UNIVERSITÄT **Zentrum für Technomathematik**

**BREMEN** Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

# Volumenanteile versus Massenanteile – der Dilatometerversuch aus der Sicht der Kontinuumsmechanik

**Michael Wolff** **Michael Böhm**
**Serguei Dachkovski**

Report 03-01

**Berichte aus der Technomathematik**

**Report 03-01** **Januar 2003**

# Volumenanteile versus Massenanteile – der Dilatometerversuch aus der Sicht der Kontinuumsmechanik

M. Wolff, M. Böhm, S. Dachkovski

**Zusammenfassung:** Auf der Grundlage der Kontinuumsmechanik wird der Dilatometerversuch modelliert. Unter den üblichen Annahmen, dass die Proben während der Phasenumwandlung homogen bezüglich Temperatur- und Phasenverteilung sind, werden aus den Grundgleichungen der linearen Thermoelastizität für spezielle Mischungen die Gleichungen hergeleitet, mit denen anhand der aufgenommenen Dilatometerdaten die Massen- und Volumenanteile der beteiligten Phasen berechnet werden können (im Falle von insgesamt zwei Phasen).
Die erhaltenen Formeln sind unabhängig von den verschiedenen bekannten Umwandlungsmodellen zur Beschreibung spezieller Phasenumwandlungen im Stahl und können daher zum Testen derartiger Modelle verwendet werden. Obwohl wir die Anwendung auf Phasenumwandlungen im Stahl vor Augen haben, gelten die Ergebnisse auch für andere Materialien, solange die getroffenen generellen Voraussetzungen zutreffen. Dabei ist für Materialien wie Stahl, bei denen die Dichteunterschiede der verschiedenen Phasen nicht groß sind, eine linearisierte Theorie möglich, während sonst mit nichtlinearen Zusammenhängen zu rechnen ist.
Es wird gezeigt, dass sich bei der Phasenumwandlung im Stahl die Massen- und Volumenanteile wenig voneinander unterscheiden (um weniger als ein Prozent), da die Dichteunterschiede der Phasen klein sind. Während in der Werkstoffkunde allgemein mit Volumenanteilen gearbeitet wird, haben die Massenanteile den Vorteil, von Temperatur und Deformation unabhängig zu sein.
Für kleine Dichteänderungen folgt aus den erhaltenen Gleichungen, dass bei vollständiger isothermer Umwandlung der Massenanteil der sich bildenden Phase gleich dem Umwandlungsgrad ist. Dieser bestimmt sich als Quotient aus der aktueller Längenänderung und der Längenänderung nach Abschluss der Umwandlung. Dagegen kann der Unterschied zwischen dem Massen- (und damit auch dem Volumenanteil) und dem Umwandlungsgrad bei vollständiger nicht-isothermer Umwandlung beträchtlich sein.

Diese Arbeit entstand mit teilweiser Unterstützung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 570 „Distortion Engineering“.
Die Autoren danken Herrn Holger Surm (IWT Bremen) für die fruchtbaren Diskussionen zum Thema und Frau Bettina Suhr für die Korrekturen und das Anfertigen der Graphik.

**Abstract:** Based on the continuum mechanics the dilatometer experiment is modeled. Assuming that the specimens are homogenous with respect to temperature and phases‘ distribution during the phase transformation we derive from the equations of the linearized thermoelasticity for special mixtures the equations which allow to calculate the mass and volume fractions from the dilatometer dates (in the case of two phases).
The formulas we get are independent of any known models for phase transitions in steel. For this reason they can be used for testing such models. Although we focus on steel, the results are also valid for other materials, as long as the general assumptions are given. For materials like steel where the density differences in various phases are small a linearized theory is possible while otherwise we have to count on nonlinear relations.
It is shown that during phase transformation in steel mass and volume fractions have only a small difference (less than 1%) as the phases‘ density differences are small. While in material sciences one generally works with volume fractions mass fractions have got the advantage of being independent of temperature and deformation.
For small density changes it follows from the equations obtained that in the case of complete isothermal transformation the mass fraction of the forming phase equals to the so-called transformation degree. The last one is the quotient of the actual length change and the length change at the end of the transformation. In contrast to this the difference between the mass fraction (and therefore also the volume fraction) and the transformation degree can be remarkable in the case of complete but non-isothermal transformation.

This work was partially supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft via the Sonderforschungsbereich 570 „Distortion Engineering“.
The authors thank Holger Surm (IWT Bremen) for fruitful discussions on the matter and Bettina Suhr for the corrections and the drawing of the graph.

**Inhalt:**

1. Einleitung
2. Vorbereitungen
3. Herleitung der Gleichungen für den Dilatometerversuch
4. Zur Berechnung der Dichten als Funktionen der Temperatur
5. Einige Ergänzungen
    5.1. Verzicht auf Linearisierung des Dichte-Dehnungs-Zusammenhangs
    5.2. Zur Mischungsregel für den Wärmeausdehnungskoeffizienten
    5.3. Zur Umrechnung des Wärmeausdehnungskoeffizienten
    5.4. Darstellung des Volumenanteils durch die Dichten
    5.5. Darstellung des Volumenanteils durch die Längen
    5.6. Berücksichtigung von nicht umwandelnden Mischungsbestandteilen
    5.7. Mehrkomponentensysteme

## 1. Einleitung

Untersuchungen zu Phasenumwandlungen und Materialverhalten von Stahl sind von großer aktueller Bedeutung für die weitere Entwicklung und Testung geeigneter Modelle zu ihrer Beschreibung. Ziel dieser Anstrengungen sind – neben dem theoretischen Verständnis – mögliche Vorhersagen des Verzugs von Stahlbauteilen bei Wärmebehandlung und möglicher mechanischer Belastung (s. hierzu [Ahr02], [Hof02]).

Auf Dilatometerversuchen bei Umwandlungen ohne Belastung bauen sich komplexere Experimente auf, bei denen die Umwandlung unter kontrollierter Zug-, Druck- und / oder Torsionsbelastung sowie gegebenem Abkühlverlauf erfolgt (Vgl. z.B. [Ahr00, 02]). Bei der Modellierung der Phasenumwandlungen mit nicht konstanter Umwandlungstemperatur gibt es noch wichtige offenen Fragen. Während bei isothermer Umwandlung die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung die Kinetik der Phasenumwandlung hinreichend genau beschreibt, ist sie bei nicht-isothermer Umwandlung dazu unzureichend geeignet (Vgl. z.B. [Den97], [Fis96], [Lar95], [Leb83], [Hun00], [Hou86], [Mit92, 02] sowie die dort zitierten Quellen). In den Arbeiten [Mit92, 02], [Lar95] wird für die vollständige Umwandlung einer Phase in die andere ein „Umwandlungsgrad“ (degree of transformation) gemäß folgender Formel eingeführt:

(1.1) $$f(t) := \frac{l(t) - l}{l_1 - l}$$

In (1.1) sind $l$, $l(t)$, $l_1$ entsprechend die Längen der Probe zu Beginn der Umwandlung, während der Umwandlung zum Zeitpunkt $t$ sowie nach Abschluß der Umwandlung. Die Größe $f$ wird als Volumenanteil der sich bildenden Phase interpretiert. Beim Stahl unterscheiden sich die Dichten der einzelnen Phasen nur wenig. Unter dieser Voraussetzung leiten wir aus den Grundannahmen der Kontinuumsmechanik mit Phasenumwandlungen her, dass für vollständige isotherme Umwandlungen die Größe $f$ in (1.1) gleich dem Massenanteil (Massenbruch) der sich bildenden Phase ist.

Es zeigt sich auch, dass bei Stahl die Abweichung zwischen Massen- und Volumenanteil im Bereich von unter einem Prozent (s. u. für ausführlichere Untersuchungen) ist, was bei vielen Anwendungen tolerierbar ist. In der Theorie sollte jedoch zwischen beiden Größen unterschieden werden.

Im Falle einer nicht-isothermen Umwandlung werden in den genannten Arbeiten [Mit92, 02], [Lar95] Ansätze entwickelt, mit deren Hilfe der Umwandlungsgrad $f$ als Funktional der Temperaturgeschichte beschrieben werden kann. Wie wir zeigen werden, ist die Größe $f$ in (1.1) in diesem Falle weder gleich dem Volumen- noch dem Massenanteil. Im ungünstigen Fall kann die in (1.1) definierte Größe negativ oder sehr groß werden, oder auch gar nicht definiert sein, wie folgende Überlegungen zeigen. Im Bild 1 sind für einen angenommenen Dilatometerversuch die gemessene Länge der Probe $l$ als Funktion der Zeit aufgetragen.

