Zentrum für Technomathematik
Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

Vergleichende Bewertung von makroskopischen Modellen für die austenitisch–perlitische Phasenumwandlung im Stahl 100Cr6

Michael Wolff
Sören Boettcher
Michael Böhm
Inga Loresch

Report 07–03

Berichte aus der Technomathematik

Report 07–03 Juli 2007

Vergleichende Bewertung von makroskopischen Modellen für die austenitisch–perlitische Phasenumwandlung im Stahl 100Cr6

M. Wolff[1], S. Boettcher[1], M. Böhm[1], I. Loresch[2]

[1] Zentrum für Technomathematik, Fachbereich 3, Universität Bremen
[2] Stiftung Institut für Werkstofftechnik (IWT) Bremen

Zusammenfassung

Phasenumwandlungen im Zuge von Wärmebehandlungen sind ein wichtiges Phänomen im Materialverhalten von Stahl. Zusammen mit dem thermischen und dem mechanischen Verhalten spielen diese eine wesentliche Rolle bei der Untersuchung des Verzugsverhaltens von Stahlbauteilen. Daher ist die Untersuchung der Phasenumwandlungen zur Beherrschung dieser Verzugsursachen von besonderem Interesse.

Die vorgelegte Arbeit hat das Ziel, die Anwendbarkeit einiger makroskopischer Modelle sowohl für die isotherme als auch für die nicht–isotherme Umwandlung des Austenits in den Perlit beim Stahl 100Cr6 anhand von Messdaten zu testen und vergleichend zu bewerten.

Abstract

Phase transformations in context of heat treatment are an important phenomenon in the material behaviour of steel. Those play an important role together with the thermal and the mechanical behaviour during the analysis of the distortion behaviour of steelwork. Therefore the analysis of phase transformations in order to control the causes of distortion is of particular interest.

The aim of this work is to check and to evaluate the practicability of some macroscopic models of the isothermal and non–isothermal transformation from austenite to pearlite in the steel 100Cr6 on the basis of measured data.

Schlüsselworte

Phasenumwandlungen, Umwandlungsmodelle, Bewerten von Modellen

Danksagung

Diese Arbeit entstand mit teilweiser Unterstützung der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen des Sonderforschungsbereichs (SFB) 570 „Distortion Engineering“ an der Universität Bremen. Die Dilatometerversuche und metallographischen Untersuchungen wurden an der Stiftung Institut für Werkstofftechnik (IWT) in Bremen durchgeführt.

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung

Phasenumwandlungen (PU) im Stahl im Verlauf von Wärmebehandlungen sind ein wichtiges, das Materialverhalten wesentlich beeinflussendes Phänomen. Zusammen mit dem thermischen und mechanischen Verhalten spielen diese eine wesentliche Rolle bei der Untersuchung des Verzugsverhaltens von Stahlbauteilen. Daher ist die Kenntnis geeigneter PU–Modelle von besonderem Interesse.
Es ist bekannt, dass die Johnson–Mehl–Avrami–Gleichung (JMAG) im Falle isothermer Umwandlungen in vielen Fällen – wie auch durch die nachfolgenden Untersuchungen bestätigt wird – zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Eine andere Situation liegt jedoch für die nicht–isotherme diffusionsgesteuerte Umwandlung (z.B. des Austenits in die ferritischen Phasen) vor. Daher gibt es eine Reihe von Ansätzen, die die Johnson–Mehl–Avrami–Differentialgleichung (JMA–DG) modifizieren, sowie andersartige Ansätze, um nicht–isotherme PU zu modellieren (für Experimente und Untersuchungen vgl. z.B. [Böh04], [Cah56], [Dac03], [Den92, 99], [Fer85], [Hou86], [Hun99], [Lar95], [Leb84, 85], [Lem01], [Mit92, 02], [Rét87, 97, 99, 01, 04]). Für Experimente und Modellierung im Zusammenhang mit der Austenitbildung sei z.B. auf [Cab01], [Fon96], [Gar98], [Mio04], [Sur04] verwiesen. Zu Phasenumwandlungen im Stahl aus Sicht der Werkstoffkunde verweisen wir auf [Ber06], [Ble01], [Bur65], [Chr75], [Dah93], [Hor92], [Koh94], [Koi59],

[Ros72], [Sei99], aus Sicht allgemeinerer makroskopischer Modellierung auf [Böh04], [Fas96], [For00], [Höm95, 97], [Leb84, 85], [Lem01], [Mit92, 02], [Rét98, 99, 01, 04], [Ver87], [Vis87], [Wol07c] und aus Sicht der mesoskopischen Modellierung exemplarisch auf [Joh39], [Dac04c], [Fis03].
Im Allgemeinen sind PU von den wirkenden Spannungen und einer möglichen Vor–Verfestigung des Austenits abhängig (vgl. z.B. [Ahr00, 02, 03], [Dal04], [Den97], [Ino85, 89], [Shi04], [Wol03d, 05a, 06c, 06i]). Im Interesse der Übersicht beschränken wir uns in dieser Arbeit auf spannungsfreie diffusionsgesteuerte Umwandlungen. Zur Bewertung von Modellen der martensitischen Umwandlung des 100Cr6 sei auf [Wol07b] für spannungsfreie Umwandlung sowie auf [Wol06i] für Umwandlungen unter Spannungen verwiesen. Zu bemerken ist, dass bei PU unter Spannungen das wichtige Phänomen der Umwandlungsplastizität auftritt (vgl. z.B. [Ahr00, 03], [Bes93], [Dal06], [Fis96, 00], [Leb86a, 86b, 89a, 89b], [Lem01], [Nag01], [Obe99], [Pie00], [Ron00], [Sjö85, 94], [Tal06], [Tan03], [Vid94], [Wol03a, 03b, 03d, 04, 05a, 06a, 06e, 06f, 07a] und die dortigen Verweise).
Um das komplexe Materialverhalten von Stahl zu modellieren und für gegebene Situationen und Werkstücke auch numerisch zu simulieren, ist es nötig, die Modelle für die PU in die entsprechenden Modelle des Gesamtverhaltens einzubinden. Hierzu sei ebenfalls auf die umfangreiche Literatur hingewiesen, so z.B. auf [Ber99], [Bes93], [Dac04a, 04b, 05], [Den02], [Ino82, 85, 89], [Pie00], [Ron00], [Sjö85, 94], [Wol03a, 03b, 05b, 06b, 06d, 06g, 06h] verwiesen. Zu den stärker mathematisch orientierten Arbeiten zählen z.B. [Boe07], [Fuh99], [Höm96, 04, 06], [Hüß07], [Sch03, 06], [Suh05].
Diese Arbeit verfolgt das Ziel, eine Reihe von Modellansätzen für nicht–isotherme sowohl „langsame“ als auch „schnelle“ diffusionsgesteuerte Umwandlungen anhand von Dilatometerversuchen für den Stahl 100Cr6 vergleichend zu bewerten. Dabei besteht das entsprechende Gütekriterium im Wesentlichen im Vergleich von berechneten und (indirekt) gemessenen Phasenanteilen. Wir erhalten dabei eine Rangfolge der Güte der verwendeten PU–Modelle.

2 Grundlagen

Der Wälzlagerstahl 100Cr6 wird im SFB 570 „Distortion Engineering“ an der Universität Bremen und dem IWT Bremen intensiv untersucht.
Wir betrachten in dieser Arbeit konkret die vollständige PU des Austenits in den Perlit für den Stahl 100Cr6 bei isothermer und nicht–isothermer Umwandlung. In dieser Arbeit werden – wie schon erwähnt – nur spannungsfreie PU betrachtet.
Das Ziel ist es, anhand von Formeln die Phasenanteile des Perlits aus den Dilatometerdaten zu berechnen und dann im Folgenden anhand dieser so erhaltenen Phasenevolution verschiedene makroskopische Modelle für die PU im Stahl zu testen und miteinander zu vergleichen. Die Messdaten, die vom IWT Bremen zur Verfügung gestellt wurden, bestehen aus Zeitreihen für die Länge und die zugehörige Temperatur der Dilatometerprobe.

Bemerkung. *Im Dilatometerversuch wird die unbelastete Probe einer bekannten Temperaturführung unterworfen, wobei bei der Auswertung des Versuchs von einer homogenen Verteilung der Temperatur und der Phasen ausgegangen wird. Gemessen wird dabei die Länge der umwandelnden Stahlprobe, die, wie im Folgenden dargestellt, Rückschlüsse auf die aktuelle Phasenzusammensetzung erlaubt.*

2.1 Allgemeine Umwandlung

Aus den Zusammenhängen zwischen der Probenlänge und –dichte sowie aus der Mischungsregel für die Dichten und die reziproken Dichten erhalten wir Relationen, um die Phasenanteile aus den Messdaten zu bestimmen.

Bemerkung. *Wir betrachten den Stahl als koexistierende Mischung seiner Phasen. Im Folgenden behandeln wir hier nur die PU von einer existierenden ersten Phase zu einer sich bildenden zweiten Phase, ohne dass eine weitere Phase auftritt. Dabei entspricht die erste Phase oder Mutterphase dem Austenit und die zweite Phase oder Tochterphase bezeichnet den Perlit. Ebenso beschränken wir uns hier auf vollständige Umwandlungen, d.h. nach Ablauf einer hinreichend großen Zeit wird der Austenit vollständig in Perlit umgewandelt. Ferner seien die Phasendichten für die gleiche Temperatur paarweise verschieden.*

Aufgrund der angenommenen Homogenität und Isotropie gilt der folgende Zusammenhang zwischen der aktuellen Dichte ρ und der aktuellen Länge l:

$$\rho = \rho(\theta(t)) = \rho(\theta_0) \left(\frac{l(\theta_0)}{l(t)}\right)^3 , \tag{1}$$

wobei θ_0 eine fixierte Temperatur zum Zeitpunkt $t = 0$ (Referenztemperatur) und $\theta = \theta(t)$ die aktuelle Temperatur sind.
Für die Dichte und die reziproke Dichte gelten die folgenden linearen Mischungsregeln (für $t \geq 0$) (vgl. z.B. [Wol03c]):

$$\rho(\theta(t)) = \rho_1(\theta(t))p_1(t) + \rho_2(\theta(t))p_2(t) \tag{2}$$

$$\frac{1}{\rho(\theta(t))} = \frac{1}{\rho_1(\theta(t))}\chi_1(t) + \frac{1}{\rho_2(\theta(t))}\chi_2(t) \tag{3}$$

Dabei sind ρ, ρ_1, ρ_2 die Dichten des Phasengemisches, der ersten Phase und der zweiten Phase, während p_1 und p_2 die entsprechenden *Volumenanteile* (VA) sowie χ_1 und χ_2 die entsprechenden *Massenanteile* (MA) sind.
Außerdem gelten die Bilanzgleichungen (für $t \geq 0$):

$$\begin{gathered} p_1(t) + p_2(t) = 1\,,\ p_1,\, p_2 \geq 0 \\ \chi_1(t) + \chi_2(t) = 1\,,\ \chi_1,\, \chi_2 \geq 0 \end{gathered} \tag{4}$$

Aus der Kombination von Mischungsregel und Bilanzgleichung erhält man folgende Formeln für den VA und den MA der sich bildenden Phase für $t \in [0, T]$:

$$p_2(t) = \frac{\rho(\theta(t)) - \rho_1(\theta(t))}{\rho_2(\theta(t)) - \rho_1(\theta(t))} \tag{5}$$

$$\chi_2(t) = \frac{\rho_2(\theta(t))}{\rho(\theta(t))} \frac{\rho(\theta(t)) - \rho_1(\theta(t))}{\rho_2(\theta(t)) - \rho_1(\theta(t))} \tag{6}$$

Mithilfe der Gleichung (1) erhält man weitere Formeln für den VA und den MA für $t \in [0, T]$:

$$p_2(t) = \frac{\rho_1(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_2(\theta(t))} \left(1 - \frac{\rho(\theta_0)}{\rho_1(\theta(t))} \left(\frac{l(\theta_0)}{l(t)}\right)^3\right) \tag{7}$$

$$\chi_2(t) = \frac{\rho_2(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_2(\theta(t))} \left(\frac{\rho_1(\theta(t))}{\rho(\theta_0)} \left(\frac{l(t)}{l(\theta_0)}\right)^3 - 1\right) \tag{8}$$

Nimmt man eine lineare Mischungsregel für die thermische Ausdehnung an, so ergibt sich die folgende Proportionalitätsformel, der *Umwandlungsgrad* (UG) für $t \in [0, T]$:

$$p_{2UG}(t) = \frac{l(t) - l_1(t)}{l_2(t) - l_1(t)} \tag{9}$$

Dabei bezeichnen l_1 und l_2 die Länge der Probe, wenn diese *nur* aus der ersten Phase bzw. *nur* aus der zweiten Phase bestünde.

Bemerkung. *In [Wol03c] wurde gezeigt, dass infolge der geringen Dichteunterschiede der Phasen im Stahl (bei gleicher Temperatur) der relative Fehler zwischen MA und VA (also zwischen χ_2 und p_2) „klein" ist. Numerische Beispiele in [Wol03e, 07b] ergeben einen relativen Fehler von maximal 1–2%.*
In [Wol03c] wurde auch gezeigt, dass für isotherme vollständige Umwandlungen der UG p_{2UG} eine Näherung des MA χ_2 der sich bildenden Phase darstellt. Bei nicht–isothermer Umwandlung kann der relative Fehler zwischen UG und MA zu Beginn der Umwandlung recht groß werden. Im Mittel über die gesamte Umwandlung ist der Unterschied jedoch klein.

Die Dichte zur Referenztemperatur $\rho(\theta_0) = 7.798 \frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^3}$ wurde den Materialdaten des IWT Bremen entnommen.

2.2 Isotherme Umwandlung

Strenggenommen sind isotherme Umwandlungen eine Idealisierung. Wir verstehen eine Umwandlung als isotherm, wenn die Überführung der Probe auf die Haltetemperatur keinen Einfluss auf die nachfolgende Umwandlung hat. In der Praxis wird die Dilatometerprobe sehr schnell von der Austenitisierungstemperatur (in unserem Fall 850°C) auf die gewünschte Haltetemperatur θ_0 heruntergekühlt und diese dann konstant gehalten. Wir setzen daher $\theta(t) = \theta_0$ für $t \geq 0$. Ferner sei $t = 0$ so gewählt, dass nur die erste Phase vorhanden ist, d.h. es gilt:

$$\rho(\theta_0) = \rho_1(\theta_0) \quad \text{mit} \quad \theta(0) = \theta_0. \tag{10}$$

Dann erhalten wir aus den Gleichungen (7) und (8) folgende Vereinfachung für $t \geq 0$:

$$p_2(t) = \frac{\rho_1(\theta_0)}{\rho_1(\theta_0) - \rho_2(\theta_0)} \left(1 - \left(\frac{l(\theta_0)}{l(t)}\right)^3\right) \tag{11}$$

$$\chi_2(t) = \frac{\rho_2(\theta_0)}{\rho_1(\theta_0) - \rho_2(\theta_0)} \left(\left(\frac{l(t)}{l(\theta_0)}\right)^3 - 1\right) \tag{12}$$

Diese Gleichung gilt ebenfalls, wenn nur die zweite Phase vorliegt, d.h. für $t = T$, wobei T hinreichend groß sei, so dass die Umwandlung als abgeschlossen gelten kann. Daher folgt für $t \in [0, T]$:

$$p_2(t) = \left(1 - \left(\frac{l(\theta_0)}{l(t)}\right)^3\right) \left(1 - \left(\frac{l(\theta_0)}{l(T)}\right)^3\right)^{-1} \tag{13}$$

$$\chi_2(t) = \left(\left(\frac{l(t)}{l(\theta_0)}\right)^3 - 1\right) \left(\left(\frac{l(T)}{l(\theta_0)}\right)^3 - 1\right)^{-1} \tag{14}$$

Eine Linearisierung ergibt die folgende Näherungsformel, den UG für $t \in [0, T]$:

$$p_{2UG}(t) = \frac{l(t) - l(\theta_0)}{l(T) - l(\theta_0)} \tag{15}$$

Bemerkung. *Im Folgenden wird der Phasenanteil aus den Daten mithilfe des UG berechnet. Wir setzen also näherungsweise* $p_2 = \chi_2 = p_{2UG}$. *Unter der Voraussetzung* $\rho_1(\theta) > \rho_2(\theta)$ *für alle relevanten* θ *folgt ferner* $0 \leq p_{2UG}(t) \leq 1$ *für* $t \geq 0$.

