UNIVERSITÄT BREMEN

Zentrum für Technomathematik

Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

Ringvorlesung: Distortion Engineering 2
Kontinuumsmechanische Modellierung des Materialverhaltens von Stahl unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen

Michael Wolff

Report 02-13

Berichte aus der Technomathematik

Report 02-13 **Dezember 2002**

Ringvorlesung: Distortion Engineering 2, 18.12.02

Kontinuumsmechanische Modellierung des Materialverhaltens von Stahl unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen

Michael Wolff, Zentrum für Technomathematik, Fachbereich 3

1. Einiges zur Mechanik der Festkörper und Mischungen
    1.1. Hookesches Gesetz
    1.2. Verzerrungs- und Spannungszustand
    1.3. Stahl als Mischung seiner Phasen
    1.4. Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl
    1.5. Volumenänderung infolge von Dichteänderungen
2. Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen
    2.1. Naviersche Gleichungen der linearen Elastizitätstheorie
    2.2. Lineare Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen
3. Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität
    3.1. Zur phänomenologischen Beschreibung der Umwandlungsplastizität
    3.2. Mathematisches Modell
    3.3. Vereinfachtes Modell für einen Abschreckversuch
4. Abschließende Bemerkungen und Ausblick

Ziel dieser Vorlesung ist es, zu zeigen, wie eine Modellierung des Materialverhaltens von Stahl unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen aus der Annahme der Grundprinzipien der Kontinuumsmechanik durch Hinzunahme von speziellen Materialgesetzen möglich wird. Wir beschränken uns dabei auf die sogenannten „kleinen“ Deformationen. Es soll auch deutlich werden, wie sukzessive weitere Effekte in die Modellierung aufgenommen werden können.

1. Einiges zur Mechanik der Festkörper

1.1. Hookesches Gesetz

Wir beginnen mit dem klassischen Zugversuch eines zylindrischen Stabes, z.B. mit rechteckigem Querschnitt, der in Längsrichtung mit einer nicht zu großen Kraft gezogen und damit deformiert wird. Der experimentell zu beobachtende

Zusammenhang zwischen wirkender Kraft F und Längenänderung Δl wird oft hinreichend genau durch das Hookesche Gesetzt beschrieben:

(1) $$\frac{F}{A} = E \frac{\Delta l}{l}.$$

Dabei sind A der Flächeninhalt des (als konstant angenommenen) Querschnitts des Stabes, l seine ursprüngliche Länge, Δl die hervorgerufene Längenänderung und E eine positive Materialkonstante (Erfahrung!), der Youngsche Elastizitätsmodul.
Das Hookesche Gesetz in der Form (1) erweist sich als verallgemeinerungsfähig für allgemeinere Situationen. Werden die Begriffe

$$\text{Spannung} := \frac{\text{Kraft}}{\text{Fläche}} \qquad \text{und}$$

$$\text{Verzerrung} := \frac{\text{Längenänderung}}{\text{Länge}}$$

eingeführt, so erhalten wir die Interpretation des Hookeschen Gesetzes zu

(2) Spannung = Young-Modul $\times$ Verzerrung.

(Für Verzerrung wird auch oft Deformation gesagt.)
Außerdem ergibt das Experiment: Wird der Balken unter der Wirkung der Kraft verlängert, so verringern sich seine Quermaße. Dieser Zusammenhang wird durch die folgende Formel erfaßt:

(3) $$\frac{\Delta a}{a} = \frac{\Delta b}{b} = - \nu \frac{\Delta l}{l}$$

Dabei sind a und b die Kantenlängen des Querschnitts. Die positive Konstante ν wird gewöhnlich Poisson-Zahl genannt. (Es gilt $0 < \nu < \frac{1}{2}$)

Die beiden Konstanten E und ν beschreiben vollständig das elastische Verhalten eines homogenen isotropen Materials.
In allgemeiner Situation besitzt ein Körper in jedem Punkt einen unterschiedlichen Verzerrungs- und Spannungszustand. Die Modellierung dieses Zustandes führt auf partielle Differentialgleichungen. (Lit. z.B. [Fey91])

1.2. Verzerrungs- und Spannungszustand

Wir wollen jetzt kurz der Frage nachgehen, wie der Zusammenhang zwischen Spannung und Verzerrung (Dehnung) im allgemeinen Fall ist.
Es wird nötig, in jedem Punkt eines Körpers den Verzerrungs- und Spannungszustand zu beschreiben. Wir bleiben vorerst bei dem vertrauten Balken.

Wir führen ein dreidimensionales kartesisches Koordinatensystem so ein, daß dieser Balken mit einer Ecke im Nullpunkt und selbst ganz im ersten Oktanten liegt.

Die einzelnen Punkte des Balkens können durch Ortsvektoren $r = r(x, y, z)$ dargestellt werden (Lage in der Referenzkonfiguration). Wird der Balken einer Deformation unterworfen, so läßt sich jeder Körperpunkt in seiner neuen Lage durch den Ortsvektor $r' = r'(x, y, z)$ darstellen. Die Differenz

(1) $$u(x, y, z) := r'(x, y, z) - r(x, y, z)$$

wird Verschiebungsvektor genannt, seine Komponenten mit u_x, u_y, u_z bezeichnet.

Wir nehmen zuerst eine homogene Deformation an.

Dann gilt wegen der Ähnlichkeit

(2) $$\frac{u_x}{x} = \frac{\Delta l_x}{l_x} \qquad \text{für alle } x \in [0, l_x],$$

dabei ist l_x die Länge in x-Richtung. Den Proportionalitätsfaktor $\frac{\Delta l_x}{l_x}$ bezeichnen wir mit ε_{xx} und erhalten dann

(3) $$u_x = \varepsilon_{xx}\, x.$$

Im allgemeinen ist dieser „Verzerrungsfaktor“ nicht konstant, und u_x ist vom einzelnen Punkt des Körpers abhängig. Das führt zu dem allgemeineren Ansatz

(4) $$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}.$$

Analog gilt bezüglich der Richtungen y und z:

(5) $$\varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \qquad \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}.$$

Wir nehmen nun an, daß auf der „Oberseite“ des Quaders eine Scherkraft parallel zu dieser wirke (in Richtung der x-Achse). Dann ist die Verschiebung u_x proportional der z-Koordinate, also

(6) $$u_x = \frac{\theta}{2} z,$$

wobei θ der „Verschiebungswinkel“ ist. Es wird nur eine Hälfte genommen, um die andere aus Symmetriegründen bei u_z zu berücksichtigen. Also

(7) $$u_z = \frac{\theta}{2} x.$$

Wir schreiben (6) und (7) um als

(8) $$u_x = \varepsilon_{xz}\, z, \qquad u_z = \varepsilon_{zx}\, x$$

mit

(9) $$\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = \frac{\theta}{2}.$$

Für den Fall der allgemeinen, nichthomogenen Deformation nehmen wir wieder die partiellen Ableitungen. Um die einfachen starren Drehungen aus dem Deformationsverhalten auszusondern, benutzen wir die Symmetrische Form, also

(10) $$\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}\right)$$

und analog für die anderen Index-Kombinationen.

