UNIVERSITÄT BREMEN

# Zentrum für Technomathematik

Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

## Übersicht über einige makroskopische Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl

**Michael Böhm** **Serguei Dachkovski**
**Martin Hunkel** **Thomas Lübben** **Michael Wolff**

Report 03-09

**Berichte aus der Technomathematik**

**Report 03-09** **August 2003**

# Übersicht über einige makroskopische Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl

M. Böhm [1)], S. Dachkovski [1)], M. Hunkel [2)], T. Lübben [2)], M. Wolff [1)]

**Zusammenfassung:** Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, eine systematische Übersicht über makroskopische Modelle für die Phasenumwandlungen im Stahl gegeben. Dabei wird der Stahl als eine koexistierende Mischung seiner möglichen Phasen modelliert. Auf mikroskopische Aspekte der Phasenumwandlungen wird nur in geringem Maße eingegangen.
Diese Arbeit entstand mit teilweiser Unterstützung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft DFG über den Sonderforschungsbereich 570 „Distortion Engineering“ an der Universität Bremen.

**Abstract:** It is the aim of the present paper to give a systematic review of macroscopic models of phase transformations in steel. Thereby steel is regarded as a coexisting mixture of its phases. Microscopical aspects of phase transformations are only considered to a minor extent.
This work has partially been supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) via the Collaborative Research Centre SFB 570 „Distortion Engineering“.

## Inhalt:

1. Einführung

2. Zweiphasenmodelle

   2.1. Diffusionsgesteuerte Umwandlungen

      2.1.1. Isotherme Umwandlungen - die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung

      2.1.2. Nicht-isotherme Umwandlungen

         2.1.2.1. Modelle auf der Basis der JMA-Differentialgleichung

            $\alpha$) Mit Korrekturfaktor

            $\beta$) Modellbildung durch Diskretisierung

            $\gamma$) Berücksichtigung der Temperaturgeschichte

         2.1.2.2. Modelle auf der Basis der JMA-DG und der Scheil-Regel

         2.1.2.3. Modelle auf der Basis von weiteren Differentialgleichungen

   2.2. Martensitische Umwandlungen

3. Einführen von Schaltern zur Steuerung der Umwandlungen

4. Mehrphasenmodelle

      4.1. Modell der Umwandlung des Austenits in mehrere Phasen

      4.2. Modell mit Berücksichtigung der Austenitisierung

[1] ) Zentrum für Technomathematik, FB 3 (Mathematik und Informatik), Universität Bremen
[2] ) Institut für Werkstofftechnik (IWT) Bremen

## 1. Einführung

Phasenumwandlungen im Zuge von Wärmebehandlungen sind ein wichtiges Phänomen im Materialverhalten von Stahl. Diese sind mit dem thermischen und mechanischen Verhalten der Bauteile gekoppelt und können u.a. Ursache für Maß- und Formänderungen (Verzug) und Eigenspannungen sein. Eine notwendige Voraussetzung zur Modellierung und Simulation des Gesamtprozesses, z.B. der Wärmebehandlung, ist das Studium von Teilprozessen unter idealisierten Bedingungen, z.B. der Phasenumwandlungen unter vorgegebenen Temperaturverläufen.

Die vorgelegte Arbeit hat als Ziel, eine zusammenfassende Darstellung von makroskopischen Modellen für Phasenumwandlungen, insbesondere unter nichtisothermen Bedingungen, zu geben.

Die Anwendbarkeit der einzelnen Modelle für bestimmte Situationen und Stahlsorten ist durch Vergleich von Rechnungen mit experimentellen Daten zu prüfen. In diesem Zusammenhang verweisen wir auf die Arbeiten [Böh02, 03], [Dac03c], in denen Modelle für die Umwandlung des Austenits in den Perlit beim Stahl 100Cr6 getestet und vergleichend bewertet wurden.

Als Legierung aus mindestens den zwei Elementen Eisen und Kohlenstoff, meist jedoch weiteren, besitzt Stahl ein sehr komplexes physikalisches Verhalten. Die chemische Zusammensetzung beeinflusst wesentlich die Eigenschaften des Stahls. Charakteristisch für den Stahl sind eine sehr differenzierte Mikrostruktur (Phasen, Körner, Textur) und die wesentlich temperaturabhängigen Phasenumwandlungen (Für Einzelheiten und weitere Quellen sei auf [Mac92], [Dah93] sowie auf [Bur65] und [Chr75] verwiesen.)

Da wir in dieser Arbeit nur auf sogenannte makroskopische Modelle eingehen, die eine Modellierung im Rahmen der Kontinuumsmechanik ermöglichen, wird auf Erscheinungen auf der Meso- oder Mikroebene nur in sehr geringem Maße eingegangen. Wir betrachten den Stahl als koexistierende Mischung seiner Phasen (z.B. Austenit, Perlit, Martensit), die in diesem Rahmen als Mischungskomponenten erscheinen. Von der konkreten Situation ist abhängig, welche Bestandteile in eine Phase eingehen. Als Beispiel sei der Perlit genannt, der bekanntlich aus Ferrit und Zementit besteht. Bei der makroskopischen Modellierung der Phasenumwandlung von Austenit zu Perlit werden seine beiden Bestandteile meist als eine Phase behandelt.

Durch Dichteänderungen und andere Effekte können bei Phasenumwandlungen unerwünschte Form- und Maßänderungen, sogenannte Verzüge, auftreten, die die Qualität von Bauteilen stark beeinträchtigen können. Die Kenntnis über die Phasentransformationen unter den verschiedenen äußeren Bedingungen ist von großer Bedeutung für die mögliche Vorhersage von Verzug bzw. für dessen Minimierung durch geeignete Maßnahmen (vgl. z.B. [Hof02]).

Die Phasenumwandlungen sind nicht nur stark temperatur-, sondern auch spannungsabhängig. Somit liegt in den meisten Anwendungsfällen eine wechselseitige Kopplung zwischen den Phasen, der Temperatur und der mechanischen Größen wie Verzerrungen und Spannungen vor (vgl. z.B. [Ino85, 89], [Sjö85, 94], [Mit87], [Ver87], [Vis87], [Bes93], [Höm95, 96, 02], [Fis96, 00], [Ron00], [Den97, 02], [Ber99], [Fuh99], [Obe99], [Pie00a, 00b], [Ahr00, 02], [Wol00, 02a, 02b, 03b, 03c], [Dac03a, 03b] und die dort zitierten Quellen.).

Wie allgemein üblich, werden in einfachen, relativ gut beherrschbaren Versuchen einzelne Aspekte des Materialverhaltens studiert, um aus den gewonnenen Erkenntnissen dann kompliziertere Modelle zu gewinnen. Derartige Experimente sind z.B. Dilatometerversuche oder Versuche unter definierter Temperaturführung und Belastung (z.B. Zug, Druck oder Torsion) auf speziellen Maschinen (vgl. z.B. [Ahr00, 02], [Wol03d]). Im Dilatometerversuch wird meist die unbelastete Probe einer bekannten Temperaturführung unterworfen, wobei bei der Auswertung des Versuchs von einer homogenen Verteilung der Temperatur und der Phasen ausgegangen wird. Aus diesem Grunde wird bei dem Versuch, die Phasenumwandlungen zu modellieren, zuerst von einem gegebenen Temperaturverlauf $\theta : [0, T] \to \mathbb{R}$ $(T > 0)$ ausgegangen.

In dieser Arbeit werden nur Phasenumwandlungen bei Abwesenheit von Spannungen betrachtet. Bezüglich der Modellierung von spannungsabhängigem Umwandlungsverhalten sei z.B. auf [Ino85, 89], [Sjö85, 94], [Den97], [Ahr00, 02], [Wol03d] verwiesen. Weiter setzen wir Homogenität der Phasenverteilung in den Proben voraus und unterdrücken daher die Ortsabhängigkeit.

In der Werkstoffkunde ist es üblich, mit den Volumenanteilen der Phasen zu arbeiten. Es ist ebenso möglich, mit Massenanteilen zu arbeiten. Beim Stahl ist die Differenz dieser beiden Größen klein, so dass bei den meisten praktischen Anwendungen zwischen Massen- und Volumenanteilen nicht unterschieden werden muss. Zu einer

ausführlichen Diskussion der hiermit zusammenhängenden Fragen sei auf [Wol03a] verwiesen. In der vorliegenden Arbeit verstehen sich die Phasenanteile stets als Volumenanteile. Aus der Mischungstheorie folgt, dass die Phasenanteile zwischen null und eins liegen und ihre Summe stets gleich eins ist.
Die Numerierung der Formeln erfolgt separat in jedem nur aus Ziffern gebildeten Unterpunkt, um die Übersicht zu erhöhen und zu große Zahlen zu vermeiden.

## 2. Zweiphasenmodelle

Wir betrachten zuerst die Umwandlung einer Phase in eine andere, ohne dass eine weitere Phase hinzutritt. Dabei nehmen wir vorerst an, dass die gegebene Temperatur ($\theta = \theta(t)$ für $t \in [0, T]$, in der Regel wird die Celsius-Skala benutzt) sich nur in dem Bereich ändert, in dem diese Situation gegeben ist. Damit vermeiden wir, in die nachfolgenden Gleichungen Schalterfunktionen einfügen zu müssen. Im Punkt 3 soll dieser Aspekt behandelt werden.

### 2.1. Diffusionsgesteuerte Umwandlungen

Die Umwandlungen des Austenits in die anderen Phasen außer in den Martensit laufen diffusionsgesteuert ab, da die Diffusion der Legierungselemente eine wesentliche Rolle spielt. Diese Umwandlungen laufen im Zeitraum von Sekunden bis Jahren ab und sind damit wesentlich langsamer als die (nicht diffusionsgesteuerte) Umwandlung des Austenits in den Martensit, die mit Schallgeschwindigkeit vonstatten geht. Die Rückumwandlung der übrigen Phasen in den Austenit ist in den meisten Fällen ebenfalls diffusionsgesteuert.

#### 2.1.1. Isotherme Umwandlungen - die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung

Strenggenommen sind isotherme Umwandlungen eine Idealisierung. Wir verstehen eine Umwandlung als isotherm, wenn die Überführung der Probe auf die Haltetemperatur keinen Einfluss auf die nachfolgende Umwandlung hat. Die Dilatometerprobe wird „schnell“ auf die gewünschte Temperatur gebracht und diese dann konstant gehalten. Bei einer sehr schnellen Umwandlung ist dieser Versuch schwer zu realisieren. Aus diesem Grunde wird die Bildung des Austenits aus den ferritischen Phasen oft unter konstanter Aufheizgeschwindigkeit untersucht (vgl. z.B. [Gar98], [Cab01], [Mio03], [Sur03] sowie die Ausführungen zu Beginn von Punkt

2.1.2.). In der Praxis werden die Umwandlungen meist durch Zeit-Temperatur-Umwandlungs-Diagramme (ZTU-Diagramme) bzw. Zeit-Temperatur-Austenitisierungs-Diagramme (ZTA-Diagramme) beschrieben. Wir verweisen auf den Atlas der Wärmebehandlung [Ros72] für detailierte Ausführungen.

Bis auf die Umwandlung Austenit zu Martensit werden die anderen Umwandlungen bei *konstanter* Temperatur $\theta$ fast immer in guter Übereinstimmung mit Experimenten durch die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung (abgekürzt JMA-Gleichung) (vgl. z.B. [Joh39], [Chr75], [Leb84], [Hun99]) beschrieben. Um uns festzulegen, betrachten wir die Umwandlung von Austenit zu Perlit. Die Probe wird bei mehr als 800 °C austenitisiert und danach auf eine konstante Umwandlungstemperatur $\theta$ unterhalb einer bestimmten Temperatur $\theta_p$, der Perlit-Starttemperatur (unterhalb der die Bildung des Perlits möglich ist) gebracht. Es gilt also

(1) $\theta < \theta_p$,

Falls zum Zeitpunkt $t = 0$ kein Perlit vorliegt, also

(2) $p(0) = 0$

gilt, lautet die JMA-Gleichung für den zum Zeitpunkt $t$ gebildeten Volumenanteil der Perlits $p$:

(3) $$p(t) = \bar{p}\,(1 - \exp(-(\frac{t}{\tau})^n))$$

Verschiedentlich wird die Gleichung (3) durch die Einführung eines neuen Parameters $b := \tau^{-n}$ umgeschrieben zu

(4) $$p(t) = \bar{p}\,(1 - \exp(-b\,t^n)).$$

Hierbei sind $\bar{p}$ mit $0 < \bar{p} \leq 1$ der (der konstanten Umwandlungstemperatur $\theta$ entsprechende) Gleichgewichtsanteil vom Perlit, $\tau$ und $n$ positive Materialparameter. Die Parameter $\bar{p}$, $n$, $\tau$ sind Funktionen der Umwandlungstemperatur $\theta$. Solange wir Umwandlungen bei konstanter Temperatur betrachten, schreiben wir die Parameter ohne ihr Argument $\theta$.

Im Falle von $\bar{p} = 1$ wird von einer vollständigen Umwandlung (Reaktion), ansonsten von einer unvollständigen gesprochen (vgl. [Rét87, 97] zur Systematik von sogenannten kinetischen Differentialgleichungen).

Der Materialparameter $\tau$ ist die Zeit, nach deren Ablauf sich 63,2% vom maximal möglichen Perlit $\bar{p}$ gebildet haben ($0{,}632 = 1 - e^{-1}$). Diese Aussage gilt unabhängig von $n$. Das heißt, für gleiche $\tau$ und $\bar{p}$ verlaufen die Kurven, die den Perlit-Anteil über der Zeit darstellen, für verschiedene $n$ durch den gleichen Punkt $(\tau, 0{,}632)$. Die Rolle der Parameter $\tau$ und $n$ wird im folgenden Bild deutlich.

