} & \\ & & & & & 1/G_{12} \end{pmatrix}.$$

- (iii) *Transvers isotrop*: Jede Ebene durch eine Längsachse ist eine Symmetrieebene; die Matrix C hat 5 unabhängige Einträge und (falls die Symmetrieachse mit einer Koordinatenachse zusammenfällt) die Form

$$C = \begin{pmatrix} 1/E_1 & -\nu_{21}/E_1 & -\nu_{31}/E_3 & & & \\ -\nu_{12}/E_1 & 1/E_1 & -\nu_{31}/E_3 & & & \\ -\nu_{23}/E_1 & -\nu_{23}/E_1 & 1/E_3 & & & \\ & & & 1/G_{23} & & \\ & & & & 1/G_{23} & \\ & & & & & (2 + 2\nu_{12})/E_1 \end{pmatrix}.$$

- (iv) *Isotrop*: Jede Ebene ist eine Symmetrieebene; die Matrix C hat 2 unabhängige Einträge und die Form

$$C = \frac{1}{E} \begin{pmatrix} 1 & -\nu & -\nu & & & \\ -\nu & 1 & -\nu & & & \\ -\nu & -\nu & 1 & & & \\ & & & (2 + 2\nu) & & \\ & & & & (2 + 2\nu) & \\ & & & & & (2 + 2\nu) \end{pmatrix}.$$

2.2 Problemstellung

Die besonderen Schwierigkeiten bei der Modellierung des menschlichen Unterkiefers liegen in der extrem irregulären Geometrie und der komplexen Morphologie des Knochens, die noch dazu von Individuum zu Individuum stark variieren und auch zeitlichen Adaptionen unterworfen sind. Hinzu kommen erst im Ansatz verstandene Lager- und Krafteinleitungsbedingungen. Ein Überblick über den physiologischen Hintergrund soll dies verdeutlichen und die für die Simulation gewählten Vereinfachungen motivieren.

2.2.1 Anatomie des Unterkiefers und Kiefergelenks

Der menschliche Unterkiefer (oder *Mandibula*) ist der größte und stärkste Knochen des Gesichts; sein Zweck ist die Aufnahme der unteren Zähne. Seine Form ist deshalb im Hinblick auf den Kauvorgang optimiert, insbesondere gibt es starke interindividuelle Unterschiede aufgrund des ständigen adaptiven Umbaus.

Der menschliche Unterkiefer

Die Mandibula gliedert sich in einen gekrümmten horizontalen *Körper* (*Corpus Mandibulae*, 1) und zwei *aufsteigende Äste* (2), auch *Ramus* genannt (Abb. 2.2).

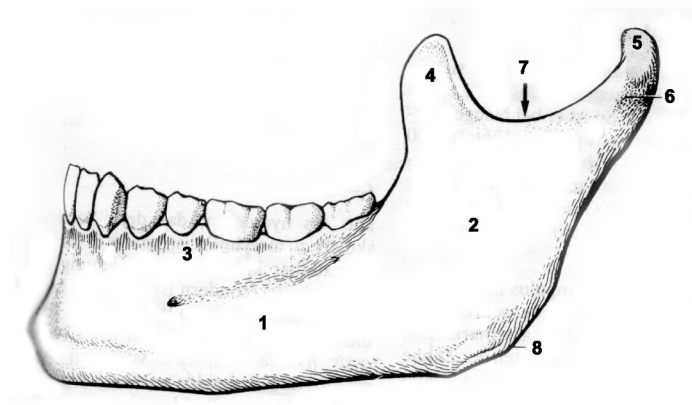


Abbildung 2.2: Mandibula. Aus [Plat91]

Der Körper weist an seinem oberen Rand den so genannten *Alveolarkamm* (3) auf, dieser bietet Aushöhlungen (*Alveolen*), die die Zähne aufnehmen. Der Alveolarkamm atrophiert nach dem Zahnverlust im Alter. Außerdem besitzt der Kamm Angriffsflächen für mehrere Muskeln, die am Kauvorgang beteiligt sind (siehe Abschnitt 2.2.2)

Der Ramus besitzt zwei Fortsätze, und zwar den vorderen *Processus coronoideus* (4), der zum Ansatz eines Muskels dient, und die hintere *Kondyle* (*Processus condylaris*), der die Gelenkfläche (*Caput mandibulae*, 5) trägt. Direkt unter der Kondyle liegt das *Collum* (6), hier treten die meisten Frakturen am Unterkiefer auf. Zwischen den Fortsätzen befindet sich die *Incisura mandibulae* (7).

Verbunden wird der Corpus mit den aufsteigenden Ästen durch den Kieferwinkel (*Angulus mandibulae*, 8), der die Angriffsfläche für mehrere Kaumuskeln bietet.

([Gray18], Kap. II, 5b)

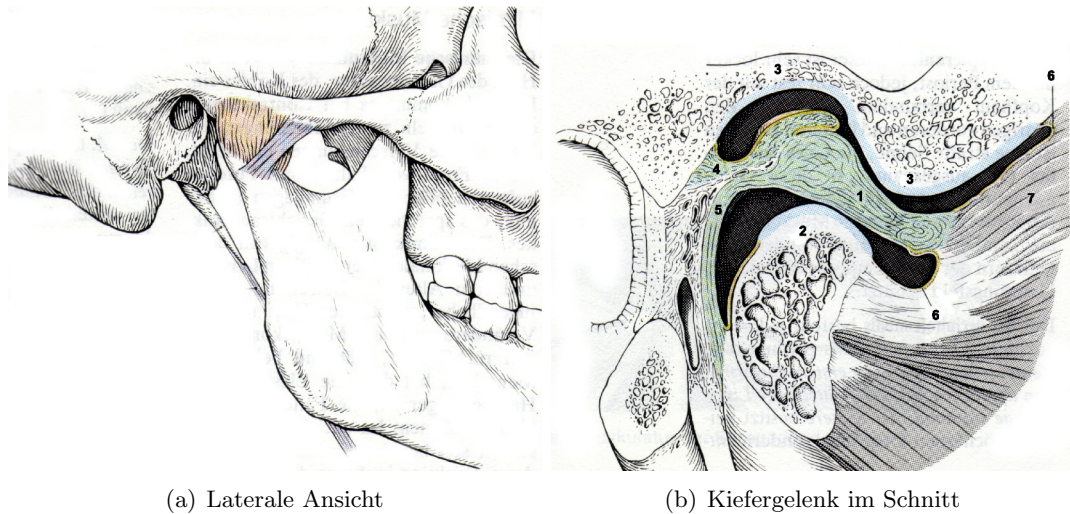


Abbildung 2.3: Das Kiefergelenk. Aus [Plat91]

Kiefergelenk

Das Kiefergelenk (*Articulatio temporomandibularis*) stellt die Verbindung zwischen der Mandibula und dem Schädelknochen her (Abb. 2.3). Das Gelenk wird durch den Diskus (1) in zwei Gelenkkörper geteilt: auf der einen Seite stellt der Diskus für das Kondylenköpfchen (2) eine bewegliche Pfanne dar, an den Schläfen trifft er auf die *Fossa mandibularis* (3). Dabei ist der hinterste Teil des Diskus bilaminär; der obere Abschnitt (4) aus lockerem elastischem Gewebe ist an der hinteren Wand der Fossa befestigt, während der untere (5) am Hinterrand des Caput condylae ansetzt und aus sehr straffem fibrösen Material besteht. Vorne ist der Diskus mit der Gelenkkapsel (6) und einem Muskelansatz (des Pterygoideus lateralis (7)) verbunden. Außerdem stabilisieren verschiedene Bänder das Gelenk. ([Gray18], Kap. III, 5d)

Auch funktional stellt das Kiefergelenk eine Kombination von zwei Gelenken dar. So kommt es bei der Öffnung des Mundes zuerst zu einer Rotation im unteren (von Kondylenköpfchen und Diskus gebildeten) Anteil, während dann das obere Gelenk (aus Diskus und Fossa) eine Schiebewegung nach vorn ausführt. Hinzu kommen noch laterale oder Mahlbewegungen. Außerdem sind die Kiefergelenke beider Seiten durch den Unterkiefer bzw. den Schädel gekoppelt. Dadurch führt das Kiefergelenk sehr komplizierte Bewegungen aus, die insbesondere beim Kauvorgang in Erscheinung treten.

2.2.2 Kausystem und Muskelkräfte

Der Kauapparat ist ein komplexes Regelkreissystem, in dem sich die einzelnen Bestandteile untereinander stark beeinflussen. Die Kaubewegungen sind ein Resultat der aktiven Kontraktion von Kaumuskeln, geführt durch die Kiefergelenke, ihre Bänder sowie den passiven elastischen Eigenschaften der Muskeln. Gesteuert wird der Regelkreis durch Rezeptoren in Muskelspindeln, Bändern und dem Kiefergelenk. Dies führt unter anderem zu einer erheblichen inter- und intraindividuellen Variation der Kaumuster. Dadurch fällt eine quantitative Bestimmung der beim Kauvorgang ablaufenden Vorgänge äußerst schwer.

Biomechanisch wird der Unterkiefer als allgemeiner Hebel betrachtet. Auf ihn wirken drei verschiedene Kraftgruppen ein: Erstens passive Reaktionskräfte an der Kaufläche

(bzw. der Nahrung), zweitens passive Reaktionskräfte an der Auflage des Kiefergelenks, und drittens aktive Muskelkräfte. Diese heben sich im Allgemeinen nicht vektoriell auf, da Nahrungszerkleinerung per se einen Energieumsatz bedeutet. Dies erschwert die Betrachtung erheblich.

Das Kiefergelenk spielt bei der propriozeptiven Überwachung des Kauvorgangs eine bestimmende Rolle, so werden z. B. auftretende Gleitbewegungen durch aktiven Muskeleinsatz verhindert bzw. geregelt. Die Druckbelastung des Gelenks wird in der Literatur kontrovers diskutiert, der Aufbau des Gelenkgewebes deutet auf eine Druckbeanspruchung hin [BKRE00]. Auf jeden Fall ist die Belastung abhängig von dem Kauvorgang. Insbesondere sind die Bewegungen des Kiefergelenks asymmetrisch.

Auch über die genauen Rollen der einzelnen Muskeln bei Bewegungen des Unterkiefers herrscht Unklarheit. Grundsätzlich werden fünf Muskelgruppen als am Kauvorgang beteiligt erklärt:

- Der *Masseter-Muskel* verläuft ungefähr vom Jochbein zum Kieferwinkel. Er unterteilt sich in den kräftigeren, oberflächlichen Masseter, dessen Fasern schräg verlaufen, und den senkrechten tiefen Masseter. Dieser Muskel ist ein kräftiger Heber, er ist am Schließen des Mundes beteiligt.
- Auch der *Temporalis* ist ein Heber, der stärkste des Unterkiefers. Er setzt sich zusammen aus dem Temporalis anterior, der mit einer Sehne am Processus coronoideus ansetzt, und dem Temporalis posterior, der in der Incisura mandibulae verankert ist. Auf der anderen Seite setzt er großflächig am Schädel oberhalb des Jochbeins an.
- Der *Pterygoideus lateralis* dient als Führung des Kiefergelenks und verbindet den Diskus seitlich sowohl mit der Kondyle als auch dem Schädelknochen.
- Senkrecht dazu verläuft der *Pterygoideus medialis*. Von seiner Verankerung am Schädel zieht er zum Kieferwinkel, so daß dieser durch den Masseter und den Pterygoideus medialis in einer Muskelschlinge, der sogenannten *Pterygo-Masseterschlinge*, liegt. Er ist sowohl am Heben als auch am Vorschieben des Unterkiefers beteiligt, außerdem kann er bei lateralen Verschiebungen und Drehbewegungen mitwirken.
- Schließlich sind die Adduktoren der Zungenbeinmuskulatur für das Öffnen des Mundes verantwortlich.

Abbildung 2.4 stellt Ansätze und Krafrichtungen der Kaumuskeln schematisch dar.

Die direkte Bestimmung der Muskelkräfte ist *in vivo* nicht möglich. Daher läßt sich die Kraft nur schätzen, indem mit Hilfe von Elektromyographie die Anregung der Muskeln gemessen und über heuristische Parameter mit der Querschnittsfläche des Muskels verknüpft wird. In der Literatur findet man deshalb stark abweichende Angaben [MKBW98],[KovE99]. Tabelle 2.1 gibt die auftretenden Kräfte während verschiedener Kaubewegungen an.

2.2.3 Aufbau von Knochengewebe

Einfach ausgedrückt, ist Knochen ein poröses Gewebe: eine mineralische Matrix umfaßt Hohlräume, die mit Weichgewebe gefüllt sind. Im Detail bildet Knochen jedoch auf verschiedenen Ebenen komplexe Strukturen aus, die auch für die Materialeigenschaften ausschlaggebend sind. Insbesondere lassen sich in allen Betrachtungsskalen Vorzugsrichtungen erkennen.

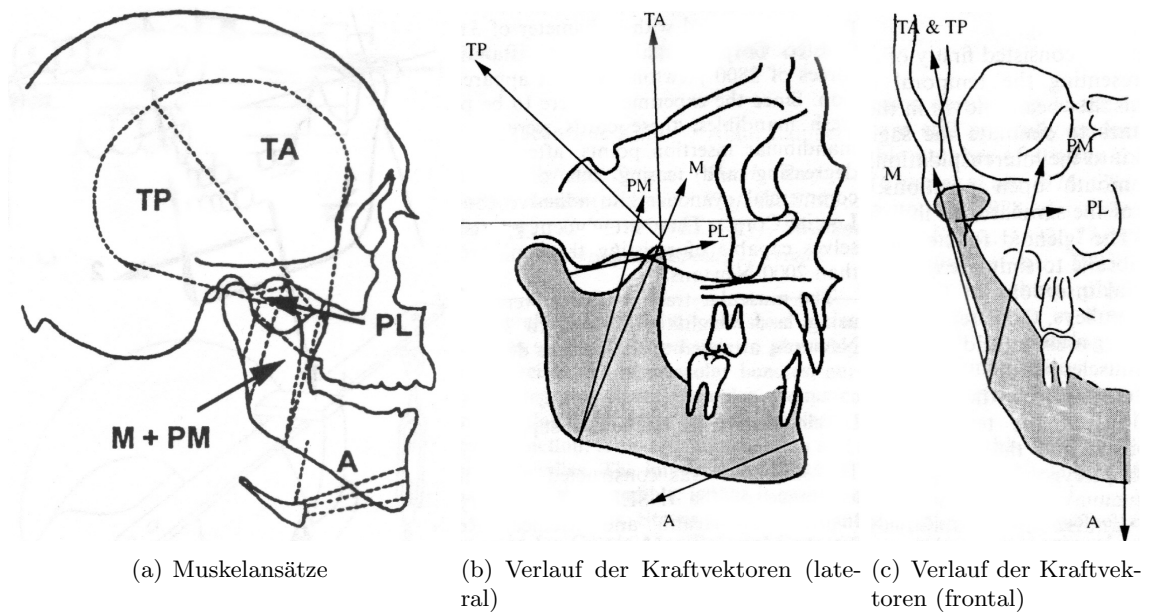


Abbildung 2.4: Schematische Ansicht der Kaumuskulatur. M: Masseter, TA: Temporalis anterior, TP: Temporalis posterior, PL: Pterygoideus lateralis, PM: Pterygoideus medialis, A: Adduktoren. Aus: [MKBW98]

| | TA | TP | M | PL | PM | A |
|----------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| Incisal | | | | | | |
| Zubiß | 693 | 254 | 749 | 753 | 554 | 295 |
| Senken des Kiefers | 12 | 14 | 32 | 58 | 72 | 93 |
| Vorschieben des Kiefers | 144 | 62 | 306 | 315 | 280 | 205 |
| Zurückschieben des Kiefers | 428 | 531 | 420 | 442 | 356 | 412 |
| Intercuspidation | | | | | | |
| Zubiß | 412 | 169 | 475 | 418 | 382 | 83 |
| Senken des Kiefers | 9 | 8 | 27 | 32 | 32 | 116 |
| Vorschieben des Kiefers | 321 | 16 | 77 | 65 | 138 | 34 |
| Zurückschieben des Kiefers | 32 | 25 | 20 | 45 | 16 | 47 |

Tabelle 2.1: Muskelkräfte (in Newton, pro Seite) für Kieferbewegungen bei zwei verschiedenen Kieferstellungen (Incisal: Auflage der zentralen Schneidezähne, Intercuspidation: Auflage der Backenzähne). Aus: [MKBW98]

Makroskopischer Aufbau von Knochen

Betrachtet man den makroskopischen Aufbau von Knochen, so kann man anhand der Porosität⁵ zwei Typen von Knochen unterscheiden:

Substantia Compacta (auch *Substantia Corticalis* genannt) ist dichter Knochen, dessen Porosität zwischen 5% und 10% liegt. Die Hohlräume bestehen hauptsächlich aus den Haversschen Kanälen, die sich ungefähr entlang der langen Achsen des Knochens ausrichten und Blutgefäße und Nerven führen. Ihr Durchmesser beträgt zwischen 30 und 70 μm . Hinzu kommen kürzere, sogenannte Volkmannsche Kanäle, die die Haversschen Kanäle

⁵definiert als Weichgewebeanteil des Knochens nach Volumen

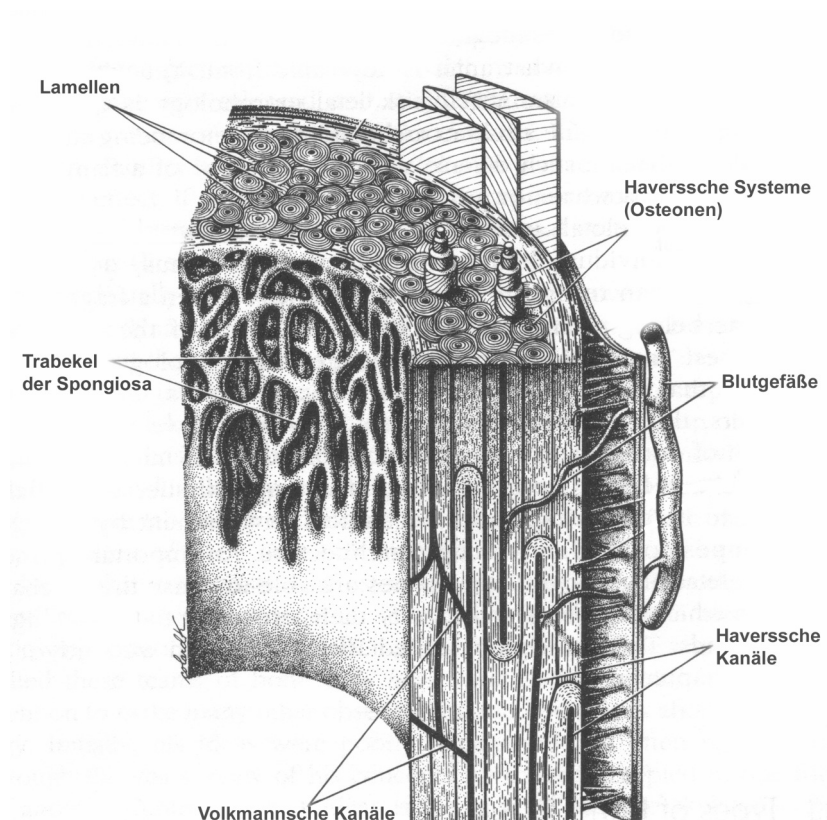


Abbildung 2.5: Aufbau von Knochengewebe. Aus: [MaBS98]

untereinander und mit der Knochenoberfläche verbinden. Compacta macht etwa 80% der Skelettmasse aus und bildet die feste „Schale“ aller Knochen.

Die restlichen 20% des Knochenkerns bestehen aus einer schwammartigen Masse, der *Substantia Spongiosa*. Das Knochengewebe formt hier Streben und Platten von ca. 200 μm Durchmesser, die *Trabekel* genannt werden. Ihre Ausrichtung zueinander ist manchmal orthogonal, zumeist jedoch eher zufällig verteilt. Die untereinander verbundenen Hohlräume machen 75% – 95% des Knochenvolumens aus und sind mit Knochenmark gefüllt.

Struktur des Knochengewebes

Sowohl Corticalis als auch Spongiosa bestehen aus demselben Knochengewebe, das sich aus organischem und anorganischem Material zusammensetzt. Lange Kollagenfasern machen dabei den Hauptteil (etwa 90%) der organischen Phase aus. Entlang dieser Fasern sind in regelmäßigen Abständen von 600 oder 700 Ångström mineralische Kristalle aus Hydroxylapatit gebunden. Die einzelnen Kristalle haben dabei Stab- oder Plattenform und sind etwa 50 Ångström breit und 100 Ångström lang. Das restliche organische Material, bestehend aus verschiedenen Proteinen, bildet einen Kitt für die Kollagenfasern und Kristalle. Diesem Zusammenspiel von Kollagen, Mineral und Proteinen verdankt der Knochen seine Härte und Steifigkeit.

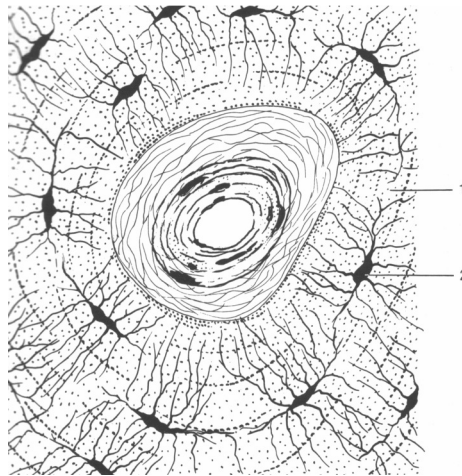


Abbildung 2.6: Lamellenstruktur von kortikalem Knochen. Lamellen (1) um einen zentralen Haversschen Kanal mit Lacunae (2). Aus: [Plat91]

Mikroskopischer Aufbau von Knochen

Auch die mikroskopische Struktur beider Knochentypen ist ähnlich. Sowohl Corticalis als auch Spongiosa besteht aus 3 bis 7 μm dicken *Lamellen* parallel orientierter Kollagenfasern. Dabei richten sich die Kollagenfasern benachbarter Lamellen senkrecht zueinander aus. Es existieren jedoch auch helikale Strukturen, in denen sich die Orientierung einzelner Lagen von parallelen Fasern kontinuierlich ändert; auch hier entstehen durch die regelmäßige Wiederholung (nach jeweils einer Drehung um 180°) Lamellen. Dazwischen befinden sich in regelmäßigen Abständen kleine Hohlräume, *Lacunae* genannt, die durch dünne Röhren, die *Canaliculi*, verbunden sind. In ihnen findet man die Knochenzellen, die für den Auf- und Umbau des Knochens verantwortlich sind. Die einzelnen Lamellen werden getrennt von 1–2 μm dicken *Zementlinien*, die aus einer kollagenarmen Mineralmatrix bestehen (Abb. 2.6).

Dabei weisen die Lamellen der Corticalis und der Spongiosa unterschiedliche Muster auf. In der Corticalis lagern sich die Lamellen vor allem in konzentrischen Ringen um die Haversschen Kanäle an. Die Anzahl der Lagen variiert dabei zwischen 4 und 20. Ein Kanal mit seinen Lamellen wird als *Osteon* oder *Haverssches System* bezeichnet und bildet die fundamentale Struktur von kompaktem Knochen. Analog findet man bei Spongiosa kleine Segmente paralleler Lamellenschichten, die zusammen wie ein Mosaik die Trabekel formen. Diese *trabekulären Pakete* werden idealisiert als flache, 50 μm dicke und 1 mm lange Sicheln mit einem Radius von 600 μm angenommen.

Diese Strukturen sind *dynamisch*; ihre Porosität und Architektur kann sich als Folge von Krankheiten, aber auch im Rahmen einer normalen Adaption an wechselnde mechanische oder physiologische Situationen ändern. Solche Umbildungen führen zum einen zu Inhomogenitäten im Knochen und im Gewebe selbst, zum anderen auch zu erheblichen interindividuellen Unterschieden. Dies hat natürlich auch Einfluß auf die mechanischen Eigenschaften.

| | Reilly und Burstein | Knets et. al. | Katz | Korioth et. al. | Hart et. al. |
|------------|---------------------|---------------|-------|-----------------|--------------|
| E_1 | 11,5 | 6,91 | 18,1 | 17,0 | 13,0 |
| E_2 | 11,5 | 8,51 | 19,4 | 8,2 | 13,0 |
| E_3 | 17,0 | 18,4 | 26,5 | 6,9 | 19,0 |
| G_{12} | 3,6 | 2,41 | 7,22 | 4,6 | 5,3 |
| G_{13} | 3,28 | 3,56 | 8,65 | 2,9 | 5,9 |
| G_{23} | 3,28 | 4,91 | 8,67 | 2,8 | 5,9 |
| ν_{12} | 0,58 | 0,488 | 0,285 | 0,315 | 0,22 |
| ν_{13} | 0,31 | 0,119 | 0,222 | 0,325 | 0,105 |
| ν_{23} | 0,31 | 0,142 | 0,207 | 0,325 | 0,105 |
| ν_{21} | 0,58 | 0,622 | 0,305 | 0,315 | 0,22 |
| ν_{31} | 0,46 | 0,315 | 0,325 | 0,310 | 0,42 |
| ν_{32} | 0,46 | 0,307 | 0,283 | 0,310 | 0,42 |

Tabelle 2.2: Materialdaten von kortikalem Knochen (E_i, G_i in GPa, ν_i dimensionslos) Zusammenstellung verschiedener Studien. Aus (in dieser Reihenfolge) [NaMe88], [KoRH92] (orthotrope Annahme), [HHTB⁺92] (transvers isotrope Annahme).

Auswirkungen auf die Materialeigenschaften

Bedingt durch diese komplexen Gegebenheiten ist es nahezu unmöglich, allgemein gültige quantitative Aussagen über die Abhängigkeit der Materialkonstanten von der Struktur zu machen. Aus Experimenten sind jedoch qualitative Beziehungen bekannt.

Wichtig für die Steifigkeit und Festigkeit des Knochens ist sein *Mineralgehalt*. Selbst bei kleiner Erhöhung des spezifischen Mineralgehalts kann die Festigkeit um ein Vielfaches anwachsen [VoKu59]. Genauso sinkt die Steifigkeit mit wachsendem Wassergehalt [NaMe88]. Auch die *Orientierung der Kollagenfasern* kann Auswirkungen auf die elastischen Eigenschaften des Knochens haben; eine parallele Anordnung führt zu höherer Festigkeit als zufällig verteilte Fasern. Hier wird auch deutlich, daß die Materialeigenschaften von Knochengewebe anisotrop sind — Längsfasern erhöhen die Zugfestigkeit, während Querfasern mit höherer Kompressionsfestigkeit in Verbindung gebracht werden.

Als bestimmend für die mechanischen Eigenschaften hat sich die *Porosität* erwiesen. Je höher der Anteil an Leerräumen im Knochen, desto geringer Steifigkeit und Festigkeit der Struktur. Deshalb unterscheiden sich die Materialparameter von Corticalis und Spongiosa deutlich.

In kompaktem Knochen machen die Osteonen den größten Anteil des Hohlraums aus. Ihre Ausrichtung hat Auswirkungen auf die Anisotropie der Corticalis; insbesondere führt sie zu einer transvers isotropen Verteilung der Zug- und Kompressionsfestigkeit. Hauptverantwortlich für die Anisotropie der Steifigkeit ist allerdings die durchschnittliche Ausrichtung der Kollagenfasern. Röntgendiffraktion zeigt, daß die Fasern hauptsächlich parallel zu der langen Achse des Knochens liegen [ChGu74]. Durch die daran gebundenen Minerale entsteht ein orthotropes Verhalten. Tabelle 2.2 zeigt eine Auswahl von experimentell bestimmten Materialdaten kompakten Knochens.

