Zentrum für Technomathematik

Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

Modellierung der Wechselwirkung von Kohlenstoff-Diffusion und ferritischen Phasenumwandlungen für einen untereutektoiden unlegierten Stahl

Michael Wolff, Michael Böhm
Sebastian Meier

Report 06–04

Berichte aus der Technomathematik

Report 06–04 **Mai 2006**

Modellierung der Wechselwirkung von Kohlenstoff-Diffusion und ferritischen Phasenumwandlungen für einen untereutektoiden unlegierten Stahl

Michael Wolff, Michael Böhm, Sebastian Meier

Zentrum für Technomathematik, Fachbereich 3, University of Bremen, D-28334 Bremen, Germany, {mwolff, mbohm, sebam}@math.uni-bremen.de

Zusammenfassung: Beim wichtigen industriellen Prozess des Einsatzhärtens werden die Phasenumwandlungen im Stahlbauteil wesentlich durch die inhomogene Kohlenstoffverteilung (in Randnähe) beeinflusst. Daneben spielt der Temperaturverlauf eine große Rolle. Eine Modellierung der ablaufenden Phänomene muss daher die Diffusion des Kohlenstoffs im Austenit, die Wärmeleitung sowie die möglichen Phasenumwandlungen berücksichtigen. In dieser Arbeit wird das mechanische Verhalten (Thermoelastizität, klassische Plastizität, Umwandlungsplastizität) nicht berücksichtigt. Als Ergebnis wird eine Rand-Anfangswert-Aufgabe für ein gekoppeltes System von zwei parabolischen partiellen und mehreren gewöhnlichen Differentialgleichungen erhalten.

Abstract: During the important industrial process of case hardening, phase transformations in a steel work-piece are essentially influenced by (non-homogeneous) carbon distribution (near the boundary). Moreover, the temperature course plays a great role. Therefore, a modelling of the occurring phenomena has to take diffusion of carbon in austenite, heat conduction and possible phase transformations into account. In this note we do not deal with mechanical behaviour (thermoelasticity, classical plasticity and transformation-induced plasticity). As a result we obtain a boundary-initial-value problem for a coupled system of two parabolic partial and several ordinary differential equations.

Schlüsselworte: Modellierung, Stahl, Einsatzhärten, Kohlenstoffdiffusion, Phasenumwandlungen

Keywords: Modelling, steel, case hardening, carbon diffusion, phase transformations

1 Einführung

Ziel ist es, auf makroskopischer Ebene die Kohlenstoffdiffusion im Stahl in Wechselwirkung mit ferritischen Phasenumwandlungen und der Wärmeleitung zu modellieren. Diese Situation findet sich z.B. beim industriellen Prozess des Aufkohlens von Stahlbauteilen mit nachfolgendem Abschrecken, dem sogenannten Einsatzhärten, wie auch bei Umwandlungen in Stahlbauteilen mit (vorgegebener) inhomogener Kohlenstoffverteilung. Ebenso wäre ein Entkohlen vor der Abschreckung, bei dem die Randschicht eines Bauteiles Kohlenstoff an die Umgebung verliert, eine Situation, die sich mit dem hier vorgeschlagenen Modell beschreiben ließe. Es sei z.B. auf folgende aktuelle ingenieurwissenschaftliche Arbeiten [1, 2, 18] zu den Themen Aufkohlen und Einsatzhärten verwiesen. Bekanntlich finden Aufkohlen und Abschrecken auf unterschiedlichen Zeitskalen statt. Insbesondere bei größeren Bauteilen mit großer Einsatzhärtetiefe kann der Aufkohlungsprozess mehrere Stunden dauern [18]. Da die Diffusion des Kohlenstoffs stark temperaturabhängig ist, kann ein Erhöhen der Aufkohlungstemperatur von z.B. 950°C auf 1050°C die Aufkohlungszeit um die Hälfte verkürzen. Bei diesem Hochtemperaturaufkohlen wird verschiedentlich eine isotherme Umwandlung nach der Aufkohlung und vor dem Abschrecken durchgeführt, um ein hinreichend feinkörniges Gefüge zu erreichen (vgl. [18] und die dort zitierten Quellen). Zu Fragen bezüglich der Werkstoffkunde von Stahl, der Phasenumwandlungen und der Wärmebehandlung verweisen wir z.B. auf [3, 5, 8, 9, 12, 14, 17,

19, 21-23]. In dieser Arbeit wird das mechanische Verhalten (z.B. Thermoelastizität, Umwandlungsplastizität, Plastizität) aus Gründen der Übersicht *nicht* berücksichtigt. In [1, 2, 17, 18] wird der Verzug von Bauteilen im Zusammenhang mit Aufkohlen und Einsatzhärten untersucht, wobei in [1, 2] Rechnungen mit dem kommerziellen Programm SYSWELD® durchgeführt wurden. Für die Modellierung allgemeinen Materialverhaltens von Stahl mit Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität sei auf [17] sowie auf [24, 26-28] – dort ohne zusätzliche Kohlenstoffdiffusion - verwiesen.

Bei der mathematischen Modellierung von Diffusion, Wärmeleitung und Phasenumwandlungen erhalten wir ein gekoppeltes System aus den parabolischen partiellen Differentialgleichungen für die Diffusion des im Austenit gelösten Kohlenstoffs und für die Wärmeleitung sowie aus gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Phasenumwandlungen.

Obwohl wir in dieser Arbeit speziell das Einsatzhärten modellieren, lassen sich die Ansätze auch auf allgemeinere Situationen anwenden, bei denen Diffusion und Phasenumwandlungen oder Mischungen eine Rolle spielen. Es sei angemerkt, dass in dieser Arbeit makroskopische Modelle betrachtet werden. Insbesondere gehen wir nicht auf die Meso- und Mikrostruktur des Stahls und seiner Phasen ein. Stichworte wären hier z.B. Körner und Korngrenzen, lokale Kohlenstoff-diffusion bei der Ferrit- und Perlitbildung. Die von uns verwendeten Größen wie Phasenanteile und Massenanteile stellen Durchschnittswerte über nicht zu kleine Volumina, den sogenannten „repräsentativen Volumenelementen“ (RVE), dar (vgl. z.B. [4, 10, 11, 31]). Eine detaillierte Modellierung, die z.B. Diffusionsvorgänge auf der Mesoebene berücksichtigt, erfordert zusätzliche Größen und Gleichungen. An verschiedenen Stellen der Arbeit geben wir entsprechende Ausblicke.

Im Punkt 2 werden nach grundlegenden Annahmen die am Prozess beteiligten Phänomene wie Diffusion des Kohlenstoffs im Austenit, Wärmeleitung und Phasenumwandlungen im Stahl beschrieben. Danach werden im Punkt 3 die im unlegierten untereutektoiden Stahl ablaufenden Umwandlungen des Austenits beschrieben. Anschließend wird im Punkt 4 das mathematische Gesamtmodell zusammenfassend formuliert.

2 Makroskopische Modellierung - Grundlagen

2.1 Phänomenologische Annahmen

Um das Problem einzugrenzen, seien folgende Annahmen getroffen:

1. Es erfolgt eine *makroskopische Modellierung*, wobei der Stahl als koexistierende Mischung seiner Phasen angesehen wird, die ihrerseits nicht diffundieren, sondern am Ort ihres Entstehens verbleiben (vgl. z.B. [26, 27]). Die Mesoebene wird nur so weit berücksichtig, wie es für die makroskopische Beschreibung nötig erscheint. Die Auswahl der möglichen auftretenden Phasen geschieht vornämlich aus makroskopischen Erwägungen, so z.B. wird Perlit als eine Phase betrachtet, obwohl er ein Gemisch aus Ferrit und Zementit ist.

2. Wir beschränken uns auf ferritische Umwandlungen, d.h., zu Beginn des zu modellierenden Prozesses liege nur Austenit vor, der sich bei entsprechenden Bedingungen in die ferritischen Phasen umwandelt. Rückumwandlungen werden bis auf die des Ferrits in den Austenit oberhalb der eutektoiden Temperatur hier *nicht* betrachtet. Zum einen scheint das gerechtfertigt, da bei Abschreckprozessen die Temperatur rasch sinkt und die latenten Wärmen i.A. keinen großen Beitrag zur Wiedererwärmung leisten, zum anderen können wir Umwandlungen zwischen Austenit und Ferrit vor dem Abschrecken berücksichtigen, die bei praktischen Anwendungen eine Rolle spielen (vgl. z.B. [18]).

3. Da im Ferrit nur wenig Kohlenstoff gelöst ist, betrachten wir *nur* die Kohlenstoff-Diffusion durch den Austenit, nicht durch die ferritischen Phasen. Die mesoskopische Diffusion des

Kohlenstoffs, z.B. bei der Bildung des Perlits taucht nicht in der makroskopischen Modellierung auf, da Perlit hier als eine Phase betrachtet wird. Bei der Bildung der ferritischen Phasen wird der dort befindliche Kohlenstoff einer weiteren Diffusion (durch den Austenit) entzogen und liegt dort „fest“.

4. In der Wärmeleitungsgleichung werden nur durch Phasenumwandlungen hervorgerufene Quellen und Senken berücksichtigt. Des weiteren werden Überkreuzeffekte zwischen Diffusion und Wärmeleitung (vgl. z.B. [16]) vernachlässigt, da sie im Stahl keine Rolle spielen.

5. Die Phasenumwandlungen hängen wesentlich von Temperatur und Kohlenstoffgehalt ab. Um die Anzahl der möglichen Phasen zu begrenzen, erscheint es zweckmäßig, Temperatur- und Kohlenstoffbereiche anzunehmen, die nicht verlassen werden. Durch das entsprechende Eisen-Kohlenstoff-Diagramm (vgl. z.B. [14, 22, 23]) werden dann die möglichen auftretenden Phasen festgelegt. Wir beschränken uns auf den untereutektoiden Bereich und auf unlegierte Stähle (vgl. Punkt 3).

