

Wolfhart Müller

**Temperatur- und Konzentrationsausgleich
unter Vernachlässigung von
Ortsabhängigkeit**

thermisch aktivierte und
reaktionskinetisch determinierte
Anwendungen in der Werkstofftechnik



Cuvillier Verlag Göttingen
Internationaler wissenschaftlicher Fachverlag



Temperatur- und Konzentrationsausgleich unter Vernachlässigung von Ortsabhängigkeit





**Temperatur- und Konzentrationsausgleich
unter Vernachlässigung von Ortsabhängigkeit**
- thermisch aktivierte und reaktionskinetisch
determinierte Anwendungen in der
Werkstofftechnik -

Wolfhart Müller



Impressum

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen: Cuvillier, 2017

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2017

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2017

Gedruckt auf umweltfreundlichem, säurefreiem Papier aus nachhaltiger Forstwirtschaft.

ISBN 978-3-7369-9552-9

eISBN 978-3-7369-8552-0



INHALT



Inhalt

Einleitung.....	7
Teil A: Grundlagen	15
1 Temperaturmodell	15
1.1 Thermisch dünnwandiges Modell	16
1.2 Randbedingungen	19
1.3 Näherungsdifferentialgleichung.....	20
1.4 Analytische Lösungen	23
1.4.1 Konvektive Wärmeübertragung.....	23
1.4.2 Wärmeübertragung durch Wärmestrahlung.....	28
1.4.3 Wärmeübertragung durch Konvektion und Wärmestrahlung	31
1.4.3.1 Geschlossene Lösungsgleichung.....	31
1.4.3.2 Lösungsverfahren für iterative Berechnung	35
1.4.4 Temperatur- oder zeitabhängige Einflussgrößen.....	39
2 Diffusionsmodell und Reaktionskinetik.....	40
2.1 Diffusionstechnisch dünnwandiges Modell.....	41
2.2 Reaktionskinetische Vergleichbarkeit	44
2.3 Rekristallisation und Kornwachstum.....	45
2.4 Reaktionskinetische Modellierung von Werkstoffeigenschaften.	46
2.5 Zeit-Temperatur-Unität.....	49



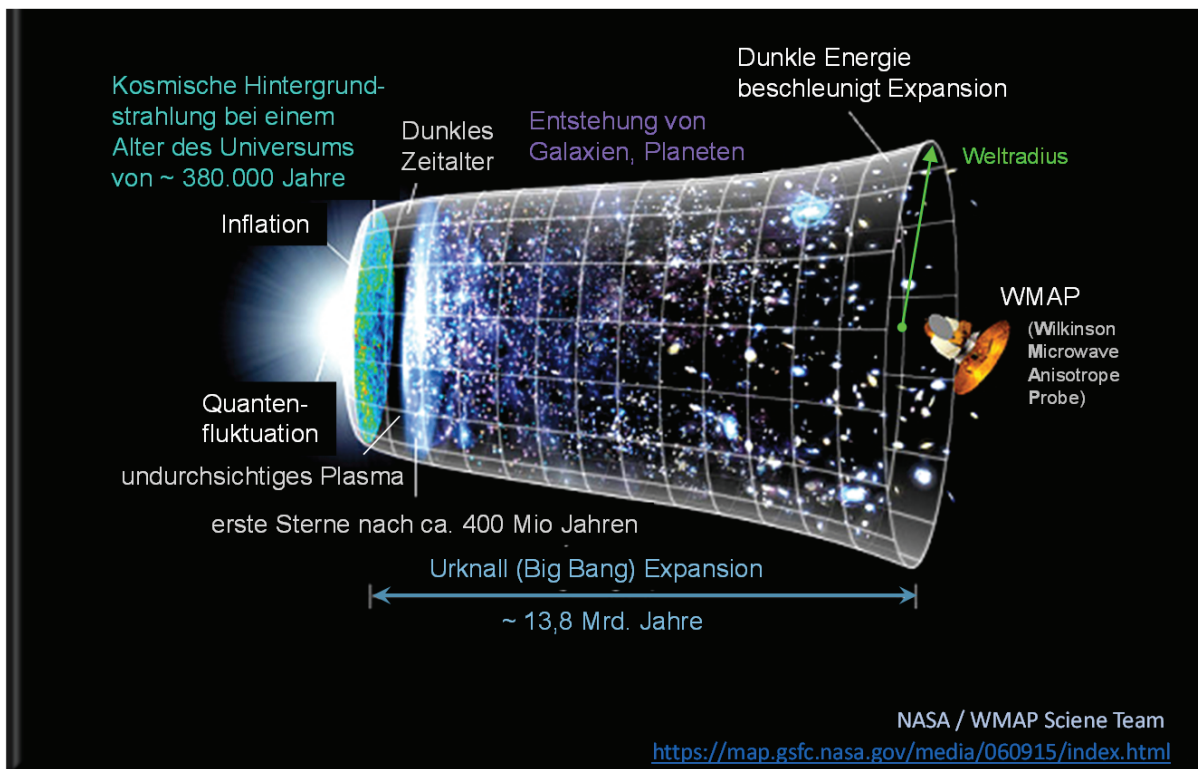
Teil B: Thermisch aktivierte und reaktionskinetisch determinierte Anwendungen	53
3 Wärmetechnisch-reaktionskinetische Modellierung zum Schweißen	53
3.1 Phasenumwandlung und Wärmetönung	55
3.2 Modellgleichungen	56
3.3 Reaktionskinetische Auswertung	60
4 Wärmetechnisch-reaktionskinetische Modellierung bei Oxidationsprozessen	66
5 Reaktionskinetische Beschreibung mechanischer Werkstoffeigenschaften in Abhängigkeit von der Glühbehandlung	70
6 Beispiel zur Erwärmung in einem Luftumwälzofen unter Berücksichtigung von Konvektion und Wärmestrahlung	77
7 Physikalische Stoffwerte abhängig von der Umwandlungskinetik	82
8 Sinterkinetik.....	85
9 Zur bedingten Austauschbarkeit von Temperatur und Zeit	90
10 Diffusion zwischen zwei sich in Kontakt befindlichen Körpern	97
11 Diffusion von Oberflächenschichten	103
12 Lokale Wärmebehandlung - Presshärten	114
13 Elektrisches Durchlauf-Widerstandsglühen – Ziehglühen	118
14 Eigenschaftsoptimierung von niedriglegierten Kupferlegierungen....	128
15 Innenhochdruckumformen von Kupfer und Simulation der thermisch aktivierten Entfestigung	131
Resümee	134
Quellen	136
Anhang	139



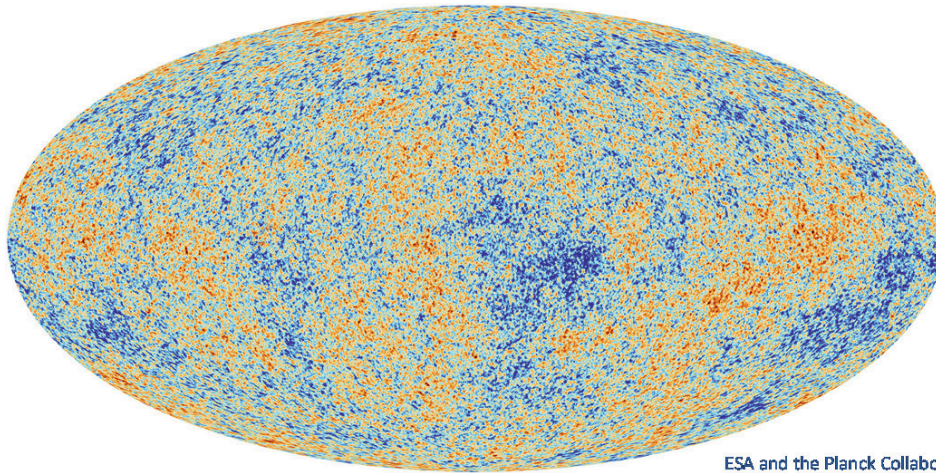
Ein später Dank sei meinen beiden Mathematik- und Physiklehrern der EOS Kreuzschule Dresden (heute Kreuzgymnasium) posthum ausgedrückt. Die Herren Dr. Alfred Hilbert und Siegfried Reichelt haben es bemerkenswert gut verstanden, für beide Wissenschaften nachhaltig Interesse zu wecken.

Einleitung

In der Natur ganz allgemein und speziell in der belebten Natur besitzen Transportprozesse für Energie und Masse eine herausragende Bedeutung. Dabei handelt es sich neben konvektivem Stofftransport um Ausgleichsvorgänge, die energetischerseits vorzugsweise als Strahlungs- und Temperaturengleich oder stofflicherseits als Konzentrations- bzw. Diffusionsausgleich in Erscheinung treten. Diese Mechanismen beherrschen unser Universum von Anbeginn, wie z.B. der Blick zurück auf die kosmische Mikrowellen-Hintergrundstrahlung (CMB) verrät.