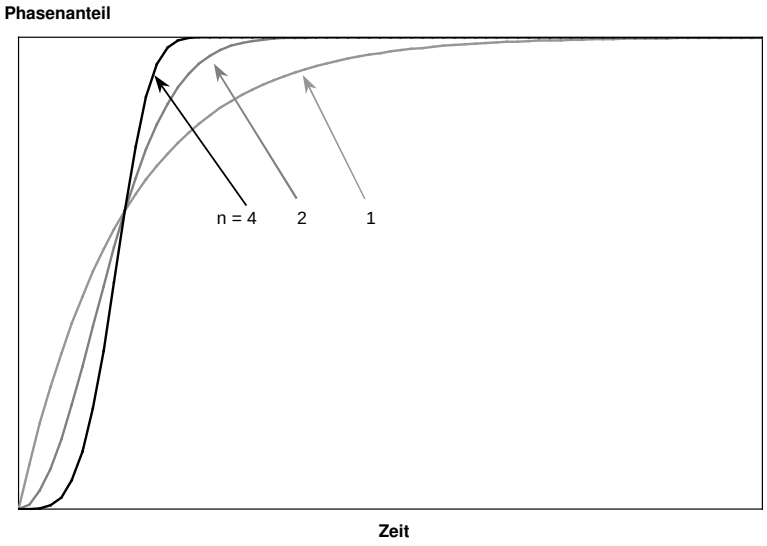


**Bild 1:** Für gleiches $\tau$ und $\bar{p}$ verlaufen die Kurven durch den gleichen Punkt $(\tau, 0{,}632\,\bar{p})$.

Wir erinnern an die Voraussetzung für den Punkt 2, dass die (Umwandlungs-) Temperatur $\theta$ nur in dem Bereich liegen soll, in dem die Bildung weiteren Phasen ausgeschlossen ist.

Wird die Gleichung (3) nach der Zeit $t$ abgeleitet (bei konstanter Temperatur $\theta$), so folgt die lineare Differentialgleichung

$$(5) \qquad p'(t) = \bar{p}\,(\frac{1}{\tau})^n\, n\, t^{n-1} \exp(-(\frac{t}{\tau})^n).$$

Mit Hilfe der Lösung (3) lässt sich der Exponentialterm eliminieren, was zu einer ebenfalls linearen Differentialgleichung

$$(6) \qquad p'(t) = (\bar{p} - p(t))\,(\frac{1}{\tau})^n\, n\, t^{n-1}$$

führt. Aus (3) folgt die Beziehung

$$(7) \qquad t = \tau\,[\,-\ln(1 - p(t)\,\bar{p}^{-1})\,]^{\frac{1}{n}}.$$

Somit ist es möglich, in der DG (6) (wie auch in der DG (5), was wir hier aber nicht tun) den Ausdruck $t^{n-1}$ ganz oder teilweise mit Hilfe von (7) zu ersetzen. Aus der offensichtlichen Beziehung, die sich bei [Rét97] findet,

(8) $$t^{n-1} = t^{\frac{n-q}{q}} t^{\frac{n(q-1)}{q}},$$

wobei $q$ ein positiver (möglicherweise auch von der Temperatur $\theta$ abhängiger) Parameter sei, sowie (6) und (7) ergibt sich

(9) $$p'(t) = (\bar{p} - p(t))\, n\, \tau^{-\frac{n}{q}}\, t^{\frac{n-q}{q}}\, [\, -\ln(1 - p(t)\, \bar{p}^{-1})\,]^{1-\frac{1}{q}}.$$

Für die Wahl $q := n$ erhalten wir aus (9) eine autonome Differentialgleichung, in der die Zeit $t$ nicht mehr explizit auftritt:

(10) $$p'(t) = (\bar{p} - p(t))\, \frac{n}{\tau}\, [\, -\ln(1 - p(t)\, \bar{p}^{-1})\,]^{1-\frac{1}{n}}.$$

Die Differentialgleichung (10) soll als JMA-Differentialgleichung (JMA-DG) bezeichnet werden. In anderem Kontext ist sie semi-additiv (vgl. [Rét97]). Die nicht-linearen Gleichungen (9) und (10) besitzen ein anderes Lösungverhalten als die linearen Gleichungen (5) und (6). Während die Differentialgleichungen (5) und (6) zur Anfangsbedingung (2) die einzige Lösung (3) besitzen, besitzen die Anfangswertaufgaben (9), (2) (für $n \geq q > 1$) sowie (10), (2) (für $n > 1$) neben der (nicht-trivialen) Lösung (3) auch die triviale Lösung $p(t) = 0$ für alle $t$, was bei der Anwendung auf Phasenumwandlungen der Realität widerspricht.

Die Gleichung (10) hat gegenüber der einfacheren Gleichung (6) den Vorteil, dass sie explizit nicht die Zeit $t$ enthält, also autonom und somit invariant gegenüber einer Verschiebung des Anfangszeitpunktes ist. Daher wird die Gleichung (10) bei Anwendungen bevorzugt, bei ihrer numerischen Lösung wird statt des Anfangswertes $p(0) = 0$ oft ein von null verschiedener kleiner positiver Wert

(11) $$p(0) = p_0 \qquad \text{mit z.B.} \qquad p_0 = 10^{-7}$$

gewählt (vgl. z.B. [Böh02, 03]). Dann ist die Anfangswertaufgabe (10), (11) eindeutig lösbar. Ein Nachteil ist, dass der Anfangswert $p_0$ als zusätzlicher Parameter auftritt, von dem das Ergebnis abhängt. Möglichkeiten, dieses auch bei nicht-isothermen Umwandlungen auftretende Problem zumindest teilweise zu lösen, bestehen darin, mit einer anderen Prozedur einen neuen Startpunkt $t_0$ und Anfangswert $p_0$ zu erhalten. Neben der Anwendung der Scheil-Regel (vgl. Punkt 2.1.2.2.) oder der Modelle nach Hougardy oder Denis (vgl. Punkt 2.1.2.1.β) bietet sich folgendes Vorgehen an, wenn die Anfangsbedingung (2) vorliegt. Mit Hilfe der JMA-Gleichung (3) berechnen wir die Zeit $t_0$, nach der sich ein bestimmter Anteil $p_0 > 0$ der neuen Phase gebildet hat. (Für $p_0 = 0{,}01$ wird diese Zeit wird oft als Inkubationszeit bezeichnet). Aus der Beziehung

(12) $p_0 = \bar{p}\,(1 - \exp(-(\frac{t_0}{\tau})^n))$

erhalten wir

(13) $t_0 = \tau\,[-\ln(1 - p_0\,\bar{p}^{-1})\,]^{\frac{1}{n}}$.

Anschließend stellen wir zur JMA-DG (10) die neue Anfangsbedingung

(14) $p(t_0) = p_0\ (> 0)$.

Diese Aufgabe (10), (14) ist eindeutig lösbar. Dieses soeben skizzierte Vorgehen ist auch für nicht-isotherme Umwandlungen (vgl. weiter unten) anwendbar, wenn in (13) für $\tau$, $n$ und $\bar{p}$ entsprechend die Werte $\tau(\theta_0)$, $n(\theta_0)$ bzw. $\bar{p}(\theta_0)$ (mit $\theta_0$ – Temperatur für $t = 0$) genommen werden.

Zusammenfassend können wir festhalten: Für konstantes $\theta$ besitzen die DG (5), (6), (9) und (10) zur Anfangsbedingung (2) die gleiche nicht-triviale Lösung (3). Würde jedoch die bisher als konstant angenommene Umwandlungstemperatur $\theta$ als eine Funktion von $t$ angesehen, so wären die Lösungen dieser Anfangswertaufgaben (jetzt mit $\bar{p} = \bar{p}(\theta(t))$, $\tau = \tau(\theta(t))$, $n = n(\theta(t))$) i.a. verschieden. Somit ergeben sich Möglichkeiten zur Modellierung nicht-isothermer Umwandlungen, worauf wir im nächsten Punkt zu sprechen kommen. Zusätzlich kann dann $q$ als eine Funktion der Temperatur $\theta$ angenommen werden, allerdings werden dann zur Parameterbestimmung auch nicht-isotherme Experimente benötigt (vgl. [Rét97]).

Wir weisen darauf hin, dass für die allgemeinere Anfangsbedingung (14) die Lösungen der Anfangswertaufgaben für die einzelnen Differentialgleichungen (5), (6), (9) und (10) i.a. verschieden sind. Die einzige Lösung der Aufgabe (6), (14) lautet, wie leicht nachzuprüfen

(15) $p(t) = \bar{p}\,(\,1 - \exp(\,(\frac{t_0}{\tau})^n - (\frac{t}{\tau})^n\,)\,) + p_0\,\exp(\,(\frac{t_0}{\tau})^n - (\frac{t}{\tau})^n\,)\,)$.

Für $p_0 \neq 0$ lautet die einzige Lösung der Aufgabe (10), (14) dagegen

(16) $p(t) = \bar{p}\,(\,1 - \exp(-(\,\frac{t}{\tau} - \frac{t_0}{\tau} + [\,-\ln(1 - p_0\,\bar{p}^{-1})\,]^{\frac{1}{n}}\,)^n\,)\,)$.

Diese Unterschiede sind bei der Entwicklung von Diskretisierungsverfahren (s. Punkt 2.1.2.1.) für nicht-isotherme Umwandlungen zu beachten, wenn auf kleinen Zeitintervallen mit konstanter Temperatur gerechnet wird.

Zum Schluss dieses Punktes wollen wir noch erwähnen, wie aus einem isothermen Umwandlungsdiagramm für eine bestimmte Stahlsorte die entsprechenden Materialparameter $\tau = \tau(\theta)$ und $n = n(\theta)$ bestimmt werden können.
Im Bild 2 ist ein schematisches isothermes Umwandlungsdiagramm mit der typischen „Nase“ gegeben (vgl. z.B. [Mac92], [Dah93] für detaillierte Erläuterungen). Uns interessiert hier nur der Temperaturbereich unterhalb der Perlit-Starttemperatur $\theta_p$.

Außerdem möge gelten $\bar{p}(\theta) = 1$. Für jede Temperatur $\theta$ unterhalb von $\theta_p$ wird die linke Kurve, die Ein-Prozent-Kurve, zu einem Zeitpunkt $t_1$ und die rechte Kurve, die Neunundneunzig-Prozent-Kurve, zu einem Zeitpunkt $t_2$ erreicht.

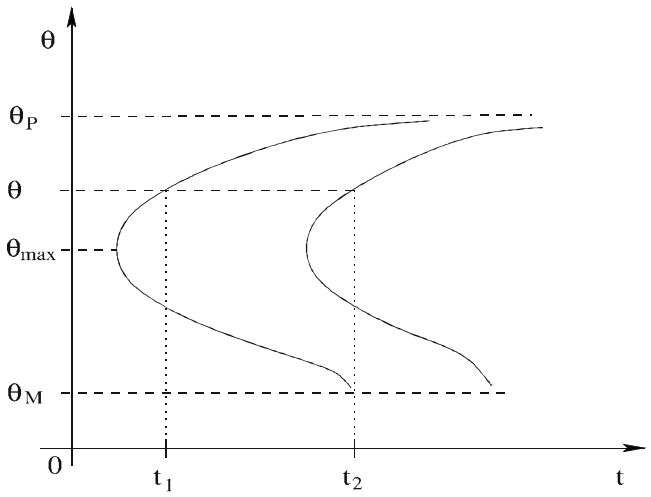


**Bild 2:** Schema eines isothermen Umwandlungsdiagramms

Wir erhalten somit zwei Gleichungen zur Bestimmung von $\tau(\theta)$ und $n(\theta)$, nämlich

(17) $$0{,}01 = 1 - \exp\left(-\left(\frac{t_1}{\tau(\theta)}\right)^{n(\theta)}\right),$$

(18) $$0{,}99 = 1 - \exp\left(-\left(\frac{t_2}{\tau(\theta)}\right)^{n(\theta)}\right).$$

Wird diese Prozedur für hinreichend viele Temperaturen $\theta$ durchgeführt, so erhält man die Materialparameter $\tau$ und $n$ als Funktionen der Temperatur (vgl. hierzu auch [Höm96]).

### 2.1.2. Nicht-isotherme Umwandlungen

Eine formale Anwendung der für isotherme Umwandlungen aus der JMA-Gleichung im vorigen Punkt erhaltenen Differentialgleichungen auf nicht-isotherme Umwandlungen führt oft zu unbefriedigenden Resultaten.

Wie Experimente zeigen, beschreibt die JMA-DG (10) bei nicht-isothermen Umwandlungen, besonders bei Abkühlung, die realen Prozesse oft zu ungenau (vgl. [Leb84], [Hun99], während [Rét97] eine bessere Anwendbarkeit bemerkt).

Es ist verschiedentlich möglich, die JMA-DG (10) in hinreichender Übereinstimmung für die Umwandlung mit konstanter Aufheizgeschwindigkeit in den Austenit zu verwenden, wir verweisen auf [Mio03] bezüglich 42CrMo4 sowie auf [Gar98] bezügliches eines eutektoiden Stahls sowie auf [Sur03] bezüglich der Stahlsorten 100Cr6 und 16MnCr5. In der letztzitierten Arbeit wird mit von der Aufheizgeschwindigkeit $\theta'$ abhängigem $\tau$ gearbeitet.

