UNIVERSITÄT BREMEN

Zentrum für Technomathematik

Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

Modellierung der Abkühlung von Stahlbrammen

Michael Wolff **Eberhard Bänsch**
Michael Böhm **Dominic Davis**

Report 00-07

Berichte aus der Technomathematik

Report 00-07 **März 2000**

Modellierung der Abkühlung von Stahlbrammen

unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen
und mechanischen Deformationen

Michael Wolff [1], Eberhard Bänsch [2], Michael Böhm [1], Dominic Davis [2]

Zusammenfassung

In einem mathematischen Modell zur Phasenumwandlung fest-fest bei der Abkühlung von Stahl werden thermoelastische Effekte berücksichtigt. Es werden die zeit- und ortsabhängigen Deformationen, Temperatur sowie Phasenanteile (Austenit, Perlit, Martensit) berechnet. Die Modellierung führt auf ein System von partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen, welches mit Hilfe eines Finite-Elemente-Verfahrens numerisch gelöst wird.

1. Phänomenologische Beschreibung

Wir betrachten den Abkühlprozeß von Stahlbrammen aus eutektoiden Stahl C 1080. Dabei werden thermische und mechanische Effekte sowie Phasenumwandlungen im Stahl berücksichtigt. Die einzelnen Phasen werden als koexistierendes Gemisch angesehen (vgl. [Leb84], [Vis87], [Höm96], [Ino89], [Hun99] und die dort zitierten Quellen).

Die Bramme – im Ausgangszustand als ein Quader angesehen - besitze zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ eine homogene Temperaturverteilung θ_0 (gleich der Austenit-Starttemperatur), sei spannungsfrei und bestehe nur aus der austeniten Phase.

Durch Abkühlung setzen Phasenumwandlungen ein, die sich entwickelnde inhomogene Temperaturverteilung bewirkt Wärmespannungen, die zur Deformation führen. Daneben bewirken inhomogene Phasenverteilungen zusätzliche Spannungen. Im vorliegenden Modell sind mögliche plastische Deformationen, die auftreten, falls die entstehenden Spannungen die Fließgrenze erreichen, noch nicht

[1] Universität Bremen, FB 3 (Mathematik), Zentrum für Technomathematik, AG Math. Modellierung, Postfach 330440, D-28334 Bremen, Tel. +49(0)421/218-7175, Fax ...-9406, Sekr. ...-9405
mbohm@math.uni-bremen.de, mwolff@math.uni-bremen.de
[2] Universität Bremen, FB 3 (Mathematik), Zentrum für Technomathematik, AG Numerik Part. DG, Postfach 330440, D-28334 Bremen, Tel. +49(0)421/218-7138, Fax ...-4863, Sekr. ...-2924
baensch@math.uni-bremen.de, dominic@math.uni-bremen.de

berücksichtigt. Die sogenannte Umwandlungsplastizität tritt bereits bei Spannungen auf, die wesentlich unterhalb der Fließgrenzen der beteiligten Phasen liegen (vgl. [Mit87], [Fis96], [Fis99]). Dieses Phänomen ist von der klassischen Plastizität verschieden. In dieser Arbeit soll die Umwandlungsplastizität jedoch nicht berücksichtigt werden.

Unser Ziel ist es, anhand eines einfachen Modells den Einfluß der Phasenumwandlungen auf den thermoelastischen Prozeß bei der Abkühlung von Stahlbrammen zu verstehen. Weitergehende Fragestellungen, insbesondere zu mathematischen und numerischen Untersuchungen gekoppelter komplizierterer Modelle, betrachten wir später.

2. Mathematisches Modell

Zunächst formulieren wir das Modell für *endliche* Deformationen. Danach werden verschiedene Vereinfachungen vorgenommen. Das resultierende Modell wird dann, als erster Test, numerisch ausgewertet.

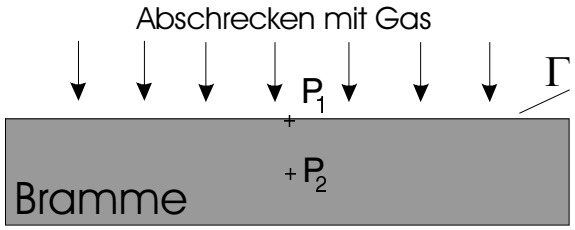

Abbildung 1: Seitenansicht der Bramme im undeformierten Anfangszustand (vgl. Kap. 4).

Sei die undeformierte, spannungsfreie Bramme mit einem Quader $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ identifiziert (Abb. 1). Die Bewegungs- und Wärmeleitungsgleichung in *Lagrangeschen* Koordinaten bei Vernachlässigung äußerer Kräfte und Quellen lauten:

$$\rho_0(x)\,\frac{d^2}{dt^2}\,u(x,t) - \operatorname{div}\left((I + \nabla u)\,S(x,t)\right) = 0 \qquad \text{in } \Omega \times]0,T[, \tag{2.1}$$

$$\rho_0(x)\,\frac{d}{dt}\,e(x,t) + \operatorname{div} q(x,t) = S(x,t) \bullet\bullet \frac{d}{dt}\,E \qquad \text{in } \Omega \times]0,T[. \tag{2.2}$$

Hierbei sind

u - Verschiebungsvektor, θ - absolute Temperatur, ρ_0 - Dichte im Referenzzustand, also für $t = 0$ und $\theta = \theta_0$ (Bei anfangs homogenem Material ist ρ_0 konstant), T - Dauer des Prozesses, S - zweiter Piola-Kirchhoff-Tensor,

(2.3) $E := \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^* + \nabla u^* \nabla u)$ – Verzerrungstensor,

e - Massendichte der inneren Energie, q - Wärmestromdichtevektor (alles bezogen auf Lagrangesche Koordinaten), I – Einheitstensor.

Zur Kontinuumsmechanik und Thermomechanik sei auf Standardwerke wie [Tru66], [Nol73], [Hau77], [Mar83], sowie auf neuere Arbeiten [Sil97], [Wil98] verwiesen.

Wir nehmen an, die Summe der spezifischen Volumina der austeniten, perliten und martensiten Phase – a, p, m – sei zu jedem Zeitpunkt und an jedem Ort gleich 1, also

(2.4) $a(x, t) + p(x, t) + m(x, t) = 1$ in $\Omega \times [0, T]$.

Außerdem seien a, p und m stets nichtnegativ.

Es genügt, p und m als unabhängige Größen anzusehen.

Weiterhin verwenden wir auch die Notation

$\omega := (a, p, m)$.

Wir setzen folgendes vereinfachtes Evolutionsmodell voraus:

(2.5) $\frac{d}{dt} p(x, t) = (1 - p(x, t) - m(x, t))\, f_p(\theta)\, H(\theta_a - \theta)$ in $\Omega \times]0, T[$,

(2.6) $\frac{d}{dt} m(x, t) = (1 - p(x, t) - m(x, t))\, f_m(\frac{d}{dt}\theta)\, H(-\frac{d}{dt}\theta))\, H(\theta_m - \theta)$ in $\Omega \times]0, T[$

(2.7) $p(x, 0) = 0$ in Ω,

(2.8) $m(x, 0) = 0$ in Ω.

Dabei bezeichnen die nichtneagtiven Funktionen f_p und f_m die später genauer zu bestimmenden Bildungsraten von Perlit bzw. Martensit. H sei die Heaviside-Funktion, also

(2.9) $H(s) := 0$ für $s \le 0$ und $H(s) := 1$ für $s > 0$.

θ_a, θ_m seien die Austenit- bzw. Martensit-Starttemperatur mit $\theta_m < \theta_a = \theta_0$.

Zur Vereinfachung der Schreibweise bezeichnen wir alle Ableitungen nach (der Zeit) t mit einem Punkt über der Funktion, also $\dot{\theta}$ für $\frac{d}{dt}\theta$.

Bemerkung 1: Die Beziehungen (2.4) – (2.8) sowie die Nichtnegativität von f_p und f_m sichern die Nichtnegativität von a, p und m.

Bemerkungen 2: Das Evolutionsmodell (2.5) – (2.8) geht von folgenden Voraussetzungen aus:

- Die Bildungsraten von p und m hängen nicht von den Phasen selbst und vom

Verzerrungszustand, sondern nur von der zur Verfügung stehenden Austenit-Menge ab.

- Martensit wird nur gebildet, wenn $\theta < \theta_m$ und $\dot{\theta} < 0$, also unterhalb der Martensit-Starttemperatur und bei Abkühlung.
- Perlit wird nur gebildet unterhalb der Austenit-Starttemperatur.
- Die Umwandlungen haben irreversiblen Charakter. Eine mögliche Rückumwandlung in Austenit wird nicht berücksichtigt. Eine Rechtfertigung dafür sind die Ausgangsbedingungen (nur Austenit zu Beginn, Abkühlung bzw. Abschrecken, latente Wärmen zu gering für Auslösen einer selbständigen Rückumwandlung).
- Zur Diskussion weiterer Modelle für die Phasenumwandlungen sei auf [Leb84], [Höm96], [Hun99] und die dort zitierte Literatur sowie auf einen Report der Autoren [Böh00] verwiesen.