6. Da sich die Dichten der einzelnen Phasen im Stahl (für gleiche Temperaturen) nur wenig voneinander unterscheiden (im Bereich von höchstens 1 bis 2 Prozent), setzen wir zur Vereinfachung Massen- und Volumenanteile der entsprechenden Phasen gleich (vgl. [25]), obwohl die Dichteänderungen zwischen den Phasen den Verzug von Stahlbauteilen verursachen können. Beim Aufkohlen selbst sind die Dichteänderungen eine wesentliche Quelle des Verzugs (vgl. [1]).

7. Die mechanische Bewegung wird in dieser Arbeit vernachlässigt. Damit kann mit dem unten vorgeschlagenen Modell kein Verzug, z.B. im Zusammenhang mit dem Einsatzhärten, beschrieben werden, wohl aber die Phasenzusammensetzung und somit auch die Härte. Zur Beschreibung des Verzugs wäre eine Hinzunahme von Bewegungsgleichung und mechanischen Materialgesetzen (z.B. Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität sowie ggf. auch klassischer Plastizität) erforderlich, was weiteren Untersuchungen vorbehalten ist. Zur Modellierung des mechanischen Verhaltens von Stahl unter Einschluss von Kohlenstoffdiffusion, Phasenumwandlungen, Umwandlungs- und klassischer Plastizität sei auf [17], sowie auf [24, 26-28] (ohne Kohlenstoffdiffusion) und die dort zitierte Literatur verwiesen.

2.2 Modellierung der Kohlenstoff-Diffusion im Austenit

Wir betrachten die Diffusion in einem Festkörper, der nur kleinen Deformationen unterliegt, und in dem durch die Diffusion ein fixiertes Volumen sowie seine Masse nur unwesentlich verändert werden. Im Falle endlicher Deformationen ist der Kalkül der Piola–Transformationen anzuwenden (vgl. z.B. [13, 30]). Es werden $N \geq 2$ Phasen von Relevanz betrachtet, dabei erhalte der Austenit stets den Index 1. Wir betrachten ein repräsentatives Volumenelement (REV) V am Punkt $x \in \Omega$, wobei das (3-dimensionale) Gebiet Ω das Werkstück bezeichne. Die Masse des sich in V befindlichen und in der Phase i (i = 1, ..., N) gelösten Kohlenstoffs sei mit m_{ci} bezeichnet. Dann definieren wir die Massenkonzentration (= Partialdichte) des in Phase i gelösten Kohlenstoffs *im Gesamtvolumen* V in x, zum Zeitpunkt t, durch

$$c_{ci}(x, t) := \frac{1}{V} \int_V \tilde{\rho}_{ci}(x, t, y)\, \gamma_i(x, t, y)\, dy \qquad i = 1, ..., N, \tag{2.1}$$

wobei γ_i die charakteristische Funktion der Phase i in V und $\tilde{\rho}_{ci}$ die mikroskopische (mesoskopische) Massenkonzentration (Partialdichte) des Kohlenstoffs in der Phase i seien. Der Volumenanteil p_i und der Massenanteil ψ_i der Phase i sind entsprechend definiert als

$$p_i(x, t) := \frac{1}{V} \int_V \gamma_i(x, t, y)\, dy \qquad i = 1, ..., N, \tag{2.2}$$

(2.3) $$\psi_i(x, t) := \frac{\rho_i(x, t)}{\rho(x, t)} \qquad i = 1, ..., N,$$

wobei ρ die Massendichte des REV und ρ_i die Massendichte der Phase i in V seien. Dann ist natürlich die Summe aller c_{ci} gleich der Gesamtmassen-Konzentration des Kohlenstoffs im Stahl. Sei J_{ci} die Diffusionsstromdichte des sich im Austenit befindlichen Kohlenstoffs (*bezogen auf das Gesamtvolumen*). Dann gilt die Diffusionsgleichung

(2.4) $$\frac{\partial c_{ci}}{\partial t} + \operatorname{div} J_{ci} = f \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[,$$

wobei f die noch zu bestimmende Quelldichte ist, $T > 0$ sei die Prozessdauer. Nach Voraussetzung 3 aus 2.1 diffundiert der Kohlenstoff *nur* im Austenit. Somit erscheint die folgende Variante des Fickschen Gesetzes sinnvoll

(2.5) $$J_{ci} = - d_{ci}(\theta)\, p_1\, \nabla\left(\frac{c_{ci}}{p_1}\right)$$

Dabei ist d_{ci} die temperaturabhängige Diffusionskonstante des Kohlenstoffs im Austenit. Die Anwesenheit des Volumenanteils p_1 unter dem Gradienten ist mit folgendem Argument zu motivieren. Die Annahme eines örtlich konstanten c_{ci} bei örtlich nicht konstantem p_1 führt zur Diffusion, da dann die Kohlenstoffkonzentration im Austenit nicht konstant sein kann. Der Volumenanteil vor dem Gradienten besagt, dass die Diffusion nur im Austenit stattfinden kann. Die Gleichung (2.5) liest sich dann wie folgt

(2.6) $$\frac{\partial c_{ci}}{\partial t} - \operatorname{div}\left(d_{ci}(\theta)\, p_1\, \nabla\left(\frac{c_{ci}}{p_1}\right)\right) = f \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$$

Wir bestimmen nun f. Bildet sich eine Phase aus dem Austenit, z.B. Ferrit, so wird der in dieser Phase befindliche Kohlenstoff der Diffusion (im Austenit) entzogen. Für unsere Situation, in der sich die ferritischen Phasen nur aus den Austenit und in diesen zurückverwandeln können, gilt:

(2.7) $$f = - \sum_{j=2}^{N} \frac{\partial c_{cj}}{\partial t}.$$

Das negative Vorzeichen in (2.7) wird gewählt, weil ein Anwachsen der Phase j die Masse des im Austenit befindlichen Kohlenstoffs (*bezüglich des Gesamtvolumens*) verringert. Wir bemerken, dass ohne C-Diffusion aus (2.6) und (2.7) die Beziehung

(2.8) $$\sum_{j=1}^{N} \frac{\partial c_{cj}}{\partial t} = 0$$

folgt, was ja bedeutet, dass sich die Gesamtkonzentration des Kohlenstoffs bei fehlender (makroskopischer) Diffusion nicht ändert. Alternativ können wir die Größen c_{cj} durch den Massenanteil des Kohlenstoffs u_{cj} (:= Quotient der Massen) in der Phase j und dem Massenanteil ψ_j der Phase j (in der Gesamtmasse) ausdrücken. Aus den Definitionen dieser Größen folgt dann leicht:

(2.9) $$c_{cj} = \rho\, u_{cj}\, \psi_j.$$

Somit folgt aus (2.7) und (2.9) für den Quellterm

(2.10) $$f = - \rho \sum_{j=2}^{N} \frac{\partial}{\partial t}(u_{cj}\, \psi_j).$$

Die Beziehung (2.10) gilt wegen (2.9) auch für eine nicht konstante Gesamtdichte ρ, wobei dann ein Standardargument (Zeitableitungen von speziellen Volumenintegralen) zu verwenden ist (vgl. z.B. [13, 30]). Als Resümee von (2.6) und (2.10) erhalten wir eine inhomogene Diffusionsgleichung für c_{c1}:

(2.11) $$\frac{\partial c_{c1}}{\partial t} - \mathrm{div}(d_{c1}(\theta)\, p_1\, \nabla(\frac{c_{c1}}{p_1})) = -\rho \sum_{j=2}^{N} \frac{\partial}{\partial t}(u_{cj}\, \psi_j) \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$$

Nach Annahme 7 aus 2.1 wollen wir nicht zwischen Massen- und Volumenanteil einer Phase im Stahl unterscheiden. Somit verwenden wir näherungsweise

(2.12) $$p_j = p_j = \psi_j,$$

und sprechen nur vom Phasenanteil p_j. Die Randbedingungen können wie folgt modelliert werden. Sei $c_{c\Gamma}$ die äußere Massenkonzentration, also die Masse des Kohlenstoffs pro Volumen im umgebenden Medium. Auf einem Teil des Randes wählen wir die Dirichlet-Bedingung

(2.13) $$\frac{c_{c1}}{p_1} = c_{c\Gamma} \qquad \text{auf } \Gamma_0\times]0, T[,$$

sowie auf dem Komplement $\Gamma_1 := \partial\Omega \setminus \Gamma_0$ eine Robin-Bedingung

(2.14) $$J_{c1}\, \nu = -d_{c1}(\theta)\, p_1 \frac{\partial}{\partial \nu}(\frac{c_{c1}}{p_1}) = \delta_{c1}(\theta)\, p_1\, (\frac{c_{c1}}{p_1} - c_{c\Gamma}) \qquad \text{auf } \Gamma_1\times]0, T[.$$

Hierbei sind: ν – äußerer Normalenvektor an $\partial\Omega$, δ_{c1} – temperaturabhängiger Diffusionsübergangskoeffizient für Kohlenstoff in den Austenit. Die Anfangsbedingung ist

(2.15) $$c_{c1}(x, 0) = c_{c10}(x) \qquad \text{für } x\in\Omega$$

mit der Anfangskonzentration c_{c10}. Statt mit der Größe c_{c1} wird oft mit dem Massenanteil des Kohlenstoffs im Austenit u_{c1} gerechnet. Wegen (2.9), (2.12) und der angenommenen Konstanz der Dichte ρ ergibt sich aus (2.11) (beachte auch (2.7))

(2.16) $$\frac{\partial}{\partial t}(p_1\, u_{c1}) - \mathrm{div}(d_{c1}(\theta)\, p_1\, \nabla(u_{c1})) = -\sum_{j=2}^{N} \frac{\partial}{\partial t}(u_{cj}\, p_j) = -\frac{1}{\rho} \sum_{j=2}^{N} \frac{\partial c_{cj}}{\partial t} \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$$

Je nach Zweckmäßigkeit wird dann mit dem Quellterm in der einen oder anderen Form gearbeitet. Der Zusammenhang (2.9) liefert auch die Randbedingungen für u_{c1}, nämlich anstelle von (2.13)

(2.17) $$u_{c1} = \frac{c_{c\Gamma}}{\rho} \qquad \text{auf } \Gamma_0\times]0, T[,$$

sowie anstelle von (2.14)

(2.18) $$-d_{c1}(\theta) \frac{\partial}{\partial \nu}(u_{c1}) = \delta_{c1}(\theta)\, (u_{c1} - \frac{c_{c\Gamma}}{\rho}) \qquad \text{auf } \Gamma_1\times]0, T[,$$

sowie die Anfangsbedingung

(2.19) $$u_{c1}(x, 0) = u_{c10}(x) \qquad \text{für } x\in\Omega.$$

Bemerkungen 2.1. (i) Verschiedentlich werden weitere Größen definiert, um eine Modellierung zwischen der Makro- und Mikro- (Meso-) Ebene zu ermöglichen. So wird z.B. durch

(2.20) $$\rho_{ci}(x, t) := (\int_V \gamma_i(x, t, y)\, dy)^{-1} \int_V \tilde{\rho}_{ci}(x, t, y)\, \gamma_i(x, t, y)\, dy$$

im Unterschied zu (2.1) die Massenkonzentration (= Partialdichte) des in Phase i gelösten Kohlenstoffs im Teilvolumen von V, das die Phase i einnimmt, definiert („intrinsic phase average of $\tilde{\rho}_{ci}$"). Wir verweisen auf [4, 10, 11, 31] für weitere Diskussionen.