Offenbar ist die Anwendbarkeit der JMA-DG wesentlich von der Art der Umwandlung (z.B. Bildung oder Zerfall des Austenits), der untersuchten Stahlsorte und der Temperaturführung abhängig. Somit besteht eine wichtige Aufgabe darin, für konkrete Stahlsorten die verschiedenen Umwandlungsmodelle für beliebige Temperaturführungen (lineares, exponentielles Abkühlen, mit Halten zwischendurch usw.) zu testen, zu vergleichen und somit zu einem für die betrachtete Situation geeignetem Modell zu gelangen. In [Böh02, 03] und [Dac03c] wurden von den Autoren einige Schritte auf diesem Weg für den Stahl 100Cr6 gegangen.

Wir bemerken an dieser Stelle, dass die JMA-Gleichung (3), mit variabler Temperatur $\theta$ betrachtet, zur Modellierung der nicht-isothermen Umwandlung nicht geeignet ist. Denn bei diesem Vorgehen würde die Gleichung (3) zu jedem Zeitpunkt $t$ den Perlitanteil angeben, der sich auch bei als konstant angenommener Temperatur $\theta(t)$ nach Ablauf der Zeit $t$ gebildet hätte. Für einen geeignet zu wählenden Abkühlverlauf unterhalb der Perlit-Starttemperatur ergebe sich dann für den Perlitanteil keine monoton wachsende Funktion, was der Realität widerspräche.

Im Gegensatz zur (diffusionsgesteuerten) isothermen ist eine befriedigende Modellierung der nicht-isothermen Umwandlung noch nicht gegeben. Es wurden im Laufe der Zeit verschiedene Modelle vorgeschlagen, um allgemeinere nicht-isotherme Umwandlungen hinreichend genau zu beschreiben. Im Wesentlichen werden und wurden dabei drei Wege beschritten:

- Modifizierung der JMA-DG
- Verbinden von JMA-DG und Scheil-Regel
- Ansätze mit anderen Differentialgleichungen

### 2.1.2.1. Modelle auf der Basis der JMA-Differentialgleichung

Die aus der JMA-Gleichung (3) erhaltenen Differentialgleichungen (5), (6), (9) und (10) wurden im vorigen Punkt für eine konstante Umwandlungstemperatur $\theta$ betrachtet. Daher wurde die Abhängigkeit von $\theta$ in diesen Gleichungen nicht aufgezeigt. Um nicht-isotherme Umwandlungen zu beschreiben, kann $\theta$ als Funktion der Zeit $t$ angenommen werden, was zu den entsprechenden Differentialgleichungen mit variablem $\theta$ führt, die jetzt alle i.a. verschiedene Lösungen besitzen und somit auch verschiedene Modelle repräsentieren. Wir erhalten also die folgenden Differentialgleichungen

(1) $$p'(t) = \bar{p}(\theta(t)) \left(\frac{1}{\tau(\theta(t))}\right)^{n(\theta(t))} n(\theta(t))\, t^{\,n(\theta(t))-1} \exp\left(-\left(\frac{1}{\tau(\theta(t))}\right)^{n(\theta(t))}\right),$$

(2) $$p'(t) = (\bar{p}(\theta(t)) - p(t))\, n(\theta(t))\, \tau^{-\frac{n(\theta(t))}{q(\theta(t))}}\, t^{\frac{n(\theta(t)) - q(\theta(t))}{q(\theta(t))}} \left[-\ln(1 - p(t)\, \bar{p}(\theta(t))^{-1})\right]^{1 - \frac{1}{q(\theta(t))}},$$

(3) $$p'(t) = (\bar{p}(\theta(t)) - p(t)) \left(\frac{1}{\tau(\theta(t))}\right)^{n(\theta(t))} n(\theta(t))\, t^{\,n(\theta(t))-1},$$

(4) $$p'(t) = (\bar{p}(\theta(t)) - p(t)) \frac{n(\theta(t))}{\tau(\theta(t))} \left[-\ln(1 - p(t)\, \bar{p}(\theta(t))^{-1})\right]^{1 - \frac{1}{n(\theta(t))}}.$$

mit der allgemeinen Anfangsbedingung

(5) $$p(t_0) = p_0 \qquad \text{mit } 0 \le p_0 < 1.$$

Hierbei ist $q$ eine positiv-wertige Funktion (vgl. die Ausführungen zur Gleichung (9) in 2.1.1.). Aus (2) erhalten wir für $q = n$ die Gleichung (4), für $q = 1$ die Gleichung (3).

(Für den Anfangswert $p_0 = 0$ sind wiederum für die Gleichungen (2) und (4) zusätzliche triviale Lösungen möglich – s. oben) Wir nehmen an, dass die Materialparameter stetige Funktionen der Temperatur und die Temperatur eine stetige Funktion der Zeit seien.

Ist die betrachtete Umwandlung (bei uns exemplarisch die des Austenits in den Perlit) nicht für alle in Frage kommenden Temperaturen vollständig, so müssen die Differentialgleichungen (1) – (4) korrigiert werden. Es seien

(6) $$0 < \bar{p}(\theta(s)) \le 1 \qquad \text{für } s \ge 0$$

und

(7) $$p_0 < \bar{p}(\theta(0)).$$

Die letzte Bedingung (7) sichert, dass die Umwandlung beginnen kann. Die Umwandlung findet aber nur dann statt, wenn

(8) $p(t) < \bar{p}(\theta(t))$

gilt. Die Differentialgleichungen müssen also mit der Schalterfunktion

(9) $H(\bar{p}(\theta(t)) - p(t))$

multipliziert werden, wobei $H$ die bekannte Heaviside-Funktion mit

(10) $$H(s) := \begin{cases} 1, & \text{für } s > 0 \\ 0, & \text{für } s \leq 0 \end{cases}$$

darstellt. In [Rét97] wurde die nicht-isotherme Umwandlung (mit konstanter Abkühlungsrate) des Austenits in den Perlit für einen niedrig legierten eutektoiden Stahl untersucht. Dabei wurde gefunden, dass die Anwendung der Differentialgleichung (4) eine besseres Ergebnis als (3) liefert. Es wurde mit theoretischen Überlegungen gezeigt, dass die Gleichung (1) nicht anwendbar ist.

Ausgangspunkt der verschiedenen Bemühungen, ein geeignetes Modell zu finden, ist oft die DG (4), die aus physikalischen Gründen den Vorzug erhält, da in ihr die Zeit $t$ nur über die Temperatur eingeht. Diese DG wollen wir in der Folge ebenso JMA-DG nennen wie im Falle konstanter Temperatur (vgl. (10) aus 2.1.1.). Wir wenden uns jetzt den folgenden Möglichkeiten einer Modellerweiterung zu:

$\alpha$) Multiplikation der JMA-DG (4) mit einem Korrekturfaktor,

$\beta$) Modellbildung durch Diskretisierung,

$\gamma$) Berücksichtigung der Temperaturgeschichte.

**$\alpha$) Korrekturfaktor in der isothermen JMA-DG**

Eine Möglichkeit, die JMA-DG (4) für eine nicht-isotherme Umwandlung (besonders bei Abkühlung) anzupassen, besteht darin, die rechte Seite von (4) mit einem von $\theta$ und $\theta'$ abhängigen Faktor

(11) $f(\theta, \theta')$ mit $f(\theta, 0) = 1$

zu multiplizieren. Dabei wird in [Hun99] die Darstellung

(12) $f(\theta, \theta') = 1 + g(\theta)\theta'$,

und im Programm-Paket SYSWELD™ [SYS00] der Ansatz

(13) $f(\theta, \theta') = h(\theta')$

verwendet. Das Problem besteht im Auffinden der Funktionen $g$ und $h$ durch Experimente und / oder theoretische Überlegungen. In [Hun99] wird hierfür ein Ansatz vorgestellt, der zwei freie Parameter enthält.

Aus (4) und (12) erhalten wir eine modifizierte JMA-Differentialgleichung

$$(14)\quad p'(t) = (\bar{p}(\theta(t)) - p(t)) \frac{n(\theta(t))}{\tau(\theta(t))} [\, - \ln(1 - p(t)\, \bar{p}(\theta(t))^{-1}) \,]^{1 - \frac{1}{n(\theta(t))}} (1 + g(\theta(t))\theta'(t)\,).$$

Wird die Anfangsbedingung (2) aus 2.1.1. gestellt, tritt das schon angesprochene Problem der Nicht-Eindeutigkeit auf. Beim numerischen Verfahren ist also wiederum ein kleiner positiver Wert als Anfangswert zu wählen.

Als Ausgangspunkt einer Erweiterung mit einem Korrekturfaktor (12) (oder (13)) können auch die Differentialgleichungen (2) und (3) dienen. Bei nichtvollständigen Umwandlungen sind die rechten Seiten der modifizierten Differentialgleichungen mit dem Schalter (9) zu multiplizieren. So erhalten wir z.B. für die mit (12) korrigierte JMA-DG

$$(15)\quad p'(t) = (\bar{p}(\theta(t)) - p(t)) \frac{n(\theta(t))}{\tau(\theta(t))} [\, - \ln(1 - p(t)\, \bar{p}(\theta(t))^{-1}) \,]^{1 - \frac{1}{n(\theta(t))}} (1 + g(\theta(t))\theta'(t)\,) \bullet$$

$$\bullet\, H(\bar{p}(\theta(t)) - p(t)),$$

wobei die offensichtliche Beziehung

$$(16)\quad (\bar{p}(\theta(t)) - p(t))\, H(\bar{p}(\theta(t)) - p(t)) = \max\{\, \bar{p}(\theta(t)) - p(t),\, 0\}$$

verwendet werden kann.

### β) Modellbildung durch Diskretisierung

*** Modell von Hougardy / Yamazaki**:

Ausgehend von der integralen JMA-Gleichung (16) aus 2.1.1. für die allgemeine Anfangsbedingung haben Hougardy und Yamazaki [Hou86] ein Modell vorgeschlagen, das den realen Abkühlverlauf näherungsweise durch stückweise konstante Temperaturstufen beschreibt. Auf jedem dieser isothermen Abschnitte wenden sie die JMA-Gleichung unter Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Modellparameter $n$ und $\tau$ an.

Das Zeit-(Grund-)Intervall $[0, T]$ wird in endlich viele Teilintervalle zerlegt:

$$(17)\qquad [t_{i-1}, t_i] \qquad \text{mit } i = 1, ..., N,\ N \in \mathbb{N},\ t_0 < t_1 < ... < t_N.$$

Sei $p_{i-1}$ $(i = 1, ..., N)$ bekannt. Es wird eine fiktive Zeit $t_i^*$ berechnet, die benötigt würde, um mit dem (konstanten) Wert $\theta(t_i)$ den Anteil $p_{i-1}$ zu bilden. Dann wird der Anteil $p_i$ mit der korrigierten Zeit $t_i^* + (t_i - t_{i-1})$ mit der Lösungsformel (16) aus 2.1.1.

berechnet, also mit der JMA-DG (10) aus 2.1.1. und der allgemeinen Anfangsbedingung (5).

Der Iterationszyklus lautet somit:

(18) für $i = 1, ..., N$

$$\theta_i = \theta(t_i), \qquad \tau_i = \tau(\theta_i), \qquad n_i = n(\theta_i), \qquad \bar{p}_i = \bar{p}(\theta_i);$$

falls $p_{i-1} \geq \bar{p}_i$, so $\quad p_i := p_{i-1}$;

$$t_i^* = \left[ - \tau_i^{n_i} \ln\left( 1 - p_{i-1}\, \bar{p}_i^{-1} \right) \right]^{\frac{1}{n_i}};$$

$$p_i = \bar{p}_i \left(1 - \exp\left(- \tau_i^{-n_i} \left(t_i^* + (t_i - t_{i-1})\right)^{n_i}\right)\right)$$

falls $i < N$, so $i := i + 1$, sonst Ende.

Im Bild 3 haben wir einen Iterationsschritt nach Hougardy schematisch dargestellt, der die physikalische Intention gut widerspiegelt.

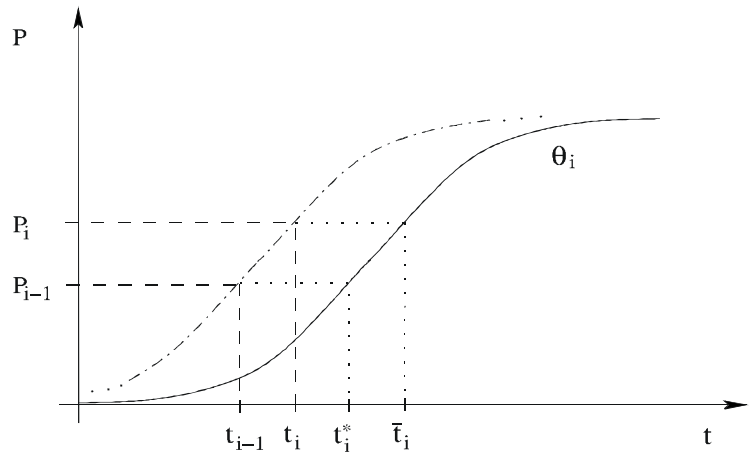


**Bild 3:** Zur Illustration des Modells nach Hougardy / Yamazaki

Zur Zeit $t_{i-1}$ liege der Perlitanteil $p_{i-1}$ vor. Die rechte Kurve beschreibt die isotherme Umwandlung mit der Temperatur $\theta_i$. Diese Kurve wird in Richtung der t-Achse so parallel verschoben, so dass sie durch den Punkt $(t_{i-1}, p_{i-1})$ verläuft (gestrichelte Darstellung). Der Perlitanteil $p_i$ zum Zeitpunkt $t_i$ ist gleich dem, der zur Zeit $\bar{t}_i$ bei der konstanten Temperatur $\theta_i$ gebildet würde. Wegen der Parallelverschiebung der einen Kurve in die andere gilt

$$\bar{t}_i - t_i = t_i^* - t_{i-1}, \text{ woraus natürlich} \qquad \bar{t}_i = t_i^* + (t_i - t_{i-1})$$

folgt.