Spongiosa hingegen zeigt eine deutlich geringere Festigkeit und Steifigkeit. Dies ist vor allem auf die wesentlich höhere Porosität zurückzuführen. Statistische Untersuchungen [RiCB88] zeigen, daß Elastizitätsmodul und Festigkeit der Spongiosa mit dem Quadrat der Rohdichte⁶ variieren, die Parameter von Spongiosa und Corticalis zusammen hinge-

⁶definiert als Masse pro Volumeneinheit des gesamten porösen Körpers, ein Maß für die Porosität

| | Korioth et. al. | Hart et. al. |
|------------|-----------------|--------------|
| E_1 | 960 | 273 |
| E_2 | 390 | 273 |
| E_3 | 320 | 823 |
| G_{12} | 170 | 115 |
| G_{13} | 90 | 123 |
| G_{23} | 130 | 123 |
| ν_{12} | 0,3 | 0,19 |
| ν_{13} | 0,3 | 0,105 |
| ν_{23} | 0,3 | 0,105 |
| ν_{21} | 0,3 | 0,21 |
| ν_{31} | 0,3 | 0,335 |
| ν_{32} | 0,3 | 0,335 |

Tabelle 2.3: Materialdaten der Spongiosa (E_i, G_i in MPa, ν_i dimensionslos). Zusammenstellung verschiedener Studien des menschlichen Oberschenkels. Aus [KoRH92] (orthotrope Annahme), [HHTB⁺92] (transvers isotrope Annahme) .

gen mit der dritten Potenz. Insgesamt scheint die Porosität für 70%–80% der Variabilität des Elastizitätsmoduls verantwortlich zu sein. Großen Einfluß hat auch die Orientierung der Trabekel zu der Belastungsrichtung. Cowin [Cowi85] konnte zeigen, wie die elastischen Eigenschaften von spongiösem Knochen sich aus der Architektur der Trabekel bestimmen lassen, und wies ihre Orthotropie nach. Unter der Annahme von isotropem Knochengewebe können so durch eine mikromechanische Finite-Elemente-Analyse 95% der Variabilität des Elastizitätsmoduls erklärt werden [KRDO⁺99]. Es gibt jedoch auch Hinweise [RhAT93], daß die unterschiedliche Mikrostruktur der Trabekel gegenüber den Osteonen kompakter Knochen zur geringeren Steifigkeit der Spongiosa beiträgt. In Tabelle 2.3 sind Elastizitätsmoduln aus verschiedenen Studien zusammengestellt. Aufgrund fehlender Ergebnisse für die Spongiosa des Unterkiefers sind die Daten aus menschlichen Oberschenkelknochen gewonnen.

Zusätzlich zeigt kortikaler Knochen viskoelastische Eigenschaften: die Materialparameter hängen von der Deformationsgeschwindigkeit ab [McEl66]. Die physiologischen Ursachen sind noch unklar, allerdings ist der Effekt gering bei kleinen Belastungen und langsamer Verformung [NaMe88].

2.3 Vereinfachtes Modell

Für eine vollständige Simulation der Belastungen des Unterkiefers während des Kauvorgangs müßten all diese Verhältnisse auch in das mathematische Modell einbezogen werden. Das hieße, man hätte ein nichtlinear-elastisches (und auch viskoelastisches) inhomogenes, anisotropes Komposit zu modellieren, das einer Vielzahl dynamischer und komplexer Randbedingungen unterworfen wäre. Insbesondere stellen die Kiefergelenke Kontakt- und Randbedingungen mit Reibung dar, die in dem bisher behandelten Modell keinen Platz finden. Deshalb sind Einschränkungen nötig, um überhaupt Ergebnisse zu erhalten.

Andererseits ist es in dem hier betrachteten Rahmen auch nicht nötig, bestimmte Verhältnisse zu berücksichtigen, da sie entweder, bedingt durch die Situation im Experiment, nicht auftauchen (Kiefergelenk) oder nicht realisierbar sind (intraindividuelle Un-

terschiede in der Knochenmorphologie für einen Standardkiefer). Im folgenden sollen die für diese Simulation getroffenen Vereinfachungen erläutert werden.

Gebiet

Im Hinblick auf die Verwendung der Methode der Finiten Elemente zur Simulation des elastischen Verhaltens des Unterkiefers kommt dem betrachteten Gebiet eine dominierende Rolle zu. Als Grundlage diente ein Präparat des teilweise bezahnten Unterkiefer eines ca. 80jährigen Mannes. Aufgrund der komplexen Geometrie des Unterkiefers ist für die Regularität der Lösung eine feine Diskretisierung unerlässlich (siehe Abschnitt 3.4). Laut einer Konvergenzanalyse von Hart [HHTB⁺92] sind mindestens 30000 Freiheitsgrade nötig, um eine ausreichende Genauigkeit zu erhalten. Da die exakte Geometrie durch eine Computertomographie bestimmt und direkt in das Modell übernommen werden kann (Abschnitt 5.2), ist ihre Berücksichtigung ein Schwerpunkt dieses Ansatzes. Aufgrund der Zerlegung des Kiefers in ein Tetraedernetz ist Ω ein zusammenhängendes, nicht konvexes Gebiet mit polygonalem Rand. Insbesondere handelt es sich um ein Lipschitzgebiet.

Randbedingungen

Die mechanische Belastung, und damit die Deformation des Unterkiefers, wird verursacht durch die Kaumuskulatur. Muskelansätze und -kräfte werden dabei durch die Randbedingungen an die Flächenkräfte eingebracht. Da diese Verhältnisse noch nicht vollständig verstanden und auch erheblichen Schwankungen unterworfen sind, wird im Experiment auf eine komplette Nachbildung verzichtet; dadurch müssen sie auch nicht im Modell, das dieses Experiment nachbilden soll, berücksichtigt werden. Insbesondere sind wir vornehmlich an dem Materialverhalten des Unterkiefers interessiert.

Trotzdem soll die Belastung den tatsächlich auftretenden nahekommen, um aussagekräftige Ergebnisse für die physiologische Situation zu erhalten. Als Grundlage soll eine funktionelle Last dienen, nämlich der zentrale Abbiß. Dafür wird eine senkrecht wirkende Kraft zentral auf den Alveolarkamm aufgebracht. Die Kaumuskulatur wird stark vereinfacht durch die Pterygo-Masseterschlinge repräsentiert. Sie soll auch, angestoßen durch Erfahrungen in einem früheren Test mit Kunstharzpräparaten, das Präparat vor einem Bruch des Collums bewahren. Die im täglichen Umfeld auftretenden Kräfte sind nämlich um ein Vielfaches größer als diejenige, die zur Fraktur der Knochen an sich benötigt werden. Ausgleichende Muskelkontraktionen und Weichgewebedeformation absorbieren im Körper den Großteil dieser Energie.

Die Kräfte wurden dabei im Bereich bis 100 Newton gewählt. Dies befindet sich im physiologischen Bereich, da im Kiefer die tatsächlich resultierenden Kräfte kleiner sind als die maximal möglichen [NKSH⁺00]. Darüberhinaus stellt dies im Experiment eine Sicherheitsmaßnahme dar, um das geschwächte Kieferpräparat nicht zu zerstören. Insbesondere handelt es sich dabei um tote Lasten, d. h. solche, bei denen die Massenpunkte durch die Deformationen nicht in einen Bereich geänderter Kraftdichte gelangen (siehe auch Abschnitt 2.3).

Volumenkräfte werden vernachlässigt, da im vorliegenden Fall allein die Schwerkraft auftritt, und sie im Vergleich zu den aufgetragenen Flächenlasten gering ist.

Als weitere Randbedingung taucht der Kontakt mit dem Kiefergelenk auf. Diese ist jedoch noch kaum modelliert; erste Finite-Elemente-Modelle für das elastische Verhalten des Diskus wurden beschrieben [BKRE00], jedoch führt die Verbindung zwischen Unterkiefer

und Gelenk durch die Vielzahl möglicher Bewegungen zu einer Kontaktrandbedingung mit Reibung, für die in diesem Zusammenhang noch keine ausreichenden Modelle existieren.

Daher beschränken wir uns auf homogene Dirichlet-Randbedingungen an den Kondylen, d.h. diese werden im Raum festgehalten. Dies soll auch Starrkörperbewegungen verhindern und so die Eindeutigkeit der Lösung gewährleisten. Zusätzliche Sorge wurde bei der experimentellen Realisierung getragen, das Präparat spannungsfrei einzubetten.

Materialgesetz

Bei der Wahl des verwendeten Materialgesetzes müssen nun die meisten Zugeständnisse an die Durchführung der Simulation gemacht werden. Vor allem durch die wiederholte Auswertung der Simulation im Rahmen der Parameterbestimmung (siehe Kapitel 6) ist eine einfache Berechenbarkeit nötig. Aus diesem Grund beschränken wir uns auf lineare Materialien; gestützt wird diese Annahme auf den kleinen Betrag der auftretenden Verschiebungen.

Inhomogenitäten des Knochengewebes, die starken inter- und intraindividuellen Variationen unterworfen sind, wurden im Hinblick auf die Fragestellung der Entwicklung eines Standardkiefers vernachlässigt; schließlich soll dieser exakt solche Unterschiede ausmitteln. Zwischen Spongiosa und Corticalis wurde in erster Näherung nicht unterschieden, in der Hoffnung, daß bereits ein homogenes Modell hinreichende Genauigkeit liefert. Dies ist auch der erste Ansatzpunkt für weitere Verfeinerung des Modells. Da das Präparat stark atrophiert und kaum bezahnt ist, wurde auf eine Modellierung der Zähne verzichtet, die beiden verbliebenen wurden als kortikaler Knochen angenommen.

Als besonders kompliziert stellt sich die Wahl des Hookeschen Gesetzes dar. Nach [Cowi85] weist Knochen orthotrope Eigenschaften auf. Für lange Knochen wie z. B. den Oberschenkelknochen ist die numerische Realisierung relativ einfach; am Kiefer ist dies, bedingt durch die Bestimmung der (gekrümmten) Hauptachsen schwierig. Auch die Produktion eines geeigneten Modellkiefers mit genau definierten Symmetrieebenen wird dadurch problematisch.

Hinzu kommen noch Unsicherheiten in der Literatur; so wird in [AsvB87] gezeigt, daß speziell der menschliche Unterkiefer transverse Isotropie aufweist. Darauf gestützt, wird im Experiment die Belastung am Corpus gemessen; dort tritt sie in Transversalrichtung auf. Dadurch können wir uns — wieder in erster Näherung — auf ein isotropes Material beschränken. Dies erleichtert zusätzlich die Parameteridentifizierung, da mit wachsender Parameteranzahl die Konvergenz schlechter wird. Da wir nur statische Lasten betrachten, tritt außerdem kein viskoelastisches Verhalten auf.

Das lineare Randwertproblem

Ausgehend von den obigen Betrachtungen können wir jetzt ein elliptisches Randwertproblem zweiter Ordnung formulieren, daß die interessierenden Eigenschaften des Modells hinreichend genau wiedergibt. Dafür bedienen wir uns des Randwertproblems, welches wir in Satz 2.4 für die Referenzkonfiguration aufgestellt haben, und setzen die aus Kinetik und Materialverhalten stammenden Identitäten ein. Im folgenden betrachten wir ein objektives elastisches Material.

Definition 2.23 (Allgemeines Randwertproblem) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein Lipschitzgebiet, dessen Rand $\partial\Omega$ in zwei disjunkte Teile Γ_0, Γ_1 zerfällt, die relativ offen in $\partial\Omega$ sind.

Gesucht sind Funktionen $\boldsymbol{\varphi} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ und $\boldsymbol{\Sigma} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ mit

$$-\operatorname{div}(\nabla \boldsymbol{\varphi}(x) \boldsymbol{\Sigma}(x)) = f(x), \quad x \in \Omega, \quad (2.66)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}(x)^T = \boldsymbol{\Sigma}(x), \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (2.67)$$

$$\boldsymbol{\varphi}(x) = \boldsymbol{\varphi}_0(x), \quad x \in \Gamma_0, \quad (2.68)$$

$$\nabla \boldsymbol{\varphi}(x) \boldsymbol{\Sigma}(x) \mathbf{n}(x) = g(x), \quad x \in \Gamma_1, \quad (2.69)$$

wobei

$$\boldsymbol{\Sigma}(x) = \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(x, \mathbf{C}(x)), \quad \mathbf{C}(x) = \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)^T \nabla \boldsymbol{\varphi}(x). \quad (2.70)$$

Gegeben sind die Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$, $g : \Gamma_1 \rightarrow \mathbb{R}^3$, $\boldsymbol{\varphi}_0 : \Gamma_0 \rightarrow \mathbb{R}^3$ sowie die Antwortfunktion $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}} : \bar{\Omega} \times S_{>}^{3,3} \rightarrow S^{3,3}$. Zusätzlich soll gelten

$$\boldsymbol{\varphi} \text{ ist injektiv, } \det \nabla \boldsymbol{\varphi}(x) > 0 \quad \forall x \in \bar{\Omega}. \quad (2.71)$$

Dabei stellt Bedingung (2.68) eine *Dirichlet-Randbedingung* dar, die Bedingungen an f und g eine *Neumann-Randbedingung*. Im weiteren betrachten wir nur tote Kräfte, d. h. solche, deren Kraftdichten $\mathbf{f}^\varphi : \varphi(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^3$ bzw. $\mathbf{g}^\varphi : \varphi(\Gamma_1) \rightarrow \mathbb{R}^3$ in der Referenzkonfiguration nicht von der Deformation abhängen. Dies ist natürlich der Fall für $\mathbf{f}^\varphi = 0$ oder $\mathbf{g}^\varphi = 0$, aber auch, wenn \mathbf{f}^φ die Schwerkraft darstellen soll. Ansonsten ist dies in der Regel nicht gegeben. Bei kleinen Verschiebungen (kleinem $\nabla \mathbf{u}$) ist die Abhängigkeit von $\boldsymbol{\varphi}$ allerdings auch vernachlässigbar.

Da wir uns nur für die auftretenden Verschiebung interessieren, bedienen wir uns der Gleichungen (2.2) und (2.6), um Problem 2.23 zu einem *reinen Verschiebungsansatz* umzuformulieren. Beschränken wir uns zusätzlich auf ein homogenes, isotropes Material, können wir als Antwortfunktion (2.45) einsetzen. Wir nehmen dazu noch Nullrandbedingungen auf Γ_0 an (setzen also $\boldsymbol{\varphi}_0 = \operatorname{id}$) und fordern Spannungsfreiheit in der Referenzkonfiguration.

Definition 2.24 (Verschiebungsansatz für isotrope Materialien) Seien $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, Γ_0, Γ_1 wie oben. Wir betrachten ein homogenes, isotropes Material, das in der Referenzkonfiguration kräftefrei ist. Gesucht sind Funktionen $\mathbf{u} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ und $\mathbf{E} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ mit

$$-\operatorname{div}((\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(\mathbf{E}(\mathbf{u}))) = f(x), \quad x \in \Omega, \quad (2.72)$$

$$\mathbf{u}(x) = 0, \quad x \in \Gamma_0, \quad (2.73)$$

$$(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(\mathbf{E}(\mathbf{u}))(x) \mathbf{n}(x) = g(x), \quad x \in \Gamma_1, \quad (2.74)$$

wobei

$$\mathbf{E}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u}), \quad (2.75)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(\mathbf{E}) = \lambda(\operatorname{spur} \mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E} + o(\mathbf{E}), \quad (2.76)$$

gilt mit den Lamé-Konstanten λ und μ . Gegeben sind die Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ und $g : \Gamma_1 \rightarrow \mathbb{R}^3$. Zusätzlich soll (2.71) gelten.

Für das vollständig lineare Problem bedienen wir uns auch der geometrischen Linearität, ersetzen also mittels der Gleichungen (2.8) und (2.63) die Tensoren \mathbf{E} und $\boldsymbol{\Sigma}$ durch ihre Linearisierungen $\boldsymbol{\varepsilon}$ und $\boldsymbol{\sigma}$. Zu beachten ist allerdings, daß diese Tensoren keine physikalischen Größen mehr darstellen, sondern nur deren Approximationen. Insbesondere verletzt das linearisierte Problem das Axiom der Objektivität.

Definition 2.25 (Linearisiertes Problem) Seien $\Omega \subset \mathbb{R}^3, \Gamma_0, \Gamma_1$ und das Material wie oben. Gesucht ist eine Funktion $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit

$$-\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(u)))(x) = f(x), \quad x \in \Omega, \quad (2.77)$$

$$u(x) = 0, \quad x \in \Gamma_0, \quad (2.78)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(u)))(x)\mathbf{n}(x) = g(x), \quad x \in \Gamma_1, \quad (2.79)$$

wobei

$$\boldsymbol{\varepsilon}(u) = \frac{1}{2}(\nabla u^T + \nabla u), \quad (2.80)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \lambda(\operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}. \quad (2.81)$$

Gegeben sind die Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ und $g : \Gamma_1 \rightarrow \mathbb{R}^3$. und die Lamé-Konstanten λ und μ .

In Komponentenschreibweise lautet das Problem 2.25:

$$-\mu \sum_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} - (\lambda + \mu) \sum_j \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} = f_i, \quad x \in \Omega, \quad (2.82)$$

$$u_i = 0, \quad x \in \Gamma_0, \quad (2.83)$$

$$\lambda n_i \sum_j \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \mu \sum_j \left(n_j \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) = g_i, \quad x \in \Gamma_1, \quad (2.84)$$

Kapitel 3

Mathematische Lösung des Modells

Für die Lösung des Problems 2.25 bietet sich die Methode der Finiten Elemente an. Sie wird häufig in der Strukturmechanik angewendet und ist insbesondere aufgrund ihrer Flexibilität bezüglich Geometrie und Randbedingungen ein Standardwerkzeug in der biomechanischen Analyse von Knochen. Ein weiterer Vorteil der Finiten-Elemente-Methode ergibt sich aus der Einführung eines neuen Lösungsbegriffes, der sogenannten schwachen Lösung: Betrachtet man Gleichung (2.77), so kann man für eine nicht zweimal differenzierbare rechte Seite f nicht notwendigerweise eine Lösung u erwarten. Dennoch gibt es sinnvolle Approximationen einer Lösung, die aber nicht im klassischen Sinne zweimal differenzierbar sind. Sucht man nämlich für die Lösung Fehlerabschätzungen, so muß man gewöhnlich sehr hohe Glattheitsanforderungen an die gesuchte Funktion u stellen, z. B. $u \in C^4(\Omega)$, die im allgemeinen unrealistisch sind. Fordert man hingegen nur schwache Differenzierbarkeit, so ist die Existenz von schwachen Lösungen viel häufiger gesichert. Sie hängt im wesentlichen von der Glattheit der rechten Seite f , der Glattheit des Randes $\partial\Omega$ und den Randbedingungen ab.

Diese Überlegung führt zu der Variationsformulierung des Problems 2.25; diese wird für das allgemeine und lineare Randwertproblem in Abschnitt 3.1 hergeleitet.

Daran schließen sich einige Resultate über allgemeine Existenz- und Stabilitätsbedingungen an, die nur kurz genannt werden (Abschnitt 3.2).

Die Existenz der schwachen Lösung des speziellen Problems 2.25 wird in Abschnitt 3.3 begründet und die nötigen Räume werden kurz dargestellt. Die für die numerische Bestimmung der Lösung erforderliche Approximation wird durch den Ansatz von Galerkin durchgeführt (Abschnitt 3.4). Dafür betrachtet man endlichdimensionale Unterräume. In unserem Fall sind dies die Finite-Elemente-Räume.

Die Wahl des verwendeten Finiten-Elemente-Raumes wird in Abschnitt 3.5 erläutert. Anschließend wird auf das zu lösende lineare Gleichungssystem hingeführt. Zuletzt werden noch in Abschnitt 3.7 einige Konvergenzbetrachtungen erläutert.

3.1 Schwache Formulierung des Randwertproblems

Ausgangspunkt der mathematischen Methode der Finiten Elemente ist die Suche nach einer schwachen Lösung des Randwertproblems; dazu wird das Problem umformuliert als eine Variationsaufgabe. Alternativ kann die Lösung auch aufgefasst werden als stationärer

Punkt eines Energiefunktional. In diesem Fall sind beide Aufgaben äquivalent (siehe auch [Ciar88], §§2.4, 2.6 sowie §4).

Prinzip der virtuellen Arbeit

Die Multiplikation der Gleichung 2.77 mit Testfunktionen $\theta \in L^2(\Omega)$ ergibt im $L^2(\Omega)$ -Skalarprodukt $\langle u, v \rangle_0 = \int_{\Omega} u(x)v(x) dx$ nach partieller Integration die *schwache Formulierung*. Mit Hilfe der Greenschen Formel läßt sich die Äquivalenz von Randwertproblem in der deformierten Konfiguration und Variationsformulierung nachweisen.

Im weiteren sei $\mathbf{A} : \mathbf{B} = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ij} = \text{spur } \mathbf{A}^T \mathbf{B}$.

Satz 3.1 Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein Lipschitzgebiet, $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ eine C^1 -Deformation, $\Gamma_1 \subset \partial\Omega$ meßbar. Seien $\mathbf{T}^\varphi : \varphi(\bar{\Omega}) \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$, $\mathbf{f}^\varphi : \varphi(\bar{\Omega}) \rightarrow \mathbb{R}^3$, $\mathbf{g}^\varphi : \varphi(\Gamma_1) \rightarrow \mathbb{R}^3$ hinreichend glatt. Dann sind äquivalent:

(i) Das Randwertproblem

$$-\text{div } \mathbf{T}^\varphi(x) = \mathbf{f}^\varphi(x), \quad x \in \varphi(\Omega), \quad (3.1)$$

$$\mathbf{T}^\varphi(x)\mathbf{n}(x) = \mathbf{g}^\varphi(x), \quad x \in \partial\varphi(\bar{\Omega}). \quad (3.2)$$

(ii) Für alle hinreichend glatten $\theta : \varphi(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit $\theta = 0$ auf $\partial\varphi(\Omega) \setminus \varphi(\Gamma_1)$ gilt

$$\int_{\partial\varphi(\Omega)} \mathbf{T}^\varphi(x) : \nabla\theta(x) dS = \int_{\Omega} \langle \mathbf{f}^\varphi(x), \theta(x) \rangle dx + \int_{\Gamma_1} \langle \mathbf{g}^\varphi(x), \theta \rangle dS. \quad (3.3)$$

Die Gleichung (3.3) wird auch *Prinzip der virtuellen Arbeit* genannt.

Analog gilt für die Variationsformulierung in der Referenzkonfiguration:

Satz 3.2 Die Variationsformulierung

$$\int_{\Omega} (\nabla\varphi(x)\Sigma(x) : \nabla\theta(x)) dx = \int_{\Omega} \langle f(x), \theta(x) \rangle dx + \int_{\Gamma_1} \langle g(x), \theta \rangle dS, \quad (3.4)$$

für alle hinreichend glatten $\theta : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit $\theta = 0$ auf $\partial\varphi(\Omega) \setminus \varphi(\Gamma_1)$ ist äquivalent zu (2.26) und (2.28), wenn alle beteiligten Funktionen hinreichend regulär sind.

Für das linearisierte Problem 2.25 lautet dann die Variationsaufgabe:

Definition 3.1 (Linearisierte Variationsaufgabe) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein Lipschitzgebiet, $\Gamma_1 \subset \partial\Omega$ meßbar, und die Antwortfunktion durch das Hookesche Gesetz (2.63) gegeben. Gesucht ist eine Funktion $u : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit $u = 0$ auf $\partial\varphi(\Omega) \setminus \varphi(\Gamma_1)$, so daß

$$\int_{\Omega} (\lambda \text{spur } \varepsilon(u) \text{spur } \varepsilon(v) + 2\mu \varepsilon(u) : \varepsilon(v)) dx = \int_{\Omega} \langle f, v \rangle dx + \int_{\Gamma_1} \langle g, v \rangle dS, \quad (3.5)$$

für alle hinreichend glatten $v : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit $v = 0$ auf $\partial\varphi(\Omega) \setminus \varphi(\Gamma_1)$ gilt. Dieses u wird als schwache Lösung bezeichnet.

Einen einfachen Zugang zur Lösung der Variationsaufgabe 3.1 liefert der Begriff der Hyperelastizität.

Hyperelastizität

Wenn sich sowohl die aufgebrauchten Kräfte als auch die Antwortfunktion $\hat{\mathbf{T}}$ als Richtungsableitungen von passenden Funktionalen schreiben lassen, so ist die Variationsformulierung äquivalent zu der Aufgabe, die stationären Punkte eines Energiefunktional zu bestimmen.

Definition 3.2 (Konservative Kräfte)

- (i) Eine Volumenkraft mit Kraftdichte $\mathbf{f} : \Omega \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ heißt konservativ, wenn das Integral $\int_{\Omega} \langle \mathbf{f}(x, \boldsymbol{\varphi}(x)), \theta(x) \rangle dx$ aus (3.4) als Richtungsableitung

$$F'(\boldsymbol{\varphi})\theta = \int_{\Omega} \langle \mathbf{f}(x, \boldsymbol{\varphi}(x)), \theta(x) \rangle dx \quad (3.6)$$

eines Funktional F der Form

$$F : \{\boldsymbol{\psi} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3\} \rightarrow F(\boldsymbol{\psi}) = \int_{\Omega} \hat{F}(x, \boldsymbol{\psi}(x)) dx \quad (3.7)$$

geschrieben werden kann. $\hat{F} : \Omega \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ wird dann Potential der Kraft genannt.

- (ii) Eine Flächenkraft mit Kraftdichte $\mathbf{g} : \Gamma_1 \times \mathbb{R}_+^{3,3} \rightarrow \mathbb{R}^3$ heißt konservativ, wenn das Integral $\int_{\Gamma_1} \langle \mathbf{g}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)), \theta(x) \rangle dx$ aus (3.4) als Richtungsableitung

$$G'(\boldsymbol{\varphi})\theta = \int_{\Gamma_1} \langle \mathbf{g}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)), \theta(x) \rangle dx \quad (3.8)$$

eines Funktional G der Form

$$G : \{\boldsymbol{\psi} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3\} \rightarrow G(\boldsymbol{\psi}) = \int_{\Gamma_1} \hat{G}(x, \boldsymbol{\psi}(x), \nabla \boldsymbol{\psi}(x)) dx \quad (3.9)$$

geschrieben werden kann. $\hat{G} : \Omega \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+^{3,3} \rightarrow \mathbb{R}$ wird dann Potential der Kraft genannt.

Offensichtlich sind tote Lasten konservativ mit den Potentialen

$$\hat{F}(x, \boldsymbol{\eta}) = \langle \mathbf{f}(x), \boldsymbol{\eta} \rangle \quad \forall x \in \Omega, \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^3, \quad (3.10)$$

$$\hat{G}(x, \boldsymbol{\eta}, \mathbf{F}) = \langle \mathbf{g}(x), \boldsymbol{\eta} \rangle \quad \forall x \in \Gamma_1, \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{F} \in \mathbb{R}_+^{3,3}. \quad (3.11)$$

$$(3.12)$$

Für bestimmte Materialien ist eine solche Darstellung auch für die linke Seite des Prinzips der virtuellen Arbeit möglich; wir nennen Materialien, deren Antwortfunktion ein Potential hat, hyperelastisch.