3 Zweiphasenmodelle

In dieser Arbeit betrachten wir Modelle, denen die JMAG zu Grunde liegt, da die vorliegenden Umwandlungen bei *konstanter* Temperatur fast immer in guter Übereinstimmung mit den Experimenten durch die JMAG beschrieben werden. Ein anderer verallgemeinerter Ansatz stellt eine Differentialgleichung mit mehreren Parameterfunktionen dar (s. Kap. 3.1). Die JMAG lautet (vgl. z.B. [Bur65], [Chr75], [Joh39], [Lem01]):

$$p(t) \;=\; \bar{p}\left(1 - \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n}\right)\right) \tag{16}$$

Dabei ist $p(t)$ der zum Zeitpunkt t gebildete Phasenanteil des Perlits, n, τ und $\bar{p}$ sind positive Materialparameter. Der Parameter n beschreibt die Wachstumsgeschwindigkeit des Perlits und τ ist die Verzögerungszeit, d.h. die Zeit, nach deren Ablauf sich 63.2% von maximal möglichen Perlit $\bar{p}$ gebildet haben. Die Parameter n und τ hängen u.a. von der Keimbildungsrate und der Wachstumsgeschwindigkeit der Perlitkeime ab (vgl. z.B. [Bur65]).
Der Parameter $\bar{p}$ mit $0 < \bar{p} \leq 1$ beschreibt den Gleichgewichtsanteil des Perlits. Da wir nur den Fall der vollständigen Umwandlung betrachten, d.h. nach hinreichend großer Zeit liegt kein Austenit mehr vor, ist $\bar{p}$ immer gleich eins zu setzen.

Weitere Ansätze für diffusionsgesteuerte PU, die z.B. die Scheil–Regel benutzen, werden von uns nicht betrachtet (vgl. z.B. [Cah56], [Rét99, 04], [Böh03]).

3.1 Getestete Zweiphasenmodelle

Wir betrachten die Austenit–Perlit–Umwandlung und nehmen vorerst an, dass die gegebene Temperatur $\theta = \theta(t)$ für $t \in [0, T]$ sich nur in dem Bereich ändert, in dem diese Situation gegeben ist. Unter der Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Materialparameter, werden die nachfolgenden Modelle getestet.
Zu den Modellen 1, 2, 4 – 11 finden sich in der Übersichtsarbeit [Böh03] ausführliche Diskussionen. Für die nicht–isothermen Umwandlungen ist die Kenntnis der Parameter als Funktion der Temperatur erforderlich. Dazu werden die durch Anpassung an isotherme Umwandlungen gewonnenen Werte geeignet interpoliert.

1. **Johnson–Mehl–Avrami–Gleichung (JMAG)**

   $$p(t) \;=\; 1 - \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau(\theta)}\right)^{n(\theta)}\right) \tag{17}$$

   mit den beiden Parametern $n \geq 1$ und $\tau > 0$.

2. **Leblond–Devaux–Gleichung (LDG)**
   Als Spezialfall der Gleichung (17) ergibt sich für $n = 1$ (vgl. [Leb84, 85]):

   $$p(t) \;=\; 1 - \exp\left(-\left(\frac{t}{\mu(\theta)}\right)\right) \tag{18}$$

   mit dem Parameter $\mu > 0$.

3. **Phänomenologisches Mehrparameter–Modell (ODE1)**
Ausgehend von der Erkenntnis, dass die JMA–DG die nicht–isothermen diffusionsgesteuerten Umwandlungen oft nur ungenügend genau beschreibt, wurde von einigen Autoren (vgl. z.B. [Höm04, 06]) ein allgemeines phänomenologisches Modell in Form einer Differentialgleichung vorgeschlagen. Dieses Modell verallgemeinert den Ansatz von Leblond–Devaux (vgl. z.B. [Leb84, 85]) und – nach Linearisierung des Logarithmus – auch die JMAG (vgl. [Wol07c] für ausführliche Diskussionen).
$$p'(t) = (e(\theta) + p(t))^{r(\theta)}(1 - p(t))^{s(\theta)}g(\theta) \tag{19}$$
$$p(0) = 0 \tag{20}$$
mit den vier Parametern $e \geq 10^{-7}$, $r \geq 0$, $s \geq 1$ und $g \geq 0$.
Durch die Restriktion $e \geq 10^{-7}$ ist die Einzigkeit der Lösung von (19), (20) gesichert.

4. **Nichtautonome Johnson–Mehl–Avrami–Differentialgleichung (JMA–DG)**
Die JMA–DG sowie die unter 5., 7. und 8. aufgeführten Differentialgleichungen werden aus der JMAG erhalten, indem diese für eine angenommene *konstante* Umwandlungstemperatur umgeformt (z.B. differenziert oder als Integral geschrieben) wird. Danach werden die erhaltenen Gleichungen für variable Temperaturen verwendet. In diesem Fall sind sie natürlich *nicht* mehr äquivalent und stellen somit unterschiedliche Modelle dar (vgl. [Rét97], [Böh03]).
Wird die Gleichung (17) bei konstanter Temperatur θ nach der Zeit t abgeleitet, so erhält man eine Differentialgleichung, die mithilfe der Lösung (17) auf die folgende lineare Differentialgleichung führt:
$$p'(t) = (1 - p(t))n(\theta)\tau(\theta)^{-\frac{n(\theta)}{q(\theta)}} t^{\frac{n(\theta)-q(\theta)}{q(\theta)}} \big[- \ln(1 - p(t))\big]^{1-\frac{1}{q(\theta)}} \tag{21}$$
$$p(0) = 10^{-7} \tag{22}$$
mit $n \geq q > 1$ und $\tau > 0$. Diese Gleichung wird in der Folge mit den Parameterwerten $q = \frac{n}{2}$ und $q = 1$ ausgewertet. Wir bezeichnen den Fall $q = \frac{n}{2}$ mit JMA–DG2 und den Fall $q = 1$ mit JMA–DG3. Der Fall $q = n$ führt auf die autonome JMA–DG unter 5.
Die Differentialgleichung (21) mit der Anfangsbedingung $p(0) = 0$ sowie die folgenden Anfangswertaufgaben besitzen für $n \geq q > 1$ neben der (nicht–trivialen) Lösung (17) auch die triviale Lösung $p(t) = 0$ für alle t, die auch bei numerischen Verfahren erhalten wird. Allerdings entspricht diese Lösung keinem realen Phasenumwandlungsprozess. Daher wird für die Gleichung (21) bei praktischen Anwendungen statt der Anfangsbedingung $p(0) = 0$ der von null verschiedene Anfangswert (22) verwendet. Dann sind die Anfangswertaufgabe (21), (22) sowie alle Folgenden eindeutig lösbar.

5. **Autonome Johnson–Mehl–Avrami–Differentialgleichung (JMA–DG1)**
Für die Wahl $q = n$ erhält man aus (21) die folgende autonome Differentialgleichung, in der die Zeit t nicht mehr explizit vorkommt.Obwohl t natürlich noch mittelbar über $\theta = \theta(t)$ auftritt, behalten wir trotzdem den Begriff „autonome JMA–DG“ bei.
Somit ist diese Gleichung invariant gegenüber einer Verschiebung des Anfangszeitpunktes.
$$p'(t) = \big(1 - p(t)\big)\frac{n(\theta)}{\tau(\theta)}\big[- \ln(1 - p(t))\big]^{1-\frac{1}{n(\theta)}} \tag{23}$$
$$p(0) = 10^{-7} \tag{24}$$

mit $n \geq 1$ und $\tau > 0$.

6. **Autonome Leblond–Devaux–Differentialgleichung (LD–DG1)**
Für die Wahl $n = 1$ erhält man aus (23) die folgende autonome Differentialgleichung:

$$p'(t) = \frac{1 - p(t)}{\mu(\theta)} \tag{25}$$
$$p(0) = 0 \tag{26}$$

mit $\mu > 0$. Dieses einfache Modell wurde 1984 von Leblond und Devaux vorgeschlagen, um nicht–isotherme diffusionsgesteuerte und auch martensitische Umwandlungen (vgl. [Leb84, 85]) zu beschreiben. Für isotherme Umwandlungen ist es der JMAG allerdings deutlich unterlegen.

Der Anfangswert (26) ist zulässig, da für die lineare Differentialgleichung (25) im Gegensatz zur Gleichung (21) die eindeutige Existenz einer Lösung gesichert ist.

7. **Differentialgleichung mit Integralterm 2 (IDG2)**
Die beiden folgenden Modellen berücksichtigen den gesamten früheren Temperaturverlauf.
Für konstante Materialparameter lässt sich die Gleichung (17) geeignet umschreiben und durch Ableiten nach t erhält man die folgende Gleichung (vgl. 4. sowie [Böh03]):

$$p'(t) = \int_0^t f(\theta)(t-s)^{n(\theta)-2}\,\mathrm{d}s\ \exp\left(-\int_0^t \frac{n(\theta)}{\tau(\theta)^{n(\theta)}}(t-s)^{n(\theta)-1}\,\mathrm{d}s\right) \tag{27}$$
$$f(\theta) := \frac{n(\theta)(n(\theta)-1)}{\tau(\theta)^{n(\theta)}} \tag{28}$$
$$p(0) = 10^{-7} \tag{29}$$

mit $n \geq 2$ und $\tau > 0$. Nach der Umformung von Gleichung (17) können wir wieder eine Temperaturabhängigkeit der Materialparameter annehmen, wie in Gleichung (27) dargestellt. Den Fall $n = 4$ bezeichnen wir mit IDG24.

8. **Differentialgleichung mit Integralterm 1 (IDG1)**
Unter Benutzung der Gleichung (17) folgt aus der Gleichung (27):

$$p'(t) = (1 - p(t)) \int_0^t \frac{n(\theta)(n(\theta)-1)}{\tau^{n(\theta)}}(t-s)^{n(\theta)-2}\,\mathrm{d}s \tag{30}$$
$$p(0) = 10^{-7} \tag{31}$$

mit $n \geq 2$ und $\tau > 0$. Den Fall $n = 4$ bezeichnen wir mit IDG14.

9. **Hougardy/Yamazaki (HOU)**
Ausgehend von der Gleichung (17) haben Hougardy und Yamazaki (vgl. [Hou86]) ein Modell vorgeschlagen, das den realen Abkühlungsverlauf näherungsweise durch stückweise konstante Temperaturstufen beschreibt. Auf jedem dieser isothermen Abschnitte wird die JMAG unter Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Parameter n und τ angewandt.
Das Zeitintervall $[0, T]$ wird in endlich viele Teilintervalle $[t_{i-1}, t_i]$ mit $i = 1, \ldots, N$, $N \in \mathbb{N}$, $t_0 < t_1 < \cdots < t_N$ zerlegt.

Sei p_{i-1} für $i = 1, \ldots, N$ bekannt. Es wird eine fiktive Zeit s_i berechnet, die benötigt würde, um mit dem (konstanten) Wert $\theta(t_i)$ den Phasenanteil p_{i-1} zu bilden. Dann wird der Anteil p_i mit der korrigierten Zeit s_i via Gleichung (17) berechnet. Der Iterationszyklus lautet somit:

```
FOR i = 1,...,N
    IF (p(i-1) < 1)
       s(i) = tau(i)*(-log(1-p(i-1)))^(1/n(i));
       p(i) = 1-exp(-tau(i)^(-n(i))*(s(i)+(t(i)-t(i-1)))^n(i));
    ELSE
       p(i) = p(i-1);
    END
END
```

10. **Denis et al. (DEN)**
Wir betrachten folgenden Iterationszyklus (vgl. [Fer85], [Den92]), der eine sogenannte Inkubationszeit berücksichtigt (vgl. [Böh03]):

```
z(0) = 0;
FOR i = 1,...,N
    IF (z(i) < 1)
        s(i) = tau(i)*(-log(0.99)^(1/n(i));
        z(i) = z(i-1)+(t(i)-t(i-1))/s(i);
        p(i) = 0.01;
    END
    IF (s(i) >= 1)
        IF (p(i-1) < 1)
            s(i) = tau(i)*(-log(1-p(i-1)))^(1/n(i));
            p(i) = 1-exp(-tau(i)^(-n(i))*(s(i)+(t(i)-t(i-1)))^n(i));
        ELSE
            p(i) = p(i-1);
        END
    END
END
```

11. **Berücksichtigung einer gemittelten Temperatur (JMA–DG4)**
Das folgende Modell wurde in [Böh03] vorgeschlagen, in [Dac03] finden sich erste Rechnungen. In der Gleichung (23) wird anstelle der aktuellen Temperatur θ eine geeignet gemittelte Temperatur $\hat{\theta}$ verwendet, womit die Geschichte der Temperatur berücksichtigt wird. Zu jedem gegebenen Temperaturverlauf kann ein gewichtetes Mittel berechnet werden. Dabei sei $t = 0$ der Zeitpunkt, ab dem die Perlit–Starttemperatur unterschritten wird.

$$p'(t) = \big(1 - p(t)\big)\frac{n(\hat{\theta})}{\tau(\hat{\theta})}\big[-\ln(1-p(t))\big]^{1-\frac{1}{n(\hat{\theta})}} \tag{32}$$

$$p(0) = 10^{-7} \tag{33}$$

mit

$$\hat{\theta}(t) := \begin{cases} \alpha\big(1-\exp(-\alpha t)\big)^{-1}\int_0^t \theta(s)e^{-\alpha(t-s)}\,\mathrm{d}s & \text{für} \quad t > 0 \\ \theta(0) & \text{für} \quad t = 0 \end{cases} \tag{34}$$

Dabei ist $\alpha = 0.713\frac{1}{\mathrm{s}}$ ein positiver Abklingparameter, der aus der Arbeit von [Dac03] übernommen wurde.

Für weitere Modelle zur Beschreibung von diffusionsgesteuerten Umwandlungen sei auf [Böh03] verwiesen.

Bekanntlich hat die Abkühlgeschwindigkeit, also θ', einen wesentlichen Einfluss auf die (diffusionsgesteuerten) PU. Um die Genauigkeit der Modelle zu verbessern, kann die Abhängigkeit von der Zeitableitung θ' der Temperatur berücksichtigt werden (vgl. z.B. [Böh03], [Hun99], [Lem01], [Sys03]).
Eine Möglichkeit dieser Modifikation besteht darin, die rechten Seiten der Gleichungen (19), (23) und (25) mit einem von θ' abhängigen Faktor $h(\theta')$ mit $h(0) = 1$ zu multiplizieren. Der Faktor h muss positiv sein, da eine kontinuierliche Abkühlung nicht die Richtung der Umwandlung ändert. In [Hun99] wird ein von θ und θ' abhängiger Faktor benutzt (vgl. auch [Böh03]).

12. **Modifiziertes phänomenologisches Mehrparameter–Modell (ODE2)**
Wir erweitern unseren Ansatz in (19) in folgender Weise:

$$\begin{aligned} p'(t) &= (e(\theta) + p(t))^{r(\theta)}(1 - p(t))^{s(\theta)} g(\theta) h(\theta') && (35) \\ p(0) &= 0 && (36) \end{aligned}$$

mit $e \geq 10^{-7}$, $r \geq 0$, $s \geq 1$, $g \geq 0$ und $h > 0$.

13. **Modifizierte Johnson–Mehl–Avrami–Differentialgleichung (JMA–DG5)**
Aus der Gleichung (23) erhält man mithilfe des Korrekturfaktors h die folgende autonome Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} p'(t) &= \big(1 - p(t)\big)\frac{n(\theta)}{\tau(\theta)}\big[-\ln(1 - p(t))\big]^{1-\frac{1}{n(\theta)}} h(\theta') && (37) \\ p(0) &= 10^{-7} && (38) \end{aligned}$$

mit $n \geq 1$, $\tau > 0$ und $h > 0$.

14. **Modifizierte Leblond–Devaux–Differentialgleichung (LD–DG2)**
Aus der Gleichung (25) erhält man mithilfe des Korrekturfaktors h die folgende lineare autonome Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} p'(t) &= \big(1 - p(t)\big)\frac{h(\theta')}{\mu(\theta)} && (39) \\ p(0) &= 0 && (40) \end{aligned}$$

mit $\mu > 0$ und $h > 0$.

Bemerkung. *Wir bemerken an dieser Stelle, dass die JMAG (17), mit variabler Temperatur θ betrachtet, zur Modellierung der nicht–isothermen Umwandlung vom Ansatz her nicht geeignet ist. Denn bei diesem Vorgehen würde die JMAG zu jedem Zeitpunkt t den Perlitanteil $p(t)$ angeben, der sich auch bei konstant angenommener Temperatur $\theta(t)$ nach der Zeit t gebildet hätte. Für einen nicht–isothermen Abkühlverlauf unterhalb der Perlit–Starttemperatur kann sich dann für den Perlitanteil eine nicht–monoton wachsende Funktion ergeben, was der Realität widerspricht (s. Abb. 1).*
Die LDG (18) ist zudem in vielen Fällen besonders zu Beginn der isothermen Umwandlung qualitativ falsch, da die Kurve einen von null verschiedenen Anstieg für $t = 0$ besitzt.