*** Modell von Denis** et al. [Fer85], [Den92]:

Wir nehmen eine Zerlegung des Zeitintervalls $[0, T]$ wie in (17) an. Außerdem sei ein Wert $\tilde{p}$ gegeben, der für den Phasenanteil nach Ablauf der Inkubationszeit steht.

Oft wird $\tilde{p} := 0{,}01$ gewählt.

Wir betrachten folgenden Iterationszyklus

(19) für $i = 1, ..., N$

$$\theta_i = \theta(t_i), \qquad \tau_i = \tau(\theta_i), \qquad n_i = n(\theta_i), \qquad \overline{p}_i = \overline{p}(\theta_i), \text{ sowie } p_i := p_{i-1}, \text{ falls } p_{i-1} \geq \overline{p}_i.$$

nach der Scheil-Regel (s. Punkt 2.1.2.2.) wird die Inkubationszeit iterativ berechnet.

Seien $s_0 = 0$, $i = 1$,

solange $s_i < 1$,

$$\tilde{\tau}(\theta_i) = [- \tau_i^{n_i} \ln( 1 - \tilde{p}\, \overline{p}_i^{-1} )\, ]^{\frac{1}{n_i}},$$

$$s_i = s_{i-1} + (t_i - t_{i-1})\, \tilde{\tau}(\theta_i)^{-1},$$

$i = i + 1$

$$p_0 = \tilde{p}, \qquad t_0 = t_{i-1}$$

Von hier ab wird die Iteration nach Hougardy (18) durchgeführt.

Dieses Verfahren wird z.B. in [Ber99] angewendet. Zum Vergleich der vorstehenden Modelle (Korrekturfaktoren, Modelle nach Hougardy und Denis) werden in [Böh02, 03] einige Vergleichsrechnungen durchgeführt.

*** Allgemeine Diskretisierung**

Bei praktischen Anwendungen der Umwandlungsmodelle werden in aller Regel die zugrunde liegenden DG für die numerische Behandlung (Simulation) diskretisiert, zumal die nicht-linearen DG mit zeitabhängigem $\theta$ i.a. keine Lösung in Quadraturen gestatten. Es ergeben sich die unterschiedlichsten Diskretisierungs- oder Iterationsverfahren.

Wir wenden uns der Diskretisierung der Anfangswertaufgabe (4), (5) zu.

Wir beschreiten hier folgenden Weg: Das Grundintervall $[0, T]$ wird wieder gemäß (17) in endlich viele Teilintervalle $[t_{i-1}, t_i]$ zerlegt. Auf jedem Teilintervall $[t_{i-1}, t_i]$

werden die Anfangswertaufgabe (4), (5) für eine konstante Temperatur gelöst und die so entstehenden Lösungen stetig zusammengeklebt. Dadurch wird die Lösungsformel (16) aus 2.1.1. auf jedem dieser Teilintervalle anwendbar.

Im Einzelnen verfahren wir wie folgt:

Seien $\theta = \theta(t)$ auf $[t_0, t_N]$ und der Anfangswert $p_0 := p(t_0)$ gegeben.

Zu der Folge von Teilungspunkten $t_0 < t_1 < ... < t_N$ wählen wir Folgen von Zwischenpunkten

(20) $$t_0 \le \sigma_1^{\theta} \le t_1 \le \sigma_1^{\theta} \le t_2 \le ... \le t_N, \qquad t_0 \le \sigma_1^{\tau} \le t_1 \le \sigma_1^{\tau} \le t_2 \le ... \le t_N,$$

$$t_0 \le \sigma_1^{n} \le t_1 \le \sigma_1^{n} \le t_2 \le ... \le t_N, \qquad t_0 \le \sigma_1^{p} \le t_1 \le \sigma_1^{p} \le t_2 \le ... \le t_N.$$

Die temperaturabhängigen Materialparameter $\tau$, $n$ und $\bar{p}$ betrachten wir als gegeben.

Die Anteile der sich bildenden Phase $p_i := p(t_i)$ $(i = 1, ..., N)$ werden durch folgenden Iterationszyklus bestimmt:

(21) für $i = 1, ..., N$

$$\theta_i := \theta(\sigma_i^{\theta}), \quad \tau_i := \tau(\theta(\sigma_i^{\tau})), \quad n_i := n(\theta(\sigma_i^{n})), \quad \bar{p}_i := \bar{p}(\theta(\sigma_i^{p}));$$

falls $p_{i-1} \ge \bar{p}_i$, so $p_i := p_{i-1}$;

$$p_i := \bar{p}_i \left( 1 - \exp\left( - \left( \frac{t_i}{\tau_i} - \frac{t_{i-1}}{\tau_i} + \left[ - \ln(1 - p_{i-1}\, \bar{p}_i^{-1}) \right]^{\frac{1}{n_i}} \right)^{n_i} \right) \right)$$

falls $i < N$, so $i := i + 1$, sonst Ende.

Im Fall, dass sowohl $\theta$ stetig von $t$ und $\tau$, $n$, $\bar{p}$ stetig von $\theta$ abhängen, gilt die Aussage:

Geht die Feinheit der Zerlegung, d.h. die maximale Länge der Teilintervalle, gegen null, so nähert sich die durch Iteration erhaltenen Lösung derjenigen der Aufgabe (4), (5) an (im Falle $p_0 = 0$ der nicht-trivialen Lösung), wie durch Vergleich der Beziehung (16) in 2.1.1. mit der vorletzten Zeile im Iterationszyklus (21) sichtbar wird. Die Konsequenz dessen ist somit, dass bei feiner werdender Zerlegung des Grundintervalls $[0, T]$ die iterative Lösung den realen Sachverhalt ungenügend widerspiegelt, wenn ihn die JMA-DG (4) ungenau widerspiegelt. Bei nicht zu feiner Zerlegung besteht Hoffnung, durch geeignete Wahl der Zwischenpunkte in (21) ein befriedigendes Ergebnis zu erzielen.

Wir erhalten aus dem obigen Iterationsverfahren (21) das von Hougardy und Yamazaki vorgeschlagene Modell, wenn die Zwischenpunkte in (20) wie folgt spezialisiert werden:

(22) $\sigma_i^\theta := \sigma_i^\tau := \sigma_i^n := \sigma_i^p := t_i \qquad$ für $i = 1, ..., N.$

**γ) Berücksichtigung der Temperaturgeschichte**

Bei den folgenden Modellen wird der frühere Temperaturverlauf (die „Geschichte“) insgesamt berücksichtigt.

*** Verallgemeinerung von JMA:** Für konstante Materialparameter können wir die JMA-Gleichung wie folgt umschreiben (vgl. [Rét97]):

(23) $$p(t) = \bar{p}\,(1 - \exp(-(\frac{t}{\tau})^n)) = \bar{p}\,(1 - \exp(-\int_0^t \frac{n}{\tau^n}(t-s)^{n-1}\,ds)).$$

Ebenfalls für konstante Materialparameter erhalten wir durch Ableiten nach $t$ die Integro-Differentialgleichung

(24) $$p'(t) = \bar{p} \int_0^t \frac{n(n-1)}{\tau^n}(t-s)^{n-2}\,ds \;\exp(-\int_0^t \frac{n}{\tau^n}(t-s)^{n-1}\,ds).$$

Mit Hilfe von (23) können wir in (24) den Exponentialterm ausschließen und erhalten

(25) $$p'(t) = (\bar{p} - p(t)) \int_0^t \frac{n(n-1)}{\tau^n}(t-s)^{n-2}\,ds.$$

Damit die Integrale existieren, sollte $n > 1$ sein. Jetzt können wir wiederum eine Temperaturabhängigkeit der Materialparameter von $\theta$ annehmen und erhalten z.B. aus (25) die Integro-Differentialgleichung

(26) $$p'(t) = (\bar{p}(\theta(t)) - p(t)) \int_0^t f(\theta(s))\,(t-s)^{n(\theta(s))-2}\,ds$$

mit

(27) $$f(\theta(s)) := \frac{n(\theta(s))(n(\theta(s))-1)}{\tau(\theta(s))^{n(\theta(s))}}.$$

Für $n = 4$ und $\bar{p} = 1$ findet sich dieser Ansatz in [Leb84] und in [Ino85, 89]. In den beiden letztgenannten Arbeiten wurde dieser Ansatz verallgemeinert, indem die Funktion $f$ von den Spannungen und der Kohlenstoffkonzentration im Austenit abhängig sein darf. Wir bemerken, dass für unvollständige Umwandlungen an Stelle von (26)

(28) $$p'(t) = \max\{ \bar{p}(\theta(t)) - p(t), 0\} \int_0^t f(\theta(s)) \, (t - s)^{n(\theta(s)) - 2} \, ds$$

zu verwenden ist.

* **Einführung einer Zustandsvariablen:** In [Mit92, 02], [Lar95] wurde folgende Verallgemeinerung der JMA-Gleichung (3) aus 2.1.1. vorgeschlagen (für vollständige Umwandlungen)

(29) $$p(t) = 1 - \exp( - \beta^n),$$

mit einer Zustandsvariablen $\beta$

(30) $$\beta = \int_0^t k_0 \exp( - \frac{E}{R \, \theta(s)} ) \, ds.$$

In dem Ansatz (30) ist $R$ die Gaskonstante, die materialspezifischen Parameter $E$ („Aktivierungsenergie“) und $k_0$ sind mit Hilfe von speziellen Experimenten zu bestimmen. Unter $\theta$ ist in (30) die absolute Temperatur zu verstehen. Der Exponent $n$ wird für den Fall $\theta' = \text{const}$ („lineares Abkühlen oder Erwärmen“) als konstant angenommen. Unter einer Kleinheitsannahme kann das Integral in (30) durch eine Näherungsformel ersetzt werden (s. [Lar95]).

* **Berücksichtigung einer gemittelten Temperatur:**

Im folgenden Modell einige der Autoren (M. B, S. D, M. W.) vor, in der JMA-DG (4) aus 2.1.2.1. anstelle der aktuellen Temperatur $\theta(t)$ eine geeignet gemittelte Temperatur zu verwenden, womit die Geschichte der Temperatur berücksichtigt wird. Zu einem gegebenen Temperaturverlauf $\theta$ kann ein gewichtetes Mittel berechnet werden:

(31) $$\hat{\theta}(t) := \alpha(1 - e^{-\alpha(t - t_0)})^{-1} \int_{t_0}^t \theta(s) \, e^{-\alpha(t - s)} \, ds \qquad \text{für } t > t_0 \qquad \text{mit } \alpha > 0,$$

$$\hat{\theta}(t_0) = \theta(t_0).$$

Dabei ist $t_0$ der Zeitpunkt, ab dem die Perlit-Starttemperatur unterschritten wird. (Nach unserer generellen Annahme soll der Temperaturverlauf im weiteren dann unterhalb der Perlit-Starttemperatur bleiben, und es soll sich keine weitere Phase bilden.) Dann ersetzen wir den Augenblickswert der Temperatur in der JMA-DG (4)

durch den Wert $\hat{\theta}(t)$ und erhalten (unter Beachtung einer möglichen unvollständigen Umwandlung)

$$(32) \qquad p'(t) = \max\{ \bar{p}(\hat{\theta}(t)) - p(t), 0 \} \frac{n(\hat{\theta}(t))}{\tau(\hat{\theta}(t))} [ - \ln(1 - p(t)\, \bar{p}(\hat{\theta}(t))^{-1} ) ]^{1 - \frac{1}{n(\hat{\theta}(t))}}.$$

Ein wesentlicher praktischer Vorteil von (32) besteht darin, dass auf bisherige Werte für die Materialparameter $\bar{p}$, $\tau$ und $n$ aus den isothermen Umwandlungen zurückgegriffen werden kann. Für konstante Temperaturverläufe ergibt sich die bekannte JMA-Differentialgleichung (10) aus 2.1.1. Der Abklingparameter $\alpha$ ist durch Experimente anzupassen.

In [Dac03c] stellen die Autoren erste Ergebnisse hierzu für den Stahl 100Cr6 vor. Bei exponentiellem Abkühlen geben dieses Modell und die JMA-Differentialgleichung (4) aus 2.1.2.1. eine vergleichbar gute Beschreibung der Realität mit Vorteilen des Modells (32) bei schnellerem Abkühlen. Die nach Hunkel et al. modifizierte JMA-Differentialgleichung (14) aus 2.1.2.1. liefert für die betrachteten Abkühlverläufe bessere Werte als die beiden vorgenannten Modelle.

Für Diskretisierungen bietet sich an, die Formel (31) so zu modifizieren, dass $\hat{\theta}$ stückweise konstant ist. Dann kann wiederum die Formel (16) aus 2.1.1. in jeder Iteration benutzt werden (vgl. den Iterationszyklus (21)).

#### 2.1.2.2. Modelle auf Basis der JMA-Differentialgleichung und der Scheil-Regel

Die sogenannten Additivitätsregel von Scheil ([Sch35], [Wev52], [Cah56], [Chr75], [Fas95], [Fon96], [Rét97, 99a, 99b]) kann zur Beschreibung der diffusionsgesteuerten Umwandlung des Austenits (bei vollständiger Umwandlung und mit $p(0) = 0$) verwendet werden. Bevor wir die Scheil-Regel angeben und mit der Untersuchung fortfahren, möchten wir kurz auf ihre die Motivation eingehen, wobei wir den Überlegungen in [Wev52] folgen.

