UNIVERSITÄT BREMEN

Zentrum für Technomathematik

Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

Numerische Untersuchungen für ein Modell des Materialverhaltens mit Umwandlungsplastizität und Phasenumwandlungen beim Stahl 100Cr6 (Teil 1)

Alfred Schmidt **Michael Wolff**

Michael Böhm

Report 03-13

Berichte aus der Technomathematik

Report 03-13 **September 2003**

Numerische Untersuchungen für ein Modell des Materialverhaltens mit Umwandlungsplastizität und Phasenumwandlungen beim Stahl 100Cr6 (Teil 1)

A. Schmidt, M. Wolff, M. Böhm

Abstract: In this note we present numerical simulations of the deformation behaviour of 100Cr6-steel workpieces under quenching and external load taking into account transformation-induced plasticity during the austenite-to-pearlite transformation. The model used here is a specialisation of a more general one (cf. [Wol03c]) coupling mechanical quantities, temperature and phase fractions. In this paper effects of classical plasticity are excluded and therefore small deformations are used. For simulation we use the adaptive finite element package ALBERT.
The numerical results show qualitatively correctly visible effects of the tranformation-induced plasticity.

This work has partially been supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) via the Collaborative Research Centre SFB 570 „Distortion Engineering“. We would like to thank Dr. Martin Hunkel (IWT Bremen) for stimulating discussions and suggestions and the Institut of Materials Technology (IWT) Bremen for supplying material data.

Zusammenfassung: In der vorgelegten Arbeit werden numerische Untersuchungen zum Deformationsverhalten von Bauteilen aus dem Stahl 100Cr6 bei Abschreckung und äußerer Belastung unter Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität während der Austenit-Perlit-Umwandlung vorgestellt. Das zugrunde gelegte Modell ist eine Spezialisierung eines allgemeinen (vgl. [Wol03c]), das mechanische Größen, Temperatur und Phasenanteile koppelt. In dieser Arbeit werden mögliche Effekte der klassischen Plastizität ausgeschlossen, so dass in kleinen Deformationen gerechnet wird. Zur Rechnung wird das adaptive Finite-Elemente-Programm ALBERT benutzt.
Die numerischen Ergebnisse geben die zu beobachtenden Effekte der Umwandlungsplastizität qualitativ korrekt wieder.

Diese Arbeit entstand mit teilweiser Unterstützung der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 570 „Distortion Engineering“ an der Universität Bremen. Die Autoren danken Dr. Martin Hunkel für die fruchtbaren Diskussionen sowie dem Institut für Werkstofftechnik (IWT) Bremen für die Bereitstellung der Materialdaten.

Inhalt:

1. Einführung

2. Zum kontinuumsmechanischen Modell

3. Herleitung der Rand-Anfangswert-Aufgaben für thermoelastisches Materialverhalten mit Umwandlungsplastizität für kleine Verschiebungen

4. Modellprobleme

5. Das Finite-Elemente-Modell

6. Numerische Simulationen

1. Einführung

Stahl ist ein universell einsetzbarer Werkstoff mit einem komplexen Materialverhalten. Dazu gehören in Abhängigkeit von der Temperatur auftretende Phasenumwandlungen und damit zusammenhänge Effekte wie Umwandlungsplastizität und

spannungsabhängiges Umwandlungsverhalten (vgl. z.B. [Dah93], [Mac92], [Bes93], [Den97, 02], [Obe99], [Ron00], [Pie00a], [Vog01], [Ahr02], [Hof02], [Höm02], [Böh03a, 03b], [Wol03c, 03d, 03e], [Ble03]). Eine möglichst genaue Kenntnis und Beschreibung dieser Vorgänge ist von großer Bedeutung, sowohl in theoretischer, als auch in praktischer Hinsicht. Das Materialverhalten von Stahl wird aktuell sehr intensiv untersucht.

Bei der Bearbeitung von Stahlbauteilen (z.B. durch Wärmebehandlung) treten in der Regel Wechselwirkungen der mechanischen Größen (Verschiebungen, Spannungen), der Temperatur und der Phasenanteile auf. Eine mathematische Modellierung dieser wechselwirkenden Phänomene führt auf gekoppelte Systeme von partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen.

In den Arbeiten [Wol02a, 02b, 03b, 03c, 03d] wurden Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität beim Stahl im Rahmen der Kontinuumsmechanik modelliert. Dabei wurden in ein Modell, das thermoelastisch-plastisches Materialverhalten mit dem Konzept einer spannungsfreien Zwischenkonfiguration beschreibt (vgl. z.B. [Hau00]), die insbesondere für Stahl typischen Phänomene der Phasenumwandlungen und der Umwandlungsplastizität integriert. Ein alternatives Herangehen ohne explizite Verwendung einer solchen Zwischenkonfiguration findet sich in [Dac03a, 03b].

In [Böc02] wurde die Umwandlungsplastizität ebenso über ein Konzept endlicher Deformationen in das thermoelastisch-plastische Materialverhalten von Stahl integriert. Dabei wird diese, ausgehend vom bekannten Modell der Umwandlungsplastizität nach Mitter / Leblond [Mit87], [Leb89a, 89b], als eine Art von-Mises-Plastizität mit verschwindender Fließspannung modelliert und mit einem Algorithmus von Simo / Hughes [Sim98] werden Rechnungen durchgeführt.

Hauptgegenstand dieser Arbeit sind modellvalidierende Rechnungen mit dem adaptiven Finite-Elemente-Programm ALBERT [Sch00, 01].

In einem fortsetzenden Teil 2 dieser Arbeit (in Vorb.) werden wir die Rechnungen anhand von Kontrollrechnungen mit SYSWELD^{TM} und Messdaten von Bauteilversuchen validieren.

2. Zum kontinuumsmechanischen Modell

Zur Motivation der im nächsten Punkt zu betrachtenden mathematischen Aufgaben seien an dieser Stelle einige kurze Erläuterungen gegeben. Für ausführlichere Darlegungen sei auf [Wol02a, 02b, 03a] verwiesen. Die mathematischen Voraussetzungen an die auftretenden Parameter und Funktionen werden bei aktuellem Bedarf formuliert.

Als Körper (in seiner Referenzkonfiguration) verstehen wir die Abschließung $\bar{\Omega}$ eines beschränkten Gebietes $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ mit Lipschitz-stetigem Rand $\partial\Omega$. Wir bemerken, dass die weiter unten folgenden Rechnungen auch für zwei Dimensionen durchgeführt werden können. Wir nehmen an, dass die Referenzkonfiguration Ω spannungsfrei ist, und verwenden zur Beschreibung der Bewegung Lagrange-Koordinaten. In der üblichen Weise seien definiert:

(1) u Verschiebungsvektor,

$F := I + \nabla u$ Deformationsgradient,

$C := F^T F$ rechter Cauchy-Green-Tensor,

$E := \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T + \nabla u^T \nabla u) = \frac{1}{2} (F^T F - I)$ Greenscher Verzerrungstensor,

$\varepsilon := \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T)$ linearisierter Greenscher Verzerrungstensor,

θ Temperatur,

(I – Einheitstensor, F^T – zu F transponierter Tensor).