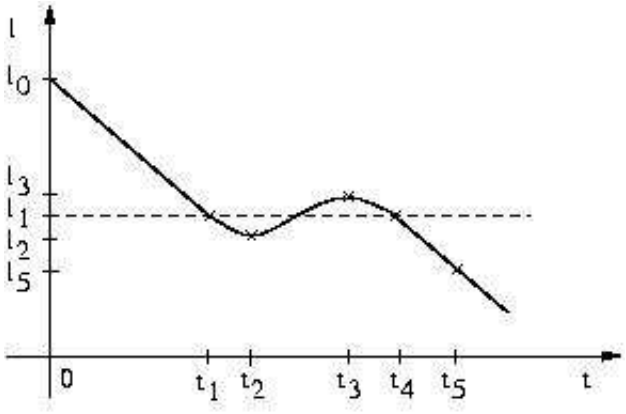


Bild 1

Bis zum Zeitpunkt $t_1$ zieht sich die Probe infolge Abkühlung (ohne Umwandlung) zusammen, zum Zeitpunkt $t_1$ setzt die Umwandlung ein. Dabei ist es möglich, dass zwischenzeitlich (zwischen $t_2$ und $t_3$) die umwandlungsbedingte Ausdehnung das

thermisch bedingte Schrumpfen übertrifft. Zum Ende der Umwandlung $t_4$ hat die Probe dann genau die selbe Länge wie zu Beginn der Umwandlung $t_1$. (Eine solche Situation kann erreicht werden, wenn die Temperatur sich nicht weit von der Umwandlungs-Starttemperatur entfernt). Versuchen wir nun, den Umwandlungsgrad $f$ nach (1.1) für die dargestellte Umwandlung zu definieren. Wählen wir als Beginn und Ende der Messungen entsprechend Umwandlungsbeginn und -ende $t_1$ und $t_4$, so ist der Nenner in (1.1) gleich null und die Größe $f$ somit nicht definiert. Beginnen wir z.B. jedoch mit $l_0$ zum Zeitpunkt $t = 0$ und hören mit $l_1$ zu $t_4$ oder mit $l_5$ zu $t_5$ auf, so ist die Größe $f$ definiert, liegt aber nur im zweiten Falle ständig zwischen 0 und 1. Diese Überlegungen zeigen, dass der Umwandlungsgrad für nicht-isotherme Umwandlungen zumindest eine sehr problematische Größe ist.

Im Verlauf unserer Arbeit zeigen wir, dass der Zugang über die Massenanteile (= Massenbrüche) zu einfacheren Formeln führt.

Die in dieser Arbeit abgeleiteten Formeln für die Massen- bzw. Volumenanteile sind unabhängig von den verschiedenen Umwandlungsmodellen zur Beschreibung von Phasenumwandlungen (z.B. Johnson-Mehl-Avrami) und können somit zum Test derartiger Modelle für spezielle Stahlsorten verwendet werden. Wichtig dabei ist die möglichst genaue Bestimmung oder Kenntnis der Dichten der beteiligten Phasen.

Wie Vergleichsrechnungen zeigen, ist die getroffenene Annahme über die Homogenität der Dilatometerprobe während der Umwandlung in guter Näherung erfüllt [Hun03].

Bei der Auswertung von Dilatometerversuchen, z.B. zur Umwandlung von Austenit zu Perlit, wird allgemein die folgende Formel verwandt (Vgl. z.B. [Böh03]).

$$p_p = \frac{l(\theta) - l_a(\theta)}{l_p(\theta) - l_a(\theta)} . \tag{1.2}$$

Hierbei sind $p_p$ der Volumenanteil des Perlits, $l(\theta)$ die aktuelle Länge der Probe zur Temperatur $\theta$, $l_a(\theta)$ und $l_p(\theta)$ die entsprechenden Längen, wenn die Probe nur aus Austenit bzw. Perlit bestünde. Die Formel (1.2) folgt aus der Anwendung der linearen Mischungsregel bezüglich der Volumenanteile auf die aktuelle Länge und stellt gegenüber den im Punkt 3 hergeleiteten Formeln eine Näherung dar (Vgl. Punkt 5.5.).

Die Berechnung der Massenanteile anhand aufgenommener Messdaten für konkrete Stahlsorten, z.B. C80 oder 100Cr6, sowie der Vergleich der einzelnen Formeln bleibt späteren Arbeiten vorbehalten.

## 2. Vorbereitungen

In diesem Kapitel stellen wir einige aus der Kontinuumsmechanik und der Theorie der Mischungen benötigte Begriffe und Zusammenhänge bereit, auf denen die Berechnungen für den Dilatometerversuch beruhen (s. Kapitel 3).

### 2.1. Verzerrungstensor, Spannungstensor, Bewegungsgleichung

Wir betrachten Stahl als Festkörper und zugleich als koexistierende Mischung seiner Phasen (z.B. Austenit, Perlit) (Siehe Punkt 2.2.). Im Rahmen der linearisierten Theorie verwenden wir zur kontinuumsmechanischen Modellierung des Materialverhaltens den linearisierten Greenschen Verzerrungstensor $\varepsilon$ und den Cauchyschen Spannungstensor $\sigma$, der in diesem Fall mit den anderen Spannungstensoren zusammenfällt. Bekanntlich gelten zwischen $\varepsilon$ und dem Verschiebungsvektor $u$ der Zusammenhang

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

(bei drei Raumdimensionen) sowie die Bewegungsgleichung

(2.2) $$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \operatorname{div} \sigma = F \qquad \text{in } \Omega.$$

Dabei sind $\rho$ die Massendichte und $F$ die Dichte der Massenkräfte. Mit $\Omega$ sei die Referenzkonfiguration des Körpers bezeichnet. Für quasi-statische Aufgaben gilt entsprechend

(2.3) $$-\operatorname{div} \sigma = F \qquad \text{in } \Omega.$$

Den Gleichungen (2.2) und (2.3) sind Randbedingungen, der Gleichung (2.2) zusätzlich Anfangsbedingungen hinzuzufügen. Im Falle des reinen Spannungsproblems lautet die Randbedingung

(2.4) $$\sigma n_{\partial\Omega} = g \qquad \text{auf } \partial\Omega$$

($n_{\partial\Omega}$ - äußerer Normalenvektor an $\partial\Omega$ - Oberfläche des Körpers $\Omega$, $g$ – gegebener Spannungsdichtevektor auf der Oberfläche)

### 2.2. Massen- und Volumenanteile – Stahl als Mischung

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. Es sei darauf hingewiesen, dass eine Modellierung der Phasenumwandlungen, insbesondere des Austenits in den Martensit mit sehr großer

Umwandlungsgeschwindigkeit, auch möglich ist, indem an einem Punkt nur Austenit oder Martensit sein kann, wobei sich eine Phasengrenze ausbildet. Hierzu verweisen wir auf [Lev98] und die dort zietierten Arbeiten.

In der Mischungstheorie wird angenommen, dass die Komponenten in jedem Körperpunkt simultan präsent sein können (Vgl. z.B. [Hau00], [Mül73]). In Arbeiten zum Materialverhalten von Stahl werden die Begriffe Phase und Komponente oft synonym benutzt, während in der Mischungstheorie eine Phase oft als ein Bereich erklärt ist, in dem nur eine Komponente vorkommt, z.B. wenn ein räumlicher Bereich eines Stahlwerkstücks ganz aus Perlit bestünde (vgl. z.B. [Lüd00]). Bei Stahl vernachlässigen wir eine Diffusion der Komponenten (Phasen), sie wandeln sich ineinander um und verbleiben am Ort. Der für die Umwandlungen wichtige Kohlenstoff wird in diesem Modell nicht berücksichtigt. Deshalb besitzen in diesem hier betrachteten Fall die Komponenten keine von null verschiedenen Diffusionsgeschwindigkeiten (Vgl. [Hau00], [Mül73]) und die makroskopische Modellierung von Stahl ist ein Spezialfall der allgemeinen Mischungstheorie (s. auch [Wol02], [Dac02]). Wir stellen einige wichtige Begriffe bereit (z.B. [Ber99]).