(ii) Wird eine Diffusion des Kohlenstoffs durch die anderen Phasen berücksichtigt, so ist analog zu (2.6) für jedes c_{ci} eine Diffusionsgleichung aufzustellen:

(2.21) $$\frac{\partial c_{ci}}{\partial t} - \mathrm{div}(d_{ci}(\theta)\, p_i\, \nabla(\frac{c_{ci}}{p_i})) = f_i \qquad i = 1, ..., N \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$$

Wird – im Gegensatz zu unserer Annahme 2 aus 2.1 – prinzipiell jede Phasenumwandlung $i \to j$ ($i \neq j$) zulassen, dann können wir der Umwandlung $i \to j$ eine Kohlenstoffsenke – f_{ij} ($f_{ij} \geq 0$) (aus der Sicht von i) zuschreiben. Dann lautet die rechte Seite f_i in (2.21):

(2.22) $$f_i = -\sum_{j=1, j\neq i}^{N} f_{ij} + \sum_{j=1, j\neq i}^{N} f_{ji}.$$

Dabei sind die f_{ij} für die einzelnen Umwandlungen aus gesonderten Überlegungen (z.B. Fe-Fe_3C-Diagramm, s. z.B. [14, 22, 23]) zu bestimmen. Die Summe der f_i von 1 bis N ist gleich null, was damit konsistent ist, dass die Gesamtkonzentration keine Quellen und Senken hat. Das Modell (2.21), (2.22) kann wesentlich allgemeinere Situationen als die in dieser Arbeit betrachtete beschreiben, nämlich die Diffusion einer (schwach konzentrierten) Substanz durch eine Mischung bzw. durch ein Material, das Phasenumwandlungen unterliegt. Gegebenenfalls ist dabei zwischen Massen- und Volumenanteilen der Phasen zu unterscheiden.

(iii) Bei Anwendungen (z.B. in der Werkstofftechnik) wird oft anstelle der Massenanteile u_{ci} mit den Massenprozenten gerechnet, die sich nach Multiplikation der u_{ci} mit 100 ergeben. Gegebenenfalls sind die obigen Gleichungen sowie die Anfangs- und Randbedingungen entsprechend zu korrigieren.

2.3 Modellierung der Wärmeleitungsgleichung

Es soll nun die Wärmeleitungsgleichung im Zusammenhang mit der Kohlenstoff-Diffusion im Austenit und den Phasenumwandlungen betrachtet werden. Somit haben wir für die Temperatur θ die parabolische Gleichung (vgl. [13, 26, 27]) (u_c steht für (u_{c1}, ..., u_{cN}))

(2.23) $$\rho\, c_e\, \theta' - \mathrm{div}(\kappa\nabla\theta) = \rho \sum_{i=2}^{N} L_i(u_c)\, p_i', \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[.$$

Zur Abkürzung seien die Zeitableitungen (gewöhnliche wie partielle) auch mit einem Strich bezeichnet. Die Bezeichnungen seien: ρ - Dichte (allgemein die in der Referenzkonfiguration, somit nach Annahme 2 aus 2.1 die des Austenits zur Anfangstemperatur θ_0 und zur Anfangskonzentration des Kohlenstoffs im Austenit u_{c10}), c_e - spezifische Wärme, κ - Wärmeleitfähigkeit, L_i - latente Wärme der Umwandlung des Austenits in die Phase i (i = 2, ..., m). Für κ und c_e schreiben wir Ansätze mit Mischungsregeln bezüglich der Phasenanteile::

(2.24) $$c_e(u_c, \theta, p) := \sum_{i=1}^{N} c_{ei}(u_{ci}, \theta)\, p_i,$$

(2.25) $$\kappa(u_c, \theta, p) := \sum_{i=1}^{N} \kappa_i(u_{ci}, \theta)\, p_i,$$

Wir wählen folgende Anfangs- und Randbedingung:

(2.26) $$\theta(x, 0) = \theta_0(x) \qquad \text{in } \Omega,$$

(2.27) $$-\kappa(u_c, \theta, p)\frac{\partial\theta}{\partial\nu} = \delta_\theta(u_c, \theta, p)\,(\theta - \theta_\Gamma) \qquad \text{auf } \partial\Omega\times]0, T[,$$

mit der Anfangstemperatur θ_0, der Temperatur des umgebenden Mediums θ_Γ sowie dem Wärmeübergangskoeffizienten δ_θ, der gegebenenfalls auch nach einer Mischungsregel analog zu (2.24), (2.25) zu berechnen ist.

2.4 Modellierung der Phasenumwandlungen – allgemeiner Ansatz

Wir gehen von einem recht allgemeinen Ansatz der Modellierung aus, der viele bekannte einschließt (vgl. z.B. [29]). Der Vorteil dieses Herangehens besteht darin, sich nicht von vornherein auf bestimmte Umwandlungsgesetze wie z.B. die von Johnson-Mehl-Avrami oder von Leblond-Devaux festlegen zu müssen (vgl. Bemerkung 2.2 und z.B. [6-9, 15, 20, 21] und die dort zitierten Quellen). Ebenso werden die Konkretisierungen für unsere Situation später vorgenommen. Wir nehmen an, dass für den zu modellierenden Prozess (z.B. Abschrecken eines untereutektoiden Stahls) $N \geq 2$ Phasen unterschieden werden. Dann gelten für die Phasenanteile p_j die allgemeine Bilanz sowie die Nicht-Negativität:

$$\sum_{i=1}^{N} p_i(x, t) = 1 \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[, \tag{2.28}$$

$$p_i(x, t) \geq 0 \qquad \text{für } i = 1, ..., N \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[. \tag{2.29}$$

Wir bezeichnen mit p_1 den Phasenanteil des Austenits, mit p_2 den des Ferrits und mit p_3 bis p_N die der übrigen Phasen, wobei p_N der des Martensits sei. Aufgrund der Annahme 2 aus 2.1 können in unserer Situation nur die Phasenumwandlungen

$$p_1 \to p_j \qquad j = 2, ... N, \qquad p_2 \to p_1 \tag{2.30}$$

stattfinden. Dabei kommen der Temperatur θ und dem (Gesamt-) Kohlenstoffmassenanteil u eine bestimmende Rolle zu. Wir formulieren zwei wichtige allgemeine Annahmen für Phasenumwandlungen im Stahl (vgl. [6, 20, 21] und die dort zitierten Quellen).

(2.31) Zu jedem θ und u gibt es Gleichgewichtsanteile $\overline{p}_j(\theta, u)$ (j : 1, ..., N), die sich (bei konstanten θ und u) nach hinreichend langer Zeit einstellen.

(2.32) Die Umwandlung $i \to j$ $(i \neq j)$ ist nur möglich, falls $p_i > \overline{p}_i$ und $p_j < \overline{p}_j$.

Die Umwandlung $p_i \to p_j$ $(i \neq j)$ geschehe mit der Bildungsrate a_{ij} (aus Sicht von p_j), also

$$p_j' = a_{ij} \qquad (a_{ij} \geq 0), \tag{2.33}$$

falls die Umwandlung möglich ist, also neben (2.32) auch Temperatur und C-Gehalt entsprechend sind. Wie üblich sei die Heaviside-Funktion H durch

$$H(s) := 0 \qquad \text{für } s \leq 0, \qquad H(s) = 1 \qquad \text{für } s > 0 \tag{2.34}$$

definiert. Gestützt auf (2.32), (2.33) schreiben wir folgende Differentialgleichungen für die gemäß (2.30) möglichen Phasenumwandlungen (vgl. [29] für ausführliche Darlegungen)

$$p_1' = -\sum_{j=2}^{N} a_{1j}\, H(p_1 - \overline{p}_1)\, H(\overline{p}_j - p_j)\, G_{1j} + a_{21}\, H(p_2 - \overline{p}_2)\, H(\overline{p}_1 - p_1)\, G_{21} \tag{2.35}$$

$$p_2' = a_{12}\, H(p_1 - \overline{p}_1)\, H(\overline{p}_2 - p_2)\, G_{12} - a_{21}\, H(p_2 - \overline{p}_2)\, H(\overline{p}_1 - p_1)\, G_{21} \tag{2.36}$$

$$p_i' = a_{1i}\, H(p_1 - \overline{p}_1)\, H(\overline{p}_i - p_i)\, G_{1i} \qquad i = 3, \ldots, N. \tag{2.37}$$

Dabei seien die G_{ij} von Temperatur und Kohlenstoffgehalt abhängige Schalterfunktionen für die Umwandlungen $i \to j$. Diese Schalterfunktionen werden später als charakteristische Funktionen von bestimmten Gebieten definiert, die Bereiche für Temperatur und Kohlenstoffgehalt beschreiben, die durch das Fe-Fe_3C-Diagramm (vgl. z.B. [14, 23]) festgelegt werden. Die Gleichung (2.35) beschreibt die Umwandlung des Austenits in die ferritischen Phasen sowie die Rückumwandlung des Ferrits in den Austenit, die Gleichung (2.36) beschreibt Bildung und Zerfall des Ferrits, während (2.37) die Bildung der übrigen ferritischen Phasen aus dem Austenit beschreibt. Die Heaviside-Funktionen in (2.35) - (2.37) berücksichtigen die Bedingung (2.32). Die a_{ij} werden entsprechend den konkreten Verhältnissen angegeben, hierzu gibt es verschiedene Ansätze (z.B. den von Johnson-Mehl-Avrami für diffusionsgesteuerte Umwandlungen oder den

von Koistinen-Marburger für die martensitische Umwandlung). Wir wählen einen allgemeineren Ansatz (vgl. [29] für ausführliche Darlegungen sowie die Bemerkungen 2.2).