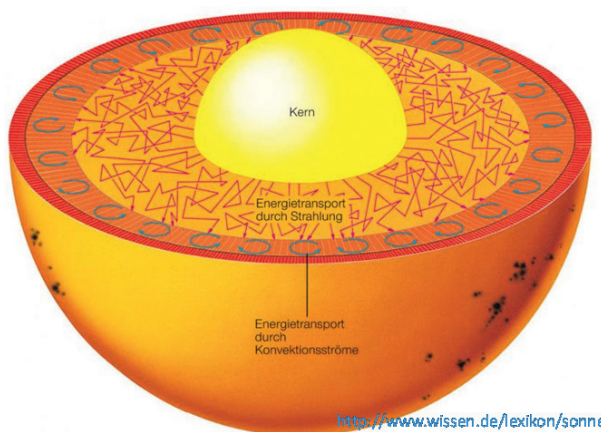
Die folgende Momentaufnahme des Satelliten „Planck“ aus dem Jahre 2013 vom ältesten Licht im Universum, das ausgesandt wurde, als das All mit 380000 Jahren noch ganz jung und heiß war, zeigt nunmehr bei auf 2,7K abgekühlter Reststrahlung winzige thermische Inhomogenitäten im Bereich von wenigen Mikrokkelvin in Regionen mit geringfügig unterschiedlicher Dichte, aus denen alle Strukturen hervorgingen, die während der Zeitdauer von 13,8 Mrd. Jahren, dem Weltalter, insbesondere auch durch die kosmische Fundamentalkraft der Gravitation (Massenanziehung), durch Strahlung (Photonenbewegung), Diffusion (Transport atomarer und molekularer Teilchen), Konvektion (Transport durch Strömung) und durch Elektromagnetismus (Phononen- und Elektronentransport) entstanden sind.



ESA and the Planck Collaboration
http://www.esa.int/Our_Activities/Space_Science/Highlights/Planck_s_Universe

Kosmische 2,7K Mikrowellen-Hintergrundstrahlung (CMB) und deren nur sehr geringe Inhomogenität im μK -Bereich

Die Transportprozesse werden in aller Regel überlagert von weiteren universellen Kräften oder stehen in Konkurrenz zu ihnen, wie es z.B. die nuklear angetriebenen Prozesse in Sternen zeigen. Die bei der Kernfusion



<https://www.wissen.de/lexikon/sonne>

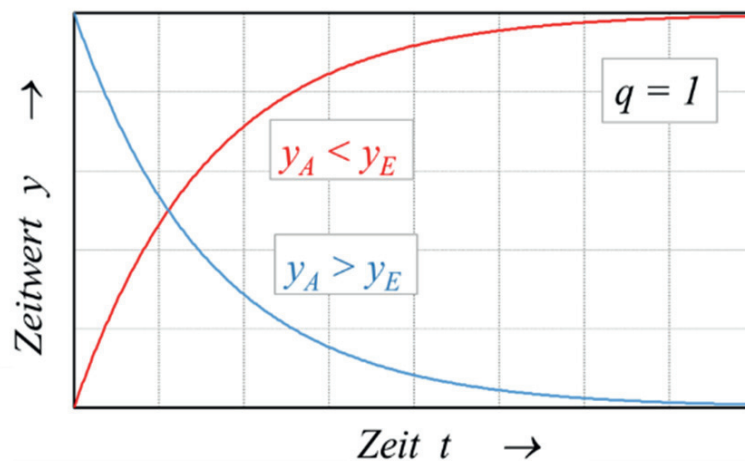
von Wasserstoff zu Helium im Sonneninneren entstehenden Photonen benötigen infolge von Streuprozessen an der Sternmaterie bis zur Sonnenoberfläche Zeiten in der Größenordnung von zehn- bis hunderttausend Jahren oder länger, während sie dann im Vakuum die Entfernung zur Erde in gerade einmal acht Minuten zurücklegen.

Transportmechanismen sind aber nicht nur auf der Größenskala in so riesigen Dimensionen anzutreffen, sondern sind auch in Maßstäben bis herunter zu Mikrobereichen, insbesondere bei Zellen lebender Organismen wirksam. Ohne diese im Laufe der Evolution aufeinander abgestimmten, optimierten Mechanismen wäre hochentwickeltes Leben letztlich nicht möglich geworden. Die genannten Transportprozesse besitzen u.a. für die chemische Industrie, die Verfahrenstechnik und nicht zuletzt für die Werkstoffentwicklung eine herausragende Bedeutung.

Dabei geht es nicht selten um die Abschätzung der zeitabhängigen, der kinetischen Vorgänge und schließlich bis hin zu deren gezielten Steuerung. Diese Zeitabhängigkeit der thermischen oder der diffusiven Prozesse genügt

im einfachsten Fall einer gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung der Gestalt $\dot{y} + \frac{1}{\tau} \cdot y = \frac{1}{\tau} \cdot y_E$, die besagt, dass die Änderungsgeschwindigkeit \dot{y} dem aktuellen Wert von y zur Zeit t proportional ist, wobei τ eine Zeitkonstante und y_E den (asymptotischen) Endwert bezeichnen. Unter einer Anfangsbedingung $y(t=0) = y_A$ bekommt die Lösung die Form $y(t) = y_A + (y_E - y_A) \cdot (1 - e^{-t/\tau})$.

Für $y_E > y_A$ handelt es sich um einen anschwellenden und für $y_E < y_A$ um einen abklingenden Zeitverlauf, jeweils mit dem Ziel- bzw. Endwert y_E . Ausgleichsvorgänge dieser Art verlaufen damit exponentiell und asymptotisch auf den Endwert zu, ohne jedoch diesen in endlichen Zeiten vollständig zu erreichen.



Die mathematische Beschreibung von Wärmeleitung und Temperaturausgleich hat erstmals (1822) der bemerkenswerte Mathematiker und Physiker *JOSEPH FOURIER* (1768-1830) vorgenommen, indem er für ein zeit- und ortsabhängiges Temperaturfeld $\mathcal{G} = \mathcal{G}(t, x)$ die Dgl. der Wärmeleitung

in der Form $\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} = a \cdot \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial x^2}$ hergeleitet hatte. Etwas später fand *ADOLF FICK* (1829-1901) für ein zeit- und ortsabhängiges Konzentrationsfeld $c = c(t, x)$

die formal gleiche Abhängigkeit als Diffusionsgleichung $\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$. Die

beiden partiellen Differentialgleichungen vom parabolischen Typ und deren Lösungen beschreiben die Realität außerordentlich exakt, auch wenn erwähnt werden soll, dass sie ein Paradoxon enthalten. Das drückt sich darin aus, dass sich thermische oder diffusive Wirkungen instantan, d.h., mit unendlich hoher Geschwindigkeit übermitteln, was bekanntlich im Gegensatz zu grundlegenden Prinzipien der Physik steht. Deshalb hat es



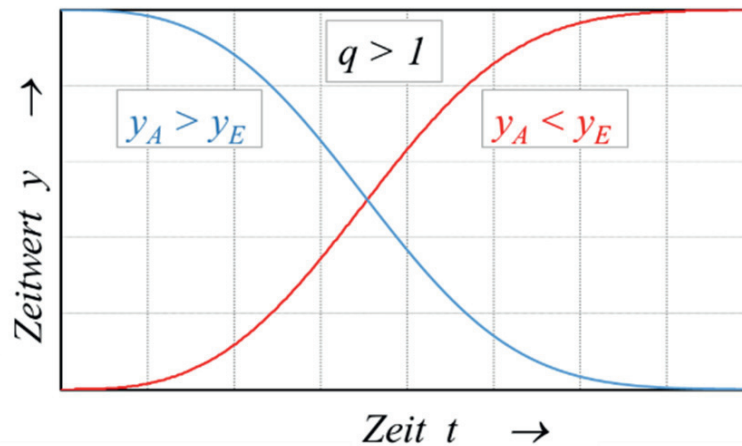
z.B. im Rahmen der rationalen Thermodynamik Bemühungen gegeben, diesen Widerspruch aufzulösen, wobei gezeigt wurde, dass zur Beschreibung von Wärmeleit- und Diffusionsphänomenen genaunommen Differentialgleichungen von hyperbolischem Typ oder Integrodifferentialgleichungen herangezogen werden müssten. Diesen Sachverhalt zu kennen, kann zur sachlich richtigen Interpretation ggf. wichtig sein. Allerdings stellen die *FOURIER*'sche Wärmeleitungsgleichung und die *FICK*'sche Diffusionsgleichung - trotz dieses physikalischen Einwandes - für praktisch alle technisch relevanten Aufgabenstellungen auch weiterhin eine ausgezeichnete Näherung dar. Deshalb basieren nahezu alle Berechnungen zu diesem Problemkreis auf diesen Grundgleichungen, indem entweder analytisch geschlossene Lösungsformeln (bei hinreichend einfacher Geometrie) oder Ergebnisse mit vordergründig numerischen Methoden abgeleitet werden.