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

$$\rho := \frac{m}{V} \tag{2.5}$$

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 $\chi_i$ sowie die Dichte $\rho_i$ der i-ten Phase entsprechend durch

$$p_i := \frac{V_i}{V}, \qquad \chi_i := \frac{m_i}{m}, \qquad \rho_i := \frac{m_i}{V_i} \tag{2.6}$$

definiert. Für inhomogene Mischungen werden anhand von (2.5), (2.6) die Größen $\rho$, $p_i$, $\chi_i$, $\rho_i$ 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)

$$\sum_{i=1}^{n} p_i = 1, \qquad \sum_{i=1}^{n} \chi_i = 1; \qquad \forall\, i = 1, \ldots, n : \qquad p_i \geq 0,\ \chi_i \geq 0. \tag{2.7}$$

Aus (2.5), (2.6) folgen der Zusammenhang zwischen Massen- und Volumenanteilen

$$\chi_i = \frac{\rho_i}{\rho} p_i \tag{2.8}$$

sowie die Mischungsregeln für die Dichte und die reziproke Dichte (Vgl. [Ber99])

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

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

Die Produkte $\rho_i \, p_i$ werden auch Partialdichten genannt. Aus dem Bisherigen folgt, daß die Kenntnis der Dichten $\rho$ und $\rho_i$ ausreicht, um mit Hilfe von (2.8) Volumen- 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 (2.8) folgt dann für verschiedene Temperaturen und Verzerrungen – solange keine Umwandlungen stattfinden –

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

(Dabei gehören entsprechend $\theta_1, \varepsilon_1$ bzw. $\theta_2, \varepsilon_2$ zu einem Zustand.)

### 2.3. 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 $\rho_0$, das (z.B. infolge von Phasen- und / oder Temperaturänderungen) sein Volumen auf $V$ mit der neuen Dichte $\rho$ ändert. Nehmen wir an, dass sich die Masse des Kontrollvolumens nicht ändert, so gilt offenbar

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

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

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

wobei $\Delta l$ die Längenänderung jeder einzelnen Kante ist. Somit erhalten wir

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

Aus (2.12) und (2.14) erhalten wir

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

Bei kleinen Dichteänderungen folgt aus (2.15) durch Linearisierung

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

für die relative Längenänderung in jeder Richtung. Bei den meisten Anwendungen auf Phasenumwandlungen im Stahl scheint die einfachere Formel (2.16) gerechtfertigt, da die relativen Dichteänderungen „klein“ sind (s. weiter unten). Daher werden wir in der Folge meist mit der einfacheren Formel (2.16) arbeiten und nur im Punkt 4 kurz auf die Verwendung der Formel (2.15) eingehen.

### 2.4. 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. Der Einfachheit halber arbeiten wir mit der linearisierten Formel (2.16). Im Punkt 4.1. erörtern wir die Konsequenzen, wenn mit der Formel (2.15) gearbeitet wird. Auf der Grundlage von (2.16) setzen wir an

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

wobei $\rho_0$ die Dichte der Referenzkonfiguration (also bezogen auf $\theta_0$) und $\rho(\theta)$ die aktuelle Dichte sind. Manchmal kann es nützlich sein, den letzten Term in (2.17) aufzuspalten in thermische und Umwandlungsverzerrungen. Dann gilt

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

Unter $\rho(\theta_0)$ ist jetzt die Dichte des aktuellen Phasengemischs, aber bezogen auf die Referenztemperatur $\theta_0$, zu verstehen.

E, $\nu$ und $\alpha$ sind entsprechend Young-Modul, Poisson-Zahl und Wärmeausdehungskoeffizient bezüglich $\theta_0$, $\delta$ ist der Einheitstensor. Für Materialien ohne Mischungskomponenten (Phasen) fällt der letzte Term in (2.18) 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 Gleichungen (2.17) und (2.18) nach $\sigma$ erhalten wir

$$\sigma = 2\mu\,\varepsilon + \lambda(\mathrm{tr}\,\varepsilon)\,\delta - K\frac{\rho_0 - \rho(\theta)}{\rho(\theta)}\,\delta, \tag{2.19}$$

$$\sigma = 2\mu\,\varepsilon + \lambda(\mathrm{tr}\,\varepsilon)\,\delta - 3K\alpha\,(\theta - \theta_0)\,\delta - K\frac{\rho_0 - \rho(\theta_0)}{\rho(\theta_0)}\,\delta \tag{2.20}$$

mit den Lamé-Koeffizienten $\lambda$ und $\mu$, sowie dem Kompressionsmodul $K$ gemäß

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \qquad \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \qquad K = \frac{E}{3(1-2\nu)}. \tag{2.21}$$

Wir haben die Möglichkeit, den letzten Term in (2.17) bis (2.20) entweder mittels (2.9) durch die Volumenanteile oder mittels (2.10) durch die Massenanteile auszudrücken. Jede einzelne Phase kann ihre individuellen, temperaturabhängigen Materialparameter besitzen. Für den Dilatometerversuch ist es nicht notwendig, die Frage zu diskutieren, nach welchen Mischungsregeln welche Größen zu berechnen sind. Im Punkt 4 werden wir aus den beiden Formel (2.17) und (2.18) eine Folgerung herleiten, die für den Wärmeausdehnungskoeffizienten die Anwendung der Mischungsregel mit den Volumenanteilen, bezogen auf die Referenztemperatur $\theta_0$, nahelegt.
Da die Volumenanteile von der Temperatur und den Verzerrungen abhängen (Vgl. (2.11)), geben wir den Massenanteilen den Vorzug. Danach führen wir die entsprechenden Betrachtungen mit Volumenanteilen durch. Es gilt offenbar gemäß der Formel (2.10)

$$\frac{\rho_0 - \rho(\theta)}{\rho(\theta)} = \Big(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\rho_i(\theta)}\chi_i\Big)\Big(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\rho_i(\theta_0)}\chi_{0i}\Big)^{-1} - 1, \tag{2.22}$$

wobei $\chi_{0i}$ die Anfangsmassenanteile sind. Aus den Beziehungen (2.20), (2.22) sowie (2.1) 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 $\theta$ sowie der Massenanteile $\chi$.
Analog zu (2.22) erhalten wir mittels (2.9) die Darstellung mittels Volumenanteilen zu

$$\frac{\rho_0 - \rho(\theta)}{\rho(\theta)} = \Big(\sum_{i=1}^{n}\rho_i(\theta_0)\,p_{0i}(\theta)\Big)\Big(\sum_{i=1}^{n}\rho_i(\theta)\,p_i(\theta)\Big)^{-1} - 1, \tag{2.23}$$

wobei $p_{0i}$ die Anfangsvolumenanteile sind. Die Beziehungen (2.7) werden für die Anfangsmassen- bzw. – volumenanteile vorausgesetzt. Während die Beziehung

(2.22) bezüglich $\chi_i$ linear ist (abgesehen von einer möglichen Abhängigkeit der Parameter von $\chi$), ist es (2.23) bezüglich der $p_i$ nicht. Hierin liegt ein weiterer Vorteil bei der Arbeit mit Massenanteilen.

### 3. Herleitung der Gleichungen für den Dilatometerversuch

Wir betrachten eine zylindrische Probe kreisförmigen oder kreisringförmigen Querschnitts, die sich unbelastet umwandeln soll. Aus mathematischen Gründen nahmen wir an, dass zu Beginn des zu untersuchenden Umwandlungsprozesses, also bei der (Referenz-) Temperatur $\theta_0$, die Probe die Länge $l$ und den (Außen-) Durchmesser $d$ besitze. Wir weisen besonders auf diesen Umstand hin, da in der Dilatometrie als Ausgangslänge $l_0$ gewöhnlich die Länge der Probe bei 20 °C genommen wird. Wollen wir z.B. die Umwandlung einer vollständig austenitisierten Probe des C80 in Perlit untersuchen, so können wir z.B. $\theta_0 = 723$ °C oder auch ein größeres $\theta_0$ wählen. Die Länge $l$ ist dann die Länge, die die Probe bei der Temperatur $\theta_0$ besitzt. Alle äußeren Kräfte – auch die Schwerkraft – seien vernachlässigt.

Die folgenden Erörterungen beziehen sich gleichermaßen auf die Voll- und die Hohlprobe. Bei den Versuchen wird oft der (dünnen) Hohlprobe der Vorzug gegeben, weil dann die Annahme einer homogenen Temperatur und Phasenverteilung eher gerechtfertigt erscheint. Offenbar ist

(3.1) $\sigma = 0$

Lösung der statischen Gleichung

(3.2) $-\operatorname{div}\sigma = 0$

und genügt den Randbedingungen der Spannungsfreiheit. Weiter sei die $x_1$-Achse parallel zur Zylinderachse. Somit folgen aus (2.17)

(3.3) $$\varepsilon_{11} = \frac{1}{3}\frac{\rho_0 - \rho(\theta)}{\rho(\theta)},$$

(3.4) $$\varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = \frac{1}{3}\frac{\rho_0 - \rho(\theta)}{\rho(\theta)},$$

alle anderen Komponenten von $\varepsilon$ verschwinden. Bei angenommener Homogenität der Temperatur und der Phasenanteile entspricht dem örtlich konstanten Spannungszustand ein örtlich konstanter Verzerrungszustand. Insbesondere gilt

(3.5) $$\varepsilon_{11} = \frac{\Delta l}{l}, \qquad \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = \frac{\Delta d}{d},$$

dabei ist $\frac{\Delta d}{d}$ die relative Änderung des Durchmessers d. Somit erhalten wir für die lineare homogene Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen im spannungsfreien Fall die zwei Gleichungen:

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

(3.7) $$\frac{\Delta d}{d} = \frac{1}{3} \frac{\rho_0 - \rho(\theta)}{\rho(\theta)},$$

die die Isotropie der thermischen und Umwandlungsverzerrungen ausdrücken. Bei Dilatometerversuchen (d.h., ohne zusätzliche Belastungen) gibt die Gleichung (3.7) gegenüber (3.6) keine zusätzlichen Informationen.