Definition 3.3 (Hyperelastisches Material) Ein elastisches Material mit Antwortfunktion $\hat{\mathbf{T}} : \bar{\Omega} \times \mathbb{R}_+^{3,3} \rightarrow \mathbb{R}^{3,3}$ ist hyperelastisch, wenn es eine Funktion der Form

$$\hat{W} : \bar{\Omega} \times \mathbb{R}_+^{3,3} \rightarrow \mathbb{R}, \quad (3.13)$$

gibt, die für alle $x \in \bar{\Omega}$ differenzierbar in $\mathbf{F} \in \mathbb{R}_+^{3,3}$ ist, so daß

$$\hat{\mathbf{T}}(x, \mathbf{F}) = \frac{\partial \hat{W}}{\partial \mathbf{F}}(x, \mathbf{F}) \quad \forall x \in \Omega, \quad \mathbf{F} \in \mathbb{R}_+^{3,3}. \quad (3.14)$$

Dabei ist der Gradient komponentenweise zu verstehen, d. h.

$$\hat{T}_{ij}(x, \mathbf{F}) = \frac{\partial \hat{W}}{\partial F_{ij}}(x, \mathbf{F}). \quad (3.15)$$

Damit können wir jetzt verlangen, daß die Lösungen der Randwertaufgabe gerade die stationären Punkte der *Gesamtenergie* $I = W - (F + G)$ sind:

Satz 3.3 *Sei $\Gamma_1 \subset \partial\Omega$, $\Gamma_0 = \partial\Omega \setminus \Gamma_1$. Wir betrachten ein hyperelastisches Material, das konservativen Volumen- und Flächenkräften ausgesetzt ist. Dann sind die Gleichungen*

$$-\operatorname{div} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \mathbf{F}}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)) = \mathbf{f}(x, \boldsymbol{\varphi}(x)), \quad x \in \Omega \quad (3.16)$$

$$\boldsymbol{\varphi}(x) = \boldsymbol{\varphi}_0(x) \quad x \in \Gamma_0, \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial \mathbf{F}}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)) \mathbf{n} = \mathbf{g}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)), \quad x \in \Gamma_1 \quad (3.18)$$

äquivalent zu der Bedingung

$$I'(\boldsymbol{\varphi})\theta = 0, \quad (3.19)$$

für alle glatten Abbildungen $\theta : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$, die auf Γ_0 verschwinden. Dabei ist das Funktional I definiert für alle hinreichend glatten Abbildungen $\boldsymbol{\psi} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ als

$$I(\boldsymbol{\psi}) = \int_{\Omega} [\hat{W}(x \nabla \boldsymbol{\psi}(x)) - F(\boldsymbol{\psi})] dx + \int_{\Gamma_1} G(\boldsymbol{\psi}) dx. \quad (3.20)$$

Da das Minimum der Gesamtenergie I ein stationärer Punkt des Funktionals $I_0(x) := I(x - \boldsymbol{\varphi}_0)$ mit der vorgegebenen Funktion $\boldsymbol{\varphi}_0$ auf Γ_0 ist, folgt:

Satz 3.4 *Seien Material und Kräfte wie oben angenommen. Dann ist jede glatte Abbildung $\boldsymbol{\varphi}$ mit*

$$\boldsymbol{\varphi} \in \boldsymbol{\Psi} := \{\boldsymbol{\psi} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3; \boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\varphi}_0 \text{ auf } \Gamma_0\}, \quad (3.21)$$

$$I(\boldsymbol{\varphi}) = \inf_{\boldsymbol{\psi} \in \boldsymbol{\Psi}} \int_{\Omega} [\hat{W}(x \nabla \boldsymbol{\psi}(x)) - F(\boldsymbol{\psi})] dx + \int_{\Gamma_1} G(\boldsymbol{\psi}) dx, \quad (3.22)$$

eine Lösung des Randwertproblems

$$-\operatorname{div} \frac{\partial \hat{W}}{\partial \mathbf{F}}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)) = \mathbf{f}(x, \boldsymbol{\varphi}(x)), \quad x \in \Omega, \quad (3.23)$$

$$\boldsymbol{\varphi}(x) = \boldsymbol{\varphi}_0(x) \quad x \in \Gamma_0, \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial \mathbf{F}}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)) \mathbf{n} = \mathbf{g}(x, \nabla \boldsymbol{\varphi}(x)), \quad x \in \Gamma_1. \quad (3.25)$$

Analog zu den Auswirkungen auf die Antwortfunktion eines elastischen Materials haben die Annahmen in Abschnitt 2.1.3 auch Konsequenzen für das Energiefunktional von hyperelastischen Materialien. Insbesondere führt die Forderung der Objektivität direkt zu der Symmetrie des zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensors; die entsprechende Gleichung des Randwertproblems 2.23 braucht also nicht berücksichtigt werden. Eine vollständige Herleitung der Resultate findet man in [Ciar88], §§4.2–4.5.

Wichtig ist in diesem Zusammenhang nur die Form des Energiefunktionals für lineare Materialien:

Satz 3.5 *Ein St. Venant-Kirchhoff-Material mit der Antwortfunktion $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}(\mathbf{E}) = \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(\mathbf{I} + 2\mathbf{E}) = \lambda(\operatorname{spur} E)\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}$ ist hyperelastisch. Das Energiefunktional hat die Form*

$$\tilde{W}(\mathbf{E}) = \frac{\lambda}{2}(\operatorname{spur} E)^2 + \mu \operatorname{spur} E^2. \quad (3.26)$$

Damit können wir die linearisierte Minimierungsaufgabe zu Problem 2.25 formulieren:

Satz 3.6 *Es gelten die Voraussetzungen von Satz 3.4. Zusätzlich sei das Material ein St. Venant-Kirchhoff-Material, und $\varphi_0 = 0$. Dann ist die Minimierungsaufgabe*

$$\text{Finde } u \in V := \{v : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3; v = 0 \text{ auf } \Gamma_0\}, \quad (3.27)$$

$$I(u) = \inf_{v \in V} \int_{\Omega} (\mu \varepsilon(v) : \varepsilon(v) + \frac{\lambda}{2} (\operatorname{div} v)^2) - F(v) dx + \int_{\Gamma_1} G(v) dx. \quad (3.28)$$

äquivalent zu Problem 2.25.

Die Existenz einer solchen schwachen Lösung garantiert der Lax-Milgram-Satz; er ist Gegenstand des nächsten Abschnitts. Dafür muss das Variationsproblem in passenden Hilbert-Räumen gelöst werden. Diese Räume werden in Abschnitt 3.3 dargestellt.

3.2 Die allgemeine Variationsaufgabe

Für die allgemeine lineare Variationsgleichung gibt es eine Existenzaussage, die auf der Topologie des zugrundeliegenden Funktionenraums fußt. Eine genaue Darstellung findet sich z. B. in [Wlok82].

Definition 3.4 *Sei V ein \mathbb{R} -Vektorraum, sei $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ eine symmetrische Bilinearform, sei $F : V \rightarrow \mathbb{R}$ eine Linearform. Wir betrachten das quadratische Funktional $J : V \rightarrow \mathbb{R}$,*

$$J(v) = \frac{1}{2} a(v, v) - F(v), \quad (3.29)$$

und die lineare Variationsgleichung

$$a(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V. \quad (3.30)$$

Ein $u \in V$, für das (3.30) gilt, heißt Lösung der linearen Variationsgleichung.

Ist die Bilinearform a zusätzlich positiv definit, so hat die Variationsgleichung als eindeutige Lösung das Minimum des quadratischen Funktional:

Satz 3.7 *Es gelten die Voraussetzungen von Definition 3.4. Zusätzlich sei a positiv definit. Dann ist J strikt konvex und für $u \in V$ gilt*

$$J(u) = \min_{v \in V} J(v) \Leftrightarrow a(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V. \quad (3.31)$$

Es gibt höchstens ein u mit dieser Eigenschaft.

Dabei folgt die strikte Konvexität direkt aus der Tatsache, daß a positiv definit ist. Einsetzen der Behauptung in die Taylorentwicklung von J liefert die Äquivalenz, die Eindeutigkeit des Minimums ist eine Folge der strikten Konvexität.

Definition 3.5 *Sei V ein Banachraum. Eine Bilinearform $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ heißt stetig, wenn es ein $c > 0$ gibt mit*

$$|a(u, v)| \leq c \|u\| \|v\|, \quad \forall u, v \in V, \quad (3.32)$$

und V -elliptisch, falls ein $\alpha > 0$ existiert mit

$$a(v, v) \geq \alpha \|v\|^2, \quad \forall v \in V. \quad (3.33)$$

Durch diese Abschätzung kann man mit der Bilinearform a ein Skalarprodukt $\langle u, v \rangle_a = a(u, v)$ und eine Norm $\|v\|_a := \sqrt{a(v, v)}$ definieren. Da diese *Energienorm* äquivalent zur Norm des Banachraums ist, wird $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle_a)$ zu einem Hilbertraum und der Rieszsche Darstellungssatz liefert die gewünschte Existenzaussage.

Satz 3.8 (Satz von Lax-Milgram) *Sei V Banachraum, $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige V -elliptische Bilinearform und $F : V \rightarrow \mathbb{R}$ linear und stetig. Dann hat die lineare Variationsgleichung*

$$a(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V, \quad (3.34)$$

genau eine Lösung $u \in V$, für die die folgende Abschätzung gilt:

$$\|u\| \leq \frac{\|F\|}{\alpha}. \quad (3.35)$$

Daraus folgt eine Stabilitätsaussage: Sind u_1, u_2 die zu den linearen Funktionalen F_1, F_2 gehörenden Lösungen der linearen Variationsgleichung, so ist $u = u_1 - u_2$ die zu $F = F_1 - F_2$ gehörende Lösung, und es gilt

$$\|u_1 - u_2\| \leq \frac{1}{\alpha} \|F_1 - F_2\|. \quad (3.36)$$

Die lineare Variationsaufgabe (3.5) findet sich in der allgemeinen Variationsformulierung (3.30) wieder, indem man

$$a(u, v) = \int_{\Omega} (\lambda \operatorname{spur} \varepsilon(u) \operatorname{spur} \varepsilon(v) + 2\mu \varepsilon(u) : \varepsilon(v)) dx, \quad (3.37)$$

$$F(v) = \int_{\Omega} f(x)v(x) dx + \int_{\Gamma_1} g(x)v(x) dS, \quad (3.38)$$

setzt.

Komponentenweise lautet sie mit dem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ in $L^2(\bar{\Omega})$

$$\begin{aligned} & (\lambda + 2\mu) \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \right\rangle + \lambda \left\langle \frac{\partial u_2}{\partial x_2}, \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \right\rangle + \lambda \left\langle \frac{\partial u_3}{\partial x_3}, \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \right\rangle + \\ & \mu \left\langle \frac{\partial u_2}{\partial x_2}, \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right\rangle + \mu \left\langle \frac{\partial u_2}{\partial x_1}, \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right\rangle + \mu \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial x_3}, \frac{\partial v_1}{\partial x_3} \right\rangle + \mu \left\langle \frac{\partial u_3}{\partial x_1}, \frac{\partial v_1}{\partial x_3} \right\rangle = F_1(v_1) \end{aligned}, \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} & (\lambda + 2\mu) \left\langle \frac{\partial u_2}{\partial x_2}, \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right\rangle + \lambda \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right\rangle + \lambda \left\langle \frac{\partial u_3}{\partial x_3}, \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \right\rangle + \\ & \mu \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial x_2}, \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right\rangle + \mu \left\langle \frac{\partial u_2}{\partial x_1}, \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right\rangle + \mu \left\langle \frac{\partial u_2}{\partial x_3}, \frac{\partial v_2}{\partial x_3} \right\rangle + \mu \left\langle \frac{\partial u_3}{\partial x_2}, \frac{\partial v_2}{\partial x_3} \right\rangle = F_2(v_2) \end{aligned}, \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} & (\lambda + 2\mu) \left\langle \frac{\partial u_3}{\partial x_3}, \frac{\partial v_3}{\partial x_3} \right\rangle + \lambda \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \frac{\partial v_3}{\partial x_3} \right\rangle + \lambda \left\langle \frac{\partial u_2}{\partial x_2}, \frac{\partial v_3}{\partial x_3} \right\rangle + \\ & \mu \left\langle \frac{\partial u_1}{\partial x_3}, \frac{\partial v_3}{\partial x_1} \right\rangle + \mu \left\langle \frac{\partial u_3}{\partial x_1}, \frac{\partial v_3}{\partial x_1} \right\rangle + \mu \left\langle \frac{\partial u_2}{\partial x_3}, \frac{\partial v_3}{\partial x_2} \right\rangle + \mu \left\langle \frac{\partial u_3}{\partial x_2}, \frac{\partial v_3}{\partial x_2} \right\rangle = F_3(v_3) \end{aligned}. \quad (3.41)$$

Aus der Linearität und der Symmetrie des Hookeschen Gesetzes folgt, daß a eine symmetrische Bilinearform ist. Wir suchen also einen Banachraum V von Funktionen auf $\bar{\Omega}$, so daß a wohldefiniert, stetig und V -elliptisch, sowie F stetig ist. Dafür bedienen wir uns der Sobolevräume, die Inhalt des nächsten Abschnitts sind.

3.3 Existenz der Lösung

Die Lösung der Variationsaufgabe 3.4 suchen wir in Räumen, in denen abgeschwächte Differenzierbarkeitseigenschaften gelten. Dies führt zu den Sobolevräumen, die auf dem Funktionenraum $L^2(\Omega)$ aufgebaut werden und für die zusätzlich eine schwache Ableitung definiert ist.

Sei im folgenden $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen mit stückweise glattem Rand, $C_0^\infty(\Omega)$ der Raum aller beliebig oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger, α ein Multiindex und $\langle u, v \rangle_0 = \int_\Omega u(x)v(x) dx$ das Skalarprodukt auf $L^2(\Omega)$. Die Beweise der aus der Funktionalanalysis bekannten Tatsachen finden sich z. B. in [Wern00].

Definition 3.6 (Schwache Ableitung) Ein $u \in L^p(\Omega)$ besitzt die schwache Ableitung $w = \partial^\alpha u$, falls $w \in L^p(\Omega)$ und

$$\langle \varphi, w \rangle_0 = (-1)^{|\alpha|} \langle \partial^\alpha \varphi, u \rangle_0, \quad \forall \varphi \in C_0^\infty(\Omega). \quad (3.42)$$

Definition 3.7 (Sobolevräume) Sei $m \geq 0$ ganzzahlig. Der Raum

$$W^{m,2} := \{v \in L^2(\Omega) : \partial^\alpha v \text{ existiert } \forall |\alpha| \leq m\} \quad (3.43)$$

heißt Sobolevraum.

Analog kann man auch basierend auf den L^p -Normen, $p \neq 2$, Sobolevräume konstruieren. Diese werden dann mit $W^{m,p}(\Omega)$ bezeichnet.

Satz 3.9 $W^{m,2}(\Omega)$ ist mit der Norm

$$\|v\|_{W^{m,2}(\Omega)} = \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha v\|_0^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.44)$$

ein Banachraum.

Satz 3.10 Ist Ω ein Lipschitzgebiet, so ist $C^\infty(\bar{\Omega})$ dicht in $W^{m,2}(\Omega)$

Mit einem geeigneten Skalarprodukt wird $W^{m,2}(\Omega)$ zu einem Hilbertraum (dies gilt nicht mehr für $p \neq 2$):

Satz 3.11 Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen. Dann ist $W^{1,2}(\Omega)$ mit dem Skalarprodukt

$$\langle u, v \rangle_1 = \int_\Omega u(x)v(x) dx + \sum_{j=1}^n \int_\Omega \partial_j u(x) \partial_j v(x) dx \quad (3.45)$$

vollständig.

Definition 3.8 Wir definieren:

$$H_0^m(\Omega) := \overline{C_0^\infty(\Omega)}, \quad (3.46)$$

wobei der Abschluß in $W^{m,2}(\Omega)$ gebildet wird. Sei weiterhin

$$H^m(\Omega) := \overline{C^m(\bar{\Omega}) \cap W^{m,2}(\Omega)}. \quad (3.47)$$

$H^m(\Omega)$, $H_0^m(\Omega)$ sind ebenfalls Hilberträume mit dem Skalarprodukt $\langle u, v \rangle_1$. Für beschränkte Gebiete mit genügend glattem Rand ist $W^{m,2}(\Omega) = H^m(\Omega)$. Im weiteren betrachten wir die Räume $H_0^1(\Omega)$ und $H^1(\Omega)$, in denen die Elliptizität der Bilinearform (3.38) gezeigt werden kann. Dafür bedienen wir uns der folgenden Ungleichung:

Satz 3.12 (Kornsche Ungleichung im $H_0^1(\Omega)$) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein Lipschitzgebiet, sei $v \in (H_0^1(\Omega))^3$. Dann gilt:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(v) : \boldsymbol{\varepsilon}(v) \, dx \geq \frac{1}{2} |v|_{H^1(\Omega)}^2 \quad (3.48)$$

mit der Seminorm

$$|v|_{H^1(\Omega)} := \left(\sum_{j=1}^n \int_{\Omega} |\partial_j v(x)|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.49)$$

Beweis: Da nach Satz 3.10 $C_0^\infty(\bar{\Omega})$ dicht in $H_0^1(\Omega)$ ist, genügt es, (3.48) für $u \in (C_0^\infty(\Omega))^3$ zu betrachten. Mit Hilfe der Greenschen Formel

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \, dx = \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \, dx, \quad 1 \leq i, j \leq 3 \quad (3.50)$$

erhalten wir:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(u) : \boldsymbol{\varepsilon}(u) \, dx &= \frac{1}{4} \sum_{i,j} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \, dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2 \, dx + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \, dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2 \, dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(\sum_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \left(\sum_j \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \, dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2 \, dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(\sum_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right)^2 \, dx \\ &\geq \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2 \, dx, \end{aligned}$$

aufgrund der Nicht-Negativität des zweiten Integrals in der letzten Gleichung. \square

Durch Anwenden der Poincaréschen Ungleichung auf Ableitungen folgt mit Induktion, daß die Seminorm (3.49) eine zu $\|\cdot\|_{H^1(\Omega)}$ äquivalente Norm auf $H_0^1(\Omega)$ definiert. Die Kornsche Ungleichung (3.48) liefert deshalb die $(H_0^1(\Omega))^3$ -Elliptizität der Bilinearform

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(u) : \boldsymbol{\varepsilon}(v) \, dx.$$

Der Raum $H_0^1(\Omega)$ enthält allerdings nur diejenigen Lösungen, die auf dem ganzen Rand $\partial\Omega$ verschwinden, d. h. es wird nur die Randbedingung $u = 0$ auf ganz $\partial\Omega$ erfaßt. Für eine Behandlung gemischter Randbedingungen benötigen wir Räume, die zwischen $H^1(\Omega)$ und $H_0^1(\Omega)$ liegen. Ihre Konstruktion soll hier nur kurz skizziert werden; für eine ausführliche Herleitung wird auf [Ciar88] verwiesen.

Zuerst formulieren wir die Kornsche Ungleichung im $H^1(\Omega)$. Ihr Beweis fußt auf der Tatsache, daß sich aufgrund der stetigen Einbettung von $L^2(\Omega)$ in den Dualraum $H^{-1}(\Omega)$ von $H_0^1(\Omega)$ die Fouriernorm in $H^{-1}(\Omega)$ durch die $L^2(\Omega)$ -Norm abschätzen läßt. Eine vollständige Darstellung des Beweises findet sich in [OISY92], Kapitel I, §2.

Definition 3.9 (Kornsche Ungleichung im $H^1(\Omega)$) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein Lipschitzgebiet. Dann gibt es eine Konstante $c > 0$ mit

$$\int_{\Omega} \varepsilon(v) : \varepsilon(v) \, dx + \langle u, u \rangle_0 \geq \frac{1}{2} c \|v\|_{H^1(\Omega)}^2, \quad \forall v \in (H^1(\Omega))^3. \quad (3.51)$$

In der Variationsformulierung 3.1 treten Randwerte von Funktionen sowohl in der Bedingung „ $u = 0$ auf Γ_0 “ als auch im linearen Funktional $F(v) = \int_{\Omega} \langle f, v \rangle \, dx + \int_{\Gamma_1} \langle g, v \rangle \, dS$ auf. Zur Behandlung dieser Randbedingung wird der Raum $L^2(\partial\Omega)$ der auf $\partial\Omega$ quadratintegrierbaren Funktionen benötigt, der analog über das Oberflächenintegral definiert wird:

Satz 3.13 *Der Raum*

$$L^2(\partial\Omega) = \{v : \int_{\partial\Omega} v^2 \, dx < \infty\}, \quad (3.52)$$

ist mit dem Skalarprodukt

$$\langle u, v \rangle_{\partial\Omega} = \int_{\partial\Omega} uv \, dS \quad (3.53)$$

ein Hilbertraum. Ist $\Gamma \subset \partial\Omega$ offen in $\partial\Omega$, so ist auch

$$L^2(\Gamma) = \{v|_{\Gamma} : v \in L^2(\partial\Omega)\} \quad (3.54)$$

mit dem Skalarprodukt

$$\langle u, v \rangle_{\Gamma} = \int_{\Gamma} uv \, dS \quad (3.55)$$

ein Hilbertraum und die Restriktion $r_{\Gamma} : L^2(\partial\Omega) \rightarrow L^2(\Gamma)$ ist linear, surjektiv und stetig.

Daß das lineare Funktional $F(v)$ für alle $v \in H^1(\Omega)$ wohldefiniert und stetig ist, folgt aus dem Spursatz:

Satz 3.14 (Spursatz) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein Lipschitzgebiet. Dann läßt sich die Restriktion $\gamma : C^1(\Omega) \rightarrow C(\partial\Omega)$,

$$\gamma v = v|_{\partial\Omega} \quad (3.56)$$

eindeutig zu einer linearen stetigen Abbildung $\gamma : H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\partial\Omega)$, der Spurabbildung, fortsetzen.

Anschaulich bedeutet also γv die stetige Fortsetzung der Restriktion von v auf den Rand. Jetzt können wir den Raum definieren, in dem die Bilinearform a elliptisch ist:

Definition 3.10 Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ Lipschitzgebiet, $\Gamma \subset \partial\Omega$ relativ offen in $\partial\Omega$. Wir definieren

$$V(\Gamma) = \{v : v \in H^1(\Omega), (r_{\Gamma} \circ \gamma)v = 0\}, \quad (3.57)$$

mit der Spurabbildung $r_{\Gamma} \circ \gamma : H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Gamma)$.

Es gilt:

$$H_0^1(\Omega) = V(\partial\Omega) \subset V(\Gamma) \subset H^1(\Omega).$$

Satz 3.15 Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ Lipschitzgebiet, $\Gamma \subset \partial\Omega$ relativ offen in $\partial\Omega$, $\Gamma \neq \emptyset$. Sei $(V(\Gamma), \|\cdot\|_{H^1(\Omega)})$ wie in (3.57) definiert. Dann ist die Bilinearform

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(u) : \boldsymbol{\varepsilon}(v) \, dx \quad (3.58)$$

$V(\Gamma)^3$ -elliptisch.

Damit kommen wir endlich zu der Existenzaussage für die Variationsaufgabe 3.1.

Satz 3.16 Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ Lipschitzgebiet, seien $\Gamma_0, \Gamma_1 \subset \partial\Omega$ relativ offen in $\partial\Omega$. Dann hat für jedes $f \in (L^2(\Omega))^3$ und jedes $g \in (L^2(\Gamma_1))^3$ das lineare Variationsproblem

$$\int_{\Omega} (\lambda \operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon}(u) \operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon}(v) + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(u) : \boldsymbol{\varepsilon}(v)) \, dx = \int_{\Omega} \langle f, v \rangle \, dx + \int_{\Gamma_1} \langle g, v \rangle \, dS, \quad (3.59)$$

genau eine Lösung $u \in (V(\Gamma_0))^3$, und es gilt

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq c(\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{L^2(\Gamma_1)}), \quad (3.60)$$

mit einer von f und g unabhängigen Konstante c .

Im Falle von homogenen Dirichlet-Randbedingungen können wir eine Aussage über die Regularität der schwachen Lösung machen.

Satz 3.17 ([Ciar88], Th. 6.3–6) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ein Gebiet mit Rand in C^2 , $f \in L^2(\Omega)$, und sei $\Gamma = \Gamma_0$. Dann ist die schwache Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ des linearisierten Elastizitätsproblems im Raum $W^{2,2}(\Omega)$ enthalten und erfüllt

$$-\operatorname{div}(\lambda(\operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))\mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) = f \quad \text{in } L^2(\Omega). \quad (3.61)$$

Sei $m \geq 1$ eine natürliche Zahl. Wenn der Rand Γ aus C^{m+2} ist und $f \in W^{m,2}(\Omega)$, dann ist die schwache Lösung $\mathbf{u} \in H_0^1(\Omega)$ in $W^{m+2,2}(\Omega)$ enthalten.

Dieses Resultat kann für gemischte Randbedingungen verallgemeinert werden, wenn die Abschlüsse der Dirichlet- und Neumannränder eine leere Schnittmenge haben.

Aus (3.60) und der Linearität folgt schließlich die Stabilitätsabschätzung

$$\|u_1 - u_2\|_{H^1(\Omega)} \leq c(\|f_1 - f_2\|_{L^2(\Omega)} + \|g_1 - g_2\|_{L^2(\Gamma_1)}), \quad (3.62)$$

für die Differenz zweier Lösungen zu den Daten (f_i, g_i) .

3.4 Diskretisierte Fassung der Variationsaufgabe

Für die numerische Lösung der Variationsaufgabe bestimmen wir das Minimum des Funktionals J nicht in $H^1(\Omega)$, sondern in einem passenden endlichdimensionalen Unterraum. Dieser wird üblicherweise mit S_h bezeichnet, wobei h für einen Diskretisierungsparameter steht. Damit soll angedeutet werden, daß für $h \rightarrow 0$ Konvergenz gegen die Lösung des kontinuierlichen Problems erreicht werden soll. Für eine ausführliche Darstellung und die Beweise wird auf [KnAn00], Abschnitt 2.2 und Abschnitt 2.3 verwiesen.

Nach Satz 3.7 ist $u_h \in S_h$ genau dann Lösung der Variationsaufgabe

$$J(u_h) := \frac{1}{2}a(u_h, u_h) - F(u_h) \rightarrow \min_{S_h}! \quad (3.63)$$

wenn gilt

$$a(u_h, v) = F(v) \quad \forall v \in S_h. \quad (3.64)$$

Dieses Problem kann mit dem *Galerkin-Verfahren* auf ein lineares Gleichungssystem zurückgeführt werden. Dazu betrachten wir die Basis $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$ von S_h . Dann ist (3.64) äquivalent zu

$$a(u_h, \psi_i) = F(\psi_i), \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.65)$$

Der Ansatz

$$u_h = \sum_{k=1}^N z_k \psi_k \quad (3.66)$$

führt zu dem Gleichungssystem

$$\sum_{k=1}^N a(\psi_k, \psi_i) z_k = F(\psi_i) \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.67)$$

bzw. in Matrixschreibweise

$$Az = b \quad (3.68)$$

mit $A_{ik} := a(\psi_k, \psi_i)$ und $b_i := F(\psi_i)$. Die Matrix A wird auch als *Steifigkeitsmatrix* bezeichnet, der Vektor b als *Lastvektor*.

Wenn die Bilinearform $a : S_h \times S_h \rightarrow \mathbb{R}$ wie in unserem Fall symmetrisch und positiv definit ist, so führt der Galerkin-Ansatz zu dem selben Gleichungssystem wie der *Ritzsche Ansatz*, der von der Minimierungsaufgabe (3.63) ausgeht — man spricht dann von einem *Ritz-Galerkin-Verfahren*. Insbesondere ist A positiv definit, wenn die zugehörige Bilinearform H^1 -elliptisch ist.

Für V -elliptische Bilinearformen a (wobei $V \subset H^1(\Omega)$ ist), erhalten wir mit $0 < \alpha \leq c$ die Abschätzungen

$$a(u, u) \geq \alpha \|u\|_1 \quad \text{und} \quad |a(u, v)| \leq c \|u\|_1 \|v\|_1 \quad \forall u, v \in V. \quad (3.69)$$

Mit der Stetigkeit des linearen Funktionals F erhält man eine von der Wahl des Unterraums $S_h \subset V$ unabhängige Stabilitätsaussage:

Lemma 3.1 *Für die Lösung $u_h \in S_h$ von (3.64) gilt:*

$$\|u_h\|_1 \leq \alpha^{-1} \|F\|, \quad (3.70)$$

wobei $\|F\|$ die Operatornorm von F ist.

Die Konvergenz des Galerkin-Verfahrens liefert

Lemma 3.2 (Céa-Lemma) *Sei $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ eine V -elliptische Bilinearform mit $H_0^1(\Omega) \subset V \subset H^1(\Omega)$. Seien u bzw. u_h Lösungen der Variationsaufgabe in V bzw. $S_h \subset V$. Dann gilt*

$$\|u - u_h\|_1 \leq \frac{c}{\alpha} \inf_{v_h \in S_h} \|u - v_h\|_1. \quad (3.71)$$

Danach hängt die Genauigkeit der Näherungslösung u_h wesentlich davon ab, Funktionenräume zu wählen, in denen sich die Lösung u gut approximieren läßt. Günstig ist deshalb die Wahl von stückweisen Polynomen auf einer Zerlegung von Ω . Damit kann eine höhere Genauigkeit durch eine Verfeinerung dieser Gebietsunterteilung erreicht werden. Dieser Ansatz führt direkt zu den Finite-Elemente-Räumen.

3.5 Wahl des Finite-Elemente-Raums

Zur Konstruktion der Finite-Elemente-Räume diskretisiert man zunächst das Gebiet Ω in endlich viele einfache Teilgebiete. Dann wählt man für die gesuchte Funktion u_h einen Ansatz, der in jedem Teilgebiet ein Polynom ist. Stetigkeitsbedingungen für den Übergang zwischen den Teilgebieten führen dann zu einem linearen Gleichungssystem für die gesuchte Funktion.

Die Finite-Elemente-Räume lassen sich anhand der folgenden Merkmale klassifizieren: der Art der Zerlegung des Gebiets (Tetraeder, Würfel, krummlinige Elemente), der Form der Ansatzfunktionen in den Teilgebieten (linear, quadratisch) und ihrer Differenzierbarkeits- und Stetigkeitseigenschaften (C^0 -, C^1 -stetig).

Offensichtlich muß die Zerlegung (oder *Triangulierung*) bestimmte Eigenschaften haben, damit die Übergänge zwischen den Teilgebieten einen stückweisen Ansatz für u_h erlauben. Im folgenden beschränken wir uns auf Gebiete $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ mit polygonalem Rand, so daß dieses in Tetraeder oder Würfel zerlegt werden kann.