Wir betrachten den Körper als eine koexistierende Mischung von $m \geq 2$ Komponenten, die beim Stahl in der Werkstoffwissenschaft allgemein als Phasen (z.B. Austenit, Perlit, Martensit) bezeichnet werden. Obwohl unsere Untersuchungen durch Phänomene im Stahl, hier konkret der Stahl 100Cr6, motiviert sind, sei angemerkt, dass die Theorie ein *allgemeines* Materialverhalten beschreibt (vgl. [Wol03c]).

Während in der Werkstoffwissenschaft meist mit Volumenanteilen gearbeitet wird, wollen wir in dieser Arbeit den Massenanteilen den Vorzug geben, da sie in erster Näherung zu einer linearen Bewegungsgleichung führen. Beim Stahl unterscheiden sich die Dichten der einzelnen Phasen nur wenig voneinander, so dass die Unterschiede zwischen Massen- und Volumenanteilen klein (unter 0,5%) sind (vgl. hierzu [Wol03a], [Wol03g]). Daher wollen wir hier nicht zwischen Massen- und Volumenanteilen unterscheiden, sondern einfach von Phasenanteilen sprechen.

Diese seien mit p_i bezeichnet (i = 1, ..., m). Dann gelten die folgende Bilanz sowie die Nicht-Negativitäts-Beziehungen (an allen Orten und zu allen Zeiten)

(2) $$\sum_{i=1}^{m} p_i = 1,$$

(3) $$p_i \geq 0 \qquad \text{für } i = 1, ..., m$$

und daher

(4) $$p_i \leq 1 \qquad \text{für } i = 1, ..., m.$$

Der Kern des Konzeptes der spannungsfreien Zwischenkonfiguration ist die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten F gemäß

(5) $$F = \hat{F}_{te}\, F_{in}$$

in einen „inelastischen“ und einen „thermoelastischen“ Anteil F_{in} bzw. $\hat{F}_{te}$. Die Art der Zerlegung in (5) ist materialspezifisch und wird durch die Materialgesetze des Körpers gesteuert (vgl. [Hau00], [Wol02a, 02b, 03c]). Die Abbildung F_{in} wird Zwischenkonfiguration genannt. Größen, die auf dieser operieren, erhalten zur Kennzeichnung ein Dach ^. Ausgehend von der Zerlegung (5) lassen sich folgende Größen definieren:

(6) $C_{in} := F_{in}^T F_{in}$ (inelastischer rechter Cauchy-Green-Tensor),

$E_{in} := \frac{1}{2} (F_{in}^T F_{in} - I)$ (inelastischer Greenscher Verzerrungstensor),

$\hat{E}_{te} := \frac{1}{2} (\hat{F}_{te}^T \hat{F}_{te} - I)$ (elastischer Greenscher Verzerrungstensor, auf der Zwischenkonfiguration operierend),

$E_{te} := F_{in}^T \hat{E}_{te} F_{in}$ (elastischer Greenscher Verzerrungstensor, auf der Referenzkonfiguration operierend).

Wir notieren den aus (1) und (6) folgenden Zusammenhang

(7) $E = E_{te} + E_{in}$.

In [Wol02a, 02b, 03c] wird ein „thermoelastisch-plastischer Körper mit Phasenumwandlungen ohne Diffusion und mit endlichem Gedächtnis“ definiert.

Wesentliche Punkte sind dabei:

- Der inelastische Greensche Verzerrungstensor E_{in} ist durch die Geschichte von Bewegung, Temperatur und Phasenanteilen eindeutig bestimmt.
- Bezüglich der Zwischenkonfiguration ist das Materialverhalten des Körpers thermoelastisch unter Einschluss von Phasenumwandlungen.

Im Ergebnis der in [Wol03c] durchgeführten Überlegungen können folgende Grundgleichungen für die isotrope Thermo-Elastoplastizität mit Phasenumwandlungen zur Bestimmung des Verschiebungsvektors u, der Temperatur θ, der Massenanteile p_i ($i = 1, ..., m$) der $m \geq 2$ Phasen sowie des inelastischen Greenschen Verzerrungstensors E_{in} gewonnen werden:

(8) $\rho_0 \frac{d^2u}{dt^2} - \operatorname{div} (I + \nabla u)S = f$ in $\Omega \times]0, T[$,

(Bewegungsgleichung, ρ_0 – Dichte in der Referenzkonfiguration, S – zweiter Piola-Kirchhoff-Spannungstensor, I – Einheitstensor, f – Volumenkraftdichte)

(9) $\rho_0 \frac{de}{dt} - \operatorname{div} (\kappa \nabla\theta) = (I + \nabla u)\, S \bullet\bullet \nabla \frac{du}{dt} + r$ in $\Omega \times]0, T[$,

(Energiegleichung mit Dissipationsterm, e – spezifische innere Energie, κ - Wärmeleitfähigkeit, r – äußere thermische Leistungsdichte)

(10) $\frac{dp_i}{dt} = \gamma_i(E_d^t, E, \theta_d^t, \theta, \frac{d}{dt}\theta, p_d^t, p)$ $i = 1, ..., m$, in $\Omega \times]0, T[$,

(Umwandlungsgesetze in allgemeiner Form, γ_i – Produktionsrate der i-ten Phase)

Dabei werden die Geschichten E^t, θ^t, p^t von E, θ bzw. p sowie die Vorgeschichten (difference history) E_d^t, θ_d^t, p_d^t als Funktionen auf $[0, t]$ für $t \in [0, T]$ gemäß

(11) $E^t(s) := E(t - s)$ für $0 \leq s \leq t$

bzw.

(12) $E_d^t(s) := E^t(s) - E(t)$ für $0 \leq s \leq t$

und analog für die anderen Größen definiert. Die Argumente der Funktionen γ_i in (10) sind somit zum einen die Werte $E = E(x, t)$, $\theta = \theta(x, t)$ usw., zum anderen die Funktionen E_d^t, θ_d^t und p_d^t. In der Materialtheorie werden geeignete Glattheitseigenschaften bezüglich der letztgenannten Argumente vorausgesetzt, um Konsequenzen aus der Clausius-Duhem-Ungleichung abzuleiten. Wir gehen darauf in dieser Arbeit nicht ein.