Im Bild 4 ist wiederum schematisch ein isothermes Umwandlungsdiagramm dargestellt, vgl. Bild 1, wobei wir nur die 1%-Kurve eingetragen haben.

Wir nehmen zuerst an, dass der Temperaturverlauf stückweise konstant sei. In unserer dargestellten Situation habe sich nach der Zeit $t$ ein Perlit-Anteil $p(t)$ gebildet. Im Zeitintervall $[0, t_1]$ war die Probe der Temperatur $\theta_1$, im Zeitintervall $[t_1, t]$ der Temperatur $\theta_2$ unterworfen. Der Ansatz von Scheil lautet nun:

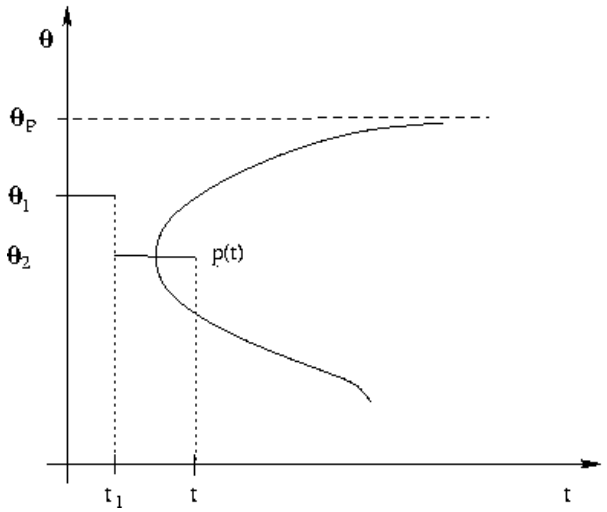


**Bild 4:** Zur Interpretation der Scheil-Regel

Der im Intervall konstanter Temperatur gebildete Anteil am Gesamtanteil $p(t)$ ist gleich diesem, multipliziert mit dem Quotienten aus der Länge des Intervalls („Haltezeit“) und der Zeit $t_p(\theta, p(t))$, die zur isothermen Bildung des Anteils $p(t)$ bei der Intervalltemperatur $\theta$ erforderlich wäre. Also gilt für die zwei Intervalle im Bild 3

$$(1) \qquad \frac{t_1}{t_p(\theta_1, p(t))}\, p(t) + \frac{t - t_1}{t_p(\theta_2, p(t))}\, p(t) = p(t).$$

Für endlich viele Teilintervalle einer Zerlegung $0 = t_0 < t_1 < \ldots < t_N = t$ des Intervalls $[0, t]$ ergibt sich dann nach Kürzen des Wertes $p(t)$:

$$(2) \qquad \sum_{j=1}^{N} \frac{t_j - t_{j-1}}{t_p(\theta(t_j), p(t))} = 1,$$

wobei wir den auf $[t_{j-1}, t_j]$ konstanten Wert von $\theta$ mit $\theta(t_j)$ bezeichnen. Der Übergang zum Integral liefert dann die als Scheil-Regel (oder Additivitätsregel) bezeichnete Formel

$$(3) \qquad \int_0^t \frac{d\sigma}{t_p(\theta(\sigma), p(t))} = 1.$$

Dabei ist $t_p = t_p(\theta, p)$ die Zeit, die benötigt wird, um bei konstanter Temperatur $\theta$ den Perlit-Anteil $p$ zu bilden. Meist wird $t_p$ aus der JMA-Gleichung (3) aus 2.1.1. berechnet zu

$$(4) \qquad t_p(\theta, p) = \tau(\theta)\, (-\ln(1 - p))^{\frac{1}{n(\theta)}}.$$

Aus Gründen der Übersicht setzen wir $\bar{p} = 1$ voraus. Aus (3) und (4) folgt dann

$$(5) \qquad \int_0^t \frac{1}{\tau(\theta(\sigma))}\, (-\ln(1 - p(t)))^{-\frac{1}{n(\theta(\sigma))}}\, d\sigma = 1.$$

Ursprünglich wurde die Regel von Scheil (3) für erstarrende Schmelzen, bei denen auch wesentlich Keimbildungsprozesse eine Rolle spielen, entwickelt. Später wurde sie von anderen Autoren zur Beschreibung der diffusionsgesteuerten Bildung der Gefügearten angewandt und verallgemeinert (s. die Dissertation von Medeiros Fonseca [Fon96] für Einzelheiten, kritische Einwände zur Scheil-Regel und weitere Quellen sowie [Rét97, 99b]).

Eine theoretische Untersuchung und Auswertung der Gleichung (3) im Zusammenhang mit „semi-additiven" Gleichungen der Form

$$\frac{dp}{dt} = h(p, \theta) \tag{6}$$

findet sich in [Rét99b]. Außerdem sei angemerkt, dass die Scheil-Regel (3) für Prozesse gilt, die sich mit einer „additiven kinetischen" Gleichung

$$\frac{dp}{dt} = h(p)\, K(\theta) \tag{7}$$

beschreiben lassen. Die Gleichung (6) berücksichtigt nicht die Geschichte der Temperatur (vgl. Punkt 2.1.2.1 $\gamma$). Eine erweiterte nichtlineare Scheil-Regel, die die Temperaturgeschichte, aber auch andere Größen wie etwa die Spannung berücksichtigt, wird in [Rét99b] entwickelt.

In [Ver87], [Vis87], [Höm95] wird direkt mit der Formel (5), also einer Integralgleichung, gearbeitet. In [Höm96] wird (5) nach $t$ differenziert, um eine DG zu erhalten, nämlich

$$p'(t) = (1 - p(t))\, \frac{1}{\tau(\theta(t))} \left\{ \int_0^t \frac{1}{\tau(\theta(\sigma))\, n(\theta(\sigma))} \left(-\ln(1 - p(t))\right)^{-1 - \frac{1}{n(\theta(\sigma))} + \frac{1}{n(\theta(t))}} d\sigma \right\}^{-1}. \tag{8}$$

Die zugehörige Anfangsbedingung ist

$$p(0) = 0. \tag{9}$$

Hier haben wir dasselbe Problem wie im Punkt 2.1.1. Es tritt zusätzlich die triviale Lösung $p(t) = 0$ für alle $t$ auf. Ein praktischer Ausweg besteht wieder darin, anstelle der Null einen kleine positiven Wert in (9) vorzugeben. Wir bemerken, dass für konstantes $\theta$ aus (8) unter Zuhilfenahme der JMA-Gleichung (3) aus 2.1.1. die DG (5) und (6) aus 2.1.1. folgen (mit $\bar{p} = 1$).

Bisher wurde von der Anfangsbedingung (9) ausgegangen. Es ist auch möglich, anstelle von (9) die allgemeinere Anfangsbedingung

$$p(t_0) = p_0 \tag{10}$$

(mit $0 \le p_0 < 1$) zu verwenden. Dann kann auf die Bildung des ausstehenden Perlits (wir bleiben bei der Situation „Austenit zu Perlit“) die Additivitätsregel angewandt werden. Allerdings ist dann die Beziehung (16) aus 2.1.1. zu verwenden (wieder der Einfachheit halber mit $\bar{p} = 1$). Somit ergibt sich

$$(11) \quad t_p(p, \theta) = t_0 + \tau(\theta)\,[-\ln(1 - p(t))]^{\frac{1}{n(\theta)}} - \tau(\theta)\,[-\ln(1 - p_0)]^{\frac{1}{n(\theta)}}.$$

Die allgemeinere Scheil-Regel lautet dann

$$(12) \quad \int_{t_0}^{t} \{t_0 + \tau(\theta(\sigma))\,[-\ln(1 - p(t))]^{\frac{1}{n(\theta(\sigma))}} - \tau(\theta(\sigma))\,[-\ln(1 - p_0)]^{\frac{1}{n(\theta(\sigma))}}\}^{-1}\, d\sigma = 1.$$

Ein Ableiten nach $t$ führt zu einer Differentialgleichung in Analogie zu (8)

$$(13) \quad p'(t) = (1 - p(t))\, F(p(t), t, ...)$$

mit einem geeigneten Ausdruck für $F$.

Verschiedentlich wird die Scheil-Regel benutzt, um die Inkubationszeit zu berechnen. Darunter wird oft die Zeit verstanden, nach deren Ablauf sich ein Prozent der neuen Phase gebildet hat. Also

$$(14) \quad \int_{0}^{t_0} \frac{d\sigma}{t_p(\theta(\sigma),0,01)} = 1.$$

Danach kann die Gleichung (13) mit dem Anfangswert $p_0 = 0,01$ verwendet werden (vgl. [Höm96]).

### 2.1.2.3. Modelle auf der Basis von weiteren Differentialgleichungen

Neben den vorstehend aufgeführten Umwandlungsmodellen, die sich wesentlich aus der JMA-Differentialgleichung und ggf. der Scheil-Regel speisen, wurden auch Modelle vorgeschlagen und untersucht, die andere Differentialgleichungen benutzen.

**α)** Für die Modellierung nicht-isothermer Umwandlungen wurden von Leblond et al. [Leb84, 85] eine lineare Differentialgleichung zur Modellierung einer unvollständigen Umwandlung vorgeschlagen:

$$(1) \quad p'(t) = \frac{\bar{p}(\theta(t)) - p(t)}{\mu(\theta(t))}.$$

Dabei ist $\bar{p}(\theta)$ wiederum der Anteil des Perlits, der sich nach unendlich langer Zeit bei der konstanten Temperatur $\theta$ einstellen würde, $\mu$ ist ein temperaturabhängiger

Materialparameter. Für den Fall $n = 1$ folgt aus den Differentialgleichungen (2) und (4) aus 2.1.2.1. sofort die Leblond-Gleichung (1) und es gilt $\mu = \tau$.

In der Arbeit [Leb85] findet sich auch ein Zusammenhang der Umwandlung gemäß (1) mit der Kohlenstoffkonzentration im Austenit.

Der Vorteil des durch (1) beschriebenen Modells liegt in seiner Einfachheit. Schwierigkeiten zeigen sich bei der Auswahl von geeigneten Ansätzen für die Funktion $\mu$, um eine hinreichend gute Beschreibung der Umwandlungen für unterschiedliche Abkühlverläufe zu erreichen. In [Dac03c] wird für einen speziellen Ansatz für $\mu$ das Modell (1) mit der JMA-Differentialgleichung (4) aus 2.1.2.1. sowie mit dem in (31), (32) in 2.1.2.1. vorgeschlagenen Modell, das die Temperaturgeschichte berücksichtigt, verglichen. Dabei zeigt das Modell (1) eine schlechtere Übereinstimmung mit dem Experiment als die beiden anderen.

**β)** In [Rét97] wird die Modellierung von nicht-isothermen Umwandlungen mit Hilfe nichtlinearer Differentialgleichungen, sogenannter „kinetischer" Differentialgleichungen diskutiert. Einige dieser Gleichungen folgen direkt aus der JMA-Gleichung bei konstanter Temperatur (vgl. (5), (6), (9), (10) aus 2.1.1.) und werden dann für nichtisotherme Umwandlungen angesetzt (vgl. (1) – (4) in 2.1.2.1.). Darüber hinaus wird in [Rét97] eine DG aufgeführt, die sechs (aus Experimenten anzupassende) Parameter besitzt und die vorher genannten DG als Spezialfälle enthält.

**γ)** Ansätze in Form linearer Differentialgleichungen erster Ordnung für die Umwandlung des Austenits zum Perlit finden sich auch in [Fuh99] und [Wol00] finden.

## 2.2. Martensitische Umwandlungen

Im Unterschied zu den bisher betrachteten diffusionsgesteuerten Umwandlungen verläuft die Umwandlung von Austenit zu Martensit sehr schnell (mit Schallgeschwindigkeit) (vgl. z.B. [Mac92], [Bur65], [Chr75]).

Wir treffen zunächst die idealisierenden Voraussetzungen wie zu Beginn von Kapitel 2.1., insbesondere sei zu Beginn der Martensit-Bildung nur Austenit vorhanden.

Bei vielen Stahlsorten hängt die gebildete Martensit-Menge nur von der Temperatur ab. (Diese muss sich unterhalb der Martensit-Starttemperatur befinden.) Nach Koistinen / Marburger [Koi59] bildet sich bei einer Temperatur $\theta$ kleiner als die

Martensit-Starttemperatur $\theta_{ms}$ folgender Martensitanteil (aus angenommenen allein vorhandenem Austenit)

(1) $$\bar{m}(\theta) = 1 - \exp\left( - \frac{\theta_{ms} - \theta}{\theta_{m0}} \right).$$

Dabei ist $\theta_{m0}$ ein positiver (temperatur*un*abhängiger) Materialparameter. Experimente zeigen, dass beim Vergleich verschiedener Stahlsorten dieser Parameter stark vom Kohlenstoffgehalt abhängt. In [Koi59] findet sich der Wert $\theta_{m0} = 91$ K.

Die Formel (1) sagt nichts über die Evolution der Martensitbildung aus. Experimente zeigen, dass die Martensitbildung „sehr schnell“, (mit Schallgeschwindigkeit) verläuft. Oft wird bei der Modellierung gekoppelter Vorgänge eine Aussage über die Evolution gebraucht. Hierzu ist folgender Weg denk- und gangbar:

Wir nehmen einen monoton fallenden Temperaturverlauf $\theta = \theta(t)$ unterhalb von $\theta_{ms}$ an und unterstellen, dass sich zu jeder Zeit $t$ der Martensitanteil $m(t) := \bar{m}(\theta(t))$ „sehr schnell bildet“. In diesem Fall würde (1) auch die Evolution des Martensitanteils beschreiben, also

(2) $$m(t) = 1 - \exp\left( - \frac{\theta_{ms} - \theta(t)}{\theta_{m0}} \right).$$

Aus (2) erhalten wir eine Differentialgleichung

(3) $$m'(t) = (1 - m(t)) \frac{- \theta'(t)}{\theta_{m0}}$$

mit der Anfangsbedingung

(4) $$m(0) = 0.$$

Die Probe zeigt, dass im Fall $\theta(0) = \theta_{ms}$ durch (2) die einzige Lösung der Anfangswertaufgabe (3), (4) angegeben wird.