Wir betrachten jetzt ein Zweiphasenmodell, z.B. die Umwandlung von Austenit zu Perlit. Die Massenanteile seien mit $\chi_a$ und $\chi_p$, die Volumenanteile mit $p_a$ und $p_p$ bezeichnet, ihre Anfangswerte seien

(3.8) $$\chi_{0a} = 1, \qquad \chi_{0p} = 0, \qquad p_{0a} = 1, \qquad p_{0p} = 0.$$

Unter Beachtung von $c_a = 1 - c_p$ erhalten wir aus (2.22) und (3.6)

(3.9) $$\frac{\Delta l}{l} = \frac{1}{3} \left( \frac{\rho_a(\theta_0)}{\rho_a(\theta)} - 1 \right) + \frac{1}{3} \rho_a(\theta_0) \frac{\rho_a(\theta) - \rho_p(\theta)}{\rho_a(\theta)\, \rho_p(\theta)} \chi_p,$$

woraus dann leicht folgt

(3.10) $$\chi_p = \left\{ \left( 3 \frac{\Delta l}{l} + 1 \right) \frac{\rho_a(\theta)}{\rho_a(\theta_0)} - 1 \right\} \frac{\rho_p(\theta)}{\rho_a(\theta) - \rho_p(\theta)},$$

wobei die Größen $\chi_p$, $\frac{\Delta l}{l}$ und $\theta$ i.a. zeitabhängig sind.

Aus der Formel (3.10) kann also die Evolution der Massenanteile des Perlits leicht berechnet werden, wenn die zeitlichen Verläufe von Temperatur und Längenänderung $\Delta l$ gemessen werden. Als $\theta_0$ wird die Temperatur zu Beginn der Messung gewählt.

Um die Formel (3.10) sowie entsprechende folgende anzuwenden, ist die Kenntnis der Dichten der beiteiligten Phasen als Funktionen der Temperatur notwendig. Im Punkt 4 gehen wir gesondert darauf ein, wie sich aus den aufgenommenen (und weiteren Daten) eine Formel für die Temperaturabhängigkeit der Dichten gewinnen lässt.

Aus den Formeln (3.6) und (3.10) folgt, dass der Massenanteil der sich bildenden Phase solange null bleibt, solange keine Phasenumwandlung stattfindet. Diese Tatsache kann bei der Dichtebestimmung der zuerst vollständig vorhandenen Phase benutzt werden. Das Experiment muss auch nicht bei der Perlit-Starttemperatur

begonnen werden, sondern es ist auch eine höhere Temperatur möglich, solange keine anderen nicht gewünschten Effekte auftreten.

Analog zu (3.10) können wir eine entsprechende Beziehung für den Volumenanteil des Perlit erhalten. Aus (2.23) und (3.6) folgen

(3.11) $$\frac{\Delta l}{l} = \frac{1}{3} \left( \frac{\rho_a(\theta_0)}{\rho_a(\theta) - (\rho_a(\theta) - \rho_p(\theta))\, p_p(\theta)} - 1 \right),$$

(3.12) $$p_p = \{ (3 \frac{\Delta l}{l} + 1)\, \rho_a(\theta) - \rho_a(\theta_0) \} \{ (3 \frac{\Delta l}{l} + 1)\, (\rho_a(\theta) - \rho_p(\theta)) \}^{-1}.$$

In (3.12) hängt der Volumenanteil i.a. von der Zeit und von der Temperatur ab, überdies ist der Zusammenhang zwischen $p_p$ und $\frac{\Delta l}{l}$ nicht mehr (affin-) linear wie der zwischen $\chi_p$ und $\frac{\Delta l}{l}$ in (3.10). Zur Vereinfachung der Schreibweise setzen wir ab jetzt

(3.13) $$\gamma(t) := (\frac{\Delta l}{l})(t) := \frac{l(t) - l}{l}$$

für die relative Längenänderung zum Zeitpunkt t.

Wir möchten einige Schlüsse aus den hergeleiteten Formeln ziehen.

Bei **isothermer Umwandlung** (also mit $\theta = \theta_0$) erhalten wir aus (3.10) und (3.13)

(3.14) $$\chi_p(t) = 3\, \gamma(t)\, \frac{\rho_p(\theta_0)}{\rho_a(\theta_0) - \rho_p(\theta_0)},$$

sowie aus (3.12) und (3.13)

(3.15) $$p_p(\theta_0, t) = 3\, \gamma(t)\, \frac{\rho_a(\theta_0)}{(\rho_a(\theta_0) - \rho_p(\theta_0))\, (1 + 3\, \gamma(t))}$$

(wiederum mit nichtlinearer Abhängigkeit von $\gamma(t)$). (Wegen der Modellannahme gilt natürlich $\gamma(t) << 1$.)

Aus den Zusammenhängen (2.8), (2.9) folgt die Fehlerabschätzung

(3.16) $$|p_p(\theta_0, t) - \chi_p(t)| \le | \frac{\rho_a(\theta_0) - \rho_p(\theta_0)}{\rho_p(\theta_0)} |\, (1 - p_p(\theta_0, t))\, \chi_p(t).$$

Der Bruch in (3.16) ist für Stahl klein, wie gleich sichtbar wird. Für den Stahl C80 lauten die Dichten des Austenits und des Perlits für $\theta_0 = 600$ °C (s. [Roh96], dabei stammen die Angaben für den Perlit aus der angegebenen Tabelle, die für den Austenit wurden durch lineare Regression erhalten.)

(3.17) $\rho_a(\theta_0) = 7688$, $\rho_p(\theta_0) = 7655$ [Kg / m$^3$],

sowie entsprechend für den 100Cr6 für $\theta_0 = 600$ °C

(3.18) $\rho_a(\theta_0) = 7715$, $\rho_p(\theta_0) = 7599$ [Kg / m$^3$].

Somit folgen aus (3.16) und (3.18) für den C80:

(3.19) $|p_p(\theta_0, t) - \chi_p(t)| \le 0{,}004 \bullet (1 - p_p(\theta_0, t))\ \chi_p(t) \le 0{,}0011$

sowie aus (3.16) und (3.19) für den 100Cr6:

(3.20) $|p_p(\theta_0, t) - \chi_p(t)| \le 0{,}01 \bullet (1 - p_p(\theta_0, t))\ \chi_p(t) \le 0{,}0038$

als maximaler Wert etwa zur halben Umwandlung. Zu Beginn und zu Ende der vollständigen Umwandlung ist dieser Fehler gleich null. Für viele Belange ist also der Unterschied zwischen Massen- und Volumenanteil bei Stahl nicht erheblich. Bei einer konsistenten Modellierung sollte er beachtet werden. Bei anliegenden Spannungen könnte der Unterschied etwas größer werden.

Wir bemerken, dass für die uns interessierende Temperaturen, also unter 1000 °C der Austenit jeweils die größere Dichte als der Perlit besitzt (bei gleicher Temperatur), so dass die Differenzen in den Nennern der Ausdrücke in (3.10) und folgende nicht verschwinden.

Für die **vollständige isotherme Umwandlung** ergibt sich eine wesentliche Vereinfachung von (3.14). Nach „unendlich langer Zeit“ gilt

(3.21) $$1 = \chi_p(\infty) = 3\ \gamma(\infty)\ \frac{\rho_p(\theta_0)}{\rho_a(\theta_0) - \rho_p(\theta_0)}$$

($\gamma(\infty)$ ist die relative Längenänderung nach der vollständigen Umwandlung). Aus (3.21) kann eine der beiden beteiligten Dichten berechnet werden. Aus (3.21) und (3.14) folgt dann die gut zu handhabende Formel für den Massenanteil der sich bildenden Phase

(3.22) $$\chi_p(t) = \gamma(t)\ (\gamma(\infty))^{-1} = \frac{l(t) - l}{l(\infty) - l}.$$

Wie bereits in Kapitel 1 ausgeführt (s. Formel (1.1)), findet sich diese Formel u.a. in den Arbeiten [Mittemejer, Larsson / Mangard]. Dort als „degree of transfomation“ definiert und als „fraction transformed“ und Volumenanteil interpretiert.