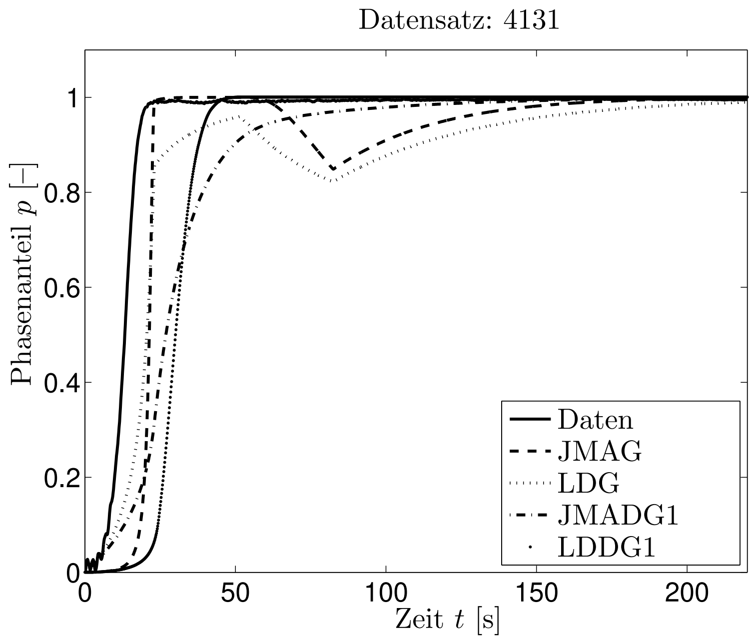

Abbildung 1: Unterschiede zwischen den algebraischen Gleichungen und den Differentialgleichungen von Johnson–Mehl–Avrami und Leblond–Devaux

4 Methodik der Datenauswertung

4.1 Entrauschen der Messdaten

Bei der Auswertung der Messdaten tritt das Problem auf, dass die Messdaten oft stark verrauscht sind. Daher ist die exakte Bestimmung des Umwandlungsbereichs und damit des UG nicht möglich.
Aufgrund dieser Tatsache werden die Daten (Länge und Temperatur) mit einem modifizierten Moving–Average–Filter mit der Filtermaske $\frac{1}{256}\,[1; 8; 28; 56; 70; 56; 28; 8; 1]$ geglättet. Die Messdaten werden unter der Voraussetzung, dass sich die gefilterten Daten im L^2–Sinn weniger als eine festgelegte Schranke von den Originaldaten unterscheiden, mehrfach gefiltert, bis die L^2–Abweichung zwischen zwei aufeinander folgenden gefilterten Daten hinreichend klein ist.

Bemerkung. *Eine Folge von Daten $\{x_1, \ldots, x_N\}$ wird in eine neue Folge transformiert, um die Daten zu analysieren. Das Ziel dieser Transformation ist es, lokale Schwankungen in den Messdaten zu glätten. Ein linearer Filter mit Gewichten $\{c_0, \ldots, c_{r-1}\}$ transformiert die gegebenen Daten zu gewichteten Mitteln $\sum_{j=0}^{r-1} c_j\, x_{t-j}$ $(t = r, \ldots, N)$. Für $\sum_{j=0}^{r-1} c_j = 1$ wird der lineare Filter r–term moving average genannt.*

4.2 Bestimmung des Umwandlungsbereichs

Bei der isothermen Umwandlung wird die Dilatometerprobe sehr schnell von der Austenitisierungstemperatur auf die Haltetemperatur abgekühlt. Theoretisch ist diese Abkühlung so schnell, dass noch keine PU stattgefunden hat. Daher wird der Bereich, in dem die Dilatometerprobe der Haltetemperatur ausgesetzt ist, als Umwandlungsbereich betrachtet.

Bei der nicht–isothermen Umwandlung betrachten wir zunächst das Längen–Temperatur–Diagramm der Dilatometerprobe. Vor Beginn der Umwandlung wird die Länge als Funktion der Temperatur für den Austenit, nach Beendigung der Umwandlung für den Perlit erhalten.
Die Austenitlänge l_A lässt sich im Bereich unterhalb der Austenitisierungstemperatur als Ausgleichsgerade in Abhängigkeit von der Temperatur darstellen. Die (über eine festgelegte Schranke) erste Abweichung dieser Ausgleichsgerade von der gemessenen Länge der Dilatometerprobe markiert den Beginn des Umwandlungsbereichs für die nicht–isotherme PU. Die Perlitlänge l_P lässt sich im Bereich oberhalb der Raumtemperatur als Ausgleichspolynom zweiten Grades in Abhängigkeit von der Temperatur darstellen. Die (über eine festgelegte Schranke) erste Abweichung dieses Ausgleichspolynoms von der gemessenen Länge der Dilatometerprobe markiert das Ende des Umwandlungsbereichs für die nicht–isotherme PU. Durch Extrapolation in dem für die Umwandlung relevanten Temperaturbereich werden die Funktionen l_A (lineare Regression) und l_P (quadratische Regression) erhalten. Entscheidend für die weiteren Rechnungen ist die Auswahl der Punkte, die für die Berechnung der Regressionskurven herangezogen werden (s. Abb. 2).

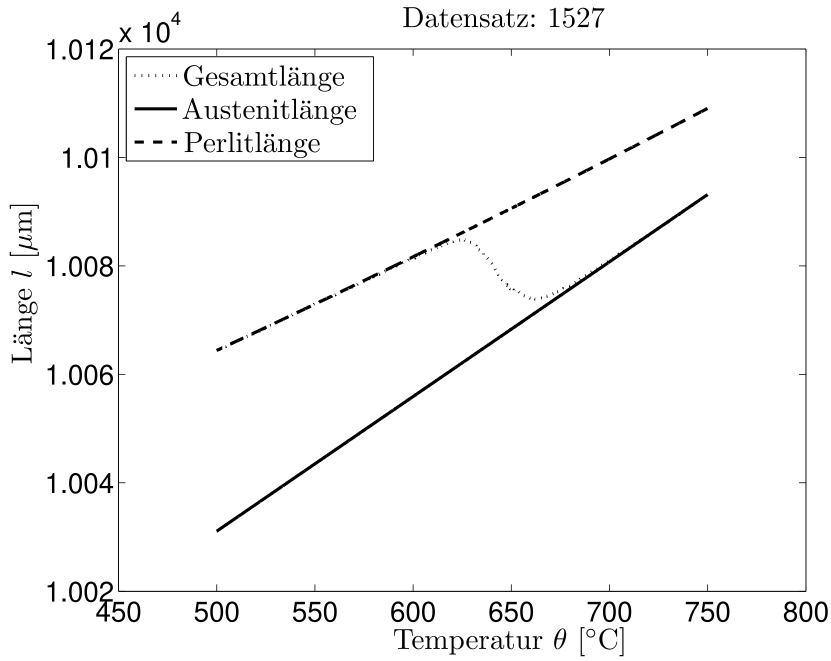

Abbildung 2: Zur Berechnung der Regressionskurven

4.3 Vergleich der Daten

Die Messdaten f lassen sich als diskret definierte Funktionen interpretieren, d.h. die Messpunkte f_i sind nur zu bestimmten Zeitpunkten t_i gegeben ($i = 1, \ldots, N$).
Zum Vergleich von zwei verschiedenen Datensätzen f und g im L^2–Sinn berechnen wir die L^2–Abweichung der Differenz der stückweise linear interpolierten Funktionen f und g, normiert auf die Länge des Zeitintervalls. Im Folgenden bezeichnen wir diesen Ausdruck

als “diskrete“ (zeitnormierte) L^2–Norm. Es gilt näherungsweise:

$$\begin{aligned} \|f-g\|_{L^2} &:= \frac{1}{\sqrt{t_N - t_1}} \|f-g\|_{L^2(]t_1,t_N[)} \\ &= \left(\sum_{i=2}^{N} \frac{t_i - t_{i-1}}{3\,(t_N - t_1)} \left(w_i^2 + w_i\, w_{i-1} + w_{i-1}^2 \right) \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{41}$$

wobei $w_i := f_i - g_i$ für $i = 2, \ldots, N$.

4.4 Testkriterium

Die Messdaten bestehen aus Zeitreihen der Länge l und der Temperatur θ der Dilatometerprobe. Aus diesen Daten lassen sich die Phasenanteile von Austenit und Perlit berechnen (vgl. Kap. 2). Wir bezeichnen den aus den Messdaten via UG berechneten Phasenanteil des Perlits mit p. Mithilfe der Modelle aus Kapitel 3.1 lässt sich unter der Voraussetzung der Kenntnis geeigneter Parameterwerte $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ der Phasenanteil des Perlits berechnen, den wir mit p_{cal} bezeichnen.
Zur Anpassung der Modellparameter an die Messdaten lösen wir folgendes Optimierungsproblem:

$$\|p - p_{cal}(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)\|_{L^2(]t_1,t_N[)} \to \min\,. \tag{42}$$

4.5 Gütekriterium

Als Ergebnisse werden die L^2–Abweichungen zwischen dem aus den Daten gewonnenen Phasenanteil und dem Phasenanteil mit den optimal angepassten Parametern präsentiert. Nun lässt sich aus dem berechneten Phasenanteil p mithilfe der Formel

$$l_{cal} = p_{cal}(l_T - l_0) + l_0 \tag{43}$$

für die isotherme Umwandlung bzw.

$$l_{cal} = p_{cal}(l_P - l_A) + l_A \tag{44}$$

für die nicht–isotherme Umwandlung (vgl. Kap. 2) die Länge l_{cal} neu berechnen. Daher werden ebenfalls die L^2–Abweichungen zwischen der aus den Daten erhaltenden Länge und der nach der Formel (43) bzw. (44) berechneten Länge präsentiert.
Als Gütekriterium der getesteten Modelle dient das arithmetische Mittel $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i$ der berechneten L^2–Abweichungen $x_1, \ldots, x_N$ der N verschiedenen Datensätze.

4.6 Testen der Modelle

Zunächst werden die Messdaten für die isotherme Umwandlung eingelesen. Anhand dieser Daten wird dann der Phasenanteil p via Kapitel 2.2 berechnet.
Für die Auswertung der Modelle, die auf der JMAG basieren, werden Startwerte $n_0 = 2$ und $\tau_0 = 18$ für die Parameter der JMAG gewählt und das Optimierungsproblem (42) mithilfe der *MATLAB*™–Funktion fmincon gelöst. Diese Funktion liefert die optimalen Parameter n und τ. Zusätzlich wählen wir $\mu_0 = 18$ als Startwert für den Parameter der LDG und lösen erneut das Optimierungsproblem (42), um den optimalen Parameter μ zu erhalten. Dabei beschreibt p_{cal} den Phasenanteil, der mithilfe des Modells JMAG bzw. LDG berechnet wird.

Die Funktion fmincon versucht, eine beschränkte vektorwertige Minimalstelle einer skalaren Funktion zu finden (vgl. [Ang05], [Mat07]). Der Medium–Scale–Algorithmus der Funktion fmincon benutzt das SQP–Verfahren der nichtlinearen Optimierung und liefert ein vom Startwert abhängiges, lokales Minimum. Es gilt die Einschränkung, dass sowohl die Zielfunktion als auch alle nichtlinearen Nebenbedingungen stetig sein müssen. Ferner muss ein gültiger Lösungsraum bestehen bleiben, d.h. die Nebenbedingungen dürfen sich nicht gegenseitig ausschliessen.
Die berechneten Werte n und τ dienen zur Festlegung der Startwerte für das phänomenologische Mehrparameter-Modell (19), wobei $e_0 = 10^{-7}$, $r_0 = 1 - \frac{1}{n}$, $s_0 = 1$ und $g_0 = \frac{n}{\tau}$ gelten. Mit diesen Startwerten wird das Optimierungsproblem (42) erneut mithilfe der *MATLAB*™–Funktion fmincon gelöst. Diese Funktion liefert die optimalen Parameter e, r, s und g. Dabei wird in jedem Optimierungsschritt die Lösung der Differentialgleichung (19) mithilfe der *MATLAB*™–Funktion ode23 berechnet.
Die Funktion ode23 realisiert ein explizites Runge–Kutta–Verfahren der Ordnung 2 mit automatischer Schrittweitensteuerung (vgl. [Ang05], [Mat07]).
Für die nicht–isotherme Umwandlung werden die optimalen Parameter n, τ und μ sowie e, r, s und g als Funktionen von der Umwandlungstemperatur aufgefasst und mithilfe der *MATLAB*™–Funktion interp1 (vgl. [Ang05], [Mat07]) zwischen der kleinsten und der größten diskreten Umwandlungstemperatur der isothermen Versuche stückweise linear interpoliert und bis zu den Grenzen des Umwandlungsbereichs (bei uns 550°C bis 734°C) konstant fortgesetzt. Somit werden die Parameter in Abhängigkeit von der Temperatur dargestellt und die Modelle aus Kapitel 3.1 mit den entsprechenden Parameterfunktionen getestet.
Bei der Auswertung der Modelle kommt ferner die *MATLAB*™–Funktion quad zur numerischen Integration zur Anwendung. Die Funktion quad basiert auf der Implementierung einer adaptiven Simpson–Regel (vgl. [Ang05], [Mat07]).
Die Optimierung des von der Zeitableitung der Temperatur abhängigen Parameters h stellt eine Erweiterung zum Vorigen auf nicht–isotherme Umwandlungen dar. Zunächst wird jeweils θ' für die lineare Abkühlung bestimmt. Ferner wird jeweils ein Startwert $h_0 = 1$ für den Parameter h der modifizierten JMA–DG, LD–DG und ODE gewählt und das Optimierungsproblem (42) gelöst. Somit erhält man für jedes lineare Abkühlszenario jeweils einen optimalen Parameter h. Mithilfe der stückweisen linearen Interpolation lässt sich der Parameter h als Funktion von der Zeitableitung der Temperatur auffassen. Damit können die modifizierten Modelle für die nicht–isotherme Umwandlung, insbesondere mit nicht–linearer Abkühlung, ausgewertet werden.

5 Ergebnisse der Datenauswertung

Folgende Datensätze für die Austenit–Perlit–Umwandlung im Stahl 100Cr6 wurden vom IWT Bremen für die Auswertung zur Verfügung gestellt:

Daten–satz	4230	4232	4233	4236
Θ [°C]	550	600	650	700
l_0 [mm]	9.99	9.98	9.985	9.98

Tabelle 1: Datensätze für die isotherme Austenit–Perlit–Umwandlung im Stahl 100Cr6 (Θ – Haltetemperatur, l_0 – Länge bei Referenztemperatur)

Daten–satz	1373	1374	1526	1527	1529	5794	5795	5796	5797
l_0 [mm]	9.97	9.97	10.00	10.00	10.01	10.02	10.02	10.02	10.025

Tabelle 2: Datensätze für die nicht–isotherme Austenit–Perlit–Umwandlung im Stahl 100Cr6 bei linearer Abkühlung (l_0 – Länge bei Referenztemperatur)

Daten–satz	1006	1008	1009	1014	1015	1018	4131	4132	4133	4219	4225	4226
l_0 [mm]	10.01	10.01	10.01	10.00	10.01	10.01	10.00	10.01	10.02	10.00	9.985	9.995

Tabelle 3: Datensätze für die nicht–isotherme Austenit–Perlit–Umwandlung im Stahl 100Cr6 bei exponentieller Abkühlung (l_0 – Länge bei Referenztemperatur)

Zur besseren Übersicht listen wir die von uns anhand der Messdaten getesteten Modelle nochmals auf:

Modell	Beschreibung	Gleichung
JMAG	Johnson–Mehl–Avrami–Gleichung	(17)
LDG	Leblond–Devaux–Gleichung	(18)
ODE1	Phänomenologisches Mehrparameter–Modell	(19)
HOU	Modell von Hougardy/Yamazaki	9.
DEN	Modell von Denis et al.	10.
JMADG1	autonome JMA–Differentialgleichung	(23)
LDDG1	autonome LD–Differentialgleichung	(25)
JMADG2	nicht–autonome JMA–DG mit $q = \frac{n}{2}$	(21)
JMADG3	nicht–autonome JMA–DG mit $q = 1$	(21)
IDG1	DG mit Integralterm 1	(30)
IDG14	DG mit Integralterm 1 mit $n = 4$	(30)
IDG2	DG mit Integralterm 2	(27)
IDG24	DG mit Integralterm 2 mit $n = 4$	(27)
JMADG4	JMA–DG mit gemittelter Temperatur	(32)
ODE2	modifizierte ODE1	(35)
JMADG5	modifizierte JMA–DG1	(37)
LDDG2	modifizierte LD–DG1	(39)

Tabelle 4: Liste der getesteten Modelle

5.1 Isotherme Umwandlung

Bei der Auswertung der isothermen Datensätze entfällt die Temperaturabhängigkeit der Materialparameter, da im für uns interessanten Bereich der Umwandlung die Temperatur konstant gehalten wird.

Für die getestete Datensätze ergaben sich mithilfe der in Kapitel 4.6 beschriebenden Optimierung folgende Parameterwerte für die Umwandlung von Austenit zu Perlit im Stahl 100Cr6:

Datensatz	Θ [°C]	τ	n	μ	e	r	s	g
4230	550	49.70	1.25	47.76	$0.34{\cdot}10^{-3}$	0.26	1.02	$2.90{\cdot}10^{-2}$
4232	600	16.91	2.22	16.05	$17.04{\cdot}10^{-3}$	0.83	1.00	$19.58{\cdot}10^{-2}$
4233	650	12.15	2.49	11.87	$1.97{\cdot}10^{-3}$	0.76	1.00	$29.59{\cdot}10^{-2}$
4236	700	218.18	1.85	203.67	$1000.00{\cdot}10^{-3}$	3.52	1.00	$0.17{\cdot}10^{-2}$

Tabelle 5: Parameterwerte der isothermen Umwandlung von Austenit zu Perlit (Θ – Umwandlungstemperatur)

Dabei beziehen sich die Parameter τ und n auf die autonome Johnson–Mehl–Avrami–Differentialgleichung (23), der Parameter μ auf den Ansatz von Leblond–Devaux (25) und die Parameter e, r, s, g auf das von uns vorgeschlagene phänomenologische Mehrparameter–Modell (19).