Definition 3.11 *Eine Zerlegung $\mathcal{T} = \{T_1, \dots, T_n\}$ von $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ heißt zulässig, wenn gilt:*

- (i) $\bar{\Omega} = \bigcup_{i=1}^M T_i$.
- (ii) Besteht $T_i \cap T_j$ aus einem Punkt, so ist er Eckpunkt sowohl von T_i als auch von T_j .
- (iii) Besteht $T_i \cap T_j$ für $i \neq j$ aus mehr als einem Punkt, so liegt $T_i \cap T_j$ entweder auf einer Linie, die sowohl von T_i als auch von T_j eine Kante ist, oder auf einer Fläche, die sowohl von T_i als auch von T_j eine Seite ist.

Hat jedes T_i höchstens einen Durchmesser von $2h$, so kann man für \mathcal{T} auch \mathcal{T}_h schreiben.

Damit läßt sich jetzt eine formelle Definition für die Finiten Elemente aufstellen:

Definition 3.12 (Finites Element) *Ein Finites Element ist ein Tripel (T, Π, Σ) mit folgenden Eigenschaften:*

- T ist ein Polyeder in \mathbb{R}^d
- Π ist ein Unterraum von $C(T)$ mit endlicher Dimension s . Die Funktionen $p \in \Pi$ heißen Formfunktionen.

- Σ ist eine Menge von s linear unabhängigen Funktionalen über Π . Dabei ist jedes $p \in \Pi$ eindeutig durch die Werte der s Funktionalen aus Σ bestimmt. Diese Funktionalen werden auch Interpolationsbedingungen oder Freiheitsgrade des Elements genannt.

Im Sprachgebrauch bezeichnet man die Teilgebiete T als Elemente, während die Funktionen Finite Elemente genannt werden. Ist die Bedeutung aus dem Kontext ersichtlich (z. B. lineare Elemente), so wird die Unterscheidung hinfällig.

Elemente, deren Freiheitsgrade nur Auswertungen der Funktionen $p \in \Pi$ in einer Menge von bestimmten Punkten $\mathbf{n}^i \in T$ umfassen, werden auch *Lagrange-Elemente* genannt. Bestehen die $p \in \Pi$ aus Funktionen, die an genau einem Punkt dieser Menge von Null verschieden sind, so bilden sie eine *nodale Basis*. Sind alle $p \in \Pi$ in dem Sobolevraum enthalten, in dem das Variationsproblem gestellt wird, so spricht man von *konformen Elementen*.

Um eine nodale Basis von Polynomen vom Grad t für C^0 -Elemente zu konstruieren, verteilt man zum Beispiel $s = \frac{1}{6}(t+1)(t+2)(t+3)$ Punkte so auf jedes Element, daß auf jeder Kante $t+1$ Punkte liegen. Durch die Vorgabe der Werte an jedem dieser Punkte sind Polynome vom Grad $\leq t$ eindeutig bestimmt, außerdem ist die Restriktion auf jede Kante ein Polynom in einer Variablen vom Grad $\leq t$. Diese Punkte werden auch *Knoten* genannt. Da die Werte in den Knoten auf den Kanten von den Polynomen der beiden angrenzenden Seiten gleich interpoliert werden, ist die Stetigkeit gesichert.

Mit dem *Finite-Elemente-Raum* ist dann derjenige Funktionenraum gemeint, der von den Formfunktionen über ganz Ω aufgespannt wird. Genauer:

Definition 3.13 (Finite-Elemente-Raum) Sei eine Familie von Finiten Elementen auf einer Triangulierung \mathcal{T}_h gegeben. Sei \mathcal{N}_h die Menge aller Knoten in \mathcal{T}_h . Dann ist der zugehörige Finite-Elemente-Raum

$$S_h := \left\{ v = (v_T)_{T \in \mathcal{T}_h} \in \prod_{T \in \mathcal{T}_h} \Pi_T, \forall \mathbf{n} \in \mathcal{N}_h \forall \lambda, \mu \in \Lambda(\mathbf{n}), v_{T_\lambda}(\mathbf{n}) = v_{T_\mu}(\mathbf{n}) \right\}, \quad (3.72)$$

wobei $\Lambda(\mathbf{n})$ die Menge aller Elemente ist, die \mathbf{n} als Knoten enthalten.

Beschränkt man sich auf konforme Elemente, so benötigt man für unser Randwertproblem Elemente, die Formfunktionen aus $H^1(\Omega)$ haben. Daß die oben konstruierten C^0 -Elemente dafür genügen, besagt der folgende Satz:

Satz 3.18 ([Brae97], Kap. II, 5.2) Sei $k \geq 1$, Ω beschränkt. Eine stückweise beliebig oft differenzierbare Funktion $v : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ ist genau dann aus $H^k(\Omega)$, wenn $v \in \mathbf{C}^{k-1}(\bar{\Omega})$ gilt.

Für unser Problem genügt es also, für die betrachteten Funktionen Stetigkeit an den Knotenpunkten zu verlangen; Ableitungen brauchen nicht berücksichtigt werden. Dies erleichtert die Konstruktion der Elemente.

Bis jetzt war nur von einzelnen Elementen die Rede. Sind alle auftauchenden Elemente von einem einzigen *Referenzelement* ableitbar, so vereinfacht sich die Behandlung.

Definition 3.14 (Affine Familie) Eine Familie von Finite Elementen (T_k, Π_k, Σ_k) auf einer Triangulierung \mathcal{T}_h von $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ heißt affine Familie, wenn es ein Element $(T_{\text{ref}}, \Pi_{\text{ref}}, \Sigma_{\text{ref}})$ gibt mit den folgenden Eigenschaften:

Zu jedem $T_j \in \mathcal{T}_h$ existiert eine affine Abbildung $F_j : T_{\text{ref}} \rightarrow T_j$, so daß für jedes $v \in S_h$ die Restriktion auf T_j die Form

$$v(x) = p(F_j^{-1}x) \quad \text{mit } p \in \Pi_{\text{ref}} \quad (3.73)$$

hat. Dazu hat jedes Funktional $s \in \Sigma$ die Form $s(v) = s_{\text{ref}}(p)$ mit $s_{\text{ref}} \in \Sigma$ und $p = v \circ F$.

Die Transformationsfunktionen F_j bilden einen Punkt $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in T_{\text{ref}}$ in den lokalen Koordinaten des Referenzelements auf einen Punkt $(x_1, x_2, x_3) \in T_j$ im globalen Koordinatensystem ab. Insbesondere werden die Funktionen der nodalen Basis auf eine der normierten Formfunktionen $N_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ transformiert.

Für die Durchführung unserer Berechnungen bedienen wir uns der einfachsten konformen C^0 -Elemente mit nodaler Basis, den sogenannten M_0^1 -Elementen. Im \mathbb{R}^3 sind dies die linearen Tetraederelemente. Da wir also ein Interpolationspolynom erster Ordnung bestimmen wollen, genügen vier Stützstellen, die wir an den Ecken des Tetraeders ansetzen. Die normierten Formfunktionen lauten dann:

$$N_1 := 1 - \xi_1 - \xi_2 - \xi_3, \quad (3.74)$$

$$N_2 := \xi_1, \quad (3.75)$$

$$N_3 := \xi_2, \quad (3.76)$$

$$N_4 := \xi_3. \quad (3.77)$$

Definition 3.15 (Lineares Tetraederelement) Als lineares Tetraederelement wird ein Finites Element $(T_{\text{tet}}, \Pi_{\text{tet}}, \Sigma_{\text{tet}})$ bezeichnet mit:

$$(i) \quad T_{\text{tet}} := \{(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in \mathbb{R}^3 : \xi_1 \geq 0, \xi_2 \geq 0, \xi_3 \geq 0, 1 - \xi_1 - \xi_2 - \xi_3 \geq 0\}$$

$$(ii) \quad \Pi_{\text{tet}} := \{N_1, N_2, N_3, N_4\}$$

$$(iii) \quad \Sigma_{\text{tet}} := \{p(\mathbf{n}^i) : i = 1, \dots, 4\} \quad \text{mit } \mathbf{n}^i = (\delta_{i2}, \delta_{i3}, \delta_{i4})$$

Die zugehörige Transformationsfunktion $F_j : T_j \rightarrow T_{\text{tet}}$ lautet:

$$\begin{aligned} F_j(\xi_1, \xi_2, \xi_3) &= (n_1^1 + (n_1^2 - n_1^1)\xi_1 + (n_1^3 - n_1^1)\xi_2 + (n_1^4 - n_1^1)\xi_3, \\ &\quad n_2^1 + (n_2^2 - n_2^1)\xi_1 + (n_2^3 - n_2^1)\xi_2 + (n_2^4 - n_2^1)\xi_3, \\ &\quad n_3^1 + (n_3^2 - n_3^1)\xi_1 + (n_3^3 - n_3^1)\xi_2 + (n_3^4 - n_3^1)\xi_3), \end{aligned} \quad (3.78)$$

bzw. in Matrixschreibweise

$$(x - \mathbf{n}^1) = J \cdot \xi, \quad (3.79)$$

mit der Jacobimatrix

$$J = \begin{pmatrix} (n_1^2 - n_1^1) & (n_1^3 - n_1^1) & (n_1^4 - n_1^1) \\ (n_2^2 - n_2^1) & (n_2^3 - n_2^1) & (n_2^4 - n_2^1) \\ (n_3^2 - n_3^1) & (n_3^3 - n_3^1) & (n_3^4 - n_3^1) \end{pmatrix}. \quad (3.80)$$

Bildet man die partiellen Ableitungen der Transformation 3.78 nach (x_1, x_2, x_3) so erhält man:

$$I = J \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} & \frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} & \frac{\partial \xi_3}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} & \frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} & \frac{\partial \xi_3}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \xi_1}{\partial x_3} & \frac{\partial \xi_2}{\partial x_3} & \frac{\partial \xi_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} =: J \cdot J^{-1} \quad (3.81)$$

Dann ist

$$\xi = J^{-1}(x - \mathbf{n}^1). \quad (3.82)$$

Im Referenzelement kann der Verlauf der Lösung u_h durch die Formfunktionen N_i ausgedrückt werden:

$$u_h(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{i=1}^4 N_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) z_i \quad (3.83)$$

bzw. in Matrixform

$$u_h(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \mathbf{N} \mathbf{z}, \quad (3.84)$$

wobei die z_i die zu bestimmenden Koeffizienten sind. Die Stützstellen \mathbf{n}^i eines Elementes sind dabei nicht unabhängig von Nachbarelementen, es wird eine Stützstelle auch von den Nachbarelementen verwendet. Dadurch ergibt sich ein verkoppeltes lineares Gleichungssystem für die z_i , das es zu lösen gilt.

3.6 Aufstellen des linearen Gleichungssystems

Benutzt man Finite Elemente mit einer nodalen Basis, so kann man die Steifigkeitsmatrix elementweise aufstellen. Wir schreiben (wegen der Symmetrie der Bilinearform a):

$$A_{ij} = a(\psi_i, \psi_j) = \int_{\Omega} (\lambda \operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_i) \operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_j) + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_i) : \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_j)) dx = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T (\lambda \operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_i) \operatorname{spur} \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_j) + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_i) : \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_j)) dx \quad (3.85)$$

Dabei müssen nur Elemente berücksichtigt werden, die gleichzeitig zum Träger von ψ_i und ψ_j gehören. Die Berechnung des Integrals erfolgt sinnvollerweise im Referenzelement; man geht gleichzeitig zu einer lokalen Knotennumerierung über. Diesen Vorgang bezeichnet man auch als *Assemblierung*. Dabei ist die *Speicherstruktur* der Elementdaten wichtig. Im Falle der M_0^1 -Elemente genügt dafür eine (global) numerierte Liste aller Knoten mit ihren Koordinaten, sowie eine numerierte Liste, die jedes Element mit seinen zugehörigen Knoten aufführt.

Am effizientesten geht man bei der Berechnung der A_{ij} deshalb Element-orientiert vor. Statt für alle Paare ψ_i, ψ_j die Elemente $T_m \in \mathcal{T}_h$ zu suchen, die Träger sind (und damit einen Beitrag zu A_{ij} liefern), bestimmt man für jedes T_m den additiven Beitrag

$$A_{ij}^m = \int_{T_m} (\lambda \operatorname{div}(\psi_i) \operatorname{div}(\psi_j) + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_i) : \boldsymbol{\varepsilon}(\psi_j)) dx, \quad (3.86)$$

für alle ψ_i, ψ_j , deren Träger T_m ist. Wenn jedes Element s Knoten enthält, so muß man deshalb nur eine $s \times s$ -Untermatrix, die *Steifigkeitselementsmatrix*, bestimmen.

Mittels der Kettenregel

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial u_i}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial u_i}{\partial \xi_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial u_i}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_3} \end{pmatrix} =: J^T \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial u_i}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_3} \end{pmatrix}, \quad (3.87)$$

und der Beziehung

$$\int_{\Omega} f dx_1 dx_2 dx_3 = \int_{\Omega} f |\det(J)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3, \quad (3.88)$$

läßt sich jetzt der Integralausdruck 3.86 im Referenzelement berechnen. Die dadurch auftauchenden partiellen Ableitungen nach x_i können mit der Vorschrift (3.82) durch die Funktionswerte an den Knoten ausgedrückt werden. Diese Transformation ist unabhängig von ξ , kann also vor das Integral gezogen werden. Anschließend kann man die $\psi_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ mit dem Ansatz (3.83) durch die normierten Formfunktionen darstellen. Die Integration im Referenzelement erfolgt dann durch eine *Gaußsche Quadraturformel*

$$\int_T f(\xi) d\xi = \int_{\xi_1=0}^1 \int_{\xi_2=0}^{1-\xi_1} \int_{\xi_3=0}^{1-\xi_1-\xi_2} f(\xi) d\xi = \frac{1}{24} (f(s, s, s) + f(s, r, r) + f(r, s, r) + f(r, r, s))$$

mit $r = \frac{1}{20}(5 - \sqrt{5})$, $s = \frac{1}{20}(5 - 3\sqrt{5})$, (3.89)

die für Polynome bis zum Grad 2 exakt ist.

Der Lastvektor b des Galerkin-Ansatzes (3.68) kann analog elementweise aufgestellt werden. Für jedes Element $T_m \in \mathcal{T}_h$ wird das Integral der Volumenkräfte

$$F_i^m = \int_T f(x) \psi_i(x) dx \quad (3.90)$$

wie oben im Referenzelement ausgewertet.

Die Behandlung von Flächenkräften ist etwas aufwendiger. Dazu faßt man die Hülle der Triangulierung \mathcal{T}_h als eine Zerlegung $T_{\partial h}$ des Randes $\partial\Omega$ in lineare Dreieckselemente auf. Dies sind wieder M_0^1 -Elemente; Form- und Transformationsfunktionen dieser affinen Familie werden analog zum dreidimensionalen Fall gebildet. Insbesondere gelten die selben Aussagen in Bezug auf Approximation und Konvergenz. Eine genaue Darstellung findet sich z. B. bei [Brae97]. Die Knoten dieses *Oberflächengitters* sind dabei so zu numerieren, daß Knoten beider Zerlegungen, die dieselben globalen Koordinaten besitzen, identische Nummern bekommen. Dann kann man für jedes Element $t_m \in T_{\partial h}$ das Integral

$$G_i^m = \int_{t_m} g(x) \psi_i|_{t_m}(x) dS \quad (3.91)$$

mittels geeigneter Quadraturformeln berechnen. Der additive Beitrag zum Lastelementsvektor b^m ist dann

$$b_i^m = F_i^m + G_i^m. \quad (3.92)$$

Für die *Kompilation* der Gesamtmatrix müssen die Elementbeiträge aufsummiert werden. Dabei geht man von den lokalen Elementsknoten (i, j) wieder zu einer globalen Knotennumerierung (r_i, r_j) des Gesamtgitters über. Für jedes Element T_m führt man also unter der Berücksichtigung der Symmetrie von A durch:

$$A_{r_i r_j} = A_{r_i r_j} + A_{ij}^m \quad 1 \leq i, j \leq 3, \quad (3.93)$$

$$b_{r_i} = b_{r_i} + b_i^m \quad 1 \leq i \leq 3. \quad (3.94)$$

Die so gebildete Matrix A ist singulär, da für die Eindeutigkeit der Lösung die Berücksichtigung der Dirichlet-Randbedingungen notwendig ist. Sind die Randbedingungen homogen, so ist das Einbringen relativ einfach. Ist am Knoten j der Wert Null vorgegeben, so ersetzt man die j -te Zeile und die j -te Spalte von A durch den j -ten Einheitsvektor

e_j und setzt $b_j = 0$. Für inhomogene Dirichlet-Randbedingungen müssen auch die restlichen Komponenten des Lastvektors angepaßt werden. Alternativ können die Knoten so numeriert werden, daß solche Knoten, an denen Dirichlet-Randbedingungen gelten, gesondert stehen. Haben die Dirichletknoten die Nummern $n + 1, \dots, N$, so kann dies bei der Kompilation bereits ausgenutzt werden. Ist bei der Betrachtung des Beitrags A_{ij} der Index $i > n$, so ist $b_j = A_{ij}b_i$. Für den Fall $i, j > n$ ergibt sich gar kein Beitrag. Dabei muß jedes Indexpaar nur einmal betrachtet werden. Für die Kompilation des Lastvektors ergibt sich ein analoges Vorgehen.

Im Hinblick auf die Lösung des linearen Gleichungssystems $Az = b$ ist jedoch eine andere Wahl der Numerierung sinnvoll. Sie hat offensichtlich immensen Einfluß auf die Struktur der Matrix A . Durch die nodale Basis hat sie nur wenige von Null verschiedene Einträge, sie ist *dünn besetzt*. A_{ij} enthält nämlich nur dann einen Eintrag, wenn die beiden zu i und j gehörenden Knoten zusammen in mindestens einem Element liegen. Die Position der Außerdiagonaleinträge hängt dabei von der Numerierung der Knoten ab. Für eine effiziente Lösung des Gleichungssystems ist es aber essentiell, daß die *Bandbreite* bzw. genauer das *Profil* der Matrix A , beides Maße für die Verteilung der Einträge außerhalb der Diagonalen, möglichst gering ist.

Ein Verfahren, eine günstige Knotennumerierung zu bestimmen, ist das *Cuthill-McKee-Verfahren*. Dafür wird der Triangulierung \mathcal{T}_h mit Basisfunktionen ψ_i ein Graph $G = (N, K)$ zugeordnet. Dabei entspricht jeder Knoten $n_i \in N$ genau einem Knoten der Triangulierung, und für jedes Paar (ψ_i, ψ_j) , die ein Element als Träger gemeinsam haben, existiert genau eine Kante $(n_i, n_j) \in K$. Zwei Knoten n_i und n_j für die $(n_i, n_j) \in K$ gilt, heißen benachbart; der Grad eines Knotens bezeichnet die Anzahl der benachbarten Knoten. Der Cuthill-McKee-Algorithmus weist dann jeden Knoten einer Stufe zu:

- (i) Schritt 1: Wähle einen Knoten mit minimalem Grad, möglichst einen „am Ende“ des Graphen. Dieser bekommt die Nummer 1 und bildet die erste Stufe.
- (ii) Schritt k : Sind alle Knoten numeriert, brich ab. Sonst füge alle nicht-numerierten Knoten, die zu einem Knoten der Stufe $k - 1$ benachbart sind, in Stufe k und gehe zu Stufe $k + 1$. Dabei werden die Knoten innerhalb einer Stufe fortlaufend numeriert.

Für die so erzeugte Numerierung kann eine Abschätzung für die Bandbreite bewiesen werden (siehe z.B. [Schw91], Abschn. 3.2). Ein (bei gleicher Bandbreite) besseres Profil kann man erzeugen, indem die Numerierung anschließend umgekehrt wird. Dies entspricht einer Spiegelung von A an der Gegendiagonalen.

Die Assemblierung, Kompilation und Knotennumerierung übernimmt die Finite-Elemente-Umgebung FElCs, die in Abschnitt 5.1 beschrieben wird.

3.7 Konvergenzabschätzungen

Wichtig für die Konvergenz des Verfahrens ist die Qualität der zugrundeliegenden Triangulierung, in der Form einer Schranke für die Unförmigkeit der Elemente. Ein Maß hierfür ist das Verhältnis von In- und Umkreis:

Definition 3.16 Eine Zerlegung \mathcal{T}_h heißt quasi-uniform, wenn es für jedes Element $T \in \mathcal{T}_h$ Konstanten $0 < c_1 < c_2$ gibt, so daß T eine Kugel mit Radius $c_1 h$ enthält, und selbst in einer Kugel mit Radius $c_2 h$ enthalten ist.

Eine schwächere Forderung ist eine Schranke für die Stumpfheit der Innenwinkel.

Definition 3.17 Eine Zerlegung \mathcal{T}_h erfüllt die Maximalwinkelbedingung, wenn eine Konstante $\bar{\alpha} < \pi$ existiert, so daß für alle $T \in \mathcal{T}_h$ der Maximalwinkel $\alpha_T \leq \bar{\alpha}$ ist.

Diese Abschätzungen erlauben Aussagen über den Approximationsfehler der Methode der Finiten Elemente. Im weiteren beschränken wir uns auf die verwendeten M_0^1 -Elemente. Eine Ausführung in größerer Allgemeinheit insbesondere der Beweise findet man in [KnAn00].

Ist eine quasi-uniforme Triangulierung gegeben, so können wir nach dem Céa-Lemma 3.2 die Konvergenzordnung durch eine Abschätzung für den Interpolationsfehler $\|u - I_h(u)\|$ angeben. Dabei ist der lineare Interpolationsoperator I_h gerade die Interpolation in den Freiheitsgraden in den Knoten \mathbf{n}^i mit der nodalen Basis ψ_i . Also ist

$$I_h(u) = \sum_i u(\mathbf{n}^i) \psi_i \in V_h. \quad (3.95)$$

Damit dieser Operator wohldefiniert ist, muß $u \in C(\bar{\Omega})$ sein. Nach dem Einbettungssatz von Kondrasov gilt dies, wenn $u \in H^1(\Omega)$ ist. Dies ist nach Satz 3.18 der Fall. Da sich die Sobolevnormen und -halbnormen über Teilmengen von Ω zerlegen lassen, kann die Abschätzung im Referenzelement erfolgen. Dabei bleiben die Interpolationspolynome erhalten, da die Knoten und Formfunktionen eines Elements wieder auf Knoten und Formfunktionen des Referenzelements abgebildet werden. Dort betrachtet man jetzt das lineare, stetige *Interpolationsfehlerfunktional*

$$G : W^{2,2}(T) \rightarrow H^1(T), \quad u \mapsto u - I_T(u). \quad (3.96)$$

Da im M_0^1 -Element Polynome vom Grad 1 exakt interpoliert werden, gilt das Bramble-Hilbert-Lemma:

Lemma 3.3 (Bramble-Hilbert-Lemma) Sei $T \in \mathbb{R}^d$ offen, und $G : H^2(T) \rightarrow \mathbb{R}$ ein stetiges lineares Funktional, für das gilt:

$$G(p) = 0 \text{ für alle } p \in \mathcal{P}_1. \quad (3.97)$$

Dann gibt es ein $C > 0$, so daß für alle $u \in W^{2,2}(T)$ gilt:

$$|G(u)| \leq C \|G\| |u|_{W^{2,2}(T)}. \quad (3.98)$$

Aus der Regularitätsaussage 3.17 folgt die Abschätzung:

Satz 3.19 Man betrachtet eine affine Familie von M_0^1 -Elemente auf einer quasi-uniformen Triangulierung \mathcal{T}_h . Liegt die Lösung u der Randwertaufgabe 2.25 in $W^{2,2}(\Omega)$, dann existiert eine Konstante $C > 0$, so daß für die Finite-Elemente-Approximation u_h aus (3.64) gilt:

$$\|u - u_h\|_1 \leq Ch |u|_2 \quad (3.99)$$

Im Falle von linearen Dreieckselementen genügt die schwächere Forderung der Maximalwinkelbedingung:

Satz 3.20 *Man betrachtet lineare Dreieckselemente auf einer Triangulierung \mathcal{T}_h , die die Maximalwinkelbedingung erfüllt. Liegt die Lösung u der Randwertaufgabe 2.25 in $W^2(\Omega)$, dann existiert eine Konstante $C > 0$, so daß für die Finite-Elemente-Approximation u_h aus (3.64) gilt:*

$$\|u - u_h\|_1 \leq Ch |u|_2 \quad (3.100)$$

Eine analoge Aussage für lineare Tetraederelemente wird in [Kriz92] bewiesen.

Ist man wie in unserem Fall nicht an der Approximation des Gradienten interessiert, so kann der Fehler in der L^2 -Norm gemessen werden. Man erhält dann eine Konvergenz höherer Ordnung. Dafür bedient man sich eines Dualitätsarguments, indem man das *adjungierte Randwertproblem*

$$a(v, u) = F(v) \quad \forall v \in V, \quad (3.101)$$

betrachtet.

Aufgrund der Symmetrie der speziellen Bilinearform in unserem Problem genügt als Voraussetzung für die Konvergenz die Regularität des ursprünglichen Randwertproblems.

Satz 3.21 (Satz von Aubin und Nitsche) *Es gelten die Voraussetzungen von Satz 3.19 oder 3.20. Liegt die Lösung u der Randwertaufgabe 2.25 in $W^2(\Omega)$, dann existiert eine Konstante $C > 0$, so daß für die Finite-Elemente-Approximation u_h aus (3.64) gilt:*

$$\|u - u_h\|_0 \leq Ch^2 |u|_2 \quad (3.102)$$

Im Falle nichtkonformer Methoden sind zusätzliche Abschätzungen der Fehler durch näherungsweise Berechnung der Integrale, inhomogene Dirichlet-Randbedingungen oder krummlinige Ränder nötig, die in unserem Falle vernachlässigt werden können.

Kapitel 4

Experimente

Für die Bestimmung der Materialparameter ist sowohl die aus der numerischen Lösung des Modells berechnete Verschiebung, als auch eine *in-vitro*-Messung in biomechanischen Experimenten erforderlich. Dabei ist für die Parameteridentifikation neben einer hohen Meßgenauigkeit vor allem die Vergleichbarkeit von Experiment und Simulation wichtig. Die nötige Flexibilität, um eine möglichst hohe Übereinstimmung der Randbedingungen in Experiment und Simulation zu erreichen, stellt hohe Anforderungen an den Versuchsaufbau. Für die experimentelle Analyse wurde deshalb der an der Abteilung Biomechanik der Klinik für Orthopädie und Sportorthopädie der TU München entwickelte Prüfstand verwendet. Die Beschreibung dieser speziell für die biomechanische Untersuchung des Unterkiefers konstruierten Anlage ist Gegenstand von Abschnitt 4.1. Anschließend sollen der speziell für unser Problem gewählte Versuchsaufbau und die Durchführung der Experimente geschildert werden.

4.1 Beschreibung des biomechanischen Prüfstands

Der Prüfstand (genannt *Mandibulator*) ist eine PC-gesteuerte, variable Versuchsumgebung, die eine realitätsnahe Simulation von dynamischen Kaukräften ermöglichen soll [SNKZ+00]. Dazu erzeugen computergeregelte Hydraulikzylinder vordefinierte Kraftverläufe; die resultierenden Verformungen werden über Videokameras erfaßt und einer Bewegungsanalyse unterzogen. Abbildung 4.1 zeigt den Prüfstand inklusive Steuerrechner.

Die Komponenten werden dabei von einem modularen Gestell aufgenommen, das sich verstellen und erweitern läßt. Dadurch wird eine flexible Einrichtung des Versuchsaufbaus sowie ein günstiger Zugang zum Objekt ermöglicht. Dieses ruht in künstlichen Gelenkgruben, die an piezoelektrischen Kraftsensoren befestigt sind. Dadurch können passive Reaktionskräfte am Gelenk dreidimensional erfaßt werden.

Krafteinleitung

Aktive Muskel- und Zahnkräfte werden durch fünf hydraulische Zylinder erzeugt und über Seile und reibungsarme Umlenkrollen auf das Objekt aufgebracht. Der modulare Versuchsaufbau erlaubt dabei beinahe beliebige Kraftansätze und Kraftvektoren. Eine flächige Aufbringung kann erreicht werden, indem das Seil aufgedreht und mit Hilfe von Klebstoff auf der gewünschten Fläche befestigt wird.