Wir erhalten also einen symmetrischen Tensor 2. Ordnung zur Beschreibung des lokalen Verzerrungszustandes in einem Körperpunkt. Schreiben wir die Indices 1, 2, 3 anstelle von x, y, z, so erhalten wir die kompakte Form

(11) $$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \qquad \text{mit } i, j \text{ gleich } 1, 2 \text{ oder } 3.$$

Dieser Tensor wird oft linearisierter Greenscher Verzerrungstensor genannt. Bei den obigen Ausführungen haben wir stillschweigend vorausgesetzt, dass die Ortsableitungen der Verschiebungen „klein“ sind. Ist das nicht der Fall. gestaltet sich die Modellierung aufwendiger, man gelang zum Greenschen Verzerrungstensor, der sogenannte „endliche“ Deformationen beschreibt. Wir lösen uns jetzt von dem Balken und nehmen an, dass der zu betrachtende Körper eine recht allgemeine Punktmenge des dreidimensionalen Raums ausfüllt. Für unsere Zwecke reicht es aus, den Körper mit dieser seiner sogenannten Referenzkonfiguration zu identfizieren. Eine exakte mathematische Darlegung dieser Dinge ist sehr aufwendig ([Mar83], [Hau00]). Wir müssen noch den lokalen Spannungszustand beschreiben.

Wir stellen uns eine kleine ebene Fläche mit Flächeninhalt A vor, die rechtwinklig zur x-Achse durch einen Körperpunkt (x, y, z) geht. Stellen wir uns weiter vor, daß der Körper längs dieses Flächenstücks „aufgeschnitten“ ist. Vom Körper wirkt dann eine Kraft auf diese Fläche. Diese Kraft läßt sich in drei Komponenten bezüglich der Koordinatenachsen zerlegen, also F_{xx}, F_{xy}, F_{xz}.

Die Quotienten dieser Kraftkomponenten mit dem Flächeninhalt haben den Charakter von Spannungen, nämlich

(12) $$S_{xx} := \frac{F_{xx}}{A}, \qquad S_{xy} := \frac{F_{xy}}{A}, \qquad S_{xz} := \frac{F_{xz}}{A}.$$

Nun wird angenommen, daß diese Größen einen Grenzwert besitzen, falls der Flächeninhalt gegen null geht. Wir bezeichnen diese Grenzwerte mit

(13) $$\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}.$$

Analog verfahren wir mit den anderen beiden Richtungen. Wir erhalten einen Tensor 2. Ordnung, den Cauchyschen Spannungstensor

(14) σ_{ij} für i, j gleich 1, 2 oder 3,

der den Spannungszustand in einem Körperpunkt beschreibt. Aus der Erhaltung des Drehimpulses folgt die Symmetrie des Cauchyschen Spannungstensors.

Aus der Impulsbilanz folgt als lokale Bilanzgleichung die Bewegungsgleichung

(15) $$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \operatorname{div} \sigma = f \qquad \text{in } \Omega \times]0, T[,$$

dabei sind ρ die Massendichte, f die Dichte der Massenkräfte und $T > 0$ ein Zeitpunkt, bis zu dem wir den Prozess betrachten wollen. Wir bleiben wieder bei kleinen Deformationen.

Diese Bewegungsgleichung gilt für alle Körper, ob flüssig oder fest, elastisch oder nicht. Schon deswegen muß sie durch einen materialspezifischen Zusammenhang ergänzt werden.

Für eine ausführliche Einführung und Herleitung der angesprochenen Zusammenhänge sei auf die Literatur verwiesen (z.B. [Fey91], [Alt94], [Hau00]).

1.3. Stahl als Mischung seiner Phasen

Sei eine Mischung aus $n \geq 2$ Komponenten gegeben. Wir betrachten hier Stahl als eine Mischung seiner meist als Phasen bezeichneten Gefügearten Austenit, Perlit, Martensit usw. In der Mischungstheorie wird angenommen, dass die Komponenten in jedem Körperpunkt simultan präsent sein können. Wir benutzen hier die Begriffe Phase und Komponente synonym. Bei Stahl schließen wir eine Diffusion der Komponenten (Phasen) aus, sie wandeln sich ineinander um und verbleiben am Ort. Die für das Verständnis der Umwandlungen wichtige Diffusion des Kohlenstoffs wird in diesem Modell nicht berücksichtigt. Deshalb besitzen in diesem hier betrachteten Fall die Komponenten keine von null verschiedenen Diffusionsgeschwindigkeiten und die makroskopische Modellierung von Stahl ist ein Spezialfall der allgemeinen Mischungstheorie (z.B. [Ber99]). Wir stellen einige wichtige Begriffe bereit.

Wir betrachten ein (Kontroll-)Volumen V mit der Masse m. Zuerst nehmen wir an, dass die Mischung homogen sei Dann ist die (Gesamt-)Dichte ρ gemäß

(1) $$\rho := \frac{m}{V}$$

definiert. In dem Volumen V nehme die i-te Phase (oder Komponente) das Volumen V_i ein und besitze die Masse m_i. Dann sind der Volumenanteil p_i, der Massenanteil χ_i sowie die Dichte ρ_i der i-ten Phase entsprechend durch

$$(2) \qquad p_i := \frac{V_i}{V}, \qquad \chi_i := \frac{m_i}{m}, \qquad \rho_i := \frac{m_i}{V_i}$$

definiert. Für inhomogene Mischungen werden anhand von (1), (2) die Größen ρ, p_i, χ_i, ρ_i in jedem Körperpunkt erklärt, indem jeweils der Grenzwert dieser Größen für ein sich auf einen Punkt zusammenziehendes Volumen genommen wird. (Die Existenz dieser Grenzwerte sei angenommen.)

Bekanntlich gelten dann die folgende Bilanzen (in allen Punkten und zu allen Zeiten)

$$(3) \qquad \sum_{i=1}^{n} p_i = 1, \qquad \sum_{i=1}^{n} \chi_i = 1; \qquad \forall\, i = 1, \ldots, n : \qquad p_i \geq 0,\ \chi_i \geq 0.$$

Aus (1), (2) folgen der Zusammenhang zwischen Massenanteilen und Volumenanteilen

$$(4) \qquad \chi_i = \frac{\rho_i}{\rho}\, p_i$$

sowie die Mischungsregeln für die Dichte und die reziproke Dichte

$$(5) \qquad \rho = \sum_{i=1}^{n} \rho_i\, p_i,$$

$$(6) \qquad \frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\rho_i}\, \chi_i.$$

Die Produkte $\rho_i\, p_i$ werden auch Partialdichten genannt. Aus dem Bisherigen folgt, daß die Kenntnis der Dichten ρ und ρ_i ausreicht, um mit Hilfe von (4) Volumenanteile und Massenanteile ineinander umzurechnen. Der Vorteil der Massen- gegenüber den Volumenanteilen besteht jedoch darin, daß diese weder von der Temperatur noch von umwandlungsfreien mechanischen Verzerrungen abhängig sind, da die anteiligen Massen im Kontrollvolumen sich nicht verändern, solange keine Phasenumwandlungen auftreten. Dagegen können sich die Volumenanteile allein durch elastische Verzerrungen ändern, falls sich die elastischen Module der einzelnen Phasen voneinander unterscheiden. Aus der Beziehung (4) folgt dann für verschiedene Temperaturen und Verzerrungen – solange keine Umwandlungen stattfinden –

$$(7) \qquad \chi_i = \frac{\rho_i(\theta_1, \varepsilon_1)}{\rho(\theta_1, \varepsilon_1)}\, p_i(\theta_1, \varepsilon_1) = \frac{\rho_i(\theta_2, \varepsilon_2)}{\rho(\theta_2, \varepsilon_2)}\, p_i(\theta_2, \varepsilon_2).$$

(Dabei gehören entsprechend θ_1, ε_1 bzw. θ_2, ε_2 zu einem Zustand.)