Wir nehmen an, die Bramme verhalte sich isotrop, linear thermoelastisch und erleide Umwandlungsspannungen (s. Appendix 1). Dies führt zu folgender rheologischer Zustandsgleichung:

(2.10) $$S = \lambda(\mathrm{tr}\, E)I + 2\mu\, E - 3K\alpha(\theta)\,(\theta - \theta_0)I - K\,\frac{\rho_0 - \rho(\theta_0)}{\rho(\theta_0)}\,I$$

mit λ, μ - Lamé-Koeffizienten, $K := \lambda + \frac{2}{3}\mu$ Modul der Volumenkompression, α - Koeffizient der (linearen) Wärmeausdehnung, $\rho(\theta_0)$ - aktuelle Dichte des Phasengemisches bezogen auf θ_0.

Generell hängen λ, μ, α von den Invarianten von E, von θ, p und m ab. Wir geben später konkrete Ansätze auf der Basis der Mischungsregel an (vgl. Kap. 3).

Für den Wärmestrom setzen wir das Fourier-Gesetz an:

(2.11) $$q = -\kappa(\theta)\,\nabla\theta.$$

Die innere Energie hat allgemein die folgende Gestalt

(2.12) $$e = e(E, \theta, p, m).$$

Setzen wir die Materialgleichungen (2.10), (2.11), (2.12) in (2.1) und (2.2) ein und drücken E gemäß (2.3) durch die Verschiebungen u aus, so erhalten wir folgendes gekoppeltes System zur Bestimmung von u und θ:

(2.13) $$\rho_0\, \ddot{u}(x, t) - \mathrm{div}\,(\,(I + \nabla u)\,\tilde{S}\,(u, \theta, p, m)\,) = 0 \qquad \text{in } \Omega \times]0, T[,$$

(2.14) $$\rho_0\, c_e\, \dot{\theta} - \mathrm{div}\,(\kappa(\theta)\nabla\theta) = (\rho_0 \frac{\partial e}{\partial E} - S(x, t)) \bullet\bullet \dot{E} - \rho_0 \frac{\partial e}{\partial p}\dot{p} - \rho_0 \frac{\partial e}{\partial m}\dot{m} \quad \text{in } \Omega \times]0, T[.$$

Hierbei sind c_e $(= \frac{\partial e}{\partial \theta})$ - spezifische Wärme(-Kapazität), $\tilde{S}$ - Ausdruck, der nach Einsetzen von (2.3) in (2.10) entsteht.

Neben der üblichen Dissipation treten Terme in (2.14) auf, die das Freisetzen von Energie bei der Phasenumwandlung beschreiben.

Oft werden

$$L_p := -\frac{\partial e}{\partial p}, \qquad L_m := -\frac{\partial e}{\partial m}$$

als latente Wärme für den Austenit-Perlit bzw. Austenit-Martensit Phasenübergang bezeichnet.

Als Konsequenz aus der Entropie-Ungleichung (vgl. [Dau90], [Sil97]) kann der erste Term auf der rechten Seite von (2.14) umgeformt werden, so daß wir statt (2.14) schreiben können:

(2.15) $$\rho_0 c_e \dot{\theta} - \mathrm{div}\,(\kappa(\theta)\nabla\theta) = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \bullet\bullet \dot{E} + \rho_0 L_p \dot{p} + \rho_0 L_m \dot{m} \quad \text{in } \Omega \times]0, T[.$$

Wir ergänzen die Anfangsbedingungen für u und θ:

(2.16) $\theta(x, 0) = \theta_0 = \theta_a$ (= Austenit-Starttemperatur = const.), in Ω,

(2.17) $u(x, 0) = 0, \quad \dot{u}(x, 0) = 0$ in Ω.

Die Randbedingungen für u sind i.a. gemischt, auf einem Teil Γ_1 des Randes werden die Verschiebungen, auf dem restlichen Teil Γ_2 die Spannungen $(I + \nabla u)Sn$ vorgeschrieben (n - äußerer Normalenvektor an Γ_2):

(2.18) $u = 0$ auf Γ_1, $\quad (I + \nabla u)Sn = 0$ auf Γ_2.

Für unseren weiter unten behandelten Fall setzen wir $\Gamma_2 := \partial\Omega$ voraus.

Außerdem wird der Wärmestrom durch den Rand vorgegeben.

(2.19) $$-\kappa(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial n} = \delta(\theta, x)\,(\theta - \theta_\Gamma) \quad \text{auf } \partial\Omega,$$

dabei sind δ - Wärmeaustauschkoeffizient, θ_Γ - Umgebungs- bzw. Abschreck-Temperatur. Abschrecken wird durch „großes“ δ, Abkühlen durch „kleineres“ δ modelliert (s. (4.11))

Wir erhalten das System (2.5) – (2.8), (2.13), (2.15) – (2.19) zur Bestimmung von u, θ, p und m.

Gekoppelte Modelle, die neben Temperatur und Deformation auch die Phasenumwandlungen beschreiben, sind bislang vom allgemeineren mathematischen Aspekt her wenig untersucht worden.

Zur Koppelung von Phasenumwandlungen mit dem Temperaturregime – also *ohne* Betrachtung der mechanischen Größen – gibt es eine Reihe von mathematisch orientierten Arbeiten, vergleiche [Vis87], [Ver87], [Höm95], [Höm97a], [Höm97b], [Bro96], sowie (stärker den numerischen Aspekt betonend) [Höm96] und [Fuh99]. Verschiedentlich wurde auch eine Koppelung mit einem Magnetfeld untersucht, wie es z.B. beim Induktionshärten nötig ist [Höm97b], [Fuh99].
In [Fuh99] (siehe auch [Höm96]) wird das Problem der Phasenumwandlungen (ohne Berücksichtigung der Strukturmechanik) numerisch gelöst. Das betrachtete Anwendungsbeispiel ist die Härtung von Stahl, das verwendete Modell der Phasenumwandlungen weicht von unserem hier vorgelegten ab.
Zur optimalen Steuerung der Abkühlung von Profilstählen verweisen wir auf [Kre97], [Trö99]. Dort werden nur thermische Größen berücksichtigt, die Umwandlungswärmen werden mit einer angepaßten Wärmekapazität kompensiert.

3. Vereinfachtes Modell

Wir wollen das obige Modell (2.13), (2.15) weiter vereinfachen und treffen folgende **Annahmen:**

- Wir vernachlässigen den Trägheitsterm $\rho_0(x)\,\ddot{u}(x,t)$ in (2.13) (und damit auch die Anfangsbedingungen (2.17)) sowie den Dissipationsterm $\theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \bullet\bullet \dot{E}$ in (2.15) und linearisieren das Materialgesetz (2.10) in den Verschiebungen u zu

(3.1) $S = \lambda(\mathrm{tr}\,\varepsilon)I + 2\mu\,\varepsilon - 3K\alpha(\theta)\,(\theta - \theta_0)I - K\frac{\rho_0 - \rho(\theta_0)}{\rho(\theta_0)}\,I \qquad \text{mit } \varepsilon(u) := \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^*).$

- Die latenten Wärmen L_p, L_m seien konstant und c_e sei unabhängig von den mechanischen Größen. Damit wird das System teilweise entkoppelt, zuerst können θ, p, m bestimmt werden, danach u.

- Für die von θ, p und m abhängigen Koeffizienten verwenden wir die „Mischungsregel“. Sei z.B. α für die einzelnen Phasen gegeben mit α_a, α_p, α_m (i.a. temperaturabhängig). Dann setzen wir an

(3.2) $\alpha(a, p, m, \theta) = a\alpha_a(\theta) + p\alpha_p(\theta) + m\alpha_m(\theta) = (1 - p - m)\alpha_a(\theta) + p\alpha_p(\theta) + m\alpha_m(\theta).$

Mit der Dichte verfahren wir analog und gelangen zu

(3.3) $\rho(a, p, m, \theta_0) = a\rho_a(\theta_0) + p\rho_p(\theta_0) + m\rho_m(\theta_0) =$

$$= (1 - p - m)\rho_a(\theta_0) + p\rho_p(\theta_0) + m\rho_m(\theta_0),$$

mit ρ_a, ρ_p, ρ_m als Dichten von Austenit, Perlit bzw. Martensit.

Entsprechend verfahren wir mit λ, μ, K und α sowie mit c_e und κ in der Wärmeleitungsgleichung (2.15).

