

UNIVERSITÄT

BREMEN



Zentrum für Technomathematik

Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

**Bewerten von Modellen der Martensitbildung
bei nichtmonotoner Abkühlung
für den Stahl 100Cr6**

Michael Wolff

Friedhelm Frerichs

Natalja Lysenko

Report 07-01

Berichte aus der Technomathematik

Report 07-01

Februar 2007

Bewerten von Modellen der Martensitbildung bei nichtmonotoner Abkühlung für den Stahl 100Cr6

M. Wolff, F. Frerichs, N. Lysenko

Kurzfassung

Um das Verhalten von Stahlbauteilen im Zusammenhang mit der Wärmebehandlung zu simulieren, werden Modelle für die Phasenumwandlungen benötigt, die möglichst gut die Realität beschreiben. In der vorliegenden Arbeit werden anhand von Dilatometerdaten für den Wälzlagerstahl 100Cr6 verschiedene Modelle für die Martensitbildung vergleichend bewertet. Wir betrachten die Modelle nach Koistinen und Marburger, nach Leblond und Devaux sowie ihre Modifikationen, um ein zwischenzeitliches Halten oder Wiedererwärmen zu berücksichtigen. Des Weiteren werden für strang-gegossene und sprüh-kompaktierte Proben der Umwandlungsgrad mit dem Massen- und Volumenanteil verglichen.

Abstract

In order to simulate the behaviour of steel work-pieces in connection with heat treatment, one needs models of phase transformations which describe sufficiently well the reality. In the paper presented several models of martensite transformation are evaluated, based on dilatometer data of the bearing steel 100Cr6 (SAE52100). We consider the models due to Koistinen and Marburger, to Leblond and Devaux as well as their modifications in order to take temporary holding or reheating into account. Besides this, mass fraction, volume fraction and transformation degree will be compared for continuously cast and spray compacting probes.

Schlüsselworte

Martensitbildung, Umwandlungsmodelle, nichtmonotone Abkühlung, Bewerten von Modellen

Danksagung

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

1. Einführung

Die diffusionslose Umwandlung des Austenits in den Martensit beim Stahl wird mit verschiedenen Modellen beschrieben. Der bekannte Ansatz von Koistinen-Marburger [4, 6, 7, 14, 16, 21] gibt den Martensitanteil an, der sich aus dem zur Verfügung stehenden Austenit bei monotoner Abkühlung auf eine Temperatur unterhalb der Martensit-Starttemperatur bildet. Für nichtmonotone Abkühlverläufe sind in der Modellierung Modifikationen nötig. Die Modellierung und Simulation des Materialverhaltens von Stahlbauteilen während der Wärmebehandlung erfordert die Verwendung von Umwandlungsgesetzen in Form von Differentialgleichungen, die in das Gesamtmodell eingebunden werden. Wir verweisen hierzu auf [2, 9, 10, 13, 17, 19, 23, 26, 27] und die dort zitierte Literatur. Neben dem Modell von Koistinen-Marburger gibt es in der Literatur weitere Ansätze für die martensitische Umwandlung (vgl. z.B. [4, 12, 15, 28]). Allgemein wird die Qualität dieser Ansätze danach bewertet, wie „gut“ die vom Modell berechneten Phasenanteile die aus den Messdaten erhaltenen approximieren (bezüglich diffusionsgesteuerter Umwandlungen sei zu diesem Vorgehen auf [5, 18] verwiesen). Aus den Dilatometermessdaten wird meist über einen Proportionalitätsansatz der sogenannte Umwandlungsgrad bestimmt und als Volumenanteil der sich bildenden Phase (in dieser Arbeit des Martensits) angesehen. Genauere Analysen zeigen, dass dieser Umwandlungsgrad bei nicht-

isothermen Umwandlungen (wie im Falle der Martensitbildung) vom Volumenanteil abweicht. Alternativ zum Umwandlungsgrad werden daher aus den Messdaten – bei Kenntnis der Dichten der beteiligten Phasen als Funktionen der Temperatur – der Massen- und Volumenanteil berechnet und miteinander und mit dem Umwandlungsgrad verglichen. Als Konsequenz werden die Modellansätze anhand des Umwandlungsgrades und des Volumenanteils getestet.

In der vorliegenden Arbeit werden

- anhand von Dilatometermessdaten (und der metallographischen Untersuchung) der Massen- und Volumenanteil des sich bildenden Martensits sowie der Umwandlungsgrad berechnet und miteinander verglichen,
- die Martensit-Starttemperatur und der Koistinen-Marburger-Parameter mit alternativen Methoden bestimmt und verglichen,
- verschiedene Modelle für die Martensitbildung bewertet, indem die von den Modellen berechneten Phasenanteile mit den aus den Daten ermittelten verglichen werden,

In dieser Arbeit werden nur spannungsfreie Umwandlungen betrachtet. Zu Umwandlungen unter Spannungen und nach Vorverfestigung sei z.B. auf [1, 8, 9, 16, 20, 23 - 27] und die dort zitierten Quellen verwiesen.

2. Bestimmung des Martensitanteils aus den Messdaten

In dieser Arbeit wollen wir genau unterscheiden zwischen den Informationen, die direkt oder indirekt aus den Messdaten gewonnen werden (Dilatometerdaten und metallographische Analyse), und jenen Informationen, die unter Annahme eines speziellen Modells (z.B. des von Koistinen-Marburger) gewonnen werden.

2.1. Formeln zur Datenauswertung

Es wird angenommen, dass nur die beiden Phasen Austenit und Martensit auftreten. Unter Annahme einer linearen Mischungsregel für die Probenlänge des Phasengemisches (bezüglich der Volumenanteile) erhalten wir für den Volumenanteil des Martensits zum Zeitpunkt t :

$$(2.1) \quad p_{v2}(t) = \frac{l(\theta(t)) - l_1(\theta(t))}{l_2(\theta(t)) - l_1(\theta(t))}$$

Dabei sind l die aktuelle Länge (als Funktion der gemessenen Temperatur $\theta = \theta(t)$) und l_1, l_2 die Längen der Probe, wenn sie vollständig aus Austenit bzw. Martensit bestünde. In der Folge bezieht sich der Index 1 auf den Austenit und der Index 2 auf den Martensit. Die Größe auf der rechten Seite von (2.1) wird auch *Umwandlungsgrad* genannt. Während l_1 durch Interpolation der vor der Umwandlung gemessenen Längen erhalten wird, muss (für unvollständige Umwandlungen) l_2 aus der Länge l_g des Gemisches Martensit-Restaustenit berechnet werden. Unter der Annahme, dass bei moderatem Wiedererwärmen der Probe nach Erreichen der Raumtemperatur θ_{RT} sich die Phasenanteile nicht ändern, wenden wir die lineare Mischungsregel an und erhalten

$$(2.2) \quad l_g(\theta(t)) = l_1(\theta(t)) p_{v1}(\theta_{RT}) + l_2(\theta(t)) p_{v2}(\theta_{RT}),$$

woraus wegen

$$(2.3) \quad p_{v2}(\theta_{RT}) = 1 - p_{v1}(\theta_{RT})$$

die folgende Formel zur Ermittlung des Martensit-Anteils folgt:

$$(2.4) \quad p_{v2}(t) = (1 - p_{v1}(\theta_{RT})) \frac{l(\theta(t)) - l_1(\theta(t))}{l_g(\theta(t)) - l_1(\theta(t))}$$

Der Restaustenitgehalt $p_{v1}(\theta_{RT})$ ist metallographisch zu bestimmen (s. Punkt 2.2).

Bemerkung 1.1 Die Formeln (2.1) und (2.4) beruhen auf einer linearen Mischungsregel für die Längen, die sich *nicht* aus der Kontinuumsmechanik herleiten lässt. Aus diesem Grunde ist der Umwandlungsgrad in (2.1) bzw. (2.4) weder gleich dem Volumen- noch dem Massenanteil der sich bildenden Phase. Deshalb erhält der nach den Formeln (2.1) bzw. (2.4) berechnete Martensitanteil in der Folge den Index „ug“ (für Umwandlungsgrad). Bei vollständigen diffusionsgesteuerten Umwandlungen mit konstanter Umwandlungstemperatur ergibt sich der Umwandlungsgrad (2.1) durch Linearisierung aus dem Massenanteil (vgl. [22]).

Eine zu (2.4) alternative Formel kann aus der Kontinuumsmechanik hergeleitet werden, wenn die Probe als homogen (bezüglich Temperatur und Phasenverteilung) während der Umwandlung und isotrop angesehen wird (vgl. [22]). Zusätzlich zu den Dilatometerdaten werden die Dichte der Probe bei Raumtemperatur ρ_{RT} sowie die zugehörige Länge l_{RT} benötigt. Aufgrund der angenommenen Homogenität und Isotropie gilt der Zusammenhang zwischen Dichten und Längen

$$(2.5) \quad \frac{\rho_{RT}}{\rho(\theta)} = \left(\frac{l(\theta)}{l_{RT}}\right)^3,$$

wobei $\rho(\theta)$ und $l(\theta)$ zur gleichen Temperatur θ gehörende Dichte und Länge der Probe sind. Nach Ende der Austenitisierung und vor der Umwandlung stellt $\rho(\theta)$ die Dichte des Austenits als Funktion der Temperatur, nach (unvollständiger) Umwandlung während der moderaten Wiedererwärmung die des Gemisches Martensit-Restaustenit dar. Somit erhalten wir aus der gemessenen Länge und den Werten ρ_{RT} und l_{RT} die Dichte der Probe als Funktion der Temperatur (und somit auch der Zeit). Durch Extrapolation über den jeweiligen Bereich des alleinigen Vorliegens hinaus erhalten wir die Dichten des Austenits ρ_1 und des Gemisches ρ_g für den relevanten Temperaturbereich der gesamten Umwandlung.

Es gelten die linearen Mischungsregeln für die Dichte und für die reziproken Dichten (vgl. [22])

$$(2.6) \quad \rho = \rho_1 p_{v1} + \rho_2 p_{v2},$$

$$(2.7) \quad \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\rho_1} p_{m1} + \frac{1}{\rho_2} p_{m2},$$

dabei sind ρ , ρ_1 und ρ_2 entsprechend die Dichten des Phasengemisches, des Austenits und des Martensits, während p_{v1} und p_{v2} (p_{m1} und p_{m2}) die Volumenanteile (Massenanteile) des Austenits bzw. Martensits sind. Für die Volumen- und Massenanteile gelten die Bilanzen

$$(2.8) \quad p_{v1}(t) + p_{v2}(t) = 1, \quad p_{m1}(t) + p_{m2}(t) = 1 \quad \text{für } t \geq 0,$$

Aus (2.6), (2.8) sowie (2.7), (2.8) folgen dann Formeln für die Evolution des Volumen- bzw. Massenanteils des Martensits:

$$(2.9) \quad p_{v2}(t) = \frac{\rho_1(\theta(t)) - \rho(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_2(\theta(t))} \quad \text{für } t \geq 0,$$

$$(2.10) \quad p_{m2}(t) = \frac{\rho_2(\theta(t))}{\rho(\theta(t))} \cdot \frac{\rho_1(\theta(t)) - \rho(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_2(\theta(t))} \quad \text{für } t \geq 0.$$

Die Formeln (2.9) und (2.10) besagen, dass der Unterschied zwischen Volumen- und Masseanteil klein ist, wenn es auch die Dichteunterschiede der Phasen (bei gleichen Temperaturen) sind. Glücklicherweise ist das beim Stahl der Fall, so dass oft die Unterschiede zwischen Massen- und Volumenanteilen vernachlässigt werden (vgl. Punkt 2.3 sowie [22]). Für das Gemisch Martensit-Restaustenit gelten die Beziehungen (vgl. (2.6), (2.7)):

$$(2.11) \quad \rho_g(\theta(t)) = \rho_1(\theta(t)) p_{v1}(RT) + \rho_2(\theta(t)) p_{v2}(RT),$$

$$(2.12) \quad \frac{1}{\rho_g(\theta(t))} = \frac{1}{\rho_1(\theta(t))} p_{m1}(RT) + \frac{1}{\rho_2(\theta(t))} p_{m2}(RT).$$