Beim Stahl unterscheiden sich die Dichten der verschiedenen Phasen wenig, so dass beim Stahl die Unterschiede zwischen Massen- und Volumenanteilen unter einem Prozent liegen /Vgl. [Wol02d]). Während in den Materialwissenschaften in der Regel mit den Volumenanteilen gearbeitet wird, geben wir in dieser Vorlesung den Massenanteilen den Vorzug. Nach der vorstehenden Bemerkung begehen wir keinen großen Fehler, wenn wir z.B. die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung für die Massenanteile benutzen.

1.4. Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl

Wir wollen hier kurz aus mathematischer Sicht auf die Phasentransformationen im Stahl eingehen. (Literatur: [Mac92] allgemeine Einführung, [Hou86], [Fis96], [Den97], [Hun99, 02] spezielle Arbeiten) Wie bereits ausgeführt, betrachten wir Stahl als eine Mischung seiner Phasen (Austenit, Perlit, Martensit, ...), ohne Diffusion dieser Phasen untereinander.

Wir stellen uns vor, dass wir es mit n $(n \geq 2)$ verschiedenen Phasen zu tun haben.

Ihre Massenanteile (in guter Näherung gleich den Volumenanteilen) seien wie oben mit χ_i bezeichnet. Dann gilt selbstverständlich die Bilanzgleichung (3) aus 1.3. Um die Phasentransformationen zu modellieren, benutzen wir den folgenden Ansatz als System von gewöhnlichen Diffenrentialgleichungen

$$(1) \qquad \frac{d}{dt}\chi_i = \Psi_i(\theta, \frac{d}{dt}\theta, \chi, \sigma) \qquad\qquad i = 1, ..., n,$$

wobei für die Produktionsraten Ψ_i wegen der Bilanzgleichung (3) aus 1.3. gelten muss

$$(2) \qquad \sum_{i=1}^{n} \Psi_i(\theta, \frac{d}{dt}\theta, \chi, \sigma) = 0,$$

und zwar für alle möglichen Argumente θ, $\frac{d}{dt}\theta$, χ und σ. In (1) drücken wir aus, dass jede Phase χ_i ihre Produktionsrate besitzt, die von der Temperatur, ihrer Zeitableitung, von den Phasen selbst sowie der Spannung (s. z.B. [Ahr02]) abhängt. Hier geht die durch Experiment und theoretische Untersuchung gewonnene Kenntnis über die Phasenumwandlungen beim Stahl ein. Die eigentliche Schwierigkeit liegt darin, für konkrete Situationen und Stahlsorten die Gestalt der Funktionen Ψ_i anzugeben. So wäre es z.B. möglich, sich für die Umwandlung von Austenit zu Perlit

für (1) die Johnson-Mehl-Avrami-Differentialgleichung mit geeigneter Modifikation vorzustellen. Weiter unten geben wir ein konkretes Beispiel

1.5. Volumenänderung infolge von Dichteänderungen

In der Kontinuumsmechanik mit Phasenumwandlungen ist es nötig, den Anteil der Verzerrungen, der durch Dichteänderungen hervorgerufen wird, zu bestimmen.

Wir betrachten ein (dreidimensionales) Kontrollvolumen V_0 mit der Dichte ρ_0, das (z.B. infolge von Phasen- und / oder Temperaturänderungen) sein Volumen auf V mit der neuen Dichte ρ ändert. Nehmen wir an, dass sich die Masse des Kontrollvolumens nicht ändert, so gilt offenbar

(1) $$\frac{V - V_0}{V_0} = \frac{\rho_0 - \rho}{\rho}.$$

Sei das Kontrollvolumen V_0 ein Würfel der Kantenlänge l. Bei allgemein angenommener Isotropie der Volumenänderung gilt dann

(2) $$V = (l + \Delta l)^3,$$

wobei Δl die Längenänderung jeder einzelnen Kante ist. Somit erhalten wir

(3) $$\frac{V - V_0}{V_0} = \frac{(l + \Delta l)^3 - l^3}{l^3} = 3\,\frac{\Delta l}{l} + 3\,(\frac{\Delta l}{l})^2 + (\frac{\Delta l}{l})^3.$$

Aus (1) und (3) erhalten wir

(4) $$\frac{\Delta l}{l} = \sqrt[3]{1 + \frac{\rho_0 - \rho}{\rho}} - 1,$$

wie sich leicht nachprüfen lässt. Für Materialien mit „kleinen“ Dichteänderungen – wie z.B. bei Phasenumwandlungen im Stahl - erhalten wir aus (4)

(5) $$\frac{\Delta l}{l} = \frac{1}{3}\,\frac{\rho_0 - \rho}{\rho}$$

für die relative Längenänderung in jeder Richtung.

2. Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen

2.1. Naviersche Gleichungen der linearen Elastizitätstheorie

Der Zusammenhang zwischen Spannungs- und Verzerrungstensor ist materialspezifisch. Im einfachsten Fall wird angenommen, daß dieser linear ist und dass keine thermischen oder Umwandlungseffekte auftreten, also

(1) $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\,\varepsilon_{kl}$ (Summenkonvention!)

Der vierstufige Tensor C wird Elasitizitäts-Tensor, Steifheits-Tensor oder Steifheits-Matrix genannt und besitzt 81 Komponenten, diese sind aus Symmetriegründen durch maximal 21 verschiedene unabhängige Größen determiniert. Bei einem homogenen Material sind diese Größen ortsunabhängig. Bei inhomogenen Materialien können sie Funktionen aller drei Raumkoordinaten sein.

Die Gleichung (1) verallgemeinert das Hookesche Gesetz (1) aus 1.1.

Bei isotropen Materialien reduzieren sich die 21 unabhängigen Größen auf zwei, die Lamé-Koeffizienten μ und λ. Aus (1) wird

(2) $$\sigma_{ij} = 2\mu\, \varepsilon_{ij} + \lambda\, tr(\varepsilon)\, \delta_{ij},$$

wobei $tr(\varepsilon) := \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$ die Spur von ε und δ der Einheitstensor sind.