In der Praxis wird statt „unendlich großer Zeit“ eine Zeit $t_\infty$ so groß gewählt, dass die Umwandlung als abgeschlossen gelten kann. In den entsprechenden Formeln wird dann $\infty$ durch $t_\infty$ ersetzt.

In analoger Weise folgt aus (3.15) die Formel für den Volumenanteil bei vollständiger isothermer Umwandlung

(3.23) $$p_p(\theta_0, t) = \gamma(t)\ (\gamma(t_\infty))^{-1}\ (3\ \gamma(t_\infty) + 1)\ (3\ \gamma(t) + 1)^{-1} = \frac{l(t) - l}{l(t_\infty) - l}\ \frac{3\ l(t_\infty) - 2l}{3\ l(t) - 2l}.$$

Im Falle einer vollständigen isothermen Umwandlung können wir aus (3.22) und (3.23) die Abweichung zwischen Massen- und Volumenanteilen sehr gut bestimmen. Wir erhalten aus (3.22) und (3.23) leicht

$$\chi_p(t) - p_p(\theta_0, t) = \frac{l(t) - l}{l(t_\infty) - l}\left(1 - \frac{3\,l(t_\infty) - 2l}{3\,l(t) - 2l}\right) = 3\,\frac{l(t) - l}{l(t_\infty) - l} \bullet \frac{l(t_\infty) - l(t)}{3\,l(t) - 2l}. \tag{3.24}$$

Bei der isothermen Umwandlungen von Austenit zu Perlit gilt

$$l \le l(t) \le l(t_\infty), \tag{3.25}$$

somit sind beide Seiten in der Gleichung (3.24) nichtnegativ, und die Volumenanteile sind in diesem Falle nicht kleiner als die Massenanteile. Aus (3.24) erhalten wir auch die maximale Abweichung, indem wir die Funktion

$$\varphi(s) := 3\,\frac{s - l}{l(t_\infty) - l} \bullet \frac{l(t_\infty) - s}{3\,s - 2l} \tag{3.26}$$

auf dem Intervall $[l, l(t_\infty)]$ untersuchen. Wie leicht nachzurechnen, nimmt die Funktion $\varphi$ ihr Maximum im Punkt

$$s_0 := \frac{l}{3}\left(2 + \sqrt{\frac{3\,l(t_\infty) - 2l}{l}}\right) \tag{3.27}$$

an. Damit beträgt die maximale Abweichung zwischen Volumen- und Massenanteil bei vollständiger isothermer Umwandlung

$$\varphi(s_0). \tag{3.28}$$

Wir bemerken, dass die Größe in (3.28) nur von den Längen zu Beginn und Ende der Umwandlung abhängt. Da die relativen Längenänderungen sehr klein sind, kann die Wurzel in (3.27) unter Benutzung von

$$\sqrt{\frac{3\,l(t_\infty) - 2l}{l}} \approx 1 + \frac{3}{2}\,\frac{l(t_\infty) - l}{l} \tag{3.29}$$

näherungsweise umgeformt werden, so dass wir angenähert

$$s_0 \approx \frac{1}{2}\,(l(t_\infty) + l), \tag{3.30}$$

$$\varphi(s_0) \approx \frac{3}{2}\,\frac{l(t_\infty) - l}{3\,l(t_\infty) - l} \approx \frac{3}{4}\,\frac{l(t_\infty) - l}{l}. \tag{3.31}$$

erhalten. Mit anderen Worten, die maximale Abweichung zwischen Volumen- und Massenanteil beträgt rund drei Viertel der relativen Gesamtlängenänderung. Diese Abweichung wird erreicht, wenn die Länge der Probe etwa ihre halbe Ausdehnung erfährt.

Es sei angemerkt, dass die letzten Resultate (egal ob mit oder ohne Rundung) unabhängig von der Stahlsorte sind, wir haben nur die Beziehung (3.25) benutzt,

also die Eigenschaft, dass der Austenit eine größere Dichte als der Perlit hat. Für die umgekehrte Umwandlung sind nur in (3.25) die Relationen zu wechseln und das qualitative Resultat bleibt, nur dass jetzt der Massenanteil nicht kleiner als der Volumenanteil ist.

Überdies sind diese Abschätzungen auch für andere Umwandlungen anwendbar, so lange nur zwei Phasen auftreten, die Umwandlung vollständig ist, konstanter Temperatur stattfindet und die Phasen keine großen Dichteunterschiede aufweisen. Sonst muss auf der Grundlage von Formel (2.15) gearbeitet werden.

Aus (3.10) erhalten wir für die **vollständige nicht-isotherme Umwandlung**

$$(3.32) \qquad 1 = \chi_p(t_\infty) = \{ (3\,\gamma(t_\infty) + 1)\,\frac{\rho_a(\theta(t_\infty))}{\rho_a(\theta_0)} - 1 \}\,\frac{\rho_p(\theta(t_\infty))}{\rho_a(\theta(t_\infty)) - \rho_p(\theta(t_\infty))},$$

woraus sich $\rho_a(\theta_0)$ eliminieren lässt, mit $\theta_0$ – Starttemperatur und $\theta(t_\infty)$ – Endtemperatur. Somit können wir (3.10) umschreiben zu

$$(3.33) \qquad \chi_p(t) = \{ \frac{3\,\gamma(t) + 1}{3\,\gamma(t_\infty) + 1}\,\frac{\rho_a(\theta(t))}{\rho_p(\theta(t_\infty))} - 1 \}\,\frac{\rho_p(\theta(t))}{\rho_a(\theta(t)) - \rho_p(\theta(t))}.$$

Analog erhalten wir aus (3.12) für den Volumenanteil

$$(3.34) \qquad p_p(\theta(t), t) = \frac{(3\,\gamma(t) + 1)\,\rho_a(\theta(t)) - (3\,\gamma(t_\infty) + 1)\,\rho_p(\theta(t_\infty))}{(3\,\gamma(t) + 1)\,(\rho_a(\theta(t)) - \rho_p(\theta(t)))}.$$

Die Formeln (3.33) und (3.34) sind unabhängig von der Art der Temperaturänderung, es müssen während der Umwandlung nur maximal zwei Phasen präsent sein.

Wir wollen auch hier die Abweichung zwischen Massen- und Volumenanteilen abschätzen. Analog zu (3.16) erhalten wir

$$(3.35) \qquad |p_p(\theta(t), t) - \chi_p(t)| \le |\,\frac{\rho_a(\theta(t)) - \rho_p(\theta(t))}{\rho_p(\theta(t))}\,|\,(1 - p_p(\theta(t), t))\,\chi_p(t),$$

was zu keiner anderen qualitativen Aussage als nach (3.16) führt: Auch für nichtisotherme Umwandlungen sind die Unterschiede zwischen Massen- und Volumenanteil oft vernachlässigbar.

Die Differenz zwischen Massenanteil $\chi_p$ und Umwandlungsgrad $f$ aus (1.1) bei der vollständigen nicht-isothermen Umwandlung berechnet sich zu:

$$(3.36) \qquad \chi_p(t) - f(t) = \{ \frac{3\,\gamma(t) + 1}{3\,\gamma(t_\infty) + 1}\,\frac{\rho_a(\theta(t))}{\rho_p(\theta(t_\infty))} - 1 \}\,\frac{\rho_p(\theta(t))}{\rho_a(\theta(t)) - \rho_p(\theta(t))} - \frac{\gamma(t)}{\gamma(t_\infty)}.$$

Mit den nachfolgenden Überlegungen zeigen wir, dass die Unterschiede zwischen Massenanteil $\chi$ und Umwandlungsgrad $f$ für nicht-isotherme Umwandlungen durchaus nicht vernachlässigbar sein können.

Vorher bemerken wir: Solange keine Umwandlung stattfindet, bleibt der Massenanteil der sich bildenden Phase null, zugleich kann sich infolge thermischer Dehnung aber bereits der Umwandlungsgrad ändern.

Auch bei „sofort“ beginnenden Umwandlungen sind teils beträchliche Unterschiede möglich, wie die folgenden Ausführungen zeigen. Die Daten wurden wiederum [Roh96] entnommem.