Der Vergleich zwischen den (via der vorgestellten Modelle) berechneten und den (indirekt) gemessenen Phasenanteilen liefert für die isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit im Stahl 100Cr6 folgende L^2–Abweichungen:

Modell	Datensatz 4230 $\cdot 10^{-3}$	4232 $\cdot 10^{-3}$	4233 $\cdot 10^{-3}$	4236 $\cdot 10^{-3}$	Mittel–wert $\cdot 10^{-3}$	Rang–folge
JMAG	6.29	3.69	2.28	58.18	17.61	2
LDG	26.92	124.22	147.68	110.44	102.31	13
ODE1	5.66	2.55	8.96	39.03	14.05	1
HOU	6.29	3.70	2.42	58.17	17.64	3
DEN	6.39	5.67	6.59	57.71	19.09	7
JMADG1	6.92	4.42	2.60	58.12	18.02	4
LDDG1	26.62	124.15	147.66	110.41	102.21	12
JMADG2	6.79	4.66	2.76	57.97	18.04	5
JMADG3	7.10	4.71	2.83	57.98	18.16	6
IDG1	49.07	4.71	2.83	59.21	28.96	9
IDG14	100.37	73.88	64.51	115.36	88.53	11
IDG2	48.28	3.66	2.28	59.39	28.40	8
IDG24	100.07	73.40	64.01	115.07	88.14	10
JMADG4	6.92	4.42	2.60	58.12	18.02	4

Tabelle 6: L^2–Abweichungen der Phasenanteile der isothermen Umwandlung von Austenit zu Perlit im Stahl 100Cr6

Der Vergleich zwischen den (via der vorgestellten Modelle) zurückgerechneten und den gemessenen Längen liefert für die isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit im Stahl 100Cr6 folgende L^2–Abweichungen:

Modell	Datensatz 4230 $\cdot 10^{-5}$	4232 $\cdot 10^{-5}$	4233 $\cdot 10^{-5}$	4236 $\cdot 10^{-5}$	Mittel–wert $\cdot 10^{-5}$	Rang–folge
JMAG	1.64	0.86	0.45	9.20	3.04	2
LDG	6.91	28.64	29.43	17.46	20.61	13
ODE1	1.46	0.58	1.79	6.17	2.50	1
HOU	1.64	0.87	0.48	9.20	3.05	3
DEN	1.66	1.33	1.31	9.12	3.36	7
JMADG1	1.82	1.04	0.52	9.19	3.14	4
LDDG1	6.83	28.62	29.43	17.45	20.58	12
JMADG2	1.78	1.09	0.55	9.16	3.15	5
JMADG3	1.86	1.11	0.56	9.17	3.17	6
IDG1	12.66	1.11	0.56	9.36	5.92	9
IDG14	25.85	17.05	12.86	18.24	18.50	11
IDG2	12.45	0.86	0.46	9.39	5.79	8
IDG24	25.78	16.94	12.76	18.19	18.42	10
JMADG4	1.82	1.04	0.52	9.19	3.14	4

Tabelle 7: L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der isothermen Umwandlung von Austenit zu Perlit im Stahl 100Cr6

Das vorgeschlagene phänomenologische Mehrparameter–Modell mit vier Parametern (19) und die JMAG (17) approximieren die isotherme Umwandlung am besten. Es folgen die Modelle von Hougardy/Yamazaki, die JMA–DG (23), die JMA–DG mit gemittelter Temperatur (32), die beiden übrigen Varianten der JMA–DG (21) und das Modell nach Denis et al. Deutlich schlechter schneiden die Modelle (27) und (30) ab, die Integralterme beinhalten. Wie zu erwarten, belegen die linearen Ansätze nach Leblond–Devaux bei isothermer Umwandlung den letzten Platz, da die LDG (18) einen von null verschiedenen Anstieg für $t = 0$ besitzt (vgl. Abb. 3). Die gleiche Einschätzung wird auch durch die zurückgerechneten Längen bestätigt.

Der Vergleich der Rechenzeiten der einzelnen Modelle liefert für die isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit im Stahl 100Cr6:

Modell	Datensatz 4230 $\cdot 10^{-1}$	4232 $\cdot 10^{-1}$	4233 $\cdot 10^{-1}$	4236 $\cdot 10^{-1}$	Mittel–wert $\cdot 10^{-1}$	Rang–folge
JMAG	2.34	0.30	0.18	0.36	0.80	7
LDG	1.12	0.15	0.09	0.19	0.39	2
ODE1	2.76	0.41	0.44	0.30	0.98	10
HOU	2.49	0.32	0.19	0.38	0.85	9
DEN	2.47	0.30	0.18	0.37	0.83	8
JMADG1	0.56	0.39	0.39	0.32	0.42	5
LDDG1	0.26	0.18	0.18	0.18	0.20	1
JMADG2	0.57	0.36	0.36	0.41	0.42	6
JMADG3	0.53	0.35	0.38	0.37	0.41	4
IDG1	2.19	9.01	8.02	1.18	5.10	13
IDG14	2.44	2.08	2.05	2.02	2.15	11
IDG2	3.41	14.36	12.80	2.10	8.17	14
IDG24	4.32	3.68	3.61	3.50	3.78	12
JMADG4	0.47	0.39	0.39	0.32	0.39	3

Tabelle 8: Rechenzeiten in Sekunden der einzelnen Modelle für die isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit im Stahl 100Cr6

Die linearen Ansätze von Leblond–Devaux benötigen aufgrund der einfachen Struktur die geringste Rechenzeit. Es folgenden die verschiedenen JMA–Modelle sowie das phänomenologische Mehrparameter–Modell (19), welches aufgrund der höheren Anzahl der Parameter rechenzeitintensiver ist. Wesentlich längere Rechenzeiten benötigen die Modelle mit Integralterm.

Im Weiteren illustieren wir exemplarisch anhand von ausgewählten Datensätzen und Modellen den Verlauf der Phasenanteile und den Verlauf der zurückgerechneten Längen für die isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit.

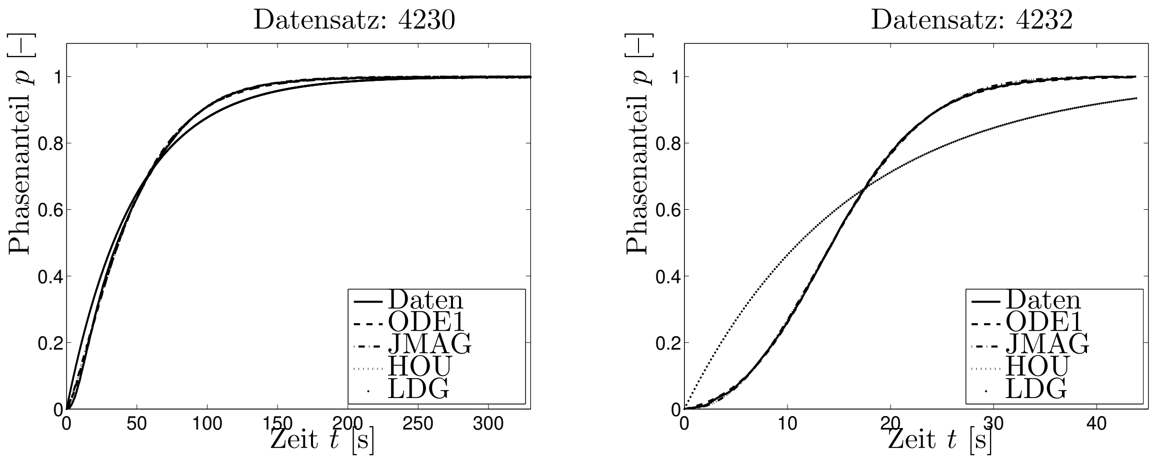

Abbildung 3: Phasenanteile der isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung

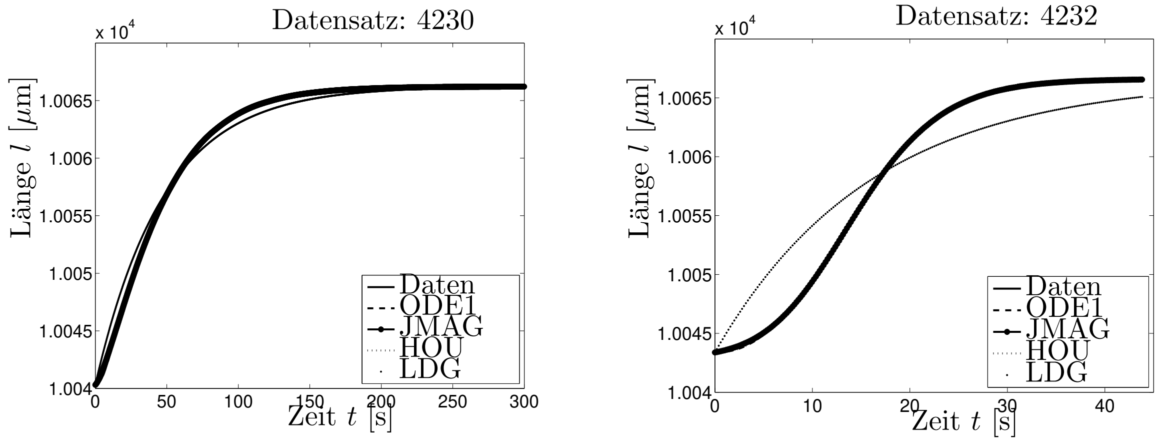

Abbildung 4: Zurückgerechnete Längen der isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung

5.2 Nicht–isotherme Umwandlung

Es wird im Folgenden nur der UG des Perlits betrachtet, da sich UG, VA und MA (siehe die Diskussion in Kapitel 2) nicht maßgeblich unterscheiden.

L^2-Abweichung	linear	exponentiell	gesamt
$\|p_{UG} - p_{VA}\|_{L^2}$	$2.45 \cdot 10^{-4}$	$2.04 \cdot 10^{-4}$	$2.25 \cdot 10^{-4}$
$\|p_{UG} - p_{MA}\|_{L^2}$	$1.22 \cdot 10^{-4}$	$1.02 \cdot 10^{-4}$	$1.12 \cdot 10^{-4}$
$\|p_{MA} - p_{VA}\|_{L^2}$	$3.67 \cdot 10^{-4}$	$3.07 \cdot 10^{-4}$	$3.37 \cdot 10^{-4}$

Tabelle 9: Unterschiede zwischen den Mittelwerten der L^2–Abweichungen der aus den Daten berechneten Größen UG, MA und VA für die nicht–isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit bei linearer und exponentieller Abkühlung

Bei der Auswertung der nicht–isothermen Datensätze musste die Temperaturabhängigkeit der Parameter berücksichtigt werden. Wir betrachten im Folgenden nur die lineare und die exponentielle Abkühlung.
Die optimalen Parameter der isothermen Datensätze (vgl. Tab. 5) werden als Funktion der Umwandlungstemperatur dargestellt, indem diese zwischen der kleinsten und der größten diskreten Umwandlungstemperatur der isothermen Versuche stückweise linear interpoliert und bis zu den Grenzen des Umwandlungsbereichs (bei uns 550°C bis 734°C) konstant fortgesetzt werden.

Die Optimierung des von der Zeitableitung der Temperatur abhängigen Parameters h der modifizierten JMA–DG, LD–DG und ODE stellt eine Erweiterung zum Vorigen dar. Für die getesteten Datensätze ergaben sich folgende Parameterwerte für die Umwandlung von Austenit zu Perlit im Stahl 100Cr6 bei linearer Abkühlung:

θ' [°C/s]	-8.00	-4.01	-2.67	-2.00	-1.60	-1.00	-0.80	-0.50	-0.17	0
$h_{JMA}(\theta')$	3.95	2.50	3.17	1.73	3.29	2.00	4.33	1.69	0.65	1.00
$h_{LD}(\theta')$	3.45	2.48	3.01	1.90	4.15	2.52	4.69	2.02	0.71	1.00
$h_{ODE}(\theta')$	1.00	0.75	0.87	0.37	1.00	0.40	0.68	0.50	0.24	1.00
Datensatz	1529	1527	1526	5794	1374	5795	1373	5796	5797	–

Tabelle 10: Parameterwerte für die nicht–isotherme Umwandlung von Austenit nach Perlit für die modifizierten Umwandlungsgleichungen (35), (37) und (39)

Um die Güte der einzelnen Modelle festzulegen, wird die L^2–Abweichung der Differenz zwischen den Werten der vorhandenen Daten und den ausgewerteten Modellen bestimmt.

Die Resultate entnehme man folgenden Tabellen, wobei wir die algebraischen Gleichungen von JMA und LD nicht weiter betrachten, da diese zur Modellierung der nicht–isothermen Umwandlung nicht geeignet sind (vgl. Kap. 3.1).

5.2.1 Lineare Abkühlung

Im Fall der linearen Abkühlung lässt sich die Zeitableitung der Temperatur aus dem Differenzenquotienten erster Ordnung unter Benutzung der Temperatur und des Zeitpunktes zu Beginn und nach Abschluss der Umwandlung berechnen.
Im Folgenden definieren wir eine *langsame* Abkühlung durch $|\theta'| \leq 1$ und eine *schnelle* Abkühlung durch $|\theta'| > 1$.
Der Vergleich zwischen den berechneten und den (indirekt) gemessenen Phasenanteilen liefert für die nicht–isotherme austenitisch–perlitische Umwandlung folgende L^2–Abweichungen:

Modell	Datensatz				Mittel–wert	Rang–folge
	1373	5795	5796	5797		
	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	
ODE1	17.33	6.37	5.17	9.24	9.05	4
HOU	12.73	2.14	4.28	10.44	14.33	9
DEN	4.75	11.39	9.56	10.50	14.32	8
JMADG1	22.99	13.97	11.93	8.41	14.37	10
LDDG1	22.98	13.97	11.89	8.42	12.17	5
JMADG2	23.05	14.04	12.00	8.41	12.67	7
JMADG3	18.39	10.14	9.70	10.44	12.41	6
IDG1	21.08	11.24	9.87	8.49	17.44	13
IDG14	20.78	10.75	9.63	8.48	21.23	14
IDG2	26.52	18.68	16.24	8.33	17.43	12
IDG24	30.49	22.99	22.54	8.90	21.25	15
JMADG4	26.52	18.67	16.18	8.35	14.68	11
ODE2	30.49	22.99	22.64	8.88	3.95	2
JMADG5	23.46	14.65	12.22	8.40	3.26	1
LDDG2	2.42	4.08	5.59	3.72	6.73	3

Tabelle 11: L^2–Abweichungen der Phasenanteile der nicht–isothermen austenitisch–perlitischen Umwandlung, *langsame lineare* Abkühlung

Modell	Datensatz					Mittel–wert	Rang–folge
	1374	1526	1527	1529	5794		
	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	
ODE1	10.21	17.04	22.63	65.14	10.66	18.99	4
HOU	7.15	18.90	22.66	57.60	9.38	24.99	10
DEN	10.61	5.84	9.75	54.70	14.07	25.09	12
JMADG1	19.40	17.78	18.37	60.28	9.12	25.08	11
LDDG1	19.43	17.91	18.68	60.27	9.15	19.57	5
JMADG2	19.46	17.84	18.43	60.32	9.34	20.74	7
JMADG3	15.95	14.93	18.17	42.40	6.42	19.93	6
IDG1	15.69	10.73	4.98	63.36	8.96	23.26	9
IDG14	15.04	9.21	3.54	62.51	9.36	25.64	15
IDG2	23.78	20.71	21.91	37.16	12.77	23.25	8
IDG24	26.54	23.39	24.86	38.21	15.22	25.64	14
JMADG4	23.78	20.71	21.92	37.10	12.77	25.62	13
ODE2	26.54	23.39	24.86	38.21	15.21	15.97	3
JMADG5	20.56	19.85	20.83	56.67	10.21	3.59	1
LDDG2	10.61	5.14	6.00	54.70	3.42	5.33	2

Tabelle 12: L^2–Abweichungen der Phasenanteile der nicht–isothermen austenitisch–perlitischen Umwandlung, *schnelle lineare* Abkühlung

Der Vergleich zwischen den zurückgerechneten und den gemessenen Längen liefert für die nicht–isotherme austenitisch–perlitische Umwandlung folgende L^2–Abweichungen:

Modell	Datensatz				Mittel–wert	Rang–folge
	1373	5795	5796	5797		
	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	
ODE1	3.61	1.43	1.16	2.00	1.96	4
HOU	2.69	0.52	0.99	2.23	3.19	9
DEN	0.85	2.59	2.11	2.28	3.19	8
JMADG1	4.90	3.29	2.76	1.82	3.20	10
LDDG1	4.90	3.29	2.75	1.82	2.74	6
JMADG2	4.91	3.30	2.78	1.82	2.79	7
JMADG3	3.97	2.44	2.29	2.25	2.73	5
IDG1	4.45	2.61	2.27	1.83	3.95	12
IDG14	4.38	2.49	2.21	1.83	4.83	14
IDG2	5.73	4.45	3.80	1.80	3.95	13
IDG24	6.63	5.50	5.28	1.91	4.85	15
JMADG4	5.73	4.46	3.80	1.81	3.28	11
ODE2	6.63	5.50	5.36	1.91	0.79	2
JMADG5	5.01	3.45	2.83	1.82	0.70	1
LDDG2	0.40	0.88	1.23	0.66	1.49	3