Somit erhalten wir aus (2.9), (2.11) sowie aus (2.10), (2.12) entsprechend die Formeln

$$(2.13) \quad p_{v2}(t) = (1 - p_{v1}(\theta_{RT})) \frac{\rho_1(\theta(t)) - \rho(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_g(\theta(t))} \quad \text{für } t \geq 0,$$

$$(2.14) \quad p_{m2}(t) = (1 - \frac{\rho_1(\theta_{RT})}{\rho_g(\theta_{RT})} p_{v1}(\theta_{RT})) \frac{\rho_g(\theta(t))}{\rho(\theta(t))} \cdot \frac{\rho_1(\theta(t)) - \rho(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_g(\theta(t))} \quad \text{für } t \geq 0,$$

wobei der allgemeine Zusammenhang zwischen Massen- und Volumenanteil (vgl. [22])

$$(2.15) \quad p_{m1}(\theta_{RT}) = \frac{\rho_1(\theta_{RT})}{\rho_g(\theta_{RT})} p_{v1}(\theta_{RT})$$

berücksichtigt wurde. Mit Hilfe der Beziehung (2.5) kann die aktuelle Dichte $\rho(\theta(t))$ in den Formeln (2.9), (2.10), (2.13), (2.14) durch die aktuelle Länge der Probe ersetzt werden. Dabei können in (2.5) ρ_{RT} und l_{RT} durch $\rho_0 := \rho(\theta_0)$ und $l_0 := l(\theta_0)$ ersetzt werden, wobei ρ_0 und l_0 sich auf einen fest gewählten Zeitpunkt zwischen Austenitisierung und Umwandlung beziehen. Aus (2.5) und (2.13) folgt dann eine weitere Formel zur Bestimmung des Volumenanteils des Martensits

$$(2.16) \quad p_{v2}(t) = (1 - p_{v1}(\theta_{RT})) \frac{\rho_1(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_g(\theta(t))} \left\{ 1 - \frac{\rho_1(\theta_0)}{\rho_1(\theta(t))} \left(\frac{l(\theta_0)}{l(t)} \right)^3 \right\} \quad \text{für } t \geq 0.$$

Analog folgt aus (2.5) und (2.14)

$$(2.17) \quad p_{m2}(t) = (1 - \frac{\rho_1(\theta_{RT})}{\rho_g(\theta_{RT})} p_{v1}(\theta_{RT})) \frac{\rho_g(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_g(\theta(t))} \left\{ \frac{\rho_1(\theta(t))}{\rho_1(\theta_0)} \left(\frac{l(t)}{l(\theta_0)} \right)^3 - 1 \right\} \quad \text{für } t \geq 0.$$

Des weiteren ist in den Formeln (2.16) und (2.17) eine Linearisierung gemäß

$$(2.18) \quad \left(\frac{l(\theta_0)}{l(t)} \right)^3 = \left(\frac{l(t)}{l(\theta_0)} \right)^{-3} = \left(1 + \frac{l(t) - l(\theta_0)}{l(\theta_0)} \right)^{-3} \approx 1 - 3 \frac{l(t) - l(\theta_0)}{l(\theta_0)},$$

$$(2.19) \quad \left(\frac{l(t)}{l(\theta_0)} \right)^3 = \left(1 + \frac{l(t) - l(\theta_0)}{l(\theta_0)} \right)^3 \approx 1 + 3 \frac{l(t) - l(\theta_0)}{l(\theta_0)}$$

möglich, was zu

$$(2.20) \quad p_{v2}(t) = (1 - p_{v1}(\theta_{RT})) \frac{\rho_1(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_g(\theta(t))} \left\{ 1 - \frac{\rho_1(\theta_0)}{\rho_1(\theta(t))} \left(1 - 3 \frac{l(t) - l(\theta_0)}{l(\theta_0)} \right) \right\} \quad \text{für } t \geq 0,$$

$$(2.21) \quad p_{m2}(t) = (1 - \frac{\rho_1(\theta_{RT})}{\rho_g(\theta_{RT})} p_{v1}(\theta_{RT})) \frac{\rho_g(\theta(t))}{\rho_1(\theta(t)) - \rho_g(\theta(t))} \left\{ \frac{\rho_1(\theta(t))}{\rho_1(\theta_0)} \left(1 + 3 \frac{l(t) - l(\theta_0)}{l(\theta_0)} \right) - 1 \right\} \quad \text{für } t \geq 0$$

führt. Wie in Bemerkung 1.1 angesprochen, sind die Formeln (2.4) und (2.9) nicht identisch. Für vollständige diffusionsgesteuerte Umwandlungen bei *konstanter* Umwandlungstemperatur geben (2.4) und (2.20) den gleichen Wert. Die übliche Verwendung von (2.4) beruht auf der bequemer Handhabung, denn neben den Dilatometerdaten sind keine weiteren Informationen (bei vollständigen Umwandlungen) erforderlich. Zum numerischen Vergleich sei auf die Ergebnisse im Punkt 2.3 verwiesen.

2.2. Beschreibung von Material und Versuchsablauf, metallographische Analyse

Die chemische Zusammensetzung des verwendeten Stahls 100Cr6, stranggegossen bzw. sprühkompaktiert, ist in Tabelle 1 gegeben.

Herstellungsart	C	Si	Mn	S	Cr	Mo
strang-gegossen	0,97	0,21	0,43	0,004	1,50	0,089
sprüh-kompaktiert	0,88	0,22	0,43	0,008	1,56	0,048

Tabelle 1: Chemische Zusammensetzung des untersuchten Stahls 100Cr6 (SAE52100) in Massenprozent

Die Proben wurden in drei Minuten linear auf 850°C aufgeheizt und dann zehn Minuten gehalten. Es wurden vier Abkühlvorgänge durchgeführt, jeweils für eine stranggegossene und eine sprühkompaktierte Probe, nämlich

1. linear auf 40°C (sprühkompaktierte Probe 6057, stranggegossene 6056)
2. linear auf 150°C, 10s halten, linear auf 40°C (sprühkompaktierte Probe 5779, stranggegossene 5783)
3. linear auf 150°C, dann linear auf 100°C, 10s halten, linear auf 40°C (sprühkompaktierte Probe 5780, stranggegossene 5784)
4. linear auf 150°C, linear auf 100°C, dann linear auf 150°C in 5s, linear auf 100°C in 5s, linear auf 40°C (sprühkompaktierte Probe 5781, stranggegossene 5785)

Dabei waren die Abkühlungsraten (26 K/sec) gleich, außer beim zwischenzeitlichen Wiedererwärmen im 4. Abkühlpfad. Nach der Martensitbildung wurden alle Proben linear von 40°C auf 120°C erwärmt, um die thermische Dehnung des Gemisches Martensit-Restaustenit zu bestimmen. Aus technischen Gründen wurden statt der Raumtemperatur 40°C gewählt, was eine mögliche Fehlerquelle darstellt.

Nr. des Versuches	Interne Nummerierung	Abkühlungspfad	Art der Herstellung	Restaustenit (%)
1	6057	1	sprüh-kompaktiert	13
2	5779	2	sprüh-kompaktiert	14
3	5780	3	sprüh-kompaktiert	11
4	5781	4	sprüh-kompaktiert	14
5	6056	1	strang-gegossen	12
6	5783	2	strang-gegossen	14
7	5784	3	strang-gegossen	11
8	5785	4	strang-gegossen	10

Tabelle 2: Restaustenitgehalt und Erzeugungsart der einzelnen Proben

Für die Proben 1 und 5 wurde der Restaustenit als Durchschnitt der drei vorhandenen Werte für die jeweilige Herstellungsart berechnet.

2.3. Ergebnisse: Vergleich von Massen- und Volumenanteilen mit dem Umwandlungsgrad

Sämtliche Berechnungen wurden mit dem kommerziellen Programm MATLAB[®] ausgeführt. Um bessere Ergebnisse erzielen zu können, wurden die Werte für die Temperatur und für die Längenänderung mit Hilfe eines FIR-Tiefpassfilters entrauscht.

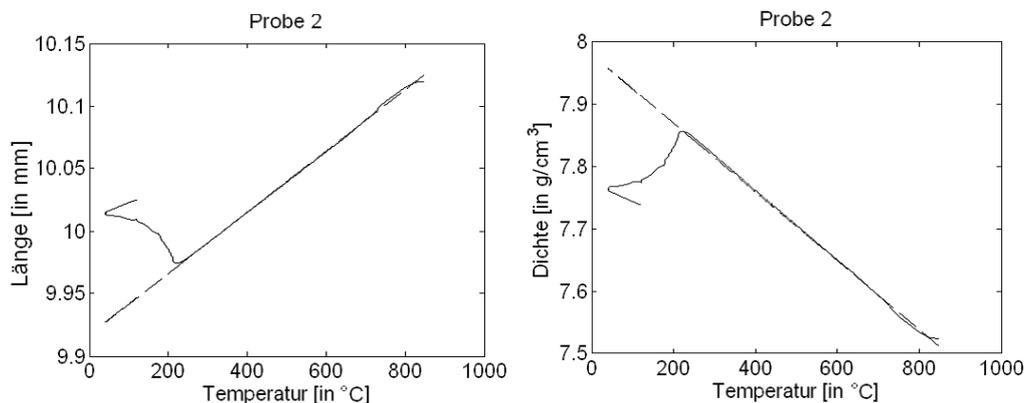


Abbildung 1: Aufgenommene Länge (links) und berechnete Dichte (rechts)

Die Abbildung 1 zeigt exemplarisch die entrauschte gemessene Länge (links) und die daraus nach der Formel (2.5) berechnete Dichte (rechts) für die Probe 5779. In Abbildung 2 sind Umwandlungsgrad, Volumen- und Massenanteile sowie linearisierte Volumen- und Massenanteile für dieselbe Probe dargestellt, wobei entsprechend die Formeln (2.4), (2.16), (2.17) sowie

(2.20), (2.21) benutzt wurden. Die 10s Haltedauer während der Abkühlung sind in Abb. 1 schwach und in Abb. 2 deutlich zu sehen. Wie Abb. 2 zeigt, sind die Unterschiede zwischen den einzelnen Kurven nicht besonders auffällig. Die Berechnung des relativen Fehlers bestätigt diese Vermutung für den Vergleich von Massen- und Volumenanteil.

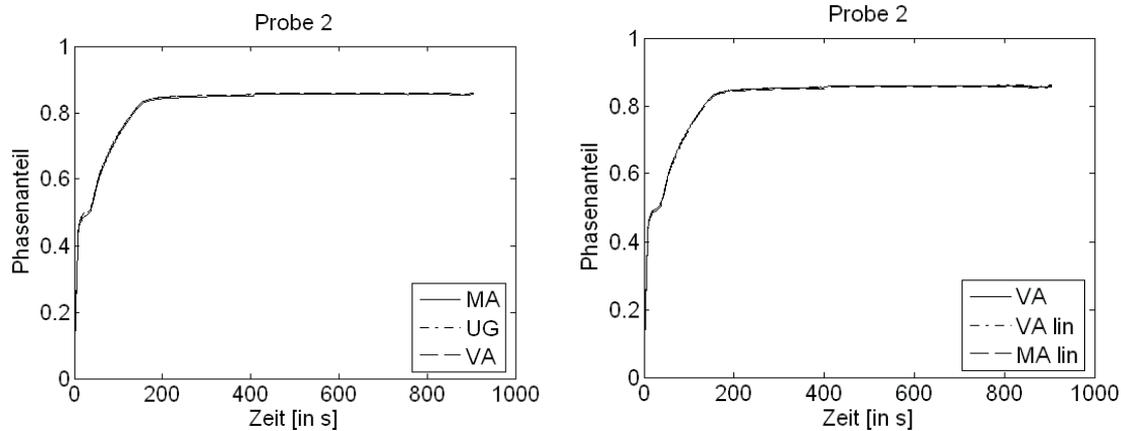


Abbildung 2: Umwandlungsgrad, Volumen- und Massenanteil sowie linearisierter Volumen- und Massenanteil

Zur besseren Vergleichbarkeit der Ergebnisse verwenden wir hier und in Folge die sogenannte normalisierte Standardabweichung (norm. SD), worunter wir die durch den Durchschnitt geteilte Standardabweichung verstehen wollen.