Während der Aufwand zur Erlangung von analytisch-symbolischen Ergebnissen, ausgehend von partiellen Differentialgleichungen vom parabolischen Typ oder entsprechenden Dgl.-Systemen, beträchtlich sein kann, sollen die nachfolgenden Ausführungen zeigen, dass es bei Einführung gewisser Vereinfachungen reizvoll und hilfreich ist, analytische Näherungslösungen zu gewinnen und anzuwenden. Diese müssen den exakten, jedoch viel aufwendiger zu erhaltenden Ergebnissen immer dann nicht nachstehen, wenn gewisse Kriterien den real vorliegenden Bedingungen genügen.

In diesem Sinne lassen sich Lösungen herleiten, die gemeinhin als wärme- bzw. diffusionstechnisch dünnwandig bezeichnet werden. Im Zusammenhang mit der Diffusion wird besonders auf Aspekte der Reaktionskinetik und deren Folgerungen eingegangen werden. In diesem Falle erhält das Charakteristikum des rein exponentiellen Auf- oder Abklingens eine Modifikation dahingehend, dass jeweils ein verzögernder Einschwingabschnitt vorgelagert ist. Das wird üblicherweise erreicht durch geeignete Einführung eines Parameters q , den *AVRAMI*-Exponenten.

Die gegenüber oben entsprechend modifizierte Dgl. bekommt in diesem Fall variable Koeffizienten und hat damit die Gestalt $\dot{y} + \frac{1}{\tau} f(t) \cdot y = \frac{1}{\tau} f(t) \cdot y_E$ mit $f(t) = q \cdot (t/\tau)^{q-1}$. Sie besitzt die optisch nur wenig veränderte Lösung $y(t) = y_A + (y_E - y_A) \cdot (1 - e^{-(t/\tau)^q})$ und lässt anstelle eines rein exponen-

tiellen Verlaufs einen *S*-förmigen bzw. sigmoidalen entstehen. Diese Charakteristik beschreibt Festkörperreaktionen, die eine mehr oder weniger ausgeprägte Anlaufphase besitzen, noch treffender; der rein exponentielle Grenzfall ohne Anlaufverzögerung (vorheriges Diagramm) ist mit $q = 1$ ebenfalls enthalten.



Im folgenden Teil A werden die Grundlagen einerseits zu Temperaturberechnung unter thermisch dünnwandigen Verhältnissen sowie andererseits zu Diffusion und Reaktionskinetik infolge statischer Rekristallisation und Entfestigung dargestellt, also zu Prozessen, wie sie thermisch aktiviert nach durch Umformung erfolgter Verfestigung ablaufen. Darüberhinaus lassen sich Korn- und Schichtwachstumsprozesse sowie Phasenumwandlungs- und Ausscheidungsphänomene beschreiben. Im Gegensatz zu numerisch aufwendigen Methoden, wie sie beispielsweise kommerzielle Software wie *ThermoCalc* oder *DICTRA* bereitstellen – vgl. die Bemerkungen hierzu in [MÜL 05], kommen die hier betrachteten physikalisch eher elementaren Methoden mit einem vergleichsweise geringen mathematischen und numerischen Aufwand aus, wenngleich experimentelle Ergebnisse zur konkreten Modellbildung zunächst unumgänglich sind. Gegenüber weiteren komfortablen Programmpaketen, wie *ChemSage* oder *Pandat*, die Systeme im thermodynamischen Gleichgewicht sehr genau zu modellieren vermögen, lässt sich mit der nachfolgend angewendeten Näherungsbetrachtung insbesondere der kinetische Aspekt qualitativ und quantitativ sowohl im isothermen als auch allgemeiner im anisothermen Fall recht vorteilhaft beschreiben, wie die Beispiele im Teil B zeigen werden.

Herleitungen können, soweit sie hier gebracht werden, dem besseren Verständnis der getroffenen Annahmen und Voraussetzungen dienen und



damit die förderlichen Anwendungsbereiche der Formeln sichtbar machen. Viele Ergebnisse wurden eingerahmt und können auch unabhängig davon als Formelsammlung genutzt werden.

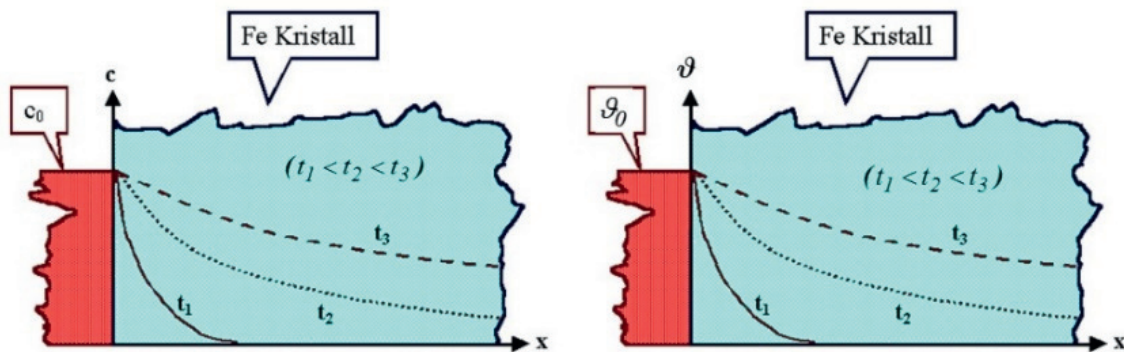
Im Teil B werden Anwendungen aus beiden Bereichen – Wärmeübertragung sowie Diffusion bzw. Reaktionskinetik – und deren Kombination anhand verschiedener Beispiele betrachtet. Dabei wird sich zeigen, welche vielfältigen und vergleichsweise einfachen sowie eleganten Möglichkeiten der Modellbildung sich mit analytisch geschlossenen Näherungslösungen ergeben. Das betrifft Fortschritte, von denen sowohl das technologische bzw. ingenieurtechnische Personal in der herstellenden und verarbeitenden Metallbranche beim Planen von termisch aktivierten Entfestigungs-, Aushärtungs- sowie Schicht- und Kornwachstumsprozessen als auch der in diesem Werkstoffsektor tätige Forscher profitiert. Es werden eine Reihe von Beispielen aus der einschlägigen Praxis angeführt, die zeigen, dass das Arbeiten mit Modellen auf Basis analytisch geschlossener Lösungen - auch im technisch aufwendiger zu beherrschenden Normalfall anisothermer Verhältnisse – bis hin zur Auswertung und Anwendung konkreter numerischer Ergebnisse deutliche Vorteile mit sich bringt; der lästige Umstand, diese Modelle und deren Parameter zunächst an experimentell zu beschaffenden Messergebnissen ausrichten bzw. kalibrieren zu müssen, ist allerdings auch hier, wie bei halbempirischen Modellen generell, prinzipiell nicht zu umgehen. Sobald jedoch diese experimentelle Aufgabe sowie die Identifikation der Modellparameter als Einmalaufwand geleistet sind, gestalten sich der Umgang mit den Berechnungsformeln und die Beschreibung der Modelleigenschaften außerordentlich übersichtlich. Für die Berechnungen selbst sind bereits programmierbare Taschencomputer völlig ausreichend, während man für die Visualisierung allerdings den Möglichkeiten des PC den deutlichen Vorzug einräumen wird. Damit eignet sich diese Methode insbesondere auch für den robusten betrieblichen Einsatz bei der technologischen Planung und Einstellung von Verfahrensparametern, um gewünschte ganz bestimmte Werkstoffeigenschaften dann auch tatsächlich zu treffen. Dem kommt zusätzlich entgegen, dass die praxisrelevanten Anwendungen weit überwiegend unter instationären und anisothermen Bedingungen stattfinden, deren Beschreibung mit den halbphysikalischen bzw. halbempirischen kinetischen Gleichungen mathematisch exakt und implizit stets gegeben ist.