Wir stellen uns einen beliebigen Abkühlverlauf von 750 °C zu 250 °C für eine Dilatometerprobe des eutektoiden Sathls C80 vor. Dieses Temperaturintervall werde nicht verlassen, so dass nach hinreichend großer Zeit eine vollständige Umwandlung in Perlit stattfinde. Die maximale relative Längenänderung berechnet sich dann nach der Formel (3.6) zu

$$\gamma(t_\infty) = \frac{1}{3}\,\frac{\rho_a(750) - \rho_p(250)}{\rho_p(250)}\,, \tag{3.37}$$

was mit den Daten aus [Roh96] zu

$$\gamma(t_\infty) = -\,0{,}007708 \tag{3.38}$$

führt. Weiter nehmen wir an, dass die Abkühlung so verlaufe, dass bei der Temperatur 700 °C die relative Längenänderung zu einer betimmten Zeit $t_1$ genau ein Fünftel von $\gamma(t_\infty)$ betrage. Nach der Formeln (3.36) erhalten wir dann

$$\chi_p(t_1) - f(t_1) = -\,0{,}251. \tag{3.39}$$

Unter Beachtung dessen, dass die Größen $\chi_p$ zwischen 0 und 1 liegt (f kann ungünstigerweise zwischenzeitlich auch negativ werden), ist die Abweichung in (3.39) zu hoch. Insbesondere für langsame Abkühlverläufe kann sich ein großer Fehler ergeben, bei schnelleren Abkühlverläufen wird dieser geringer. Gehen wir z.B. sehr schnell auf 250 °C und halten diese Temperatur, so liegt eine isotherme Umwandlung vor, und die Größen $\chi_p$ und f stimmen – wie oben gezeigt – überein.

## 4. Zur Berechnung der Dichten als Funktionen der Temperatur

Sind die Dichten der auftretenden Phasen nicht aus anderen Quellen bekannt, müssen sie – unter Zuhilfenahme weiterer Daten – aus den Dilatometerdaten errechnet werden. Wir bleiben bei der Situation der vollständigen Umwandlung des Austenits in den Perlit beim Stahl C80, obwohl das Prinzip auch auf andere Situationen übertragbar ist.

Wir erörtern zwei Möglichkeiten, wobei die erste von der Genauigkeit der Geometrie abhängt, dafür aber keine Dichtebestimmung nach dem Archimedischen Prinzip erfordert.

Aus dem Zusammenhang (3.6) ergibt sich durch Umstellung

(4.1) $$\rho(\theta) = \rho(\theta_0)\,(1 + 3\,\frac{\Delta l}{l})^{-1},$$

wobei $\frac{\Delta l}{l}$ die relative Längenänderung ist, die der Temperatur $\theta$ entspricht. (Wie oben ausgeführt, bezieht sich die Ausgangslänge $l$ auf die Temperatur $\theta_0$. Solange nur Austenit vorhanden ist, sind beide Werte der Dichten in (4.1) die des Austenits. Insofern ist es günstig, einen Abkühlverlauf zu wählen, bei dem die Umwandlung nicht zu schnell erfolgt, oder bei dem die Anfangstemperatur über der Perlit-Starttemperatur liegt. Werden ein paar Temperaturen nebst zugehörigen Längenänderungen gemessen, so können einige Werte der Dichte nach (4.1) berechnet werden, so die Dichte $\rho(\theta_0)$ bekannt ist, worauf wir gleich zurückkommen. Danach kann z.B. für den Austenit durch lineare Extrapolation eine Formel für die Dichte gewonnen werden.

Um die Dichte $\rho(\theta_0)$ zu berechnen, wird die Masse $m$ der Probe benötigt. Bei einer zylindrischen Vollprobe werden deren Länge und Außendurchmesser bei der Temperatur $\theta_0$ benötigt. Bei klassischen Dilatometern lässt sich oft nur die Länge messen. Ein Ausweg besteht darin, die Probe bei Zimmertemperatur zu vermessen (Länge, Außen- und Innendurchmesser bei Hohlproben). Aus dem Ähnlichkeitsverhältnis

(4.2) $$l(\theta_0) : d_a(\theta_0) = l(\theta_{zi}) : d_a(\theta_{zi})$$

erhält man den benötigten Außenurchmesser $d_a(\theta_0)$, sowie analog den Innendurchmesser $d_i(\theta_0)$. (zi steht für Zimmertemperatur, z.B. 20°).

Somit erhalten wir das Volumen $V(\theta_0)$ der Probe zur Temperatur $\theta_0$ und danach

(4.3) $$\rho(\theta_0) = \rho_a(\theta_0) = \frac{m}{V(\theta_0)}.$$

Zur Bestimmung der Dichte des Perlits verfahren wir analog, nur zum Ende der Umwandlung hin, wenn kein Austenit mehr vorhanden ist, und sich der Perlit bei weiterer Abkühlung nur noch zusammenzieht.

Eine Fehlerquelle kann darin liegen, dass die Probe zu stark von einem idealen Zylinder (Hohlzylinder) abweicht. Daher zeigen wir eine zweite Möglichkeit, die

Dichte $\rho(\theta_0)$ zu berechnen. Mit Hilfe des Archimedischen Prinzips bestimmen wir die Dichte bei 20 °C, also $\rho(\theta_{zi})$, und außerdem die Länge der Probe $l(\theta_{zi})$, ebenfalls bei 20 °C. Aus den Überlegungen des Punktes 2.3. folgt dann die Formel

$$\rho(\theta_0) = \rho_a(\theta_0) = \rho(\theta_{zi}) \left( \frac{l(\theta_{zi})}{l(\theta_0)} \right)^3. \tag{4.4}$$

Analog lässt sich die Dichte des Perlits zu einer Temperatur am Ende der Umwandlung bestimmen.

## 5. Einige Ergänzungen

### 5.1. Verzicht auf Linearisierung des Dichte-Dehnungs-Zusammenhangs

Bisher haben wir die linearisierte Formel (2.16) verwendet, um den Zusammenhang zwischen der relativen Längenänderung und der Dichtänderung zu beschreiben. Wir geben an, wie sich einige Formeln ändern, wenn (2.16) durch die nichtlineare Beziehung (2.15) ersetzt wird. Anstelle von (2.17) ist dann

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E}\sigma_{ij} - \frac{\nu}{E}\,\mathrm{tr}(\sigma)\,\delta_{ij} + \left\{ \sqrt[3]{1 + \frac{\rho_0 - \rho}{\rho}} - 1 \right\} \delta_{ij} \tag{5.1}$$

als Ausgangspunkt zu wählen. Für den Dilatometerversuch folgt dann anstelle von (3.6) die Beziehung

$$\frac{\Delta l}{l} = \sqrt[3]{1 + \frac{\rho_0 - \rho}{\rho}} - 1. \tag{5.2}$$

Zusammen mit (2.22) und (3.8) erhalten wir für unsere Situation der Umwandlung von Austenit zu Perlit eine Verallgemeinerung der Formel (3.10) für den Massenanteil des Perlits

$$\chi_p(t) = \left\{ \frac{\rho_a(\theta)}{\rho_a(\theta_0)} (1 + \gamma(t))^3 - 1 \right\} \frac{\rho_p(\theta)}{\rho_a(\theta) - \rho_p(\theta)}. \tag{5.3}$$

Die Linearisierung der letzten Formel bezüglich $\gamma$ ergibt sofort (3.10). Aus (5.3) ergibt sich mit den obigen Überlegungen die Verallgemeinerung zu (3.33) (für vollständige Umwandlungen), nämlich

$$\chi_p(t) = \left\{ \frac{(1 + \gamma(t))^3}{(1 + \gamma(t_\infty))^3} \frac{\rho_a(\theta(t))}{\rho_p(\theta(t_\infty))} - 1 \right\} \frac{\rho_p(\theta(t))}{\rho_a(\theta(t)) - \rho_p(\theta(t))}. \tag{5.4}$$

Für vollständige isotherme Umwandlungen folgt aus (5.3) leicht

$$\chi_p(t) = \frac{(1 + \gamma(t))^3 - 1}{(1 + \gamma(t_\infty))^3 - 1}. \tag{5.5}$$

Näherungsweise ergibt sich für „kleine“ relative Längenänderungen die Übereinstimmung mit dem Abbildungsgrad $f$ aus (1.1). Die Abweichung beträgt in diesem Fall

$$(5.6) \qquad \chi_p(t) - f(t) = \frac{(1 + \gamma(t))^3 - 1}{(1 + \gamma(t_\infty))^3 - 1} - \frac{\gamma(t)}{\gamma(t_\infty)}.$$

Ein Überschlag zeigt, dass diese Abweichung in der Größenordnung von $0{,}0025$ ist und somit toleriebar scheint. (Erfahrungsgemäß übersteigt $\gamma(t_\infty)$ dem Betrage nach nicht $0{,}01$. Der Ausdruck in (5.6) erreicht ein Maximum in der Nähe von $\gamma(t) = 0{,}5\ \gamma(t_\infty)$.)