Probe	MA-VA	MA-UG	VA-UG	MA-MA lin.	VA-VA lin.	Herstellungsart
1	0,0192	0,670	0,666	9,93	11,4	sprüh-komp.
2	0,0222	0,209	0,182	0,0113	0,062	sprüh-komp.
3	0,0209	0,895	0,854	0,227	0,701	sprüh-komp.
4	0,0217	0,312	0,283	0,147	0,170	sprüh-komp.
Durchschnitt	0,0210	0,529	0,496	2,58	3,08	sprüh-komp.
Norm. SD	0,00131	0,323	0,317	4,90	5,54	sprüh-komp.
5	0,0188	0,914	0,877	11,7	11,8	strang-geg.
6	0,0220	0,189	0,163	0,0137	0,0570	strang-geg.
7	0,0205	0,784	0,747	0,639	0,640	strang-geg.
8	0,0204	0,298	0,271	0,180	0,196	strang-geg.
Durchschnitt	0,0204	0,546	0,514	3,13	3,17	strang-geg.
Norm. SD	0,00130	0,357	0,350	5,70	5,76	strang-geg.

Tabelle 3: Relative Fehler zwischen Massen- (MA) und Volumenanteilen (VA) und Umwandlungsgrad (UG) (Norm. SD := normalisierte Standardabweichung)

Wie Tabelle 3 zeigt (zweite Spalte), beträgt das Maximum des relativen Fehlers zwischen Massen- und Volumenanteil etwa 2,2%. Somit muss bei praktischen Anwendungen nicht zwischen diesen beiden Größen unterschieden werden, zumal stets Störeinflüsse vorhanden sind. Für die anderen Vergleiche in Tab. 3 kann der relative Fehler beträchtlich werden, was auf Kosten des Umwandlungsbeginns geht, bei dem alle Kurven in der Nähe von null verlaufen. Besonders zu Beginn einer (nicht-isothermen) Umwandlung kann der Umwandlungsgrad vom Massen- bzw. Volumenanteil beträchtlich abweichen. Der Umwandlungsgrad ist jedoch leichter zu berechnen. Über die Umwandlung gemittelt, sind die Unterschiede zwischen allen Kurven allerdings klein, wie auch die Abbildung 2 unterstreicht. Als erste Konsequenz aus den Ergebnissen in Tab. 3 verwenden wir in der Folge nicht die Formeln für den linearisierten Massen- bzw. Volumenanteil (2.20), (2.21). Die Herstellungsart der Proben hat offenbar keinen erkennbaren Einfluss auf die relativen Fehler.

3. Bestimmung der Martensit-Starttemperatur

Die Martensit-Starttemperatur (MS-Temperatur, hier abgekürzt durch θ_{ms} , verschiedentlich auch mit M_s) hängt wesentlich vom Kohlenstoffgehalt im Austenit, von wirkenden Spannungen (vgl. z.B. [1, 9, 16, 20, 25]), die wir in dieser Arbeit ausschließen, von den Legierungsbestandteilen sowie von chemischen Vorbehandlungen (vgl. [11]) ab. Die Schwankungen in der Starttemperatur in den Experimenten gleicher Herstellungsart lassen sich durch Inhomogenitäten in den Proben erklären.

Zur Bestimmung der Martensit-Starttemperatur θ_{ms} verwenden wir zwei Methoden. Für Temperaturen oberhalb von θ_{ms} ändern sich die Dichte und Länge der Probe in (fast) linearer Abhängigkeit von der Temperatur. Nach Einsetzen der Martensit-Bildung unterhalb von θ_{ms} zeigt die Kurve der Länge eine deutliche Abweichung von einer Geraden. Als Martensit-Starttemperatur kann zum einen die Temperatur genommen werden, bei der eine „erste Abweichung“ von der Geraden auftritt. Zum anderen kann die Temperatur gewählt werden, bei der ein Minimum der Länge in der Umgebung der Abweichung von der Geraden auftritt. Abbildung 3 zeigt diese beiden Möglichkeiten, besonders im vergrößerten Ausschnitt rechts.

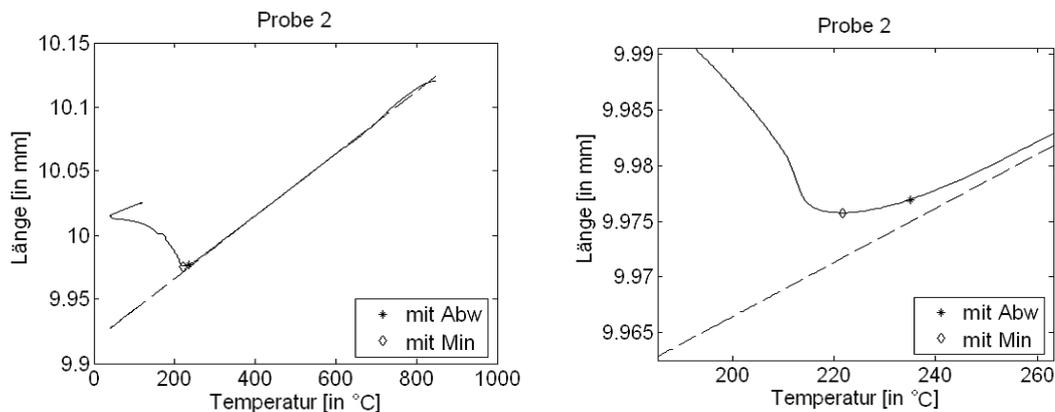


Abbildung 3: Zur Bestimmung der Martensit-Starttemperatur

Ein praktisches Problem besteht darin, dass trotz Entrauschens der Datensätze die diskreten Werte der gemessenen Länge auch im Austenitbereich nicht genau auf einer Geraden liegen. Daher wurde mittels MATLAB[®] die erste Abweichung als der Punkt ermittelt, an dem die Ordinate über ein vorgegebenes Maß von der Regressionsgeraden abweicht. Als Maß wurde 0,002 verwendet. Das Minimum wurde ebenso mit dem Programm MATLAB[®] bestimmt. In den Spalten 2 und 3 der Tabelle 4 sind die Ergebnisse aufgelistet.

Ein Abweichen von der „Austenitgeraden“ wird allgemein als Umwandlungsbeginn interpretiert. Daher sind die mit der Methode der „ersten Abweichung“ berechneten Werte näher an der Realität, wenngleich die Berechnung vom vorgegebenen Maß der Abweichung abhängt. Die strang-gegossenen Proben zeigen deutlich höhere Starttemperaturen als die sprüh-kompaktierten, was mit den stärkeren Inhomogenitäten der ersteren zu erklären ist, die die Umwandlung (zumindest an einigen Stellen der Probe) früher einsetzen lassen. Wir werden in der Folge die Starttemperaturen verwenden, die mit der Abweichungsmethode berechnet wurden.

Eine alternative Methode, die Starttemperaturen zu bestimmen, besteht darin, diese Werte zusammen mit denen des Parameters θ_{m0} (s. (4.1)) durch Optimierung (d.h., durch ein nicht-lineares Least-Square-Verfahren) zu erhalten, indem die Phasenanteile aus den Messdaten (Volumenanteil oder Umwandlungsgrad) mit denen von der Koistinen-Marburger-Gleichung (4.1) vorhergesagten in der L_2 -Norm verglichen werden. Das Ergebnis ist in den Spalten 4 und 5 der Tabelle 4 angegeben. Die simultan erhaltenen Werte für den Parameter θ_{m0} werden weiter unten angegeben. Wir bemerken, dass diese Bestimmung der MS-Temperatur – im Unterschied zu den beiden Methoden mit dem Minimum bzw. der „ersten Abweichung“ – bereits eine

Annahme über das Modell der Martensitbildung, hier der Koistinen-Marburger-Gleichung (4.1) erfordert. Ein Vergleich der Spalten 3 und 4 in Tabelle 4 zeigt, dass die durch Anpassung an die Koistinen-Marburger-Gleichung (4.1) (an den Volumenanteil) erhaltenen Starttemperaturen teils größer, teils kleiner sind als die durch die Abweichungsmethode erhaltenen. Die Verwendung des Umwandlungsgrades bei der Anpassung liefert größere Werte als die Verwendung des Volumenanteils.

Probe	θ_{ms} mit Minimum	θ_{ms} mit Abweichung	θ_{ms} angepasst an den VA	θ_{ms} angepasst an den UG	Herstellungsart
1	221,9	220,6	232,4	235,6	sprüh-komp.
2	221,7	235,0	231,9	233,6	sprüh-komp.
3	221,0	227,1	223,1	226,4	sprüh-komp.
4	221,6	226,5	227,5	229,4	sprüh-komp.
Durchschnitt	221,5	227,3	228,7	231,2	sprüh-komp.
Norm. SD	0,380	5,93	4,322	4,140	sprüh-komp.
5	239,0	236,2	242,9	246,7	strang-geg.
6	245,4	272,8	261,5	264,0	strang-geg.
7	247,5	268,1	258,2	262,0	strang-geg.
8	245,0	265,5	255,1	257,6	strang-geg.
Durchschnitt	244,2	260,7	254,4	257,6	strang-geg.
Norm. SD	3,63	16,6	8,107	7,732	strang-geg.

Tabelle 4: Martensit-Starttemperaturen für sprühkompaktierte und stranggegossene Proben mit alternativer Berechnungsart aus den Messdaten (Spalten 2 und 3) sowie durch Anpassung an die K-M-G (4.1) (Spalten 4 und 5).

4. Testen und Bewerten einiger Modelle der Martensitbildung

Bisher wurden keinerlei spezifische Modelle der martensitischen Umwandlung verwendet (bis auf die alternative Bestimmung von θ_{ms} durch Anpassen, s. Tab. 4). Jetzt soll untersucht werden, wie gut verschiedene derartige Modelle die Martensitbildung beschreiben. Dazu werden die aus den Messdaten gewonnenen Größen Umwandlungsgrad, Massen- und Volumenanteil mit dem nach den Modellen zu erwartenden Volumenanteil verglichen. Gewöhnlich wird ein Umwandlungsmodell als „gut“ bewertet, wenn die Abweichung „klein“ bzw. kleiner als bei anderen Modellen ist.

4.1. Beschreibung der Modelle

Nach Koistinen / Marburger [4, 6, 7, 14, 16, 21, 28] bildet sich bei Abkühlung auf eine Temperatur θ kleiner als die Martensit-Starttemperatur θ_{ms} folgender Martensit(volumen-)anteil (aus angenommenem allein vorhandenem Austenit) gemäß der *Koistinen-Marburger-Gleichung*

$$(4.1) \quad \bar{p}_2(\theta) = 1 - \exp\left(-\frac{\theta_{ms} - \theta}{\theta_{m0}}\right).$$

Dabei ist θ_{m0} ein positiver (temperaturunabhängiger, jedoch legierungsabhängiger)

Materialparameter. Sind der Restaustenitgehalt (und damit $\bar{p}_2(\theta_{RT})$ [= Martensitanteil bei Raumtemperatur θ_{RT}]) sowie θ_{ms} bekannt, so kann aus der Formel (4.1) θ_{m0} bestimmt werden. Für weitere Zwecke kann dann jeweils für die stranggegossenen und die sprühkompaktierten Proben der Durchschnitt dieser Werte verwendet werden (vgl. Tab. 5). In der Folge schreiben wir für den nach den verschiedenen Umwandlungsmodellen berechneten Phasenanteil des Martensits nur p_2 . Die Formel (4.1) sagt nichts über die Evolution der Martensitbildung aus.