- Der Wärmeaustauschkoeffizient δ sei temperaturunabhängig.
- Wir reduzieren die Raumdimension, indem wir einen ebenen Verzerrungszustand (vgl. z.B. Braess [Bra97]) annehmen. Dann gilt (3.1) mit Tensoren S und ε, die durch 2x2-Matrizen dargestellt werden.

Von jetzt an bezeichne Ω statt des dreidimensionalen Quaders einen seiner zweidimensionalen Querschnitte (s. Kap. 4).

Als Ergebnis dieser Vereinfachungen erhalten wir folgende Teilaufgaben:

Aufgabe zur Bestimmung von θ, a, p und m:

(3.4)	$\rho_0 c_e \dot{\theta} - \operatorname{div}(\kappa(\theta)\nabla\theta) = \rho_0 L_p \dot{p} + \rho_0 L_m \dot{m}$	in $\Omega \times]0, T[$,
(3.5)	$\theta(x, 0) = \theta_0$ (= θ_a = const.),	in Ω,
(3.6)	$-\kappa(\theta) \frac{\partial\theta}{\partial n} = \delta(x)\,(\theta - \theta_\Gamma)$	auf $\partial\Omega$,

(3.7)	$\dot{p}(x, t) = (1 - p(x, t) - m(x, t))\, f_p(\theta) H(\theta_a - \theta)$	in $\Omega \times]0, T[$,
(3.8)	$\dot{m}(x, t) = (1 - p(x, t) - m(x, t))\, f_m(\dot{\theta})\, H(-\dot{\theta})\, H(\theta_m - \theta)$	in $\Omega \times]0, T[$
(3.9)	$p(x, 0) = 0$	in Ω,
(3.10)	$m(x, 0) = 0$	in Ω,
(3.11)	$a(x, t) = 1 - p(x, t) - m(x, t)$	in $\Omega \times]0, T[$.

Mit einem anderen Evolutionsmodell für p und m wurde eine analoge Aufgabe für den Jominy-Abschrecktest numerisch behandelt [Höm96]. In [Höm97b] wird für eine verwandte dreidimensionale Aufgabe Existenz und Einzigkeit der Lösung unter geeigneten Bedingungen gezeigt.

Aufgabe zur Bestimmung von u:

Wir setzen (3.2) und (3.3) in (3.1) ein und erhalten aus (2.13) unter Vernachlässigung des Trägheitsterms (und Linearisierung bezüglich u)

$$(3.12)\quad \operatorname{div}(\lambda(\operatorname{tr}\varepsilon)I + 2\mu\,\varepsilon) - \operatorname{div}\{(3\lambda + 2\mu)[(1-p-m)\alpha_a + p\alpha_p + m\alpha_m](\theta-\theta_0)I\} +$$
$$- \operatorname{div}\{(\lambda + \tfrac{2}{3}\mu)\frac{p(\rho_a(\theta_0) - \rho_p(\theta_0)) + m(\rho_a(\theta_0) - \rho_m(\theta_0))}{(1-p-m)\rho_a(\theta_0) + p\rho_p(\theta_0) + m\rho_m(\theta_0)} I\} = 0 \qquad \text{in } \Omega \times]0, T[,$$

Zusammen mit den Randbedingungen (2.18) erhalten wir eine vom (Zeit-)Parameter t abhängige lineare (zwei-dimensionale) Lamé-Aufgabe mit variablen Koeffizienten, die nach Lösen der Aufgabe (3.4) – (3.11) für θ, a, p, m als bekannt angesehen werden.

4. Materialparameter

Alle folgenden physikalischen Größen werden in Meter (m), Sekunden (s), Kilogramm (Kg) und Grad Celsius (°C) ausgedrückt.

Der Querschnitt der undeformierten Bramme Ω sei ein Rechteck von

$$1{,}32\ \text{m} \times 0{,}22\ \text{m}.$$

Die Punkte P_1 und P_2 seien wie folgt gewählt (vgl. Abb. 1):

P_1: Mittelpunkt auf oberem Rand Γ,

P_2 : Mittelpunkt von Ω.

Die Tiefe wird im zweidimensionalen Modell vernachlässigt.

Die folgenden Zahlenwerte für die Stoffgrößen und Parameter wurden freundlicherweise von den Mitarbeitern des Institutes für Werkstofftechnik Bremen (IWT) zur Verfügung gestellt.

Die Dichten (in $\frac{Kg}{m^3}$) der Phasen sind gegeben zu

$$(4.1)\qquad \rho_a(\theta) := -0{,}4553\bullet\theta + 7988, \qquad \rho_{p,m}(\theta) := -0{,}36\bullet\theta + 7815$$

und somit

$$(4.2)\qquad \rho_0 = \rho_a(\theta_a) = 7659, \qquad \rho_{p,m}(\theta_a) = 7555.$$

Das Elastizitätsmodul E und die Poisson-Zahl ν sind für alle Phasen (in erster Näherung) gleich mit

$$E(\theta) := 2{,}140\bullet10^{11} - 9{,}84\bullet10^{7}\bullet\theta \qquad [\text{in } \tfrac{Kg}{ms^2}] \qquad \text{bzw.}$$

$$\nu(\theta) := 0{,}282 + 6{,}444\bullet10^{-5}\bullet\theta \qquad [\text{dimensionslos}].$$

Wir unterdrücken die Temperaturabhängigkeiten von E und ν, indem wir näherungsweise mit

$$(4.3)\qquad E(350) = 1{,}796\bullet10^{11},$$

(4.4) $\nu(350) = 0{,}3046$

rechnen. Dann erhalten wir für die Lamé-Koeffizienten μ, λ und das Modul der Volumenkompression $K := \lambda + \frac{2}{3}\mu$ (für alle Phasen):

(4.5) $\mu := \frac{E}{2(1+\nu)} = 0{,}6882 \cdot 10^{11}$ [in $\frac{Kg}{ms^2}$],

(4.6) $\lambda := \frac{\nu E(\theta)}{(1+\nu)(1-2\nu)} = 0{,}59726 \cdot E = 1{,}0724 \cdot 10^{11}$ [in $\frac{Kg}{ms^2}$],

(4.7) $K := \lambda + \frac{2}{3}\mu = 1{,}5312 \cdot 10^{11}$ [in $\frac{Kg}{ms^2}$].

Weiter notieren wir:

Koeffizient der linearen Wärmeausdehnung (dimensionslos):

(4.8) $\alpha_a := 1{,}55 \cdot 10^{-5}$, $\alpha_p := 1{,}70 \cdot 10^{-5}$, $\alpha_m := 1{,}16 \cdot 10^{-5}$.

Wärmeleitfähigkeit [in $\frac{Kg\ m}{s^3\ grad}$]:

(4.9) $\kappa_a(\theta) := 0{,}0127 \cdot \theta + 14{,}6$ $\kappa_{p,m}(\theta) := 40 - 3{,}116 \cdot 10^{-5} \cdot \theta^2$.

Spezifische Wärmekapazität [in $\frac{m^2}{s^2\ grad}$]:

(4.10)
$$\begin{cases} c_{e,a}(\theta) := 0{,}1756 \cdot \theta + 454{,}4 \\ c_{e,p,m}(\theta) := 422 + 0{,}9258 \cdot \theta - 0{,}00212 \cdot \theta^2 + 2{,}626 \cdot 10^{-6} \cdot \theta^3 \end{cases}$$

Wärmeaustauschkoeffizient [in $\frac{Kg}{s^3\ grad}$]:

(4.11)
$$\delta := \begin{cases} 3000 & \text{auf } \Gamma \text{ (für Abschrecken mit Gas)} \\ 50 & \text{auf } \partial\Omega - \Gamma \text{ (für Abkühlen an Luft)} \end{cases}.$$

Umgebungs- und Abschrecktemperatur [in °C]

(4.12) $\theta_\Gamma := 20.$

Wir betrachten das Umwandlungsverhalten des eutektoiden Kohlenstoff-Stahls C 1080. Damit ergeben sich

(4.13) $\theta_a := 723$ °C (= 996 K), $\theta_m := 220$ °C (= 493 K).

Wir verwenden für die Phasenumwandlung Austenit – Perlit die Gleichung

(4.14) $\dot{p}(t) = (1 - p(t) - m(t))\, f_p(\theta)\, H(\theta_a - \theta)$

dabei besitzt f_p den in Abbildung 2 dargestellten Funktionsverlauf

Die Umwandlung Austenit zu Martensit beschreiben wir mit

(4.15) $\dot{m}(t) = (1 - p(t) - m(t)) \frac{-\dot{\theta}}{91} H(-\dot{\theta})) H(\theta_m - \theta).$

Die latenten Wärmen für den Stahl C 1080 lauten

(4.16) $L_p := 77 \frac{J}{g} = 0{,}077 \frac{m^2}{s^2}$, $L_m := 84 \frac{J}{g} = 0{,}084 \frac{m^2}{s^2}$.