Überleitung zu Teil A: Grundlagen

Wärme- und Stoffübertragung folgen weitgehend denselben Gesetzen

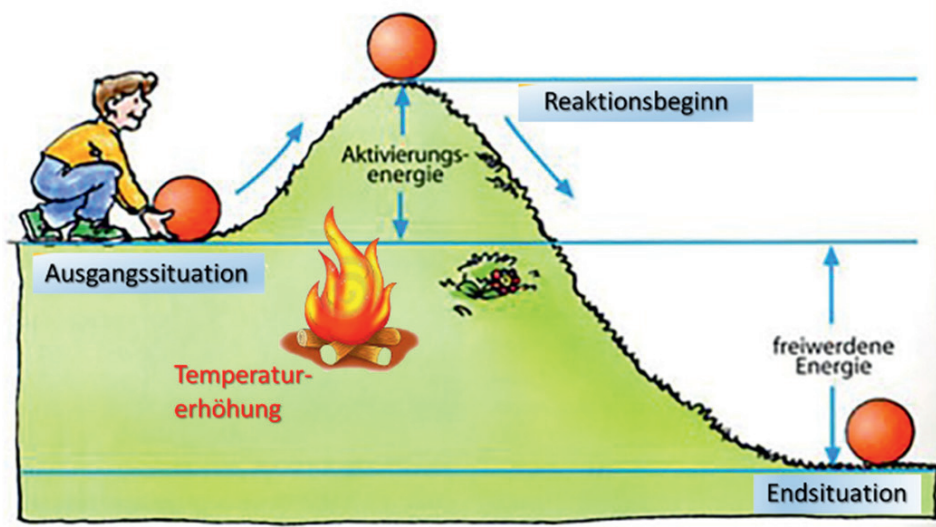
Analogie Konzentrationsausgleich \Leftrightarrow Temperatursausgleich



$$c(t,x) = c_0 \cdot \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}} \right) \right)$$

$$\vartheta(t,x) = \vartheta_0 \cdot \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot t}} \right) \right)$$

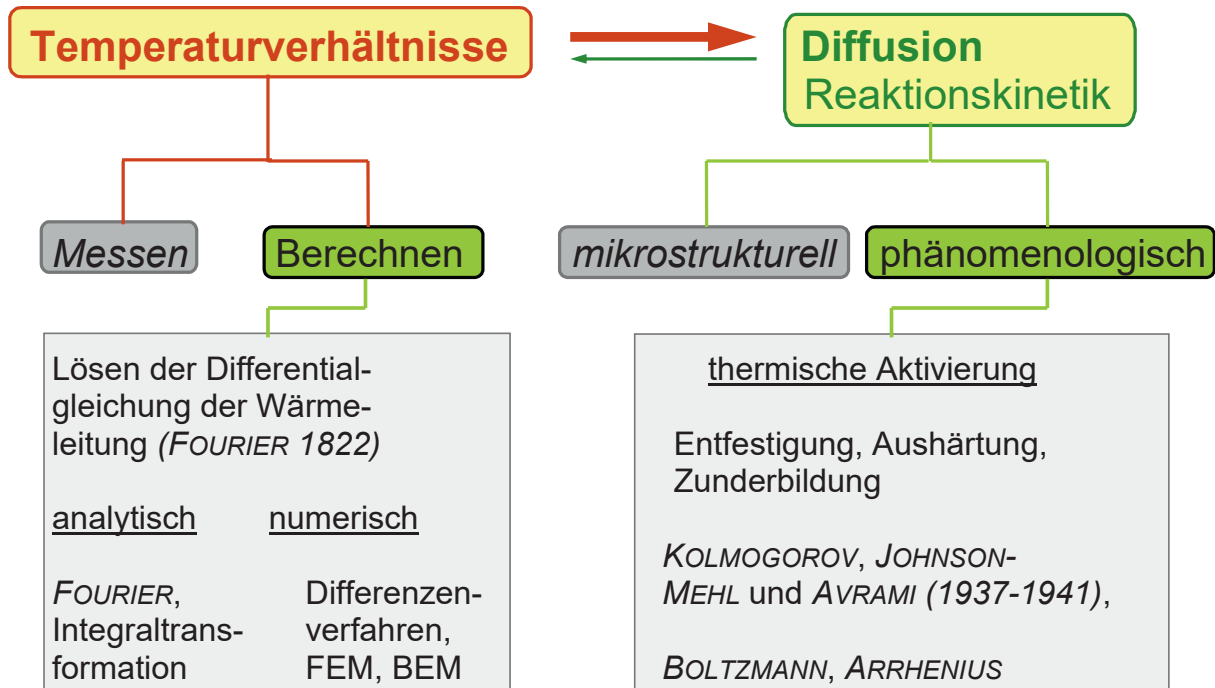
Die Reaktionskinetik besitzt einen engen Bezug zur Diffusion





Thermisch aktivierte Werkstoffreaktionen

Rekristallisation, Kornwachstum, Ausscheidungsbildung, Phasenumwandlung, Oxidschichtwachstum



In den folgenden Kapiteln werden allgemeine Grundlagen sowohl zur Berechnung der thermischen Verhältnisse (Kapitel 1) als auch deren Kombination mit der reaktionskinetischen Modellierung (Kapitel 2) gebracht. Eine Auswahl von Beispielen belegt in den darauffolgenden Kapiteln des Teils B die vielfältigen Möglichkeiten der Anwendung.

Teil A: Grundlagen

Vom numerischen Standpunkt aus sind die auf beliebige Körper und Geometrien exakt zutreffenden mathematisch-analytischen Lösungen (so weit darstellbar), z.B. in der Form als *FOURIER*-, *BESSEL*- oder *DINI*-Reihen oder mittels *GREEN*'scher Funktionen (vgl. die Standardwerke zur Wärmeleitung [CAR 59], [TAU 71], [HAH 12]), auch im Falle wärme- bzw. diffusionstechnisch „dünnwandiger“ Verhältnisse, d.h., sofern vernachlässigbar kleine Temperatur- bzw. Konzentrationsgradienten entlang wenigstens einer Körperabmessung vorliegen, prinzipiell anwendbar. In diesen Fällen lassen sich jedoch auch analytisch geschlossene Näherungslösungen gewinnen, wobei sogar nichtlineare Randbedingungen und damit - im Falle der Wärmeübertragung - Strahlungsaustausch explizit berücksichtigt werden kann. Diese Näherungslösungen sind dann weit vorteilhafter anzuwenden als die physikalisch exakten, dafür aber deutlich aufwendiger zu handhabenden Lösungsausdrücke, abgesehen davon, dass sich nichtlineare Randbedingungen i.allg. nicht oder nur unter ganz speziellen Vereinfachungen berücksichtigen lassen [TAO 81, JÄC 61]. Auf Grund der Tatsache, dass Wärmeleitung und Diffusion sehr ähnlichen mathematisch-physikalischen Strukturen folgen, treffen die wärmetechnischen Betrachtungen sinngemäß auch auf diffusionstechnisch dünnwandige Verhältnisse zu, worauf im Anschluss unter dem Aspekt der reaktionskinetischen Modellierung explizit eingegangen wird. Die Ausführungen im Teil A folgen eng angelehnt an [MÜL 98, Kap, A2.3.3 und 3.3].

1 Temperaturmodell

Es wird vereinfachend zunächst davon ausgegangen, dass die Randbedingungen so gegeben sind, dass Wärmeleitung in Achsrichtung eines vorzugsweise strangförmigen Wärmegutes vernachlässigt werden darf¹. Weiterhin sollen nur solche Bedingungen betrachtet werden, bei denen Wärmeleitung weder über den Umfang noch über den Strangquerschnitt nennenswerte Gradienten erzeugt. Hierüber entscheidet der Test mit dem

¹ Bei axial fortbewegtem Wärmgut z.B. ist das gegeben, wenn etwa die Bedingung $\frac{v \cdot d}{a} \gg 1$ eingehalten wird, wobei mit v die Durchlaufgeschwindigkeit des Wärmegutes durch die Wärmebehandlungsanlage, mit d die Dickenabmessung und mit a die Temperaturleitfähigkeit des Wärmegutes bezeichnet sind.



BIOT-Kriterium $\mathcal{B}i = \frac{\alpha}{\lambda} \cdot L$, wobei α der äußere Wärmeübergangskoeffizient, λ die Wärmeleitfähigkeit und L eine charakteristische Körperabmessung (i.allg. die Hälfte der kleinsten Körperdimension) sind [BAE 10, Kap. 2.3.5.2]. Für $0 \leq \mathcal{B}i \ll 1$ unterscheiden sich die lokalen Temperaturen nicht oder kaum merklich von den mittleren Temperaturen in der betreffenden Körperdimension. Werden also solche Bedingungen von vornherein vorausgesetzt, so lassen sich die Temperaturverhältnisse einerseits bereits aus den Wärmebilanzen an den Körperoberflächen berechnen oder andererseits herleiten, ausgehend von der über diese Körperachse(n) gemittelten Wärmeleitungsgleichung - ein Weg der nachfolgend bevorzugt wird. Dabei entsteht neben den Herleitungen eine nützliche Formelsammlung, die immer dann mit Vorteil herangezogen werden kann, wenn die Temperaturverhältnisse in einfachen und als wärmetechnisch dünnwandig zu betrachtenden Körpern interessieren.