Experimente zeigen, dass diese „sehr schnell“ verläuft. Oft wird bei der Modellierung gekoppelter Vorgänge eine Aussage über die Evolution in Form einer Differentialgleichung gebraucht. Um eine solche zu erhalten, nehmen wir einen monoton fallenden Temperaturverlauf

$\theta = \theta(t) (\leq \theta_{ms})$ an und unterstellen, dass sich zu jeder Zeit t der Martensitanteil $\bar{p}_2(\theta(t))$ „sehr schnell bildet“. In diesem Fall würde (4.1) auch näherungsweise die Evolution des Martensitanteils beschreiben, also

$$(4.2) \quad p_2(t) = 1 - \exp\left(-\frac{\theta_{ms} - \theta(t)}{\theta_{m0}}\right),$$

mit der Anfangsbedingung

$$(4.3) \quad p_2(0) = 0$$

sowie der zusätzlichen Bedingung

$$(4.4) \quad \theta(0) = \theta_{ms}.$$

Aus (4.2) erhalten wir durch Differentiation die *Koistinen-Marburger-Differentialgleichung*

$$(4.5) \quad p_2'(t) = (1 - p_2(t)) \frac{-\theta'(t)}{\theta_{m0}} \quad (p_2'(t) := \frac{d}{dt} p_2(t))$$

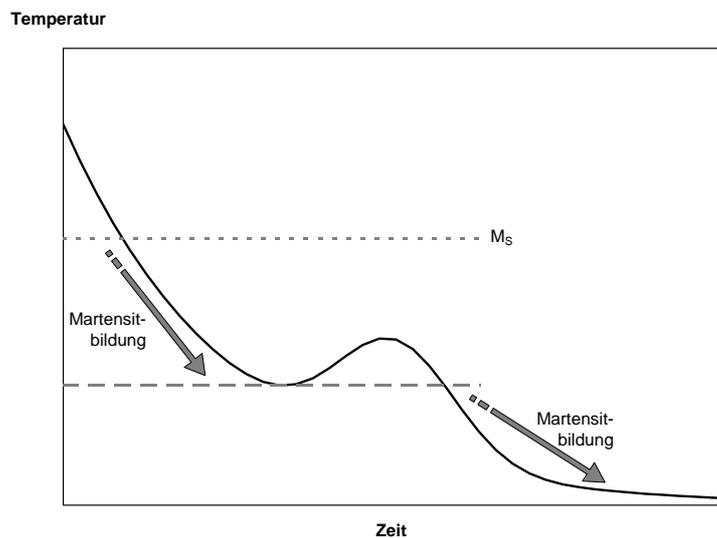


Abbildung 4: Bereiche der Martensit-Bildung

Bei der Verwendung der Differentialgleichung (4.5) ist nur die Anfangsbedingung (4.3) erforderlich, was insbesondere bei der Modellierung von komplexen, gekoppelten Aufgaben der Wärmebehandlung von großem Vorteil ist. Offenbar ist (4.2) die einzige Lösung zu (4.3) – (4.5), solange die Temperatur θ unterhalb von θ_{ms} bleibt. Ist der Abkühlverlauf (unterhalb θ_{ms}) *nicht streng monoton fallend*, so zeigen Experimente (vgl. [3]), dass sich erst dann weiterer Martensit bilden kann, wenn die Temperatur unter ihr letztes Minimum fällt (s. Abbildung 4). Für diesen allgemeinen Fall müssen wir die Gleichung (4.5) geeignet modifizieren, indem die aktuelle Temperatur θ durch die Größe

$$(4.6) \quad \theta^*(t) := \min_{0 \leq s \leq t} \{\theta(s)\}$$

ersetzt wird. Im Ergebnis erhalten wir die Gleichung

$$(4.7) \quad p_2'(t) = (1 - p_2(t)) \frac{-1}{\theta_{m0}} \frac{d}{dt}(\theta^*(t)),$$

zu der die Anfangsbedingung (4.3) zu wählen ist. Gemäß (4.7) kann Martensit (zum Zeitpunkt t) nur gebildet werden kann, wenn

$$(4.8) \quad \theta'(t) < 0 \quad \text{und} \quad \theta(t) = \theta^*(t).$$

gelten. Darüber hinaus muss natürlich

$$(4.9) \quad \theta(t) < \theta_{ms}$$

sein. Um (4.9) zu berücksichtigen, wird (4.7) in folgender Weise zur *modifizierten Koistinen-Marburger-Differentialgleichung* ergänzt:

$$(4.10) \quad p_2'(t) = (1 - p_2(t)) \frac{-1}{\theta_{m0}} \frac{d}{dt}(\theta^*(t)) H(\theta_{ms} - \theta(t)).$$

Dabei ist H die Heaviside-Funktion ($H(s) := 1$ für $s > 0$, sonst $H(s) := 0$). Es wurde von Leblond und Devaux in [15] vorgeschlagen, für die Martensitbildung eine lineare Differentialgleichung zu Grunde zu legen, nämlich

$$(4.11) \quad p_2'(t) = \frac{\bar{p}_2(\theta(t)) - p_2(t)}{\mu},$$

mit der Anfangsbedingung (4.3), wobei $\mu > 0$ ein temperatur-unabhängiger Materialparameter und $\bar{p}_2(\theta(t))$ der der aktuellen Temperatur entsprechende Wert nach (4.1) sind. In (4.11) wird unterstellt, dass die aktuelle Temperatur unterhalb θ_{ms} liegt. Ist dem nicht so, so ist in folgender Weise zu modifizieren:

$$(4.12) \quad p_2'(t) = \frac{\bar{p}_2(\theta(t)) - p_2(t)}{\mu} H(\theta_{ms} - \theta(t)).$$

Martensit kann nur gebildet werden, wenn sein aktueller Anteil nicht den Wert nach (4.1) übersteigt. Unter Berücksichtigung dessen gelangen wir zur *Differentialgleichung nach Leblond-Devaux*

$$(4.13) \quad p_2'(t) = \max\{0, \bar{p}_2(\theta(t)) - p_2(t)\} \frac{1}{\mu} H(\theta_{ms} - \theta(t)).$$

Ein Nachteil von (4.13) ist, dass ein Aussetzen der Martensitbildung während einer zwischenzeitlichen Erwärmung (vgl. Abbildung 4) *nicht* berücksichtigt wird. Der Vorteil ist jedoch, dass (4.13) ohne Zeitableitung der Temperatur und ohne θ^* gemäß (4.6) auskommt, was ein großer (numerischer) Vorteil ist. Überdies ergibt (4.1), dass mit steigender Temperatur der Gleichgewichtsanteil sinkt, so dass der in (4.13) enthaltene Fehler etwas kompensiert wird (vgl. Abb. 7). Die Gleichung hat den weiteren Vorteil, sich gut in allgemeinere Modelle für Mehrphasensysteme einzufügen (zur Diskussion sei hierzu auf [23, 26-28] verwiesen). In den Arbeiten [2, 13] wird die Gleichung (4.13) bei einer Aufgabe des Laserhärtens zufriedenstellend verwendet. Es ist natürlich möglich, die Funktion θ^* im Leblond-Ansatz zu verwenden. Unter Berücksichtigung von (4.8), (4.9) ergibt sich die *modifizierte Leblond-Devaux-Differentialgleichung*

$$(4.14) \quad p_2'(t) = \frac{\bar{p}_2(\theta^*(t)) - p_2(t)}{\mu} H\left(-\frac{d}{dt}(\theta^*(t))\right) H(\theta_{ms} - \theta(t)),$$

wiederum zusammen mit der Anfangsbedingung (4.3).

Bemerkungen 4.1 (i) Gegebenenfalls ist die Heaviside-Funktion durch eine stetige Funktion näherungsweise zu ersetzen, um Probleme bei der Simulation zu vermeiden (vgl. z.B. [12]).

(ii) Einflüsse von Spannungen und plastischer Dehnung der Austenits vor der Umwandlung (sogenannte Vorverfestigung) können durch Modifikationen der aufgeführten Modelle berücksichtigt werden (vgl. z.B. [23, 26-28]).

(iii) Die hier dargestellten Modelle gehen von Situationen aus, in denen außer Austenit und Martensit keine weiteren Phasen auftreten. Anderenfalls muss in den obigen

Differentialgleichungen die Differenz $(1 - p_2(t))$ durch den aktuellen Austenitanteil ersetzt werden (vgl. [27] für Diskussionen).

(iv) Die von Wildau [21] vorgeschlagene Modifizierung der K-M-Gleichung gemäß

$$(4.15) \quad \bar{p}_2(\theta) = 1 - \exp\left(-\frac{(\theta_{ms} - \theta)^n}{\theta_{m1}}\right)$$

mit den Parametern $\theta_{m1} > 0$ und $n > 0$ wird von uns nicht weiter betrachtet, da der angepasste Parameter n bei eins liegt, womit sich aus (4.15) wieder näherungsweise (4.1) ergibt. Zu weiteren Modifikationen der Koistinen-Marburger-Gleichung (4.1) sei auf [4] und die dort zitierten Quellen verwiesen.

4.2. Ergebnisse: Testen und Bewerten der Modelle

Das Testen und Bewerten geschieht zuerst „innerhalb“ des jeweiligen Modells, indem die Ergebnisse miteinander verglichen werden, bei denen zum einen individuell berechnete Parameter und zum anderen deren entsprechende Durchschnittswerte verwendet werden. Im Kapitel 4.2.5 werden die Modelle untereinander verglichen.

4.2.1. Die Koistinen-Marburger-Differentialgleichung

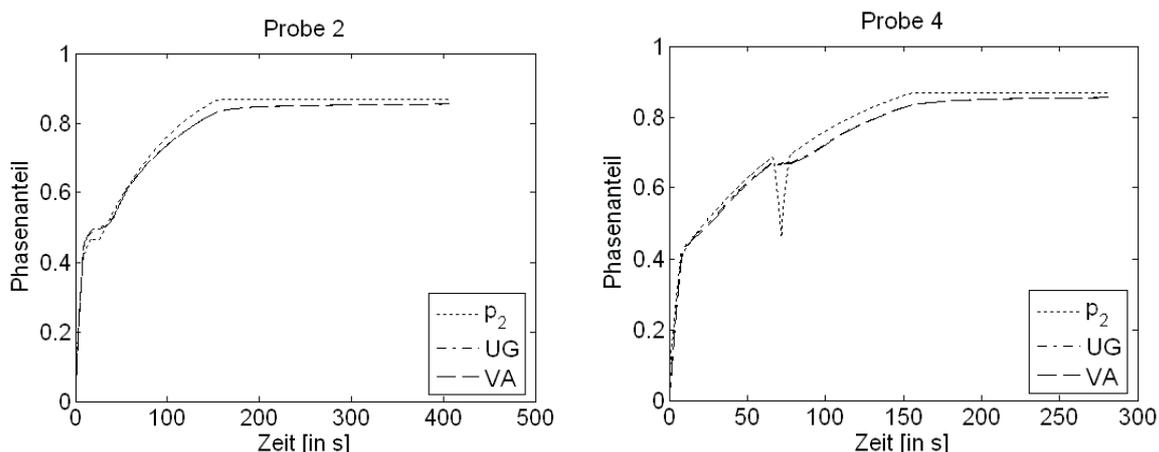


Abbildung 5: Volumenanteil (VA), Umwandlungsgrad (UG) sowie nach der K-M-DG (4.5) berechneter Phasenanteil p_2 für zwei Versuche

Zuerst bemerken wir, dass wegen der mathematischen Äquivalenz zwischen der K-M-Gleichung (4.1) und der K-M-Differentialgleichung (4.5) (bei Temperaturen unterhalb θ_{ms}) beide Gleichungen nur minimale Unterschiede liefern, die in der Numerik begründet sind. Daher konzentrieren wir uns auf die DG (4.5). Sind die MS Temperaturen und der Restaustenitgehalt der Proben bekannt, lässt sich der Parameter θ_{m0} für jede Probe mit Hilfe der K-M-Gleichung (4.1) berechnen. Tabelle 5 (Spalte 2) gibt das Resultat an, wobei *nur* die nach der „Abweichungsmethode“ ermittelten MS Temperaturen verwendet wurden (s. Tab. 4, Spalte 3).