Die Lamé-Koeffizienten stehen mit dem Young-Modul und der Poisson-Zahl in folgendem Zusammenhang

(3) $$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \qquad \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}.$$

Im Gegensatz zum Balken unter homogener Deformation sind Spannungs- und Verzerrungstensor in einem Punkt von den entsprechenden Zuständen in den anderen Körperpunkten abhängig. Wir können nicht unmittelbar mit der Gleichung (2) rechnen, sondern müssen Rand-Anfangswert-Aufgaben für partielle Differentialgleichungen lösen.

Wir berücksichtigen den Zusammenhang zwischen Verschiebungen und Verzerrungen (11) aus 1.2., setzen das Materialgesetz (2) in die Bewegungsgleichung (15) aus 1.2. ein und erhalten die Navierschen (auch Lamésche) Gleichungen der linearen Elastizitätstheorie (für konstante μ, λ)

(4) $$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \mu\, \Delta u - (\lambda + \mu)\, grad(div\, u) = f \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$$

Zu (4) kommen Anfangsbedingungen für u und $\frac{\partial u}{\partial t}$ hinzu, also

(5) $$u(x, 0) = u_0, \qquad \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = u_1 \qquad \text{in } \Omega,$$

(Ω steht für den Körper) Desweiteren müssen wir Randbedingungen für die Verschiebungen und / oder Spannungen hinzufügen. Im Falle des reinen Spannungsproblems (d.h., Verschiebungen werden auf dem Rand nicht vorgegeben)

(6) $$\sigma\, n_{\partial\Omega} = g \qquad \text{auf } \partial\Omega\times]0, T[$$

(σ Spannungstensor gemäß (2), $n_{\partial\Omega}$ äußerer Normalenvektor, g Kraftdichte auf der Oberfläche)

Die Grundaufgabe der linearen Elastizitätstheorie besteht darin, zu gegebenen f, g, u_0, u_1 sowie zu gegebenen Lamé-Konstanten μ, λ die Aufgabe (4) – (6) zu lösen, d.h., das von Ort und Zeit abhängige Verschiebungsfeld u zu bestimmen, also die Bewegung des gesamten Körpers zu bestimmen. Literatur: [Cha94] aus mechanischer Sicht, [Cia88] aus mathematischer Sicht sowie auch [Fey91], [Alt94], [Hau00], [Mül73],

Bekanntlich spielen nicht nur beim Stahl thermische und Umwandlungseffekte eine wesentliche Rolle. Eine Erweiterung des Modells ist also in vielen Fällen unumgänglich.

2.2. Lineare Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen

Die klassischen Duhamel-Neumann-Beziehungen der linearen isotropen Thermoelastizität werden in der Weise modifiziert, dass sie die Verzerrungen integrieren, die aus Änderungen der Phasen entstehen:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E}\sigma_{ij} - \frac{\nu}{E}\,\mathrm{tr}(\sigma)\,\delta_{ij} + \alpha\,(\theta - \theta_0)\,\delta_{ij} + \frac{1}{3}\frac{\rho_0 - \rho(\theta_0)}{\rho(\theta_0)}\,\delta_{ij}, \tag{1}$$

wobei ρ_0 die Dichte der Referenzkonfiguration (also bezogen auf θ_0) und $\rho(\theta_0)$ die Dichte des aktuellen Phasengemischs, aber bezogen auf die Referenztemperatur θ_0, sind. Wir wollen mit dem Ansatz (1) die thermischen und die durch Umwandlungen bedingten Verzerrungen auseinander halten.

Weiter ist α der Wärmeausdehungskoeffizient (bezogen auf θ_0). Für Materialien ohne Mischungskomponenten (Phasen) fällt der letzte Term in (1) weg, und man erhält die klassischen Duhamel-Neumann-Beziehungen der linearen Thermoelastizität.

Wir bemerken, dass in diesem Modell die durch Temperatur- und Phasenänderungen hervorgerufenen Verzerrungen und Spannungen isotrop sind.

Durch Auflösen der Gleichung (1) nach dem Spannungstensor σ erhalten wir

$$\sigma = 2\mu\,\varepsilon + \lambda(\mathrm{tr}\,\varepsilon)\,\delta - 3K\alpha\,(\theta - \theta_0)\,\delta - K\frac{\rho_0 - \rho(\theta_0)}{\rho(\theta_0)}\,\delta \tag{2}$$

mit dem Kompressionsmodul K gemäß

$$K = \frac{E}{3(1-2\nu)}. \tag{3}$$

Wir haben die Möglichkeit, den letzten Term in (1) bzw. (2) entweder mittels (5) aus 1.3. durch die Volumenanteile oder mittels (6) aus 1.3. durch die Massenanteile auszudrücken. Jede einzelne Phase kann ihre individuellen, temperaturabhängigen Materialparameter besitzen. Gewöhnlich werden diese Größen für die Mischung aus den entsprechenden Größen für die Komponenten nach Mischungsregeln, meist der linearen bezüglich der Massen- oder Volumenanteile angesetzt.

Da die Volumenanteile von der Temperatur und den Verzerrungen abhängen (Vgl. (7) aus 1.3.), geben wir den Massenanteilen den Vorzug. Danach führen wir die entsprechenden Betrachtungen mit Volumenanteilen durch. Es gilt offenbar gemäß der Formel (6) aus 1.3.

$$(4) \qquad \frac{\rho_0 - \rho(\theta_0)}{\rho(\theta_0)} = \Big(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\rho_i(\theta_0)} \chi_i \Big) \Big(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\rho_i(\theta_0)} \chi_{0i} \Big)^{-1} - 1,$$

wobei χ_{0i} die Anfangsmassenanteile sind. Aus den Beziehungen (2) und (4) folgt das Materialgesetz für die (isotrope) lineare Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen (also für Körper, die Mischungen sind) in der Abhängigkeit von den Verschiebungen u, der Temperatur θ sowie der Massenanteile χ:

$$(5) \qquad \sigma = 2\mu\,\varepsilon + \lambda(\operatorname{tr}\varepsilon)\,\delta - 3K\alpha\,(\theta - \theta_0)\,\delta - K\Big\{ \Big(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\rho_i(\theta_0)} \chi_i \Big) \Big(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\rho_i(\theta_0)} \chi_{0i} \Big)^{-1} - 1 \Big\}\,\delta$$

Analog zu (4) erhalten wir mittels (5) aus 1.3. die Darstellung mittels Volumenanteilen zu

$$(6) \qquad \frac{\rho_0 - \rho(\theta_0)}{\rho(\theta_0)} = \Big(\sum_{i=1}^{n} \rho_i(\theta_0)\, p_{0i}(\theta_0) \Big) \Big(\sum_{i=1}^{n} \rho_i(\theta_0)\, p_i(\theta) \Big)^{-1} - 1,$$

wobei p_{0i} die Anfangsvolumenanteile sind. Die Beziehungen (3) aus 1.3. werden für die Anfangsmassen- bzw. – volumenanteile vorausgesetzt. Analog erhalten wir aus (2) und (6) das Materialgesetz mit den Volumenanteilen

$$(7) \quad \sigma = 2\mu\,\varepsilon + \lambda(\operatorname{tr}\varepsilon)\,\delta - 3K\alpha\,(\theta - \theta_0)\,\delta - K\Big\{ \Big(\sum_{i=1}^{n} \rho_i(\theta_0)\, p_{0i}(\theta_0) \Big) \Big(\sum_{i=1}^{n} \rho_i(\theta_0)\, p_i(\theta) \Big)^{-1} - 1 \Big\}\,\delta.$$

Während die Beziehung (5) bezüglich der χ_i linear ist (wenn wir von der Abhängigkeit der Materialparameter von χ absehen), ist es (7) bezüglich der p_i nicht. Hierin liegt ein weiterer Vorteil bei der Arbeit mit Massenanteilen.