1.1 Thermisch dünnwandiges Modell

Es sollen hier neben den zylindersymmetrischen Querschnitten von Draht und Rohr gleichsam jene von „breitem“ Band (*Einfluss nur von Bandober- und -unterseite, nicht von Bandrändern*) und von „schmalem“ Band (bzw. Rechkantdraht) gemittelte Temperaturen interessieren. Diese Geometrien lassen sich ohne nennenswerten Mehraufwand recht übersichtlich parallel behandeln.

Ausgegangen werde von der *FOURIER*'schen Wärmeleitungsgleichung², einer partiellen Differentialgleichung, die die Geometrie über den *LAPLACE*-Operator Δ berücksichtigt:

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial t} = a \cdot \Delta \vartheta + \frac{q_V}{\rho \cdot c}; \quad q_V \text{ Quellen/Senken,} \quad (1.1)$$

$$\Delta \vartheta := \begin{cases} \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \vartheta}{\partial r} \right) \equiv \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \vartheta}{\partial r} \\ \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2} \end{cases}$$

² Die Näherung des thermisch dünnwandigen Modells geht hierbei von temperaturunabhängigen Stoffwerten λ , ρ , c aus. Denn bei temperaturabhängigen gilt statt der linearen Dgl. (1.1) eine erweiterte nichtlineare Dgl. [BAE 10, (2.8) bzw. (2.25)].

Diese Dgl. ist linear und geht durch lokale Mittelwertbildung - je nach Form des die Körpergeometrie berücksichtigenden LAPLACE'schen Operators durch Integration über den Querschnitt (bzw. charakteristische Körperachse(n)) - in eine nur noch gewöhnliche, allein zeitabhängige Differentialgleichung über. Diese Differentialgleichungen zur Berechnung der über den Strang- (Rohr-, Draht-, Band-, Rechteck-)querschnitt gemittelten, zeitabhängigen Temperaturen $\bar{\vartheta}(t)$ lauten:

- **ebener Querschnitt** für $(-\frac{d}{2} = -X \leq x \leq X = \frac{d}{2})$, wenn d die Dicke eines (hinreichend langen und breiten) Bandes bzw. Bleches ist:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{\vartheta}(t) &= \frac{a}{2X} \cdot \int_{-X}^X \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} dx + \frac{\bar{q}_V(t)}{\rho \cdot c} \\ &= \frac{a}{2X} \cdot \left(\frac{\partial \vartheta(X, t)}{\partial x} - \frac{\partial \vartheta(-X, t)}{\partial x} \right) + \frac{\bar{q}_V(t)}{\rho c} \end{aligned} \quad (1.1-1.1)$$

bzw. speziell bei symmetrischen Randbedingungen:

$$\frac{d}{dt} \bar{\vartheta}(t) = \frac{a}{X} \cdot \frac{\partial \vartheta(X, t)}{\partial x} + \frac{\bar{q}_V(t)}{\rho c} \quad (1.1-1.2)$$

- **zylindersymmetrischer Querschnitt** für $(\frac{d_1}{2} = R_1 \leq r \leq R_2 = \frac{d_2}{2})$, wenn d_1 und d_2 Innen- und Außendurchmesser eines Rohres (bzw. langen Hohlzylinders) sind:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{\vartheta}(t) &= \frac{2\pi}{\Delta A} \cdot a \int_{R_1}^{R_2} r \cdot \vartheta(t, r) \cdot dr + \frac{\bar{q}_V(t)}{\rho c}; \quad \Delta A = \pi \cdot (R_2^2 - R_1^2) \\ &= 2 \frac{a}{R_2^2 - R_1^2} \cdot \left(R_2 \frac{\partial \vartheta(R_2, t)}{\partial r} - R_1 \frac{\partial \vartheta(R_1, t)}{\partial r} \right) + \frac{\bar{q}_V(t)}{\rho c} \quad (1.1-2.1) \end{aligned}$$

Speziell für $d_1 = R_1 = 0$ folgt mit $(0 \leq r \leq R = \frac{d}{2})$, wobei d der Durchmesser eines Drahtes (bzw. entsprechend langen Vollzylinders) ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\vartheta}(t) = 2 \frac{a}{R} \cdot \frac{\partial \vartheta(R, t)}{\partial r} + \frac{\bar{q}_V(t)}{\rho c} \quad (1.1-2.2)$$



- **prismatisch-rechteckiger Querschnitt** für

$$\left(-\frac{d_X}{2} = -X \leq x \leq X = \frac{d_X}{2}\right) \quad \text{und} \quad \left(-\frac{d_Y}{2} = -Y \leq y \leq Y = \frac{d_Y}{2}\right),$$

wenn d_X und d_Y die Seitenlängen des Rechteckquerschnitts eines „hinreichend langen“ Profildrahtes sind:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{\vartheta}(t) &= \frac{a}{2X \cdot 2Y} \cdot \int_{-X}^X \int_{-Y}^Y \left(\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2} \right) dx dy + \frac{\bar{q}_V(t)}{\rho \cdot c} \\ &= \frac{a}{2X} \cdot \left(\frac{\partial \vartheta(X, t)}{\partial x} - \frac{\partial \vartheta(-X, t)}{\partial x} \right) + \frac{a}{2Y} \cdot \left(\frac{\partial \vartheta(Y, t)}{\partial y} - \frac{\partial \vartheta(-Y, t)}{\partial y} \right) + \frac{\bar{q}_V(t)}{\rho \cdot c} \end{aligned} \quad (1.1-3)$$

Im Stranginneren ggf. auftretende Wärmequellen/-senken sind als Mittelwerte über den Querschnitt zu berücksichtigen:

- für das ebene Problem

$$\bar{q}_V(t) = \frac{l}{2X} \cdot \int_{-X}^X q_V(x, t) \cdot dx, \quad (1.1-4.1)$$

- für das zylindersymmetrische Problem

im Falle des Rohres bzw. Hohlzylinders

$$\bar{q}_V(t) = \frac{2\pi}{\Delta A} \cdot \int_{R_I}^{R_2} r \cdot q_V(r, t) \cdot dr, \quad \Delta A = \pi \cdot (R_2^2 - R_I^2) \quad (1.1-4.2.1)$$

im Falle des Drahtes bzw. Vollzylinders

$$\bar{q}_V(t) = \frac{2\pi}{A_R} \cdot \int_0^R r \cdot q_V(r, t) \cdot dr, \quad A_R = \pi \cdot R^2. \quad (1.1-4.2.2)$$

- und im Falle des Rechteckdrahtes

$$\bar{q}_V(t) = \frac{l}{A} \cdot \int_{-X}^X \int_{-Y}^Y q_V(x, y, t) \cdot dx dy, \quad A = 4XY \equiv d_X \cdot d_Y. \quad (1.1-4.3)$$

Die gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung (1.1-1), (1.1-2) und (1.1-3) lassen sich ohne nähere Spezifizierung der Randbedingungen noch nicht explizit integrieren.



1.2 Randbedingungen

Konvektion und Wärmestrahlung gleichermaßen berücksichtigende Randbedingungen, vgl. [MÜL 98, (A2.3.2.10-1)], haben

für das *ebene Problem* (1.1-1.1) an den beiden Rändern ($j = 1, 2$) bei $x = x_j = (-1)^j \cdot X$ die folgende Gestalt³:

$$(-1)^j \cdot \lambda \cdot \frac{\partial \vartheta((-1)^j \cdot X, t)}{\partial x} = \alpha_j(t) \cdot \left(\vartheta_{UKj}(t) - \vartheta((-1)^j \cdot X, t) \right) + \dots \\ \dots + C_j(t) \cdot \left(\Theta_{USj}^4(t) - \Theta^4((-1)^j \cdot X, t) \right), \quad (1.2-1)$$

wobei α_j die Wärmeübergangskoeffizienten (Konvektion), C_j die Strahlungsaustauschkoeffizienten sowie ϑ_{UKj} und Θ_{USj} die Umgebungstemperaturen (bezogen auf *CELSIUS*- bzw. *KELVIN*-Skala) darstellen. Der erste Summand der Gleichung (1.2-1) vertritt den Konvektions-, der zweite den Strahlungsanteil, wobei sich die Umgebungstemperaturen durchaus voneinander unterscheiden dürfen⁴.