Alternativ kann der Parameter θ_{m0} zusammen mit der MS Temperatur θ_{ms} (vgl. Tabelle 5) mit Hilfe der K-M-Gleichung (4.1) angepasst werden. Das ergibt die 3. und 4. Spalten in Tabelle 5.

Für die sprühkompaktierten Proben führt die Anpassung des Parameters θ_{m0} zu größeren, bei den strang-gegossenen zu kleineren Werten. Die aus der Verwendung von Umwandlungsgrad bzw. Volumenanteil bei der Anpassung resultierenden Unterschiede fallen geringer aus.

Wie die Abbildung 5 zeigt, ist die K-M-DG (4.5) ungeeignet, die zwischenzeitliche Wiedererwärmung im Versuch 4 adäquat zu modellieren. Es wird ein beträchtlicher Rückgang des Martensitanteils berechnet, der jedoch nicht auftritt.

Probe	θ_{m0} berechnet aus der K-M-G (4.1)	θ_{m0} optimiert an VA	θ_{m0} optimiert an UG	Herstellungsart
1	88,5	98,3	99,5	Sprüh-komp.
2	99,2	100	101	Sprüh-komp.
3	84,8	88,2	89,2	Sprüh-komp.
4	94,9	94,7	95,5	Sprüh-komp.
Durchschnitt	91,8	95,3	96,3	Sprüh-komp.
Norm. SD	6,44	5,24	5,31	Sprüh-komp.
5	88,9	94,4	95,6	strang-geg.
6	118	106	108	strang-geg.
7	103	100	101	strang-geg.
8	98,0	90,9	92,1	strang-geg.
Durchschnitt	102	97,7	99,1	strang-geg.
Norm. SD	12,4	6,67	6,89	strang-geg.

Tabelle 5: Parameter θ_{m0} , erhalten aus der K-M-Gleichung (4.1) mittels θ_{ms} aus Tabelle 5 (Spalte 3) sowie durch Anpassung an den Volumenanteil bzw. an den Umwandlungsgrad

In Abbildung 5 und Tabelle 6 ist p_2 der Martensitanteil, der mit der K-M-DG (4.5) berechnet wurde. Dabei werden θ_{ms} nach der Abweichung (3. Spalte in Tab. 4) sowie die mit (4.1) berechneten θ_{m0} (2. Spalte in Tab. 5) benutzt. Die Spalten 2 und 3 in Tabelle 6 geben die L_2 -Norm zwischen berechneten Martensitanteil und Volumenanteil bzw. Umwandlungsgrad an. In den Spalten 4 und 5 werden bei diesem Vergleich die jeweiligen Durchschnittswerte der Parameter (für die Proben gleicher Herstellung) benutzt.

Probe	Verwendung individueller θ_{ms} und θ_{m0}		Verwendung der Durchschnittswerte	
	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.5) und VA	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.5) und UG	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.5) und VA	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.5) und UG
1	0,0318	0,037	0,0234	0,0249
2	0,0158	0,014	0,0205	0,0202
3	0,0310	0,0232	0,0126	0,0109
4	0,0271	0,0268	0,0320	0,0308
Durchschnitt	0,0264	0,0254	0,0221	0,0217
Norm. SD	0,00738	0,00955	0,00800	0,00838
5	0,0228	0,0275	0,0413	0,0337
6	0,0280	0,0260	0,0318	0,0306
7	0,0241	0,0196	0,0168	0,0165
8	0,0337	0,0309	0,0314	0,0316
Durchschnitt	0,0271	0,0260	0,0303	0,0281
Norm. SD	0,00489	0,00475	0,0101	0,00784

Tabelle 6: Vergleich der L_2 -Normen der Differenzen von nach (4.5) berechneten Martensitanteil mit VA bzw. UG unter Verwendung der zu den einzelnen Versuchen optimierten Parameter sowie unter Verwendung der Durchschnittswerte

In der 2. und 3. Spalte von Tab. 6 ist angegeben, wie gut sich die einzelnen Versuche durch die K-M-DG (4.5) approximieren lassen, wenn die jeweiligen „individuellen“ Parameter genommen werden. Realistischer ist es natürlich, die Bewertung unter Verwendung der *Durchschnittswerte*

für θ_{ms} und θ_{m0} (für die gleiche Herstellungsart der Proben) durchzuführen, wie es in der 4. und 5. Spalte von Tabelle 6 geschieht.

Ein Vergleich der Spalten 2 und 3 mit den Spalten 4 und 5 ergibt kein eindeutiges Bild. Eine Verwendung der Durchschnitte der Parameter θ_{ms} und θ_{m0} anstelle der individuell ermittelten führt in der Tendenz nicht zu einer Verschlechterung, d.h., einer größeren Abweichung der Kurven in der L_2 -Norm. Diese Aussage ist insbesondere für Anwendungen, z.B. für Simulationen von Bauteilversuchen, interessant, da in diesem Falle nur mit Durchschnittswerten gerechnet werden kann.

4.2.2. Die modifizierte Koistinen-Marburger-Differentialgleichung

Jetzt soll die modifizierte K-M-DG (4.10) in analoger Weise untersucht werden. Die Abbildung 6 zeigt, dass die während der Zwischenerwärmung angehaltene Martensitbildung bei der Probe 4 durch die modifizierte K-M-DG (4.10) beschrieben wird (vgl. das rechte Bild in Abb. 6). Es werden die gleichen Parameter θ_{ms} und θ_{m0} wie in Tabelle 6 verwendet. Der Vergleich unter Zuhilfenahme der für jeden Versuch individuellen Parameter ergibt die Spalten 2 und 3 in Tabelle 7.

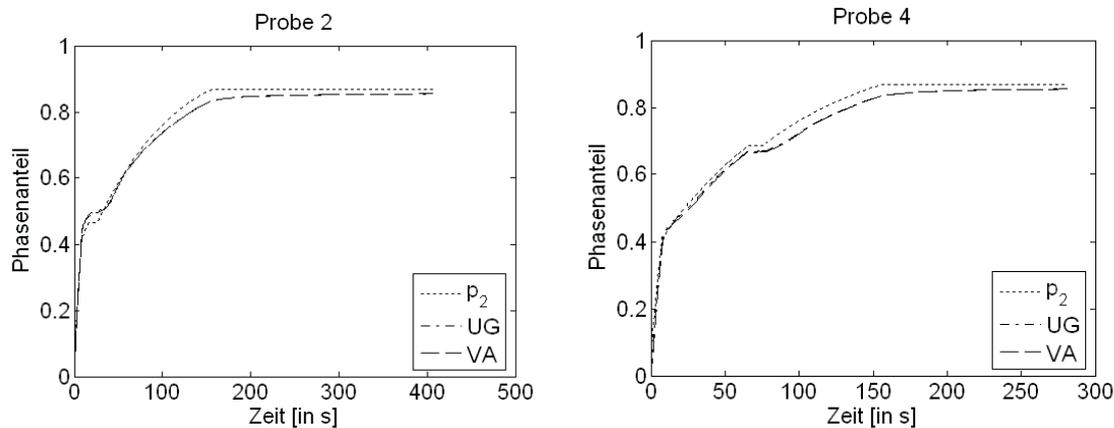


Abbildung 6: Volumenanteil (VA), Umwandlungsgrad (UG) sowie nach der modifizierten K-M-DG (4.10) berechneter Phasenanteil p_2 für zwei Versuche

Ähnlich wie bei der K-M-DG (4.5) ist die Situation bei Verwendung der modifizierten K-M-DG (4.10). Ein Vergleich der Spalten 2 und 3 mit den Spalten 4 und 5 in Tabelle 7 zeigt keinen eindeutigen Vor- oder Nachteil für die Verwendung der Durchschnittswerte der Parameter.

Probe	Verwendung individueller θ_{ms} und θ_{m0}		Verwendung der Durchschnittswerte	
	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.10) und VA	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.10) und UG	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.10) und VA	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.10) und UG
1	0,0318	0,0374	0,0234	0,0249
2	0,0158	0,0144	0,0206	0,0203
3	0,0310	0,0232	0,0126	0,0108
4	0,0153	0,0141	0,0254	0,0233
Durchschnitt	0,0235	0,0223	0,0205	0,0198
Norm. SD	0,00913	0,0110	0,00563	0,0063
5	0,0228	0,0275	0,0413	0,0337
6	0,0279	0,0260	0,0318	0,0306
7	0,0241	0,0197	0,0168	0,0165
8	0,0295	0,0259	0,0211	0,0209
Durchschnitt	0,0261	0,0248	0,0278	0,0254
Norm. SD	0,00312	0,00348	0,0110	0,00804

Tabelle 7: Vergleich der L_2 -Normen der Differenzen von nach (4.10) berechneten Martensitanteil mit VA bzw. UG unter Verwendung der zu den einzelnen Versuchen optimierten Parameter sowie unter Verwendung der Durchschnittswerte

4.2.3. Die Leblond-Devaux-Differentialgleichung

In analoger Weise soll nun die Leblond-Devaux-Differentialgleichung (4.13) untersucht werden. Die Abbildung 7 zeigt, dass während der Zwischenerwärmung ein Rückgang des Martensitanteils berechnet wird. Dieser fällt jedoch wesentlich geringer aus als beim Modell (4.1) bzw. (4.5).

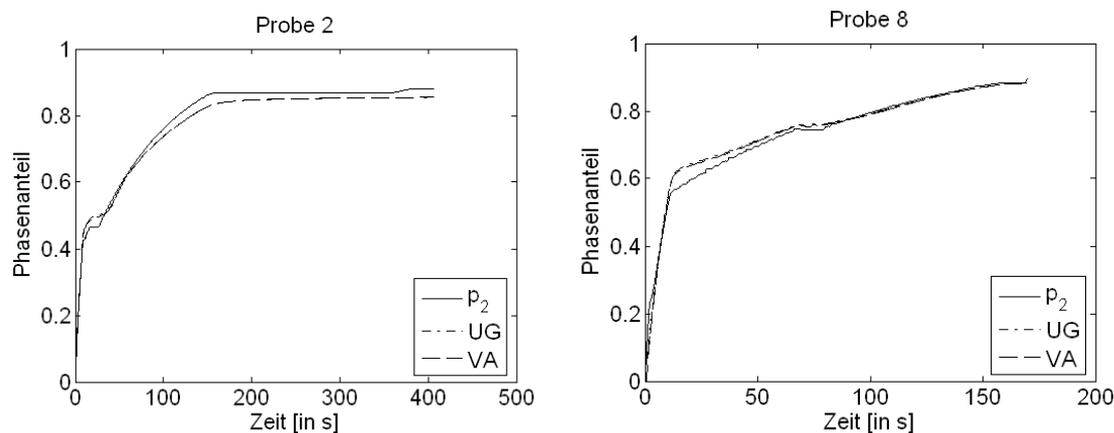


Abbildung 7: Volumenanteil (VA), Umwandlungsgrad (UG) sowie nach der L-D-DG (4.13) berechneter Phasenanteil p_2 für zwei Versuche

Der Parameter μ im Modell von Leblond und Davaux wurde mit einer nicht-linearen Least-Square-Methode in den MATLAB-Routinen angepasst. Dabei wird die aus den Messdaten erhaltene Kurve (Volumenanteil oder Umwandlungsgrad) mit der von einem Parameter abhängigen Lösung der DG (4.13) verglichen. Als Startwert wurde der Wert

$$(4.16) \quad \mu_0 := -\frac{\theta'(0)}{\theta_{m0}}$$

gewählt. Ein formaler Vergleich von (4.10) und (4.13) suggeriert eher den reziproken Wert zu (4.16). Eine genauere Analyse zeigt, dass die nichtlineare Optimierungsaufgabe Ergebnisse liefert, die vom Startwert abhängen. Es zeigt sich aber an den Ergebnissen (s. Tab. 8, 9), dass der Startwert in (4.16) praktikabel ist. Wir verwenden wiederum die Durchschnitte der MS-Temperaturen θ_{ms} nach der „Abweichungsmethode“ (Tab. 4, Spalte 3) sowie der Werte für θ_{m0} (Tab. 5, Spalte 2). Zur Anpassung nach der Least-Square-Methode kann der Volumenanteil oder der Umwandlungsgrad benutzt werden. Die Rechnungen ergeben nur sehr geringe Unterschiede, so dass wir in Tabelle 8 nur die Werte von μ aufnehmen, die durch Vergleich mit dem Volumenanteil angepasst wurden. Die Werte zeigen keine großen Schwankungen für die gleiche Herstellungsart.