Bei der Herleitung von (3) wurde ein monoton fallender Temperaturverlauf angenommen, da der nach der Koistinen-Marburger-Formel (1) berechnete Endanteil des Martensits eine monoton wachsende Funktion (für $\theta \leq \theta_{ms}$) darstellt.

Ist der Abkühlverlauf nicht streng monoton fallend, so kann sich erst dann weiterer Martensit bilden, wenn die Temperatur „unter das letzte Minimum fällt“ (s. Bild 5).

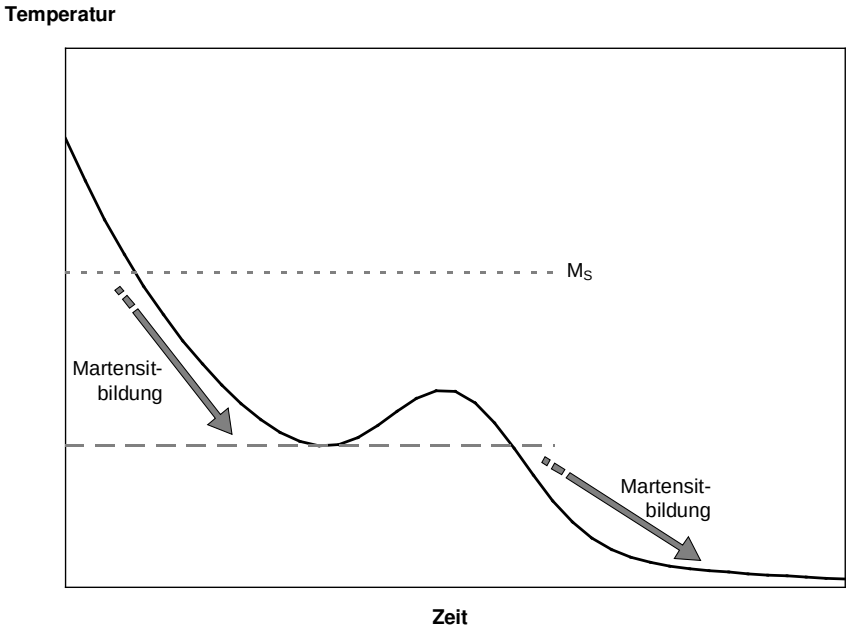


**Bild 5:** Bereiche der Martensit-Bildung

In diesem Fall müssen wir die Gleichung (3) in folgender Weise modifizieren. Wir definieren eine Funktion

(5) $$\bar{\theta}(t) := \min_{0 \le s \le t} \{\theta(s)\}$$

Wir ersetzen in (3) die Temperatur $\theta$ durch $\bar{\theta}$ (für $\theta$ mindestens Lipschitz-stetig) und erhalten

(6) $$m'(t) = (1 - m(t)) \frac{-1}{\theta_{m0}} \bar{\theta}'(t)$$

Aus (6) folgt, dass (zum Zeitpunkt t) Martensit nur gebildet werden kann, wenn gelten

(7) $\theta'(t) < 0$ und $\theta(t) = \bar{\theta}(t)$.

Darüber hinaus muss natürlich sein

(8) $\theta(t) < \theta_{ms}$.

Die Differentialgleichung (6) wird in folgender Weise korrigiert, wobei mögliche Anlasseffekte unberücksichtigt bleiben:

(9) $$m'(t) = (1 - m(t)) \frac{-1}{\theta_{m0}} \bar{\theta}'(t)\, H(\theta_{ms} - \theta(t)).$$

Dabei ist H die Heaviside-Funktion (vgl. (10) in 2.1.2.1.). Die Gleichung (9) berücksichtigt also nicht nur den Augenblickswert $\theta'(t)$, sondern auch die Geschichte

der Temperaturführung. Ist aus anderen Überlegungen bekannt, dass $\theta$ monoton fallend ist, so kann anstelle von (9) die (auch numerisch) einfachere Gleichung

$$(10) \qquad m'(t) = (1 - m(t)) \frac{1}{\theta_{ms}} \max\{-\theta'(t), 0\}\, H(\theta_{ms} - \theta(t)),$$

verwendet werden. Verschiedene Autoren (z.B. [Höm96], [Fuh99]) benutzen Differentialgleichungen der Form (3), wobei heuristische Argumente zur Begründung verwendet werden (Bildungsrate proportional der vorhandenen Austenitmenge und der negativen Temperaturableitung).

Es gibt Modifikationen der Koistinen-Marburger-Gleichung (1) der Art, dass der Ausdruck im Exponenten geändert wird. So wurden z.B. in [Wil86]

$$(11) \qquad \bar{m}(\theta) = 1 - \exp\left( - \frac{(\theta_{ms} - \theta)^n}{\theta_{m0}} \right),$$

sowie in [Yu77]

$$(12) \qquad \bar{m}(\theta) = 1 - \exp\left(- \left[ \frac{\theta - \theta_{ms}}{\theta_{ms} - \theta_{mf}} \right]^2 \right)$$

mit geeigneten Parametern $n > 1$ und $\theta_{mf}$ („Martensit-Endtemperatur“) vorgeschlagen.

Diese Formeln enthalten ebenfalls ohne zusätzliche Annahmen keine Information über die Evolution des Martensits. Wird wiederum angenommen, dass die Umwandlung so schnell abläuft, dass zu jedem Zeitpunkt $t$ der vorhandene Martensit-Anteil bereits gleich dem bei dieser Temperatur maximal möglichen ist, so können durch Ableiten der Formel (11) und (12) nach der Zeit $t$ Differentialgleichungen gewonnen werden. So ergibt sich z.B. aus (11)

$$(13) \qquad m'(t) = (1 - m(t)) \frac{-\theta'(t)}{\theta_{ms}} n\, (\theta_{ms} - \theta(t))^{n-1},$$

sowie nach Berücksichtigung der obigen Ausführungen zu den Voraussetzungen für die Martensitbildung

$$(14) \qquad m'(t) = (1 - m(t)) \frac{-1}{\theta_{m0}} \bar{\theta}'(t)\, n\, (\theta_{ms} - \theta(t))^{n-1}\, H(\theta_{ms} - \theta(t)).$$

In den Arbeiten [Leb84], [Leb85] wird vorgeschlagen, das Model der linearen Differentialgleichung (1) aus Punkt 2.1.2.3. auch für die Beschreibung der Martensitbildung zu verwenden. Dabei wird der sich bei konstanter Temperatur $\theta$ einstellende Wert aus der Koistinen / Marburger – Formel (1) genommen. Somit ergibt sich

$$(15) \qquad m'(t) = \frac{\bar{m}(\theta(t)) - m(t)}{\mu}$$

Die (für viele Stahlsorten) temperaturunabhängige Größe $\mu$ muss aus speziellen Überlegungen und Experimenten bestimmt werden. Zusammen mit den obigen Voraussetzungen für die Martensitbildung erhalten wir ein korrigiertes Modell nach Leblond

$$(16) \qquad m'(t) = \frac{\bar{m}(\theta(t)) - m(t)}{\mu} \frac{-1}{\theta_{m0}} \bar{\theta}'(t)\, H(\theta_{ms} - \theta(t)),$$

oder näherungsweise vereinfacht (vgl. die Argumentation zu (10))

$$(17) \qquad m'(t) = \frac{\bar{m}(\theta(t)) - m(t)}{\mu} \max\{-\theta'(t), 0\}\, H(\theta_{ms} - \theta(t)).$$

### 3. Einführen von Schaltern zur Steuerung der Umwandlungen

Bisher haben wir vorausgesetzt, dass sich die Temperaturen in den Bereichen bewegen, in denen die betrachteten Umwandlungen wirklich stattfinden.

Bei unvollständigen Umwandlungen muss der aktuelle Wert der sich bildenden Phase, z.B. $p(t)$, kleiner sein als der der aktuellen Temperatur $\theta(t)$ entsprechende Maximalwert $\bar{p}(\theta(t))$. In den vorstehenden Ausführungen wurde diese Bedingung durch entsprechende Schalterfunktionen berücksichtigt.

Falls der Temperaturverlauf Bereiche berührt, in denen die betrachtete Umwandlung nicht möglich ist, so sind den Umwandlungsgleichungen weitere Schalter hinzuzufügen. Für die Umwandlung des Austenits in den Perlit ergibt sich z.B. aus der korrigierten JMA-Differentialgleichung (15) aus 2.1.2.1.

$$(1) \qquad p'(t) = \max\{\bar{p}(\theta(t)) - p(t), 0\} \frac{n(\theta(t))}{\tau(\theta(t))} [-\ln(1 - p(t)\,\bar{p}(\theta(t))^{-1})]^{1 - \frac{1}{n(\theta(t))}} \cdot$$

$$\cdot (1 + g(\theta(t))\theta'(t))\, H(\theta_{ps} - \theta(t))$$

Dabei ist $\theta_{ps}$ die Perlit-Starttemperatur. Für die Fälle von Umwandlungen, bei denen es Endtemperaturen gibt, ist in die Umwandlungsgleichungen ein weiterer Schalter einzubauen. Die Anfangsbedingung lautet wiederum

$$(2) \qquad p(0) = p_0,$$

wobei gelten soll

$$(3) \qquad p_0 < \bar{p}(\theta(0)) \qquad (\text{für } \theta(0) < \theta_{ps}).$$

Es sei angemerkt, dass die Gleichung (1) nur die Bildung des Perlits, nicht jedoch eine mögliche Bildung des Austenits beschreibt. Hierzu verweisen wir auf den nächsten Punkt dieser Arbeit.

In ähnlicher Art können die anderen in den vorigen Punkten aufgeführten Differential- und Integro-Differentialgleichungen gesteuert werden.
In [Höm96], [Fuh99], [Wol00] wird mit derartigen Schaltern gearbeitet. In den Iterationsprozeduren müssen entsprechende Abfragen eingebaut werden. Die Verwendung der Heaviside-Funktion kann wegen der Unstetigkeit zu mathematischen Problemen führen, die sich durch Glättung beheben lassen.

## 4. Mehrphasenmodelle

In der Realität laufen oft mehrere Umwandlungen ab (vgl. z.B. [Leb84], [Höm96], [Fuh99], [Wol00]). Bei der Abkühlung des Austenits ist dieser der Rohstoff für alle anderen Phasen. Diese können im Prinzip hintereinander oder auch parallel gebildet werden. Beim sogenannten Austenitisieren werden alle vom Austenit verschiedenen Phasen in diesen umgewandelt, entweder nacheinander oder auch parallel. Wir wollen zuerst wieder exemplarisch bei der Abkühlung bleiben.

### 4.1. Modell der Umwandlung des Austenits in mehrere Phasen

Wie beginnen mit der Gleichung (1) in Punkt 3. für die Umwandlung des Austenits in den Perlit bei Abwesenheit anderer Phasen, die in abgekürzter Form lautet

(1) $$p'(t) = F(t, p)$$

mit

(2) $$F(t, p) = \max \{ \bar{p}(\theta(t)) - p(t), 0\} \frac{n(\theta(t))}{\tau(\theta(t))} [ - \ln(1 - p(t)\, \bar{p}(\theta(t))^{-1}) ]^{1 - \frac{1}{n(\theta(t))}} \cdot$$
$$\cdot (1 + g(\theta)\, \theta') H(\theta_p - \theta(t))$$

Die Gleichung (1) schreiben wir in äquivalenter Weise um zu

(3) $$p'(t) = (1 - p(t)) \frac{F(t, p(t))}{1 - p(t)}.$$

Die Größe F gemäß (2) können wir als Produktionsrate des Perlits interpretieren, den Quotienten

(4) $$F_{rel}(t, p) := \frac{F(t, p)}{1 - p} \qquad \text{für } p < 1, \quad \text{sonst } F_{rel}(t, 1) := 0,$$

als relative Produktionsrate des Perlits bezüglich des für die Umwandlung noch vorhandenen Austenits. Damit gilt also

(5) Produktionsrate =

= Anteil des vorhandenen Austenits $\times$ relative Produktionsrate.

Dieser Ansatz ist verallgemeinerungsfähig auf mehrere Phasen. Bei $m$ Phasen ist der Anteil der vorhandenen Mutterphase (hier Austenit) zum Zeitpunkt $t$ gleich

$$(6) \qquad p_m(t) = 1 - \sum_{j=1}^{m-1} p_j(t),$$

wobei $p_j$ $(j = 1, ..., m - 1)$ für die sich aus dem Austenit bildenden Phasen stehen. Der Austenit selbst tritt hier als m-te Phase auf. Wir ersetzen also den Faktor $(1 - p(t))$ in der Gleichung (3) durch den in (6) stehenden Ausdruck. Analog verfahren wir mit den restlichen Umwandlungsgleichungen für die Phasen 2 bis $m - 1$. Es ergibt sich ein (im Allgemeinen nichtlineares) System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$(7) \qquad p_i'(t) = \left( 1 - \sum_{j=1}^{m-1} p_j(t) \right) F_{rel,i}(t, p_i) \qquad i = 1, ..., m - 1,$$

wobei die $F_{rel,i}(t, p_i)$ die relativen Produktionsraten der jeweils i-ten Phase sind. Bei diesem Ansatz wird davon ausgegangen, dass diese relativen Produktionsraten von den anderen Phasen unabhängig sind. Im Allgemeinen ist es möglich,

$$(8) \qquad F_{rel,i} = F_{rel,i}(t, p_1, ..., p_{m-1})$$

anzusetzen. Wir verweisen auf die Arbeit [Rét01] für Fragen der Modellierung von Mehrkomponentensystemen und für die Anwendung auf eine konkrete Abschrecksituation nebst Berechnung der Phasenanteile anhand der Daten. Zur mathematischen Modellierung von Mehrphasensystemen beim Stahl unter etwas anderen Voraussetzungen sei auch auf die Arbeit [Leb84] verwiesen.