Bei nichtisothermer Umwandlung können sich – besonders, wenn große Temperaturunterschiede vorliegen – die Effekte der Umwandlung und der thermischen Dehnung verstärken. Wir können die Differenz der nach den Formeln (3.10) und (5.3) berechneten Massenanteile bilden und erhalten

$$(5.7) \qquad \mathrm{diff} = \frac{\rho_a(\theta)}{\rho_a(\theta_0)} \bullet \frac{\rho_p(\theta(t))}{\rho_a(\theta(t)) - \rho_p(\theta(t))} (3\,\gamma^2(t) + \gamma^3(t)).$$

Ein Überschlag mit den Daten für den C80

$$(5.8) \quad \theta_0 = 750\ °C,\ \theta(t) = 700\ °C,\ \theta(t_\infty) = 250\ °C,\ \gamma(t) = 0{,}2\,\gamma(t_\infty),\ \gamma(t_\infty) = -\,0{,}007708$$

führt unter Beachtung von [Roh96] zu

$$(5.9) \qquad \mathrm{diff} = 0{,}052.$$

(Dabei wurden (3.38), (3.39) benutzt.) Diese Abweichung erscheint schon recht groß. Im Einzelfall ist ein Überprüfen des möglichen Fehlers für eine konkrete Stahlsorte und für ein konkretes Temperaturintervall nötig.

### 5.2. Zur Mischungsregel für den Wärmeausdehnungskoeffizienten

Wir kommen kurz auf die Formeln (2.17), (2.18) zurück, in denen ein Zusammenhang zwischen den Dichten und dem (mittleren linearen) Wärmeausdehnungskoeffizienten enthalten ist. Für den Dilatometerversuch (Spannung gleich null) folgt leicht

$$(5.10) \qquad \frac{1}{3}\frac{\rho_0 - \rho(\theta)}{\rho(\theta)} = \alpha\,(\theta - \theta_0) + \frac{1}{3}\frac{\rho_0 - \rho(\theta_0)}{\rho(\theta_0)}.$$

Es sei daran erinnert, dass $\rho_0$ die Dichte der Referenzkonfiguration (also bezogen auf $\theta_0$) ist, während $\rho(\theta)$ und $\rho(\theta_0)$ die aktuellen Dichten sind, bezogen auf die aktuelle Temperatur $\theta$ bzw. auf die Referenztemperatur $\theta_0$.

Die Umstellung nach dem Wärmeausdehnungskoeffizienten $\alpha$ ergibt leicht

(5.11) $$\alpha = \frac{\rho_0}{3\,(\theta - \theta_0)} \left( \frac{1}{\rho(\theta)} - \frac{1}{\rho(\theta_0)} \right).$$

Die Mischungsregel für die reziproke Dichte (2.10) führt zu

(5.12) $$\alpha = \frac{\rho_0}{3\,(\theta - \theta_0)} \sum_{i=1}^{n} \left( \frac{1}{\rho_i(\theta)} - \frac{1}{\rho_i(\theta_0)} \right) \chi_i = \frac{1}{3\,(\theta - \theta_0)} \left( \sum_{j=1}^{n} \frac{\chi_{0j}}{\rho_j(\theta_0)} \right)^{-1} \sum_{i=1}^{n} \left( \frac{1}{\rho_i(\theta)} - \frac{1}{\rho_i(\theta_0)} \right) \chi_i =$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \chi_i \left( \sum_{j=1}^{n} \frac{\rho_i(\theta_0)\,\chi_{0j}}{\rho_j(\theta_0)} \right)^{-1} \alpha_i$$

wobei die Größen $\alpha_i$ gemäß

(5.13) $$\alpha_i := \frac{\rho_i(\theta_0)}{3\,(\theta - \theta_0)} \left( \frac{1}{\rho_i(\theta)} - \frac{1}{\rho_i(\theta_0)} \right)$$

die auf $\theta_0$ bezogenen Wärmeausdehnungskoeffizienten der i-ten Phase sind. Aus dem Zusammenhang (2.8) zwischen Massen- und Volumenanteilen folgen

(5.14) $$\chi_i = \frac{\rho_i(\theta_0)}{\rho(\theta_0)}\, p_i(\theta_0), \qquad \chi_{0i} = \frac{\rho_i(\theta_0)}{\rho(\theta_0)}\, p_{0i}.$$

Unter Benutzung von (5.14) erhalten wir aus (5.12) die lineare Mischungsregel für den Wärmeausdehnungskoeffizienten mit Hilfe der auf $\theta_0$ bezogenen Volumenanteile:

(5.15) $$\alpha = \sum_{i=1}^{n} p_i(\theta_0)\, \alpha_i.$$

In Anbetracht der geringen Abweichungen zwischen Massen- und Volumenanteile – zumindest beim Stahl – lässt sich näherungsweise auch die lineare Mischungsregel mit den Massenanteilen verwenden.

## 5.3. Zur Umrechnung des Wärmeausdehnungskoeffizienten auf eine andere Bezugstemperatur

In den üblichen Tabellen (s. z.B. [Roh96], [Ric73]) werden die (linearen mittleren) Wärmeausdehnungskoeffizienten in der Regel auf $\theta_0 = 20\ °C$ bezogen. Da die Referenztemperatur bei Abschreckversuchen erheblich davon abweichen kann, ist es nötig, den Wärmeausdehnungskoeffizienten auf eine andere Bezugstemperatur $\theta_1$ umzurechnen. Wir gehen von den Definitionen für die Ausdehnungskoeffizienten aus, also von

(5.16) $$\frac{l(\theta) - l(\theta_0)}{l(\theta_0)} = \alpha_{\theta_0}(\theta)\,(\theta - \theta_0),$$

(5.17) $$\frac{l(\theta) - l(\theta_1)}{l(\theta_1)} = \alpha_{\theta_1}(\theta)\,(\theta - \theta_1).$$

Aus (5.16) ergibt sich

(5.18) $l(\theta_1) = (1 + \alpha_{\theta_0}(\theta_1)\ (\theta_1 - \theta_0)\ )\ l(\theta_0)$.

Aus (5.16) und (5.17) folgt unter Beachtung von (5.18) die gesuchte Formel

(5.19) $$\alpha_{\theta_1}(\theta) = \frac{\alpha_{\theta_0}(\theta)}{1 + \alpha_{\theta_0}(\theta)\ (\theta_1 - \theta_2)}\ .$$

### 5.4. Darstellung des Volumenanteils durch die Dichten

Die Formel für den Volumenanteil des Perlits (3.12) kann so umgeschrieben werden, dass nur die Dichten des Gemischs sowie der beiden Phasen Austenit und Perlit auftreten. (Wir betrachten wiederum die Umwandlung einer Probe, die zu Beginn nur aus Austenit besteht, zu Perlit.) Unter Beachtung der stets angenommenen Homogenität und der Formel (3.6) erhalten wir aus (3.12)

(5.20) $$p_p(\theta) = \frac{\rho_a(\theta) - \rho(\theta)}{\rho_a(\theta) - \rho_p(\theta)}.$$

Diese Formel folgt auch sofort aus der Mischungsregel (2.9) für die Dichte.

### 5.5. Darstellung des Volumenanteils durch die Längen

Wie in der Einleilung erwähnt, werden bei der Auswertung von Dilatometerversuchen meist Formeln der Art

(1.2) $$p_p(\theta) = \frac{l(\theta) - l_a(\theta)}{l_p(\theta) - l_a(\theta)}$$

verwendet. In unserer Standardsituation sind $p_p(\theta)$ der Volumenanteil des Perlits, $l(\theta)$ die aktuelle Länge der Probe zur Temperatur $\theta$, $l_a(\theta)$ und $l_p(\theta)$ die entsprechenden Längen, wenn die Probe nur aus Austenit bzw. Perlit bestünde. Die Formel (1.2) folgt aus der Anwendung der linearen Mischungsregel bezüglich der Volumenanteile auf die aktuelle Länge der Probe. Wir wollen hier kurz der Frage nachgehen, ob diese Formel (1.2) sich in Übereinstimmung mit den in Punkt 3 hergeleiteten befindet.