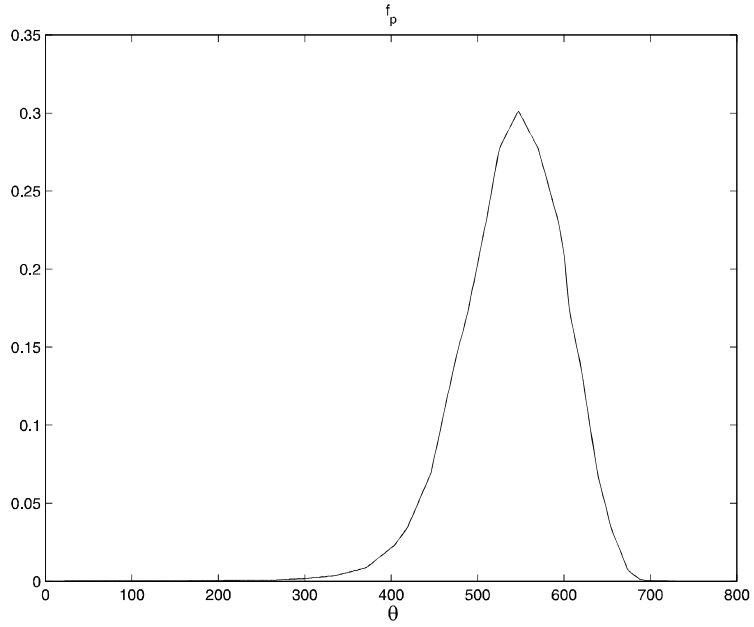

Abbildung 2: Graph der Funktion $f_p = f_p(\theta)$. Erklärungen hierzu in Bemerkung 3.(i).

Bemerkungen 3:

(i) In Vermeidung der Additivitätsregel von Scheil (s. z.B. [Vis87], [Höm96]) wählen wir für die Austenit-Perlit-Umwandlung einen etwas anderen Ansatz, der auf folgende Aufgabe führt:

(4.17) $\dot{p}(t) = a(t) f_p(\theta), \quad p(0) = 0.$

(Für den Fall, daß Perlit nur aus Austenit gebildet wird).

Für konstantes θ lautet die Lösung der Anfangswert-Aufgabe (4.17)

(4.18) $p(t) = 1 - \exp(-f_p(\theta)t)$.

Die Funktion f_p wurde anhand der 50%-Kurve aus dem isothermalen Transformationsdiagramm für den Kohlenstoff-Stahl C 1080 (vgl. [Atl77]) anhand (4.18) bestimmt, zuerst für ausgewählte Werte für θ und danach durch stückweise lineare Interpolation (s. Abb. 2).

Unter Beachtung von (2.4) folgt aus (4.2) und der Umwandlungsbedingung (Vgl. Bemerkung 2) die Gleichung (4.14)

(ii) Für die Umwandlung von Austenit zu Martensit (unterhalb der Maternsit-

Starttemperatur θ_m gehen wir von der Formel von Koistinen / Marburger [Koi59]

(4.19) $$m_{eq}(\theta) = a_0(1 - \exp(- \frac{\theta_m - \theta}{\tau})).$$

aus. Hierbei sind a_0 der vorhandene Austenitanteil, τ - ein (von der Stahlsorte abhängiger) Umwandlungsparameter und $m_{eq}(\theta)$ der sich nach unendlich langem Abkühlen zur Endtemperatur θ bildende Martensitanteil (Gleichgewichtsanteil). Um zu einem Bildungsgesetz zu gelangen, beschreiten wir in näherungsweise folgenden Weg. Wir fassen θ als Funktion der Zeit t auf, setzen $m(t) := m_{eq}(\theta(t))$ und differenzieren die Gleichung (4.19) nach t (bei angenommenem konstanten a_0) und erhalten

(4.20) $$\dot{m}(t) = (a_0 - m(t)) \frac{-\dot{\theta}}{\tau} .$$

Wir ersetzen nun a_0 durch $1 - p(t)$ und fügen zur Prozeßsteuerung die entsprechenden Heaviside-Funktionen ein (s. (2.6)), verwenden $\tau := 91$ und gelangen zu (4.15).

(iii) Die Materialparameter (Dichte, Elastizitätsmodul, Poisson-Zahl, linearer Wärmeausdehnungskoeffizient, Wärmeleitfähigkeit und spezifische Wärmekapazität) sind temperatur- und phasenabhängig. Überdies hängen sie auch von der Stahlsorte ab. Das experimentelle Ermitteln dieser Abhängigkeiten, insbesondere für die höheren Temperaturbereiche, gestaltet sich sehr aufwendig. Hinzu kommt, daß die einzelnen Phasen in bestimmten Temperaturbereichen nicht stabil sind. Daher werden die Werte für den Austenit durch die entsprechenden Werte für austenitische Stähle näherungsweise ersetzt.

Es stellt sich weiterhin heraus, daß für einzelne Gruppen von Stählen, z.B. für niedriglegierte, die Abhängigkeit von den Legierungsbestandteilen weniger ins Gewicht fällt als die Abhängigkeit von Temperatur und Phase.

Aus diesen Gründen verwenden wir für unser Testbeispiel die vom IWT Bremen zur Verfügung gestellten Daten (bis auf die Umwandlungsparameter) für niedriglegierte Stähle.

5. Diskretisierung

Zur Lösung von (3.4) – (3.12) formen wir die Gleichungen wie folgt um. Einsetzen von (3.7), (3.8) und (4.16) in (3.4) ergibt:

(5.1) $\rho_0 c_e(\theta)\,\dot{\theta} + \frac{\rho_0 L_m a}{\tau}\,\dot{\theta}\,H(-\dot{\theta})\,H(\theta_m - \theta) - \mathrm{div}\,(\kappa(\theta)\nabla\theta) = \rho_0 a L_p f_p(\theta)\,H(\theta_a - \theta).$

Zunächst wird (5.1) in der Zeit semi-implizit diskretisiert.

Dazu seien $0 = t_0 < t_1 < ... < t_N = T$ diskrete Zeitschritte und $\Delta t_n := t_n - t_{n-1}$ für $n = 1, ..., N$. Das zeitdiskrete Problem lautet dann:

Gesucht $\theta^n, \omega^n := (a^n, p^n, m^n)$ mit $\theta^0 = \theta_0$, $\omega^0 = (1, 0, 0)$ und für $n \geq 1$

(5.2) $$\frac{\theta^n - \theta^{n-1}}{\Delta t_n}\left(\rho_0 c_e(\theta^{n-1}) + \frac{\rho_0 L_m}{\tau} a^{n-1} H_{\varepsilon_1}\left(\frac{\theta^{n-1} - \theta^n}{\Delta t_n}\right) H_{\varepsilon_2}(\theta_m - \theta^{n-1})\right) - \mathrm{div}\,(\kappa(\theta^{n-1})\nabla\theta^n) =$$
$$= \rho_0 a^{n-1} L_p f_p(\theta^{n-1})\,H_{\varepsilon_2}(\theta_a - \theta^{n-1})$$

sowie $\omega^n = \tilde{\omega}(t_n)$, wobei $\tilde{\omega}$ Lösung des Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen

(5.3) $$\dot{\tilde{\omega}} = F(\tilde{\omega}, \bar{\theta}, \dot{\bar{\theta}}), \qquad \tilde{\omega}(t_{n-1}) = \omega^{n-1}$$

auf dem Zeitintervall $]t_{n-1}, t_n[$ ist. Hierbei ist $F = (F_a, F_p, F_m)$ mit

$$F_p(\tilde{\omega}, \bar{\theta}, \dot{\bar{\theta}}) := \tilde{a}\, f_p(\bar{\theta})\,H(\theta_a - \bar{\theta}),$$

$$F_m(\tilde{\omega}, \bar{\theta}, \dot{\bar{\theta}}) := \tilde{a}\, f_m(\dot{\bar{\theta}})\,H(-\dot{\bar{\theta}})\,H(\theta_m - \theta),$$

$$F_a := -(F_p + F_m),$$

sowie $\bar{\theta}$ die stückweise linearen Interpolationen der θ^n, d.h.

$$\bar{\theta}(x, t) = \frac{t_n - t}{\Delta t_n}\theta^{n-1}(x) + \frac{t - t_{n-1}}{\Delta t_n}\theta^n(x) \qquad \text{für } t \in [t_{n-1}, t_n] \text{ und } x \in \Omega.$$

In (5.2) ist H_ε für $\varepsilon > 0$ eine glatte Approximation von H der Form

$$H_\varepsilon(s) := \left(\arctan\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) + \frac{\pi}{2}\right) \cdot \pi^{-1}.$$

Wir sind im besonderen an Situationen interessiert, in denen nur Abkühlung auftritt, d.h. $\dot{\theta} \leq 0$. In diesem Falle kann der Term $H_{\varepsilon_1}\left(\frac{\theta^{n-1} - \theta^n}{\Delta t_n}\right)$ in (5.2) fortgelassen werden. Im folgenden beschränken wir uns auf diesen Fall. Dann stellt für jeden Zeitschritt die Gleichung (5.2) ein *lineares* elliptisches System zur Lösung von θ^n dar.