Inelastische Effekte außerhalb von thermischen Dehnungen und Volumenänderungen aufgrund von Dichteänderungen bei den Phasenumwandlungen werden in folgender Weise berücksichtigt:

(13) $E_{in} = \mathfrak{F}(E_d^t, E, \theta_d^t, \theta, p_d^t, p)$

($\mathfrak{F}$ – geeignete Funktion) Wir setzen voraus, dass diese inelastischen Effekte volumenerhaltend seien, also gilt

(14) $\det F_{in} = 1$ in $\Omega\times]0, T[$,

Bezüglich der Zwischenkonfiguration ist das Materialverhalten isotrop thermoelastisch unter Einschluss von Phasenumwandlungen. Nach Umrechnen auf die Referenzkonfiguration gelangt man zu

(15) $S = 2\mu\, C_{in}^{-1} (E - E_{in})\, C_{in}^{-1} + \lambda\, tr(F_{in}^{-T} (E - E_{in})\, F_{in}^{-1})\, C_{in}^{-1} + \delta\, C_{in}^{-1} [(E - E_{in})\, C_{in}^{-1}]^2 +$

$$- (\det F) \{ 3K\alpha (\theta - \theta_0) + K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \} C^{-1}.$$

(ρ - aktuelle Dichte des Phasengemischs, bezogen auf die Anfangstemperatur θ_0, μ, λ – Lamé-Koeffizienten, $K := \lambda + \frac{2}{3}\mu$ – Kompressionsmodul, δ - Materialparameter des physikalisch-nichtlinearen Verhaltens) Die Beziehung zwischen dem Cauchyschen Spannungstensor τ und dem zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor S ist:

(16) $\tau = (\det F)^{-1} F S F^T$.

Wir notieren schließlich die bekannten Zusammenhänge

(17) $\mu = \frac{E}{2(1 + \sigma)}, \qquad \lambda := \frac{\sigma E}{(1 + \sigma)(1 - 2\sigma)},$

(18) $\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{\rho_i} p_i$ (Mischungsregel für die reziproke Dichte),

wobei die ρ_i die entsprechenden Dichten der i-ten Phasen sind. Die Energiegleichung (9) lässt sich umformen zu (vgl. [Wol03c])

(19) $\rho_0 c_e \frac{d\theta}{dt} - \operatorname{div} (\kappa \nabla\theta) = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \bullet\bullet \frac{dE_{te}}{dt} + S \bullet\bullet \frac{dE_{in}}{dt} + 2 (F_{in}^{-1} \frac{dF_{in}}{dt} (S - \theta \frac{\partial S}{\partial \theta})) \bullet\bullet E_{te} +$

$$+ \theta F S \frac{\partial F_{in}^T}{\partial \theta} \bullet\bullet \frac{d}{dt} \hat{F}_{te} - \rho_0 \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial e}{\partial p_i} \gamma_i + r \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$$

($c_e := \frac{\partial e}{\partial \theta}$ – spezifische Wärme). Unter der einschränkenden Annahme

(20) $e = e(\theta, p)$

folgt aus (9) und (10) eine andere, zu (19) alternative Form der Energie- oder Wärmeleitungsgleichung

(21) $\rho_0 c_e \frac{d\theta}{dt} - \operatorname{div} (\kappa \nabla\theta) = (I + \nabla u)\, S \bullet\bullet \nabla \frac{du}{dt} - \rho_0 \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial e}{\partial p_i} \gamma_i + r \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$

3. Herleitung der Rand-Anfangswert-Aufgaben für thermoelastisches Materialverhalten mit Umwandlungsplastizität für kleine Verschiebungen

Beim Anliegen von deviatorischen Spannungen – weit unterhalb der Fließgrenze - während der Phasenumwandlungen finden bleibende Verformungen statt, die weder mit der klassischen Plastizität noch mit den üblichen Verformungen infolge Dichte- und Temperaturänderungen zu erklären sind. Dieses Phänomen wird Umwandlungsplastizität (UP oder TRIP = transfomation-induced plasticity) genannt (vgl. hierzu z.B. [Mit87], [Leb89a, 89b], [Fis96, 00], [Den97, 02], [Ahr02] sowie [Wol03e] mit weiteren Quellen). Wie die klassische Plastizität ist auch die Umwandlungsplastizität volumenerhaltend.

Wir möchten jetzt die Gleichungen (2.8), (2.10), (2.13) – (2.15) sowie (2.19) oder (2.21) für den Fall modifizieren, dass nur Umwandlungsplastizität, nicht aber klassische Plastizität auftritt, was z.B. bei moderaten Abkühlungen (vgl. [Wol03]) oder nicht zu großen einwirkenden mechanischen Kräften möglich ist.

In dieser Arbeit nehmen wir „kleine Deformationen“ an, was beim alleinigen Auftreten von Umwandlungsplastizität gegeben ist. Als Konsequenz werden die Terme vernachlässigt, die Produkte der Verschiebungen sowie ihrer Ableitungen mit sich selbst enthalten. Die Kleinheitsannahme führt auch dazu, dass der plastische Deformationsgradient Gradient einer wirklichen Bewegung ist. Wir schreiben also

(1) $$F_{up} = I + \nabla u_{up}$$

(mit u_{up} – umwandlungsplastische Verschiebung) und erhalten den linearisierten umwandlungsplastischen Verzerrungstensor (Der Index „up“ steht ab jetzt für „in“)

(2) $$\varepsilon_{up} := \frac{1}{2} (\nabla u_{up} + \nabla u_{up}^T).$$

Die Bedingung (2.14) führt dann in der Linearisierung zu

(3) $$\operatorname{div} u_{up} = 0$$

und damit zu

(4) $$\operatorname{tr}(\varepsilon_{up}) = 0, \quad \text{also} \quad \varepsilon_{up} = \varepsilon_{up}^*.$$

Wir setzen im Materialgesetz (2.15) $\delta = 0$ sowie $\tau = S$ infolge der Annahme kleiner Deformationen (entspricht $F = I$ in (2.15)) und erhalten:

(5) $$\tau = 2\mu\, \varepsilon + \lambda \operatorname{tr}(\varepsilon)\, I - 3K\alpha\, (\theta - \theta_0)\, I - K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho}\, I - 2\mu\, \varepsilon_{up},$$

und daraus (für den dreidimensionalen Fall)

(6) $$\tau^* = 2\mu\, \varepsilon - \frac{2}{3} \mu \operatorname{tr}(\varepsilon)\, I - 2\mu\, \varepsilon_{up} = 2\mu\, \varepsilon^* - 2\mu\, \varepsilon_{up}$$

($\tau^* = \tau - \frac{1}{3}\,\mathrm{tr}(\tau)\,\mathrm{I}$ – Deviator von τ bei drei Raumdimensionen, $\mathrm{tr}(\tau)$ – Spur von τ).

Aus dem Ansatz von Mitter / Leblond für die Umwandlungsplastizität (vgl. z.B. [Mit87], [Leb89a, 89b], [Fis96], [Den97, 02], [Ahr02], [Wol03e]) folgt (wobei die Ortsabhängigkeit nicht notiert wird)

$$(7) \qquad \varepsilon_{up}(t) = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^{m} \int_0^t K_i\, \Phi_i'(p_i(s))\, \max\{p_i'(s), 0\}\, \tau^*(s)\, ds$$

Dabei sind: K_i – Greenwood-Johnson-Parameter der Umwandlungsplastizität für die i-te Phase, Φ_i – Sättigungsfunktion für die i-te Phase mit den Voraussetzungen

$$(8) \qquad \Phi_i \in C^{0,1}([0, 1]), \qquad \Phi_i(0) = 0, \qquad \Phi_i(1) = 1, \qquad \Phi_i' \geq 0 \qquad \text{f.ü. auf } [0, 1].$$

($C^{0,1}([0, 1])$ bezeichnet die Menge der auf $[0, 1]$ Lipschitz-stetigen Funktionen.)