Probe	Parameter μ , angepasst an den VA
1	0,145
2	0,144
3	0,164
4	0,153
Durchschnitt	0,151
Norm. SD	0,00909
5	0,169
6	0,171
7	0,165
8	0,165
Durchschnitt	0,168
Norm. SD	0,00325

Tabelle 8: Werte des Parameters μ in (4.13), angepasst an den VA unter Verwendung der entsprechenden Durchschnitte für θ_{ms} und θ_{m0}

Probe	Verwendung individueller Parameter		Verwendung der Durchschnittswerte	
	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.13) und VA	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.13) und UG	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.13) und VA	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.13) und UG
1	0,0230	0,0250	0,0840	0,0757
2	0,0219	0,0217	0,0622	0,0603
3	0,0167	0,0146	0,0815	0,0717
4	0,025	0,0231	0,0779	0,0745
Durchschnitt	0,0216	0,0211	0,0764	0,0705
Norm. SD	0,00356	0,00455	0,0098	0,00705
5	0,0395	0,0317	0,0394	0,0317
6	0,0312	0,0303	0,0310	0,0300
7	0,0162	0,0165	0,0160	0,0163
8	0,0202	0,0206	0,0259	0,0263
Durchschnitt	0,0268	0,0248	0,0280	0,0261
Norm. SD	0,0106	0,00742	0,00984	0,00690

Tabelle 9: Vergleich der L_2 -Normen der Differenzen von nach (4.13) berechneten Martensanteil mit VA bzw. UG unter Verwendung der zu den einzelnen Versuchen optimierten Parameter sowie unter Verwendung der Durchschnittswerte

Die Tabelle 9 enthält – analog zu den Tabellen 6 und 7 – die L_2 -Normen der Differenzen zwischen den nach (4.13) berechneten Phasenanteilen und dem Volumenanteil bzw. dem Umwandlungsgrad, wobei wiederum neben den individuellen Werten für μ auch die Durchschnitte genommen werden.

Ein Vergleich zwischen den Spalten 2 und 3 sowie 4 und 5 in Tabelle 9 zeigt, dass die mit den Durchschnittswerten des Parameters μ berechneten Phasenanteile nach der L-D-DG (4.13) bei den sprüh-kompaktierten Proben (1 bis 4) eine wesentlich größere Abweichung zum Experiment besitzen. Bei den strang-gegossenen Proben gibt es kein klares Bild. Ein Grund dafür kann sein, dass diese Proben stärkere Inhomogenitäten besitzen, was zu sich überlagernden Störungen führt.

4.2.4. Die modifizierte Leblond-Devaux-Differentialgleichung

Abschließend soll die modifizierte Leblond-Devaux-Differentialgleichung (4.14) untersucht werden. Wie die Abb. 8 zeigt, wird jetzt die durch die Zwischenerwärmung unterbrochenen Martensitbildung vom Modell berücksichtigt.

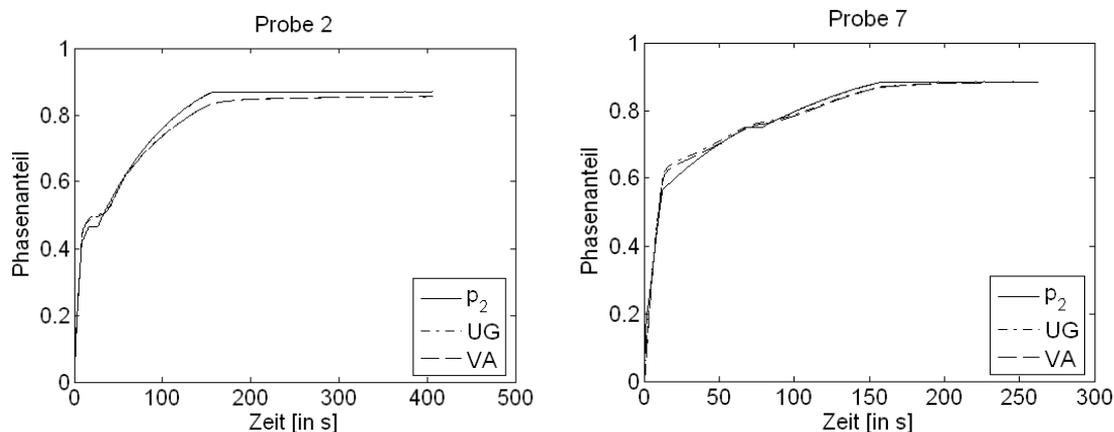


Abbildung 8: Volumenanteil (VA), Umwandlungsgrad (UG) sowie nach der modifizierten L-D-DG (4.14) berechneter Phasenanteil p_2 für zwei Versuche

Unter Verwendung der im vorigen Punkt erhaltenen individuellen Werte für den Parameter μ können die L_2 -Normen der Differenzen zwischen dem nach (4.14) berechneten Martensitanteil p_2 und dem Volumenanteil bzw. dem Umwandlungsgrad berechnet werden (s. Tab. 10).

Das Berechnen des Martensitanteils mit der modifizierten L-D-DG (4.14) ergibt ein ähnliches Bild wie bei der einfachen L-D-DG (4.13). Während für die sprüh-kompaktierten Proben (1 bis 4) die Abweichungen bei Verwenden des Durchschnittsparameters deutlich größer werden, liegen die Werte für die strang-gegossenen Proben dicht nebeneinander.

Probe	Verwendung individueller Parameter		Verwendung der Durchschnittswerte	
	L ₂ -Norm der Differenz von p ₂ nach (4.14) und VA	L ₂ -Norm der Differenz von p ₂ nach (4.14) und UG	L ₂ -Norm der Differenz von p ₂ nach (4.14) und VA	L ₂ -Norm der Differenz von p ₂ nach (4.14) und UG
1	0,0228	0,0248	0,0840	0,0757
2	0,020	0,0202	0,0622	0,0604
3	0,0111	0,0106	0,0816	0,0717
4	0,0248	0,0228	0,0784	0,0750
Durchschnitt	0,0198	0,0196	0,0766	0,0707
Norm. SD	0,00606	0,00631	0,00981	0,00711
5	0,0394	0,0317	0,0394	0,0317
6	0,0309	0,0300	0,0310	0,0300
7	0,0161	0,0164	0,0161	0,0164
8	0,0202	0,0206	0,0202	0,0206
Durchschnitt	0,0267	0,0247	0,0267	0,0247
Norm. SD	0,0106	0,00736	0,0106	0,00737

Tabelle 10: Vergleich der L₂-Normen der Differenzen von nach (4.14) berechneten Martensitanteil mit VA bzw. UG unter Verwendung der zu den einzelnen Versuchen optimierten Parameter sowie unter Verwendung der Durchschnittswerte

4.2.5. Vergleich der verwendeten Modelle untereinander

Der besseren Übersicht wegen sollen jetzt die vier Modelle (K-M-DG (4.5), modifizierte K-M-DG (4.10), L-D-DG (4.13) sowie modifizierte L-D-DG (4.14)) miteinander verglichen werden.

Probe	Verwendung der Durchschnittswerte der Parameter, Vergleich mit Volumenanteil			
	L ₂ -Norm der Differenz von p ₂ nach (4.5)	L ₂ -Norm der Differenz von p ₂ nach (4.10)	L ₂ -Norm der Differenz von p ₂ nach (4.13)	L ₂ -Norm der Differenz von p ₂ nach (4.14)
1	0,0234	0,0234	0,0840	0,0840
2	0,0205	0,0206	0,0622	0,0622
3	0,0126	0,0126	0,0815	0,0816
4	0,0320	0,0254	0,0779	0,0784
Durchschnitt	0,0221	0,0205	0,0764	0,0766
Norm. SD	0,00800	0,00563	0,0098	0,00981
5	0,0413	0,0413	0,0394	0,0394
6	0,0318	0,0318	0,0310	0,0310
7	0,0168	0,0168	0,0160	0,0161
8	0,0314	0,0211	0,0259	0,0202
Durchschnitt	0,0303	0,0278	0,0280	0,0267
Norm. SD	0,0101	0,0110	0,00984	0,0106

Tabelle 11: Vergleich der vier betrachteten Modelle der Martensitbildung unter Verwendung von Durchschnittswerten der Parameter, wobei mit dem Volumenanteil verglichen wurde

Die Tabelle 11 liefert folgende Erkenntnis:

Ein Modifizieren der Umwandlungsmodelle nach Koistinen-Marburger und Leblond-DevauX durch Berücksichtigung des Aussetzens der Martensitbildung während eines zwischenzeitlichen Haltens oder Wiedererwärmens (unterhalb θ_{ms}) führt zu keiner wesentlichen Verbesserung (im

Sinne der L_2 -Norm). Ein leichter Einfluss macht sich bei den Proben 4 und 8 bemerkbar, bei denen zwischenzeitlich wiedererwärmt wurde (vgl. Punkt 2.2). Die Modelle nach Leblond-Devaux (4.13), (4.14) liefern bei den sprüh-kompaktierten Proben (1 bis 4) deutlich größere Abweichungen (zwischen drei und fünfmal so große). Bei den strang-gegossenen Proben (5 bis 8) hingegen fallen keine gravierenden Unterschiede auf. Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass sich bei inhomogenem Material die störenden Einflüsse und die Unzulänglichkeiten im Modell gegenseitig kompensieren. Die vorstehenden Aussagen gelten für den Fall, dass mit den Durchschnittswerten der Parameter gerechnet und mit dem Volumenanteil verglichen wird. Wird hingegen mit dem Umwandlungsgrad verglichen, ergibt sich das Bild in Tabelle 12.

Verwendung der Durchschnittswerte der Parameter, Vergleich mit Umwandlungsgrad				
Probe	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.5)	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.10)	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.13)	L_2 -Norm der Differenz von p_2 nach (4.14)
1	0,0249	0,0249	0,0757	0,0757
2	0,0202	0,0203	0,0603	0,0604
3	0,0109	0,0108	0,0717	0,0717
4	0,0308	0,0233	0,0745	0,0750
Durchschnitt	0,0217	0,0198	0,0705	0,0707
Norm. SD	0,00838	0,0063	0,00705	0,00711
5	0,0337	0,0337	0,0317	0,0317
6	0,0306	0,0306	0,0300	0,0300
7	0,0165	0,0165	0,0163	0,0164
8	0,0316	0,0209	0,0263	0,0206
Durchschnitt	0,0281	0,0254	0,0261	0,0247
Norm. SD	0,00784	0,00804	0,00690	0,00737

Tabelle 12: Vergleich der vier betrachteten Modelle der Martensitbildung unter Verwendung von Durchschnittswerten der Parameter, wobei mit dem Umwandlungsgrad verglichen wurde

In der Tabelle 12 werden die zu Tabelle 11 getroffenen Aussagen bestätigt. Dabei ergibt der Vergleich mit dem Umwandlungsgrad für alle sprüh-kompaktierten Proben ein wenig kleinere Abweichungen. Für die Proben 7 und 8 hingegen sind die Abweichungen beim Vergleich mit dem Volumenanteil etwas kleiner.