Für das *zylindersymmetrische Profil* (1.1-2) lauten die entsprechenden Randbedingungen beim Hohlzylinder auf innerer und äußerer Mantelfläche, d.h., bei $r = R_j$ mit $j = 1$ oder 2 :

$$(-1)^j \cdot \lambda \cdot \frac{\partial \vartheta(R_j, t)}{\partial r} = \alpha_j(t) \cdot \left(\vartheta_{UKj}(t) - \vartheta(R_j, t) \right) + \\ + C_j(t) \cdot \left(\Theta_{USj}^4(t) - \Theta^4(R_j, t) \right), \quad (1.2-2.1)$$

bzw. speziell beim Vollzylinder auf dem Außenmantel bei $r = R$:

$$\lambda \cdot \frac{\partial \vartheta(R, t)}{\partial r} = \alpha(t) \cdot \left(\vartheta_{UK}(t) - \vartheta(R, t) \right) + C(t) \cdot \left(\Theta_{US}^4(t) - \Theta^4(R, t) \right). \quad (1.2-2.2)$$

³ Randquellen q_R seien hier außer Betracht gelassen.

⁴ Strahlungshintergrund und "Konvektionsmedium" können unterschiedliche Temperaturen aufweisen.



Bei einem Draht/Stab mit **Rechteckprofil** (1.1-3) lauten die Randbedingungen, wiederum als Überlagerung von Konvektion und Wärmestrahlung formuliert, jeweils mit $j = 1$ und 2 :

- bei $x = x_j = (-1)^j \cdot X$

$$\begin{aligned} (-1)^j \cdot \lambda \cdot \frac{\partial \vartheta((-1)^j \cdot X, t)}{\partial x} = & \alpha_{X_j}(t) \cdot \left(\vartheta_{UK_{X_j}}(t) - \vartheta((-1)^j \cdot X, t) \right) + \dots \\ & \dots + C_{X_j}(t) \cdot \left(\Theta_{US_{X_j}}^4(t) - \Theta^4((-1)^j \cdot X, t) \right) \end{aligned} \quad (1.2-3.1)$$

- bei $y = y_j = (-1)^j \cdot Y$

$$\begin{aligned} (-1)^j \cdot \lambda \cdot \frac{\partial \vartheta((-1)^j \cdot Y, t)}{\partial y} = & \alpha_{Y_j}(t) \cdot \left(\vartheta_{UK_{Y_j}}(t) - \vartheta((-1)^j \cdot Y, t) \right) + \dots \\ & \dots + C_{Y_j}(t) \cdot \left(\Theta_{US_{Y_j}}^4(t) - \left(\Theta^4((-1)^j \cdot Y, t) \right) \right) \end{aligned} \quad (1.2-3.2)$$

Infolge der Voraussetzung, dass sich die Betrachtungen hier ausschließlich auf wärmetechnisch dünnwandiges Wärmegut beschränken, darf jetzt vereinfachend angenommen werden, dass in den rechten Seiten der Randbedingungen (1.2-1) bis (1.2-3) die Randtemperaturen näherungsweise durch die jeweils mittleren Temperaturen ersetzt werden können, d.h. es wird $\vartheta((-1)^j \cdot X, t) \cong \bar{\vartheta}(t)$, $\vartheta((-1)^j \cdot Y, t) \cong \bar{\vartheta}(t)$ und $\vartheta(R_j, t) \cong \bar{\vartheta}(t)$ bzw. $\vartheta(R, t) \cong \bar{\vartheta}(t)$ angesetzt⁵.

1.3 Näherungsdifferentialgleichung

Mit o.g. Näherungen und Vereinfachungen erhält man entsprechend (1.1-1) bis (1.1-3) und mit den Randbedingungen (1.2-1) bis (1.2-3) für die über den Strangquerschnitt gemittelte Temperatur $\bar{\vartheta}(t)$ bzw. $\bar{\Theta}(t)$ eine

⁵ Diese Annahme ist bei *BIOT*-Zahlen im Bereich $0 \leq \mathcal{B}i \ll 1$ gerechtfertigt. Für praktische Belange ausreichend, liegen wärmetechnisch dünnwandige Verhältnisse bereits vor, wenn das Kriterium $\mathcal{B}i < 0,1 \dots 0,2$ eingehalten ist.

gewöhnliche, nichtlineare und inhomogene Differentialgleichung erster Ordnung mit variablen Koeffizienten⁶:

$$\boxed{\bar{\Theta}' + \frac{C(t)}{\varpi} \cdot \bar{\Theta}^4 + \frac{\alpha(t)}{\varpi} \cdot \bar{\Theta} = f(t)} \quad (1.3-1)$$

Die auf die Wärmeübertragungsfläche bezogene Wärmekapazität ϖ und die "Störfunktion" $f(t)$ haben sich hierbei körpergeometrie- bzw. querschnittsabhängig ergeben:

- *ebener Querschnitt (breites Band)*

$$\begin{aligned} \varpi &:= \rho \cdot c \cdot X \equiv \rho \cdot c \cdot \frac{d}{2}, & f(t) &:= \frac{I}{\varpi} \cdot \varphi^4(t); \\ \text{mit } \varphi^4(t) &:= \frac{d}{2} \cdot \bar{q}_V(t) + \frac{1}{2} \cdot \sum_{j=1}^2 \left(\alpha_j(t) \cdot \Theta_{UK_j}(t) + C_j(t) \cdot \Theta_{US_j}^4(t) \right), \end{aligned} \quad (1.3-2)$$

wobei in (1.3-1) die Mittelwerte der Wärmeübergangs- bzw. Strahlungsaustauschkoeffizienten aus beiden Bandoberflächen, d.h.

$\alpha(t) = \frac{1}{2} \cdot (\alpha_1(t) + \alpha_2(t))$ und $C(t) = \frac{1}{2} \cdot (C_1(t) + C_2(t))$, sowie in (1.3-2) die Wärmequellen \bar{q}_V nach (1.1-4.1) einzusetzen sind.

- *zylindersymmetrischer Querschnitt*

beim Hohlzylinder bzw. Rohr:

$$\begin{aligned} \varpi &:= \frac{\rho \cdot c}{2} (R_2 - R_1), & f(t) &:= \frac{I}{\varpi} \cdot \varphi^4(t); \\ \varphi^4(t) &:= \frac{R_2 - R_1}{2} \cdot \bar{q}_V(t) + \sum_{j=1}^2 \frac{R_j}{R_1 + R_2} \cdot \left(\alpha_j(t) \cdot \Theta_{UK_j}(t) + C_j(t) \cdot \Theta_{US_j}^4(t) \right) \end{aligned} \quad (1.3-3.1)$$

$$\alpha(t) := \frac{R_1 \alpha_1(t) + R_2 \alpha_2(t)}{R_1 + R_2}, \quad C(t) := \frac{R_1 C_1(t) + R_2 C_2(t)}{R_1 + R_2}$$

und \bar{q}_V nach (1.1-4.2.1)

⁶ Von einer Temperaturabhängigkeit der Koeffizienten sei zunächst abgesehen, um analytisch geschlossene Lösungsausdrücke erhalten zu können; siehe aber Hinweis in Teil B, Kap. 6, Gl. (6-1); eine Zeitabhängigkeit $\varpi = \varpi(t)$ ist möglich, jedoch hier wenig sinnvoll.



beim Vollzylinder bzw. Draht mit $R_1 \rightarrow 0$, $R_2 \rightarrow R$:

$$\varpi := \frac{\rho \cdot c \cdot R}{2}, \quad f(t) := \frac{1}{\varpi} \cdot \varphi^4(t); \quad (1.3-3.2)$$

$$\text{mit } \varphi^4(t) := \frac{R}{2} \cdot \bar{q}_V(t) + \alpha(t) \cdot \Theta_{UK}(t) + C(t) \cdot \Theta_{US}^4(t)$$

und \bar{q}_V nach (1.1-4.2.2)

- *prismatisch-rechteckiger Querschnitt*

$$\begin{aligned} \varpi &:= \rho c \sqrt{XY} \equiv \frac{\rho c}{2} \sqrt{d_X d_Y}, & f(t) &:= \frac{1}{\varpi} \cdot \varphi^4(t) \\ \varphi^4(t) &:= \frac{1}{2\sqrt{d_X d_Y}} \cdot \left\{ d_X d_Y \cdot \bar{q}_V(t) + \dots \right. \\ &\quad \dots + \left(\alpha_{X_1}(t) \cdot \Theta_{UK_{X_1}}(t) + \alpha_{X_2}(t) \cdot \Theta_{UK_{X_2}}(t) \right) \cdot d_Y + \dots \\ &\quad \dots + \left(\alpha_{Y_1}(t) \cdot \Theta_{UK_{Y_1}}(t) + \alpha_{Y_2}(t) \cdot \Theta_{UK_{Y_2}}(t) \right) \cdot d_X + \dots \\ &\quad \dots + \left(C_{X_1}(t) \cdot \Theta_{US_{X_1}}^4(t) + C_{X_2}(t) \cdot \Theta_{US_{X_2}}^4(t) \right) \cdot d_Y + \dots \\ &\quad \left. \dots + \left(C_{Y_1}(t) \cdot \Theta_{US_{Y_1}}^4(t) + C_{Y_2}(t) \cdot \Theta_{US_{Y_2}}^4(t) \right) \cdot d_X \right\} \end{aligned} \quad (1.3-4)$$

mit den effektiven Wärme- und Strahlungsübergängen

$$\alpha(t) := \frac{\left(\alpha_{X_1}(t) + \alpha_{X_2}(t) \right) \cdot d_Y + \left(\alpha_{Y_1}(t) + \alpha_{Y_2}(t) \right) \cdot d_X}{2\sqrt{d_X d_Y}}$$

$$C(t) := \frac{\left(C_{X_1}(t) + C_{X_2}(t) \right) \cdot d_Y + \left(C_{Y_1}(t) + C_{Y_2}(t) \right) \cdot d_X}{2\sqrt{d_X d_Y}}$$

und den Volumenquellen \bar{q}_V nach (1.1-4.3).