Bei unseren Anwendungen beschränken wir uns auf die Umwandlung des Austenits zu Perlit, so dass weitergehende Ansätze für die Umwandlungsplastizität bei der Martensit-Bildung (vgl. z.B. [Fis00]) hier nicht berücksichtigt werden.

Aus (6) und (7) folgt

$$(9) \qquad \varepsilon_{up}(t) = 3 \sum_{i=1}^{m} \int_0^t K_i\, \Phi_i'(p_i)\, \max\{p_i', 0\}\, (\mu\, \varepsilon^*(s) - \mu\, \varepsilon_{up}(s))\, ds$$

Der Ansatz (7) ist wegen (5) eine Spezialisierung des allgemeineren Ansatzes in (2.13), der die Umwandlungsplastizität (nach Mitter / Leblond) bei kleinen Deformationen, aber keine klassische Plastizität berücksichtigt. Wir können die Integralgleichung (9) in eine äquivalente Cauchy-Aufgabe für ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen umschreiben zu

$$(10) \qquad \varepsilon_{up}'(t) + a(t)\, \varepsilon_{up}(t) = a(t)\, \varepsilon^*(t) \qquad \text{in }]0, T[,$$

$$(11) \qquad \varepsilon_{up}(0) = 0,$$

(ε_{up}' – Ableitung nach der Zeit t) wobei a als Abkürzung gemäß

$$(12) \qquad a(t) := 3\mu \sum_{i=1}^{m} K_i\, \Phi_i'(p_i)\, \max\{p_i', 0\},$$

verwendet wird. Wegen (8) ist a ein nicht-negativer Skalar und die Aufgabe (9), (10) besitzt als einzige Lösung

$$(13) \qquad \varepsilon_{up}(t) = \int_0^t a(s)\, \varepsilon^*(s)\, \exp\Big(-\int_s^t a(\sigma)\, d\sigma\Big)\, ds$$

und es gelingt, die Größe ε_{up} aus den Gleichungen zu eliminieren. Wir erhalten folgende Gleichungen für die Verschiebung u, die Temperatur θ sowie die

Massenanteile der Phasen p_i (i = 1, ..., m) aus den Gleichungen (2.8), (2.10), (2.21) sowie (5) und (13):

$$(14)\quad \rho_0 \frac{d^2u}{dt^2} - \mathrm{div}(\, 2\mu\, \varepsilon(u) + \lambda\, \mathrm{tr}(\varepsilon(u))\, I\,) = -\,\mathrm{div}(\, 3K\alpha\, (\theta - \theta_0)\, I\,) +$$

$$- \mathrm{div}\{\, K\, \{(\sum_{i=1}^{m} \frac{p_i}{\rho_i(\theta_0)})\, (\sum_{i=1}^{m} \frac{p_{0i}}{\rho_i(\theta_0)})^{-1} - 1\}\, I\,\} +$$

$$- \mathrm{div}(\int_0^t 2\mu\, \varepsilon^*(u(s))\, a(s)\, \exp(-\int_s^t a(\tau)\, d\tau)\, ds\,) + f \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[,$$

$$(15)\quad \rho_0 c_e \frac{d\theta}{dt} - \mathrm{div}\,(\kappa\, \nabla\theta) = -\,3K\alpha\, (\theta - \theta_0)\, \mathrm{div}(\frac{du}{dt}) +$$

$$- K\, \{(\sum_{i=1}^{m} \frac{p_i}{\rho_i(\theta_0)})\, (\sum_{i=1}^{m} \frac{p_{0i}}{\rho_i(\theta_0)})^{-1} - 1\}\, \mathrm{div}(\frac{du}{dt}) + \rho_0 \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial e}{\partial p_i}\, \tilde{\gamma}_i + r \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$$

Dabei wurde der Term mit den Dichten ρ_0 und ρ in (5) mit Hilfe von (2.18) umgeformt. Entsprechend der obigen Kleinheitsannahme wurden in der Wärmeleitungsgleichung (15) nur die Teile des Dissipationsterms

$$(16)\qquad (I + \nabla u)\, S \bullet\bullet \nabla \frac{du}{dt} \approx \tau \bullet\bullet \nabla \frac{du}{dt}$$

berücksichtigt, die keine Produkte von ∇u und $\nabla \frac{du}{dt}$ mit sich selbst enthalten.

Wir schreiben die Umwandlungsgleichungen (2.10) in der Form

$$(17)\qquad \frac{dp_i}{dt} = \gamma_i(\theta_d^t, \theta, \theta', p_d^t, p, \tau_d^t, \tau) \qquad i = 1, ..., m, \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[,$$

wobei wir das in der Realität auftretende spannungsabhängige Umwandlungsverhalten berücksichtigen, bei dem die Phasenevolution von den Spannungen abhängt. Einige Modellierungsansätze für das spannungsabhängige Umwandlungsverhalten unterstellen eine Abhängigkeit der Phasenumwandlung von der mittleren Hauptspannung und / oder der von-Mises-Vergleichsspannung (vgl. [Wol03e]). Dieser Ansatz führt über die Darstellung des Spannungstensors in (5) zur Abhängigkeit von den Verschiebungen in der Art wie in (2.9).

Die folgenden Rechnungen gelten für n = 3. Für die mittlere Hauptspannung

$$(18)\qquad \tau_M := \frac{1}{3}\, \mathrm{tr}(\tau)$$

und die Vergleichsspannung nach von Mises

$$(19)\qquad \tau_V := (\frac{3}{2}\, \tau_{ij}^*\, \tau_{ij}^*)^{\frac{1}{2}} \qquad \text{(Summenkonvention)}$$

erhalten wir unter Berücksichtigung von (6), (13) und (2.18) die Beziehungen

(20) $\tau_M(t) = (\frac{2}{3}\mu + \lambda)\, tr(\varepsilon(u(t))) - 3K\alpha(\theta - \theta_0) - K\{(\sum_{i=1}^{m} \frac{p_i(t)}{\rho_i(\theta_0)})(\sum_{i=1}^{m} \frac{p_{0i}}{\rho_i(\theta_0)})^{-1} - 1\}$,

(21) $\tau_V^2(t) = 6\mu^2 ([\varepsilon(u(t)) ; \varepsilon(u(t))] - 2 \int_0^t [\varepsilon(u(t) ; \varepsilon(u(s))]\, a(s) \exp(-\int_s^t a(\tau)\, d\tau)\, ds +$

$+ \int_0^t \int_0^t [\varepsilon(u(s) ; \varepsilon(u(\sigma))]\, a(s)\, a(\sigma) \exp(-\int_s^t a(\tau)\, d\tau - \int_\sigma^t a(\tau)\, d\tau)\, ds\, d\sigma,$

wobei zur Abkürzung die Bezeichnung

(22) $[A ; B] := A_{ij} B_{ij} - \frac{1}{3} tr(A)\, tr(B)$

benutzt wurde (A, B - 3×3-Matrizen). Somit führt der Ansatz in (17) wieder auf (2.10). Für unsere Zwecke genügt es, die Umwandlungsgleichungen in folgender Form zu schreiben, da wir vorerst keine Darstellung durch invariante Größen benötigen.