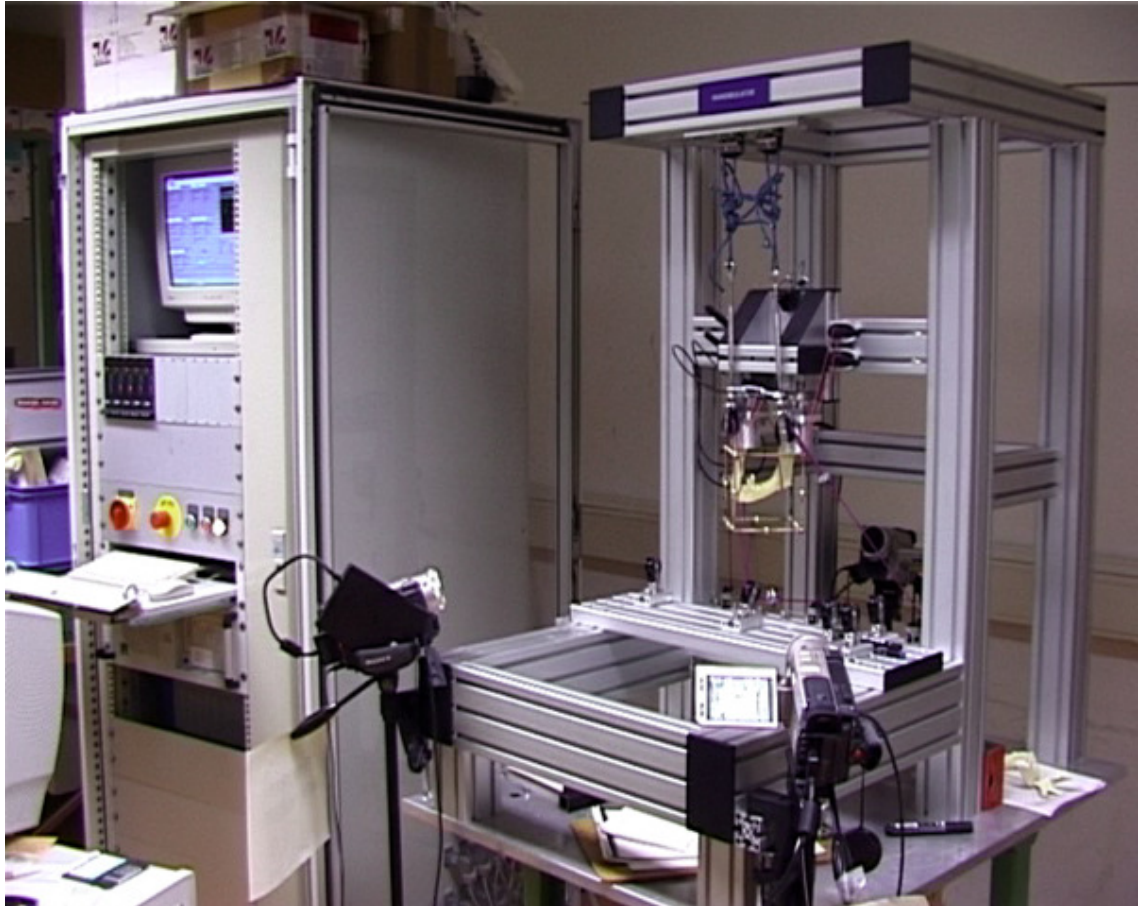


Abbildung 4.1: Gesamtansicht des Prüfstands. Links der PC für die Regelung der Hydraulikzylinder, rechts das eingespannte Präparat.

Die einzelnen Antriebe können individuell gesteuert werden und willkürliche Lastverläufe fahren. Dazu werden die Hydraulikzylinder von einem PC angesteuert, der über eine mit der Meß- und Steuersoftware LabVIEW realisierte Oberfläche die gewünschten Belastungsprofile generiert. Aus diesen werden die benötigten Spannungssignale errechnet, die als Sollwertkurven über einen Digital/Analog-Wandler zyklisch an die PID-Regler¹ der Hydrauliksteuerung übergeben werden. Nach einer langsamen Vorbelastung liefern die Zylinder dann die gewünschte Kraftkurve. Dabei werden die Ist-Werte wieder an den Computer übergeben, der sie kontinuierlich überwacht und bei Überschreitung einer wählbaren Toleranz automatisch den Versuch abbricht. Die Software visualisiert und protokolliert dabei ständig die Soll- und Ist-Werte.

Verformungsaufzeichnung

Die Aufzeichnung der Verschiebungen erfolgt über ein videogestütztes Bewegungserfassungssystem (*SIMI*), das kontaktfreie Messung erlaubt und auch in der Medizin zur Sprach- und Ganganalyse eingesetzt wird. Dabei werden auf dem Objekt passive Marker angebracht, die über handelsübliche digitale Videokameras aufgenommen werden. Durch

¹Proportional-Integral-Differential-Regler, ein integrierter Schaltkreis zur Regelsteuerung

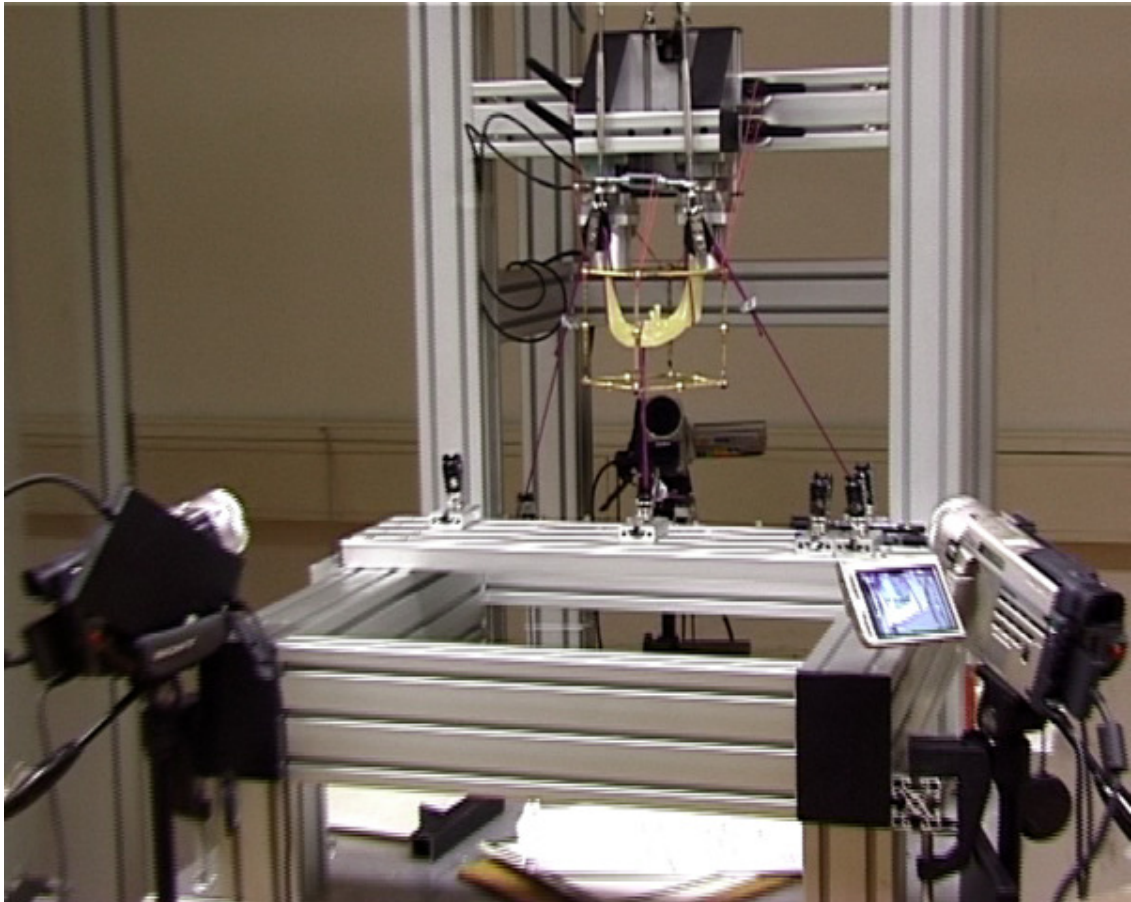


Abbildung 4.2: Versuchsaufbau zur dreidimensionalen Erfassung von Verschiebungen. Drei Kameras wurden zur Erhöhung der Genauigkeit verwendet. Um das Präparat ist ein Gitter mit einem Referenzkoordinatensystem angebracht.

Einsatz von mehreren Kameras aus verschiedenen Blickwinkeln können die dreidimensionalen Koordinaten dieser Punkte im Raum berechnet und verfolgt werden. Dazu definiert man zuerst ein Referenzkoordinatensystem mit Hilfe eines Objekts mit bekannten Dimensionen. Anhand dessen kann das Programm SIMI später, sofern die Blickwinkel nicht verändert werden, die Marker im Raum lokalisieren. Da das System ohne Kabel oder ähnliches arbeitet, kann es als rückwirkungsfrei betrachtet werden. Aufgrund der Auflösung der Videokameras arbeitet das System mit einer Genauigkeit zur Erfassung der Verschiebung von 0,2 mm in einem Meßvolumen von 1 m³. Da der Unterkiefer in einem Würfel von 25 cm Kantenlänge Platz findet, gibt der Hersteller eine Auflösung von 10 µm an. Eine weitere Fehlerquelle liefert die manuelle Markierung der Referenz- und Testpunkte auf den aufgenommenen Bildern. Zusammen mit der Rechenungenauigkeit ist davon auszugehen, daß die so bestimmten Verschiebungen mit gewissen Meßfehlern behaftet sind. Diese Tatsache ist bei der Durchführung der Parameteridentifikation zu berücksichtigen.

Abbildung 4.2 zeigt ein eingespanntes Kieferpräparat zusammen mit dem Referenzgitter für die Kalibrierung.

4.2 Durchführung der Experimente

Die Durchführung der Versuche erfolgte nach dem angedeuteten Schema: Nach der Aufnahme eines Referenzgitters zur Kalibration der Bewegungserfassung wurde das Präparat in den Versuchsaufbau eingespannt. Nach dem Aufbringen von Markerpunkten wurde eine Aufnahme der kräftefreien Referenzkonfiguration angefertigt. Danach wurde das Präparat einer Reihe von zunehmenden Belastungen unterzogen, wobei jedesmal der deformierte Zustand aufgezeichnet wurde. Schließlich wurden die so entstandenen Aufnahmen mit Hilfe der Software ausgewertet und die Verschiebungen aus der Referenzkonfiguration berechnet. Im folgenden sollen einige dieser Schritte genauer erläutert werden. Abbildung 4.3 zeigt den Versuchsaufbau aus Sicht der Kameras.

Präparat

Bei dem für die Untersuchungen zur Verfügung gestellte Präparat handelt es sich um den Unterkiefer eines etwa 80jährigen Mannes. Der Kiefer ist nur noch teilweise bezahnt, der Alveolarkamm stark atrophiert. Zusätzlich ist der Knochen osteoporotisch, d. h. er weist einen überhöhten Verlust an trabekulärem Gewebe auf. Dadurch wird auch die Annahme eines homogenen Kiefers aus kortikalem Knochen passender. Die daraus resultierende Schwächung des Knochens steht den Auswirkungen der Behandlung entgegen, die der Haltbarkeit des Präparats dienen. Durch Mazerieren² wurde das Weichgewebe entfernt; wie in Abschnitt 2.2.3 erwähnt, führt dies zu einer erhöhten Festigkeit. Dazu rechnet man bei ausgetrocknetem Knochen mit einer um bis zu 20% höheren Steifigkeit gegenüber dem lebenden Gewebe.

Randbedingungen

Für die Einbettung und die gefahrenen Lastfälle wurden die in Abschnitt 2.3 gewählten Randbedingungen realisiert.

Das Präparat wurde an den Kondylen befestigt, um Starrkörperbewegungen zu verhindern. Die Einbettung der Kondylenköpchen erfolgte dabei durch Eingießen in Stahlköpfe. Das dazu verwendete Material mußte schnell härten, aber auch die an den Einbettungsstellen auftretenden hohen Spannungen aushalten können. Gleichzeitig sollte eine rückstandsfreie Auslösung des Präparats möglich sein; deshalb wurde Hartzement aus der Zahntechnik eingesetzt. Die Köpfe wurden dann am Gerüst des Prüfstands befestigt. Dadurch konnte eine spannungsfreie Einbettung garantiert werden.

Als Belastung wurden über Seilschlingen senkrechte Kraftvektoren auf das Präparat aufgebracht. In der Nähe des Kieferwinkels wurde auf jeder Seite ein Zug nach oben angebracht, um die Kaumuskulatur in Form der Pterygo-Masseterschlinge zu repräsentieren. Der Alveolarkamm wurde durch einen zentralen Zug nach unten belastet, um eine Kaulast zu simulieren. Die Lasten wurden dabei flächig aufgebracht. Der genaue Aufbau ist aus Abbildung 4.3 ersichtlich.

Die Belastungen wurden, angefangen bei 50 Newton, in Schritten von 10 Newton erhöht. Auf alle drei Angriffsflächen wurde dieselbe Kraft eingeleitet, um eine symmetrische Last zu realisieren und dabei möglichst wenig Spannung am Collum zu erzeugen. Diese Vorsichtsmaßnahme beruht auf früheren Erfahrungen mit Kunstharzpräparaten, die

²Einweichen über längere Zeit in Wasser oder Lauge



(a) Laterale Ansicht



(b) Frontale Ansicht

Abbildung 4.3: Der Versuchsaufbau aus Sicht der beiden Kameras. An den Seilen wird eine identische Kraft (im Bild 80 Newton) eingeleitet. In beiden Bildern sind die vier markierten Punkte gut sichtbar.

bei vergleichsweise geringer, aber asymmetrischer Last, an der Einbettungsstelle durchbrachen. Deshalb wurden die Versuche bei Erreichen von 90 Newton eingestellt, um das Humanpräparat nicht zu zerstören. Zusätzlich ermöglichte die geregelte Hydraulik als weitere Sicherheitsmaßnahme ein sanftes Einschwingen der Belastung; dies diente auch dazu, um viskoelastische Effekte zu vermeiden.

Erfassung und Auswertung

Zur Erfassung der resultierenden Verschiebungen wurden auf dem Präparat vier Punkte markiert (siehe Abbildung 4.3). Die genaue Platzierung der Marker erfolgte dabei so, daß sie aufgrund der Krümmung der Oberfläche auf (oder zumindest sehr nahe an) Knoten des in Abschnitt 5.2 erzeugten Oberflächengitters lagen. Da es sich um rein symmetrische Lasten handelte, genügte eine einseitige Betrachtung. Um die Verformung des Corpus möglichst genau zu messen, wurden die Marker zwischen den Lastauflagen angebracht. Für die Berechnung der dreidimensionalen Koordinaten muß dabei jeder Punkt auf (mindestens) zwei Aufnahmen gut sichtbar sein. Durch die unilaterale Markierung waren aus nur zwei Blickwinkeln alle Punkte klar zu erkennen, deshalb konnte man sich auf zwei Kameras beschränken. Aufgrund der Beschränkung auf statische Lasten wurden dabei digitalen Photokameras gegenüber den Videokameras Vorzug gegeben, da so eine höhere Auflösung möglich war (1600×1200 Punkte anstatt 720×576). Außerdem reduzierte sich so die Datenmenge bei der Auswertung. Aufnahmen wurden jeweils von frontal und lateral gemacht.

Für die Kalibrierung wurden die Kanten eines Würfels zusammengelötet und anschließend mit einer Fräsmaschine submillimetergenau ausgemessen. Die so gewonnenen Daten lieferten ein Referenzsystem, innerhalb dessen die Markerpunkte lokalisierbar waren. Bei der Auswertung mit SIMI wurde zuerst auf jeweils einer Aufnahme des Kalibrierungsgitters mit beiden Kameras dessen Eckpunkte identifiziert. Dann mußten, angefangen mit dem kraftfreien Präparat, auf allen Aufnahmen (für jeden Lastfall ein Bild von jeder Kamera) die vier Punkte von Hand markiert werden. Aus diesen Informationen berechnete die Software dann die Koordinaten der Marker und gab schließlich die Norm der Verschiebungsvektoren in Form einer Kraft-Verformungskurve aus (siehe Abschnitt 7.1).

Aus diesen so gewonnenen Daten können die Materialparameter durch Lösen eines inversen Problems bestimmt werden. Dazu müssen sie mit den Ergebnissen der numerischen Simulation verglichen werden. Ihre Durchführung ist Gegenstand des nächsten Kapitels.

Kapitel 5

Numerische Lösung mit der Finite-Elemente-Methode

Für die Identifikation der Materialparameter muß die experimentelle Simulation durch eine numerische Simulation mit der Methode der Finiten Elemente nachvollzogen werden, um aus dem Vergleich der Resultate die gesuchten Größen zu bestimmen. Für die Implementierung dieser numerischen Lösung stand die Finite-Elemente-Umgebung FeliCs zur Verfügung. Sie zeichnet sich durch hohe Flexibilität im Umgang mit Randbedingungen und Ansatzräumen sowie durch eine einfache Einbindung von effizienten Algorithmen der numerischen linearen Algebra aus. Eine Kurzbeschreibung wird in Abschnitt 5.1 gegeben.

Da für die Konvergenz einer Finite-Elemente-Methode die Diskretisierung des Gebiets eine erhebliche Rolle spielt, war ein besonderer Schwerpunkt die möglichst genaue Wiedergabe der Geometrie des Präparats in der Simulation. Um das zu gewährleisten, wurde das Gitter direkt aus einer Computertomographie-Aufnahme des Präparats generiert und anschließend auf seine Qualität überprüft. Dafür wurde auf die kommerzielle Software amira des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik in Berlin zurückgegriffen. Eine Schilderung der Vorgehensweise inklusive Darstellung von amira erfolgt in Abschnitt 5.2.

Das schließlich resultierende lineare Gleichungssystem zeichnet sich durch eine dünn besetzte Matrix mit spezieller Bandstruktur aus. Für die effiziente Lösung ist deren Ausnutzung essentiell, deshalb wurde ein von dem freien Paket SPOOLES bereitgestelltes blockorientiertes Verfahren verwendet. Darauf soll in Abschnitt 5.3 eingegangen werden.

5.1 Beschreibung der Finite-Elemente-Umgebung FeliCs

Die numerische Lösung einer partiellen Differentialgleichung über die Methode der Finiten Elemente ist ein aufwendiges Verfahren. Wie in Abschnitt 3.6 dargestellt, ist die Struktur der Steifigkeitsmatrix nicht nur von den zu lösenden Gleichungen, sondern auch stark von der speziellen (diskretisierten) Geometrie des Problems und den verwendeten Elementen abhängig. Insbesondere der Prozeß der Assemblierung und Kompilation ist mühsam, kann aber bei vorgegebenen Rahmenbedingungen automatisch erfolgen. Dies ist die Stärke von fertigen Finite-Elemente-Paketen wie NASTRAN.

Für das vorliegende Problem wurde die am Lehrstuhl für Angewandte Mathematik der TU München entwickelte Finite-Elemente-Umgebung *FeliCs* (Finite Elements in Cplusplus) verwendet. Die objektorientiert in C++ entwickelte Software ist eine Sprache zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode.

Aufbauend auf der schwachen Formulierung einer partiellen Differentialgleichung und der Definition von Ansatzräumen kann FeliCs verschiedenartige numerische Probleme lösen. FeliCs bietet große Flexibilität in der Formulierung der Gleichungen; es sind beliebige Gleichungssysteme mit einer beliebigen Anzahl von Ansatzfunktionen formulierbar. Die Ansatzräume und Gitter sind vom Benutzer frei definierbar. FeliCs rechnet in ein, zwei und drei Raumdimensionen. Darüber hinaus enthält die Umgebung algorithmische Sprachelemente wie Schleifen und If-Then-Anweisungen, die die Realisierung verschiedenster Verfahren zur Behandlung von Nichtlinearitäten und Zeitabhängigkeiten ermöglichen.

FeliCs ist durch eine Kombination der Vererbungsmöglichkeiten der objektorientierten Programmiersprache C++ mit dem Konzept der dynamischen Bindung von Bibliotheken in modernen Betriebssystemen erweiterbar. Solche Erweiterungen sind theoretisch ohne Neukompilierung und ohne Zugriff auf die Quelltexte von FeliCs möglich. Insbesondere ist eine leicht zugängliche Schnittstelle zum Einbinden von Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme vorgesehen. Das Paket wurde für verschiedene UNIX-Workstations (Sun, DEC, SGI) sowie für Linux-PCs implementiert.

Zur Behandlung von partiellen Differentialgleichungen gibt der Anwender dabei in einem Quelltext die Ansatzräume in Form der Geometrie der Elemente, der Formfunktionen und Transformationsformeln sowie der Gaußschen Quadraturformeln vor. Gebiete und Ränder werden im *winged-edge* Format als Listen von Elementen, die Verweise auf eine Liste von Knoten mit zugehörigen Koordinaten enthalten, angegeben. Genauso können beliebige Regionen definiert werden, auf denen später Randbedingungen vorgegeben werden. In einem nächsten Schritt werden die Gleichungen in schwacher Formulierung eingegeben. Die Netzgenerierung verbindet dann den Ansatz mit dem eben deklarierten Gebieten, erzeugt aus der Geometrie also ein (internes) Gitter mit FE-Knoten. Sie bestimmt, welche Regionen assembliert werden bzw. wo Dirichlet-Randbedingungen vorgeschrieben sind. Durch die Erweiterbarkeit sind auch selbstdefinierte Randbedingungen integrierbar, wie z. B. paarweise oder vollkommene Identifizierung von Freiheitsgraden. In einer C-ähnlichen Sprache können danach die genauen Randbedingungen (homogen, inhomogen) vorgegeben und die Steifigkeitsmatrix assembliert und kompiliert werden. Dabei bietet FeliCs Unterstützung für dünnbesetzte Matrizen, die auch Spalten-Informationen enthalten bzw. hüllenorientiert vorliegen können. Für die Lösung des so aufgestellten linearen Gleichungssystems existieren verschiedene numerische Verfahren, aber auch die Möglichkeit, dazu extern vorliegende Routinen zu verwenden. Weiterhin stehen Möglichkeiten zur Ablaufsteuerung sowie verschiedene Matrix-Vektor-Operationen und Funktionen zur Ein- und Ausgabe von Daten zur Verfügung.

Im vorliegenden Fall wurde die schwache Formulierung (3.39) zugrunde gelegt. Als Ansatzräume kamen lineare Tetraederelemente mit Form- und Transformationsfunktionen aus Definition 3.15 sowie der Quadraturformel (3.89) zum Einsatz, für die Randelemente wurden analog lineare Dreieckselemente definiert. Anhand des im nächsten Abschnitt erläuterten Gitters sind homogene Dirichlet-Randbedingungen auf den den Kondylen entsprechenden Randelementen sowie an den Muskel- und Lastangriffsflächen Kraftdichten, die — über die entsprechenden Randelemente summiert — den im jeweiligen zu simulierenden Lastfall aufgebrachten Kräften entsprechen, vorgegeben worden. Die Lösung des Gleichungssystems erfolgte mit der in Abschnitt 5.3 vorgestellten Bibliothek SPOOLES, die auf die Lösung dünnbesetzter Matrixgleichungen spezialisiert ist.

5.2 Gittergenerierung

Um eine möglichst exakte Repräsentation der Geometrie des Unterkieferpräparats zu erreichen, wurde das Finite-Elemente-Gitter direkt aus einer Computertomographie-Aufnahme des Präparats generiert. Dies ist ein nicht-trivialer Vorgang, der bestenfalls halbautomatisch erfolgen kann. Auch ist die Qualität des erzeugten Gitters entscheidend für die Stabilität des Finite-Elemente-Verfahrens.

Unterstützung hierbei bietet das am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik in Berlin entwickelte 3D-Visualisierungspaket *amira*. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf der Darstellung von medizinischen Datensets; so können Volumendaten direkt angezeigt werden. Außerdem stellt die Software einen Editor für die interaktive Segmentierung von geschichteten Daten zur Verfügung und erzeugt Oberflächen- und Volumengitter. Mit Hilfe von Werkzeugen zur Qualitätsüberprüfung und Netzvereinfachung können die so generierten Gitter nachbearbeitet werden. Durch die Verwendung nur eines integrierten Softwarepakets kann der Datenverlust auf ein Minimum reduziert werden. Im folgenden soll das genaue Vorgehen erläutert werden.

Ausgangspunkt ist eine Computertomographie-Aufnahme des Präparats. Vom Kiefer werden dabei in Abständen von 2 mm Schichtbilder in der Transversalebene (d. h. parallel zum Corpus) angefertigt. Jedes Bild besteht aus Pixeln, denen von der lokalen Gewebe-

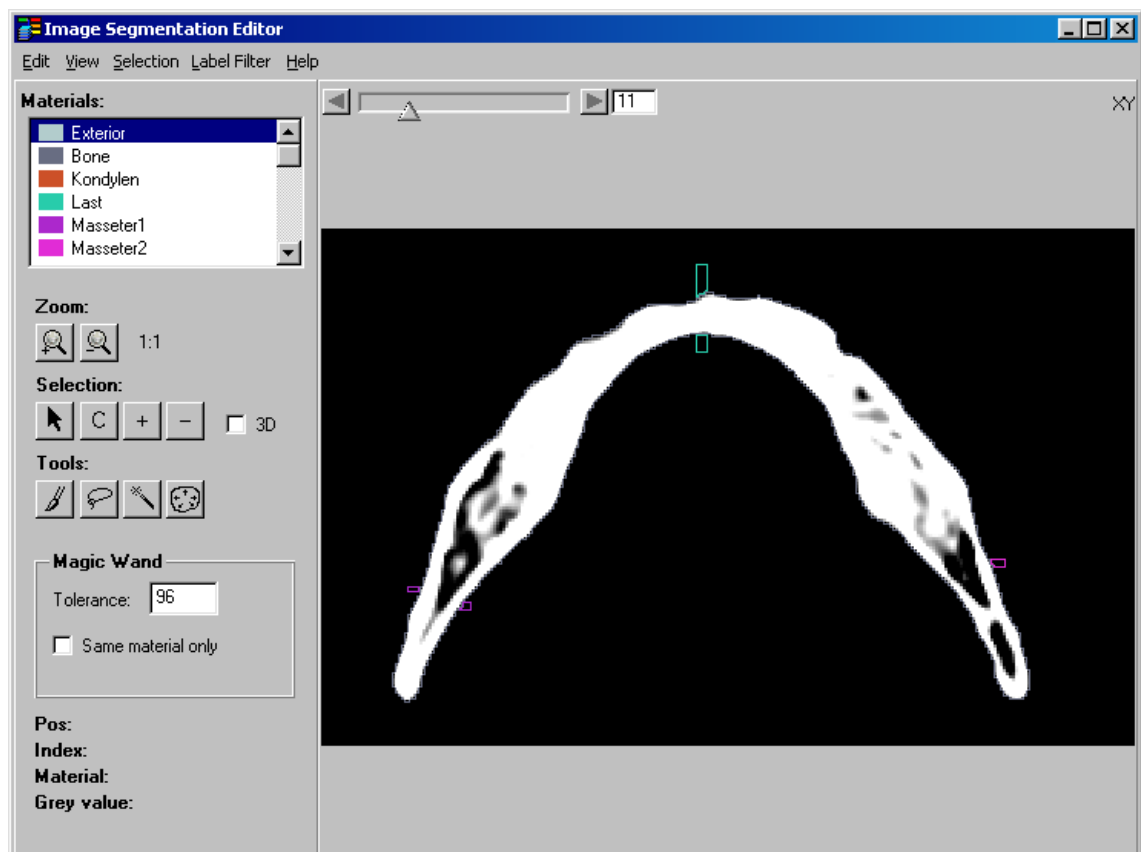


Abbildung 5.1: Segmentierung der Computertomographie-Aufnahme. In jeder Schicht wird das Knochenmaterial identifiziert. In Farbe sind die virtuellen Materialien für die Randbedingungen sichtbar.

dichte (in Form der relativen radiologischen Schwächung) abhängige Grauwerte zugeordnet sind. Aus den 48 Schichten mit je 512×512 Pixeln entsteht so ein Volumenbild mit einer Auflösung von $0.05 \times 0.05 \times 0.2 \text{ cm}^3$.