Setzen wir den Ausdruck für den Spannungstensor in die Bewegungsgleichung (15) aus 1.2. ein, so erhalten wir unter Beachtung des Zusammenhangs zwischen ε und

u ((11) aus 1.2.) die spezielle Bewegungsgleichung für die lineare Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen

$$(8)\qquad \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \mathrm{div}(2\mu\,\varepsilon + \lambda(\mathrm{tr}\,\varepsilon)\,\delta) =$$

$$= -\,\mathrm{div}(3K\alpha\,(\theta-\theta_0)\,\delta) - \mathrm{div}\{\,K\,\{\,(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\rho_i(\theta_0)}\chi_i\,)\,(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\rho_i(\theta_0)}\chi_{0i}\,)^{-1}-1\}\,\delta\,\} + f$$

in $\Omega\times]0, T[$.

Wie in der Thermoelastizität notwendig, fügen wir die Wärmeleitungsgleichung hinzu. Diese lautet, ergänzt durch Quellen, die aus den Phasenumwandlungen resultieren:

$$(9)\qquad \rho\, c_e \frac{\partial}{\partial t}\theta - \mathrm{div}(\kappa\nabla\theta) = \sigma \bullet\bullet \nabla\frac{du}{dt} + \rho\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial e}{\partial\chi_i}\frac{\partial\chi_i}{\partial t} + r \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$$

Hierbei sind c_e spezifische Wärme (Wärmekapazität), κ Wärmeleitfähigkeit, e spezifische innere Energie, r Volumendichte der äußeren Wärmequellen.

(Die sogenannte Überschiebung von zwei quadratischen Matrizen A und B wird durch $A \bullet\bullet B := \mathrm{tr}(A\,B^T)$ erklärt, wobei $A\,B^T$ das Matrizenprodukt von A mit B transponiert ist.)

Zusammen mit den Umwandlungsgesetzen (1) aus 1.4. ergeben die Gleichungen (8) und (9) ein System zur Bestimmung der Felder der Verschiebungen, der Temperatur und der Phasen, wenn noch geeignete Anfangs- und Randbedingungen für diese Größen hinzugefügt werden. Wir tun das weiter unten für eine konkrete Abschrecksituation, um nach Vereinfachungen die Übersicht zu erhöhen.

3. Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität

3.1. Zur phänomenologischen Beschreibung der Umwandlungsplastizität

Zum Phänomen der Umwandlungsplastizität selbst verweisen wir auf die umfangreiche Literatur (z.B. [Fis96, 99], [Mit87], [Den97]). Zuerst wurde die Umwandlungsplastizität für den einachsigen Zugversuch bei konstanter Belastung und einer Phasenumwandlung beobachtet und modelliert. In der Folge wurden der mehrdimensionale Fall unter nichtkonstanter Belastung modelliert. Bei der Bildung einer Phase (z.B. Martensit durch Abschrecken) wurde folgender Zusammenhang vorgeschlagen

$$(1)\qquad \frac{d}{dt}\varepsilon_{up} = \frac{3}{2}K_{up}\,\sigma^*\,\Phi'(\chi)\,\chi'$$

wobei ε_{up} ein durch die Umwandlunsplastizität hervorgerufener zusätzlicher

linearisierter Verzerrungsstensors ist. Die Bezeichnung up rührt her von „Umwandlungsplastizität“, oft auch als „transfomation induced plastisity“ bezeichnet. Weiter sind σ^* der Deviator des Cauchyschen Spannungstensors σ, also

(2) $\sigma^* := \sigma - \frac{1}{3} tr(\sigma)\, \delta$ (für drei Raumdimensionen),

χ die sich bildende Phase, K_{up} eine Materialkonstante und Φ eine monotone Funktion auf $[0, 1]$ mit $\Phi(0) = 0$ und $\Phi(1) = 1$. Die Konstante K wird z.B. angegeben zu

(3) $K_{up} = 4{,}2 \cdot 10^{-11} \frac{m\, s^2}{Kg}$

für Stahl 42CrMo6 (Fischer), für die Funktion Φ werden von den Autoren verschiedene Varianten vorgeschlagen, eine besonders einfache ist die von Tanaker

(4) $\Phi(s) := s$.

Der Ansatz (1) läßt sich auf n Phasen erweitern zu (unter der Annahme (4))

(5) $$\frac{d}{dt} \varepsilon_{up} = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^{n} K_{up,i}\, \chi_i{}'\, H(\chi_i{}')\, \sigma^*$$

mit phasenindividuellen $K_{up,i}$. (‘ steht für die Ableitung nach der Zeit.) Mit der Heaviside-Funktion H berücksichtigen wir nur jeweils die Bildung einer Phase (und nicht deren Abnahme.) Verallgemeinerungen von (5) sind möglich (z.B. [Fis99]).

Unter der Voraussetzung $\varepsilon_{up}(0) = 0$, (folgt aus Annahme des Modells) folgt aus (5) die Beziehung

(6) $$\varepsilon_{up}(t) = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^{n} K_{up,i} \int_0^t \chi_i{}'\, H(\chi_i{}')\, \sigma^*\, ds.$$

3.2. Mathematisches Modell

Die Aufgabe besteht jetzt darin, das soeben vorgestellte Modell der UP ((6) in 3.1.) in das bisherige Modell „Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen“ einzubauen und dieses damit zu erweitern. Wir beschränken uns wiederum auf den Fall „kleiner“ Deformationen. Das scheint z.B. dann gerechtfertigt, wenn von außen nicht massiv mechanische Energie – wie etwa beim Walzen oder Schmieden - eingetragen wird. Die Effekte der Umwandlungsplastizität führen oft zu unerwünschtem Verzug von Bauteilen, können meist aber trotzdem als „klein“ gelten.

Die entscheidende Idee besteht darin, dass wir den linearisierten Verzerrungstensor ε in eine Summe zerlegen, also

(1) $\varepsilon = \varepsilon_{th} + \varepsilon_{up}$,

wobei der Anteil ε_{th} für „thermoelastisch mit Phasenumwandlungen“ steht, und ε_{up} den durch die Umwandlungsplastizität hervorgerufenen Anteil von ε bezeichnet. In der linearisierten Theorie entspricht der Zerlegung (1) eine analoge Zerlegung des Verschiebungsvektors u gemäß

(2) $u = u_{th} + u_{up}$.