Hiermit und mit der Dgl. (1.3-1) liegt das in Aussicht gestellte, entsprechend vereinfachte Temperaturmodell für die verschiedenen Stab- bzw. Drahtprofile vollständig vor. Diese nichtlineare Differentialgleichung lässt sich mit entsprechender Software rein numerisch lösen. Unter gewissen Einschränkungen sind aber auch analytisch-geschlossene Lösungen zu gewinnen, die hier im Vordergrund stehen sollen.

1.4 Analytische Lösungen

Auf der Grundlage der Näherungsdifferentialgleichung (1.3-1) können analytische Lösungsausdrücke für über den Band- bzw. Strangquerschnitt gemittelte Temperaturen hergeleitet werden. Bevor jedoch eine allgemeingültige Lösung aufgesucht wird, sollen vorab die Lösungen zweier Grenzfälle – Wärmeübertragung ausschließlich durch Konvektion und ausschließlich durch Wärmestrahlung - betrachtet werden. Für die Anwendung sind diese folgenden Lösungen stets dann vorteilhaft nutzbar, wenn das *BIOT*-Kriterium $B\dot{v} < 0,1 \dots 0,2$ eingehalten wird.

1.4.1 Konvektive Wärmeübertragung

Bei rein konvektiver Wärmeübertragung vereinfacht sich Gleichung (1.3-1) infolge $C \rightarrow 0$ zu einer linearen Dgl., deren Lösung bekanntlich unter Verwendung der Methode der Variation der Konstanten (z.B. [ZEI 96, Kap. 1.12.4.5]) mit $f(t)|_{C=0}$ zu

$$\bar{\vartheta}(t) = \left(\bar{\vartheta}(t_A) + \int_{t_A}^t f(\tau) \cdot e^{-\int_{t_A}^{\tau} \frac{\alpha(\xi)}{\varpi} d\xi} d\tau \right) \cdot e^{-\int_{t_A}^t \frac{\alpha(\tau)}{\varpi} d\tau} \quad (1.4-1)$$

erhalten wird. Die vorkommenden Integrale sind analytisch geschlossen nur lösbar, wenn die Zeitfunktionen $\alpha(t)$ und $f(t)|_{C=0}$ von hinreichend einfacher Bauart sind. Andernfalls lassen sich mittels numerischer Integration immerhin quantitative Ergebnisse erhalten.

Im einfachsten Falle zeitunabhängiger Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha(t) = \alpha = konst.$ und "Störfunktionen" $f(t) = f = konst.$ sowie mit der Anfangstemperatur $\bar{\vartheta}(t_A) := \bar{\vartheta}_A$ ergibt sich nach kurzer Zwischenrechnung:

$$\bar{\vartheta}(t) = \bar{\vartheta}_A \cdot e^{-\frac{\alpha}{\varpi} \cdot (t-t_A)} + f \cdot \frac{\varpi}{\alpha} \cdot \left(1 - e^{-\frac{\alpha}{\varpi} \cdot (t-t_A)} \right);$$

$$f := f_{(C=0)} \quad (1.4-2)$$

Der Beharrungszustand wird nach hinreichend langer Zeit mit

$$\bar{\vartheta}(t \rightarrow \infty) \equiv \bar{\vartheta}_\infty = \frac{\varpi}{\alpha} \cdot f = \frac{\varphi^4}{\alpha}; \quad \varphi := \varphi_{(C=0)} \quad (1.4-3.1)$$

erreicht.



Damit lässt sich Gl. (1.4-2) als explizite Lösungsformel in der bekannten Form

$$\begin{aligned}\bar{\vartheta}(t) &= \bar{\vartheta}_A + (\bar{\vartheta}_\infty - \bar{\vartheta}_A) \cdot \left(1 - e^{-\frac{\alpha}{\varpi} \cdot (t - t_A)}\right) \\ &\equiv \bar{\vartheta}_\infty + (\bar{\vartheta}_A - \bar{\vartheta}_\infty) \cdot e^{-\frac{\alpha}{\varpi} \cdot (t - t_A)}\end{aligned}\quad (1.4-3.2)$$

oder, unter Verwendung einer Zeitkonstante $T_K := \frac{\varpi}{\alpha}$, in impliziter und dimensionsloser Form

$$\ln \frac{1 - (\bar{\vartheta}_A / \bar{\vartheta}_\infty)}{1 - (\bar{\vartheta}(t) / \bar{\vartheta}_\infty)} = \frac{t - t_A}{T_K} \quad (1.4-3.3)$$

im Temperaturintervall $\bar{\vartheta}(t) \in (\bar{\vartheta}_A, \bar{\vartheta}_\infty)$ angeben.

Infolge der Identität $\frac{1 - (\bar{\vartheta}_A / \bar{\vartheta}_\infty)}{1 - (\bar{\vartheta}(t) / \bar{\vartheta}_\infty)} \equiv \frac{1 - (\bar{\vartheta}_\infty / \bar{\vartheta}_A)}{1 - (\bar{\vartheta}_\infty / \bar{\vartheta}(t))}$ verhalten sich für

lineare, konvektive Randbedingungen abgeleitete Lösungen (1.4-3.2) bzw. (1.4-3.3) gegenüber der Erwärmung $\bar{\vartheta}_A \leq \bar{\vartheta}(t) \leq \bar{\vartheta}_\infty$ wie der Abkühlung $\bar{\vartheta}_A \geq \bar{\vartheta}(t) \geq \bar{\vartheta}_\infty$ völlig symmetrisch.

Die dimensionslosen Temperaturverhältnisse in Abhängigkeit der dimensionslosen Zeit $(t - t_A) / T_K$ zeigen deshalb gleichermaßen für Erwärmung $0 \leq (\bar{\vartheta}_A / \bar{\vartheta}_\infty) \leq (\bar{\vartheta}(t) / \bar{\vartheta}_\infty) \leq 1$ wie für Abkühlung das gleiche Verhalten, was Bild 1 noch einmal veranschaulicht.

Nach Konkretisierung auf das ebene, das zylindersymmetrische oder das Rechkantprofil durch Einsetzen von (1.3-2), (1.3-3) oder (1.3-4) in Gl. (1.4-3.1) sowie mit einem Anfangszeitpunkt $t_A = 0$, werden mit Gl. (1.4-3.2) im Wesentlichen – hier allerdings zusätzlich unter Berücksichtigung von Volumenquellen q_V – bereits bekannte Näherungslösungen für die querschnittsbezogen mittleren Temperaturen erhalten⁷.

⁷ Vgl. z.B [HEI 51, Kap. VIII, 1.a)], [VDI 13, Ec 9] oder [STE 87, (6.3-5)].