Tabelle 13: L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der nicht–isothermen austenitisch–perlitischen Umwandlung, *langsame lineare* Abkühlung

Modell	Datensatz					Mittel–wert	Rang–folge
	1374	1526	1527	1529	5794		
	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	
ODE1	2.27	5.56	7.28	18.18	2.64	4.70	4
HOU	1.90	6.21	7.52	16.41	2.63	6.31	12
DEN	2.12	1.13	2.12	14.95	3.20	6.34	14
JMADG1	4.28	3.87	4.58	16.73	2.09	6.34	13
LDDG1	4.28	3.90	4.67	16.73	2.10	5.24	8
JMADG2	4.29	3.88	4.60	16.74	2.17	5.33	9
JMADG3	3.61	3.74	5.26	11.95	1.63	5.12	5
IDG1	3.41	2.29	1.14	17.77	2.05	5.18	7
IDG14	3.26	1.96	0.78	17.46	2.15	5.57	11
IDG2	5.30	4.50	5.28	7.82	3.00	5.18	6
IDG24	5.93	5.07	5.98	7.30	3.59	5.57	10
JMADG4	5.30	4.50	5.28	7.80	3.00	6.40	15
ODE2	5.93	5.07	5.98	7.30	3.59	4.10	3
JMADG5	4.54	4.33	5.17	15.60	2.36	0.75	1
LDDG2	2.12	1.08	1.41	14.95	0.96	1.09	2

Tabelle 14: L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der nicht–isothermen austenitisch–perlitischen Umwandlung, *schnelle lineare* Abkühlung

Die drei Modelle, die die Abkühlgeschwindigkeit berücksichtigen, zeigen die beste Annäherung an die aus den Daten bestimmten Phasenanteile sowohl für die schnelle als auch für die langsame lineare Abkühlung. Die beste Annäherung zeigt die modifizierte JMA–DG (37), gefolgt von der modifizierten LD–DG (39) für die schnelle Abkühlung sowie von dem phänomenologischen Mehrparameter–Modell (35) für die langsame Abkühlung. Danach folgen das Mehrparameter–Modell (19) sowie die verschiedenen JMA–Modelle, wobei die durchschnittlichen Abweichungen in der gleichen Größenordnung liegen.
Bei den zurückgerechneten Längen ist die modifizierte JMA–DG am besten, gefolgt von der modifizierten von LD–DG für die schnelle Abkühlung sowie dem phänomenologischen Modell mit den fünf Parametern für die langsame Abkühlung. Die Abstände der

folgenden Modelle sind wesentlich geringer als bei den Phasenanteilen. Die Tendenz ist analog zu den Phasenanteilen, es ergibt sich jedoch eine leicht veränderte Reihenfolge.

Der Vergleich der Rechenzeiten der einzelnen Modelle liefert für die nicht–isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit:

Modell	Datensatz 1373 $\cdot 10^{-1}$	5795 $\cdot 10^{-1}$	5796 $\cdot 10^{-1}$	5797 $\cdot 10^{-1}$	Mittel–wert $\cdot 10^{-1}$	Rang–folge
ODE1	7.64	5.49	5.56	7.41	0.90	5
HOU	3.90	2.80	2.74	3.49	7.05	10
DEN	0.94	0.94	0.87	0.84	6.61	9
JMADG1	8.82	6.00	6.11	7.28	0.66	2
LDDG1	7.97	5.79	5.84	6.86	0.43	1
JMADG2	0.69	0.73	0.64	0.60	0.75	4
JMADG3	0.47	0.48	0.39	0.38	0.68	3
IDG1	0.81	0.78	0.74	0.68	170.97	12
IDG14	0.60	0.74	0.72	0.66	200.00	13
IDG2	205.15	173.38	181.52	123.82	452.10	14
IDG24	236.11	184.72	203.44	175.72	553.92	15
JMADG4	559.67	433.43	470.73	344.56	39.74	11
ODE2	612.91	522.08	534.44	546.23	2.69	8
JMADG5	42.97	43.08	38.23	34.67	2.21	7
LDDG2	2.80	2.73	2.47	2.76	1.74	6

Tabelle 15: Rechenzeiten in Sekunden der einzelnen Modelle für die nicht–isotherme austenitisch–perlitische Umwandlung, *langsame lineare* Abkühlung

Modell	Datensatz 1374 $\cdot 10^{-1}$	1526 $\cdot 10^{-1}$	1527 $\cdot 10^{-1}$	1529 $\cdot 10^{-1}$	5794 $\cdot 10^{-1}$	Mittel–wert $\cdot 10^{-1}$	Rang–folge
ODE1	7.70	6.85	7.80	6.09	4.17	0.80	5
HOU	3.99	3.70	3.99	3.10	2.12	7.40	10
DEN	0.89	0.62	0.92	0.63	0.92	6.82	9
JMADG1	8.60	7.96	8.90	6.61	4.94	0.71	2
LDDG1	7.94	7.20	8.35	6.30	4.30	0.44	1
JMADG2	0.76	0.76	0.73	0.56	0.73	0.74	3
JMADG3	0.49	0.44	0.53	0.28	0.47	0.75	4
IDG1	0.79	0.74	0.78	0.56	0.81	168.74	13
IDG14	0.81	0.75	0.80	0.60	0.82	162.91	12
IDG2	195.28	187.95	209.83	56.42	194.21	403.08	15
IDG24	190.19	197.71	158.84	54.86	212.96	387.91	14
JMADG4	465.81	438.65	436.60	119.03	555.33	37.06	11
ODE2	501.57	466.66	366.47	122.38	482.46	2.29	7
JMADG5	45.41	35.16	40.90	17.41	46.44	2.69	8
LDDG2	2.53	1.83	2.79	1.76	2.53	1.80	6

Tabelle 16: Rechenzeiten in Sekunden der einzelnen Modelle für die nicht–isotherme austenitisch–perlitische Umwandlung, *schnelle lineare* Abkühlung

Bei der Rechenzeit liegen das Modell von LD, die autonome sowie die nicht–autonome JMA–DG und das phänomenologischen Modell mit den vier Parametern mit großem Abstand vorn. Es folgen im Mittelfeld die modifizierten Modelle, die Iterationsverfahren von Hougardy/Yamazaki und Denis et al. Schlusslichter sind die Modelle, die Integralterme beinhalten sowie die JMA–DG mit gemittelter Temperatur.

Auch an dieser Stelle illustieren wir exemplarisch anhand von ausgewählten Datensätzen und Modellen den Verlauf der Phasenanteile und den Verlauf der zurückgerechneten Längen für die nicht–isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit bei linearer Abkühlung. Im linken Bild findet sich jeweils ein Beispiel für einen schnellen linearen Abkühlungsverlauf, im rechten Bild ist jeweils das entsprechende Resultate eines langsamen linearen Abkühlungsverlaufs dargestellt.

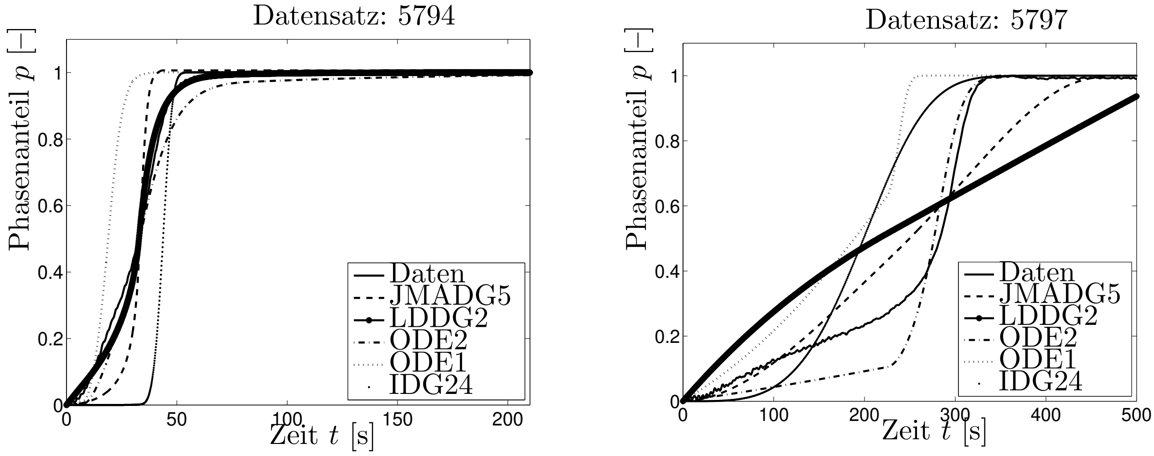

Abbildung 5: Phasenanteile der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung bei linearer Abkühlung

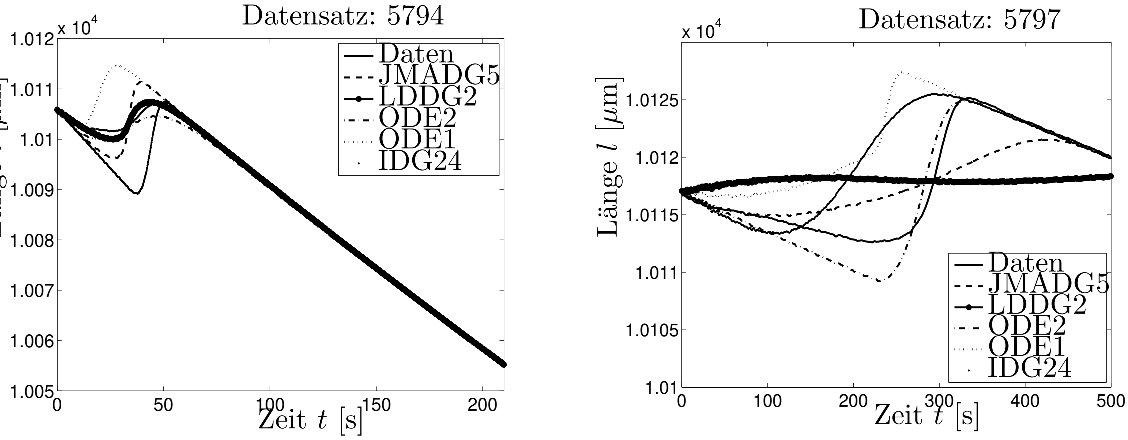

Abbildung 6: Zurückgerechnete Längen der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung bei linearer Abkühlung

5.2.2 Exponentielle Abkühlung

Im Fall der exponentiellen Abkühlung lässt sich der Temperaturverlauf durch die Funktion $\theta(t) = 850 \cdot \exp(\alpha\, t)$ mit einem geeignet gewählten negativen Parameter α darstellen. Wir verstehen eine Abkühlung als *langsam*, wenn $|\alpha| \leq 0.005$ gilt. Für $|\alpha| > 0.005$ bezeichnen wir die Abkühlung als *schnell*.

Der Vergleich zwischen den berechneten und den (indirekt) gemessenen Phasenanteilen liefert für die nicht–isotherme austenitisch–perlitische Umwandlung folgende L^2–Abweichungen:

Modell	Datensatz							Mittel–wert	Rang–folge
	1008	1009	1015	4131	4219	4225	4226		
	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	
ODE1	1.08	2.80	11.31	10.51	2.21	5.17	5.12	7.08	4
HOU	3.97	5.86	12.20	8.95	1.77	3.76	4.99	8.45	9
DEN	9.45	7.99	10.67	4.07	7.18	3.64	6.58	8.45	8
JMADG1	9.39	8.74	7.39	14.92	6.38	7.64	4.72	8.59	10
LDDG1	9.38	8.74	7.40	14.97	6.37	7.58	4.70	7.40	7
JMADG2	9.64	8.88	7.62	14.97	6.48	7.74	4.81	6.32	3
JMADG3	8.32	8.69	7.40	12.64	5.04	6.03	3.66	6.12	2
IDG1	6.76	7.10	2.13	12.46	4.92	6.88	4.01	11.17	12
IDG14	6.12	6.84	2.24	12.03	4.67	6.78	4.17	13.50	13
IDG2	13.49	11.98	10.25	17.00	8.75	9.44	7.27	23.98	14
IDG24	16.38	16.28	12.23	18.41	10.42	12.09	8.69	25.85	15
JMADG4	13.75	12.40	10.26	17.00	8.75	98.50	7.25	9.24	11
ODE2	16.39	16.35	12.23	18.41	10.42	98.50	8.68	5.40	1
JMADG5	10.36	9.13	9.16	15.75	6.91	7.85	5.53	7.17	6
LDDG2	8.76	5.21	8.57	5.36	4.48	1.30	4.14	7.13	5

Tabelle 17: L^2–Abweichungen der Phasenanteile der nicht–isothermen austenitisch–perlitischen Umwandlung, *langsame exponentielle* Abkühlung

Modell	Datensatz					Mittel–wert	Rang–folge
	1006	1014	1018	4132	4133		
	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	$\cdot 10^{-2}$	
ODE1	29.42	25.81	37.09	11.51	29.54	11.48	3
HOU	28.56	23.94	33.96	12.28	26.32	20.32	12
DEN	11.75	4.14	31.38	4.00	6.14	20.33	13
JMADG1	20.75	11.25	36.30	13.62	19.71	20.41	14
LDDG1	20.77	11.02	36.28	13.75	19.81	16.64	10
JMADG2	20.89	11.35	36.31	13.68	19.82	18.21	11
JMADG3	17.60	11.61	25.47	12.49	16.03	16.62	9
IDG1	14.43	12.66	37.09	7.42	19.47	11.65	4
IDG14	11.39	10.82	37.06	6.28	17.55	12.74	7
IDG2	8.80	7.01	11.95	16.18	14.32	11.66	5
IDG24	10.03	8.94	10.71	17.89	16.12	12.74	6
JMADG4	8.78	7.01	12.01	16.19	14.32	20.43	15
ODE2	10.03	8.94	10.71	17.88	16.12	13.26	8
JMADG5	21.47	11.31	34.27	15.08	20.00	9.37	1
LDDG2	11.24	7.17	33.86	3.46	10.59	9.69	2

Tabelle 18: L^2–Abweichungen der Phasenanteile der nicht–isothermen austenitisch–perlitischen Umwandlung, *schnelle exponentielle* Abkühlung

Der Vergleich zwischen den zurückgerechneten und den gemessenen Längen liefert für die nicht–isotherme austenitisch–perlitische Umwandlung folgende L^2–Abweichungen:

Modell	Datensatz							Mittel–wert	Rang–folge
	1008	1009	1015	4131	4219	4225	4226		
	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	
ODE1	0.20	0.59	3.27	1.91	0.54	1.17	1.71	1.49	6
HOU	0.74	1.12	3.70	1.90	0.47	0.86	1.99	1.80	9
DEN	1.76	1.57	2.16	0.64	1.73	0.79	1.79	1.80	8
JMADG1	1.92	1.83	1.66	2.58	1.55	1.74	1.35	1.83	10
LDDG1	1.92	1.83	1.66	2.59	1.55	1.73	1.34	1.66	7
JMADG2	1.98	1.86	1.70	2.59	1.57	1.76	1.36	1.32	3
JMADG3	1.72	1.78	1.93	2.24	1.24	1.39	1.30	1.28	2
IDG1	1.37	1.48	0.44	2.11	1.18	1.56	1.11	2.44	12
IDG14	1.22	1.42	0.45	2.03	1.11	1.54	1.18	2.97	13
IDG2	2.81	2.55	2.29	2.99	2.15	2.17	2.14	11.22	14
IDG24	3.42	3.48	2.72	3.25	2.56	2.80	2.56	11.57	15
JMADG4	3.06	2.98	2.29	2.99	2.18	62.90	2.17	1.99	11
ODE2	3.43	3.54	2.72	3.25	2.57	62.90	2.57	1.12	1
JMADG5	2.14	1.92	2.05	2.74	1.67	1.79	1.60	1.38	5
LDDG2	1.63	1.05	1.74	0.96	1.02	0.29	1.15	1.36	4

Tabelle 19: L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der nicht–isothermen austenitisch–perlitischen Umwandlung, *langsame exponentielle* Abkühlung

Modell	Datensatz					Mittel–wert	Rang–folge
	1006	1014	1018	4132	4133		
	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	$\cdot 10^{-4}$	
ODE1	9.77	8.16	13.53	3.49	8.75	3.43	7
HOU	9.74	7.95	12.73	3.96	8.48	6.29	14
DEN	2.36	1.05	11.51	0.66	1.56	6.29	13
JMADG1	7.03	3.31	13.26	2.66	5.19	6.31	15
LDDG1	7.03	3.24	13.25	2.69	5.22	5.53	10
JMADG2	7.07	3.33	13.26	2.67	5.22	6.02	11
JMADG3	6.37	3.79	9.76	2.89	4.83	5.35	9
IDG1	5.33	4.16	13.53	1.35	5.74	2.71	3
IDG14	3.86	3.37	13.52	1.12	4.86	2.79	6
IDG2	2.13	1.70	3.64	3.17	2.89	2.71	4
IDG24	2.23	2.14	2.89	3.51	3.20	2.79	5
JMADG4	2.13	1.70	3.67	3.17	2.89	6.21	12
ODE2	2.23	2.14	2.89	3.51	3.20	4.26	8
JMADG5	7.19	3.23	12.53	2.96	5.14	2.06	1
LDDG2	2.60	2.31	12.75	0.65	2.97	2.12	2