Zur Diskretisierung im Ort sei T_h eine konforme Triangulierung von Ω in Dreiecke $T \in T_h$. Definiere den Ansatzraum der stückweise linearen FE-Funktionen

$$V_h := \{ v_h \in C^0(\bar{\Omega}) \mid v_{h|T} \in \mathcal{P}_1 \text{ für alle } T \in T_h \} \subset H^{1,2}(\Omega).$$

($\mathcal{P}_1$ sind die Polynome von höchstens erstem Grad.)

Auf V_h sind die Lagrange-Basisfunktionen φ_i definiert durch $\varphi_i(x_j) = \delta_{ij}$ für alle Knoten x_j der Triangulierung T_h. Weiter bezeichnen wir mit $(\bullet,\bullet)$ das $L^2(\Omega)$-Skalarprodukt. Für $g \in C^0(\bar{\Omega})$, $v, w \in V_h$, $v = \sum_i v_i \varphi_i$, $w = \sum_i w_i \varphi_i$ sei

$$(g; v, w)_h := \sum_i g(x_i)\, v_i w_i \, (\sum_j (\varphi_i, \varphi_j))$$

das gelumpte $L^2(\Omega)$-Skalarprodukt sowie für $g \in L^\infty(\partial\Omega)$

$$\langle g; v, w \rangle := \sum_e \sum_i v_i w_i \, (\sum_j \int_e \varphi_i, \varphi_j) \frac{1}{|e|} \int_e g$$

das gelumpte $L^2(\partial\Omega)$-Skalarprodukt, wobei e über alle äußeren Kanten der Triangulierung läuft.

Nach der üblichen Herleitung der schwachen Formulierung von (5.2) definieren wir das volldiskrete Problem:

Gesucht sind $\theta_h^n, \omega_h^n \in V_h$ mit $\theta_h^0 = \theta_{0,h}$ eine geeignete Approximation von θ_0, $\omega_h^0 = (1, 0, 0)$ sowie für $n \geq 1$

(5.4) $$(\Phi(\omega_h^{n-1}, \theta_h^{n-1}); \frac{\theta^n - \theta^{n-1}}{\Delta t_n}, v_h)_h + (\kappa(\theta_h^{n-1}); \nabla\theta_h^n, \nabla v_h)_h + \langle \delta; \theta_h^n, v_h \rangle =$$

$$= (\rho_0 L_p F_p(\omega_h^{n-1}, \theta_h^{n-1}, \dot{\bar{\theta}}_h); 1, v_h)_h + \langle \delta\theta_\Gamma; 1, v_h \rangle \quad \text{für alle } v_h \in V_h.$$

Hier wurde zur Abkürzung

$$\Phi(\omega_h, \theta_h) := \rho_0 c_e(\theta_h) + \frac{\rho_0 L_m}{\tau} a_h H_{\varepsilon_2}(\theta_m - \theta_h)$$

verwendet.

Weiter sei $\omega_h^n = \sum_i \omega_i^n \varphi_i$ analog zu oben gegeben durch $\omega_i^n = \tilde{\omega}(t_n, x_i)$ und

(5.5) $$\dot{\tilde{\omega}} = F(\tilde{\omega}, \bar{\theta}_h, \dot{\bar{\theta}}_h), \qquad \tilde{\omega}(t_n, x) = \omega_h^{n-1}(x).$$

Durch die Formulierung (5.4), (5.5) ist die Berechnung von θ_h^n und ω_h^n entkoppelt. In jedem Zeitschritt ist (5.4) ein lineares, symmetrisches, positiv definites Gleichungssystem zur Berechnung von θ_h^n. Zur Lösung wird ein vorkonditioniertes CG-Verfahren verwendet. Da aufgrund des transienten Charakters des Problems

kleine Zeitschritte aus Genauigkeitsgründen erforderlich sind, ist die Kondition von (5.4) gutartig und die Wahl eines Vorkonditioniers unkritisch.

Das System gewöhnlicher Differentialgleichungen (5.5) wird näherungsweise mit der impliziten Trapezregel mit Schrittweitensteuerung auf dem Zeitintervall $]t_{n-1}, t_n[$ berechnet.

Zur numerischen Berechnung von u definieren wir den FE-Raum der vektorwertigen, stückweise quadratischen Funktionen

$$W_h := \{ \varphi_h \in [C^0(\bar{\Omega})]^2 \mid \varphi_{h|T} \in (\mathcal{P}_2)^2 \text{ für alle } T \in T_h \}.$$

Für gegebenes θ_h^n, ω_h^n lautet das diskrete Problem zur Bestimmung von u_h^n wie folgt:

Gesucht ist $u_h^n \in W_h$ mit

(5.6) $2\mu\,(\varepsilon(u_h^n), \varepsilon(\varphi_h)) + 2\lambda\,(\operatorname{div} u_h^n, \operatorname{div} \varphi_h) =$

$$= (3\lambda + \mu)\,(\{a\alpha_a + p\alpha_p + m\alpha_m\}(\theta_h^n - \theta_0), \operatorname{div} \varphi_h) +$$

$$+ (\lambda + \tfrac{2}{3}\mu)\,\left(\frac{\rho_{frac}}{\rho_{ges}}, \operatorname{div} \varphi_h\right) \qquad \text{für alle } \varphi_h \in W_h.$$

Dabei sei

$$\rho_{frac} := p(\rho_a - \rho_p) + m(\rho_a - \rho_m), \quad \rho_{ges} := a\rho_a + p\rho_p + m\rho_m.$$

Das Problem (5.6) kann wieder mit einem CG-Verfahren gelöst werden. Man beachte, daß das durch (5.6) beschriebene Gleichungssystem einen nichttrivialen Kern besitzt, gegeben durch die Starrkörperrotationen, das CG-Verfahren aber konvergiert.

Bemerkungen 4.

(i) Im Anwendungsbeispiel in Kap. 6 stellt sich wegen der Größe von $\delta = 3000$ am Abschreckrand (vgl. (4.11)) und für kleine t eine stark ausgeprägte zeitlich-räumliche Grenzschicht ein. Die exakte Beschreibung des Phasenüberganges in dieser Grenzschicht hängt empfindlich von der Genauigkeit von θ_h^n ab. Eine entsprechende Zeitschrittsteuerung ist deshalb unverzichtbar.

Wir gehen wie folgt vor. Definiere

$$\eta^n(\Delta t_n) := \sup_{x \in \Omega} \{ |\theta_h^n(x) - \theta_h^{n-1}(x)| \}.$$

Ein Zeitschritt wird akzeptiert, falls $\eta^n \le \text{TOL}$.

Die Fehlerschätzung $\eta^n(\Delta t_n)$ liefert zudem eine „optimierte Schrittweite“ Δt^*, definiert durch

$$\Delta t^* := \sqrt{\frac{0{,}6 \cdot TOL}{\eta_n(\Delta t_n)}}\, \Delta t_n .$$

(ii) Die Auflösung der räumlichen Grenzschicht erfolgt mit adaptierten Gittern. In der vorliegenden Arbeit werden nur a-priori verfeinerte Gitter benutzt. A-posteriori Fehlerkontrolle wird in zukünftigen Arbeiten beschrieben.

(iii) Aufgrund des semi-impliziten Charakters der Probleme (5.4), (5.5) ist die Berechnung von θ_h^n, ω_h^n numerisch sehr effizient.

(iv) Die Stabilität des Verfahrens (5.4), (5.5) erhält man wie folgt:

Zunächst gilt $0 \le a_h,\ p_h,\ m_h \le 1$. Dann kann man leicht mit Hilfe eines Maximum-Prinzips die Stabilität für den Fall beweisen, daß alle Winkel von Dreiecken der Triangulierung kleiner oder gleich $\frac{\pi}{2}$ sind. Dabei ist zu beachten, daß gelumpte L^2-Skalarprodukte verwendet werden.

Im Falle allgemeiner Triangulierung erhält man die Stabilität von (5.4) für den Fall, daß κ nicht von θ abhängt durch Testen von (5.4) mit $\theta_h^n - \theta_h^{n-1}$.