(2.38) $a_{ij} := (e_{ij}(\theta, u_c) + p_j)^{r_{ij}(\theta, u_c)} (\overline{p}_j - p_j)^{s_{1j}(\theta, u_c)} g_{ij}(\theta, u_c) h_{ij}(\theta', u_{c1})$

Dabei soll für die Parameter e_{ij}, r_{ij}, s_{ij}, g_{ij} und h_{ij} gelten:

(2.39) $e_{ij} \geq 0,\ 1 > r_{ij} \geq 0, \qquad s_{ij} \geq 1,\ g_{ij} \geq 0, h_{ij} \geq 0 \qquad$ für alle zulässigen Argumente,

(2.40) $h_{ij}(0, u_{c1}) = 1 \qquad$ für $j = 2, \ldots, N - 1, \qquad h_{1N}(\theta', u_{c1}) = 0 \qquad$ für $\theta' \geq 0$

Somit wären für die isothermen diffusionsgesteuerten Umwandlungen $i \to j$ $(j \neq N)$ vier Parameter zu bestimmen, entweder aus Dilatometerexperimenten für verschiedene relevante Situationen oder aus speziellen Umwandlungsdiagrammen (vgl. [29]). Oftmals sind die Umwandlungen nicht isotherm, so dass ein weiterer, von der Temperaturänderung θ' abhängiger Parameter h hinzutreten kann (vgl. [6, 7, 15]). Wir bemerken noch, dass es wegen (2.28) genügt, nur N – 1 Differentialgleichungen zu betrachten. Wir werden daher weiter unten nur (2.36) und (2.37) konkret beschreiben. In unserer Situation, beschrieben durch die Annahme 2 aus 2.1, werden die folgenden Anfangsbedingungen für die Phasenanteile hinzugefügt.

(2.41) $p_1(x, 0) = 1, \qquad p_j(x, 0) = 0 \qquad$ für $j = 2, ..., N.$

Bemerkung 2.2 Bekannte Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl ordnen sich in den obigen Ansatz (2.35) – (2.37) ein. Das von Leblond und Devaux [20] vorgeschlagene lineare Modell lautet für die Bildung der Phase j aus der Phase i (unter der Bedingung (2.32))

(2.42) $$p_j' = \frac{\overline{p}_i - p_i}{\tau_{ij}},$$

wobei der nicht-negative Parameter τ_{ij} die Dimension einer Zeit hat und die Geschwindigkeit der Umwandlung charakterisiert. In diesem Fall kann in den Gleichungen (2.35) – (2.37)

(2.43) $a_{ij} := \tau_{ij}^{-1}$

gesetzt werden. Das bekannte Modell für die diffusionsgesteuerten Umwandlungen nach Johnson, Mehl, Avrami und Kolmogoroff (s. z.B. [6, 8, 9, 21]) lautet für die Bildung der Phase j aus der i-ten Phase (bei konstanter Temperatur θ und unter der Bedingung (2.32))

(2.44) $$p_j(t) = \overline{p}_j \left(1 - \exp\left(- \left(\frac{t}{\tau_{ij}(\theta)}\right)^{n_{ij}(\theta)}\right)\right),$$

wobei $\tau_{ij} > 0$ und $n_{ij} > 1$ temperaturabhängige Parameter sind. Im Falle von konstantem θ folgt aus (2.44) die Differentialgleichung

(2.45) $$p_j'(t) = (\overline{p}_j - p_j(t)) \frac{n_i(\theta)}{\tau_{ij}(\theta)} \left(- \ln(1 - p_j(t)\, \overline{p}_j^{-1})\right)^{1 - \frac{1}{n_{ij}(\theta)}}.$$

Die Anwendung dieser Gleichung für nicht-isothermer Umwandlungen ist verschiedentlich zu ungenau, so dass vielfältige Modifikationen vorgeschlagen wurden (vgl. z.B. [6, 7, 15, 20]). Die rechte Seite in (2.45) hat *nicht* die Struktur wie in (2.38). Diese Struktur wird nach einer Linearisierung des Logarithmus in (2.45) erhalten, nämlich

(2.46) $$p_j'(t) = (\overline{p}_j - p_j(t)) \frac{n_{ij}(\theta)}{\tau_{ij}(\theta)} \left(p_j(t)\, \overline{p}_j^{-1}\right)^{1 - \frac{1}{n_{ij}(\theta)}}.$$

3 Phasenumwandlungen im unlegierten untereutektoiden Stahl

3.1 Festlegung der Bereiche für die (makroskopische) C-Konzentration und die Temperatur

Jetzt sollen die beim Abschrecken konkret ablaufenden Phasenumwandlungen beschrieben werden. Um den Modellierungsaufwand in Grenzen zu halten, beschränken wir uns auf untereutektoide unlegierte Stähle und setzen für den Gesamtmassenanteil des Kohlenstoffs u und die Temperatur Folgendes voraus:

(3.1) $0{,}0002 \le u \le 0{,}008$,

(3.2) $-100 \le \theta \le 1300$ (θ in °C).

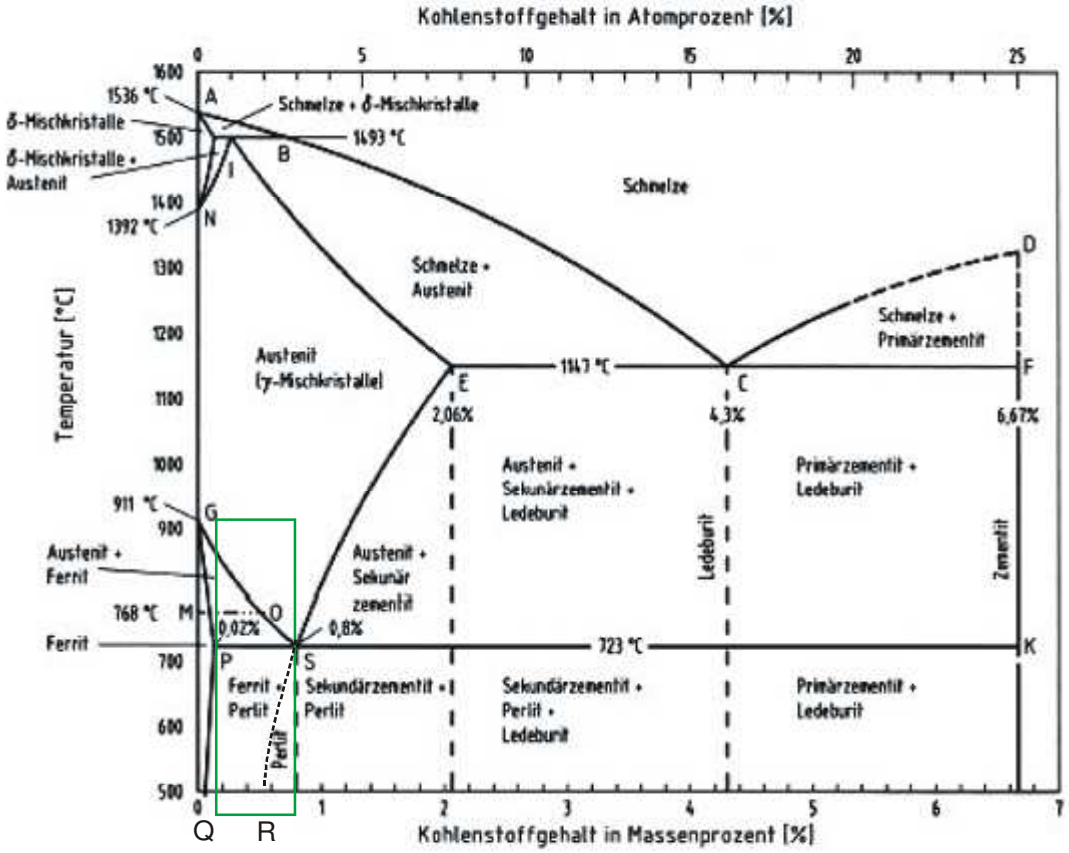

Bild 1: Fe-Fe_3C-Diagramm (vgl. [14]) mit relevantem Ausschnitt.

Somit betrachten wir (festen) Stahl, der oberhalb 900 °C (und u und θ gemäß (3.1), (3.2)) im Gleichgewicht vollständig als Austenit (mit $u_{c1} = u$) vorliegt. Bild 1 zeigt den für unsere Zwecke relevanten Ausschnitt aus dem Eisen-Kohlenstoff-Diagramm (Eisen-Eisenkarbid-Diagramm) (vgl. z.B. [14, 23]), der im Bild 2 für unsere Zwecke vergrößert dargestellt und mit wichtigen Bezeichnungen versehen wurde. Die Wahl von -100°C als unterer Schranke für den Temperaturbereich ist nicht so erheblich, sie gestattet eine tiefe Abschrecktemperatur. Bei niedriglegierten Stählen sind entsprechende Abweichungen im Fe-Fe_3C-Diagramm zu beachten (vgl. z.B. [14, 22, 23] und zitierte Quellen). Die Anfangs- und Randbedingungen (2.22) - (2.24), (2.28), (2.29) sollen zu (3.1) und (3.2) nicht im Widerspruch stehen. Während in der Werkstoffkunde gewöhnlich mit Massenprozenten gearbeitet wird, wollen wir hier aus Gründen der Konsistenz mit dem Vorherigem bei den Massenanteilen bleiben. Wir bezeichnen die

folgenden Kurven im Fe-Fe_3C-Diagramm als Graphen von Funktionen, die vom Kohlenstoffgehalt u abhängen:

(3.3) Kurve GP: $\theta = f_{GP}(u)$ für $0 \le u \le 0{,}0002$;

(3.4) Kurve GS: $\theta = f_{GS}(u)$ für $0 \le u \le 0{,}008$;

(3.5) Kurve SE: $\theta = f_{SE}(u)$ für $0{,}8 \le u \le 0{,}0206$;

(3.6) Kurve QP $\theta = f_{QP}(u)$ für $0 \le u \le 0{,}0002$.