Tabelle 20: L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der nicht–isothermen austenitisch–perlitischen Umwandlung, *schnelle exponentielle* Abkühlung

Bei der langsamen exponentiellen Abkühlung liegt das phänomenologischen Mehrparameter–Modell mit fünf Parametern (35) vorn, gefolgt von den JMA–DG (21) mit $q = \frac{n}{2}$ und $q = 1$, dem phänomenologischen Mehrparameter–Modell mit vier Parametern (19) und der modifizierten LD–DG (39).
Bei der schnellen exponentiellen Abkühlung liegen die modifizierte JMA–DG (37) und die modifizierten LD–DG (39) vorn, gefolgt von dem phänomenologischen Mehrparameter–Modell mit vier Parametern (19) und der DG mit Integralterm (30).
Bei den zurückgerechneten Längen ergibt sich keine wesentlich andere Reihenfolge.
Der Vergleich der Rechenzeit der einzelnen Modelle liefert für die nicht–isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit:

Modell	Datensatz							Mittel–wert	Rang–folge
	1008	1009	1015	4131	4219	4225	4226		
	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	
ODE1	2.01	2.00	1.76	7.53	6.23	6.44	6.95	0.91	5
HOU	1.02	1.01	0.91	4.00	3.18	3.25	3.37	5.44	10
DEN	0.91	0.90	0.71	0.74	1.11	0.99	1.01	4.99	9
JMADG1	2.04	2.15	1.79	8.67	7.32	9.32	6.79	0.79	2
LDDG1	1.99	2.00	1.76	7.81	6.45	8.34	6.55	0.51	1
JMADG2	0.79	0.68	0.77	0.85	0.80	0.73	0.90	0.89	4
JMADG3	0.50	0.45	0.49	0.50	0.54	0.50	0.63	0.84	3
IDG1	0.93	0.96	0.81	0.84	0.86	0.85	0.97	254.24	12
IDG14	0.83	0.75	0.74	0.89	0.89	0.79	1.02	304.67	13
IDG2	159.57	173.06	257.57	269.90	306.06	335.52	277.97	626.42	14
IDG24	193.99	229.19	275.66	273.33	364.04	475.92	320.54	773.50	15
JMADG4	410.00	524.99	661.40	639.15	825.18	657.30	666.94	48.75	11
ODE2	492.33	559.14	602.98	644.28	1023.60	1334.60	757.54	2.51	7
JMADG5	50.02	44.84	42.14	46.98	48.85	58.54	49.87	2.61	8
LDDG2	2.65	2.76	1.86	1.87	2.44	3.02	2.97	1.96	6

Tabelle 21: Rechenzeiten in Sekunden der einzelnen Modelle für die nicht–isotherme austenitisch–perlitische Umwandlung, langsame exponentielle Abkühlung

Modell	Datensatz					Mittel–wert	Rang–folge
	1006	1014	1018	4132	4133		
	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	$\cdot 10^{-1}$	
ODE1	1.48	1.54	3.17	6.84	5.62	0.84	5
HOU	0.76	0.78	1.60	3.36	2.79	3.94	10
DEN	1.09	0.69	0.68	0.97	0.76	3.80	9
JMADG1	1.62	1.63	3.37	7.21	5.86	0.73	2
LDDG1	1.55	1.67	3.24	6.94	5.61	0.45	1
JMADG2	0.70	0.73	0.54	0.93	0.75	0.79	4
JMADG3	0.55	0.42	0.29	0.53	0.45	0.74	3
IDG1	0.85	0.76	0.61	0.93	0.81	235.57	13
IDG14	0.77	0.73	0.57	0.88	0.76	217.69	12
IDG2	243.90	285.72	85.38	251.41	311.42	517.71	15
IDG24	213.69	252.26	108.20	246.13	268.19	514.29	14
JMADG4	570.11	603.01	192.71	638.76	583.96	34.61	11
ODE2	543.80	603.86	236.48	589.51	597.78	3.11	8
JMADG5	42.06	35.38	19.98	45.68	29.93	2.99	7
LDDG2	7.52	1.85	1.35	2.97	1.87	1.88	6

Tabelle 22: Rechenzeiten in Sekunden der einzelnen Modelle für die nicht–isotherme austenitisch–perlitische Umwandlung, schnelle exponentielle Abkühlung

Bei den Rechenzeiten ergibt sich etwa die gleiche Aussage wie für die lineare Abkühlung. Die autonome JMA–DG sowie die autonome LD–DG liegen aufgrund der einfachen Struktur weit vorne. Schlusslichter sind auch hier die Modelle mit Integraltermen.

Abschließend stellen wir exemplarisch anhand von ausgewählten Datensätzen und Modellen den Verlauf der Phasenanteile und den Verlauf der zurückgerechneten Längen für die nicht–isotherme Umwandlung von Austenit zu Perlit bei exponentieller Abkühlung grafisch dar. Im linken Bild findet sich jeweils ein Beispiel für einen schnellen exponentiellen Abkühlungsverlauf, im rechten Bild ist jeweils das entsprechende Resultate eines langsamen exponentiellen Abkühlungsverlaufs dargestellt.

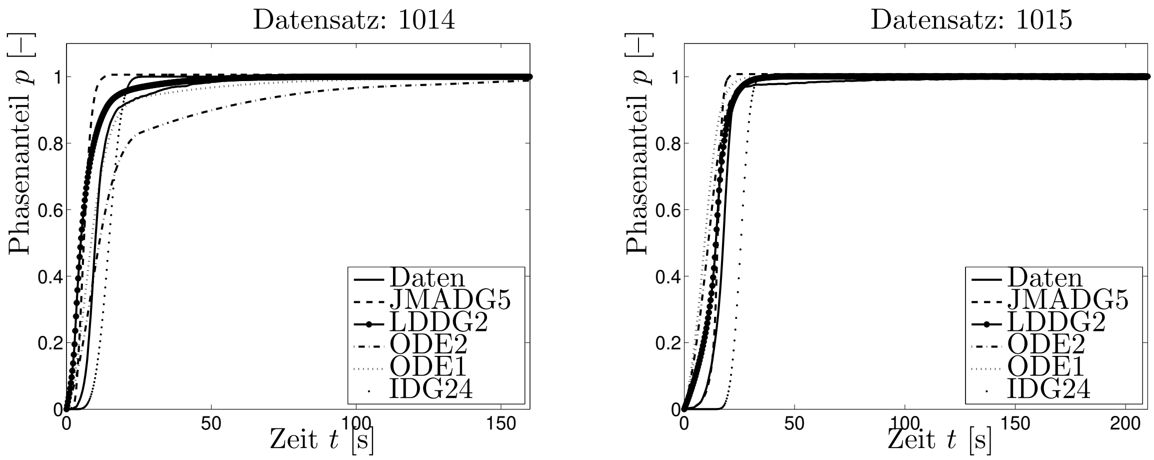

Abbildung 7: Phasenanteile der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung bei exponentieller Abkühlung

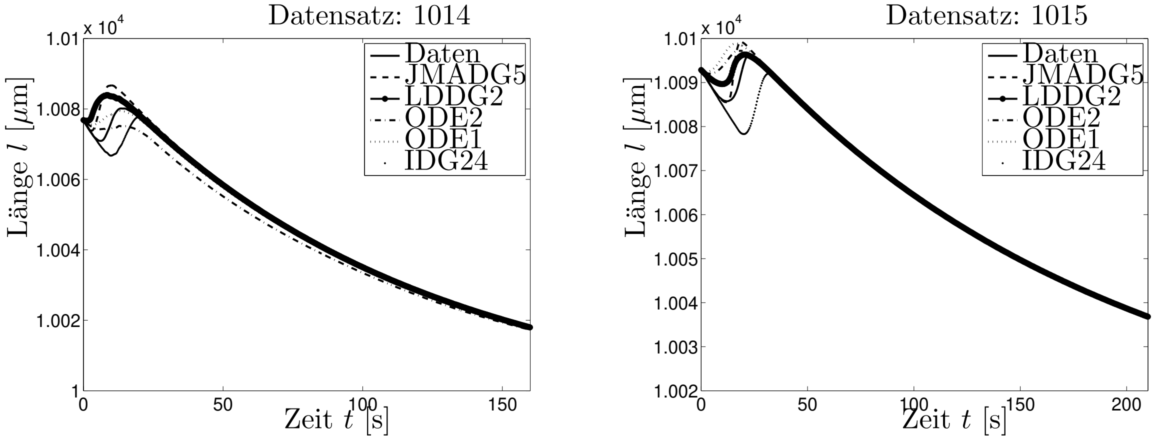

Abbildung 8: Zurückgerechnete Längen der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung bei exponentieller Abkühlung

6 Zusammenfassung

Im Folgenden werden die Ergebnisse tabellarisch zusammengefasst. Zur Veranschaulichung der Ergebnisse werden graphische Darstellungen einiger Modelle hinzugefügt.

Die vergleichende Bewertung der oben angeführten Modelle ergibt:

- Von den Modellen, die nur von der Temperatur oder der Temperaturgeschichte abhängen (d.h., die Modelle 1 - 11 in Kapitel 3.1), approximiert das von den Autoren vorgeschlagene phänomenologische Mehrparameter–Modell (19) bzw. (35) mit $h = 1$ alle Dilatometerexperimente im Sinne der Least–Square–Abweichung am besten (s. Tab. 23, 25, 26 und 27).
- Unter allen bewerteten Modellen liegt dieses Modell mit angepasstem h im Sinne der Least–Square–Abweichung für die Gesamtheit *aller* Dilatometerexperimente auf dem zweiten Platz, gefolgt von dem vorgeschlagenen phänomenologischen Mehrparameter–Modell (19) bzw. (35) mit $h = 1$. Die besten Resultate liefert das Modell der JMA–DG (37) (s. Tab. 26).

- Für die *isotherme* Umwandlung eignen sich insbesondere das phänomenologische Mehrparameter-Modell (19) sowie die auf Johnson-Mehl-Avrami fußenden Ansätze. Die linearen Ansätze von Leblond–Devaux liefern hingegen schlechte Ergebnisse (s. Tab. 25).
  Die Abbildung 3 zeigt, dass im Allgemeinen das Modell nach Leblond–Devaux isotherme Umwandlungen nur schlecht beschreiben kann. Insbesondere das langsame Anwachsen des Perlitanteils zu Beginn wird nicht berücksichtigt.

- Für *nicht–isotherme* Umwandlungen eignen sich die mit h korrigierten Modelle der JMA–DG (37) und der LD–DG (39) (vgl. hierzu auch [Böh04]) sowie das modifizierte phänomenologische Mehrparameter-Modell (35) mit aus Interpolation gewonnenem h, das mehr numerischen Aufwand erfordert. Bei der exponentiellen Abkühlung liegen die Modelle fast gleichauf – bei der linearen Abkühlung sind die Unterschiede größer (s. Tab. 23).

- Wird nach „langsamer" und „schneller" Abkühlung unterschieden, so ergibt sich folgendes Bild:

  – Bei der „langsamen" Abkühlung insgesamt sowie bei der „langsamen exponentiellen" Abkühlung liegt das phänomenologische Mehrparameter-Modell (35) vorn. Bei der „langsamen linearen" Abkühlung liegt das modifizierte Modell der JMA–DG (37) vorn (s. Tab. 23 und 24).

  – Bei der „schnellen" Abkühlung liegt das phänomenologische Mehrparameter-Modell (35) deutlich hinter den mit h korrigierten Modellen der JMA–DG (37) und der LD–DG (39) (s. Tab. 23 und 24).

- Die Modelle mit Berücksichtigung der Temperaturgeschichte rechtfertigen nicht den größeren numerischen Aufwand und die längere Rechenzeit, da sie keine bessere Approximation der Experimente liefern (s. Tab. 15, 16, 21 und 22).

- Der Vergleich der Modelle anhand der zurückgerechneten Längen liefert teilweise etwas andere Ergebnisse. Die Tendenz bzgl. des Vergleichs der Modelle unterscheidet sich jedoch nicht wesentlich von den Aussagen hinsichtlich des Vergleichs der Modelle anhand der Phasenanteile (s. Tab. 13, 14, 19 und 20).
  Abbildung 5 zeigt, dass es bei einzelnen Experimenten durchaus größere Abweichungen zwischen ermittelten und berechneten Daten geben kann.

- Ein Vergleich der von uns vorgeschlagenen phänomenologische Mehrparameter-Modelle mit vier bzw. fünf Parametern (19) und (35) *untereinander* ergibt:

  – Werden alle nicht–isothermen Umwandlungen berücksichtigt, so ist – erwartungsgemäß – das Modell (35) besser.

  – Bei den „langsamen" Umwandlungen ist das Modell (35) sogar wesentlich besser.

  – Bei der exponentiellen Abkühlung liegen die beiden Modelle (19) und (35) fast gleich auf, wobei das Modell (19) sogar etwas besser ist.

  Somit zeigt sich, dass eine Modellerweiterung durch Hinzunahme zusätzlicher Parameter nicht notwendigerweise zu einer Verbesserung des Modells führen muss.

Fazit:

- Soll die Abkühlgeschwindigkeit im Modell *nicht* berücksichtigt werden, steht zumindest für Abkühlverläufe mit dem phänomenologische Modell (19) in seiner einfachen Handhabung ein praktikables Modell zur Verfügung.
- Wird die Abkühlgeschwindigkeit im Modell berücksichtigt, so stehen die drei Modelle der JMA–DG (37) und der LD–DG (39) sowie das phänomenologische Mehrparameter–Modell (35) zur Verfügung, wobei bei „schneller" Abkühlung die Modelle der JMA–DG (37) und der LD–DG (39) besser sind. Bei der Anwendung der JMA–DG (37) ist zu berücksichtigen, dass der Anfangswert null zur trivialen Lösung führt (vgl. Kap. 3.1).
- In weiteren Untersuchungen sollten die Modelle anhand von 3d–Simulationen getestet und bewertet werden, wobei ein Vergleich mit Messdaten aus Bauteilversuchen – soweit möglich – erfolgen sollte.

Zum Abschluss der Zusammenfassung fügen wir die Tabellen an, in denen sich die oben getrofffenen Wertungen widerspiegeln.

Modell	nicht isotherm									
	langsam		schnell		linear		exponentiell		gesamt	
	$\cdot 10^{-2}$		$\cdot 10^{-2}$		$\cdot 10^{-2}$		$\cdot 10^{-2}$		$\cdot 10^{-2}$	
ODE1	8.07	4	15.24	4	14.02	4	9.28	3	11.65	4
HOU	11.39	9	22.66	12	19.66	8	14.39	11	17.02	9
DEN	11.38	8	22.71	13	19.70	9	14.39	10	17.04	10
JMADG1	11.48	10	22.74	14	19.73	10	14.50	12	17.11	11
LDDG1	9.78	7	18.11	7	15.87	5	12.02	7	13.95	6
JMADG2	9.50	6	19.48	11	16.71	7	12.27	8	14.49	7
JMADG3	9.27	5	18.28	8	16.17	6	11.37	5	13.77	5
IDG1	14.31	12	17.46	6	20.35	13	11.41	6	15.88	8
IDG14	17.36	13	19.19	10	23.44	14	13.12	9	18.28	13
IDG2	20.71	14	17.46	5	20.34	12	17.82	14	19.08	14
IDG24	23.55	15	19.19	9	23.45	15	19.30	15	21.37	15
JMADG4	11.96	11	23.02	15	20.15	11	14.83	13	17.49	12
ODE2	4.68	1	14.62	3	9.96	3	9.33	4	9.65	3
JMADG5	5.21	2	6.48	1	3.42	1	8.27	1	5.85	1
LDDG2	6.93	3	7.51	2	6.03	2	8.41	2	7.22	2

Tabelle 23: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der Phasenanteile der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung (In der jeweils zweiten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

In der Tabelle 23 werden die Mittelwerte der L^2–Abweichungen der Phasenanteile für die langsame, die schnelle, die lineare und die exponentielle Abkühlung sowie für die Gesamtheit der nicht–isothermen Umwandlung von Austenit zu Perlit dargestellt.

Die Tabelle 24 gibt für den linearen und den exponentiellen Abkühlverlauf der nicht–isothermen Umwandlung von Austenit zu Perlit jeweils die Mittelwerte der L^2–Abweichungen der Phasenanteile für die langsame und die schnelle Abkühlung an.

Modell	nicht isotherm							
	linear				exponentiell			
	langsam		schnell		langsam		schnell	
	$\cdot 10^{-2}$		$\cdot 10^{-2}$		$\cdot 10^{-2}$		$\cdot 10^{-2}$	
ODE1	9.05	4	18.99	4	7.08	4	11.48	3
HOU	14.33	9	24.99	10	8.45	9	20.32	12
DEN	14.32	8	25.09	12	8.45	8	20.33	13
JMADG1	14.37	10	25.08	11	8.59	10	20.41	14
LDDG1	12.17	5	19.57	5	7.40	7	16.64	10
JMADG2	12.67	7	20.74	7	6.32	3	18.21	11
JMADG3	12.41	6	19.93	6	6.12	2	16.62	9
IDG1	17.44	13	23.26	9	11.17	12	11.65	4
IDG14	21.23	14	25.64	15	13.50	13	12.74	7
IDG2	17.43	12	23.25	8	23.98	14	11.66	5
IDG24	21.25	15	25.64	14	25.85	15	12.74	6
JMADG4	14.68	11	25.62	13	9.24	11	20.43	15
ODE2	3.95	2	15.97	3	5.40	1	13.26	8
JMADG5	3.26	1	3.59	1	7.17	6	9.37	1
LDDG2	6.73	3	5.33	2	7.13	5	9.69	2

Tabelle 24: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der Phasenanteile der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung (In der jeweils zweiten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

In der Tabelle 25 werden die Mittelwerte der L^2–Abweichungen der Phasenanteile für die Gesamtheit der isothermen Umwandlung von Austenit zu Perlit dargestellt. In der dritten Spalte ist die Rangfolge festgehalten. Erwartungsgemäß ergeben die mit $h = h(\theta')$ modifizierten Modelle für *isotherme* Umwandlungen das gleiche Ergebnis wie die entsprechenden Ausgangsmodelle.