(23) $\frac{dp_i}{dt} = \gamma_i(\theta^t, \theta, \theta', u^t, u, p^t, p)$ $\quad i = 1, ..., m, \quad$ in $\Omega \times]0, T[$.

Ebenso reicht es hier aus, statt der Vorgeschichten die (endlichen) Geschichten gemäß (2.11) zu verwenden, da wir keine Untersuchungen mit der Clausius-Duhem-Ungleichung durchführen (wie. z.B. in [Wol03c]) und somit die speziellen technischen Gründe für ein Verwenden von Vorgeschichten entfallen.

Es werden folgende Rand- und Anfangsbedingungen gestellt:

(24) $u = 0$ auf $\Gamma_0 \times]0, T[$,

(25) $\tau\nu = 0$ auf $\Gamma_1 \times]0, T[$,

(26) $-\kappa \nabla\theta\, n = \delta(\theta - \theta_{umg})$ auf $\partial\Omega \times]0, T[$,

(27) $u(x, 0) = u_0(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = u_1(x)$ in Ω,

(28) $\theta(x, 0) = \theta_0(x)$ in Ω,

(29) $p_i(x, 0) = p_{0i}(x)$ $\quad i = 1, ..., m, \quad$ in Ω.

(n - äußerer Normal an $\partial\Omega$, $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$, $\Gamma_1 := \partial\Omega \setminus \Gamma_0$) Wir bemerken, dass auch für die Temperatur gemischte Randbedingungen in der Art (24), (25) möglich sind.

Die Anfangs-Randwert-Aufgabe (14), (15), (23), (24) - (29) ist i.a. ein stark gekoppeltes Problem, wobei zusätzlich die Materialparameter von den gesuchten Funktionen abhängen können. Unter speziellen Annahmen wollen wir diese gekoppelte Aufgabe für Stahlbauteile aus dem Wälzlagerstahl 100Cr6 numerisch mit Hilfe des adaptiven Programms ALBERT [Sch00, 01] lösen.

4. Modellprobleme

Die vollständige gekoppelte Aufgabe (3.14), (3.15), (3.23), (3.24) - (3.29) beinhaltet größere mathematische Schwierigkeiten, so dass es zweckmäßig erscheint, mögliche (möglichst physikalisch motivierte) Vereinfachungen dieser Aufgabe zu betrachten.

Wir orientieren uns an den Gegebenheiten von Teilprozessen, die im SFB 570 „Distortion Engineering“ (vgl. [Hof02]) an der Universität Bremen untersucht werden. Hier betrachten wir den Stahl 100Cr6, reine Abschreckvorgänge mit einer Phasenumwandlung von Austenit zu Perlit (also über 500°C), daher (streng) monoton fallende Temperatur, monotone Phasenumwandlungen (Austenitanteil fallend, Perlitanteil steigend).

In Abschnitt 3 wurde der umwandlungsplastische Verzerrungstensor ε_{up} weitgehend als Zeitintegral über die Geschichte des Deviators des Spannungstensors geschrieben. Eine solche Darstellung verbietet sich für die numerische Implementierung, da dafür während der Simulation die komplette Geschichte mitgeführt werden müsste. Wir führen daher $\varepsilon_{up}(t)$ als getrennte Variable ein, und müssen dann nur das Integral über den jeweils aktuellen Zeitschritt aufaddieren.

Wir verwenden in den Simulationen die identische Sättigungsfunktion $\Phi(s) = s$.

Auf dem (gesamten) Gebietsrand $\partial\Omega$ geben wir eine Robin-Randbedingung für die Temperatur, sowie eine Spannungs-Randbedingung für die Deformation vor,

(1) $$-\kappa \nabla\theta \cdot n = \delta(\theta - \theta_{ext}) \qquad \text{auf } \partial\Omega$$

und

(2) $$\sigma(u) \cdot n = F \qquad \text{auf } \partial\Omega,$$

mit äußerer Normale n. Dabei ist θ_{ext} die externe Temperatur (z.B. des Kühlmediums), $\delta(x,t)$ der Wärmeübergangskoeffizient, und $F(x,t)$ eine angelegte Spannung.

Aufgrund der deutlich unterschiedlichen Zeitskalen für die mechanischen Veränderungen sowie Wärmediffusion und Phasenumwandlungen vernachlässigen wir den Trägheitsterm $\rho_0 \partial^2 u / \partial t^2$ in (3.14) und betrachten somit statt der hyperbolischen Gleichung für die Deformation eine elliptische Gleichung in jedem Zeitpunkt. Weiterhin vernachlässigen wir die mechanischen Dissipationsterme in der

Energiegleichung (2.15), so dass diese von den Deformationen entkoppelt wird, da die latenten Wärmen nicht von der Bewegung abhängen.
Desweiteren berücksichtigen wir hier noch kein spannungsabhängiges Umwandlungsverhalten (vgl. (3.17) – (3.23)), so dass die Umwandlungsgleichungen (s. weiter unten) von der Bewegung ebenfalls entkoppelt sind.

5. Finite-Elemente-Modell

Um das Modell numerisch zu simulieren, verwenden wir eine schwache Formulierung und FEM-Diskretisierung des obigen Systems von partiellen Differentialgleichungen. Gesucht sind $\theta \in L^2(0,T;H^{1,2}(\Omega))$ und $u \in L^2(0,T;H^{1,2}(\Omega)^3)$ mit

(1) $$\int_\Omega \rho_0 c_e \frac{\partial \theta}{\partial t} w + \kappa \nabla \theta \cdot \nabla w = \int_\Omega \rho_0 L \frac{\partial p}{\partial t} w + \int_{\partial\Omega} \delta(\theta_{ext} - \theta) w,$$

(2) $$\int_\Omega 2\mu\, \varepsilon(u) \cdot \varepsilon(v) + 2\lambda\, div\, u\, div\, v = \int_\Omega div(...) v + \int_\Omega 2\mu\, div\, \varepsilon_{up} \cdot v + \int_{\partial\Omega} F \cdot v,$$

für fast alle $t \in (0,T)$, und alle Testfunktionen $w \in H^{1,2}(\Omega)$ bzw. $v \in H^{1,2}(\Omega)^3$, wobei $(...)$ in der zweiten Gleichung die Terme zur thermischen und dichtebedingten Ausdehnung beinhalten (vgl. (3.14)). Weiterhin verwenden wir aus numerischen Gründen die Gleichung (3.10) für die Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität in der Form

(3) $$\frac{\partial \varepsilon_{up}}{\partial t} + \alpha\, \varepsilon_{up} = \beta,$$

mit

(4) $$\beta = \alpha\, \varepsilon^* = \alpha(\varepsilon(u) - \tfrac{1}{3} tr\, \varepsilon(u))$$

und angepasstem

(5) $$\alpha = 3\mu K \frac{\partial p}{\partial t},$$

aufgrund der Annahme, dass sich nur Perlit aus dem Austenit bildet und p daher monoton wachsend ist. Weiter werden die entsprechenden Anfangsbedingungen für $\theta, p, \varepsilon_{up}$ gestellt.