6. Simulationen

Mit der im Kap. 5 beschriebenen Methode wurde das physikalische Problem numerisch gelöst.

Es ergibt sich folgendes Bild: Es bildet sich eine stark ausgeprägte zeitlich-räumliche Grenzschicht für die Temperatur (und Phasen) am Abschreckrand und kleine t aus, siehe Abb. 3, 4, 5. Zur Notation P_1, P_2 siehe Abb. 1 und Beginn von Kap. 4.

In der Grenzschicht ist die zeitliche Temperaturänderung stark genug, so daß sich Martensit bilden kann. Die Phasenumwandlung ist im wesentlichen hier nach weniger als 500 Sekunden abgeschlossen, siehe Abb. 4, 5.

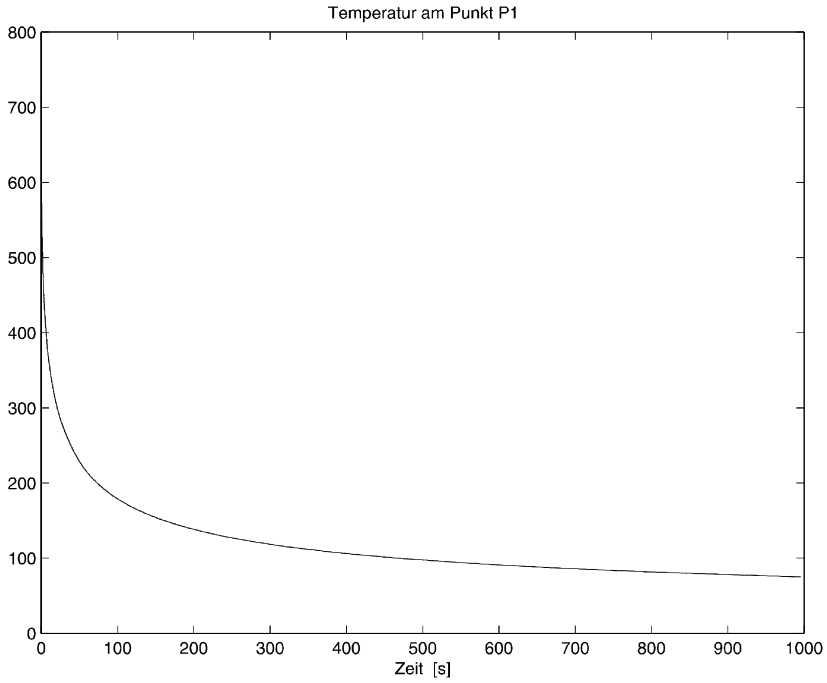

Abbildung 3: Zeitlicher Temperaturverlauf am Punkt P_1 für $t \leq 1000s$.

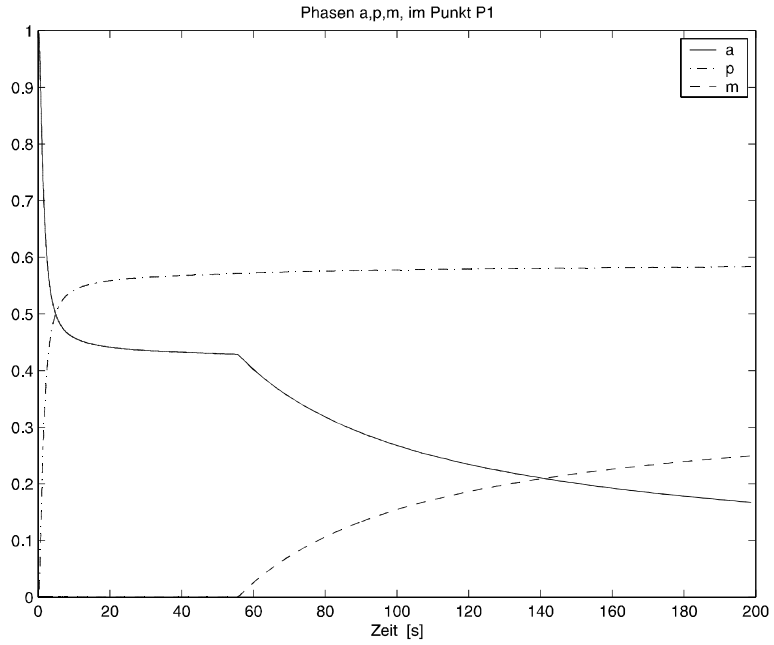

Abbildung 4: Zeitliche Entwicklung der Phasenanteile am Punkt P_1 für $t \leq 200s$.

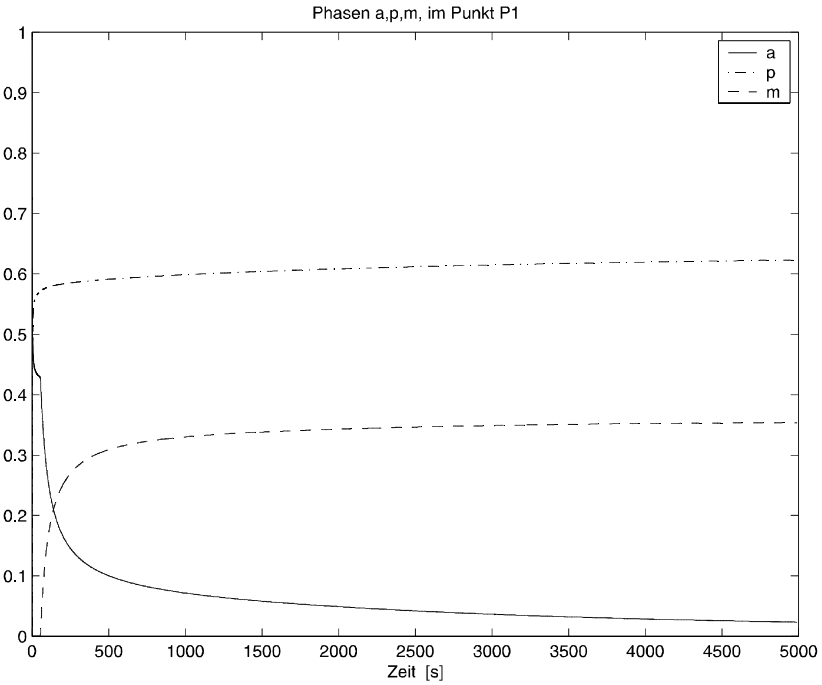

Abbildung 5: Zeitliche Entwicklung der Phasenanteile am Punkt P_1 für $t \leq 5000s$.

Abb. 6 zeigt auf einem vertikalen Schnitt durch Ω bei $x = 0.66$ m die Verteilung von Martensit nach der vollständigen Phasenumwandlung. Die Dicke der Grenzschicht beträgt weniger als ein 1,5 cm.

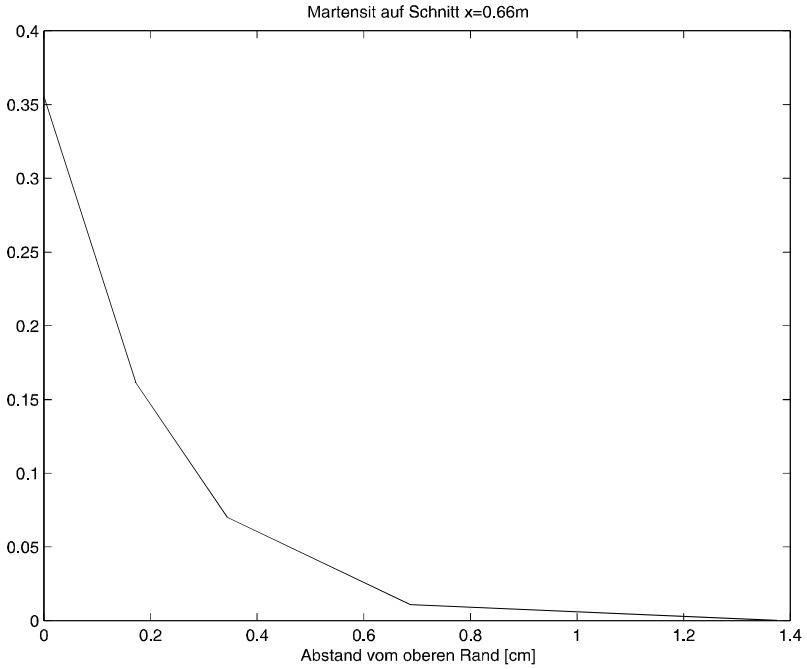

Abbildung 6: Anteil des Martensits auf einem vertikalen Schnitt $x = 0{,}66$m.