Mit f_{SE} bezeichnen wir ebenso die sich unterhalb 723 °C aus thermodynamischen Erwägungen ergebene fortgesetzte (im Bild 1 gestrichelt) Kurve, die den Grenzbereich für den Zementit (im Perlit) angibt. ($f_{SE}^{-1}(\theta)$ ist die minimale C-Konzentration im Austenit, bei der noch Zementit [als Bestandteil von Perlit] gebildet werden kann.) Damit zu Beginn nur Austenit vorliegt, möge weiter gelten

(3.7) $\theta_0(x) \ge f_{GS}(u_{c10}(x))$ für $x \in \Omega$.

Wir nummerieren die in unserer Situation auftretenden möglichen Phasen wie folgt

Austenit: 1, Ferrit (inklusive des voreutektoiden): 2, Perlit 3,

Bainit: 4, Martensit 5.

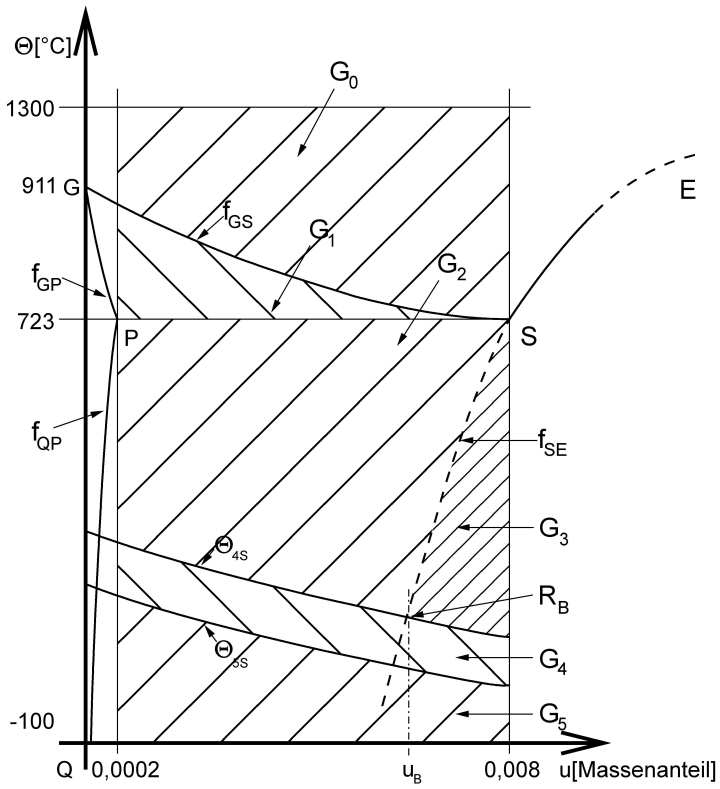

Bild 2: Schematischer Ausschnitt aus dem Fe-Fe_3C-Diagramm mit relevanten Bezeichnungen.

Des weiteren bezeichnen wir folgende Gebiete für Temperatur und C-Gehalt, mit denen wir arbeiten, und die den Bereich (3.1), (3.2) in disjunkte Teile zerlegen.

(3.8) G_0 : $0{,}0002 \le u \le 0{,}008$, $f_{GS}(u) < \theta \le 1300$;

(3.9) G_1 : $0{,}0002 \le u \le 0{,}008$, $723 < \theta \le f_{GS}(u)$;

(3.10) G_2 : $\theta_{4s}(u) < \theta \le 723$ für $0{,}0002 \le u \le u_B$,

$f_{se}(u) < \theta \le 723$ für $u_B \le u \le 0{,}008$;

(3.11) G_3 : $\theta_{4s}(u) < \theta \le f_{SE}(u)$ $u_B \le u \le 0{,}008$;

(3.12) G_4 : $\theta_{5s}(u) < \theta \le \theta_{4s}(u)$ $0{,}0002 \le u \le 0{,}008$;

(3.13) G_5 : $-100 \le \theta \le \theta_{5s}(u)$ $0{,}0002 \le u \le 0{,}008$.

Dabei stehen die beiden Kurven θ_{4s} und θ_{5s} entsprechend für die Bainit- und Martensit-Starttemperatur. Den Schnittpunkt der verlängerten Kurve SE mit der Funktion $\theta = \theta_{4s}(u)$ bezeichnen wir mit R_B. Dem Punkt R_B entspricht ein C-Anteil von u_B mit

(3.14) $0{,}0002 < u_B < 0{,}008$.

Des weiteren definieren wir zu den Gebieten G_i gehörende charakteristische Funktionen gemäß:

(3.15) $\chi_{Gi}(u, \theta) := 1$, falls $(u, \theta) \in G_j$, $\chi_{Gi}(u, \theta) := 0$ sonst für $j = 0, ..., 5$.

3.2 Spezielle Annahmen zum Ablauf der auftretenden Phasenumwandlungen

Gestützt auf das Fe-Fe_3C-Diagramm und die durch (3.1), (3.2) gegebene Einschränkung formulieren wir weitere Annahmen:

1. Im Gebiet G_0 liegt im Gleichgewicht nur Austenit vor. Gemäß (3.7) beginnt der Prozess in diesem Gebiet.

2. Im Gebiet G_1 liegen im Gleichgewicht Austenit und Ferrit mit Gleichgewichtswerten für die Phasenanteile entsprechend dem Fe-Fe_3C-Diagramm vor („Hebelgesetz“, vgl. z.B. [5, 23]). Dabei besitzen Austenit und Ferrit auch Gleichgewichtswerte für die Massenanteile des Kohlenstoffs, u_{c1} und u_{c2}. Bei Änderung von Temperatur und/ oder (Gesamt-)Kohlenstoffanteil ändern sich auch diese Größen. Wir nehmen nun an, dass diese (lokalen) Änderungen schnell vonstatten gehen. Zum einen diffundiert der Kohlenstoff schneller durch den Ferrit als durch den Austenit (vgl. z.B. [8, 22]), zum anderen ist der C-Anteil des Ferrits niedrig und ändert sich nicht zu stark (s. Fe-Fe_3C-Diagramm). Ein Verlassen des Gebietes G_1 in das Gebiet G_0 schließen wir aus.

3. Im Gebiet G_2 kann sich (unter Nichtgleichgewichtsbedingungen) voreutektoider Ferrit bilden, solange θ und u_{c1} nicht zu G_3 gehören.

4. Erreichen θ und u_{c1} das Gebiet G_3, so bildet sich Perlit mit dem C-Anteil u_{c1} beim Eintritt in dieses Gebiet.

5. Erreicht θ das Gebiet G_4, so bildet sich Bainit mit dem C-Anteil u_{c1} beim Eintritt in dieses Gebiet.

6. Erreicht θ das Gebiet G_5, so bildet sich Martensit mit dem C-Anteil u_{c1} beim Eintritt in dieses Gebiet. Für unlegierte Stähle ist die Martensit-Starttemperatur θ_{5s} eine mit wachsendem C-Anteil (im Austenit) monoton fallende Funktion.

7. Nach dem Beginn der Perlitbildung bildet sich kein Ferrit, nach Beginn der Bainitbildung kein Perlit und nach Beginn der Martensitbildung kein Bainit. Diese Annahme scheint beim Abschrecken gerechtfertigt. Sie steht im Zusammenhang mit der Annahme 2 aus 2.1, durch die Rückumwandlungen (außer der des Ferrits oberhalb 723°C) ausgeschlossen wurden.

3.3 Umwandlungen zwischen Austenit und Ferrit

Gemäß dem Fe-Fe_3C-Diagramm gibt es zu jedem u und jedem θ im Gebiet G_1 einen Gleichgewichtsanteil des Ferrits $\bar{p}_2(u, \theta)$ mit dem C-Massenanteil $f_{GP}^{-1}(\theta)$ und einen Gleichgewichtsanteil des Austenits $\bar{p}_1(u, \theta)$ mit dem C-Massenanteil $f_{GS}^{-1}(\theta)$. Aus dem Massenerhalt des Kohlenstoffs folgt dann bei *alleiniger* Anwesenheit von Austenit und Ferrit

(3.16) $u = f_{GS}^{-1}(\theta)\, \bar{p}_1(u, \theta) + f_{GP}^{-1}(\theta)\, \bar{p}_2(u, \theta)$,

woraus sich wegen $\bar{p}_1(\theta, u) = 1 - \bar{p}_2(\theta, u)$ dann

$$\bar{p}_2(u, \theta) = \frac{f_{GS}^{-1}(\theta) - u}{f_{GS}^{-1}(\theta) - f_{GP}^{-1}(\theta)} \qquad \text{für } (u, \theta) \in G_1 \tag{3.17}$$

ergibt. Wir bemerken, dass in G_1 und G_2 gilt

$$u = u_{c1} + u_{c2}. \tag{3.18}$$

Die Größen θ, u_{c1} usw. hängen von x und t ab, was wir nicht in jedem Falle notieren. Im Bereich G_2 wird die Bildung des voreutektoiden Ferrits durch den Beginn der perlitischen Umwandlung beendet, die ihrerseits einsetzt, wenn

$$u_{c1} = f_{SE}^{-1}(\theta). \tag{3.19}$$

Somit gilt

$$\bar{p}_2(u, \theta) = 1 \qquad \text{für } (u, \theta) \in G_2. \tag{3.20}$$

Wir erhalten dann für die Umwandlung des Austenits in den Ferrit die gewöhnliche Differentialgleichung (vgl. (2.33))

$$p_2' = a_{12}\, H(p_1 - \bar{p}_1(u, \theta))\, H(\bar{p}_2(u, \theta) - p_2)\, (\chi_{G1}(u, \theta) + \chi_{G2}(u, \theta)) + \\ - a_{21}\, H(p_2 - \bar{p}_2)\, H(\bar{p}_1 - p_1)\, \chi_{G1}(u, \theta), \tag{3.21}$$

wobei die a_{12} und a_{21} (beide größer oder gleich null) die Gestalt (3.35) haben können. Aus den obigen Überlegungen gewinnen wir auch Gleichungen für die Größen c_{c2} und u_{c2}. Bildet sich Ferrit oberhalb von 723°C (also in G_1) bei einer konstanter Temperatur θ, d.h., wird der Austenit sehr schnell auf diese Haltetemperatur gebracht, so gilt

$$c_{c2}(x, t) = \rho\, f_{GP}^{-1}(\theta)\, p_2(x, t), \tag{3.22}$$

Unter Beachtung von Annahme 2 in 3.2 gilt näherungsweise für die Änderung von c_{c2} bei variabler Temperatur im Gebiet G_1:

$$\frac{\partial c_{c2}}{\partial t}(x, t) = \rho \frac{\partial}{\partial t}(\, f_{GP}^{-1}(\theta(x, t))\, p_2(x, t)). \tag{3.23}$$