Modell	isotherm	
	$\cdot 10^{-2}$	
JMAG	1.76	2
LDG	10.23	13
ODE1	1.41	1
HOU	1.76	3
DEN	1.91	7
JMADG1	1.80	4
LDDG1	10.22	12
JMADG2	1.80	5
JMADG3	1.82	6
IDG1	2.90	9
IDG14	8.85	11
IDG2	2.84	8
IDG24	8.81	10
JMADG4	1.80	4
ODE2	1.41	1
JMADG5	1.80	4
LDDG2	10.22	12

Tabelle 25: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der Phasenanteile der isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung

Modell	gesamt	
	$\cdot 10^{-2}$	
ODE1	6.53	3
HOU	9.39	8
DEN	9.48	10
JMADG1	9.46	9
LDDG1	12.08	13
JMADG2	8.15	5
JMADG3	7.79	4
IDG1	9.39	7
IDG14	13.57	14
IDG2	10.96	12
IDG24	15.09	15
JMADG4	9.65	11
ODE2	5.53	2
JMADG5	3.82	1
LDDG2	8.72	6

Tabelle 26: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der Phasenanteile *aller* austenisch–perlitischen Umwandlungen

Die Tabelle 26 fasst die Mittelwerte der L^2–Abweichungen der Phasenanteile für die Gesamtheit *aller* Umwandlungen von Austenit zu Perlit zusammen. In der dritten Spalte ist die Rangfolge festgehalten. Wie schon festgestellt, werden unsere Vorschläge nur von der modifizierten JMA–DG übertroffen.

Abschließend seien die Ergebnisse der drei „besten“ Modelle in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

Bewertungsmatrix für einige PU–Modelle

Modell	isotherm		nicht isotherm						gesamt	
			langsame Abkühlung		schnelle Abkühlung		gesamt			
ODE1	$1.41 \cdot 10^{-2}$	1	$8.07 \cdot 10^{-2}$	4	$15.24 \cdot 10^{-2}$	4	$11.65 \cdot 10^{-2}$	4	$6.53 \cdot 10^{-2}$	3
JMADG1	$1.80 \cdot 10^{-2}$	2	$11.48 \cdot 10^{-2}$	6	$22.74 \cdot 10^{-2}$	6	$17.11 \cdot 10^{-2}$	6	$9.46 \cdot 10^{-2}$	5
LDDG1	$10.22 \cdot 10^{-2}$	3	$9.78 \cdot 10^{-2}$	5	$18.11 \cdot 10^{-2}$	5	$13.95 \cdot 10^{-2}$	5	$12.08 \cdot 10^{-2}$	6
ODE2	$1.41 \cdot 10^{-2}$	1	$4.68 \cdot 10^{-2}$	1	$14.62 \cdot 10^{-2}$	3	$9.65 \cdot 10^{-2}$	3	$5.53 \cdot 10^{-2}$	2
JMADG5	$1.80 \cdot 10^{-2}$	2	$5.21 \cdot 10^{-2}$	2	$6.48 \cdot 10^{-2}$	1	$5.85 \cdot 10^{-2}$	1	$3.82 \cdot 10^{-2}$	1
LDDG2	$10.22 \cdot 10^{-2}$	3	$6.93 \cdot 10^{-2}$	3	$7.51 \cdot 10^{-2}$	2	$7.22 \cdot 10^{-2}$	2	$8.72 \cdot 10^{-2}$	4

Tabelle 27: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der Phasenanteile der austenisch–perlitischen Umwandlung für einige Modelle (In der jeweils zweiten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Im Anhang folgen Resultate für die zurückgerechneten Längen und für die Rechenzeiten analog zu den Ergebnisse für die Phasenanteile.

Anhang

Der Vollständigkeit halber fügen wir in analoger Weise die Ergebnisse des Vergleichs für die zurückgerechneten Längen und die Rechenzeiten im Detail an. Die inhaltliche Wertung wurde bereits in Kapitel 6 getroffen.

Modell	nicht isotherm									
	langsam		schnell		linear		exponentiell		gesamt	
	$\cdot 10^{-4}$		$\cdot 10^{-4}$		$\cdot 10^{-4}$		$\cdot 10^{-4}$		$\cdot 10^{-4}$	
ODE1	1.72	4	4.07	5	3.33	4	2.46	3	2.90	4
HOU	2.50	9	6.30	12	4.75	10	4.05	11	4.40	10
DEN	2.50	8	6.31	14	4.76	11	4.04	10	4.40	11
JMADG1	2.52	10	6.32	15	4.77	12	4.07	12	4.42	12
LDDG1	2.20	7	5.38	10	3.99	6	3.59	8	3.79	7
JMADG2	2.06	6	5.68	11	4.06	7	3.67	9	3.87	8
JMADG3	2.00	5	5.23	9	3.92	5	3.31	7	3.62	6
IDG1	3.19	12	3.94	3	4.56	9	2.57	4	3.57	5
IDG14	3.90	13	4.18	8	5.20	14	2.88	6	4.04	9
IDG2	7.59	14	3.94	4	4.56	8	6.97	14	5.76	14
IDG24	8.21	15	4.18	7	5.21	15	7.18	15	6.20	15
JMADG4	2.63	11	6.31	13	4.84	13	4.10	13	4.47	13
ODE2	0.96	1	4.18	6	2.45	3	2.69	5	2.57	3
JMADG5	1.04	2	1.40	1	0.72	1	1.72	1	1.22	1
LDDG2	1.43	3	1.61	2	1.29	2	1.74	2	1.52	2

Tabelle 28: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung (In der jeweils zweiten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Modell	nicht isotherm							
	linear				exponentiell			
	langsam		schnell		langsam		schnell	
	$\cdot 10^{-4}$		$\cdot 10^{-4}$		$\cdot 10^{-4}$		$\cdot 10^{-4}$	
ODE1	1.96	4	4.70	4	1.49	6	3.43	7
HOU	3.19	9	6.31	12	1.80	9	6.29	14
DEN	3.19	8	6.34	14	1.80	8	6.29	13
JMADG1	3.20	10	6.34	13	1.83	10	6.31	15
LDDG1	2.74	6	5.24	8	1.66	7	5.53	10
JMADG2	2.79	7	5.33	9	1.32	3	6.02	11
JMADG3	2.73	5	5.12	5	1.28	2	5.35	9
IDG1	3.95	12	5.18	7	2.44	12	2.71	3
IDG14	4.83	14	5.57	11	2.97	13	2.79	6
IDG2	3.95	13	5.18	6	11.22	14	2.71	4
IDG24	4.85	15	5.57	10	11.57	15	2.79	5
JMADG4	3.28	11	6.40	15	1.99	11	6.21	12
ODE2	0.79	2	4.10	3	1.12	1	4.26	8
JMADG5	0.70	1	0.75	1	1.38	5	2.06	1
LDDG2	1.49	3	1.09	2	1.36	4	2.12	2

Tabelle 29: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung (In der jeweils zweiten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Modell	isotherm	
	$\cdot 10^{-4}$	
JMAG	0.30	2
LDG	2.06	13
ODE1	0.25	1
HOU	0.30	3
DEN	0.34	7
JMADG1	0.31	4
LDDG1	2.06	12
JMADG2	0.31	5
JMADG3	0.32	6
IDG1	0.59	9
IDG14	1.85	11
IDG2	0.58	8
IDG24	1.84	10
JMADG4	0.31	4
ODE2	0.25	1
JMADG5	0.31	4
LDDG2	2.06	12

Tabelle 30: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung (In der dritten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Modell	gesamt	
	$\cdot 10^{-4}$	
ODE1	1.57	3
HOU	2.35	8
DEN	2.37	10
JMADG1	2.37	9
LDDG1	2.92	12
JMADG2	2.09	7
JMADG3	1.97	5
IDG1	2.08	6
IDG14	2.95	13
IDG2	3.17	14
IDG24	4.02	15
JMADG4	2.39	11
ODE2	1.41	2
JMADG5	0.77	1
LDDG2	1.79	4

Tabelle 31: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der Gesamtheit *aller* Umwandlungen von Austenit zu Perlit (In der dritten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Bewertungsmatrix für einige PU–Modelle

Modell	isotherm		nicht isotherm: langsame Abkühlung		nicht isotherm: schnelle Abkühlung		nicht isotherm: gesamt		gesamt	
ODE1	$0.25 \cdot 10^{-4}$	1	$1.72 \cdot 10^{-4}$	4	$4.07 \cdot 10^{-4}$	3	$2.90 \cdot 10^{-4}$	4	$1.57 \cdot 10^{-4}$	3
JMADG1	$0.31 \cdot 10^{-4}$	2	$2.52 \cdot 10^{-4}$	6	$6.32 \cdot 10^{-4}$	6	$4.42 \cdot 10^{-4}$	6	$2.37 \cdot 10^{-4}$	5
LDDG1	$2.06 \cdot 10^{-4}$	3	$2.20 \cdot 10^{-4}$	5	$5.38 \cdot 10^{-4}$	5	$3.79 \cdot 10^{-4}$	5	$2.92 \cdot 10^{-4}$	6
ODE2	$0.25 \cdot 10^{-4}$	1	$0.93 \cdot 10^{-4}$	1	$4.18 \cdot 10^{-4}$	4	$2.57 \cdot 10^{-4}$	3	$1.41 \cdot 10^{-4}$	2
JMADG5	$0.31 \cdot 10^{-4}$	2	$1.04 \cdot 10^{-4}$	2	$1.40 \cdot 10^{-4}$	1	$1.22 \cdot 10^{-4}$	1	$0.77 \cdot 10^{-4}$	1
LDDG2	$2.06 \cdot 10^{-4}$	3	$1.43 \cdot 10^{-4}$	3	$1.61 \cdot 10^{-4}$	2	$1.52 \cdot 10^{-4}$	2	$1.79 \cdot 10^{-4}$	4

Tabelle 32: Mittelwerte der L^2–Abweichungen der zurückgerechneten Längen der austenisch–perlitischen Umwandlung für einige Modelle (In der jeweils zweiten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Modell	nicht isotherm: langsam $\cdot 10^{-1}$		schnell $\cdot 10^{-1}$		linear $\cdot 10^{-1}$		exponentiell $\cdot 10^{-1}$		gesamt $\cdot 10^{-1}$	
ODE1	0.90	5	0.82	5	0.85	5	0.87	5	0.86	5
HOU	6.25	10	5.67	10	7.23	10	4.69	10	5.96	10
DEN	5.80	9	5.31	9	6.72	9	4.39	9	5.55	9
JMADG1	0.73	2	0.72	2	0.69	2	0.76	2	0.72	2
LDDG1	0.47	1	0.44	1	0.44	1	0.48	1	0.46	1
JMADG2	0.82	4	0.76	4	0.74	4	0.84	4	0.79	4
JMADG3	0.76	3	0.75	3	0.72	3	0.79	3	0.75	3
IDG1	212.60	12	202.15	13	169.85	12	244.90	12	207.38	12
IDG14	252.33	13	190.30	12	181.45	13	261.18	13	221.32	13
IDG2	539.26	14	460.40	15	427.59	14	572.07	14	499.83	14
IDG24	663.71	15	451.10	14	470.91	15	643.89	15	557.40	15
JMADG4	44.24	11	35.84	11	38.40	11	41.68	11	40.04	11
ODE2	2.60	8	2.70	7	2.49	8	2.81	8	2.65	8
JMADG5	2.41	7	2.84	8	2.45	7	2.80	7	2.62	7
LDDG2	1.85	6	1.84	6	1.77	6	1.92	6	1.85	6

Tabelle 33: Mittelwerte der Rechenzeit in Sekunden der einzelnen Modelle der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung (In der jeweils zweiten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Modell	nicht isotherm							
	linear				exponentiell			
	langsam		schnell		langsam		schnell	
	$\cdot 10^{-1}$		$\cdot 10^{-1}$		$\cdot 10^{-1}$		$\cdot 10^{-1}$	
ODE1	0.90	5	0.80	5	0.91	5	0.84	5
HOU	7.05	10	7.40	10	5.44	10	3.94	10
DEN	6.61	9	6.82	9	4.99	9	3.80	9
JMADG1	0.66	2	0.71	2	0.79	2	0.73	2
LDDG1	0.43	1	0.44	1	0.51	1	0.45	1
JMADG2	0.75	4	0.74	3	0.89	4	0.79	4
JMADG3	0.68	3	0.75	4	0.84	3	0.74	3
IDG1	170.97	12	168.74	13	254.24	12	235.57	13
IDG14	200.00	13	162.91	12	304.67	13	217.69	12
IDG2	452.10	14	403.08	15	626.42	14	517.71	15
IDG24	553.92	15	387.91	14	773.50	15	514.29	14
JMADG4	39.74	11	37.06	11	48.75	11	34.61	11
ODE2	2.69	8	2.29	7	2.51	7	3.11	8
JMADG5	2.21	7	2.69	8	2.61	8	2.99	7
LDDG2	1.74	6	1.80	6	1.96	6	1.88	6

Tabelle 34: Mittelwerte der Rechenzeit in Sekunden der einzelnen Modelle der nicht–isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung (In der jeweils zweiten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Modell	isotherm	
	$\cdot 10^{-1}$	
JMAG	0.80	9
LDG	0.39	3
ODE1	0.98	12
HOU	0.85	11
DEN	0.83	10
JMADG1	0.42	6
LDDG1	0.20	1
JMADG2	0.42	8
JMADG3	0.41	5
IDG1	5.10	16
IDG14	2.15	14
IDG2	8.17	17
IDG24	3.78	15
JMADG4	0.39	4
ODE2	0.98	12
JMADG5	0.42	6
LDDG2	0.20	1

Tabelle 35: Mittelwerte der Rechenzeit in Sekunden der einzelnen Modelle der isothermen austenisch–perlitischen Umwandlung (In der dritten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Modell	gesamt $\cdot 10^{-1}$	
ODE1	0.92	5
HOU	3.40	10
DEN	3.19	9
JMADG1	0.57	2
LDDG1	0.33	1
JMADG2	0.61	4
JMADG3	0.58	3
IDG1	106.24	12
IDG14	111.73	13
IDG2	254.00	14
IDG24	280.59	15
JMADG4	20.22	11
ODE2	1.81	8
JMADG5	1.52	7
LDDG2	1.02	6

Tabelle 36: Mittelwerte der Rechenzeit in Sekunden der einzelnen Modelle der Gesamtheit *aller* Umwandlungen von Austenit zu Perlit (In der dritten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Bewertungsmatrix für einige PU–Modelle

Modell	isotherm		nicht isotherm: langsame Abkühlung		nicht isotherm: schnelle Abkühlung		nicht isotherm: gesamt		gesamt	
ODE1	$0.98 \cdot 10^{-1}$	3	$0.90 \cdot 10^{-1}$	3	$0.82 \cdot 10^{-1}$	3	$0.86 \cdot 10^{-1}$	3	$0.92 \cdot 10^{-1}$	3
JMADG1	$0.42 \cdot 10^{-1}$	2	$0.73 \cdot 10^{-1}$	2	$0.72 \cdot 10^{-1}$	2	$0.72 \cdot 10^{-1}$	2	$0.57 \cdot 10^{-1}$	2
LDDG1	$0.20 \cdot 10^{-1}$	1	$0.47 \cdot 10^{-1}$	1	$0.44 \cdot 10^{-1}$	1	$0.46 \cdot 10^{-1}$	1	$0.33 \cdot 10^{-1}$	1
ODE2	$0.98 \cdot 10^{-1}$	3	$2.60 \cdot 10^{-1}$	6	$2.70 \cdot 10^{-1}$	5	$2.65 \cdot 10^{-1}$	6	$1.81 \cdot 10^{-1}$	6
JMADG5	$0.42 \cdot 10^{-1}$	2	$2.41 \cdot 10^{-1}$	5	$2.84 \cdot 10^{-1}$	6	$2.62 \cdot 10^{-1}$	5	$1.52 \cdot 10^{-1}$	5
LDDG2	$0.20 \cdot 10^{-1}$	1	$1.85 \cdot 10^{-1}$	4	$1.84 \cdot 10^{-1}$	4	$1.85 \cdot 10^{-1}$	4	$1.02 \cdot 10^{-1}$	4

Tabelle 37: Mittelwerte der Rechenzeit in Sekunden der einzelnen Modelle der austenisch–perlitischen Umwandlung für einige Modelle (In der jeweils zweiten Spalte ist die Rangfolge festgehalten)

Literatur

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

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

[Ahr03] Ahrens, U.: Beanspruchungsabhängiges Umwandlungsverhalten und Umwandlungsplastizität niedrig legierter Stähle mit unterschiedlich hohen Kohlenstoffgehalten, Dissertation, Universität Paderborn, 2003.