Wir beachten, dass die umwandlungsplastischen Deformationen volumenerhaltend sind, was in der linearisierten Theorie zu

(3) $tr(\varepsilon_{up}) = 0$

führt. (Die thermischen und Umwandlungsdeformationen haben wir ja in den Teil u_{th} eingeschlossen.) Eine weitere Annahme unterstellt, dass der Zusammenhang zwischen dem Spannungstensor σ und dem „thermoelastischen“ Verzerrungstensor ε_{th} thermoelastisch mit Phasenumwandlungen ist, also gemäß (5) aus 2.2. erfolgt. Somit gilt also (beachte (3))

(4) $\sigma = 2\mu\,(\varepsilon - \varepsilon_{up}) + \lambda\, tr(\varepsilon)\,\delta +$

$$- 3K\alpha\,(\theta - \theta_0)\,\delta - K\,\{\,(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\rho_i(\theta)}\,\chi_i\,)\,(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\rho_i(\theta_0)}\,\chi_{0i}\,)^{-1} - 1\}\,\delta.$$

Außerdem bestimmt sich der umwandlungsplastische Verzerrungstensor ε_{up} gemäß (6) aus dem vorigen Punkt 3.1. Wir bilden von σ in (4) den Deviator und erhalten

(5) $\sigma^* = 2\mu\,\varepsilon - \frac{2}{3}\mu\, tr(\varepsilon)\,\delta - 2\mu\,\varepsilon_{up}$

und setzen diesen Ausdruck in (6) aus 3.1. ein:

(6) $\varepsilon_{up}(t) = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^{n} K_{up,i} \int_0^t \chi_i'\, H(\chi_i')\,(2\mu\,\varepsilon(s) - \frac{2}{3}\mu\, tr(\varepsilon(s))\, I - 2\mu\,\varepsilon_{up}(s))\, ds.$

Wir setzen den Ausdruck für σ in die Bewegungsgleichung (15) aus 1.2. ein und erhalten die spezielle Variante für die Berücksichtigung der UP. Zusammen mit der Wärmeleitungsgleichung (9) aus 2.2. und den Umwandlungsgleichungen (1) aus 1.4., komplettiert mit Anfangs- und Randbedingungen ergibt sich eine „geschlossene“ Aufgabe zur Bestimmung der Verschiebungen, der Temperatur, der Phasen sowie der umwandlungsplastischen Verzerrungen. Wir schreiben dieses System für eine vereinfachte Variante nieder, die sich aus einem konkreten Abschreckversuch ergibt. (Für ausführliche Darlegungen im Rahmen der Theorie der endlichen Deformationen sei auf [Wol02a, 02b, 02c] verwiesen.)

3.3. Vereinfachtes Modell für einen Abschreckversuch

Wir betrachten die Abschreckung eines vollständig austenitisierten Bauteiles aus dem Stahl 100Cr6, z.B. eines Zylinders, mit der (konstanten) Anfangstemperatur θ_0 in einer Salzschmelze einer definierten Temperatur $\theta_\Gamma < \theta_0$, bei der sich der Austenit vollständig in Perlit umwandelt. Der Körper sei mit Ω bezeichnet. Wir setzen voraus, dass die Abmessungen des Bauteiles so klein sind, dass die auftretenden Spannungen die ganze Zeit über nicht die Streckgrenze erreichen, so dass klassische Plastizität ausgeschlossen werden kann.

Für die Umwandlung des Austenits zu Perlit benutzen wir eine korrigierte Johnson-Mehl-Avrami-Differentialgleichung für die Evolution des Perlit-Anteils

$$(1) \qquad \frac{\partial \chi_2}{\partial t} = \left(\frac{1}{\tau(\theta)}\right)^{n(\theta)} n(\theta)\,(1-\chi_2)\,t^{n(\theta)-1}\,(1 - g(\theta)\,\theta') \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[,$$

dabei sind

$$(2) \qquad \tau, g > 0, \qquad n \geq 1$$

temperaturabhängige Materialparameter, genauer auch spannungsabhängige, was oft unterdrückt wird. Da wir es nur mit zwei Phasen zu tun haben, die in ihrer Summe stets eins ergeben, ist es nicht nötig, für den Austenit auch eine Gleichung hinzuschreiben. (Sie hätte als Bildungsrate die entgegengesetzte rechte Seite der Gleichung (1).) Natürlich hätten wir für dieses Beispiel anstelle des 100Cr6 auch eine andere Stahlsorte wählen können. Diese Stahlsorte wird jedoch im Sonderforschungsbereich 570 „Distortion Engineering“ intensiv untersucht, so dass die benötigten Parameter gut bestimmt sind.

Weiter notieren wir für unsere Situation (nur zwei Phasen!) die Bewegungsgleichung mit vernachlässigtem Trägheitsterm und ohne äußere Kräfte

$$(3) \qquad -\operatorname{div}(2\mu\,\varepsilon + \lambda(\operatorname{tr}\varepsilon)\,\delta) = -\operatorname{div}(3K\alpha\,(\theta-\theta_0)\,\delta) + $$

$$-\operatorname{div}\left(K\,\frac{\rho_1(\theta_0) - \rho_2(\theta_0)}{\rho_2(\theta_0)}\,\chi_2\,\delta\right) - \operatorname{div}(2\mu\,\varepsilon_{up}) \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[,$$

die Wärmeleitungsgleichung ohne Dissipationsterm und äußere Quellen

$$(4) \qquad \rho\,c_e\,\frac{\partial}{\partial t}\theta - \operatorname{div}(\kappa\nabla\theta) = \rho\,L_2\,\frac{\partial \chi_2}{\partial t} \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[$$

sowie die Integralgleichung zur Bestimmung von ε_{up}

$$(5) \qquad \varepsilon_{up}(t) = \frac{3}{2}\,K_{up,2}\int_0^t \chi_2'\,H(\chi_2')\,(2\mu\,\varepsilon(s) - \frac{2}{3}\,\mu\,\operatorname{tr}(\varepsilon(s))\,I - 2\mu\,\varepsilon_{up}(s))\,ds.$$

Dabei ist $L_2 > 0$ die latente Wärme bei der Umwandlung des Austenits zu Perlit.

Als Anfangsbedingungen wählen wir

(6) $\chi_2(x, 0) = 0$ in Ω,

da zu Anfang der Umwandlung nur Austenit vorliegen soll,

(7) $\theta(x, 0) = \theta_0$ in Ω

nach Voraussetzung des Versuchs. Eine Anfangsbedingung für die Verschiebungen u wird nicht benötigt, da wir die Trägheit vernachlässigt haben. Als mechanische Randbedingungen wählen wir

(8) $\sigma n_{\partial\Omega} = 0$ (Rand spannungsfrei, $n_{\partial\Omega}$ äußerer Normal) auf $\Omega\times]0, T[$,

als thermische Randbedingung

(9) $- \kappa \nabla\theta \, n_{\partial\Omega} = \beta (\theta - \theta_\Gamma)$,

wobei $\beta > 0$ der Wärmeübergangskoeffizient ist. Unter Beachtung des Zusammenhangs (11) aus 1.2. zwischen Verschiebungen u und Verzerrungen ε stellt das gekoppelte System von partiellen und (parameterabhängigen) gewöhnlichen Differentialgleichungen (1), (3), (4) sowie der Integralgleichung (5), ergänzt durch die Bedingungen (6) – (10) eine „korrekte“ mathematische Aufgabe zur Bestimmung der Verschiebungen u, der Temperatur θ, des Perlit-Anteils χ_2 sowie des umwandlungsplastischen Verzerrungstensors ε_{up} dar.