Zur Ortsdiskretisierung verwenden wir einen Ansatz mit stückweise polynomialen (Grad k), global stetigen Finite-Elemente-Funktionen auf einem simplizialen Gitter S_n in drei Raumdimensionen (Die Gitterelemente sind Tetraeder). Wir bezeichnen

(6) $W_n = \{w \in C(\Omega) : w|_S \in P_k \ \forall S \in S_n\} \subset H^{1,2}(\Omega), \quad V_n = (W_n)^3$.

In jedem Zeitschritt wird die Kopplung der verschiedenen Gleichungen in expliziter Weise vorgenommen, wodurch in jedem Zeitschritt die folgenden vier Lösungsschritte erfolgen:

- Berechnen der diskreten Temperatur $\theta_n \in W_n$ durch

  (7) $(\frac{\theta_n - \theta_{n-1}}{t_n - t_{n-1}}, w)_h + (\kappa(p_{n-1})\nabla\theta_n, \nabla w) = (\rho_0 L \frac{\partial p}{\partial t}, w)_h$ für alle $w \in W_n$.

  Hier bezeichnet $(\cdot,\cdot)_h$ das Skalarprodukt mit „gelumpten Massen“, das nur Werte in den Gittereckpunkten verwendet (für stückweise lineare Ansatzfunktionen).

- Berechnen des Phasenanteils $p_n(x)$ aus $p_{n-1}(x), \theta_n(x), \theta_{n-1}(x)$ in allen Ecken der Triangulierung.

- Berechnen des diskreten Verschiebungsvektorfeldes $u_n \in V_n$ durch

  $2\mu(\varepsilon(u_n), \varepsilon(v)) + 2\lambda(div\, u_n, div\, v) =$
  $(\lambda + \frac{2}{3}\mu)(3\alpha(p, \theta_n)(\theta_n - \theta_0) + \frac{\rho_0(p_n) - \rho(p_n)}{\rho(p_n)}, \nabla v) - 2\mu(div\, \varepsilon_{up,n-1}, v)$ für alle $v \in V_n$.

- Berechnen von zunächst $\varepsilon_n^* = P_n(\varepsilon^*(u_n)) \in V_n$, die L^2-Projektion von $\varepsilon^*(u_n)$, welches unstetig zwischen Gitterelementen ist, auf den stetigen Raum der FEM-Funktionen, und $\varepsilon_{up,n} \in V_n$ durch

  (9) $\varepsilon_{up,n} = \varepsilon_{up,n-1} + \frac{(t_n - t_{n-1})A}{1 - (t_n - t_{n-1})A}\varepsilon_n^*$ mit $A = 3\mu K \frac{p_n - p_{n-1}}{t_n - t_{n-1}}$.

Diese Methode basiert auf der in [Wol00] vorgestellten (dort ohne Umwandlungs-plastizität) und wurde in unserer FEM-Toolbox ALBERT [Sch00,Sch01] implementiert. Die FEM-Gitter könnten zwischen verschiedenen Zeitschritten adaptiv angepaßt werden. Für die Test-Probleme wurde das gleiche vor-adaptierte Gitter für alle Zeitschritte verwendet.

Da die diskrete Deformation $u_n \in V_n$ einen über Elementgrenzen hinweg unstetigen Gradienten hat, ist der Deformationstensor zunächst nicht im (stetigen) Finite-Elemente-Raum V_n darstellbar. Wir benutzen daher die Projektion des Deviators $\varepsilon^*(u_n)$ auf den Finite-Elemente-Raum, um den umwandlungsplastischen Ver-zerrungstensor $\varepsilon_{up,n}$ zu definieren, der dann über seine Koeffizienten bezüglich der Finite-Elemente-Basis gespeichert werden kann.

6. Numerische Simulation

Die oben beschriebene numerische Methode wurde anhand dreier Modellprobleme in drei Raumdimensionen getestet. Alle beschreiben das Abschrecken eines Werkstücks aus dem Stahl 100Cr6, mit oder ohne zusätzliche äußere Last.

Der Phasenübergang von Austenit zu Perlit wird durch eine differentielle Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung mit temperaturabhängigen Parametern für den Perlit-Anteil $p(t)$ modelliert:

$$(1) \qquad \frac{\partial p}{\partial t}(t) = \left(\overline{p}(\theta(t)) - p(t)\right)\frac{n(\theta(t))}{\tau(\theta(t))}\left(-\ln\left(1-\frac{p(t)}{\overline{p}(\theta(t))}\right)\right)^{1-\frac{1}{n(\theta(t))}}, \qquad p(0) = p_0 .$$

Dabei wurden Parameterfunktionen wie in [Hun99] für einen 100Cr6 Stahl benutzt. Des weiteren wird der Gleichgewichtsanteil des Perlits unterhalb der Perlit-Starttemperatur von 734°C gleich eins und oberhalb von 734°C gleich null gesetzt. Im Programm wird mit einem Schalter gearbeitet, der sichert, dass die Phasenumwandlung von Austenit zu Perlit nur stattfindet, wenn $p(t) < \overline{p}(\theta(t))$ gilt.

6.1. Stirnseitiges Abschrecken einer Zylinder-Probe unter äußerer Belastung

Das erste Modellproblem beschreibt einen einachsigen Druckversuch an einer zylindrischen Probe während eines stirnseitigen Abschreckens mit vollständiger Phasenumwandlung von Austenit zu Perlit. Der Zylinder hat 8mm Durchmesser und 8mm Länge, dies entspricht den Abmessungen einer Probe für die Gleeble®-Prüfmaschine, die im SFB 570 zu entsprechenden Versuchen eingesetzt wird.