5. Zusammenfassung und Ausblick

5.1. Massenanteil, Volumenanteil und Umwandlungsgrad

Der relative Fehler zwischen Massen- und Volumenanteil des Martensits beträgt maximal 2,2% (Spalte 2 in Tabelle 3). Somit muss bei praktischen Anwendungen nicht zwischen diesen beiden Größen unterschieden werden, zumal stets Störeinflüsse vorhanden sind. Im Gegensatz hierzu kann der relative Fehler zwischen Umwandlungsgrad und Massen- bzw. Volumenanteil zu Beginn der Umwandlung recht groß werden. Für die Verwendung des Umwandlungsgrades spricht neben seiner einfacheren Berechnung auch, dass die Unterschiede zwischen den Kurven klein sind, wenn über die ganze Umwandlung gemittelt wird (vgl. Abb. 2). Die Herstellungsart der Proben hat offenbar keinen erkennbaren Einfluss auf die relativen Fehler.

5.2. Bestimmung von Martensitstart-Temperatur und Parametern

Die Bestimmung der Martensitstart-Temperatur mit der „Abweichungsmethode“ liefert deutlich höhere Werte als mit der „Minimum-Methode“ (vg. Tab. 4). Da die Ergebnisse der ersteren

jedoch realistischer scheinen, wurde diese Methode bei den nachfolgenden Vergleichen der Modelle benutzt. Die strang-gegossenen Proben zeigen deutlich höhere Starttemperaturen als die sprüh-kompaktierten, was mit den stärkeren Inhomogenitäten der ersteren zu erklären ist, die die Umwandlung (zumindest an einigen Stellen der Probe) früher einsetzen lassen. Alternativ zu den beiden vorigen Methoden kann die Martensitstart-Temperatur auch durch Anpassung mit Hilfe der Koistinen-Marburger-Gleichung (4.1) erhalten werden (vgl. Tab. 4). Sind die MS-Temperatur und der Restaustenitgehalt der Proben bekannt, lässt sich der Koistinen-Marburger-Parameter θ_{m0} für jede Probe mit Hilfe der K-M Gleichung (4.1) berechnen. Alternativ kann der Parameter θ_{m0} (zusammen mit der MS-Temperatur θ_{ms}) mit Hilfe der K-M-Gleichung (4.1) angepasst werden (s. Tab. 5). Für die sprühkompaktierten Proben führt die Anpassung des Parameters θ_{m0} zu größeren, für die strang-gegossenen zu kleineren Werten. Die aus der Verwendung von Umwandlungsgrad bzw. Volumenanteil bei der Anpassung resultierenden Unterschiede fallen geringer aus. Der in den Modellen nach Leblond und Devaux auftretende Parameter μ wird ebenfalls durch Anpassung gewonnen. Die Werte zeigen keine großen Schwankungen für die gleiche Herstellungsart.

5.3. Vergleich der Modelle

Es wurden vier Modelle für die martensitische Umwandlung getestet, nämlich die Differentialgleichungen (4.5) und (4.10) (auf dem Modell von Koistinen-Marburger basierend) sowie (4.13) und (4.14) (auf dem Vorschlag von Leblond-Devaux beruhend). Die entsprechenden Modifizierungen (4.10) und (4.14) berücksichtigen ein Aussetzen der Martensitbildung während eines zwischenzeitlichen Haltens der Temperatur bzw. eines Wiedererwärmens (vgl. z.B. die Abb. 5 und 6). Diese Modifizierungen führen jedoch zu keiner wesentlichen Verbesserung *im Sinne der L_2 -Norm*. Ein leichter Einfluss macht sich bei den Proben 4 und 8 bemerkbar, bei denen zwischenzeitlich wiedererwärmt wurde (vgl. Punkt 2.2).

Der Least-Square-Vergleich der aus den Messdaten ermittelten Kurven des Martensitanteils mit denen durch die Modelle berechneten Kurven kann unter Verwendung der individuell bestimmten Parameter oder ihre Durchschnittswerte durchgeführt werden. Letzteres ist natürlich realistischer in Hinblick auf Simulationen von Bauteilversuchen. Werden statt der individuell ermittelten Parameter deren Durchschnitte (für die gleiche Herstellungsart) verwendet, ergibt sich eine wesentlich größere Abweichung in der L_2 -Norm (least square) nur bei den sprüh-kompaktierten Proben für die Leblond-Devaux-Modelle (4.13) und (4.14) (zwischen drei und fünfmal so groß). Bei den strang-gegossenen Proben ist keine solche Tendenz festzustellen. Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass sich bei stärker inhomogenem Material die störenden Einflüsse und die Unzulänglichkeiten im Modell gegenseitig kompensieren. Es ergeben sich auch keine wesentlich anderen Ergebnisse, wenn statt mit dem Volumenanteil mit dem Umwandlungsgrad verglichen wird.

Als *wichtiges Resultat* der vorstehenden Untersuchungen ergibt sich somit, dass – zumindest für strang-gegossenes Material – die vier betrachteten Modelle die Realität etwa gleich gut beschreiben, in der L_2 -Norm und für die hier betrachteten Abkühlpfade. Diese sind nicht streng monoton fallend, außer für die Proben 1 und 5, scheinen jedoch realistisch für viele Abkühlsituationen bei Wärmebehandlungsprozessen in Bauteilen zu sein. Somit erscheint eine Verwendung des relativ einfachen Modells (4.13) nach Leblond-Devaux gerechtfertigt (vg. z.B. [2, 13]). Auch für sprüh-kompaktiertes Material liefert die Modifizierung (4.14) des L-D-Modells (4.13) keine wesentliche Verbesserung, solange mit den Durchschnittswerten der Parameter gerechnet wird, was ja bei realen Anwendungen meist unumgänglich ist.

5.4. Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden die vorgestellten Modelle anhand von Dilatometermessdaten getestet und bewertet, also in einer isolierten Situation. In der Realität befinden sich jedoch Bewegung, Temperatur und Phasenanteile in Wechselwirkung, deren Beschreibung ein sehr komplexes Modell verlangt (vgl. z.B. [10, 16, 17, 19, 23, 26, 27]). Ein erweiterte Grundlage zur Bewertung der vorgestellten Modelle der Martensitbildung stellen somit (dreidimensionale) Simulationen zu Bauteilversuchen und der Abgleich mit dem Experiment dar. Hierbei muss dann der Vergleich von experimentell erhaltener und berechneter Geometrie in die Bewertung einfließen. Zusätzlich ist der Spannungseinfluss auf die Phasenumwandlung zu berücksichtigen (vgl. z.B. [9, 20, 25, 26]).

Literatur

- [1] Ahrens, U.: Beanspruchungsabhängiges Umwandlungsverhalten und Umwandlungsplastizität niedrig legierter Stähle mit unterschiedlich hohen Kohlenstoffgehalten. Diss., Universität Paderborn, Germany, 2003.
- [2] Alder, H., Hömberg, D., Weiss, W.: Simulationsbasierte Regelung der Laserhärtung von Stahl, HTM Z. Werkst. Waermebeh. Fertigung 61 (2), 2006, 103-107.
- [3] Antretter, T., Cailletaud, G., Fischer, F. D.: A numerical model for transformation induced plasticity (TRIP), J. Phys. IV, France, 115, 2004, 233-241.
- [4] Besserdich, G.: Untersuchungen zur Eigenspannungs- und Verzugsausbildung beim Abschrecken von Zylindern aus den Stählen 42CrMo4 und Ck45 unter Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität, Diss., Universität Karlsruhe, Germany, 1993.
- [5] Böhm, M., Hunkel, M., Schmidt, A., Wolff, M.: Evaluation of various phase-transition models for 100Cr6 for application in commercial FEM programs. J. de Physique IV, 120, 2004, 581-589.
- [6] Burke, J.: The kinetics of phase transformations in metals, Pergamon Press Oxford, 1965.
- [7] Christian, J. W.: The theory of transformations in metals and alloys, Part 1, Pergamon Press, Oxford, 1975.
- [8] Dalgic, M., Löwisch, G.: Transformation plasticity at different phase transformation of a bearing steel, Materialwissenschaften und Werkstofftechnik (37 (1), 2006, 122-127.
- [9] Denis, S.: Considering stress-phase transformation interaction in the calculation of heat treatment residual stresses, In: Mechanics of solids with phase changes, no. 368, p. 293-317, eds. Berveiller, M., Fischer, F. D., Springer-Verlag, 1997.
- [10] 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(1), 2002, 92-102.
- [11] Frerichs, F., Lübben, T., Hoffmann, Zoch, H.-W.: Numerical analysis of distortion due to inhomogeneous distribution of martensite-start temperature within SAE 52100 bearing rings, in press Steel Research.
- [12] Hömberg, D.: Irreversible phase transitions in steel, Math. Methods in Appl. Sciences, 20, 59-77 (1997)
- [13] Hömberg, D., Weiss, W.: PID control of laser surface hardening of steel, WIAS Preprint 876, Berlin, 2003.
- [14] 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), 1959, 59 – 60.
- [15] 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, 137 – 146.
- [16] Lemaitre, J.: Handbook of Materials Behavior Models, Academic Press, San Diego, USA, 2001.
- [17] Pietzsch, R.: Simulation des Abkühlverzuges von Stahlprofilen, Technische Mechanik, Bd. 20 (3), 2000, 265-274.
- [18] Réti, T., Fried, Z., L., Felde, I.: Computer simulation of steel quenching process using a multi-phase transformation model, Computational Material Science, 22, 2001, 261-278.
- [19] Schmidt, A., Suhr, B., Moshagen, T., Woff, M., Boehm, M.: Adaptive finite element simulations for macroscopic and mesoscopic models, Materialwissenschaften und Werkstofftechnik, 37 (1), 2006, 142-146.
- [20] Shi, W., Zhang, X., Liu, Z.: Model of stress-induced phase transformation and prediction of internal stresses of large steel workpieces during quenching. J. Phys. IV France, 120, 2004, 473-479.

- [21] Wildau, M.: Zum Einfluss der Werkstoffeigenschaften auf Spannungen, Eigenspannungen und Maßänderungen von Werkstücken aus Stahl, Dissertation, RWTH Aachen, 1986.
- [22] Wolff, M., Dachkovski, S., Böhm, M.: Volumenanteile versus Massenanteile – der Dilatometerversuch aus der Sicht der Kontinuumsmechanik, Berichte aus der Technomathematik, FB, Universität Bremen, Report 303-01, <http://www.math.uni-bremen.de/zetem/>, 2003.
- [23] 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.
- [24] Wolff, M., Böhm, M.: Transformation-induced plasticity in steel - general modelling, analysis and parameter identification, Berichte aus der Technomathematik, Report 06-02, University of Bremen, Germany, <http://www.math.uni-bremen.de/zetem/>, 2006.
- [25] 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, submitted to CMS, 2006.
- [26] Wolff, M., Böhm, M., Helm, D.: Material behavior of steel – modeling of complex phenomena and investigations on thermodynamic consistency, submitted to Int. J of Plasticity, 2006.
- [27] Wolff, M., Böhm, M., Schmidt, A., Suhr, B.: Material behavior of steel under heat treatment - A mathematical model, eingereicht zum Int. J. of Plast., 2007.
- [28] Wolff, M., Böhm, M., Hömberg, D., Boettcher, S.: General models of phase transformations in steel in the multi-phase case – analysis and parameter identification. in preparation, 2007.