Um auch die Ferritbildung in G_2 zu berücksichtigen, schreiben wir

$$\frac{\partial c_{c2}}{\partial t}(x, t) = \rho \frac{\partial}{\partial t}(\, \varphi(\theta(x, t))\, p_2(x, t)) \tag{3.24}$$

wobei φ gemäß

$$\varphi(\theta) := f_{GP}^{-1}(\theta)\, H(\theta - 723) + f_{QP}^{-1}(\theta)\, H(723 - \theta) \tag{3.25}$$

definiert ist. Durch (3.24) ist dann der Beitrag zur Quelle bzw. Senke in der Gleichung (2.14) für u_{c1} gegeben, den die Ferritbildung bzw. -umwandlung beisteuert. Aus (3.24) kann c_{c2} selbst erhalten werden, falls eine Anfangsbedingung gegeben wird. Die (i.A. ortsabhängige) Zeit t_{in2}, ab der die Ferritbildung beginnt, berechnet sich zu

$$t_{in2}(x) = \int_0^t (1 - \sum_{i=1}^{5} \chi_{Gi}(u(x, s), \theta(x, s))\, ds. \tag{3.26}$$

Somit ist $t_{in2}(x)$ der Zeitpunkt, zu dem das Gebiet G_0 verlassen wird. Nach der Annahme 2 aus 3.2 entspricht dann $t_{in2}(x)$ der Anfangswert

$$c_{c20}(x, t_{in2}(x)) = 0 = \rho\, f_{GP}^{-1}(\theta(x, t_{in2}(x)))\, \bar{p}_2(u_{c1}(x, t_{in2}(x), \theta(x, t_{in2}(x))), \tag{3.27}$$

da wegen (3.17)

(3.28) $$\overline{p}_2(u_{c1}(x, t_{in2}(x), \theta(x, t_{in2}(x))) = 0$$

gilt, weil der Punkt $(u_{c1}(x, t_{in2}(x), \theta(x, t_{in2}(x)))$ auf der Kurve GS liegt. Somit ergibt sich dann für c_{c2} selbst

(3.29) $$c_{c2}(x, t) = \rho\, \varphi(\theta(x, t))\, p_2(x, t))$$

und wegen des Zusammenhangs (2.7)

(3.30) $$u_{c2}(x, t) = \varphi(\theta(x, t)).$$

Die Gleichung (3.30) drückt noch mal die Annahme 2 in 3.2 aus, dass der „Konzentrationsausgleich“ im Ferrit „sehr schnell“ abläuft.

Bemerkungen 3.1 Die obige Situation wird komplizierter, wenn ein solcher schneller Konzentrationsausgleich nicht angenommen wird. Es bieten sich zumindest zwei Wege an.

(i) Auf der Mesoebene, also im repräsentativen Volumenelement, könnte ein lokaler C-Anteil im Ferrit u_{c2loc} definiert werden. Für diesen könnte dann eine Differentialgleichung hergeleitet werden, die einen Ausgleich von u_{c2loc} zu u_{c2} beschreibt.

(ii) Um eine solche Zwei-Skalen-Modellierung (vgl. z.B. [4, 10, 11, 31]) zu vermeiden, wäre folgender Weg denkbar. Für eine konstante Umwandlungstemperatur $\theta > 723°C$ gilt gemäß (3.22)

(3.31) $$c_{c2}(x, t) = \rho\, f_{GP}^{-1}(\theta)\, p_2(x, t) = \rho\, f_{GP}^{-1}(\theta) \int_0^t p_2'(x, s)\, ds = \rho\, f_{GP}^{-1}(\theta)\, p_2'(x, \xi)\, t,$$

wobei die Mittelwertformel zur Anwendung gelangte, und für ξ die Beziehung $0 \le \xi \le t$ gilt. Sei nun die Temperaturführung treppenförmig und monoton fallend, so dass p_2 monoton wachsend ist. Näherungsweise gelangen wir zu

(3.32) $$c_{c2}(x, t) = \rho \sum_{i=1}^{k} f_{GP}^{-1}(\theta(t_i))\, p_2'(x, \xi_i)\, (t_i - t_{i-1}),$$

wobei das Intervall $[0, t]$ durch $0 = t_0 < t_1 < \ldots < t_k = t$ zerlegt und $\xi_i \in [t_{i-1}, t_i]$ seien. Durch Grenzübergang gelangen wir dann zu

(3.33) $$c_{c2}(x, t) = \rho \int_0^t f_{GP}^{-1}(\theta(x, s))\, p_2'(x, s)\, ds$$

vorerst für einen monoton wachsenden Ferritanteil, also für $p_2' \ge 0$. Diese Formel (3.33) berücksichtigt *nicht* die Änderung des C-Anteils im Ferrit nach dessen Bildung. Ein möglicher phänomenologischer Ansatz wäre

(3.34) $$c_{c2}(x, t) = \rho \int_0^t f_{GP}^{-1}(\theta(x, s + \sigma_2(t)(t - s)))\, p_2'(x, s)\, ds,$$

mit einer „Ausgleichsfunktion“ σ_2 mit den Eigenschaften

(3.35) $$\sigma_2 \in C^1([0, \infty[),\ \sigma_2(0) = 0, \qquad \sigma_2' > 0, \qquad \lim_{t \to \infty} \sigma_2(t) = 1.$$

Die Formel (3.34) liefert zum einen für konstante Temperaturen die richtige Beziehung (3.22), zum anderen ermöglicht sie, dass c_{c2} gegen den Wert in (3.22) für $\theta = \theta^*$ strebt, falls $\theta(t) \to \theta^*$.

In analoger Weise sind mögliche Rückumwandlungen des Ferrits in den Austenit zu berücksichtigen. Wird im Bereich G_1 erwärmt, so kann sich Austenit auf Kosten von Ferrit bilden. Analoge Überlegungen ergeben, dass sich dann c_{c2} um den Betrag

(3.36) $$\rho \int_0^t f_{GS}^{-1}(\theta(x, s + \sigma_1(t)(t - s))) \, p_1'(x, s) \, ds$$

vermindert, wobei σ_1 eine Funktion gemäß (3.35) für den Austenit sei. Da in G_1 die Beziehung $p_1' = - p_2'$ gilt, folgt aus (3.34) und (3.36) für beliebige Temperaturführungen (innerhalb von G_1)

(3.37) $$c_{c2}(x, t) = \rho \int_0^t f_{GP}^{-1}(\theta(x, s + \sigma_2(t)(t - s))) \max\{p_2'(x, s), 0\} \, ds + \\ + \rho \int_0^t f_{GS}^{-1}(\theta(x, s + \sigma_1(t)(t - s))) \min\{p_2'(x, s), 0\} \, ds.$$

Um letztlich auch die Ferritbildung in G_2 mit zu berücksichtigen, schreiben wir

(3.38) $$c_{c2}(x, t) = \rho \int_0^t \varphi(\theta(x, s + \sigma_2(t)(t - s))) \max\{p_2'(x, s), 0\} \, ds + \\ + \rho \int_0^t f_{GS}^{-1}(\theta(x, s + \sigma_1(t)(t - s))) \min\{p_2'(x, s), 0\} \, ds$$

mit φ gemäß (3.25). Eine einparametrige Schar von Funktionen der Art (3.35) ist z.B. durch

(3.39) $$\sigma_k(s) := \frac{2}{\pi} \arctan(ks) \qquad \text{für } s \geq 0 \qquad \text{mit gegebenem } k > 0$$

gegeben. Aus zusätzlichen Betrachtungen müsste der Parameter k bestimmt werden.

3.4 Umwandlung des Austenits zu Perlit

Gemäß der Voraussetzungen kann sich Perlit nur bilden, wenn u_{c1} und θ das Gebiet G_3, genauer seine Begrenzung f_{SE}, erreichen. Der Zeitpunkt des Verlassens von G_2, $t_{in3}(x)$, ist durch

(3.40) $$t_{in3}(x) = \int_0^t (1 - \sum_{i=3}^{5} \chi_{Gi}(u_{c1}(x, s), \theta(x, s)) \, ds$$

gegeben. Damit sich Perlit und nicht Bainit bildet, muss zusätzlich

(3.41) $$u_{c1}(x, t_{in3}(x)) > u_b$$

gelten, was aber in der Umwandlungsgleichung (3.44) durch χ_{G3} berücksichtigt wird. Für den C-Gehalt des Perlits gilt dann

(3.42) $$u_{c3}(x, t) = u_{c1}(x, t_{in3}(x)) = f_{SE}^{-1}(\theta(x, t_{in3}(x))) \qquad \text{für } t \geq t_{in3}(x).$$

Gleichzeitig endet ab $t_{in3}(x)$ die Bildung von Ferrit. Bleibt die Temperatur im Perlitbereich G_3, so kann der ganze verbleibende Austenit in Perlit umwandeln, so dass für dessen möglichen Endwert $\overline{p}_3$ gilt

(3.43) $$\overline{p}_3(x) = 1 - p_2(x, t_{in3}(x)).$$

Somit folgt für die Perlitbildung die Differentialgleichung (vgl. (2.34))

(3.44) $$p_3'(x, t) = a_{13} \, H(\overline{p}_3(x) - p_3(x, t)) \, \chi_{G3}(u_{c1}(x, t_{in3}(x)), \theta(x, t)),$$

wobei a_{13} gemäß (2.35) mit spezifischen Parametern gewählt werden kann.