Wir bemerken, dass es möglich ist, das erhaltenen System weiter umzuformen und dabei die Größe ε_{up} auszuschließen. Wir wollen an dieser Stelle darauf verzichten, da wir uns nicht weiter mit der konkreten Untersuchung oder gar der numerischen Berechnung (Simulation) beschäftigen (z.B. [Wol02b]).

4. Abschließende Bemerkungen und Ausblick

1) Unter allgemeineren Annahmen aus der Kontinuumsmechanik sowie materialspezifischer Art für Stahl bzw. eine konkrete Stahlsorte gelingt es, mathematische Modelle zur Beschreibung der zeitlichen Evolution der Felder der Verschiebungen, der Temperatur und der Phasenanteile für komplexe Situationen zu erhalten. Diese Modelle stellen aus mathematischer Sicht Rand-Anfangswert-Aufgaben für gekoppelte Systeme von partiellen und gewöhnlichen, ggf. auch Integralgleichungen, dar. Ihre mathematische Untersuchung (z.B. Nachweis der Existenz und Einzigkeit von Lösungen in gewissen Funktionenklassen, Konvergenz von Näherungsverfahren) ist zum einen von großem eigenständigen mathematischen Interesse und liefert zum anderen die Begründung für

leistungsfähige Verfahren zum näherungsweisen Auffinden von Lösungen, auch „Simulation“ genannt.

2) Um numerische Ergebnisse für konkrete Situationen zu erhalten, müssen die mathematischen Aufgaben diskretisiert werden. Das geschieht z.B. mit den Methoden der „Finiten Differenzen“ oder mit sogenannten Projektionsverfahren, deren wichtigste Spezialisierung die Methode der Finiten Elemente ist. Hier hat es in den letzten Jahrzehnten große Fortschritte gegeben, die die Entwicklung leistungsfähiger kommerzieller Software ermöglichten.

3) Der mathematischen Berechnung gehen die Entwicklung des Modells und natürlich die Gewinnung der Materialparameter voraus, was beides nicht trivial ist. Durch Vergleich von errechneten und gemessenen Werten müssen die Modelle auf ihre Gültigkeit überprüft werden. Oft ist es sinnvoll, die Modelle durch zusätzliche Annahmen zu vereinfachen, um den mathematischen Aufwand zu verringern. Dabei ist das Kriterium der Zulässigkeit wiederum die (hinreichende) Übereinstimmung von Rechnung und Experiment.

4) Das im Punkt 3 entwickelte Modell der Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen und UP lässt sich durch Berücksichtigung der klassischen Plastizität erweitern, was insbesondere im Falle sogenannter „endlicher“ oder großer Deformationen zu wesentlich komplizierteren Aufgaben führt (z.B. [Wol02a, 02c]).

5) Im Sonderforschungsbereich 570 „Distortion Engineering“ arbeiten Ingenieure, Physiker und Mathematiker gemeinsam auch an Aufgaben, die durch diese Vorlesung skizziert wurden. Von den Kollegen des Zentrums für Technomathematik liegen zu den vorgestellten Aufgaben erste Simulationsergebnisse vor (z.B. [Wol00]).

Literatur:

[Ahr02] Ahrens, U., Besserdich, G., Maier, H. J.: Sind aufwändige Experimente zur Beschreibung der Phasenumwandlungen von Stählen noch zeitgemäß?, HTM 57 (2002) 2, 99-105

[Alt94] Altenbach, J., Altenbach, H.: Einführung in die Kontinuumsmechanik, B. G. Teubner, Stuttgart, 1994

[Ber99] Berthelot, J.- M.: Composite materials – mechanical behaviour and structural analysis, Springer-Verlag, New York, Berlin, Heidelberg, 1999

[Cha94] Chandrasekharaiah D. S., Debnath L.: Continuum Mechanics, Academic Press, London, New York, 1994

[Cia88] Ciarlet P. G.: Mathematical Elasticity, North-Holland, Amsterdam 1988

[Den97] Denis, S.: Considering Stress-Phase Transformation Interactions in the Calculation of Heat Treatment Residual Stresses, in Mechanics of Solids with Phase Changes, Editors:

Berveilleir, M., Fischer, F. D., Springer Wien, New York, 1997

[Fey91] Feynman, R. P., Leighton, R. B., Sands, M.: Vorlesungen über Physik, Bd II, R. Oldenbourg Verlag München Wien, 1991.

[Fis96] Fischer, F. D., Sun, Q. P., Tanaka, K.: Transformation-induced plasticity, (TRIP) Appl. Mech. Rev. 49, pp. 317 – 364, 1996

[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, 1999

[Hau00] Haupt, P.: Continuum Mechanics and Theorie of Materials, Springer-Verlag, 2000

[Hou86] Hougardy, H. P., Yamazaki, K.: An imptoved calculation of the transformation of steel, steel research 57 (1986) 9, 466-471

[Hun02] Hunkel, M., Schmidt, A., Wolff, M., Böhm, M.: Bewertung verschiedener Umwandlungsmodelle für den Stahl 100Cr6 zur Anwendung in kommerziellen FEM-Programmen, wird eingereicht

[Hun99] Hunkel, M., Lübben, T., Hoffmann, F., Mayr, P.: Modellierung der bainitischen und perlitischen Umwandlung bei Stählen, HTM6, 1999

[Mac92] Macherauch, E.: Praktikum in Werkstoffkunde, 10. Auflage, Vieweg & Sohn, Braunschweig 1992

[Mar83] Marsden, J. E., Hughes, J. R.: Mathematical foundations of elasticity, Engelwood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall, 1983

[Mit87] Mitter, W.: Umwandlungsplastizität und ihre Berücksichtigung bei der Berechnung von Eigenspannungen, Materialkundlich-technische Reihe 7, Gebr. Borntraeger, Berlin, Stuttgart, 1987

[Mül73] Müller, I.: Thermodynamik – Grundlagen einer Materialtheorie, Bertelsmann Universitätsverlag, Düsseldorf, 1973

[Wol00] Wolff, M., Böhm, M., Bänsch, E., Davis, D.: Modellierung der Abkühlung von Stahlbrammen unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen und mechanischen Deformationen, Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 00-07, 2000

[Wol02a] Wolff, M., Böhm, M.: Zur Modellierung der Thermoelasto-Platizität mit Phasenumwandlungen bei Stählen sowie der Umwandlungsplastizität, Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 02-01, 2002

[Wol02b] Wolff, M., Schmidt, A., Böhm, M.: Thermo-mechanical behaviour of steel including phase transitions and transformation-induced plasticity, Proceedins of the Annual GAMM Meeting 2002 in Augsburg, to appear in PAMM

[Wol02c] Wolff, M., Böhm, M.: Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität bei Stählen im Konzept der Thermoelasto-Plastizität, Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 02-05, 2002

[Wol02d] Wolff, M. et al.: Volumenanteile versus Massenanteile – der Dilatometerversuch aus der kritischen Sicht der Kontinuumsmechanik, erscheint demnächst in den Berichten der Technomahtematik

Anschrift des Autors:
Michael Wolff: Universität Bremen, FB 3 (Mathematik), Zentrum für Technomathematik
Postfach 330440, D-28334 Bremen, Tel. +49(0)421/218-7175, mwolff@math.uni-bremen.de

Berichte aus der Technomathematik ISSN 1435-7968

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

Reports **Stand: 17. Dezember 2002**

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.