Autoren:

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

Dr. Friedhelm Frerichs, Zentrum für Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Postfach 330440, D-28334 Bremen, Stiftung Institut für Werkstofftechnik, Bremen, Germany, frerichs@iwt-bremen.de

Dipl.-Math. Natalja Lysenko, Zentrum für Technomathematik, FB3, Universität Bremen, Postfach 330440, D-28334 Bremen,

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

- Vertrieb durch den Autor -

Reports**Stand: 23. Februar 2003**

- 98-01. Peter Benner, Heike Faßbender:
An Implicitly Restarted Symplectic Lanczos Method for the Symplectic Eigenvalue Problem, Juli 1998.
- 98-02. Heike Faßbender:
Sliding Window Schemes for Discrete Least-Squares Approximation by Trigonometric Polynomials, Juli 1998.
- 98-03. Peter Benner, Maribel Castillo, Enrique S. Quintana Ortí:
Parallel Partial Stabilizing Algorithms for Large Linear Control Systems, Juli 1998.
- 98-04. Peter Benner:
Computational Methods for Linear-Quadratic Optimization, August 1998.
- 98-05. Peter Benner, Ralph Byers, Enrique S. Quintana Ortí, Gregorio Quintana Ortí:
Solving Algebraic Riccati Equations on Parallel Computers Using Newton's Method with Exact Line Search, August 1998.
- 98-06. Lars Grüne, Fabian Wirth:
On the rate of convergence of infinite horizon discounted optimal value functions, November 1998.
- 98-07. Peter Benner, Volker Mehrmann, Hongguo Xu:
A Note on the Numerical Solution of Complex Hamiltonian and Skew-Hamiltonian Eigenvalue Problems, November 1998.
- 98-08. Eberhard Bänsch, Burkhard Höhn:
Numerical simulation of a silicon floating zone with a free capillary surface, Dezember 1998.
- 99-01. Heike Faßbender:
The Parameterized SR Algorithm for Symplectic (Butterfly) Matrices, Februar 1999.
- 99-02. Heike Faßbender:
Error Analysis of the symplectic Lanczos Method for the symplectic Eigenvalue Problem, März 1999.
- 99-03. Eberhard Bänsch, Alfred Schmidt:
Simulation of dendritic crystal growth with thermal convection, März 1999.
- 99-04. Eberhard Bänsch:
Finite element discretization of the Navier-Stokes equations with a free capillary surface, März 1999.
- 99-05. Peter Benner:
Mathematik in der Berufspraxis, Juli 1999.
- 99-06. Andrew D.B. Paice, Fabian R. Wirth:
Robustness of nonlinear systems and their domains of attraction, August 1999.

- 99-07. Peter Benner, Enrique S. Quintana Ortí, Gregorio Quintana Ortí:
Balanced Truncation Model Reduction of Large-Scale Dense Systems on Parallel Computers, September 1999.
- 99-08. Ronald Stöver:
Collocation methods for solving linear differential-algebraic boundary value problems, September 1999.
- 99-09. Huseyin Akcay:
Modelling with Orthonormal Basis Functions, September 1999.
- 99-10. Heike Faßbender, D. Steven Mackey, Niloufer Mackey:
Hamilton and Jacobi come full circle: Jacobi algorithms for structured Hamiltonian eigenproblems, Oktober 1999.
- 99-11. Peter Benner, Vincente Hernández, Antonio Pastor:
On the Kleinman Iteration for Nonstabilizable System, Oktober 1999.
- 99-12. Peter Benner, Heike Faßbender:
A Hybrid Method for the Numerical Solution of Discrete-Time Algebraic Riccati Equations, November 1999.
- 99-13. Peter Benner, Enrique S. Quintana Ortí, Gregorio Quintana Ortí:
Numerical Solution of Schur Stable Linear Matrix Equations on Multicomputers, November 1999.
- 99-14. Eberhard Bänsch, Karol Mikula:
Adaptivity in 3D Image Processing, Dezember 1999.
- 00-01. Peter Benner, Volker Mehrmann, Hongguo Xu:
Perturbation Analysis for the Eigenvalue Problem of a Formal Product of Matrices, Januar 2000.
- 00-02. Ziping Huang:
Finite Element Method for Mixed Problems with Penalty, Januar 2000.
- 00-03. Gianfrancesco Martinico:
Recursive mesh refinement in 3D, Februar 2000.
- 00-04. Eberhard Bänsch, Christoph Egbers, Oliver Meincke, Nicoleta Scurtu:
Taylor-Couette System with Asymmetric Boundary Conditions, Februar 2000.
- 00-05. Peter Benner:
Symplectic Balancing of Hamiltonian Matrices, Februar 2000.
- 00-06. Fabio Camilli, Lars Grüne, Fabian Wirth:
A regularization of Zubov's equation for robust domains of attraction, März 2000.
- 00-07. Michael Wolff, Eberhard Bänsch, Michael Böhm, Dominic Davis:
Modellierung der Abkühlung von Stahlbrammen, März 2000.
- 00-08. Stephan Dahlke, Peter Maaß, Gerd Teschke:
Interpolating Scaling Functions with Duals, April 2000.
- 00-09. Jochen Behrens, Fabian Wirth:
A globalization procedure for locally stabilizing controllers, Mai 2000.
- 00-10. Peter Maaß, Gerd Teschke, Werner Willmann, Günter Wollmann:
Detection and Classification of Material Attributes -- A Practical Application of Wavelet Analysis, Mai 2000.
- 00-11. Stefan Boschert, Alfred Schmidt, Kunibert G. Siebert, Eberhard Bänsch, Klaus-Werner Benz, Gerhard Dziuk, Thomas Kaiser:
Simulation of Industrial Crystal Growth by the Vertical Bridgman Method, Mai 2000.

- 00-12. Volker Lehmann, Gerd Teschke:
Wavelet Based Methods for Improved Wind Profiler Signal Processing, Mai 2000.
- 00-13. Stephan Dahlke, Peter Maaß:
A Note on Interpolating Scaling Functions, August 2000.
- 00-14. Ronny Ramlau, Rolf Clackdoyle, Frédéric Noo, Girish Bal:
Accurate Attenuation Correction in SPECT Imaging using Optimization of Bilinear Functions and Assuming an Unknown Spatially-Varying Attenuation Distribution, September 2000.
- 00-15. Peter Kunkel, Ronald Stöver:
Symmetric collocation methods for linear differential-algebraic boundary value problems, September 2000.
- 00-16. Fabian Wirth:
The generalized spectral radius and extremal norms, Oktober 2000.
- 00-17. Frank Stenger, Ahmad Reza Naghsh-Nilchi, Jenny Niebsch, Ronny Ramlau:
A unified approach to the approximate solution of PDE, November 2000.
- 00-18. Peter Benner, Enrique S. Quintana-Ortí, Gregorio Quintana-Ortí:
Parallel algorithms for model reduction of discrete-time systems, Dezember 2000.
- 00-19. Ronny Ramlau:
A steepest descent algorithm for the global minimization of Tikhonov-Phillips functional, Dezember 2000.
- 01-01. Torsten Köhler, Peter Maaß, Peter Wust, Martin Seebass:
Efficient methods in hyperthermia treatment planning, Januar 2001.
- 01-02. Peter Benner, Ralph Byers, Rafael Mayo, Enrique S. Quintana-Ortí, Vicente Hernández:
Parallel Algorithms for LQ Optimal Control of Discrete-Time Periodic Linear Systems, *Februar 2001*.
- 01-03. Peter Benner, Enrique S. Quintana-Ortí, Gregorio Quintana-Ortí:
Efficient Numerical Algorithms for Balanced Stochastic Truncation, März 2001.
- 01-04. Peter Benner, Maribel Castillo, Enrique S. Quintana-Ortí:
Partial Stabilization of Large-Scale Discrete-Time Linear Control Systems, März 2001.
- 01-05. Stephan Dahlke:
Besov Regularity for Edge Singularities in Polyhedral Domains, Mai 2001.
- 01-06. Fabian Wirth:
A linearization principle for robustness with respect to time-varying perturbations, Mai 2001.
- 01-07. Stephan Dahlke, Wolfgang Dahmen, Karsten Urban:
Adaptive Wavelet Methods for Saddle Point Problems - Optimal Convergence Rates, Juli 2001.
- 01-08. Ronny Ramlau:
Morozov's Discrepancy Principle for Tikhonov regularization of nonlinear operators, Juli 2001.
- 01-09. Michael Wolff:
Einführung des Drucks für die instationären Stokes-Gleichungen mittels der Methode von Kaplan, Juli 2001.
- 01-10. Stephan Dahlke, Peter Maaß, Gerd Teschke:
Reconstruction of Reflectivity Densities 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 Thermoelasticity with Phase Changes, July 2002.
- 02-05. Michael Wolff, Michael Böhm:
Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität bei Stählen im Konzept der Thermoelasto-Plastizität, July 2002.
- 02-06. Gerd Teschke:
Construction of Generalized Uncertainty Principles and Wavelets in Anisotropic Sobolev Spaces, August 2002.
- 02-07. Ronny Ramlau:
TIGRA - an iterative algorithm for regularizing nonlinear ill-posed problems, August 2002.
- 02-08. Michael Lukeschewitsch, Peter Maaß, Michael Pidcock:
Tikhonov regularization for Electrical Impedance Tomography on unbounded domains, October 2002.
- 02-09. Volker Dicken, Peter Maaß, Ingo Menz, Jenny Niebsch, Ronny Ramlau:
Inverse Unwuchtidentifikation an Flugtriebwerken mit Quetschöldämpfern, October 2002.
- 02-10. Torsten Köhler, Peter Maaß, Jan Kalden:
Time-series forecasting for total volume data an charge back data, November 2002
- 02-11. Angelika Bunse-Gerstner:
A Short Introduction to Iterative Methods for Large Linear Systems, November 2002.
- 02-12. Peter Kunkel, Volker Mehrmann, Ronald Stöver:
Symmetric Collocation for Unstructured Nonlinear Differential-Algebraic Equations of Arbitrary Index, November 2002.
- 02-13. Michael Wolff:
*Ringvorlesung:Distortion Engineering 2
Kontinuumsmechanische Modellierung des Materialverhaltens von Stahl unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen*, Dezember 2002.
- 03-01. Michael Wolff, Michael Böhm, Serguei Dachkovski:
Volumenanteile versus Massenanteile – der Dilatometerversuch aus der Sicht der Kontinuumsmechanik, Januar 2003.
- 03-02 Daniel Kessler, Ricardo H. Nochetto, Alfred Schmidt:

- A posteriori error control for the Allen-Cahn Problem: circumventing Gronwall's inequality*, March 2003.
- 03-03 Michael Böhm, Jörg Kropp, Adrian Muntean:
On a Prediction Model for Concrete Carbonation based on Moving Interfaces - Interface concentrated Reactions, April 2003.
- 03-04 Michael Böhm, Jörg Kropp, Adrian Muntean:
A Two-Reaction-Zones Moving-Interface Model for Predicting Ca(OH)₂-Carbonation in Concrete, April 2003.
- 03-05 Vladimir L. Kharitonov, Diederich Hinrichsen:
Exponential estimates for time delay systems, May 2003.
- 03-06 Michael Wolff, Michael Böhm, Serguei Dachkovski, Günther Löwisch:
Zur makroskopischen Modellierung von spannungsabhängigem Umwandlungsverhalten und Umwandlungsplastizität bei Stählen und ihrer experimentellen Untersuchung in einfachen Versuchen, Juli 2003.
- 03-07 Serguei Dachkovski, Michael Böhm, Alfred Schmidt, Michael Wolff:
Comparison of several kinetic equations for pearlite transformation in 100Cr6 steel, July 2003.
- 03-08 Volker Dicken, Peter Maass, Ingo Menz, Jenny Niebsch, Ronny Ramlau:
Nonlinear Inverse Unbalance Reconstruction in Rotor dynamics, July 2003.
- 03-09 Michael Böhm, Serguei Dachkovski, Martin Hunkel, Thomas Lübben, Michael Wolff:
Übersicht über einige makroskopische Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl, August 2003.
- 03-10 Michael Wolff, Friedhelm Frerichs, Bettina Suhr:
Vorstudie für einen Bauteilversuch zur Umwandlungsplastizität bei der perlitischen Umwandlung des Stahls 100Cr6, August 2003.
- 03-11 Michael Wolff, Bettina Suhr:
Zum Vergleich von Massen- und Volumenanteilen bei der perlitischen Umwandlung der Stähle 100Cr6 und C80, September 2003.
- 03-12 Rike Grotmaack, Adrian Muntean:
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 Constrained PDE Optimal Control Problems*, August 2004.
- 04-10 Christof Büskens, Matthias Gerdt: *Differentiability of Consistency Functions*, August 2004.
- 04-11 Robert Baier, Christof Büskens, Ilyes Aissa Chama, Matthias Gerdt: *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. Ruffer, Fabian R. Wirth: *An ISS Small-Gain Theorem for General Networks*, Juni 2005.
- 06-01 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. Ruffer, 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.