3.5 Umwandlung des Austenits in den Bainit

Diese Umwandlung ist analog zur vorigen. Bainit kann gebildet werden, wenn G_4 erreicht wird, entweder aus G_2 oder aus G_3. Für den C-Gehalt des Bainits gilt in beiden Fällen:

(3.45) $u_{c4}(x, t) = u_{c1}(x, t_{in3}(x))$ für $t \geq t_{in3}(x)$.

Der Zeitpunkt des Eintretens in G_4, $t_{in4}(x)$, berechnet sich zu

(3.46) $$t_{in4}(x) = \int_0^t (1 - \sum_{i=4}^{5} \chi_{Gi}(u_{c1}(x, s), \theta(x, s))\, ds.$$

Falls das Perlitgebiet G_3 für gewisse $x \in \Omega$ nicht durchlaufen wird, so fallen $t_{in3}(x)$ und $t_{in4}(x)$ zusammen. In diesem Fall gilt natürlich $p_3(x, t_{in4}(x)) = 0$. Für den möglichen Endwert $\overline{p}_4$ gilt

(3.47) $\overline{p}_4(x) = 1 - p_2(x, t_{in3}(x)) - p_3(x, t_{in4}(x))$.

Die Umwandlungsgleichung für den Bainit lautet dann

(3.48) $p_4'(x, t) = a_{14}\, H(\overline{p}_4(x) - p_4(x, t))\, \chi_{G4}(u_{c1}(x, t_{in3}(x)), \theta(x, t))$,

wobei a_{14} ebenfalls gemäß (2.35) mit spezifischen Parametern gewählt werden kann. Es ist dabei auch zu beachten, dass sich u_{c1} nach Eintritt in den Perlit- bzw. Bainitbereich nicht mehr ändert.

3.6 Umwandlung des Austenits in den Martensit

Die Martensitbildung ist nur möglich im Gebiet G_5. Analog wird die Zeit $t_{in5}(x)$ des Erreichens von G_5 durch

(3.49) $$t_{in5}(x) = \int_0^t (1 - \chi_{G5}(u_{c1}(x, s), \theta(x, s))\, ds.$$

berechnet. Der dann noch vorhandene Austenit kann sich dann in Martensit gemäß eines spezifischen Umwandlungsgesetzes in Martensit nach folgender Gleichung

(3.50) $p_5'(x, t) = (1 - p_2(x, t_{in3}(x)) - p_3(x, t_{in4}(x)) - p_4(x, t_{in5}(x)))\, a_{15}\, \chi_{G5}(u_{c1}(x, t_{in3}(x)), \theta(x, t))$

umwandeln. Die Größe a_{15} (vgl. (2.35) beinhaltet spezielle Ansätze für die Martensitbildung aus (vollständig vorhandenen) Austenit, z.B. nach Koistinen-Marburger (vgl. z.B. [6, 8, 9, 21, 29]).

4 Mathematische Modellierung

Das mathematische Modell für die durch die getroffenen Annahmen eingegrenzte Situation soll jetzt zusammenfassend dargestellt werden. Unter Beachtung von (3.24), (3.42) und (3.45) lautet die Diffusionsgleichung (2.16) (mit φ gemäß (3.25))

(4.1) $$\frac{\partial}{\partial t}(p_1\, u_{c1}) - \mathrm{div}(d_{c1}(\theta)\, p_1\, \nabla(u_{c1})) = -\frac{\partial}{\partial t}(\varphi(\theta)\, p_2) - \frac{\partial}{\partial t}(\, f_{SE}^{-1}(\theta(x, t_{in3}(x)))\, p_3) +$$
$$- \frac{\partial}{\partial t}(\, u_{c1}(x, t_{in3}(x))\, p_4) - \frac{\partial}{\partial t}(\, u_{c1}(x, t_{in3}(x))\, p_5) \qquad \text{in } \Omega \times]0, T[.$$

Aus (2.23) folgt die Wärmeleitungsgleichung in unserer Situation unter Beachtung von (3.18), (3.30), (3.42), (3.45)

(4.2) $$\rho\, c_e\, \theta' - \mathrm{div}(\kappa(u_c, \theta, p)\, \nabla\theta) = \rho\, L_2(u_{c1} + \varphi(\theta))\, p_2' + \rho\, L_2(f_{SE}^{-1}(\theta(x, t_{in3}(x))))\, p_2' +$$
$$+ \rho \sum_{i=4}^{5} L_i(u_{c1}(x, t_{in3}(x))\, p_i' \qquad \text{in } \Omega \times]0, T[,$$

Die Umwandlungsgleichungen für Ferrit, Perlit, Bainit und Martensit lauten gemäß (3.21), (3.44), (3.48), (3.50)

(4.3) $p_2' = a_{12}\, H(p_1 - \bar{p}_1(u, \theta))\, H(\bar{p}_2(u, \theta) - p_2)\, (\chi_{G1}(u, \theta) + \chi_{G2}(u, \theta)) +$

$$- \; a_{21}\, H(p_2 - \bar{p}_2)\, H(\bar{p}_1 - p_1)\, \chi_{G1}(u, \theta) \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[,$$

(4.4) $p_3' = a_{13}\, H(\bar{p}_3 - p_3)\, \chi_{G3}(u_{c1}(x, t_{in3}(x)), \theta)$ in $\Omega\times]0, T[$,

(4.5) $p_4' = a_{14}\, H(\bar{p}_4 - p_4)\, \chi_{G4}(u_{c1}(x, t_{in3}(x)), \theta)$ in $\Omega\times]0, T[$,

(4.6) $p_5' = (1 - p_2(x, t_{in3}(x)) - p_3(x, t_{in4}(x)) - p_4(x, t_{in5}(x)))\, a_{15}\, \chi_{G5}(u_{c1}(x, t_{in3}(x)), \theta)$ in $\Omega\times]0, T[$,

dabei sind die Gleichgewichtsanteile für Austenit, Ferrit, Perlit und Bainit wie folgt gegeben.

(4.7) $\bar{p}_2(u, \theta) = \dfrac{f_{GS}^{-1}(\theta) - u}{f_{GS}^{-1}(\theta) - f_{GP}^{-1}(\theta)}$ für $(u, \theta)\in G_1$, $\bar{p}_2(u, \theta) = 1$ für $(u, \theta)\in G_2$,

(4.8) $\bar{p}_1(u, \theta) = 1 - \bar{p}_2(u, \theta)$ für $(u, \theta)\in G_1$,

(4.9) $\bar{p}_3(x) = 1 - p_2(x, t_{in3}(x))$ für $x\in\Omega$,

(4.10) $\bar{p}_4(x) = 1 - p_2(x, t_{in3}(x)) - p_3(x, t_{in4}(x))$ für $x\in\Omega$.

Die ortsabhängigen "Startzeiten" für Perlit, Bainit und Martensit, t_{in3}, t_{in4} bzw. t_{in5}, sind durch die folgenden Beziehungen gegeben.

(4.11) $t_{in3}(x) = \int_0^t (1 - \sum_{i=3}^{5} \chi_{Gi}(u_{c1}(x, s), \theta(x, s))\, ds$ für $x\in\Omega$,

(4.12) $t_{in4}(x) = \int_0^t (1 - \sum_{i=4}^{5} \chi_{Gi}(u_{c1}(x, s), \theta(x, s))\, ds$ für $x\in\Omega$,

(4.13) $t_{in5}(x) = \int_0^t (1 - \chi_{G5}(u_{c1}(x, s), \theta(x, s))\, ds$ für $x\in\Omega$.

Es sei unterstrichen, dass diese „Startzeiten" a priori unbekannt sind. Die Anfangsbedingungen für u_{c1}, θ und p lauten:

(4.14) $u_{c1}(x, 0) = u_{c10}(x), \quad \theta(x, 0) = \theta_0(x)$ für $x\in\Omega$.

(4.15) $p_1(x, 0) = 1, \quad p_i(x, 0) = 0$ für $i = 2, ..., 5$ für $x\in\Omega$,

Des weiteren sind Randbedingungen für u und θ hinzuzufügen

(4.16) $u_{c1} = \dfrac{c_{c\Gamma}}{\rho}$ auf $\Gamma_0\times]0, T[$,

(4.17) $- d_{c1}(\theta)\, \dfrac{\partial}{\partial\nu}(u_{c1}) = \delta_{c1}(\theta)\, (u_{c1} - \dfrac{c_{c\Gamma}}{\rho})$ auf $\Gamma_1\times]0, T[$,

wobei $\partial\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1$,

(4.18) $- \kappa\, \dfrac{\partial\theta}{\partial\nu} = \delta_\theta\, (\theta - \theta_\Gamma)$ auf $\partial\Omega\times]0, T[$.

Dabei muss die Bedingung (3.7) für θ_0 und u_{c10} gelten.

Zusammenfassend ergibt sich als mathematisches Modell für die makroskopische Modellierung von Kohlenstoffdiffusion, Wärmeleitung und Phasenumwandlungen eine Rand-Anfangswert-Aufgabe für ein gekoppeltes System zweier parabolischer partieller Differentialgleichungen (4.1), (4.2) sowie mehrerer gewöhnlicher Differentialgleichungen (4.3) – (4.6), bei denen die

Ortsvariable die Rolle eines Parameters spielt. Die Gleichgewichtsanteile für die Phasen (4.7) – (4.10) sowie die „Startzeiten“ (4.11) – (4.13) können in die Gleichungen (4.1) – (4.6) eingesetzt und somit formal eliminiert werden. Infolge der vielfältigen Nichtlinearitäten sind die mathematischen und numerischen Untersuchungen nicht trivial. Hinzu kommen die durch die „Startzeiten“ in (4.11) – (4.13) vermittelten „Gedächtniseffekte“. Daher ist es von Bedeutung, zu untersuchen, welche Vereinfachungen vorgenommen werden dürfen, um noch eine hinreichend genaue Beschreibung der Realität zu erreichen. So könnte eventuell bei der Einsatzhärtung dünner Bauteile nur mit den Phasen Austenit und Martensit gerechnet werden. Eine weitere mathematische Schwierigkeit bereiten die unstetigen Heaviside- sowie die charakteristischen Funktionen, die ggf. durch stetige Funktionen näherungsweise ersetzt werden müssten.