00-07. Michael Wolff, Eberhard Bänsch, Michael Böhm, Dominic Davis:
Modellierung der Abkühlung von Stahlbrammen, März 2000.

00-08. Stephan Dahlke, Peter Maaß, Gerd Teschke:
Interpolating Scaling Functions with Duals, April 2000.

00-09. Jochen Behrens, Fabian Wirth:
A globalization procedure for locally stabilizing controllers, Mai 2000.

00-10. Peter Maaß, Gerd Teschke, Werner Willmann, Günter Wollmann:
Detection and Classification of Material Attributes -- A Practical Application of Wavelet Analysis, Mai 2000.

00-11. Stefan Boschert, Alfred Schmidt, Kunibert G. Siebert, Eberhard Bänsch, Klaus-Werner Benz, Gerhard Dziuk, Thomas Kaiser:
Simulation of Industrial Crystal Growth by the Vertical Bridgman Method, Mai 2000.

00-12. Volker Lehmann, Gerd Teschke:

Wavelet Based Methods for Improved Wind Profiler Signal Processing, Mai 2000.

00-13. Stephan Dahlke, Peter Maaß:
A Note on Interpolating Scaling Functions, August 2000.

00-14. Ronny Ramlau, Rolf Clackdoyle, Frédéric Noo, Girish Bal:
Accurate Attenuation Correction in SPECT Imaging using Optimization of Bilinear Functions and Assuming an Unknown Spatially-Varying Attenuation Distribution, September 2000.

00-15. Peter Kunkel, Ronald Stöver:
Symmetric collocation methods for linear differential-algebraic boundary value problems, September 2000.

00-16. Fabian Wirth:
The generalized spectral radius and extremal norms, Oktober 2000.

00-17. Frank Stenger, Ahmad Reza Naghsh-Nilchi, Jenny Niebsch, Ronny Ramlau:
A unified approach to the approximate solution of PDE, November 2000.

00-18. Peter Benner, Enrique S. Quintana-Ortí, Gregorio Quintana-Ortí:
Parallel algorithms for model reduction of discrete-time systems, Dezember 2000.

00-19. Ronny Ramlau:
A steepest descent algorithm for the global minimization of Tikhonov-Phillips functional, Dezember 2000.

01-01. Torsten Köhler, Peter Maaß, Peter Wust, Martin Seebass:
Efficient methods in hyperthermia treatment planning, Januar 2001.

01-02. Peter Benner, Ralph Byers, Rafael Mayo, Enrique S. Quintana-Ortí, Vicente Hernández:
Parallel Algorithms for LQ Optimal Control of Discrete-Time Periodic Linear Systems, Februar 2001.

01-03. Peter Benner, Enrique S. Quintana-Ortí, Gregorio Quintana-Ortí:
Efficient Numerical Algorithms for Balanced Stochastic Truncation, März 2001.

01-04. Peter Benner, Maribel Castillo, Enrique S. Quintana-Ortí:
Partial Stabilization of Large-Scale Discrete-Time Linear Control Systems, März 2001.

01-05. Stephan Dahlke:
Besov Regularity for Edge Singularities in Polyhedral Domains, Mai 2001.

01-06. Fabian Wirth:
A linearization principle for robustness with respect to time-varying perturbations, Mai 2001.

01-07. Stephan Dahlke, Wolfgang Dahmen, Karsten Urban:
Adaptive Wavelet Methods for Saddle Point Problems - Optimal Convergence Rates, Juli 2001.

01-08. Ronny Ramlau:
Morozov's Discrepancy Principle for Tikhonov regularization of nonlinear operators, Juli 2001.

01-09. Michael Wolff:
Einführung des Drucks für die instationären Stokes-Gleichungen mittels der Methode von Kaplan, Juli 2001.

01-10. Stephan Dahlke, Peter Maaß, Gerd Teschke:
Reconstruction of Reflectivity Desities by Wavelet Transforms, August 2001.

01-11. Stephan Dahlke:
Besov Regularity for the Neumann Problem, August 2001.

01-12. Bernard Haasdonk, Mario Ohlberger, Martin Rumpf, Alfred Schmidt, Kunibert G. Siebert:
h-p-Multiresolution Visualization of Adaptive Finite Element Simulations, Oktober 2001.

01-13. Stephan Dahlke, Gabriele Steidl, Gerd Teschke:
Coorbit Spaces and Banach Frames on Homogeneous Spaces with Applications to Analyzing Functions on Spheres, August 2001.

02-01. Michael Wolff, Michael Böhm:
Zur Modellierung der Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen bei Stählen sowie der Umwandlungsplastizität, Februar 2002.

02-02. Stephan Dahlke, Peter Maaß:
An Outline of Adaptive Wavelet Galerkin Methods for Tikhonov Regularization of Inverse Parabolic Problems, April 2002.

02-03. Alfred Schmidt:
A Multi-Mesh Finite Element Method for Phase Field Simulations, April 2002.

02-04. Sergey N. Dachkovski, Michael Böhm:
A Note on Finite Thermoplasticity with Phase Changes, July 2002.

02-05. Michael Wolff, Michael Böhm:
Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität bei Stählen im Konzept der Thermoelasto-Plastizität*,* July 2002.

02-06. Gerd Teschke:
Construction of Generalized Uncertainty Principles and Wavelets in Anisotropic Sobolev Spaces, August 2002.

02-07. Ronny Ramlau:
TIGRA - an iterative algorithm for regularizing nonlinear ill-posed problems, August 2002.

02-08. Michael Lukaschewitsch, Peter Maaß, Michael Pidcock:
Tikhonov regularization for Electrical Impedance Tomography on unbounded domains, October 2002.

02-09. Volker Dicken, Peter Maaß, Ingo Menz, Jenny Niebsch, Ronny Ramlau:
Inverse Unwuchtidentifikation an Flugtriebwerken mit Quetschöldämpfern, October 2002.

02-10. Torsten Köhler, Peter Maaß, Jan Kalden:
Time-series forecasting for total volume data an charge back data, November 2002

02-11. Angelika Bunse-Gerstner:
A Short Introduction to Iterative Methods for Large Linear Systems, November 2002.

02-12. Peter Kunkel, Volker Mehrmann, Ronald Stöver:
Symmetric Collocation for Unstructured Nonlinear Differential-Algebraic Equations of Arbitrary Index, November 2002.

02-13. Michael Wolff:
Ringvorlesung:Distortion Engineering 2 *Kontinuumsmechanische Modellierung des Materialverhaltens von Stahl unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen, Dezember 2002.*