Im Inneren des Gebietes geschieht der Abkühlprozess auf einer langsameren Zeitskala. Erst nach $O(10^4$ sec) erreicht die Temperatur im Punkt P_2 den asymptotischen Wert (Abb. 7). Der Wert von $-\dot{\theta}$ ist zu klein, um Martensit zu bilden, es findet eine vollständige Umwandlung von Austenit in Perlit statt, siehe Abb. 8.

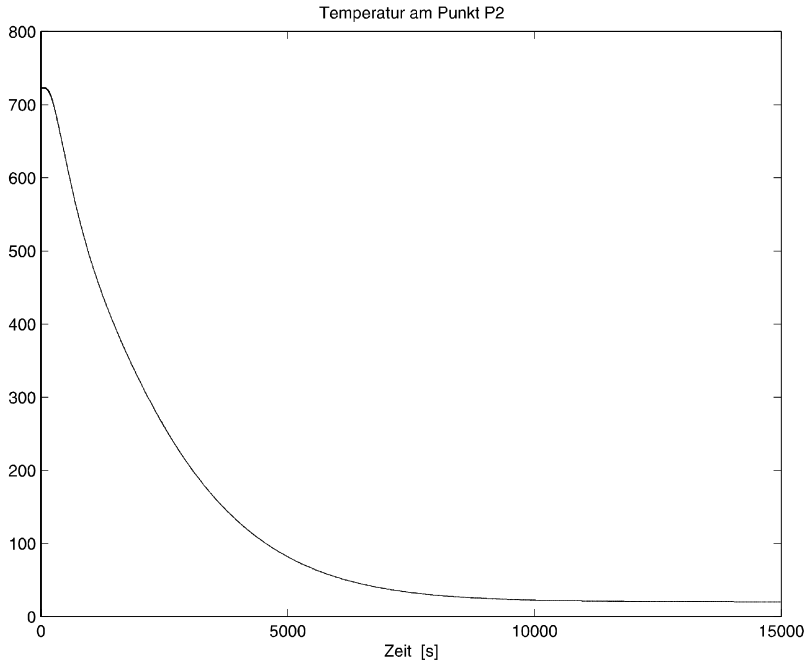

Abbildung 7: Zeitlicher Temperaturverlauf am Punkt P_2.

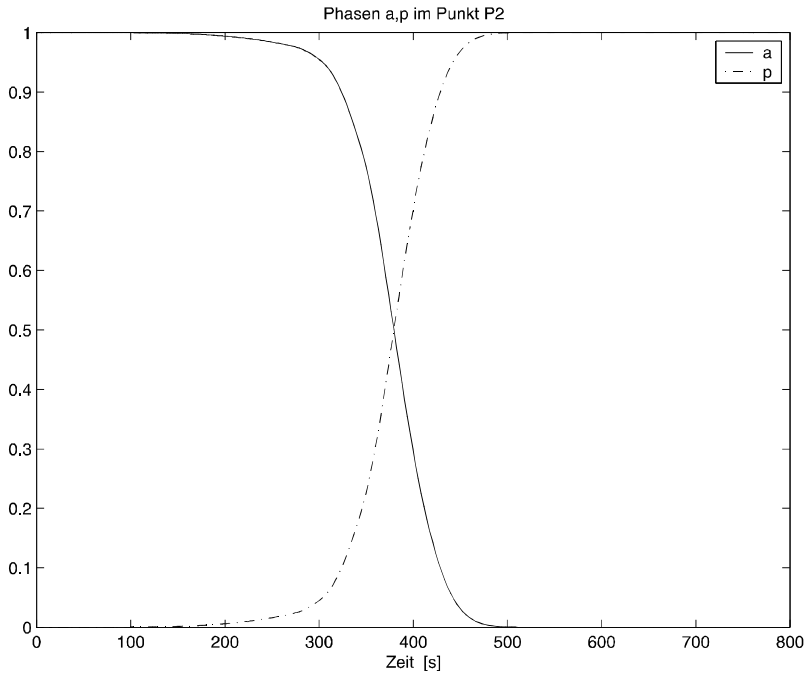

Abbildung 8: Zeitliche Entwicklung der Phasenanteile am Punkt P_2.

Die Abb. 9 zeigt das verwendete FE-Gitter.

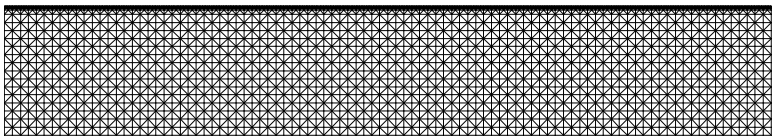

Abbildung 9: Verwendetes FE-Gitter.

Es stellt sich a-posteriori heraus, daß für dieses Beispiel die Phasenumwandlungen auf der rechten Seite in der Gleichung (3.4) keine entscheidende Rolle spielen.
Für das zeitliche Verhalten der Deformation ergibt sich folgendes:
Für kleine t dehnt sich die Bramme aus und wölbt sich nach oben (Abb. 10) (Die Deformationen sind nicht maßstabsgetreu dargestellt.)
Dies steht im Gegensatz zum thermoelastischen Verhalten ohne Phasenumwandlungen und wird bedingt durch den zweiten Volumenterm in (3.11), da $\rho_a - \rho_{p,m} > 0$. Für größere Zeiten t überwiegt der 1. Volumenterm in Gleichung (3.11) und die Bramme zieht sich zusammen und biegt sich dabei nach unten durch.
Der zeitlich asymptotische Endzustand ist eine isotrop verkleinerte Version des Anfangszustandes.

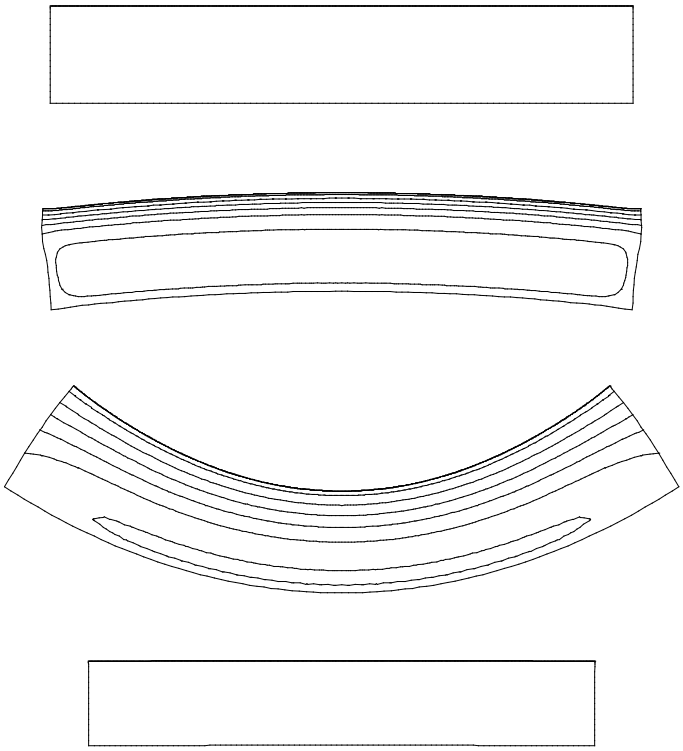

Abbildung 10: Deformierte Bramme und Isolinien der Temperatur für $t = 0, 30, 2600, 20000$s.

Appendix 1 (Herleitung der Umwandlungsspannungen)

Bei der Thermoelastizität einer koexistierenden Mischung rufen Dichteänderungen selbst bei homogener Temperatur Spannungen hervor.

Daher müssen die klassischen Duhamel-Neumann-Beziehungen der linearen Thermoelastizität (vgl. [Dau90])

(A.1) $$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} S_{ij} - \frac{\nu}{E} \mathrm{tr}(S)\, \delta_{ij} + \alpha\, (\theta - \theta_0)\, \delta_{ij}$$

durch den Anteil der Umwandlungsspannungen ergänzt werden.

Seien ρ_0 die Dichte der Referenzkonfiguration und ρ_1 die aktuelle Dichte der Mischung, bezogen auf die Temperatur zum Zeitpunkt t = 0. (Diese Dichte setzt sich nach der Mischungsregel aus den Dichten der Phasen für die Temperatur θ_0 zusammen). Dann gilt für die relative Volumenänderung

(A.2) $$\frac{V_1 - V_0}{V_0} = \frac{\rho_0 - \rho_1}{\rho_1}\,.$$

Daraus folgt für „kleine“ Deformationen die entsprechende relative Längenänderung

(A.3) $$\frac{l_1 - l_0}{l_0} = \frac{1}{3}\frac{\rho_0 - \rho_1}{\rho_1}\,,$$

so daß zu (A.1) der Term $\frac{1}{3}\frac{\rho_0 - \rho_1}{\rho_1}\delta_{ij}$ zu ergänzen ist.

Durch anschließendes Auflösen der Gleichung nach S erhalten wir (2.10).