Wir drücken die in (1.2) vorkommenden Längen mit Hilfe der zu (5.16) analogen Formeln

(5.21) $l(\theta) = l_0 + \alpha\ (\theta - \theta_0)\ l_0$,

(5.22) $l_p(\theta) = l_{op} + \alpha_p\ (\theta - \theta_0)\ l_{0p}$,

(5.23) $l_a(\theta) = l_{0a} + \alpha_a\ (\theta - \theta_0)\ l_{0a}$

aus. Dabei sind alle Wärmeausdehnungskoeffizienten auf die Starttemperatur $\theta_0$ bezogen. Aus der Versuchsanordnung ergibt sich $l_0 = l_{0a}$. Benutzen wir für $\alpha$ die Mischungsregel (5.15), so folgt aus (1.2) und (5.21) – (5.23)

$$(5.24) \qquad p_p(\theta) = p_p(\theta_0) \cdot \frac{(\theta - \theta_0)(\alpha_p - \alpha_a)}{(\theta - \theta_0)(\alpha_p - \alpha_a) + \frac{l_{0p} - l_{0a}}{l_{0a}} + \alpha_p (\theta - \theta_0) \frac{l_{0p} - l_{0a}}{l_{0a}}} .$$

Wird die Umrechnungsformel (2.11) benutzt, so erhalten wir aus (5.24) leicht

$$(5.25) \qquad p_p(\theta) = p_p(\theta) \frac{\rho_p(\theta)\, \rho_0}{\rho(\theta)\, \rho_{0p}} \cdot \frac{(\theta - \theta_0)(\alpha_p - \alpha_a)}{(\theta - \theta_0)(\alpha_p - \alpha_a) + \frac{l_{0p} - l_{0a}}{l_{0a}} + \alpha_p (\theta - \theta_0) \frac{l_{0p} - l_{0a}}{l_{0a}}} ,$$

dabei sind $\rho_0$ die Dichte der Probe für $\theta_0$ (gleich der Dichte des Austenits für $\theta_0$), $\rho_{0p}$ die Dichte des Perlits für $\theta_0$, $\rho_p(\theta)$ und $\rho(\theta)$ entsprechend die Dichten des Perlits und des Gemisches für $\theta$. Wäre die Formel (1.2) genau im Rahmen der im Punkt 3 getroffenen Annahmen, so müsste der in (5.25) auf der rechten Seite bei $p_p(\theta)$ stehende Faktor gleich eins sein. Anhand konkreter Dilatometerdaten ist ein Vergleich der Formeln (1.2) und (3.12) möglich.

### 5.6. Berücksichtigung von nicht umwandelnden Mischungsbestandteilen

Bisher haben wir angenommen, dass die umwandelnde Probe aus genau zwei Komponenten (Phasen) bestehe, von denen die eine in die andere umwandele. Verschiedentlich kann es vorkommen, dass nicht an der Umwandlung beteiligte Mischungskomponenten vorhanden sind, wie z.B. Primärkarbid beim Stahl 100Cr6 in Abhängigkeit von den Austenitisierungsbedingungen. Wir nehmen an, dass diese Komponente homogen verteilt und ihr Massenanteil $c$ ($0 < c < 1$) bekannt sei.

Eine mögliche Modellierung als Dreikomponentenmischung mit einer konstanten Komponente entsprechend den Darlegungen im Punkt 3 erfordert die Kenntnis der Dichte der nichtumwandelnden Phase als Funktion der Temperatur. Das könnte auf größere Probleme stoßen.

Ein anderer Weg sieht wie folgt aus:

Wir behandeln die Mischung als Zweikomponentensystem. Wir betrachten also als erste Phase z.B. das Gemisch aus Austenit und Primärkarbid und als zweite etwa das von Perlit und Primärkarbid. Wir verfahren wie im Punkt 3 dargelegt. Die Dichten müssen dann in der im Punkt 4 beschriebenen Weise gewonnen werden. Nach

Erhalt des Massenanteils für das Gemisch Perlit / Primärkarbid, wird dieser mit der Zahl $(1 - c)$ multipliziert.

### 5.7. Mehrkomponentensysteme

Sind $n > 2$ Komponenten (Phasen) mit sich verändernden Anteilen an der Umwandlung beteiligt (z.B. Austenit zu Perlit und Martensit), so führt das Vorgehen nach dem Kapitel 3 zu einem unterbestimmten Gleichungssystem für $n - 1$ Variable. Selbst ein Messen der Querdehnung würde wegen der Homogenität keine zusätzliche Information erbringen (Vgl. (3.5)). Theoretisch denkbar wäre, eine weitere physikalische Größe, z.B. den elektrischen Widerstand, simultan zu messen. Bei $n = 3$ könnte dann die Evolution der Phasenanteile bestimmt werden. Dem stehen große Probleme technischer Art gegenüber, wie z.B. Widerstandsmessung bei hohen Temperaturen, starker Einfluss der chemischen Zusammensetzung, Gewinnung der Widerstände für die einzelnen Phasen als Funktionen der Temperatur, geringe Unterschiede zwischen den Phasen im Vergleich zu möglichen Störfaktoren und Messfehlern. In der Werkstoffkunde werden daher andere Wege gegangen (Vgl. z.B. [Mac94]).

**Literatur:**


| | |
|---|---|
| [Ahr00] | Ahrens, U., Besserdich, G., Maier, H. J.: Spannungsabhängiges bainitisches und martensitisches Umwandlungsverhalten eines niedrig legierten Stahl, HTM 55 (2000) 6, 329-338 |
| [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 |
| [Ber99] | Berthelot, J.- M.: Composite materials – mechanical behaviour and structural analysis, Springer-Verlag, New York, 1999 |
| [Böh03] | Böhm, M., Hunkel, M., Schmidt, A., Wolff, M.: Evaluation of various phase-transition models for 100Cr6 for application in commercial FEM programs, to appear in Proceedings of the 2nd Intern. Conf. on Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, 2003 |
| [Dac02] | Dachkovski, S., Böhm, M.: A Note on Finite Thermoplasticity with Phase Changes, Berichte aus der Technomathematik 02-04, Universität Bremen, 2002 |
| [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 |
| [Fis96] | Fischer, F. D., Sun, Q. P., Tanaka, K.: Transformation-induced plasticity, (TRIP) Appl. Mech. Rev. 49, pp. 317 – 364, 1996 |

| | |
|---|---|
| [Hau00] | Haupt, P.: Continuum Mechanics and Theorie of Materials, Springer-Verlag Berlin, 2000 |
| [Hof02] | Hoffmann, F., Keßler, O., Lübben, Th., Mayr, P.: „Distortion Engineering“ – Verzugsbeherrschung in der Fertigung, HTM 57 (2002) 3, 213-217 |
| [Hou86] | Hougardy, H. P., Yamazaki, K.: An imptoved calculation of the transformation of steel, steel research 57 (1986) 9, 466-471 |
| [Hun03] | Hunkel, M.: Private Mitteilung |
| [Hun99] | Hunkel, M., Lübben, T., Hoffmann, F., Mayr, P.: Modellierung der bainitischen und perlitischen Umwandlung bei Stählen, HTM 54 (1999) 6, |
| [Lar95] | Larsson, S., Mangard, M.: Determination of phase transformation kinetics when tempering martensitic hardened low alloy steels, LiTH-IKP-Ex-1234, Institut of Technology, Department of Mechanical Engineering, Linköping, Sweden, 1995 |
| [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, 1984 |
| [Lev98] | Levitas, V. I.: Thermomechanical theory of martensitic phase transformations in inelastic materials, Int. J. Solids Structures, 35, pp. 889 – 940, 1998 |
| [Lüd00] | Lüdecke, C., Lüdecke, D.: Thermodynamik, Springer-Verlag Berlin, 2000 |
| [Mac92] | Macherauch, E.: Praktikum in Werkstoffkunde, 10. Auflage, Vieweg & Sohn, Braunschweig 1992 |
| [Mit02] | Mittemeijer, E. J., Sommer, F.: Solid state phase transformation kinetics: a modular transformation model, Z. Metallkunde 93 (2002) 5, 352-361 |
| [Mit92] | Mittemeijer, E. J.: Review – Analysis of the kinetics of phase transformations, Journal of Materials science 27, 3977-3987, 1992 |
| [Mül73] | Müller, I.: Thermodynamik – Grundlagen einer Materialtheorie, Bertelsmann Universitätsverlag, Düsseldorf, 1973 |
| [Ric73] | Richter, F.: Die wichtigsten physikalischen Eigenschaften von 52 Eisen-werkstoffen, Verlag Stahleisen, Düsseldorf, 1973 |
| [Roh96] | Rohloff, H., Zastera, A.: Physikalische Eigenschaften gebräuchlicher Stähle, Verlag Stahleisen GmbH, Düsseldorf, 1996 |
| [Wol02] | 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 |

**Berichte aus der Technomathematik** ISSN 1435-7968

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

**Reports** **Stand: 28. Januar 2003**

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.

03-01. Michael Wolff, Michael Böhm, Serguei Dachkovski:
*Volumenanteile versus Massenanteile – der Dilatometerversuch aus der Sicht der Kontinuumsmechanik,* Januar 2003.