Im nächsten Schritt erfolgt die sogenannte *Segmentierung*. Dabei wird jedes Volumen-Pixel (oder *Voxel*) einem bestimmten Material zugeordnet. Mit voreingestellten Schwellenwerten für deren Graustufen kann amira eine automatische Vorauswahl treffen, die auch mit Subvoxelgenauigkeit geschehen kann; dabei ist die Zuordnung der Voxel zu bestimmten Materialien mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit behaftet, die auch später bei der Gittergenerierung als Gewichte ausgewertet werden. Diese Segmentierung muss dann von Hand nachbearbeitet werden. Aus der Bildbearbeitung bekannte Werkzeuge wie Pinsel, Grauwert-basierte Auswahl und Glättungsfilter stehen dabei zur Verfügung. Hier werden auch die Ränder definiert, auf denen im Finiten-Elemente-Modell die Randbedingungen gelten. Dazu werden im freien Raum virtuelle Materialien gezeichnet; die Kontaktfläche zwischen diesen und dem Knochen bildet den gewünschten Rand. Hier wurde besonders darauf geachtet, daß die Flächen genau mit den im Experiment auftretenden Auflageflächen übereinstimmen. Abbildung 5.1 zeigt die entsprechende Bearbeitung einer Schicht.

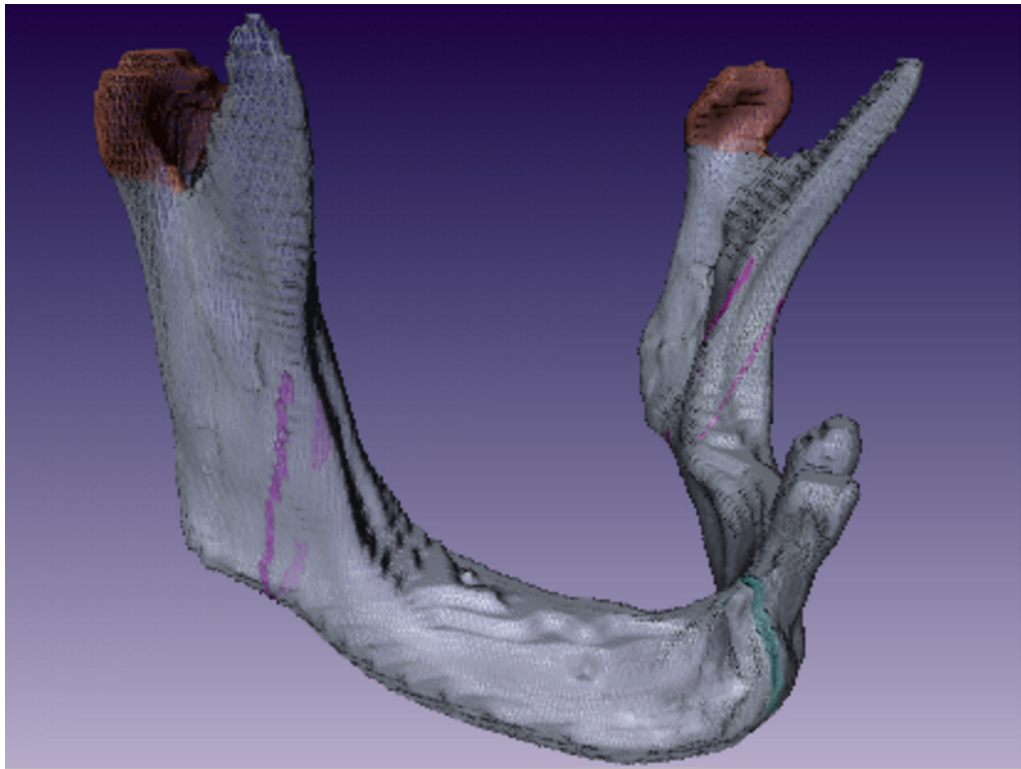
Als nächstes wird eine triangulierte Approximation der Grenzschichten zwischen diesen Materialien erzeugt. Ein abgewandeltes *Marching-Cube-Verfahren* garantiert dabei selbstüberschneidungsfreie Gitter, selbst bei Nicht-Mannigfaltigkeiten¹. Dabei werden die Wahrscheinlichkeiten aus der Segmentierung berücksichtigt, um ein glatteres Gitter zu erzeugen. Weitere Optionen erzwingen abgeschlossene Oberflächen (wichtig für die Erzeugung des Volumengitters) und erlauben die Vorgabe einer minimalen Kantenlänge, um die Qualität der Triangulierung zu erhöhen. Das resultierende Oberflächengitter (Abbildung 5.2a) wies 55564 Knoten und 111944 Dreiecke auf.

Diese Datenmenge kann auf aktuellen Rechnern der zur Verfügung stehenden Größenordnung noch nicht bewältigt werden. Deshalb muss das Dreiecksnetz zuerst vereinfacht werden, bevor es weiter verarbeitet werden kann. Nach einer Konvergenzanalyse von Hart ([HHTB⁺92]) sind für eine hinreichend genaue Approximation der Verschiebungen mindestens 30000 Freiheitsgrade nötig; bei linearen Tetraederelementen entspricht dies 10000 Knoten. Für die vorliegende Simulation wurde deshalb ein Gitter von 12000 Knoten angestrebt. Diese Dreiecksreduktion wird von amira durchgeführt. Mit Hilfe eines Kantenreduktionsverfahrens werden der Reihe nach Kanten des Ursprungsnetzes zu Punkten zusammengezogen. Koplanare Dreiecke werden dabei automatisch zusammengefasst. Durch die Minimierung eines passenden Fehlerkriteriums wird versucht, eine formerhaltende Vereinfachung zu erreichen, ohne daß neue Selbstüberschneidungen eingeführt werden. Über die maximale Kantenlänge kann die Güte des neuen Gitters gesteuert werden. Abbildung 5.2b zeigt das vereinfachte Netz mit 9723 Knoten und 20759 Dreiecken.

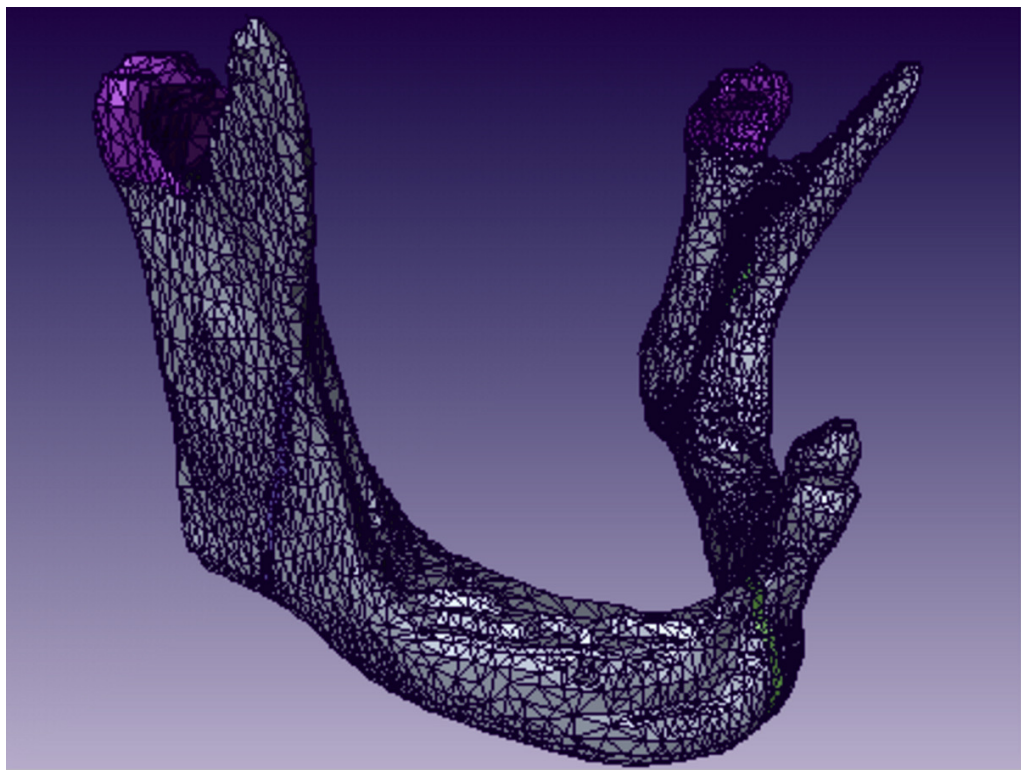
Um die Qualität des so erzeugten Gitters zu überprüfen, stellt amira Werkzeuge zur Verfügung, um Dreiecke zu identifizieren, die sich überschneiden, falsch orientiert sind oder verschiedene Gütekriterien wie Seitenverhältnis und Winkel zwischen benachbarten Dreiecken verletzen. Diese Dreiecke lassen sich, wenn sie nicht automatisch korrigiert werden können, durch manuelles Verschieben von Ecken und Kanten verbessern.

Da auch die im Inneren des Kiefers auftretenden Verzerrungen zur Berechnung der Verschiebungen von Bedeutung sind, muss aus diesem Dreiecksnetz ein Volumengitter erzeugt werden. Dazu verwendet amira eine *Advancing-Front-Methode*, um ausgehend von der Oberflächentriangulierung den Körper nach innen hin in Tetraeder zu zerlegen. Auch

¹Dieser Fall tritt auf, wenn das zu Grunde liegende Objekt Punkte hat, an denen sich drei oder mehr Regionen treffen.



(a) Drahtgitterdarstellung des Dreiecknetzes mit ca. 112000 Dreiecken.



(b) Oberflächendarstellung des vereinfachten Dreiecknetzes mit ca. 20000 Dreiecken.

Abbildung 5.2: Ursprüngliches und vereinfachtes Oberflächengitter. Farblich markiert sind die Randgebiete, an denen später Dirichlet- bzw. Neumann-Randbedingungen vorgegeben werden.

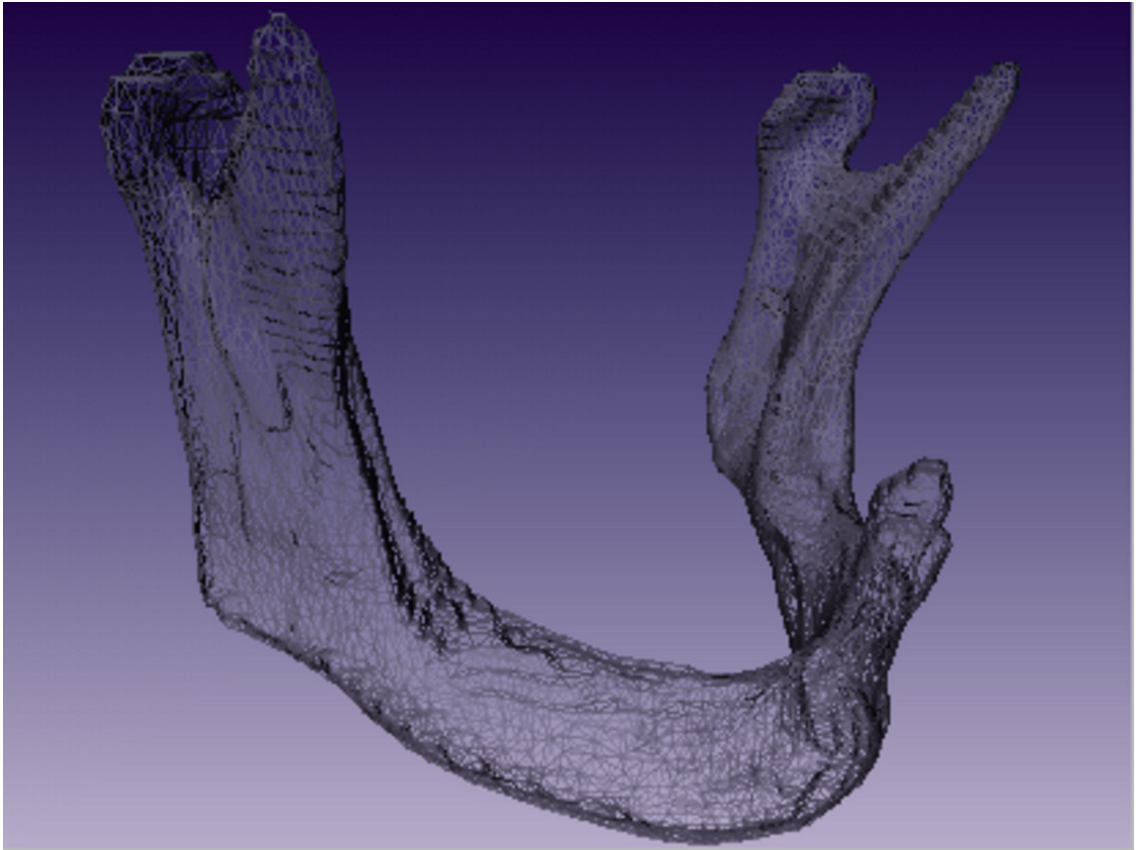


Abbildung 5.3: Drahtgitterdarstellung des Volumengitters aus ca. 10000 Tetraedern.

das so erzeugte Tetraedernetz kann auf seine Qualität hin überprüft werden. Es stehen dann verschiedene Methoden zur Optimierung zur Verfügung. Das so erzeugte Tetraedergitter (Abbildung 5.3) bestand aus 98597 Tetraedern und 12342 Knoten.

Schließlich wurden sowohl Oberflächengitter (für die Randgebiete) als auch Volumengitter (für die Knoten des Finite-Elemente-Netzes) in ein Standard-Austauschformat exportiert und in die von FeliCs erwartete Form gebracht. Nebenher wurden die Knotennummern bestimmt, die den vier markierten Punkten im Experiment entsprachen. Für die Berechnung der Kraftdichten wurden auch die Flächen der Randgebiete gemessen, die in der Simulation als Angriffsflächen dienen.

5.3 Lösung des linearen Gleichungssystems: Blockorientiertes Crout-Verfahren

Ausgehend von diesem Gitter erhält die Matrix A während des Aufstellens des linearen Gleichungssystems $Az = b$ eine spezielle, dünnbesetzte Struktur. Hat der Finite-Elemente-Raum N Freiheitsgrade, so hat die daraus resultierende Steifigkeitsmatrix N^2 Einträge. Wenn das Netz M Elemente mit je n Freiheitsgraden enthält, so setzt sie sich jedoch additiv aus M $n \times n$ -Matrizen zusammen. In unserem Fall mit 12 lokalen Freiheitsgraden sind so nur maximal 14197968 von 152324964 Elementen von Null verschieden. Das Profil der Matrix (d. h. die Verteilung der Null-Einträge außerhalb der Diagonalen) variiert dabei

stark mit der exakten Natur des Problems. Dadurch kann in der Regel keine Bandstruktur ausgenutzt werden.

Ein Verfahren zur Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$ besteht darin, eine *Faktorisierung* $A = LDU$ zu berechnen, wobei D eine Diagonalmatrix, L eine untere und U eine obere Triagonalmatrix ist. Durch einfache Vorwärts- bzw. Rückwärtssubstitution bestimmt man y aus $Ly = b$ und dann x aus $Rx = y$. Dabei sind L und R in der Regel dichter besetzt als A , sie werden *aufgefüllt*. Die Kunst besteht deshalb darin, eine Permutationsmatrix P zu finden, so daß die Faktoren von PAP^T möglichst dünn besetzt sind.

Aus diesem Grund wurde auf eine Bibliothek für die Lösung dünnbesetzter Gleichungssysteme zurückgegriffen. Die Wahl fiel auf *SPOOLES* (SParse Object-Oriented Linear Equation Solver, [AsGr99]), ein freies Softwarepaket, das verschiedene Verfahren zur Umformung von dünnbesetzten Matrizen, LU- und QR-Zerlegung inklusive Pivotsuche sowie Löser bietet. Es wurde objektorientiert in C geschrieben und für serielle, multithreaded und parallele (via MPI) Umgebungen unter Solaris, SGI, Cray T3-E und Intel/Linux portiert. Es findet auch als Löser in CSAR-Nastran Einsatz.

Zur Lösung des Systems $Ax = b$ wird wie folgt vorgegangen. Zuerst werden die Matrix A und der Vektor b über eine Brückenroutine an SPOOLES-Objekte übergeben; dabei wird A bereits als dünnbesetzte Matrix gespeichert. Daraufhin wird die optimale Anordnung von A bestimmt. Dafür stehen drei Verfahren bereit: Minimum Degree, Nested Dissection und Multisection. Für die beiden letzten Verfahren wird die Matrix, wie im Cuthill-McKee-Verfahren, als Graph aufgefaßt, jeder Freiheitsgrad entspricht dabei einem Knoten, die Kanten repräsentieren die Abhängigkeiten. Wenn, wie im vorliegenden Fall, die Matrix von einer Finite-Elemente-Diskretisierung durch lineare Tetraederelemente herrührt, so stimmen die Kanten des Matrixgraphen mit denen der Triangulierung überein. Durch eine rekursive Partitionierung wird ein Gebiets/Separator-Baum aufgebaut. Dieser wird dann geordnet, d. h. Knoten im Baum werden einem Schritt zugeordnet, in dem sie eliminiert werden. Für Nested Dissection wird ein Knoten in der Reihenfolge vor jeden anderen übergeordneten gesetzt, Multisection bringt alle Knoten der Gebiete im ersten Schritt, die aller Separatoren im zweiten. Innerhalb der Stufen können Knoten wieder nach Anzahl der Nachbarn sortiert werden. Als Ergebnis liefert die Routine ein Baumobjekt, das nicht nur die Permutation, sondern auch die Blockstrukturen der Faktormatrizen enthält. Diese erlauben es, unabhängige Berechnungen zu identifizieren, und werden für die Zerlegungs- und Substitutionsschritte benötigt.

Im nächsten Schritt werden die Matrix A und der Vektor b permutiert und die LU-Zerlegung ausgeführt. Dazu wird ein Block-orientiertes *Crout-Verfahren* für dünnbesetzte Matrizen eingesetzt. Dieses soll im folgenden kurz umrissen werden.

Ansatzpunkt ist die Betrachtung von A als Blockmatrix

$$A = \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \dots & A_{1,N} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \dots & A_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N,1} & A_{N,2} & \dots & A_{N,N} \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Ihre Faktorisierung $A = LDU$ wird in gleicher Weise aufgefaßt. Da A dünnbesetzt ist, werden die meisten Untermatrizen leer sein, die restlichen größtenteils ebenfalls dünnbesetzt. Gleiches gilt für die Faktormatrizen. Deshalb werden in jedem Schritt nur die von Null verschiedenen Einträge gespeichert und bei Berechnungen berücksichtigt. Wir

schreiben $U_{J,\partial J}$ für die Untermatrix, die die nicht-leeren Spalten von $U_{J,J+1:N}$ enthält; $L_{\partial J,J}$ enthält analog die von Null verschiedenen Zeilen von $L_{J+1:N,J}$.

Im Eliminationsschritt J werden nun der J -te Block von D , die J -te Zeile von U und die J -te Spalte von L aus bereits berechneten Blöcken, Zeilen und Spalten bestimmt. In Matrixform lautet der Schritt:

$$\begin{pmatrix} A_{J,J} & A_{J,\partial J} \\ A_{\partial J,J} & 0 \end{pmatrix} = \sum_{I \leq J} \begin{pmatrix} L_{J,I} D_{I,I} U_{I,J} & L_{J,I} D_{I,I} U_{I,\partial J} \\ L_{\partial J,I} D_{I,I} U_{I,J} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

Die Berechnung der $L_{\partial J,J}$, $L_{J,J}$, $D_{J,J}$, $U_{J,\partial J}$ und $U_{J,J}$ erfolgt in zwei Schritten: Zuerst wird die assemblierte Frontmatrix

$$T_J = \begin{pmatrix} T_{J,J} & T_{J,\partial J} \\ T_{\partial J,J} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{J,J} & A_{J,\partial J} \\ A_{\partial J,J} & 0 \end{pmatrix} - \sum_{I < J} \begin{pmatrix} L_{J,I} D_{I,I} U_{I,J} & L_{J,I} D_{I,I} U_{I,\partial J} \\ L_{\partial J,I} D_{I,I} U_{I,J} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

bestimmt. Unter Verwendung von T_J kann die Faktorisierung der Front durchgeführt werden und aus

$$T_{J,J} = L_{J,J} D_{J,J} U_{J,J}, \quad T_{J,\partial J} = L_{J,J} D_{J,J} U_{J,\partial J}, \quad T_{\partial J,J} = L_{\partial J,J} D_{J,J} U_{J,J}, \quad (5.4)$$

die Faktor-Untermatrizen bestimmt werden.

Zur Stabilisierung der Faktorisierung kann zusätzlich eine Pivotsuche eingebunden werden, um den Betrag der Einträge von L und U zu beschränken. Außerdem ist eine *dünnbesetzte* Faktorisierung möglich, bei der Einträge unter einer vorgegebenen Toleranz in L und U gleich Null gesetzt werden. Im vorliegenden Fall verzichten wir auf diese Approximation, setzten aber Pivotsuche ein.

Danach wird mit einer Blockzerlegung der Faktormatrizen die Vorwärts- und Rückwärtssubstitution durchgeführt und der Lösungsvektor durch Permutation in die korrekte Form gebracht. Dieser wird schließlich zurück an das aufrufende FeliCs übergeben, von wo es dem Benutzer als Lösung der Elastizitätsgleichung präsentiert wird. Diese ist, zusammen mit den experimentell gewonnenen Daten, auch Ausgangspunkt der Bestimmung der Materialparameter. Die Lösung des dadurch gestellten inversen Problems wird im nächsten Kapitel beschrieben.

Kapitel 6

Identifizierung der Materialparameter

Bewaffnet mit den experimentell gewonnenen Daten (Kapitel 4) und der Möglichkeit, zu vorgegebenen Materialdaten die auftretenden Verschiebungen zu berechnen (Kapitel 5), wenden wir uns jetzt der Identifizierung der elastischen Konstanten des betrachteten Präparats zu. Diese Aufgabe der Parameteridentifikation ist Teil einer Klasse von Problemen, die sich durch eine „rückwärts gerichtete“ Betrachtung auszeichnen und deshalb inverse Probleme genannt werden. Solche Probleme sind in der Regel schlecht gestellt im Hadamardschen Sinn und mit erheblichen numerischen Schwierigkeiten verbunden. Methoden zur Wiederherstellung der Stabilität sind Gegenstand von Abschnitt 6.1.

Es zeigt sich, daß die Fragestellung bei schlecht gestellten Problemen nicht mehr darin besteht, die exakte Lösung zu verrauschten Daten zu bestimmen, sondern eine Lösung zu finden, deren Bild diesen Daten möglichst nahe kommt. Diese Minimierungsaufgabe wurde mit dem Verfahren von Levenberg-Marquardt behandelt, dessen Implementation in Abschnitt 6.2 vorgestellt wird.

6.1 Regularisierung inverser Probleme

Der Begriff des inversen Problems ist weit gefaßt, und es existiert keine exakte (mathematische) Definition. Allgemein nennt man zwei Probleme invers zueinander, wenn die Formulierung eines Problems das andere enthält. Wenn ein physikalischer Hintergrund existiert, so fällt die Unterscheidung leicht: Man kann sagen, ein *inverses Problem* befaßt sich mit der Bestimmung der Ursachen einer beobachteten oder gewünschten Wirkung. Im Gegensatz dazu beschäftigt sich das *direkte Problem* damit, die Wirkung von vollständig beschriebenen Ursachen zu finden.

Ein Beispiel für ein inverses Problem ist die rückwärts gerichtete Wärmeleitung, die zu einer gegebenen Temperaturverteilung zur Zeit $t > 0$ die Anfangsverteilung in $t = 0$ sucht; diese Fragestellung tritt häufig in der Finanzmathematik bei der Berechnung von Derivaten auf. Im Rahmen der Wärmeleitung kommt auch die inverse Randwertaufgabe vor, dort soll von einer Messung im Inneren eines Gebiets auf die Temperatur am Rand geschlossen werden.

Weitere wichtige Anwendungen sind die Bildrekonstruktion aus verrauschten Signalen sowie die Computertomographie. Dort wird über die *inverse Radon-Transformation*

aus einem Röntgenabsorptionsprofil die Dichteverteilung im Inneren des Körpers bestimmt.

Hier befassen wir uns mit dem Themenkomplex der *Parameteridentifizierung*. Man ist oft in der Situation, ein mathematisches Modell eines Vorgangs zu haben, aber keine quantitativen Informationen über die darin vorkommenden physikalischen Parameter. Damit taucht die Fragestellung auf, aus Beobachtungen dieses Vorgangs auf die gesuchten Parameter zu schließen.

In diesem Zusammenhang betrachten wir das direkte Problem als Operatorgleichung

$$T(E, \nu) = u, \quad (6.1)$$

mit dem beschränkten, stetigen nichtlinearen Operator T zwischen den Hilberträumen \mathbb{R}^2 und $H^1(\Omega)$. Wir suchen also einen *Lösungsoperator*

$$T^{-1} : H^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad (6.2)$$

der zu den beobachteten Verschiebungen die Materialparameter angibt.

In den meisten Fällen erfüllt das direkte Problem durch die korrekte Vorgabe der Randbedingungen Hadamards Definition eines sachgemäß gestellten Problems:

- (i) Für alle zulässigen Daten existiert eine Lösung.
- (ii) Für alle zulässigen Daten ist die Lösung eindeutig.
- (iii) Die Lösung hängt stetig von den Daten ab.

Dies trifft jedoch in der Regel auf das zugehörige inverse Problem nicht zu, es ist *schlecht gestellt*.

Um (i) und (ii) zu begegnen, muß man die Fragestellung (6.1) so abändern, daß eine sinnvolle Antwort gegeben werden kann. Zum Einen schwächen wir die Forderung nach einer exakten Lösung ab und suchen nach einem $x^* \in \mathbb{R}^2$, das (6.1) näherungsweise löst. Eindeutigkeit läßt sich andererseits durch zusätzliche Annahmen an die Lösung erreichen. Speziell suchen wir nach einer besten Näherung im Sinne der kleinsten Quadrate. Dies führt zu dem Konzept einer *verallgemeinerten Inversen* von T ; ihre Stetigkeit wird für (iii) von Bedeutung sein. Eine ausführliche operatortheoretische Darstellung findet sich bei [EnHN96]. Hier sollen nur die wichtigsten Begriffe genannt werden.

Die beste Näherungslösung definieren wir als kleinste-Quadrate-Lösung mit einer minimalen Norm.

Definition 6.1 Sei $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ ein beschränkter Operator.

- (i) $x \in \mathcal{X}$ heißt kleinste-Quadrate-Lösung von $T(x) = u$, wenn gilt

$$\|T(x) - u\| = \inf\{\|T(z) - u\| \mid z \in \mathcal{X}\}. \quad (6.3)$$

- (ii) $x \in \mathcal{X}$ heißt (x^*) -beste Näherungslösung von $T(x) = u$, wenn x eine kleinste-Quadrate-Lösung von $T(x) = u$ ist und

$$\|x - x^*\| = \min\{\|z - x^*\| \mid T(z) = u\} \quad (6.4)$$

gilt. Dabei spielt x^* die Rolle eines Auswahlkriteriums für den Fall, daß mehrere kleinste-Quadrate-Lösungen existieren.

Für lineare Operatoren T definiert man als Lösungsoperator im Sinne der besten Näherung (für $x^* = 0$) die verallgemeinerte Inverse von T :

Definition 6.2 (Moore-Penrose-Inverse) Seien P und Q orthogonale Projektoren auf den Kern bzw. den Abschluß des Bildes des beschränkten Operators $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$. Die Moore-Penrose-Inverse T^\dagger von T ist definiert durch:

$$TT^\dagger T = T, \quad T^\dagger TT^\dagger = T^\dagger, \quad T^\dagger T = I - P, \quad TT^\dagger = Q|_{\mathcal{D}(T^\dagger)}. \quad (6.5)$$

Ist u im Definitionsbereich von T^\dagger , so kann die Moore-Penrose-Inverse explizit konstruiert werden; dafür benötigt man die Singulärwertentwicklung¹ des Operators T . In diesem Fall gibt die Moore-Penrose-Inverse die beste Näherungslösung von $Tx = u$:

Satz 6.1 Sei $u \in \mathcal{D}(T^\dagger)$. Dann hat $Tx = u$ die eindeutige beste Näherungslösung

$$x^\dagger := T^\dagger u. \quad (6.6)$$

Für nichtlineare Operatoren definiert man die verallgemeinerte Inverse über die Operatorerweiterung. Diese Minimierungsaufgabe führt zu erheblichen numerischen Problemen, wenn das schlecht gestellte Problem die Bedingung (iii) verletzt. Suchen wir die beste Näherungslösung $x^\dagger = T^\dagger(u)$ in dem Fall, daß nicht die exakte rechte Seite u bekannt ist, sondern nur eine Näherung u^δ mit

$$\|u^\delta - u\| \leq \delta, \quad (6.7)$$

dann ist $T^\dagger(u^\delta)$ sicher keine gute Näherung an $T^\dagger(u)$. Diese Vermutung trifft in unserem Fall sicher zu, da die Verschiebungsbestimmung, die unsere rechte Seite u produziert, fehlerbehaftet ist (siehe Abschnitt 4.1). Wir suchen also eine Näherungslösung x_α^δ , die auf der einen Seite stetig von u^δ abhängt (und damit eine stabile Berechnung ermöglicht), und andererseits mit $\delta \rightarrow 0$ und geeignet gewähltem α gegen x^\dagger geht. Dazu approximiert man den unstetigen Operator T^\dagger durch eine Familie stetiger Operatoren R_α . Als Näherung für x^\dagger nimmt man dann $x_\alpha^\delta := R_\alpha(u^\delta)$. Die R_α nennt man Regularisierung.