Literatur:

[Atl77] Atlas of Isothermal Transformation and Cooling Transformation Diagrams, American Society for Metals, Ohio

[Böh00] Böhm, M., Wolff, M., Bänsch, E., Davis, D.: Mathematische Aufgaben in der Thermomechanik mit Phasenumwandlungen bei Stählen, Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, in Vorbereitung

[Bra97] Braess, D.: Finite elements, theory, fast solvers and applications in solid mechanics. Cambridge University Press

[Bro96] Brokate, M., Sprekels, J.: Hysteresis and Phase Transitions, Springer-Verlag

[Dau90] Dautray, R., Lions, J.-L.: Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology, Vol.1, Springer-Verlag

[Fis96] Fischer, F. D., Sun, Q. P., Tanaka, K.: Transformation-induced plasticity, (TRIP) Appl. Mech. Rev. 49, pp. 317 – 364

[Fis99] Fischer, F. D., Reisner, G., Werner, E., Tanaka, K., Cailletaud, G., Antretter, T.: A new view on transformation induced plasticity (TRIP) to be published in Int. J. Plasticity

[Fuh99] Fuhrmann, J., Hömberg, D.: Numerical simulation of the surface hardening of steel, International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, Vol. 9 No 6, pp. 705-724, MCB University Press 0961-5539

[Hau77] Haupt, P.: Viskoelastizität und Plastizität. Springer-Verlag

[Höm95] Hömberg, D.: A mathematical model for the phase transitions in eutectoid carbon steel, IMA Journal of Applied Mathematics 54, 31 – 57, Oxford University Press

[Höm96] Hömberg, D.: A numerical simulation of the Jominy end-quench test, Acta mater, Vol. 44, No 11, pp4375-4385, Acta Metallurgica Inc.

[Höm97a] Hömberg, D., Sokolowski, J.: Optimal control of laser hardening, Preprint WIAS Berlin, Nr. 315

[Höm97b] Hömberg, D.: Irreversible Phase Transitions in Steel, Mathematical Methods in the Applied Sciences, Vol. 20, 59-77, B.G. Teubner Stuttgart – John Wiley & Sons, Ltd.

[Hun99] Hunkel, M., Lübben, T., Hoffmann, F., Mayr, P.: Modellierung der bainitischen und perlitischen Umwandlung bei Stählen, HTM6(99)

[Ino89] Inoue, T., Wang, Z., Miyao, K.: Quenching stress of carburized steel gear wheel, ICRS2 Beck, G., Denis, S., Simon, A.(eds) Elsevier Appl. Sci., London, New York, pp. 606 – 611

[Koi59] Koistinen, D. P., Marburger, R. E.: A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon and plain carbon steels, Acta metall. 7 (1), pp. 59 – 60

[Kre97] Kregel, R., Standke, R., Tröltzsch, F., Wehage, H.: Mathematisches Modell einer optimal gesteuerten Abkühlung von Profilstählen in Kühlstrecken, Technische Universität Chemnitz, Preprint 98-6

[Leb84] Leblond, J. B., Devaux, J.: A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effect of austenite grain size, Acta Met. 32, pp. 137 – 146.

[Mar83] Marsden, J. E., Hughes, J. R.: Mathematical foundations of elasticity, Engelwood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall

[Mit87] Mitter, W.: Umwandlungsplastizität und ihre Berücksichtigung bei der Berechnung von Eigenspannungen, Materialkundlich-technische Reihe 7, Gebr. Borntraeger, Berlin, Stuttgart

[Nol73] Noll, W.: Lectures on the foundations of continuum mechanics and thermodynamics, Arch, Rat. Mech. Ana. 52, pp. 62 – 92

[Sil97] Silhavý, M.: The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media, Springer-Verlag

[Trö99] Tröltzsch, F., Unger, A.: Fast solution of optimal control problems in the selective cooling of steel, Technische Universität Chemnitz, SFB393/99-07

[Tru66] Truesdell, C. A.: The elements of continuum mechanics, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg

[Ver87] Verdi, C., Visintin, A.: A mathematical model of the austenite-pearlite transformation in plain steel based on the Scheil's additivity rule, Acta Metall. 35 (11) pp. 2711-2717

[Vis87] Visintin, A.: Mathematical models of solid-solid phase transitions in steel, IMA J. Appl. Math. 39, pp. 143- 157

[Wil98] Wilmanski, K.: Thermomechanics of Continua, Springer-Verlag

Berichte aus der Technomathematik ISSN 1435-7968

http://www.math.uni-bremen.de/zetem/berichte.html
- Vertrieb durch den Autor –

Reports **Stand: 16. März 2000**

98-01. Peter Benner, Heike Faßbender:
An Implicitly Restarted Symplectic Lanczos Method for the Symplectic Eigenvalue Problem, Juli 1998.

98-02. Heike Faßbender:
Sliding Window Schemes for Discrete Least-Squares Approximation by Trigonometric Polynomials, Juli 1998.

98-03. Peter Benner, Maribel Castillo, Enrique S. Quintana Ortí:
Parallel Partial Stabilizing Algorithms for Large Linear Control Systems, Juli 1998.

98-04. Peter Benner:
Computational Methods for Linear-Quadratic Optimization, August 1998.

98-05. Peter Benner, Ralph Byers, Enrique S. Quintana Ortí, Gregorio Quintana Ortí:
Solving Algebraic Riccati Equations on Parallel Computers Using Newton's Method with Exact Line Search, August 1998.

98-06. Lars Grüne, Fabian Wirth:
On the rate of convergence of infinite horizon discounted optimal value functions, November 1998.

98-07. Peter Benner, Volker Mehrmann, Hongguo Xu:
A Note on the Numerical Solution of Complex Hamiltonian and Skew-Hamiltonian Eigenvalue Problems, November 1998.

98-08. Eberhard Bänsch, Burkhard Höhn:
Numerical simulation of a silicon floating zone with a free capillary surface, Dezember 1998.

99-01. Heike Faßbender:
The Parameterized SR Algorithm for Symplectic (Butterfly) Matrices, Februar 1999.

99-02. Heike Faßbender:
Error Analysis of the symplectic Lanczos Method for the symplectic Eigenvalue Problem, März 1999.

99-03. Eberhard Bänsch, Alfred Schmidt:
Simulation of dendritic crystal growth with thermal convection, März 1999.

99-04. Eberhard Bänsch:
Finite element discretization of the Navier-Stokes equations with a free capillary surface, März 1999.

99-05. Peter Benner:
Mathematik in der Berufspraxis, Juli 1999.

99-06. Andrew D.B. Paice, Fabian R. Wirth:
Robustness of nonlinear systems and their domains of attraction, August 1999.

99-07. Peter Benner, Enrique S. Quintana Ortí, Gregorio Quintana Ortí:
Balanced Truncation Model Reduction of Large-Scale Dense Systems on Parallel Computers, September 1999.

99-08. Ronald Stöver:
Collocation methods for solving linear differential-algebraic boundary value problems, September 1999.

99-09. Huseyin Akcay:
Modelling with Orthonormal Basis Functions, September 1999.

99-10. Heike Faßbender, D. Steven Mackey, Niloufer Mackey:
Hamilton and Jacobi come full circle: Jacobi algorithms for structured Hamiltonian eigenproblems, Oktober 1999.

99-11. Peter Benner, Vincente Hernández, Antonio Pastor:
On the Kleinman Iteration for Nonstabilizable System, Oktober 1999.

99-12. Peter Benner, Heike Faßbender:
A Hybrid Method for the Numerical Solution of Discrete-Time Algebraic Riccati Equations, November 1999.

99-13. Peter Benner, Enrique S. Quintana Ortí, Gregorio Quintana Ortí:
Numerical Solution of Schur Stable Linear Matrix Equations on Multicomputers, November 1999.

99-14. Eberhard Bänsch, Karol Mikula:
Adaptivity in 3D Image Processing, Dezember 1999.

00-01. Peter Benner, Volker Mehrmann, Hongguo Xu:
Perturbation Analysis for the Eigenvalue Problem of a Formal Product of Matrices, Januar 2000.

00-02. Ziping Huang:
Finite Element Method for Mixed Problems with Penalty, Januar 2000.

00-03. Gianfrancesco Martinico:
Recursive mesh refinement in 3D, Februar 2000.

00-04. Eberhard Bänsch, Christoph Egbers, Oliver Meincke, Nicoleta Scurtu:
Taylor-Couette System with Asymmetric Boundary Conditions, Februar 2000.

00-05. Peter Benner:
Symplectic Balancing of Hamiltonian Matrices, Februar 2000.

00-06. Fabio Camilli, Lars Grüne, Fabian Wirth:
A regularization of Zubov's equation for robust domains of attraction,, März 2000.