[Ang05] Angermann, A., Benschel, M., Rau, M., Wohlfarth, U.: Matlab–Simulink–Stateflow, Grundlagen, Toolboxen, Beispiele, 4. überarbeitete Auflage, Oldenbourg Verlag, 2005

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

[Ber06] Berns, H., Theisen, W.: Eisenwerkstoffe – Stahl und Gusseisen, Springer–Verlag Berlin, 2006.

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

[Ble01] Bleck, W.; Werkstoffkunde Stahl für Studium und Praxis, Verlag Mainz, Aachen, 2001.

[Böh03] Böhm, M.; Dachkovski, S.; Hunkel, M.; Lübben, T.; Wolff, M.: Phasenumwandlungen im Stahl – Übersicht über einige makroskopische Modelle. Berichte aus der Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Report 03-09, 2003, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

[Böh04] Böhm, M.; Hunkel, M.; Schmidt, A.; Wolff, M.: Evaluation of various phase–transition models for 100Cr6 for application in commercial FEM–programmes, J. de Physique IV 120 (2004) 581-589.

[Boe07] Boettcher, S.: Zur mathematischen Aufgabe der Thermoelastizität unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität, Diplomarbeit im Studiengang Technomathematik, Universität Bremen, FB 3, März 2007.

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

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

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

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

[Dac03] Dachkovski, S.; Böhm, M.; Schmidt, A.; Wolff, M.: Comparison of several kinetic equations for pearlite transformation in 100Cr6 steel. Berichte aus der Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Report 03-07, 2003, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

[Dac04a] Dachkovski, S. Böhm, M.: Finite thermoplasicity with phase changes based on isomorphisms. Int. J. of Plasticity 20 (2004) S. 153-160.

[Dac04b] Dachkovski, S. Böhm, M.: Modeling of elastoplastic materials with phase changes. J. de Physique IV 120 (2004) 153-160.

[Dac04c] Dachkovski, S.: Evolution of diffusional phase transformation with varying temperature, Proc. of 3rd International Conference Computational modeling and simulation of materials, Acireale, Sicilia, Italy, p. 265-272, 2004.

[Dac05] Dachkovski, S. Böhm, M.: Modeling of the thermal treatment of steel with phase changes in Mechanics of material forces, (Springer New York, 2005), 299-308, eds.: P. Steinmann, G. A. Maugin.

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

[Dal04] Dalgic, M. Löwisch, G., 2004, „Einfluss einer aufgeprägten Spannung auf die isotherme, perlitische und bainitische Umwandlung des Wälzlagerstahls 100Cr6", HTM 59, 28.

[Dal06] Dalgic, M. Löwisch, G., 2006, „Transformation plasticity at different phase transformation of a bearing steel", Materialwissenschaften und Werkstofftechnik 37, 122.

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

[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. Berveiller, M.; Fischer, F. D. (Hrsg.) Springer–Verlag, Wien, 1997.

[Den99] Denis, S.; Archambault, P.; Aubry, C.; Mey, A.; Louin, J. C.; Simon, A.: Modelling of phase transformation kinetics in steels and coupling with heat treatment residuel stress predictions. J. Phys. IV France 9 (1999), S. Pr9-323-Pr9-332.

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

[Fas96] Fasano, A., Primicerio, M.: An analysis of phase transition models, Europ. I. Appl. Math. 7, pp439-451, (1996).

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

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

[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 (2000), S. 723-748.

[Fis03] Fischer, F.D., Simha, N.K., Svoboda, J.: Kinetics of diffusional phase transformation in multicomponent elastic–olastic materials, Transactions of the ASME, 125 (2003) 266-276.

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

[For00] Fortunier, R., Leblond, J.B., Bergheau, J.M.: A numerical model for multiple phase transformations in steels during thermal processes, J. Shanghai Jiaotong Un., E5, No 1, 213, 2000.

[Fuh99] Fuhrmann, J.; Hömberg, D.: Numerical simulation of the surface hardening of steel. Int. J. of Numerical Meth. for Heat & Fluid Flow, 9 (1999) 6, S. 705-724.

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

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

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

[Höm97] Hömberg, D.: Irreversible phase transitions in steel, Math. Methods in Appl. Sciences, 20, 59-77 (1997)

[Höm04] Hömberg, D.: A mathematical model for induction hardening including mechanical effects, Nonlinear Analysis: Real World Applications 5 (2004) 55-90.

[Höm06] Hömberg, D., Weiss, W.: PID control of laser surface hardening of steel, IEEE Transactions on Control Systems Technology, 14, 5, 896-904, 2006.

[Hor92] Horstmann, D.: Das Zustandsschaubild Eisen–Kohlenstoff und die Grundlagen der Wärmebehandlung der Eisen–Kohlenstoff–Legierungen, 5th edition, Verlag Stahleisen Düsseldorf, 1992.

[Hou86] Hougardy, H. P.; Yamazaki, K.: An improved calculation of the transformations in steels. Steel Research 57 (1986) 9, S. 466-471.

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

[Hüß07] Hüßler, I.: Mathematische Untersuchungen eines gekoppelten Systems von ODE und PDE zur Modellierung von Phasenumwandlungen im Stahl, Diplomarbeit im Studiengang Technomathematik, Universität Bremen, FB 3, April 2007.

[Ino82] Inoue, T.; Wang, Z.: Finite element analysis of coupled thermo-Âinelastic problem with phase transformation. In Int. Conf. Num. Meth. in Industrial Forming Processes, Wood, J. F. T.; Dand H.; Alexander, J. H. (Hrsg.), Pittmann, Pineridge Press, 1982.

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

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

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

[Koh94] Kohtz, D.: Wärmebehandlung metallischer Werkstoffe, VDI, Düsseldorf, 1994.

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

[Lar95] Larsson, S.; Mangard, M.: Determination of phase transformation kinetics when tempering martensitic hardened low alloy steels. LiTH-IKP-Ex-1234, Institut of Technology, Department of Mechanical Engineering, Linköping, Sweden, 1995.

[Leb84] Leblond, J. B.; Devaux, J.: A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effect of austenite grain size. Acta Met. 32 (1984), S. 137-146.

[Leb85] Leblond, J. B., Mottet, G., Devaux, J., Devaux, J. C.: Mathematical models of anisothermal phase transformations in steels, and predicted plastic behaviour, Materials Science and Technology, 1 (1985), S. 815-822.

[Leb86a] Leblond, J. B., Mottet, G., Devaux, J. C., 1986a „A theoretical and numerical approach to the plastic behavior of steels during phase transformations – I“, J. Mech. Phys. Solids, 34, 395.

[Leb86b] Leblond, J. B., Mottet, G., Devaux, J. C., 1986b, „A theoretical and numerical approach to the plastic behavior of steels during phase transformations – II“, J. Mech. Phys. Solids, 34, 411.

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

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

[Lem01] Lemaitre, J., 2001, „Handbook of Materials Behavior Models (Chapter 9.11-9.14)“, Academic Press, San Diego, USA.

[Mat07] The MathWorks, Matlab Online Manuals, The MathWorks Inc., 1994–2007, http://www.mathworks.com/

[Mio04] Miokovic, T., Schwarzer, J., Schulze, V., Vöhringer, O., Löhe, D.: Description of short time phase transformations during the heating of steels based on high–rate experimental data, J. de Physique IV 120 (2004) 591-598.

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

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

[Nag01] Nagayama, K.; Terasaki, T.; Tanaka, K.; Fischer, F. D.; Antretter, T.; Cailletaud, G.; Azzouz, F.: Mechanical properties of a Cr-Ni-Mo-Al-Ti maraging steel in the process of martensitic transformation. Mat. Science and Eng. A 308 (2001), S. 25-37.

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

[Pie00] Pietzsch, R.: Simulation des Abkühlverzuges von Stahlprofilen. Techniche Mechanik 20 (2000) 3, S. 265-274.

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

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

[Rét98] Réti, T.: Generalization of the Avrami model for the description of multi–phase transformations, Proc. of the 11th Intern. Congress of Intern. Federation of Heat treatment and Surface Engineering, vol. Iii, Florence, Italy, 109-117, 1998.

[Rét99] Réti, T.; Felde, I.: A non-linear extension of the additivity rule. Computational Material Science 15 (1999), S. 466-482.

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

[Rét04] Réti, T.: On the physical and mathematical interpretation of the isokinetic hypothesis, J. de Physique IV 120 (2004) 85-91.

[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), S. 361-417.

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

[Sch03] Schmidt, A.; Wolff, M.; Böhm, M.: Adaptive finite element simulation of a model for transformation induced plasticity in steel. Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 03-13, 2003, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

[Sch06] Schmidt, A., Suhr, B., Moshagen, T., Wolff, M., Böhm, M.: Adaptive Finite Element Simulations for Macroscopic and Mesoscopic Models, Materialwissenschaften und Werkstofftechnik, 37 (1), 2006, 142-146.

[Sei99] Seidel, W.: Werkstofftechnik, Carl Hanser Verlag München Wien, 1999.

[Shi04] Shi, W.; Zhang X.; Liu, Z.: Model of stress–induced phase transformation and prediction of internal stresses of large steel work-pieces during quenching, J. de Physique IV 120 (2004) 473-479.

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

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

[Suh05] Suhr, B.: Finite–Elemente–Methoden für die Simulation der Wärmebehandlung von Stahl unter Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität, Diplomarbeit im Studiengang Technomathematik, Universität Bremen, FB 3, Juni 2005.

[Sur04] Surm, H., Kessler, O., Hunkel, M., Hoffmann, F., Mayr, P.: Modelling the Ferrite/Carbide to austenite Transformation of Hypoeutectoid and Hypereutectoid Steels, J. de Physique IV 120 (2004) 111-119.

[Sys03] SYSWELD™, 2003, http://www.esi-group.com/SimulationSoftware/Welding_heat_treatment

[Tal06] Taleb, L., Petit, S.: „New investigations on transformation–induced plasticity and its interaction with classical plasticity“, Int. J. of Plasticity, 22, (2006) 110.

[Tan03] Tanaka, K., Teresaki, T., Goto, S., Antretter, T., Fischer, F.D., Cailletaud, G.: Effect of back stress evolution due to martensitic transformation on iso–volume fraction lines in a Cr-Ni-Mo-Al-Ti maraging steel, Materials Science and Engineering A341 (2003) 189-196.

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

[Vid94] Videau, J.-Ch., Cailletaud, G., Pineau, A., 1994, „Modélisation des effets mécaniques des transformations de phases pour le calcul de structures“, J. de Physique IV, Colloque C3, supplément au J. de Physique III, 4, 227.

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

[Wol03a] Wolff, M.; Böhm, M.: Umwandlungsplastizität bei Stählen im Konzept der Thermoelasto–Plastizität – modelliert mit dem Ansatz einer Zwischenkonfiguration. Technische Mechanik 23 (2003) 1, S. 29-48.

[Wol03b] 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.

[Wol03c] 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, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

[Wol03d] Wolff, M.; Böhm, M.; Dachkovski, S.; Löwisch, G.: Zur makroskopischen Modellierung von spannungsabhängigem Umwandlungsverhalten und Umwandlungsplastizität bei Stählen und ihrer experimentellen Untersuchung in einfachen Versuchen. Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 03-06, 2003, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

[Wol03e] Wolff, M.; Suhr, B.: Zum Vergleich von Massen– und Volumenanteilen bei der perlitischen Umwandlung des Stahls 100Cr6. Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 03-11, 2003, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

[Wol04] Wolff, M.; Böhm, M.; Schmidt, A.: Phase transitions and transformation–induced plasticity of steel in the framework of continuum mechanics. J. de Physique IV 120 (2004) 145-152.

[Wol05a] Wolff, M.; Böhm, M., Löwisch, G., Schmidt, A.: Modelling and testing of transformation–induced plasticity and stress–dependent phase transformations in steel via simple experiments, Computational Materials Sciences 32 (2005) 604-610.

[Wol05b] 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, 2005), 591-601, eds: Y. Wang, K. Hutter.

[Wol06a] Wolff, M., Böhm, M., Dalgic, M., Löwisch, G., Lysenko, N., Rath, J.: Parameter identification for a TRIP model with back stress, Computational Materials Sciences 37 (2006) 37-41.

[Wol06b] Wolff, M., Böhm, M., Schmidt, A.: Modelling of steel phenomena and its interactions – an internal–variable approach, Materialwissenschaften und Werkstofftechnik, 37 (1), 2006, 147-151.

[Wol06c] Wolff, M., Böhm, M., Dalgic, M., Löwisch, G., Rath, J.: TRIP and phase evolution for the pearlitic transformation of the steel 100Cr6 under step–wise loads, Materialwissenschaften und Werkstofftechnik, 37 (1), 2006, 128-133.

[Wol06d] Wolff, M. Böhm, M., Meier, S.: Modellierung der Wechselwirkung von Kohlenstoff–Diffusion und ferritischen Phasenumwandlungen für einen untereutektoiden unlegierten Stahl, Berichte aus der Technomathematik 06-04, 2006, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

[Wol06e] Wolff, M. Böhm, M.: Transformation–induced plasticity in steel – general modelling, analysis and parameter identification, Berichte aus der Technomathematik 06-02, 2006, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

[Wol06f] Wolff, M., Böhm, M.: Transformation–induced plasticity: Modelling and analysis in 3–d case with more than two phases, PAMM 6 (1) 2006, 415-416.

[Wol06g] Wolff, M., Acht, C., Böhm, M., Meier, S.: Modelling of carbon diffusion and ferritic phase transformations in an unalloyed hypoeutectoid steel, eingereicht zu Archives of Mechanics, 2006.

[Wol06h] Wolff, M., Böhm, M., Helm, D.: Material behavior of steel – modeling of complex phenomena and investigations on thermodynamic consistency, eingereicht zum Int. J. of Plast., 2006.

[Wol06i] Wolff, M., Böhm, M., Dalgic, M., Hüßler, I.: Evaluation of models for TRIP and stress–dependent transformation behaviour for the martensitic transformation of the steel 100Cr6, angenommen für CMS, 2006.

[Wol07a] Wolff, M., Böhm, M., Dalgic, M., Löwisch, G., Rath, J.: Validation of a TRIP model with backstress for the pearlitic transformation of the steel 100Cr6 under step–wise loads, Computational Materials Sciences 39 (2007), 49-54.

[Wol07b] Wolff, M., Frerichs, F.; Lysenko, N.: Bewerten von Modellen der Martensitbildung bei nichtmonotoner Abkühlung für den Stahl 100Cr6, Berichte aus der Technomathematik 07-01, 2007, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

[Wol07c] Wolff, M.; Böhm, M.; Boettcher, S.: Phase transformations in steel in the multi–phase case – general modelling and parameter identification, Berichte aus der Technomathematik 07-02, 2007, http://www.math.uni-bremen.de/zetem/reports/reports-liste.html

Adressen der Autoren:

Dr. Michael Wolff, Zentrum für Technomathematik, Fachbereich 3, Universität Bremen, Postfach 330440, D–28334 Bremen, mwolff@math.uni–bremen.de

Dipl.–Math.techn. Sören Boettcher, Zentrum für Technomathematik, Fachbereich 3, Universität Bremen, Postfach 330440, D–28334 Bremen, soerenb@math.uni–bremen.de

Prof. Dr. Michael Böhm, Zentrum für Technomathematik, Fachbereich 3, Universität Bremen, Postfach 330440, D–28334 Bremen, mbohm@math.uni–bremen.de

Dipl.–Math.techn. Inga Loresch, Stiftung Institut für Werkstofftechnik (IWT) Bremen, Badgasteiner Straße 2, D–28359 Bremen, loresch@lfm.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: 28. August 2007**

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.

06–05. Adrian Muntean:
Error bounds on a semi-discrete finite element approximation of the weak solution to a one phase moving-boundary system describing concrete carbonation,
Mai 2006.

06–06. Sergey Dashkovskiy, Björn S. Rüffer, Fabian R. Wirth:
Construction of ISS Lyapunov functions for networks,
Juli 2006.

06–07. Adrian Muntean, Michael Böhm:
Length scales in the concrete carbonation process and water barrier effect: a matched asymptotics approach,
September 2006.

06–08. Werner Wosniok, Hakan Aycil, Jens-J. Lau, Ronald Stöver:
Mathematische Modelle zur Realisierung repräsentativer Bauschuttprobennahmen und ihre Überprüfung in der Praxis,
Dezember 2006.

07–01. Michael Wolff, Friedhelm Frerichs, Natalja Lysenko:
Bewerten von Modellen der Martensitbildung bei nichtmonotoner Abkühlung für den Stahl 100Cr6,
Februar 2007.

07–02. Michael Wolff, Sören Boettcher, Michael Böhm:
Phase transformations in steel in the multi-phase case - general modelling and parameter identification,
Juni 2007.

07–03. Michael Wolff, Sören Boettcher, Michael Böhm, Inga Loresch:
Vergleichende Bewertung von makroskopischen Modellen für die austenitisch–perlitische Phasenumwandlung im Stahl 100Cr6,
Juli 2007.