Folgenden Anfangs- und Randbedingungen für die Temperatur wurden gewählt: Die Temperatur der Probe zu Beginn des Versuchs ist $\theta_0 = 750^\circ C$, bei einer Außentemperatur von $\theta_{ext} = 500^\circ C$. Eine unterschiedliche Kühlung an Stirnseiten und Mantel der Zylinderprobe wurde modelliert durch unterschiedliche Wärmeübergangskoeffizienten: $\delta = 1000\, kg/s^3{}^\circ C$ an den Stirnseiten (Abschrecken), $\delta = 100\, kg/s^3{}^\circ C$ auf dem Mantel des Zylinders (Wärmeaustausch mit der umgebenden Luft). Diese Randbedingungen führen zu einer schnelleren Abkühlung des Zylinders nahe der Stirnseiten und damit einer früheren Phasenumwandlungen in diesen Bereichen. Um diese Randschichten numerisch gut auflösen zu können, wurde das Rechengitter nahe der Stirnseiten feiner gewählt, siehe Abbildung 1. Während der Umwandlung wurde eine Druckkraft auf beide Zylinderstirnseiten ausgeübt, die aufgrund der

Umwandlungsplastizität zu einer permanenten Deformation führt. Nach der vollständigen Umwandlung wurde die Probe entlastet. Abbildung 2 zeigt für unterschiedliche Stärken der anliegenden Spannung (F = 0 / - 50 / - 100 MPa) die deformierte Probe nach dem Abschreckvorgang, dabei ist die Deformation 100-fach überhöht dargestellt.

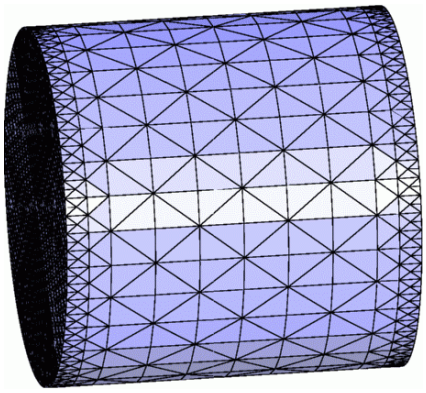

Abbildung 1: Problem-angepasste Diskretisierung des Zylinders mit feineren Gitterelementen nahe der beiden Stirnseiten.

Neben der erwarteten plastischen Verkürzung und Verdickung der Probe unter Krafteinwirkung ist eine leichte tonnenförmige Deformation zu beobachten. Diese lässt sich durch die schnellere Phasenumwandlung nahe der Stirnseiten erklären.

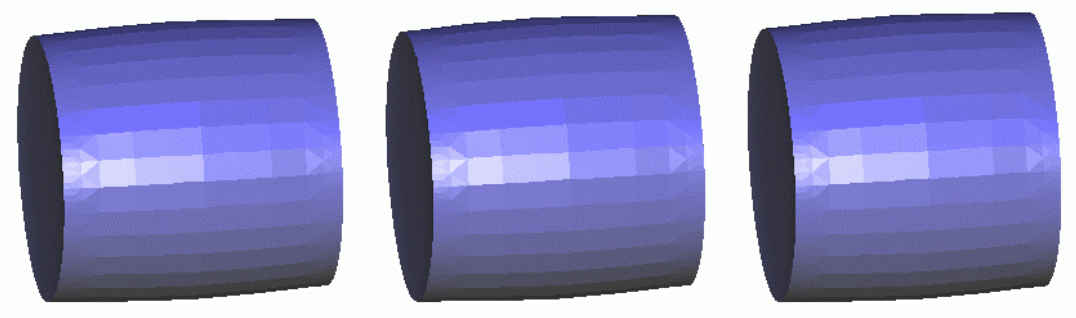

Abbildung 2: Umwandlungsplastizität beim Druckversuch während des Abschreckvorganges mit Austenit-Perlit-Umwandlung und anschließender Entlastung: Links ohne äußere Last, Mitte mit F = - 50 MPa, Rechts mit doppelter Last. Deformation 100-fach verstärkt dargestellt.

In Abbildung 3 sind die Längenänderungen der Proben nach dem Prozess als Graph über der angelegten Spannung dargestellt. Zum Vergleich ist zusätzlich die Längenänderung ohne plastische Deformation (also nur durch Phasenumwandlung und Abkühlung) durch eine gestrichelte Linie gezeigt.

Wird ohne Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität gerechnet, und somit im Modell nur die Thermoelastizität mit der Phasenumwandlung von Austenit zu Perlit berücksichtigt, so tritt nach Entlastung, vollständiger Umwandlung und Temperaturausgleich nur die auf Temperatur- und Dichteänderungen zurückgehende

Längenänderung auf. Die Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität führt zu einer von der anliegenden Spannung abhängigen zusätzlichen Längenänderung in Belastungsrichtung, wie es in der Literatur beschrieben wird (vgl. z.B. [Ahr00]).

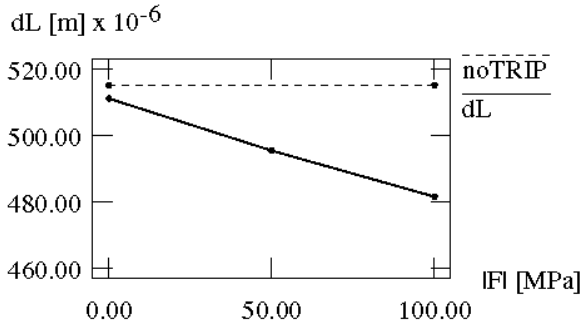

Abbildung 3: Längenänderung nach Entlastung über dem Betrag der angelegten Spannung während der Umwandlung, sowie Längenänderung ohne Umwandlungsplastizität (gestrichelt).

6.2. Einseitiges Abschrecken einer quaderförmigen Probe

Im folgenden Beispiel wirken keine äußere Kräfte auf die Probe, so dass die Umwandlungsplastizität nur durch die thermischen Spannungen während des Abschreckens hervorgerufen wird.

Wir betrachten einen Quader aus 100Cr6 mit den Abmessungen: Länge 8 mm, Höhe und Breite je 5,66 mm. Die Oberseite wird abgeschreckt mit einem Wärmeübergangskoeffizienten von $\delta = 1000\, kg/s^3{}^\circ C$, die anderen Seiten befinden sich mit $\delta = 100\, kg/s^3{}^\circ C$ im Wärmeaustausch mit der Umgebungsluft. Die Anfangs- und Umgebungstemperatur wurde wie im obigen Beispiel gewählt.

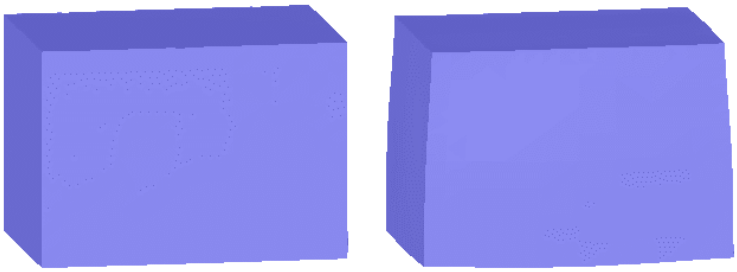

Abbildung 4: Von oben einseitig abgeschreckte Quader-Probe, links Modell ohne UP, rechts mit Berücksichtigung der UP, jeweils nach Temperaturausgleich. Die Deformationen sind um den Faktor 100 verstärkt dargestellt.