Definition 6.3 (Regularisierung) Sei $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ ein beschränkter Operator zwischen Hilberträumen, $\alpha_0 \in (0, +\infty]$. Für jedes $\alpha \in (0, \alpha_0)$ sei

$$R_\alpha : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{X} \quad (6.8)$$

ein stetiger Operator. Die Familie $\{R_\alpha\}$ heißt Regularisierung oder Regularisierungsoperator (für T^\dagger), wenn für alle $u \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ eine Parameterwahlregel $\alpha = \alpha(\delta, u^\delta)$ existiert, so daß

$$\limsup_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \|R_{\alpha(\delta, u^\delta)}(u^\delta) - T^\dagger(u)\| : u_\delta \in \mathcal{Y}, \|u^\delta - u\| \leq \delta \right\} = 0, \quad (6.9)$$

gilt. Dabei ist

$$\alpha : \mathbb{R}^+ \times \mathcal{Y} \rightarrow (0, \alpha_0) \quad (6.10)$$

dergestalt, daß

$$\limsup_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \alpha(\delta, u^\delta) : u_\delta \in \mathcal{Y}, \|u^\delta - u\| \leq \delta \right\} = 0 \quad (6.11)$$

ist. Für ein gegebenes $u \in \mathcal{D}(T^\dagger)$ heißt das Paar (R_α, α) ein konvergentes Regularisierungsverfahren, wenn (6.9) und (6.11) gelten.

¹Im endlichdimensionalen Fall entspricht dies der Singulärwertzerlegung einer Matrix; die Moore-Penrose-Inverse ist dann gerade die Pseudoinverse.

Die Regularisierung stellt also eine punktweise Approximation an die Moore-Penrose-Inverse dar.

Eine weitverbreitete Klasse von Regularisierungsverfahren ist die *Tikhonov-Regularisierung*, sie verbindet den Minimierungsansatz (6.4) mit einem Regularisierungsparameter in Form eines *Strafterms* α :

$$\left\|T(x) - u^\delta\right\|^2 + \alpha \|x - x^*\|^2 \rightarrow \min, \quad x \in \mathcal{D}(T). \quad (6.12)$$

Es läßt sich beweisen, daß dieses Verfahren stabil ist und gegen die beste Näherungslösung konvergiert, wenn diese eindeutig ist (siehe [EnHN96], Abschn. 10.2).

Ausgehend von einem iterativen Ansatz zur Lösung der Minimierungsaufgabe führt die Tikhonov-Regularisierung zu der Methode von Levenberg-Marquardt.

6.2 Numerische Behandlung: Die Methode von Levenberg-Marquardt

Das *Verfahren von Levenberg-Marquardt* zählt zu den so genannten *Trust-Region-Verfahren*. Man nimmt dabei an, daß die Minimierung $\|T(x^\delta) - u^\delta\|$ in einem Vertrauensbereich $\|x - x_k^\delta\| \leq \alpha_k$ linearisiert werden kann. Ausgehend von der Taylorentwicklung der Operatorgleichung $T(x) = u^\delta$ um eine Näherung x_k^δ erhält man aus der Lösung der linearisierten Gleichung

$$T'(x_k^\delta)(x_{k+1}^\delta - x_k^\delta) = u^\delta - T(x_k^\delta) \quad (6.13)$$

eine verbesserte Näherung x_{k+1}^δ . Daraus resultiert ein iteratives Verfahren zur Bestimmung des Minimums von $T(x) - u^\delta$.

6.2.1 Tikhonov-Regularisierung mit dem Levenberg-Marquardt-Verfahren

Wendet man den selben Ansatz auf das nichtlineare Tikhonov-Funktional (6.12) mit $x^* = x_k^\delta$ an, so erhält man das quadratische Funktional

$$\left\|u^\delta - T(x_k^\delta) - T'(x_k^\delta)(z - x_k^\delta)\right\|^2 + \alpha \left\|z - x_k^\delta\right\|^2, \quad (6.14)$$

das für $z = x_{k+1}^\delta$ minimiert werden muß.

Daraus folgt die Iterationsvorschrift

$$x_{k+1}^\delta = x_k^\delta + ((T'(x_k^\delta))^T (T'(x_k^\delta)) + \alpha_k \mathbf{I})^{-1} (T'(x_k^\delta))^T (u^\delta - T(x_k^\delta)). \quad (6.15)$$

Offensichtlich ist es von großer Bedeutung für die Konvergenz, den Regularisierungsparameter α_k geeignet zu wählen. Eine mögliche Parameterwahlregel ist motiviert durch die Überlegung, daß der Schritt (6.15) eine Abstiegsrichtung für die Residuumsnorm $\|u^\delta - T(x_k^\delta)\|$ darstellt. Wir wollen also die Schrittweite reduzieren, solange wir „auf dem richtigen Weg“ sind. In der Praxis heißt das, wir wählen

$$\begin{aligned} \alpha_{k+1} &= \frac{\alpha_k}{2} && \text{falls } \left\|u^\delta - T(x_{k+1}^\delta)\right\| < \left\|u^\delta - T(x_k^\delta)\right\|, \\ \alpha_{k+1} &= 2\alpha_k && \text{falls } \left\|u^\delta - T(x_{k+1}^\delta)\right\| \geq \left\|u^\delta - T(x_k^\delta)\right\|. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Als Wahl für den Startwert bietet sich $\alpha_0 = \frac{1}{2}$ an.

Da wir die exakte Lösung u nicht kennen, muß das Verfahren nach einer gewählten Iterationszahl $k(\delta)$ abgebrochen werden. Diese stellt einen weiteren Regularisierungsparameter für eine (indirekte) Regularisierung von (6.12) dar.

Eine Variante, die auf Bakushinskii zurückgeht, behält den Startwert x_0^δ im Strafterm fest. Die Iterationsvorschrift lautet dann:

$$x_{k+1}^\delta = x_k^\delta + ((T'(x_k^\delta))^T (T'(x_k^\delta)) + \alpha_k \mathbf{I})^{-1} \left[(T'(x_k^\delta))^T (u^\delta - T(x_k^\delta)) + \alpha_k (x_0^\delta - x_k^\delta) \right]. \quad (6.17)$$

Für diese Methode können regularisierende Eigenschaften und Konvergenz nachgewiesen werden (siehe [EnHN96], S. 286–287, sowie dort zitierte Literatur).

6.2.2 Numerische Realisierung

In der Implementierung der Parameteridentifikation entspricht die Lösung u^δ den experimentell bestimmten Daten, nämlich den Beträgen der Verschiebungen an den vier markierten Punkten jeweils für alle fünf im Experiment realisierten Lastfälle. Wir diskretisieren also die Operatorgleichung (6.1). Dementsprechend nehmen wir für $T_h(x^\delta)$ die mehrfache Auswertung der in Kapitel 5 beschriebenen Finite-Elemente-Simulation zu den festgehaltenen Randbedingungen und den (variablen) Materialparametern $x^\delta = (E, \nu)$, für alle fünf Kraftbeträge und beschränkt auf diese vier Punkte. Wir erhalten dann die Operatorgleichung

$$T_h(x^\delta) = u_h^\delta \quad (6.18)$$

für den Operator $T_h : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^{20}$.

Dessen Ableitung

$$T'_h(E, \nu) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial E} & \frac{\partial u_1}{\partial \nu} \\ \frac{\partial u_2}{\partial E} & \frac{\partial u_2}{\partial \nu} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial u_{20}}{\partial E} & \frac{\partial u_{20}}{\partial \nu} \end{pmatrix} \quad (6.19)$$

ist gerade die Jacobimatrix von T_h .

Diese muß für den Iterationsschritt $x_k^\delta \rightarrow x_{k+1}^\delta$ berechnet werden. Eine weitere indirekte Regularisierung ist dabei die Approximation der partiellen Ableitungen im Schritt k durch finite Differenzen:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \approx \frac{(T_h(x_k))_i - (T_h(x_{k-1}))_i}{x_{j,k} - x_{j,k-1}}. \quad (6.20)$$

Die Implementation des Levenberg-Marquardt-Verfahrens erfolgte in Matlab, da neben der Operatorauswertung nur die Invertierung einer 2×2 -Matrix nötig war. Die Komplexität dieser Berechnung ist vernachlässigbar gegenüber des mehrfachen Durchlaufens einer Finite-Elemente-Simulation; deshalb war kein nennenswerter Performancegewinn durch eine komplette Realisierung in C++ zu erwarten. Dem stand ein erheblicher Komfortgewinn bei der Anbindung der Finite-Elemente-Umgebung gegenüber. Diese wurde in einer Matlab-Routine gekapselt, die die aktuellen Werte der Parameter x_k und den gewünschten Betrag der Lasten als eine ASCII-Datei auf die Festplatte schrieb. Von dort wurden sie in den Quelltext der FeliCs-Simulation eingebunden, die als nächstes über ein Shell-Kommando gestartet wurde. Nach Abschluß der Berechnung gab FeliCs die Ergebnisse wieder in eine ASCII-Datei aus. Ein ebenfalls über Shell-Kommando aufgerufenes Skript

extrahierte die Verschiebungen an den zuvor bestimmten Knoten, berechnete die Norm der Verschiebungsvektoren für jeden Punkt und schrieb sie in eine neue Datei, die von Matlab eingelesen wurde. Dies wurde für jeden Lastfall wiederholt. Schließlich wurden diese Daten gesammelt und in Form des Vektors $T_h(x_k^\delta)$ an die aufrufende Minimierungsroutine übergeben.

Die Entscheidung, die Norm der Verschiebungsvektoren zu betrachten, anstatt die Vektoren komponentenweise mit der Simulation zu vergleichen, fiel dabei aufgrund der unterschiedlichen Koordinatensysteme, die in Experiment und Simulation verwendet wurden. Durch die geometrische Situation war es nicht möglich, das von der Lage des Unterkiefers während der Computertomographie bestimmte Koordinatensystem durch das Referenzgitter nachzubilden. Die Bestimmung der Lage von mehreren Punkten, deren Koordinaten die Erfassungssoftware errechnet hatte, im Koordinatensystem der Schichtbilder und die Berechnung der dadurch festgelegten Transformationsmatrix hätte weitere Ungenauigkeiten bedeutet. Deshalb wurde, auch im Hinblick auf die isotrope Modellierung, auf die Berücksichtigung der Verschiebungsrichtungen verzichtet. Es wurde natürlich darauf geachtet, daß die aus Experiment und Simulation stammenden Daten korrekt skaliert waren, indem ihnen die selbe Längenskala zugrunde gelegt wurde.

Das Levenberg-Marquardt-Verfahren wurde in naheliegender Weise als Schleife implementiert. Ausgehend von dem anhand der Literatur gewählten Startwert $x_0 = (1.5 \cdot 10^6, 0.33)$ (N/cm² bzw. dimensionslos) wurden die Operatoren mit der beschriebenen Routine ausgewertet sowie die Jacobimatrix aufgestellt. Dann wurde x_{k+1} nach Vorschrift (6.17) gebildet. Nach Prüfen des Kriteriums (6.16) wurde α_k entsprechend angepaßt und die Schleife fortgesetzt. Als Abbruchkriterium wurde $\|T(x_{k+1}^\delta) - T(x_k^\delta)\| \leq \varepsilon$ gewählt, mit einer vorgegebenen Schwelle $\varepsilon = 10^{-6}$, oder die Überschreitung der maximalen Iterationszahl $k_{\max} = 100$.

Als äußerst problematisch erwies sich dabei, daß für die Berechnung von x_{k+1}^δ (zumindest formal) die Inverse der Matrix $((T'(x_k^\delta))^T (T'(x_k^\delta)) + \alpha_k \mathbf{I})$ bestimmt werden muß.

Aufgrund der unterschiedlichen Sensitivität von T_h hinsichtlich der beiden Parameter hatte die Jacobimatrix eine Kondition in der Größenordnung von 10^{23} . Selbst nach Skalierung der Parameter, um den Unterschied von 7 Größenordnungen auszugleichen, betrug sie noch rund 10^{17} . In der Folge war eine Konvergenz des Verfahrens nicht zu erreichen, da die Invertierung in einer entsprechenden Instabilität resultierte. Die Formulierung von (6.17) als lineares Gleichungssystem brachte keine Verbesserung. Um dieses schlecht konditionierte Problem zu regularisieren, wurde auf die Pseudoinverse zurückgegriffen. Diese Form der Moore-Penrose-Inversen für Matrizen liefert analog zu der Situation in Abschnitt 6.1 diejenige Lösung im Sinne der kleinsten Quadrate, die die kleinste Norm aufweist. Dabei entspricht die gewählte Toleranzschwelle, unterhalb derer Singulärwerte als Null aufgefaßt werden, dem Regularisierungsparameter α . Dies führte in der Tat zu einer verbesserten Stabilität der Iteration, konnte ihre Konvergenz dennoch nicht herbeiführen.

Betrachtet man die in der Literatur gesammelten Materialdaten von Knochen, insbesondere des Unterkiefers, so fällt der relativ geringe Schwankungsbereich der Poissonzahl ν im Vergleich zum Elastizitätsmodul E auf. Daher bietet es sich als Möglichkeit an, das Problem zu reduzieren, indem man bei festgehaltenem ν die beste Näherungslösung für E bestimmt. In diesem Falle wird $\tilde{T}_h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{20}$ zu einem linearen Operator, für den die Theorie deutlich weitreichendere Stabilitätsaussagen liefert. Tatsächlich führte dieses Vorgehen zur Konvergenz des Verfahrens, und es zeigt sich, daß der so bestimmte Elastizitätsmodul nur in sehr geringer Weise von der Wahl der Poissonzahl abhängt. Diese Ergebnisse werden im nächsten Kapitel erläutert.

Kapitel 7

Resultate

Ausgehend von dem vereinfachten Problem aus Abschnitt 6.2.2 konnten Aussagen über die gesuchten Materialparameter gewonnen werden. Diese sollen im folgenden dargestellt werden. Als erstes Resultat aus den Experimenten kann die dem Modell zugrundeliegende Annahme der Linearität gerechtfertigt werden. Die Ergebnisse der Parameteridentifikation werden in Abschnitt 7.2 präsentiert. Dabei sollen auch die Auswirkungen der festgehaltenen Poissonzahl auf die Bestimmung des Elastizitätsmoduls erläutert werden. Schließlich wird der für die Validierung notwendige Vergleich der Ergebnisse des Experiments mit der auf den so ermittelten Materialwerten basierenden Simulation durchgeführt.

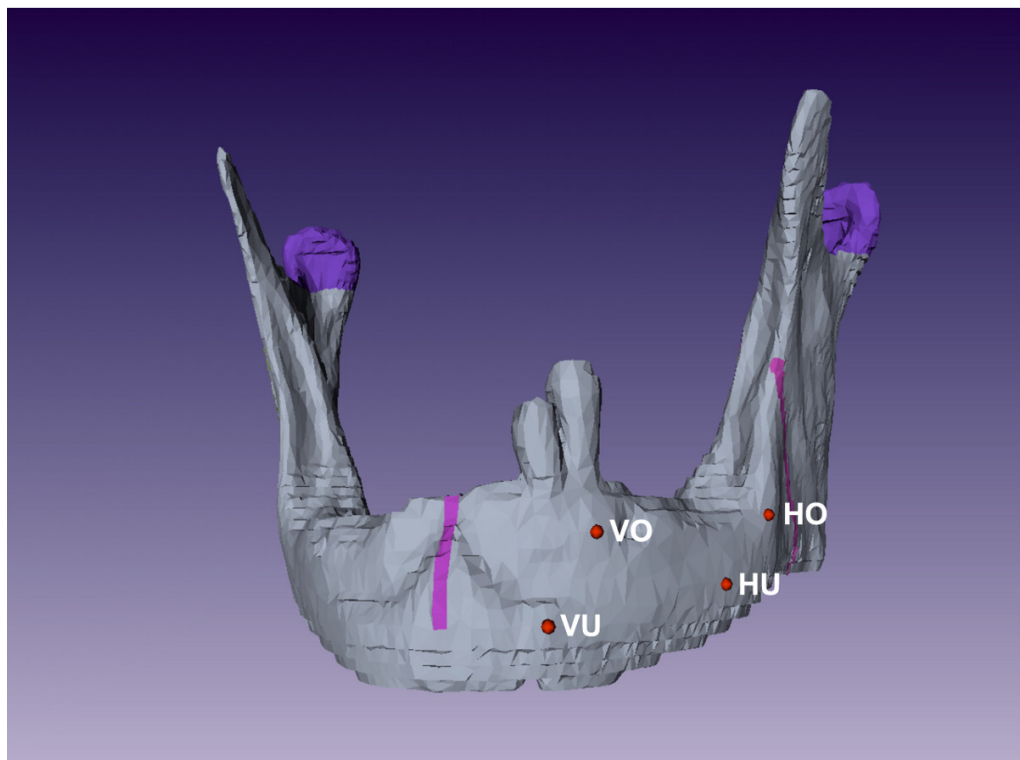


Abbildung 7.1: Modell des Präparats. Markiert sind die in Experiment und Simulation verfolgten Punkte (VO, VU, HO, HU).

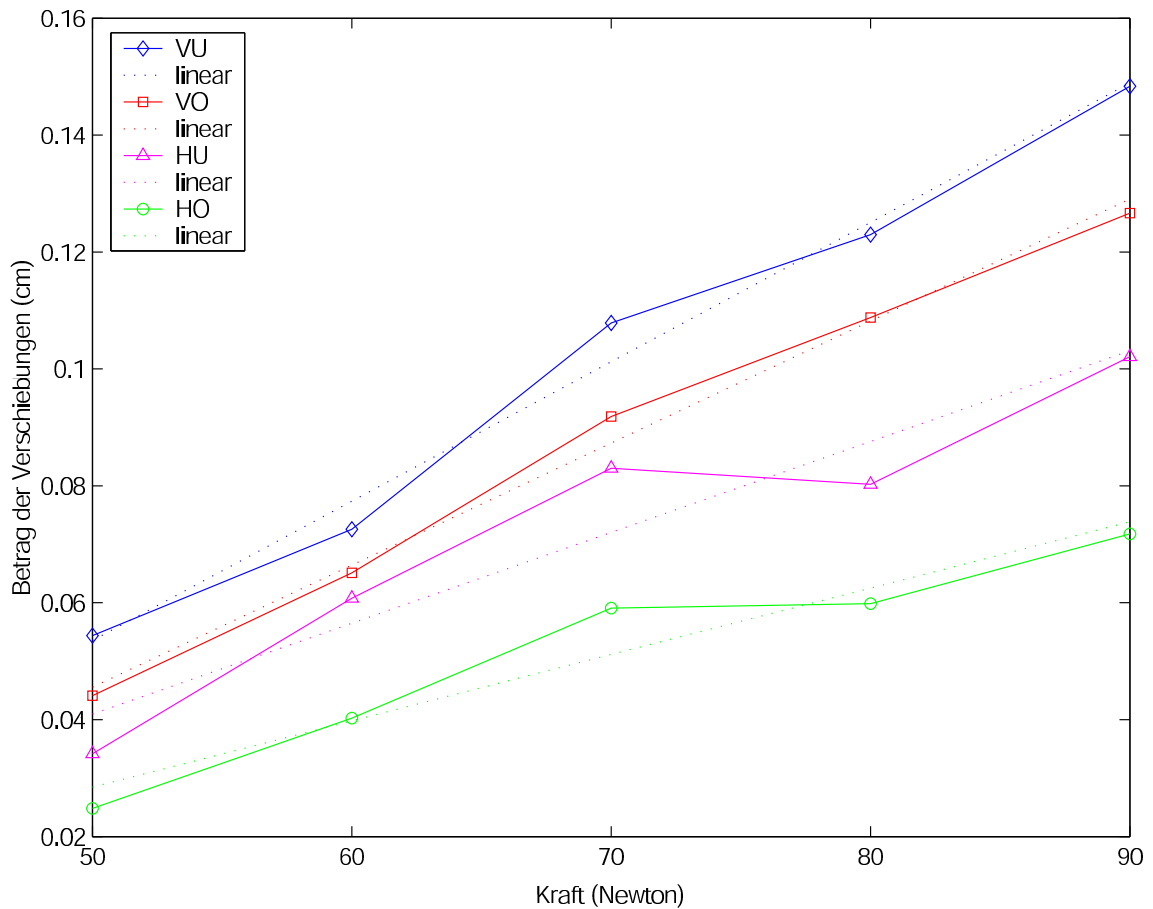


Abbildung 7.2: Kraft-Deformationskurven (durchgezogene Linien) für die vier im Experiment betrachteten Punkte (siehe Abb. 7.1) sowie die zugehörigen Regressionsgeraden (gestrichelt).

7.1 Linearität der Kraft-Deformationskurve

In Kapitel 2 sind wir davon ausgegangen, daß für kleine Verschiebungsgradienten, und insbesondere für geringe Verschiebungen, die auftretenden Deformationen in linearer Weise von der aufgebrachten Kraft abhängen. Diese Vorgabe führte zu einem Modell, das eine ausschließlich lineare Abhängigkeit der Verschiebungen von den Flächen- und Volumenkräften beschreibt. Damit die aus dem Vergleich von Experiment und Simulation gezogenen Schlüsse überhaupt eine Aussagekraft haben, die den Versuch der Parameteridentifikation erlaubt, muß zuerst überprüft werden, wie gut diese Annahme in dem betrachteten Kraftbereich zutrifft.

Dafür wurden die im Experiment gemessenen Beträge der Verschiebungsvektoren an den vier in Abbildung 7.1 gezeigten Punkten gegen die angelegte Last aufgetragen. Abbildung 7.2 zeigt die so entstandenen Kraft-Deformationskurven. Zur Beurteilung der Linearität ist zu der Meßreihe jedes Punktes eine Ausgleichsgerade eingezeichnet. Die sich aus dieser Regression ergebenden Residuumsnormen als Maß der Linearität zeigt Tabelle 7.1.

Obwohl die hinteren Punkte einen deutlichen Ausreißer bei dem Lastfall von 80 Newton zeigen, kann die Linearität zumindest in erster Näherung als gegeben angesehen werden.

| Punkt | Residuumsnorm |
|-------|---------------|
| VU | 0,0085417 |
| VO | 0,0055435 |
| HU | 0,0154730 |
| HO | 0,0093738 |

Tabelle 7.1: Residuumsnormen der linearen Regressionsgeraden an die Kraft-Deformationskurven aus Abbildung 7.2.

| ν | E | χ^2 |
|-------|-------------------|----------|
| 0,30 | $3,41 \cdot 10^5$ | 0,003 |
| 0,33 | $3,39 \cdot 10^5$ | 0,003 |
| 0,35 | $3,37 \cdot 10^5$ | 0,003 |

Tabelle 7.2: Berechnete Elastizitätsmoduln E (in N/cm²) zu vorgegebenen Poissonzahlen ν sowie die Norm des zuletzt berechneten Residuums $\chi^2 = \|u^\delta - T(x)^\delta\|$.

7.2 Materialdaten

Damit kann die auf dem linearen Modell aufbauende Simulation als Grundlage für die Parameteridentifikation im betrachteten Kraftbereich dienen. Die Rechnungen wurden auf einem Linux-PC (AMD Athlon, 1 GHz) mit 256 MB Arbeitsspeicher durchgeführt. Ein Simulationsdurchlauf benötigte dabei etwa 10 Sekunden, das gesamte Levenberg-Marquardt-Verfahren im Schnitt etwa 15 Minuten. Ein Versuch, auf einem verfeinerten Gitter mit doppelter Knotenanzahl zu rechnen, brachte keine nennenswerte Verbesserung der Genauigkeit; zwar blieb die Laufzeit auf dem feineren Netz mit mehreren Minuten akzeptabel, jedoch stieg der Speicherbedarf rasch an. Da bei etwa 30000 Knoten für die Berechnung schon auf den virtuellen Speicher ausgewichen werden mußte, beschränkte man sich auf das bereits beschriebene Netz.

Wie in Abschnitt 6.2.2 dargelegt, wurden für verschiedene festgehaltene Poissonzahlen mit der Methode von Levenberg-Marquardt die best-approximierenden Elastizitätsmoduln bestimmt. Dabei traten über den betrachteten Bereich Abweichungen von etwa 1% des Durchschnitts auf. Die Norm des Residuums $u^\delta - T(x)^\delta$ betrug dabei jedesmal 0,003. Tabelle 7.2 gibt die Elastizitätsmoduln zu einigen vorgegebenen Poissonzahlen an.

7.3 Vergleich von Experiment und Simulation

Um die so berechneten Materialparameter zu verifizieren, wurde schließlich eine Simulation mit diesen Werten durchgeführt. Die Ergebnisse wurden, wieder anhand der markierten Punkte, mit dem Experiment verglichen. Dabei ergab sich, daß die für die Parametersätze aus Tabelle 7.2 resultierenden Verschiebungen sich um weniger als 0,1% unterschieden. Abbildung 7.3 stellt die Kraft-Deformationskurven aus Experiment und Simulation für $E = 3,41 \cdot 10^5$ N/cm² und $\nu = 0,3$ gegenüber.

Zuletzt wurden die Simulationsergebnisse mit amira visualisiert. Abbildung 7.4 zeigt farbkodiert den Betrag der Verschiebungsvektoren für den Lastfall mit 80 Newton, interpoliert über die Oberflächendreiecke des Gitters.

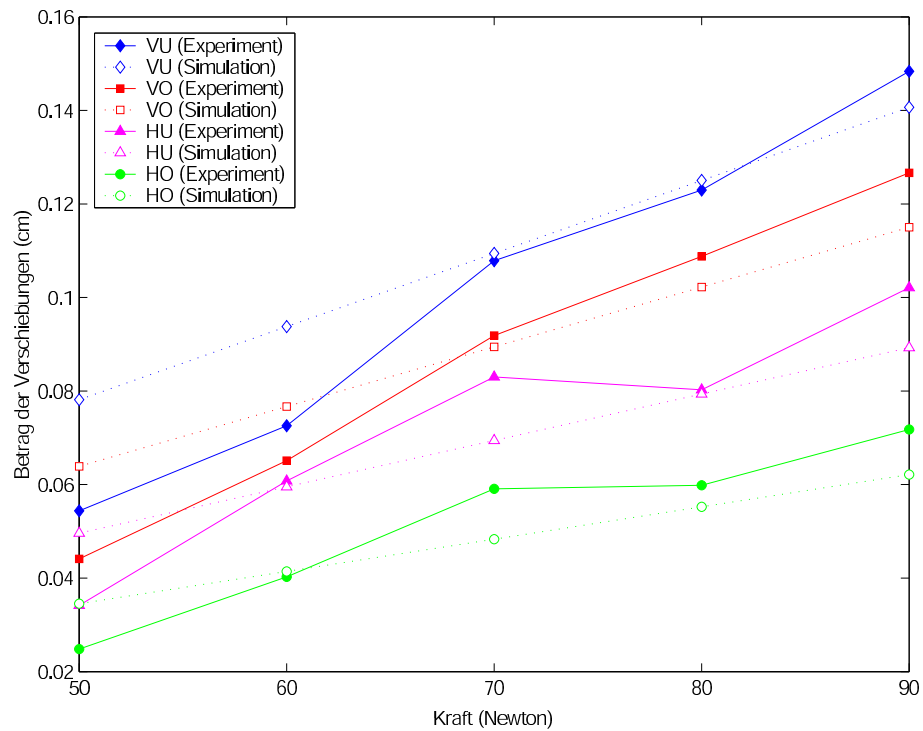


Abbildung 7.3: Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentell gewonnenen Daten. Gezeigt sind die Beträge der Verschiebungsvektoren für die in Abbildung 7.1 markierten Punkte, jeweils aus Experiment (durchgezogen) und Simulation (gestrichelt, $E = 3,41 \cdot 10^5 \text{ N/cm}^2$ und $\nu = 0,3$).