Die zum System (7) gehörenden Anfangsbedingungen sind

$$(9) \qquad p_i(0) = p_{io}, \qquad \text{mit} \quad \sum_{j=1}^{m-1} p_{io} \le 1 \quad \text{und} \quad p_{io} \ge 0.$$

(Es wurde o.B.d.A. $t_0 = 0$ gesetzt.) Das System (7) lässt gleichzeitige Bildung der auftretenden Phasen (z.B. Perlit, Bainit oder Martensit) aus mathematischer Sicht zu. Durch geeignete Wahl von Schaltern in den relativen Produktionsraten mit Hilfe von Start- und / oder Endtemperaturen lassen sich die Möglichkeiten gleichzeitiger oder nacheinander erfolgender Bildung der Phasen modellieren.

Wir können das System (7) für $m - 1$ Phasen formal als System für $m$ Phasen schreiben, indem wir die m-te Gleichung für den Austenit hinzufügen. Dessen Produktionsrate muss nämlich gleich der negativen Summe der Produktionsraten aller aus ihm sich bildenden Phasen sein, wie aus der Mischungstheorie folgt (vgl. hierzu auch [Wol03a]). Somit gilt

(10) $$p_m'(t) = -\left(1 - \sum_{j=1}^{m-1} p_j(t)\right) \sum_{i=1}^{m-1} F_{rel,i}(t, p_i) = -\, p_m(t) \sum_{i=1}^{m-1} F_{rel,i}(t, p_i)$$

mit der Anfangsbedingung

(11) $$p_m(0) = p_{m0} = 1 - \sum_{i=1}^{m-1} p_{i0}.$$

In den Gleichungen (7) kann dann ebenfalls gemäß der Beziehung (6) der Austenitanteil $p_m$ aufgeführt werden.

Aus den Gleichungen (7) und (10) sowie den Anfangsbedingungen (9) und (11) folgt, dass jede Lösung die allgemeine Bilanz für Mischungen

(12) $$\sum_{j=1}^{m} p_j(t) = 1 \qquad \text{für } t \geq 0$$

erfüllt. Unter geeigneten Voraussetzungen an die relativen Produktionsraten lässt sich zeigen, dass die zu erwartenden Bedingungen

(13) $p_j(t) \geq 0$ für $t \geq 0$ und $j = 1, ..., m$

erfüllt sind, und somit das durch (7), (9), (10), (11) beschriebene Modell konsistent ist. Dieses Modell beschreibt den Zerfall einer Phase (der m-ten) in die anderen m - 1, was dadurch ausgedrückt wird, dass die Produktionsraten der Phasen 1 bis $m - 1$ nicht-negativ sind.

### 4.2. Modell mit Berücksichtigung der Austenitisierung

Möglich sind natürlich auch Umwandlungszyklen, bei denen zwischenzeitlich in den Austenit umgewandelt wird, falls die Temperatur die Austenitstart-Temperatur übersteigt. Für diesen Fall ist das obige Modell aus 4.1. zu erweitern.

Das Modell soll nun auch die Bildung des Austenits aus den anderen Phasen und somit den Zerfall dieser in den Austenit beschreiben. Wir erweitern also das System (7), (10) aus 4.1. zu

(1) $$p_i'(t) = p_m(t)\, F_{rel,i}(t, p_i) - p_i(t)\, G_{rel,i}(t, p_i)$$
$$i = 1, ..., m - 1,$$

(2) $$p_m'(t) = -\, p_m(t) \sum_{i=1}^{m-1} F_{rel,i}(t, p_i) + \sum_{j=1}^{m-1} p_i(t)\, G_{rel,i}(t, p_i)$$

Dabei sind die $G_{rel,i}(t, p_i)$ für $i = 1, ..., m - 1$ die relativen Zerfallsraten der i-ten Phase in den Austenit. Zu (1), (2) sind die Anfangsbedingungen (9), (11) aus 4.1. hinzuzufügen. Das System (1), (2) lässt allgemein gleichzeitige Bildung und Zerfall

einer Phase zu. Beim Stahl lässt sich durch den Einbau von Schaltern in die relativen Produktions- und Zerfallsraten eine solche Situation ausschließen.

Wir wollen als Beispiel ein Modell betrachten, das Bildung und Zerfall von Austenit, Perlit und Ferrit beschreibt, wobei wir annehmen, dass die Temperatur während des gesamten zu betrachtenden Prozesses immer oberhalb der Martensit-Start-temperatur bleibt. Wir bezeichnen entsprechend mit $p_3$ den Volumenanteil des Austenits und mit $p_1$, $p_2$ die des Perlits bzw. Ferrits. Dabei mögen sich Perlit und Ferrit gemäß der modifizierten JMA-DG (1) aus Punkt 3. mit jeweils speziellen Materialparametern bilden. Aus Gründen der Übersichtlichkeit nehmen wir an, dass in dem Temperaturbereich, in dem sich Perlit und Ferrit bilden können, eine vollständige Umwandlung möglich ist. D.h., es soll gelten

(3) $\overline{p}_1 = 1, \qquad \overline{p}_2 = 1.$

Damit gelten für die Bildung von Perlit und Ferrit entsprechend

(4) $$p_1'(t) = p_3(t)\,\frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)}\,(-\ln(1-p_1(t)))^{1-\frac{1}{n_1(\theta)}}\,(1+g_1(\theta)\,\theta')\,H(\theta_{ps}-\theta(t)),$$

(5) $$p_1'(t) = p_3(t)\,\frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)}\,(-\ln(1-p_2(t)))^{1-\frac{1}{n_2(\theta)}}\,(1+g_2(\theta)\,\theta')\,H(\theta_{fs}-\theta(t))$$

mit den spezifischen Materialparametern für Perlit (mit Index 1) und Ferrit.

Es ist bekannt, dass für konstante Umwandlungstemperaturen sich der Austenit aus den ferritischen Phasen nach einer JMA-Differentialgleichung (4) aus 2.1.2.1. ohne Korrekturfaktor bildet. Diese Aussage wurde in Experimenten (für einige Stahlsorten) auch für lineares Aufheizen bestätigt (vgl. hierzu die Ausführungen im Punkt 2.1.2.)). Für allgemeines Aufheizen ist den Autoren kein diesbezügliches Ergebnis bekannt. Daher nehmen wir für die Austenitbildung Korrekturfaktoren der Form

(6) $(1 + g_{31}(\theta, \theta')\,\theta''), \qquad (1 + g_{32}(\theta, \theta')\,\theta'')$

an, der für lineares Erwärmen gleich eins ist. Dabei bezieht sich der Index 31 auf die Bildung des Austenits aus dem Perlit, entsprechend 32 auf die Bildung aus dem Ferrit. Die Bildung des Austenits können wir also wie folgt beschreiben

(7) $$p_2'(t) = p_1(t)\,\frac{n_3(\theta)}{\tau_3(\theta)}\,(-\ln(1-p_3(t)))^{1-\frac{1}{n_3(\theta)}}\,(1+g_{31}(\theta,\theta')\,\theta'')\,(1-H(\theta_{as}-\theta(t))) +$$

$$+\,p_2(t)\,\frac{n_3(\theta)}{\tau_3(\theta)}\,(-\ln(1-p_3(t)))^{1-\frac{1}{n_3(\theta)}}\,(1+g_{32}(\theta,\theta')\,\theta'')\,(1-H(\theta_{as}-\theta(t)))$$

Dabei beschreibt der erste Summand in (7) die Bildung des Austenits aus dem Perlit, der zweite die Austenitbildung aus dem Ferrit. Überdies können beide Umwandlungen vollständig sein.

Somit erhalten wir aus (4), (5) und (7) für das Dreiphasensystem Austenit – Perlit-Ferrit die Gleichungen (als Spezialfall von (1), (2))

(8) $$p_1'(t) = p_3(t)\,\frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)}\,(-\ln(1-p_1(t)))^{1-\frac{1}{n_1(\theta)}}\,(1+g_1(\theta)\,\theta')\,H(\theta_{ps}-\theta(t)) +$$

$$-\,p_1(t)\,\frac{n_3(\theta)}{\tau_3(\theta)}\,(-\ln(1-p_3(t)))^{1-\frac{1}{n_3(\theta)}}\,(1+g_{31}(\theta,\theta')\,\theta'')\,(1-H(\theta_{as}-\theta(t))),$$

(9) $$p_2'(t) = p_3(t)\,\frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)}\,(-\ln(1-p_2(t)))^{1-\frac{1}{n_2(\theta)}}\,(1+g_2(\theta)\,\theta')\,H(\theta_{fs}-\theta(t)) +$$

$$-\,p_2(t)\,\frac{n_3(\theta)}{\tau_3(\theta)}\,(-\ln(1-p_3(t)))^{1-\frac{1}{n_3(\theta)}}\,(1+g_{32}(\theta,\theta')\,\theta'')\,(1-H(\theta_{as}-\theta(t))),$$

(10) $$p_3'(t) = -\,p_3(t)\,\frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)}\,(-\ln(1-p_1(t)))^{1-\frac{1}{n_1(\theta)}}\,(1+g_1(\theta)\,\theta')\,H(\theta_{ps}-\theta(t)) +$$

$$+\,p_1(t)\,\frac{n_3(\theta)}{\tau_3(\theta)}\,(-\ln(1-p_3(t)))^{1-\frac{1}{n_3(\theta)}}\,(1+g_{31}(\theta,\theta')\,\theta'')\,(1-H(\theta_{as}-\theta(t))) +$$

$$-\,p_3(t)\,\frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)}\,(-\ln(1-p_2(t)))^{1-\frac{1}{n_2(\theta)}}\,(1+g_2(\theta)\,\theta')\,H(\theta_{fs}-\theta(t)) +$$

$$+\,p_2(t)\,\frac{n_3(\theta)}{\tau_3(\theta)}\,(-\ln(1-p_3(t)))^{1-\frac{1}{n_3(\theta)}}\,(1+g_{32}(\theta,\theta')\,\theta'')\,(1-H(\theta_{as}-\theta(t)))$$

wobei $\theta = \theta(t)$ ein gegebener Temperaturverlauf sei, derart, dass nur die Phasen Austenit, Perlit und Ferrit vorliegen können. Die zugehörigen Anfangsbedingungen zu (8), (9), (10) lauten

(11) $$p_1(0) = p_{01}, \qquad p_2(0) = p_{02}, \qquad p_3(0) = p_{03},$$

wobei die Beziehungen

(18) $$p_{01} + p_{02} + p_{03} = 1, \qquad p_{01} \geq 0, \qquad p_{02} \geq 0, \qquad p_{03} \geq 0$$

gelten müssen. Aus den oben erwähnten mathematischen Gründen (vgl. Punkt 2.1.1.) müssen die Anfangswerte $p_{01}$, $p_{02}$ und $p_{03}$ verschieden von null und eins sein.

Wie im System (7), (10) aus 4.1. sind die Gleichungen (8), (9), (10) voneinander abhängig, die Summe ihrer rechten Seiten ist gleich null. Somit gilt dann für alle Zeiten (als Spezialfall von (12) aus 4.1.) die Bilanzgleichung

(19) $p_1(t) + p_2(t) + p_3(t) = 1.$

Daher genügt es bei praktischen Aufgaben, nur zwei der drei (oder allgemein m - 1 statt m) Phasen zu betrachten.

**Literatur:**


[Ahr00] Ahrens, U., Besserdich, G., Maier, H. J.: Spannungsabhängiges bainitisches und martensitisches Umwandlungsverhalten eines niedrig legierten Stahl, HTM 55, 329-338, (2000).

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

[Ber99] Bergheau, J.-M., Boitout, F., Toynet, V., Denis, S., Simon, A.: Finite Element Simulation of Coupled Carbon Diffusion, Metallurgical Transformation and Heat Transfer with Applications in the Automobile Industry, ASM Paper No 18, (1999).

[Bes93] Besserdich, G.: Untersuchungen zur Eigenspannungs- und Verzugsbildung beim Abschrecken von Zylindern aus den Stählen 42CrMo4 und Ck45 unter Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität, Universität Karlsruhe, Dissertation, (1993).

[Böh02] Böhm, M., Hunkel, M., Schmidt, A., Wolff, M.: Evaluation of various phase-transition models for 100Cr6 for application in commercial FEM-programmes, Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 02-14, (2002).

[Böh03] Böhm, M., Hunkel, M., Schmidt, A., Wolff, M.: Evaluation of various phase-transition models for 100Cr6 for application in commercial FEM programs, Berichte aus der Technomathematik 02-14, Universität Bremen, eingereicht zu Proceedings of the 2nd Intern. Conf. on Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, (2003).

[Bur65] Burke, J.: The kinetics of phase transformations in metals, Pergamon Press Oxford, (1965).