Wir bemerken nochmals, dass ohne Berücksichtigung von klassischer Plastizität gerechnet wurde. Das Ergebnis in Abb. 4 zeigt, dass in der vorliegenden Situation die thermischen Spannungen (Zusammenziehen infolge des Abschreckens) einen größeren Beitrag zur Umwandlungsplastizität liefern als die Umwandlungs-

spannungen (Ausdehnen infolge der Dichteunterschiede zwischen Austenit und Perlit) (vgl. hierzu auch [Wol00]).

6.3. Einseitiges Abschrecken einer quaderförmigen Probe unter zusätzlicher äußerer Belastung

Wir betrachten jetzt die gleichen Versuchsanordnungen wie im vorigen Beispiel, wobei der Quader zusätzlich in Längsrichtung mit einer Spannung von 100 MPa während der Umwandlung zusammengedrückt wird. Zum Vergleich wurden in der Abbildung 5 zusätzlich die Situation ohne Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität sowie mit Umwandlungsplastizität aber ohne Belastung (wie im vorigen Beispiel) dargestellt.

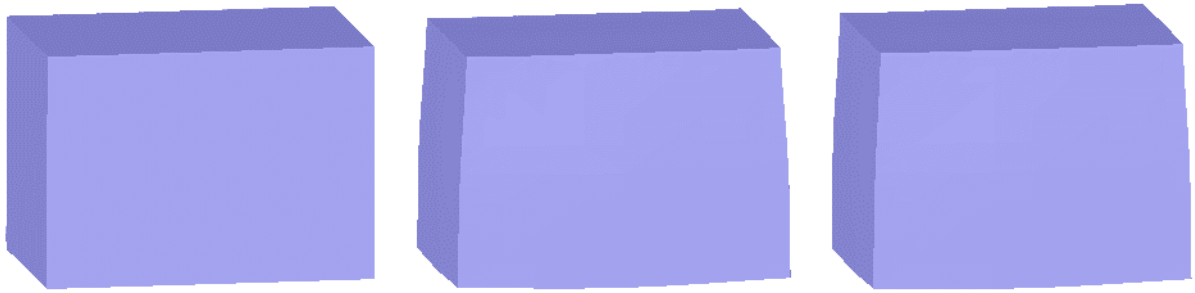

Abbildung 5: Von oben einseitig abgeschreckte Quader-Probe, links Modell ohne UP, in der Mitte mit Berücksichtigung der UP ohne äußere Last (wie in 6.2.), rechts mit UP und äußerer Last, jeweils nach Entlastung und Temperaturausgleich. Die Deformationen sind um den Faktor 100 verstärkt dargestellt.

Der rechte Quader in Abbildung 5 zeigt eine Überlagerung der umwandlungsplastischen Effekte aus den Situationen in den Punkten 6.1. und 6.2.

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).

[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).

[Ble03] Bleck, W., Pariser, G., Trute, S.: Herstellung und Verarbeitung moderner Stahlwerkstoffe, HTM, 58, 4, 181-188, (2003).

[Böc02] Böck, N.; Holzapfel, G. A.: A large strain continuum and numerical method for transformation induced plasticity (TRIP). In WCCM V 5. World Congress on Computorial Mechanics, 2002, Wien, (Hrg. Mang, H. A., Rammerstorfer, F. G., Eberhardsteiner, J.), 2002.

[Böh03a] 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, Proceedings of the 2nd Intern. Conf. on Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, erscheint im J. de Physique IV (2003).

[Böh03b] Böhm, M.; Dachkovski, S.; Hunkel, M.; Lübben, T.; Wolff, M.: Übersicht über einige makroskopische Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl. Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 03-09, 2003.

[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, Proceedings der 2nd Intern. Conference Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, erscheint im J. de Physique IV (2003).

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

[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).

[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).

[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).

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

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

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

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

[Leb89a] Leblond, J. B.; Devaux, J.; Devaux, J. C.: Mathematical modelling of transformation plasticity in steels. I: Case of ideal-plastic Phases. Int. J. Plasticity 5 (1989), 551-572.

[Leb89b] Leblond, J. B.: Mathematical modelling of transformation plasticity in steels. II: Coupling with strain hardening phenomena. Int. J. Plasticity 5 (1989), 573-591.

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

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

[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).

[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.

[Sch00] Schmidt, A.; Siebert, K. G.: ALBERT: An adaptive hierarchical finite element toolbox. Manual, 244 p., Preprint 6/2000, Universität Freiburg (2000).

[Sch01] Schmidt, A.; Siebert, K. G.: ALBERT: Software for scientific computations and applications. Acta Math. Univ. Comenianae Bratislava 70, S. 105-122, (2001).

[Sim98] Simo, J. C.; Hughes, T. J. R.: Computational inelasticity. Springer-Verlag, New York, 1998.

[Vog01] Vogelsang, H.: Parameteridentifikation für ein selbstkonsistentes Stoffmodell unter Berücksichtigung von Phasentransfomationen, Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik Nr. 129, Ruhr-Universität Bochum, (2001).

[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, Proceedings, 2nd Intern. Conf. Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, erscheint in J. de Physique IV(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.; Schmidt, A.: Thermo-mechanical behaviour of steel including phase transitions and transformation-induced plasticity. PAMM 2 (2003) 1, S. 206-207.

[Wol03e] 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).

[Wol03f] Wolff, M.; Frerichs, F.; Suhr, B.: Vorstudie für einen Bauteilversuch zur Umwandlungsplastizität bei der perlitischen Umwandlung des Stahls 100Cr6, Berichte aus der Technomathematik, 03-10, 2003. Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 03-10, 2003.

[Wol03g] Wolff, M.; Suhr, B.: Zum Vergleich von Massen- und Volumenanteilen bei der perlitischen Umwandlung der Stähle 100Cr6 und C80. Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 03-11, 2003.

Autoren:

Prof. Dr. Alfred Schmidt, Zentrum für Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Postfach 330440, D-28334 Bremen, schmidt@math.uni-bremen.de,

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

Prof. Dr. Michael Böhm, Zentrum für Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Postfach 330440, D-28334 Bremen, mbohm@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: 15. September 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 in100Cr6 steel, July 2003.

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

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

03-10 Michael Wolff, Friedhelm Frerichs, Bettina Suhr:
Vorstudie für einen Bauteilversuch zur Umwandlungsplastizität bei der perlitischen Umwandlung des Stahls 100Cr6, August 2003.

03-11 Michael Wolff, Bettina Suhr:
Zum Vergleich von Massen- und Volumenanteilen bei der perlitischen Umwandlung der Stähle 100Cr6 und C80, September 2003.

03-12 Rike Grotmaack, Adrian Muntean:
Stabilitaetsanalyse eines Moving-Boundary-Modells der beschleunigten Karbonatisierung von Portlandzementen, September 2003

03-13 Alfred Schmidt, Michael Wolff, Michael Böhm:
Numerische Untersuchungen für ein Modell des Materialverhaltens mit Umwandlungsplastizität und Phasenumwandlungen beim Stahl 100Cr6 (Teil 1), September 2003