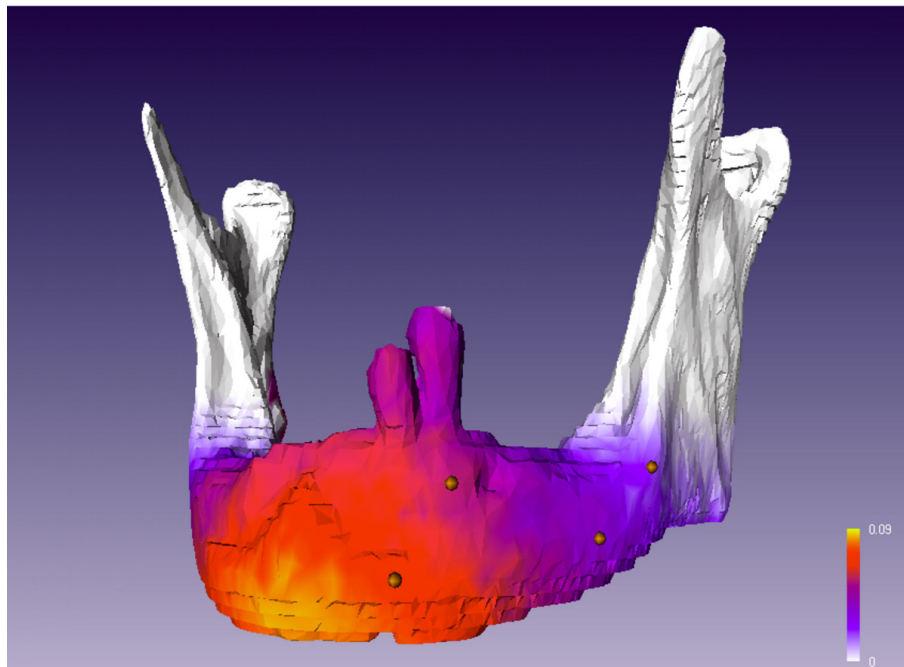


Abbildung 7.4: Visualisierung der Simulationsergebnisse zu den Materialparametern $E = 3,41 \cdot 10^5 \text{ N/cm}^2$ und $\nu = 0,3$ am Beispiel des Lastfalls 80 Newton. Aufgetragen sind wieder die Beträge der Verschiebungsvektoren.

Kapitel 8

Diskussion

Die Fragestellung der vorliegenden Arbeit war die Bestimmung der elastischen Eigenschaften eines menschlichen Unterkiefers. Dazu wurde ein vereinfachtes mathematisches Modell aufgestellt und die mit der Methode der Finiten Elemente berechnete Lösung mit den Ergebnissen biomechanischer Experimente verglichen. Die Materialdaten wurden dann durch eine nichtlineare Ausgleichsrechnung bestimmt.

Natürlich ist mit einer einzelnen Meßreihe die Aussagekraft dieser Ergebnisse eingeschränkt. Um die systematischen Fehler zu identifizieren und quantitative Aussagen über die tatsächliche Meßgenauigkeit zu machen, sind wiederholte Versuche nötig. Da aufgrund der stark begrenzten Verfügbarkeit des Humanpräparats und der Aufwendigkeit des Versuchsaufbaus weitere Experimente nicht möglich waren, sind statistische Daten zu den Ergebnissen nicht verfügbar. Deshalb müssen für eine Bewertung der Meßdaten einige Betrachtungen der möglichen Fehlerquellen ausreichen.

Die naheliegendste Quelle für Meßungenauigkeiten sind die für die Bewegungserfassung verwendeten Digitalkameras. Da ihre Auflösung mit 1600×1200 Punkten gegenüber der — den Herstellerangaben zugrunde liegenden — Auflösung von 720×576 Punkten eine über der Spezifikation liegende Genauigkeit erlaubt, kann man davon ausgehen, daß die dadurch verursachten Meßfehler im Mikrometerbereich gegenüber einer Verschiebung von $0,2 - 2$ mm vernachlässigbar sind. Einen größeren Einfluß hat die Tatsache, daß durch die Auflösung bedingt ein Meßpunkt mehrere Pixel umfaßt. Für einen exakten Vergleich sollte jedoch auf den Aufnahmen jedes Lastfalls derselbe Punkt betrachtet werden. Dies kann wegen der manuellen Identifikation dieser Punkte während der Auswertung nicht garantiert werden. Geht man im Mittel von einem Durchmesser von $0,5$ mm der Markierungen aus, so kann man mit einer Abweichung von bis zu $0,25$ mm rechnen. Besonders kritisch ist diese Identifikation auf den verschiedenen Bildern des gleichen Lastfalls. Für eine korrekte Berechnung der dreidimensionalen Koordinaten aus den zweidimensionalen Aufnahmen ist es sehr wichtig, daß aus jedem Blickwinkel exakt derselbe Punkt auf der Oberfläche des Präparats markiert wird. Dieser Vorgang nahm tatsächlich auch den größten Teil der Zeit in Anspruch, die für die Experimente aufgewendet werden mußte. Ähnlicher Aufwand war für die Kalibrierung des Referenzgitters nötig.

Erschwerend kommt hinzu, daß diese Berechnung (vermittels eines in der Dokumentation nicht näher beschriebenen Algorithmus) die bisher genannten Meßfehler auf unbekannte und vermutlich äußerst nichtlineare Weise auf die Unsicherheit der berechneten Koordinaten abbildet. Dieser Umstand liefert auch eine mögliche Erklärung für den beobachteten Knick in der Meßkurve (Abb. 7.2) bei 80 Newton. Ein solcher Verlauf wäre erst nach Erreichen der elastischen Grenze zu erwarten, wenn die aufgewendete Verformungsenergie für

plastische Deformationen verbraucht wird. Da der Kiefer nach Entfernen der Lasten keine Hysterese zeigte und wieder in die Ursprungsconfiguration zurückkehrte, ist dies allerdings auszuschließen; ein Meßfehler liegt also nahe.

Ein weiterer Unsicherheitsfaktor tritt bei Krafteinleitung auf. Dadurch, daß die Ansteuerung der Hydraulikzylinder durch eine Regelung erfolgt, ist die Bestimmung der aufgebrachten Kraft durch die Genauigkeit der Sensoren beschränkt, die den Ist-Wert an den Steuerrechner übermitteln. Diese sind auf Kilonewton geeicht, messen also in dem betrachteten Bereich nur auf 10% genau.

Eine Kumulierung der Meßfehler konnte hingegen vermieden werden, indem nach jeder Belastung die Hydraulikzylinder auf Nullast gestellt wurden und das Präparat manuell entlastet wurde. Auch die Berechnung der Verschiebungsvektoren erfolgte für jeden Lastfall unabhängig.

Unter Berücksichtigung dieser Unsicherheit zeigen die Meßreihen eine verhältnismäßig geringe Abweichung von den Ausgleichsgeraden. Dadurch ist der Vergleich der experimentell gewonnenen Daten mit dem Modell der linearen Elastizität zulässig.

Bei der Bestimmung des Elastizitätsmoduls zeigt sich, daß die berechneten Daten recht gut mit den im Experiment gemessenen übereinstimmen. Zwar wird die Steifigkeit etwas unterschätzt (die Steigung der Kraft-Deformationskurven deutet eher auf ein Elastizitätsmodul von $4 \cdot 10^5 \text{ N/cm}^2$ hin, an einem Punkt sogar bis zu $8 \cdot 10^5 \text{ N/cm}^2$). Im Hinblick auf die Unsicherheit, mit der die Meßdaten behaftet sind, weist auch die Residuumsnorm von 0,003 auf eine akzeptable Übereinstimmung hin.

Vergleicht man den so bestimmten Elastizitätsmodul von $3,4 \cdot 10^5 \text{ N/cm}^2$ mit den Werten aus der Literatur (vgl. Tabellen 2.2, 2.3), so kann man (unter Berücksichtigung der Homogenisierung von kortikalem und spongiösem Knochenmaterial) erkennen, daß die Näherungslösung innerhalb des Bereichs liegt, der von den Literaturdaten abgedeckt wird. Allerdings ist der berechnete Wert im Vergleich äußerst niedrig. Dies ließe sich aber mit der geringen Knochenqualität des Präparats erklären, etwaige Mikrofrakturen senken die Steifigkeit erheblich. Hinzu kommt die bereits erwähnte Osteoporose des Knochens.

Zur Validierung des Modells wurden die Simulationsergebnisse visualisiert. Dabei zeigte sich eine gute qualitative Übereinstimmung mit dem aus der klinischen Erfahrung zu erwartenden Verhalten. Insbesondere tritt die größte Deformation am Kinnbereich auf, direkt unter der aufgebrachten Bißlast. Der Ramus weist hingegen kaum eine Verformung auf. Die symmetrische Last führt zu einer beinahe symmetrischen Verschiebungsverteilung. Eine leichte Asymmetrie ist bedingt durch die Geometrie des Kiefers, vor allem durch das Vorhandensein der restlichen Zähne.

Insgesamt ist die vorgestellte Methode ein gangbarer Weg zur Identifizierung der Materialparameter. Von besonderem Vorteil ist dabei die Tatsache, daß im Gegensatz zu synthetischen Tests eine Konzentration auf funktional relevante Materialdaten vorliegt. Dadurch, daß die betrachteten Experimente den physiologischen Kauvorgängen entsprechen, werden vor allem diejenigen Daten bestimmt, die bei den auftretenden Belastungen des Unterkiefers tatsächlich eine Rolle spielen.

Insbesondere hat sich das in Abschnitt 5.2 geschilderte Vorgehen zur Gittererzeugung bewährt; man vermeidet viel von der in früheren Arbeiten ([KoRH92], [HHTB+92]) auftauchenden Ungenauigkeit, die von der manuellen Generierung des Netzes stammt. Vor allem ist durch den nicht mehr schichtorientierten Aufbau der Diskretisierung ein Gitter möglich, das die gekrümmten Ränder des Präparats deutlich exakter abbildet. Man kann also die Geometrie des betrachteten Gebietes als hinreichend genau approximiert ansehen;

die beobachteten Abweichungen der Ergebnisse der Simulation von den experimentell bestimmten Daten sind eher auf die Modellierung des elastischen Verhaltens zurückzuführen.

Zu den Schwächen des Modells gehören sicherlich die erheblich vereinfachten Materialannahmen. Insbesondere eine getrennte Behandlung von kortikalem und spongiösem Knochen könnte das unterschiedliche elastische Verhalten an den verschiedenen Meßpunkten besser erklären. Eine Schwierigkeit ist dabei die Bestimmung der Bereiche des Knochens, die aus den verschiedenen Materialien bestehen. Im Gegensatz zu den Methoden vorheriger Arbeiten, die diese Bereiche mehr oder weniger willkürlich festlegten, ist mit dem beschriebenen Verfahren (Abschnitt 5.2) eine genaue Repräsentation der tatsächlichen Gewebeverteilung im Präparat prinzipiell möglich. Dies erfordert jedoch beträchtliche Erfahrung bei der Segmentierung von Computertomographie-Aufnahmen, um die relativen radiologischen Schwächungen (in Form der Grauwertverteilung) korrekt zu interpretieren.

Einen weiteren Ansatzpunkt für die Verfeinerung des Modells bieten die Annahmen über die Isotropie des Knochengewebes. Interessant wäre in diesem Zusammenhang vor allem ein Vergleich der Modelle mit transvers isotropem bzw. orthotropem Knochengewebe. Eine zu behandelnde Schwierigkeit ist dabei das Einbringen der Symmetrieachsen in das aufgestellte Modell. Außerdem sind deutlich mehr Meßdaten erforderlich, um die dadurch anwachsende Parameterzahl zu behandeln.

Weitere Messungen sind natürlich auch notwendig für die eigentliche Zielsetzung, einen Standardkiefer zu kieferchirurgischen Testzwecken zu bestimmen. Dieser soll einen möglichst umfassenden Bereich von Kiefortypen repräsentieren können. Deshalb werden in erster Linie Testreihen an Präparaten verschiedener Unterkiefer, idealerweise aus gesundem, frischem Knochen, benötigt. Unter Berücksichtigung des funktionalen Ansatzes ist zusätzlich eine Ausdehnung auf unterschiedliche Lastfälle sinnvoll. Von besonderem Interesse sind dabei asymmetrische Belastungen, wie sie auch während des Kauvorgangs auftauchen. Mit ihnen ließe sich das Torsionsverhalten des Kiefers genauer erfassen.

Im Hinblick darauf erscheint als weiterer Ausblick die Verfeinerung der Lösung durch Verwendung quadratischer Tetraederelemente vorteilhaft. Dadurch wird zwar die Bandbreite der Steifigkeitsmatrix größer und ihr Aufstellen aufwendiger, aber es lassen sich glatte Lösungen besser approximieren. Eine weitere Erhöhung der Freiheitsgrade, z. B. durch C^1 -Elemente, erscheint nicht lohnenswert, da der Aufwand zur Assemblierung der Steifigkeitsmatrix und das zu lösende Gleichungssystem enorm anwachsen.

Erweitert man das vorgestellte Modell um den Kontakt mit den Kiefergelenken, und integriert man zusätzlich eine Modellierung der Kaumuskulatur, so erscheint eine komplette Finite-Elemente-Simulation des Verhaltens des Unterkiefers während des Kauvorgangs durchführbar. Damit wäre z. B. die Entwicklung von Osteosyntheseverfahren *in silico* möglich, was gegenüber der bisherigen, vor allem auf empirischen Erfahrungen beruhenden Vorgehensweise, eine enorme Zeit- und Kostenreduktion bedeuten würde. Zusätzlich eröffnet sich durch die numerische Behandlung die Möglichkeit des Einsatzes von mathematischen Optimierungsverfahren. Als Fernziel ist vorstellbar, auf Basis solcher numerischen Simulationen die Planung von Operationen im Kieferbereich zu unterstützen. Die dafür notwendige interdisziplinäre Zusammenarbeit kann auch der Mathematik neue Impulse liefern.

Literaturverzeichnis

- [ami] amira. <http://amira.zib.de>.
- [AsGr99] C. Ashcraft und R. Grimes. SPOOLES: An object-oriented sparse matrix library. In *Proceedings of the 9th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, San Antonio, 1999. CD-ROM.
- [AsvB87] R. B. Ashman und W. C. van Buskirk. The elastic properties of a human mandible. *Advances in Dental Research* 1(1), 1987, S. 64–67.
- [BKRE00] M. Beek, J. H. Koolstra, L. J. van Ruijven und T. M. G. J. van Eijden. Three-dimensional finite element analysis of the human temporomandibular joint disc. *Journal of Biomechanics* (33), 2000, S. 307–316.
- [Brae97] D. Braess. *Finite Elemente*. Springer, Berlin-Heidelberg-New York. 2. Auflage, 1997.
- [ChGu74] H. L. Chen und A. A. Gundjian. Determination of the bone-crystallites distribution function by x-ray diffraction. *Medical and Biological Engineering* (12), 1974, S. 531–535.
- [Ciar78] P. G. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. North-Holland, Amsterdam. 1978.
- [Ciar88] P. G. Ciarlet. *Mathematical Elasticity. Volume I: Three-Dimensional Elasticity*. North-Holland, Amsterdam. 1988.
- [Cowi85] S. C. Cowin. The relationship between the elasticity tensor and the fabric tensor. *Mechanics of Materials* (4), 1985, S. 137–147.
- [CrVi00] L. Cristofolini und M. Viceconti. Mechanical Validation of whole bone composite tibia models. *Journal of Biomechanics* (33), 2000, S. 279–288.
- [EnHN96] H. W. Engl, M. Hanke und A. Neubauer. *Regularization of Inverse Problems*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. 1996.
- [Gray18] H. Gray. *Anatomy of the Human Body*. Lea & Febiger. 20. Auflage, 1918.
- [HHTB⁺92] R. T. Hart, V. V. Hennebel, N. Thongpreda, W. C. van Buskirk und R. C. Anderson. Modeling the biomechanics of the mandible: A three-dimensional finite element study. *Journal of Biomechanics* (25), 1992, S. 261–286.
- [Jee88] W. S. S. Jee. *Cell and Tissue Biology. A Textbook of Histology*, Kapitel The Skeletal Tissues, S. 213–253. Urban & Schwarzenberg, Baltimore. 6. Auflage, 1988.

- [JøKu02] C. Jørgensen und T. Kundu. Measurement of material constants of trabecular bone: a micromechanical analytic study using a 1 GHz acoustic microscope. *Journal of Orthopaedic Research* (20), 2002, S. 151–158.
- [KnAn00] P. Knabner und L. Angermann. *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Springer, Berlin-Heidelberg-New York. 2000.
- [Knoe77] A. C. Knoell. A mathematical model of an in vitro human mandible. *Journal of Biomechanics* Band 10, 1977, S. 159–166.
- [KoRH92] T. W. P. Koriath, D. P. Romilly und A. G. Hannam. Three-Dimensional Finite Element Stress Analysis of the Dentate Human Mandible. *American Journal of Physical Anthropology* (88), 1992, S. 69–96.
- [KovE99] J. H. Koolstra und T. M. G. J. van Eijden. Three-Dimensional Dynamical Capabilities of the Human Masticatory Muscles. *Journal of Biomechanics* (32), 1999, S. 145–152.
- [KRDO⁺99] J. Kabel, B. van Rietbergen, M. Dalstra, A. Odgaard und R. Huiskes. The role of an effective isotropic tissue modulus in the elastic properties of cancellous bone. *Journal of Biomechanics* (32), 1999, S. 673–680.
- [Kriz92] M. Krizek. On the Maximum Angle Condition for Linear Tetrahedral Elements. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 29(2), 1992, S. 513–520.
- [MaBS98] R. B. Martin, D. B. Burr und N. A. Sharkey. *Skeletal Tissue Mechanics*. Springer, Berlin-Heidelberg-New York. 1998.
- [McEl66] J. H. McElhaney. Dynamic response of bone and muscle tissue. *Journal of Applied Physiology* (21), 1966, S. 1231–1236.
- [MKBW98] C. Meyer, J.-L. Kahn, P. Boutemy und A. Wilk. Determination of the external forces applied to the mandible during various chewing exercises. *Journal of Cranio-Maxillofacial Surgery* (26), 1998, S. 331–341.
- [MKLB⁺00] C. Meyer, J.-L. Kahn, A. Lambert, P. Boutemy und A. Wilk. Development of a static simulator of the mandible. *Journal of Cranio-Maxillofacial Surgery* (28), 2000, S. 278–286.
- [NaMe88] A. N. Natali und E. A. Meroi. A review of the biomechanical properties of bone as a material. *Journal of Biomedical Engineering* (11), 1988, S. 266–275.
- [NKSH⁺00] A. Neff, A. Kuhn, H. Schieferstein, A. Hinz, Wilczok, G. E., Mühlberger, H.-F. Zeilhofer, R. Sader, H. Deppe und H.-H. Horch. Development of Innovative Osteosynthesis Techniques by Numerical and In Vitro Simulation of the Masticatory System. In H.-J. Bungartz, R. Hoppe und C. Zenger (Hrsg.), *Lectures on Applied Mathematics. Proceedings of the Symposium Organized by the Soderforschungsbereich 438 on Occasion of Karl-Heinz Hoffmann's 60th Birthday, Munich, June 30 - July 1, 1999*, New York, 2000. Springer, S. 179–205.
- [OlSY92] O. A. Oleinik, A. S. Shamaev und G. A. Yosifian. *Mathematical Problems in Elasticity and Homogenization*. North-Holland, Amsterdam. 1992.

- [Plat91] W. Platzer. *Taschenatlas der Anatomie. Band 1: Bewegungsapparat*. Georg Thieme Verlag, Stuttgart. 6. Auflage, 1991.
- [RhAT93] J.-Y. Rho, R. B. Ashman und C. H. Turner. Young's modulus of trabecular and cortical bone material: ultrasonic and microtensile specimens. *Journal of Biomechanics* (26), 1993, S. 111–119.
- [RiCB88] J. C. Rice, S. C. Cowin und J. A. Bowman. On the dependency of the elasticity and strength of cancellous bone on apparent density. *Journal of Biomechanics* (21), 1988, S. 155–168.
- [Schw91] H. R. Schwarz. *Methode der finiten Elemente*. B. G. Teubner, Stuttgart. 3. Auflage, 1991.
- [Schw97] H. R. Schwarz. *Numerische Mathematik*. B. G. Teubner, Stuttgart. 4. Auflage, 1997.
- [SNKZ⁺00] H. Schieferstein, A. Neff, A. Kuhn, H.-F. Zeilhofer und H.-H. Horch. Experimentelle Strukturanalyse des menschlichen Unterkiefers. In R. Jamal und H. Jaschinski (Hrsg.), *Virtuelle Instrumente in der Praxis. Meßtechnik. Begleitband zum Kongreß VIP 2001*. Hüthig, 2000, S. 274–281.
- [VoKu59] G. P. Vose und A. L. Kubala. Bone strength — its relation to x-ray-determined ash content. *Human Biology* (6), 1959, S. 659–667.
- [Wern00] D. Werner. *Funktionalanalysis*. Springer, Berlin-Heidelberg-New York. 3. Auflage, 2000.
- [Wlok82] J. Wloka. *Partielle Differentialgleichungen*. B. G. Teubner, Stuttgart. 1982.

Index

- äußere Flächennormale, 9
- Advancing-Front-Methode, 62
- affine Familie, 45
- Alveolarkamm, 21
- Alveolen, 21
- amira, 61
- Angulus mandibulae, 21
- Antwortfunktion, 13
 - hyperelastische, 35
 - isotrope, 15
 - objektive, 14
 - objektive und isotrope, 16
- Articulatio temporomandibularis, 22
- Assemblierung, 47
- aufsteigende Äste, 21
- Bandbreite, 49
- beste Näherungslösung, 68
- Bilinearform
 - V-elliptische, 37
 - stetige, 37
- Canaliculi, 26
- Caput mandibulae, 21
- Cauchyscher Spannungsvektor, 10
- Collum, 21
- Corpus Mandibulae, 21
- Crout-Verfahren, 65
- Cuthill-McKee-Verfahren, 49
- dünn besetzte Matrix, 49
- Deformation, 6
 - homogene, 17
 - orientierungserhaltende, 6
 - starre, 7
- Deformationsgradient, 6
- deformierte Konfiguration, 6
- direkte Problem, 67
- direktes Problem, 67
- Dirichlet-Randbedingung, 31
- Druckspannung, 10
- Elastizitätsmodul, 18
- Element
 - Finites, 44
 - konformes, 45
 - Lagrange-, 45
 - lineares Tetraeder-, 46
 - Referenz-, 45
- Energienorm, 38
- Faktorisierung, 65
 - dünnbesetzte, 66
- FeliCs, 59
- Festigkeit, 5
- Finite-Elemente-Raum, 45
- Finites Element, 44
- Formfunktion, 44
- Fossa mandibularis, 22
- Freiheitsgrade, 45
- Galerkin-Verfahren, 43
- Gaußsche Quadraturformel, 48
- Gesamtenergie, 36
- gleichförmiger Druck, 11
- Gleichgewichtsgleichungen, 10
- Greensche Formel
 - für Lipschitzgebiete, 9
- Grenze
 - Bruch-, 5
 - elastische, 5
 - proportionale, 5
- Hauptspannungen, 10
- Hauptspannungsrichtungen, 10
- Haverssches System, 26
- homogener Spannungszustand, 17
- Hookesches Gesetz, 19
 - verallgemeinertes, 19
- Incisura mandibulae, 21
- Interpolationsbedingungen, 45

- Interpolationsfehlerfunktional, 50
- inverses Problem, 67
- Körper, 21
- kleinste-Quadrate-Lösung, 68
- Knochen
 - kortikaler, 24
 - spongiöser, 25
 - trabekulärer, 25
- Knoten, 45
- Kofaktor, 11
- Kompilation, 48
- Kondyle, 21
- konstituierende Gleichung, 13
- Koordinaten
 - Euler-, 11
 - Lagrange-, 11
- Kornsche Ungleichung
 - im $H^1(\Omega)$, 41
 - im $H_0^1(\Omega)$, 40
- Kraft
 - Flächen-, 8
 - konservative, 35
 - tote, 31
 - Volumen-, 8
- Lösung der Variationsaufgabe, 37
 - Abschätzung, 38
 - Existenz, 42
 - Regularität, 42
 - Stabilität, 38, 42
- Lösungsoperator, 68
- Lacunae, 26
- Lamé-Konstanten, 17
- Lamellen, 26
- Lastvektor, 43
- Lemma
 - Bramble-Hilbert-, 50
 - von Céa, 44
- Lipschitzgebiet, 9
- Mandibula, 21
- Mandibulator, 53
- Marching-Cube-Verfahren, 62
- Material
 - anisotropes, 20
 - elastisches, 13
 - homogenes, 13
 - hyperelastisches, 35
 - isotropes, 15, 20
 - objektives, 14
 - orthotropes, 20
 - St. Venant-Kirchhoff, 19
 - transvers isotropes, 20
- Materialgesetz
 - anisotropes, 19
 - homogenes und isotropes, 17
 - lineares, 19
- Materialparameter, 18
- Maximalwinkelbedingung, 50
- Mineralgehalt, 27
- Minimierungsaufgabe, 36
 - linearisierte, 37
- Moore-Penrose-Inverse, 69
- Muskel
 - Masseter-, 23
 - Pterygoideus
 - lateralis, 23
 - medialis, 23
 - Temporalis-, 23
- Neumann-Randbedingung, 31
- nodale Basis, 45
- normierte Formfunktion, 46
- Oberflächengitter, 48
- Orientierung der Kollagenfasern, 27
- Osteon, 26
- Osteosyntheseplatten, 1
- Parameteridentifizierung, 68
- Parameterwahlregel, 69
- Piola-Indentität, 11
- Piola-Transformation, 11
- Piola-Transformierte, 11
- Poissonzahl, 18
- Porosität, 27
- Präparat, 56
- Prinzip
 - der virtuellen Arbeit, 34
 - von Euler und Cauchy, 8
- Processus
 - condylaris, 21
 - coronoideus, 21
- Profil, 49
- Pterygo-Masseterschlinge, 23
- Querkontraktionszahl, 18

- Ramus, 21
- Randwertproblem
 - adjungiertes, 51
 - Allgemeines, 30
 - lineares, 32
 - reiner Verschiebungsansatz für, 31
- Referenzkonfiguration, 6
 - spannungsfreie, 17
- Regularisierung, 69
- Regularisierungsoperator, 69
- Regularisierungsverfahren
 - konvergentes, 69
- Ritz-Galerkin-Verfahren, 43
- Ritzscher Ansatz, 43
- Satz
 - Divergenz-, 9
 - Spur-, 41
 - von Aubin und Nitsche, 51
 - von Cauchy, 10
 - von Cauchy (Referenzkonfiguration), 13
 - von Lax-Milgram, 38
 - von Rivlin-Ericksen, 16
- Schermodul, 17
- schlecht gestelltes Problem, 68
- Schubspannung, 11
- schwache Ableitung, 39
- schwache Formulierung, 34
- schwache Lösung, 34
- Segmentierung, 62
- SIMI, 54
- Sobolevraum, 39
- Spannungs-Dehnungsgesetz, 14
 - isotropes, 16
- Spannungsinvarianten, 15
- Spannungstensor
 - Cauchyscher, 10
 - erster Piola-Kirchhoff-, 12
 - zweiter Piola-Kirchhoff-, 12
- Speicherstruktur, 47
- SPOOLES, 65
- Spurabbildung, 41
- Standardkiefer, 2
- Steifigkeitselementsmatrix, 47
- Steifigkeitsmatrix, 43
- Strafterm, 70
- Substantia
 - Compacta, 24
 - Corticalis, 24
 - Spongiosa, 25
- technische Konstanten, 18
- Tikhonov-Regularisierung, 70
- Trabekel, 25
- trabekuläres Paket, 26
- Transformationsfunktion, 46
- Triangulierung, 44
 - quasi-uniforme, 49
 - zulässige, 44
- Trust-Region-Verfahren, 70
- Variationsaufgabe, 34
 - diskretisierte, 43
 - komponentenweise, 38
 - lineare, 34
- verallgemeinerte Inverse, 68
- Verfahren von Levenberg-Marquardt, 70
- Verschiebung, 6
- Verschiebungsgradient, 6
- Verzerrung, 7
- Verzerrungstensor
 - Greenscher, 7
 - linearisierter, 8
 - rechter Cauchy-Green-, 7
- viskoelastische Eigenschaften
 - von Knochen, 28
- Voxel, 62
- winged-edge, 60
- Zementlinien, 26
- Zugspannung, 10

Ich erkläre hiermit, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

München, den 18. Juli 2001