[Cab01] Caballero, F. G., Capdevila, C., Garcia de Andres, C.: Kinetics and dilatometric behaviour of non-isothermal ferrite – austenite transformation, Mat. Science and Techn., Vol. 17, (2001).

[Cah56] Cahn, J. W.: Transformation kinetics during continuous cooling, Acta Metallurgica 4, pp. 572-575, (1956).

[Chr75] Christian, J. W.: The theory of transformations in metals and alloys, Part 1, Pergamon Press, Oxford, (1975).

[Dac03a] Dachkovski, S. Boehm, M.: Finite thermoplasicity with phase changes based on isomorphisms, zur Veröffentlichung im International Journal of Plasticity angenommen, erscheint 2003.

[Dac03b] Dachkovski, S., Böhm, M.: Objective modelling of some elastoplastic materials with phase changes, eingereicht zu den Proceedings der 2nd Intern. Conference Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, (2003).

[Dac03c] Dachkovski, S.; Böhm, M.; Schmidt, A.; Wolff, M.: Comparison of several kinetic equations for pearlite transformation in 100Cr6 steel. Berichte aus der Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Report 03-07, 2003.

[Dah93] Dahl, W. (Hrsg.): Eigenschaften und Anwendungen von Stählen, Bd 1: Grundlagen, Verlag der Augustinus Buchhandlung, Aachen, (1993).

[Den92] Denis, S., Farias, D., Simon, A.: Mathematical model coupling phase transformations and temperature in steels, ISIJ International, 32, pp. 316-325, (1992).

[Den97] Denis, S.: Considering stress-phase transformation interactions in the calculation of heat treatment residual stresses, in: CISM courses and lectures – No 368, Mechanics of solids with phase changes, ed. Bergveiller, M., Fischer, F. D., Springer-Verlag, (1997).

[Den02] Denis, S., Archambault, P., Gautier, E., Simon, A., Beck, G.: Precdiction of residual stress and distortion of ferrous and non-ferrous metals: current status and future developments, J. of Materials Eng. and Performance, 11, (1), pp. 92-102, (2002).

[Fas95] Fasano, A., Primicerio, M.: An analysis of phase transition models, Europ. I. Appl. Math. 7, pp439-451, (1996).

[Fer85] Fernandes, F. M. B., Denis, S., Simon, A.: Mathematical model coupling phase transformation and temperature evolution during quenching of steel, Materials Science and Technology 1 (1985).

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

[Fis00] Fischer, F. D., Reisner, G., Werner, E., Tanaka, K., Cailletaud, G., Antretter, T.: A new view on transformation induced plasticity (TRIP), Int. J. of Plasticity, 16, pp. 723-748, (2000).

[Fon96] Medeiros Fonseca A. S.: Simulation der Gefügeumwandlungen und des Austenitkornwachstums bei der Wärmebehandlung von Stählen, Dissertation, RWTH Aachen, (1996).

[Fuh99] Fuhrmann, J., Hömberg, D.: Numerical simulation of the surface hardening of steel, International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, Vol. 9 No 6, pp. 705-724, MCB University Press 0961-5539, (1999).

[Gar98] Garcia de Andres, C., Caballero, F. G., Capdevila, C., Bhadeshia, H. K. D. H.: Modelling of kinetics and dilatometric behavior of non-isothermal pearlite-to-austenite transformation in an eutectoid steel, Scripta Materialia 39, 6, 791-796, (1998).

[Hof02] Hoffmann, F., Keßler, O., Lübben, T., Mayr, P.: „Distortion Engineering“ – Verzugsbeherrschung in der Fertigung, HTM 57, 3, 213-217, (2002).

[Höm95] Hömberg, D.: A mathematical model for the phase transitions in eutectoid carbon steel, IMA Journal of Applied Mathematics, 54, 31 – 57, Oxford University Press, (1995).

[Höm96] Hömberg, D.: A numerical simulation of the jominy end-quench test, Acta mater, Vol. 44, No 11, pp4375-4385, (1996).

[Höm02] Hömberg, D.: Induction hardening of steel – modeling, analysis, and optimal design of inductors, Habilitationsschrift, Technische Universität Berlin, (2002).

[Hou86] Hougardy, H. P., Yamazaki, K.: An improved calculation of the transformations in steels, Steel Research 57, No 9, (1986).

[Hun99] Hunkel, M., Lübben, T., Hoffmann, F., Mayr, P.: Modellierung der bainitischen und perlitischen Umwandlung bei Stählen, HTM 54, 6, pp. 365-372, (1999).

[Ino85] Inoue, T., Wang, Z.: Coupling between stress, temperature, and metallic structures during processes involving phase transformations, Mat. Sci. Tech. 1 pp. 845 – 850, (1985).

[Ino89] Inoue, T., Wang, Z., Miyao, K.: Quenching stress of carburized steel gear wheel, ICRS2 Beck, G., Denis, S., Simon, A.(eds) Elsevier Appl. Sci., London, New York, pp. 606 – 611, (1989).

[Joh39] Johnson, W.A., Mehl, R. F.: Reaction kinetics in process of nucleation and growth, Trans. AIME, 135, pp. 416 – 458, (1939).

[Koi59] Koistinen, D. P., Marburger, R. E.: A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon and plain carbon steels, Acta metall. 7 (1), pp. 59 – 60, (1959).

[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).

[Leb85] Leblond, J. B., Mottet, G., Devaux, J., Devaux, J. C.: Mathematical models of anisothermal phase transformations in steels and predicted plastic behaviour, Mat. Sci. Tech. 1, pp. 815 – 822, (1985).

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

[Mio03] Miokovic, T., Schwarzer, J., Schulze, V., Vöhringer, O., Löhe, D.: Description of short time phase transformations during the heating of steels based on high-rate experimental data, eingereicht zu Proceedings of the 2nd Intern. Conf. on Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, (2003).

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

[Mit92] Mittemeijer, E. J.: Review – Analysis of the kinetics of phase transformations, Journal of Materials science 27, pp. 3977-3987, (1992).

[Mit02] Mittemeijer, E. J., Sommer, F.: Solid state phase transformation kinetics: a modular transformation model, Z. Metallkunde 93, 5, pp. 352-361, (2002).

[Obe99] Oberste-Brandenburg, C.: Ein Materialgesetz zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation unter Berücksichtigung der transformationsinduzierten Plastizität, Ruhr-Universität Bochum, Dissertation, (1999).

[Pie00a] Pietzsch, R.: Simulation und Minimierung des Verzuges von Stahlprofilen bei der Abkühlung, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Dissertation, (2000).

[Pie00b] Pietzsch, R.: Simulation des Abkühlverzuges von Stahlprofilen, Techniche Mechanik, Bd. 20, Heft 3, pp. 265-274, (2000).

[Rét87] Réti, T., Gergely, M., Tardy, P.: Mathematical treatment of non-isothermal transformations, Mat. Sciences and Techn., 3, pp. 365-372, (1987).

[Rét97] Réti, T., Horváth, L., Felde, I.: A comparative study of methods used for the prediction of nonisothermal austenite decomposition, J. of Mat. Eng. and Performance, 6 (4), pp. 433-442, (1997).

[Rét99a] Réti, T., Bagyinszki, G., Felde, I., Verö, B., Bell, T.: Prediction of as-quanched hardness after rapid autenitzation and cooling of surface hardened steels, Computational Materials Schience, 15, pp. 101-112, (1999).

[Rét99b] Réti, T., Felde, I.: A non-linear extension of the additivity rule, Computational Material Schience, 15, pp. 466-482, (1999).

[Rét01] Réti, T., Fried, Z., L., Felde, I.: Computer simulation of steel quenching process using a multi-phase transformation model, Computational Material Schience, 22, pp. 261-278, (2001).

[Ron00] Ronda, J.; Oliver, G. J.: Consistent thermo-mechano-metallurgical model of welded steel with unified approach to derivation of phase evolution laws and transformation-induced plasticity. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 189 (2000), 361-417.

[Ros72] Rose, A.; Hougardy, H. P.: „Atlas zur Wärmebehandlung von Stählen“, Verlag Stahleisen; Düsseldorf (1972).

[Sch35] Scheil, E.: Archiv des Eisenhüttenwesens, pp. 565-567, (1935).

[Sil97] Silhavý, M.: The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media, Springer-Verlag, (1997).

[Sjö85] Sjöström, S.: Interactions and constitutive models for calculating quench stresses in steel, Mat. Sci. Tech. 1, pp. 823 – 829, (1985).

[Sjö94] Sjöström, S.: Physical, mathematical and numerical modeling for calculation of residual stress, fundamentals and applications. In Proc. 4$^{th}$ Int. Conf. on Residual Stresses, Ed. Society of Experimental Mechanics, S. 484-497, 1994.

[Sur03] Surm, H., Kessler, O., Hunkel, M., Hoffmann, F., Mayr, P.: Modelling the Ferrite/Carbide to austenite Transformation of Hypoeutectoid and Hypereutectoid Steels, 2$^{nd}$ Intern. Conf. on Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, (2003).

[SYS00] SYSWELD$^{TM}$, (2000).

[Ver87] Verdi, C., Visintin, A.: A mathematical model of the austenite-pearlite transformation in plain steel based on the Scheil's additivity rule, Acta Metall. 35 (11) pp. 2711-2717, (1987).

[Vis87] Visintin, A.: Mathematical models of solid-solid phase transitions in steel, IMA J. Appl. Math. 39, pp. 143- 157, (1987).

[Wev52] Wever, F., Krisement, O.: Anlaufzeit der Austenitumwandlung bei verschiedener Art der Abkühlung, Archiv für das Eisenhüttenwesen, 23, 5/6, Verlag Stahleisen Düsseldorf, (1952).

[Wil86] Wildau, M.: Zum Einfluss der Werkstoffeigenschaften auf Spannungen, Eigenspannungen und Maßänderungen von Werkstücken aus Stahl, Dissertation, RWTH Aachen, (1986).

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

[Wol03a] Wolff, M., Dachkovski, S., Böhm, M.: Volumenanteile versus Massenanteile – der Dilatometerversuch aus der Sicht der Kontinuumsmechanik, Berichte aus der Technomathematik, FB, Universität Bremen, Report 303-01, (2003).

[Wol03b] Wolff, M., Schmidt, A., Böhm, M.: Phase transitions and transformation-induced plasticity of steel in the framework of continuum mechanics, eingereicht zu den Proceedings, 2nd Intern. Conf. Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, (2003).

[Wol03c] Wolff, M., Böhm, M.: Umwandlungsplastizität bei Stählen im Konzept der Thermoelasto-Plastizität – modelliert mit dem Ansatz einer Zwischenkonfiguration, Technische Mechanik, Bd 23 (1), pp. 29-48, (2003)

[Wol03d] Wolff, M.; Böhm, M.; Dachkovski, S.; Löwisch, G.: Zur makroskopischen Modellierung von spannungsabhängigem Umwandlungsverhalten und Umwandlungsplastizität bei Stählen und ihrer experimentellen Untersuchung in einfachen Versuchen. Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 03-06, (2003).

[Yu77] Yu, H. J.: Berechnung von Abkühlungs-, Umwandlungs-, Schweiß- und Verformungseigenspannungen mit Hilfe der Methode der Finiten Elemente, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), (1977).

**Adressen der Autoren:**

Prof. Dr. Michael Böhm, Zentrum für Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Postfach 330440, D-28334 Bremen, mbohm@math.uni-bremen.de,

Dr. Serguei Dachkovski, Zentrum für Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Postfach 330440, D-28334 Bremen, dsn@math.uni-bremen.de,

Dr.-Ing. Martin Hunkel, Stiftung Institut für Werkstofftechnik (IWT), Badgasteiner Str. 3, D-28359 Bremen, hunkel@iwt.uni-bremen.de

Dr.-Ing. Thomas Lübben, Stiftung Institut für Werkstofftechnik (IWT), Badgasteiner Str. 3, D-28359 Bremen, lue@iwt.uni-bremen.de

Dr. Michael Wolff, Zentrum für Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Postfach 330440, D-28334 Bremen, 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: 25. August 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.

03-02 Daniel Kessler, Ricardo H. Nochetto, Alfred Schmidt:
*A posteriori error control for the Allen-Cahn Problem: circumventing Gronwall's inequality,* March 2003.

03-03 Michael Böhm, Jörg Kropp, Adrian Muntean:
*On a Prediction Model for Concrete Carbonation based on Moving Interfaces - Interface concentrated Reactions,* April 2003.

03-04 Michael Böhm, Jörg Kropp, Adrian Muntean:
*A Two-Reaction-Zones Moving-Interface Model for Predicting Ca(OH)_2-Carbonation in Concrete,* April 2003.

03-05 Vladimir L. Kharitonov, Diederich Hinrichsen:
*Exponential estimates for time delay systems,* May 2003.

03-06 Michael Wolff, Michael Böhm, Serguei Dachkovski, Günther Löwisch*:*
*Zur makroskopischen Modellierung von spannungsabhängigem Umwandlungsverhalten und Umwandlungsplastizität bei Stählen und ihrer experimentellen Untersuchung in einfachen Versuchen*, Juli 2003.

03-07 Serguei Dachkovski, Michael Böhm, Alfred Schmidt, Michael Wolff:
*Comparison of several kinetic equations for pearlite transformation in 100Cr6 steel*, August 2003.

03-08 Volker Dicken, Peter Maass, Ingo Menz, Jenny Niebsch, Ronny Ramlau:
*Nonlinear Inverse Unbalance Reconstruction in Rotor dynamics*, Juli 2003.

03-09 Michael Böhm, Serguei Dachkovski, Martin Hunkel, Thomas Lübben, Michael Wolff*: Übersicht über einige makroskopische Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl,* August 2003.