Danksagung

Diese Arbeit wurde teilweise durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) über den Sonderforschungsbereich SFB 570 „Distortion Engineering“ an der Universität Bremen unterstützt. Die Autoren bedanken sich Frau Dipl.-Ing. Carmen Acht für hilfreiche Diskussionen. Für die Anfertigung des Bildes 2 gilt unser Dank Herrn Cand. Dipl.-Math. Jochen Rath.

Literatur

[1] Acht, C., Clausen, B., Hoffmann, F. Zoch, H.-W.: Simulation of the distortion of 20MnCr5 parts after asymmetrical carburization, in Proceedings of the 1st International Conference on Distortion Engineering, Bremen, Germany, 14-16 September, 2005, Eds. Zoch, H.-W., Lübben, T., 251-258, Verlag der Universität Bremen, 2005.

[2] Acht, C., Lübben, T., Hoffmann, F., Zoch, H.-W.: Einfluss von Prozessparametern und Abmessungsvarianten auf die Maß- und Formänderung einsatzgehärteter Scheiben aus 20MnCr5, Z. Werkst. Wärmebeh. Fertigung 61 (2006) 1, 34-42.

[3] Ahrens, U: Beanspruchungsabhängiges Umwandlungsverhalten und Umwandlungsplastizität niedrig legierter Stähle mit unterschiedlich hohen Kohlenstoffgehalten, Diss., Universität Paderborn, Germany, (2003).

[4] J. Bear, J., Bachmat, Y.: Introduction to modeling of transport phenomena in porous media, Kluwer Academics, 1990.

[5] Bleck, W.: Werkstoffkunde Stahl für Studium und Praxis, Verlag Mainz, Aachen, 2001.

[6] 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).

[7] Böhm, M., Hunkel, M., Schmidt, A., Wolff, M.: Evaluation of various phase-transition models for 100Cr6 for application in commercial FEM programs, J. de Physique IV 120 (2004) 581-589.

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

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

[10] Fischer, F. D.: Modelling and simulation of transformation induced plasticity in elasto-plastic materials. In: Mechanics of solids with phase changes, no. 368, eds. Bergveiller, M., Fischer, F. D., Springer-Verlag, 1997.

[11] Grunewald, J.: Diffusiver und konvektiver Stoff- und Energietransport in kapillarporösen Baustoffen, Diss., Technische Universität Dresden, 1997.

[12] Guy, A. G.: Metallkunde für Ingenieure, Akad. Verlagsgesellschaft, Frankfurt, 1983.

[13] Haupt, P.: Continuum Mechanics and Theory of Materials, Springer-Verlag Berlin, 2000.

[14] Horstmann, D.: Das Zustandsschaubild Eisen-Kohlenstoff und die Grundlagen der Wärmebehandlung der Eisen-Kohlenstoff-Legierungen, 5. AuflageVerlag Stahleisen Düsseldorf, 1992.

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

[16] Hutter, K., Jöhnk, K.: Continuum methods of physical modeling, Springer, Berlin, Heidelberg, 2004.

[17] 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).

[18] Kleff, J., Hock, S., Kellermann, I., Fleischmann, M., Küper, A.: Hochtemperatur-Aufkohlen – Einflüsse auf das Verzugsverhalten schwerer Getriebebauteile, Z. Werkst. Wärmebeh. Fertigung 60 (2005) 6, 311-316.

[19] Kohtz, D.: Wärmebehandlung metallischer Werkstoffe, VDI, Düsseldorf, 1994.

[20] 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).

[21] Lemaitre, J.: Handbook of Materials Behavior Models, Academic Press, San Diego, USA, 2001.

[22] Leslie, W. C.: The physical metallurgy of steels, McGraw-Hill, New York, 1981.

[23] Macherauch, E.: Praktikum in Werkstoffkunde, Friedr. Vieweg Sohn Verlagsgesellschaft, Braunschweig / Wiesbaden, 1992.

[24] Schmidt, A.; Suhr, B.; Moshagen, T.; Woff, M.; Boehm, M.: Adaptive finite element simulations for macroscopic and mesoscopic models, in Proceedings of the 1st International Conference on Distortion Engineering, Bremen, Germany, 14-16 September, 2005, Eds. Zoch, H.-W., Lübben, T., 141-148, Verlag der Universität Bremen, 2005.

[25] Wolff, M., Böhm, M., Dachkovski, S.: Volumenanteile versus Massenanteile – der Dilatometerversuch aus der Sicht der Kontinuumsmechanik. Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 03-01, 2003.

[26] Wolff, M.; Böhm, M.; Schmidt, A.: A thermodynamically consistent model of the material behaviour of steel including phase transformations, classical and transformation-induced plasticity, in Trends in Applications of Mathematics to Mechanics (Shaker Verlag, Aachen), 591-601, eds: Yongqi Wang, Kolumban Hutter, 2005.

[27] Wolff, M.; Böhm, M.; Schmidt, A.: Modelling of steel phenomena and its interactions - an internal-variable approach, in Proceedings of the 1st International Conference on Distortion Engineering, Bremen, Germany, 14-16 September, 2005, Eds. Zoch, H.-W., Lübben, T., 315-323, Verlag der Universität Bremen, 2005.

[28] Wolff, M.; Böhm, M.; Schmidt, A.: Mathematical modelling of material behaviour of steel: Phase transformations, and transformation and classical plasticity, in preparation: contribution to International Symposium on plasticity, Halifax, Nova Scotia (Canada), July 17-22, 2006

[29] Wolff, M., Böhm, M., Hömberg, D.: General models of phase transformations in steel in the multi-phase case – analysis and parameter identification, in preparation, 2006.

[30] Zeidler, E.: Nonlinear functional analysis and its applications IV – applications to mathematical physics, Springer, 1997.

[31] Zohdi, T. I., Wriggers, P.: Introduction to Computational Micromechanics, Springer, 2005.

Berichte aus der Technomathematik ISSN 1435-7968

http://www.math.uni-bremen.de/zetem/berichte.html

— Vertrieb durch den Autor —

Reports **Stand: 9. Mai 2006**

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

01–02. Parallel Algorithms for LQ Optimal Control of Discrete-Time Periodic Linear Systems:
Peter Benner, Ralph Byers, Rafael Mayo, Enrique S. Quintana-Ortí, Vicente Hernández, 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, Juli 2002.

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

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

02–10. Torsten Köhler, Peter Maaß, Jan Kalden:
Time-series forecasting for total volume data and 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.

02–14. Michael Böhm, Martin Hunkel, Alfred Schmidt, Michael Wolff:
Evaluation of various phase-transition models for 100Cr6 for application in commercial FEM programs, 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, März 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,
Juli 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,
Juli 2003.

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

04–01. Liliana Cruz Martin, Gerd Teschke:
A new method to reconstruct radar reflectivities and Doppler information,
Januar 2004.

04–02. Ingrid Daubechies, Gerd Teschke:
Wavelet based image decomposition by variational functionals,
Januar 2004.

04–03. N. Guglielmi, F. Wirth, M. Zennaro:
Complex polytope extremality results for families of matrices,
März 2004.

04–04. I. Daubechies, G. Teschke:
Variational image restoration by means of wavelets: simultaneous decomposition, deblurring and denoising,
April 2004.

04–05. V.L. Kharitonov, E. Plischke:
Lyapunov matrices for time-delay systems,
April 2004.

04–06. Ronny Ramlau:
On the use of fixed point iterations for the regularization of nonlinear ill-posed problems,
Juni 2004.

04–07. Christof Büskens, Matthias Knauer:
Higher Order Real-Time Approximations In Optimal Control of Multibody-Systems For Industrial Robots,
August 2004.

04–08. Christof Büskens, Roland Griesse:
Computational Parametric Sensitivity Analysis of Perturbed PDE Optimal Control Problems with State and Control Constraints,
August 2004.

04–09. Christof Büskens:
Higher Order Real-Time Approximations of Perturbed Control Constrainted PDE Optimal Control Problems ,
August 2004.

04–10. Christof Büskens, Matthias Gerdts:
Differentiability of Consistency Functions,
August 2004.

04–11. Robert Baier, Christof Büskens, Ilyes Aïssa Chama, Matthias Gerdts:
Approximation of Reachable Sets by Direct Solution Methods of Optimal Control Problems,
August 2004.

04–12. J. Soares, G. Teschke, M. Zhariy:
A Wavelet Regularization for Nonlinear Diffusion Equations,
September 2004.

05–01. Alfred Schmidt, Adrian Muntean, Michael Böhm:
Numerical experiments with Self-Adaptive Finite Element Simulations in 2D for the Carbonation of Concrete,
April 2005.

05–02. Sebastian A. Meier, Malte A. Peter, Adrian Muntean, Michael Böhm:
Modelling and simulation of concrete carbonation with internal layers,
April 2005.

05–03. Malte A. Peter, Adrian Muntean, Sebastian A. Meier, Michael Böhm:
Modelling and simulation of concrete carbonation: competition of several carbonation reactions,
April 2005.

05–04. Adrian Muntean, Sebastian A. Meier, Malte A. Peter, Michael Böhm, Jörg Kropp:
A note on limitations of the use of accelerated concrete-carbonation tests for service-life predictions,
April 2005.

05–05. Sergey Dashkovskiy, Björn S. Rüffer, Fabian R. Wirth:
An ISS Small-Gain Theorem for General Networks,
Juni 2005.

06–01. Prof. Dr. Christof Büskens, Peter Lasch:
Suboptimal Improvement of the classical Riccati Controller,
März 2006.

06–02. Michael Wolff, Michael Böhm:
Transformation-induced plasticity in steel - general modelling, analysis and parameter identification,
April 2006.

06–03. Adrian Muntean, Michael Böhm:
A sharp-interface moving-boundary system modeling carbonation penetration in concrete,
April 2006.

06–04. Michael Wolff, Michael Böhm,Sebastian Meier:
Modellierung der Wechselwirkung von Kohlenstoff-Diffusion und ferritischen Phasenumwandlungen für einen untereutektoiden unlegierten Stahl,
Mai 2006.