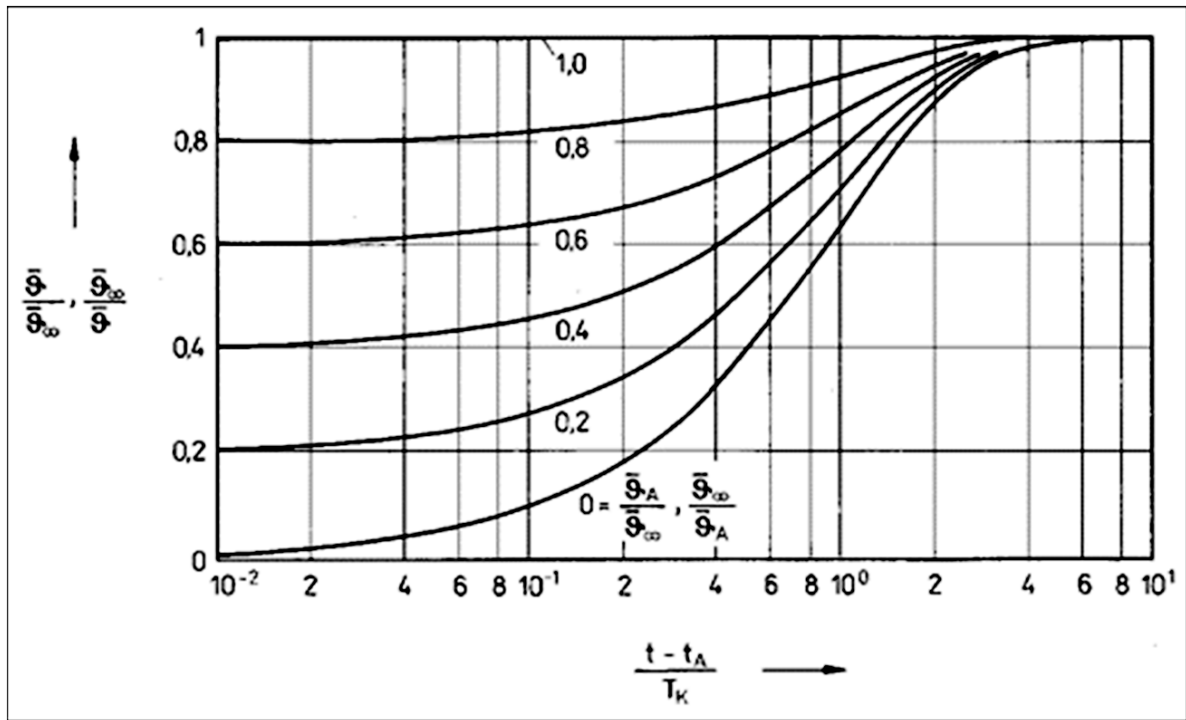


Bild 1: Temperaturverhältnisse bei Wärmeübertragung durch Konvektion

Diese sind wie folgt gegeben:

- *ebener* Querschnitt mit $\bar{\alpha} = \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_2)$ und sofern $B\dot{\nu} = \frac{\bar{\alpha}}{\lambda} \cdot d \ll 1$ zutrifft:

$$\bar{\vartheta}(t) \approx \vartheta_A + \left(\frac{1}{2\bar{\alpha}} \cdot \sum_{j=1}^2 \alpha_j \cdot \vartheta_{UKj} - \vartheta_A + \frac{d}{2\bar{\alpha}} \cdot q_V \right) \cdot \left(1 - e^{-\frac{2\bar{\alpha}}{\rho c d} \cdot t} \right) \quad (1.4-3.4)$$

- *zylindersymmetrischer* Querschnitt

für Hohlzylinder bzw. Rohr mit $\bar{\alpha} = \frac{R_1 \alpha_1 + R_2 \alpha_2}{R_1 + R_2}$ und sofern

$$B\dot{\nu} = \frac{\bar{\alpha}}{\lambda} \cdot (R_2 - R_1) \ll 1 \text{ gilt:}$$

$$\bar{\vartheta}(t) \approx \vartheta_A + \left(\frac{1}{\bar{\alpha}} \cdot \sum_{j=1}^2 \frac{R_j \cdot \alpha_j}{R_1 + R_2} \cdot \vartheta_{UKj} - \vartheta_A + \frac{R_2 - R_1}{2\bar{\alpha}} \cdot q_V \right) \cdot \left(1 - e^{-\frac{2\bar{\alpha}}{\rho c \cdot (R_2 - R_1)} \cdot t} \right) \quad (1.4-3.5)$$



sowie mit $R_j \rightarrow 0$ für Vollzylinder bzw. Draht und sofern

$$\mathcal{B}\dot{v} = \frac{\alpha}{\lambda} \cdot R \ll 1 \text{ gilt:}$$

$$\boxed{\bar{\vartheta}(t) \approx \vartheta_A + \left(\vartheta_{UK} - \vartheta_A + \frac{R}{2\alpha} \cdot q_V \right) \cdot \left(1 - e^{-\frac{2\alpha}{\rho c R} \cdot t} \right)}, \quad (1.4-3.6)$$

was mit einer auf anderem Wege gefundenen Näherungsformel [MÜL 98, (A23.2.9-5.3) bzw. (A2.3.2.9-8.2)] erwartungsgemäß übereinstimmt. Außerdem wird aus der Hohlzylinderlösung (1.4-3.5) nicht nur für $R_j \rightarrow 0$ die des Vollzylinders (1.4-3.6), sondern für $R_j \rightarrow \infty$, $R_2 = R_1 + d$ auch die des ebenen Falls (ausgedehnte Platte bzw. breites Band) (1.4-3.4) folgerichtig erhalten.

Auf derselben Grundlage lassen sich Lösungen für weitere Querschnitte bzw. Profile herleiten. Hier sei noch eine entsprechende Lösung für den prismatisch-rechteckigen Fall angeben:

- *prismatisch-rechteckiger Querschnitt*

$$\boxed{\bar{\vartheta}(t) \approx \vartheta_A + \left(\frac{\sum_{j=1}^2 (\alpha_{X_j} \cdot \vartheta_{UKX_j} \cdot d_Y + \alpha_{Y_j} \cdot \vartheta_{UKY_j} \cdot d_X)}{2\bar{\alpha} \cdot \sqrt{d_X d_Y}} - \vartheta_A + \frac{\sqrt{d_X d_Y}}{2\bar{\alpha}} \cdot q_V \right) \cdot \left(1 - e^{\frac{-2\bar{\alpha}}{\rho c \sqrt{d_X d_Y}} \cdot t} \right)}; \quad (1.4-3.7)$$

der effektive Wärmeübergangskoeffizient

$$\bar{\alpha} = \frac{\alpha_{X_1} + \alpha_{X_2}}{2} \cdot \sqrt{\frac{d_Y}{d_X}} + \frac{\alpha_{Y_1} + \alpha_{Y_2}}{2} \cdot \sqrt{\frac{d_X}{d_Y}} \text{ wird gebildet mit den einzelnen}$$

Wärmeübergängen an den vier Seiten und mit den Seitenlängen des Rechteckprofils d_X , d_Y .

Im einfachsten Falle eines Stabes mit quadratischem Querschnitt, d.h. $d_X = d_Y = d$, sowie unter allseitig vollsymmetrischen Randbedingungen $\vartheta_{UKX_1} = \vartheta_{UKX_2} = \vartheta_{UKY_1} = \vartheta_{UKY_2} := \vartheta_{UK}$ und $\alpha_{X_1} = \alpha_{X_2} = \alpha_{Y_1} = \alpha_{Y_2} = \alpha$ gewinnt man aus (1.4-3.7) speziell:

$$\boxed{\bar{\vartheta}(t) = \vartheta_A + \left(\vartheta_{UK} - \vartheta_A + \frac{d}{4\alpha} \cdot q_V \right) \cdot \left(1 - e^{-\frac{4\alpha}{\rho c d} \cdot t} \right)}. \quad (1.4-3.8)$$

Diese Lösung ist mit der betreffenden Lösung des Rundstabes bzw. Drahtes identisch, wenn unter d statt der Seitenlänge des Quadrats der Durchmesser verstanden wird. Damit verhält sich ein Vierkantdraht quadratischen Querschnitts unter wärmetechnisch dünnwandigen Verhältnissen und bei voll symmetrischen Randbedingungen thermisch genauso wie ein entsprechender Runddraht (1.4-3.6). Das jedoch ist folgerichtig, da das Verhältnis von Querschnittsfläche zu Umfang (bzw. Volumen zu Oberfläche eines Drahtabschnitts) für beide Geometrien mit $\sim d/4$ exakt denselben Wert besitzt und damit das Verhältnis zwischen dem Wärme austauschenden Volumen und seiner Wärme übertragenden Oberfläche unverändert bleibt. Weiter gilt ganz analog, dass auch Drähte/Stäbe mit anderweitig profilierten Querschnitten dasselbe zeitabhängige Temperaturverhalten aufweisen, solange deren Verhältnis von Volumen zu Oberfläche bzw. Querschnitt zu Umfang unverändert bleibt.

In diesem Sinne lässt sich die Gleichung (1.4-3.8) noch verallgemeinern, indem das Verhältnis von Umfang zu Querschnittsfläche U/A bzw. von Mantelfläche des profilierten Stranges zum davon umschlossenen Volumen A_M/V eingeführt wird:

Mit der Zeitkonstante $T = \frac{\rho c}{\alpha} \cdot \frac{A}{U} = \frac{\rho c}{\alpha} \cdot \frac{V}{A_M}$ (1.4-3.9a)

erhält man die Lösung in der Form

$$\bar{\vartheta}(t) = \vartheta_A + \left(\vartheta_{UK} - \vartheta_A + T \cdot \frac{q_V}{\rho \cdot c} \right) \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{T}} \right) \quad (1.4-3.9b)$$

Damit lassen sich Aufwärm- und Abkühlvorgänge von Profilen mit beliebigen Quotienten aus Oberfläche zu Volumen berechnen, solange es das Kriterium wärmetechnisch dünnwandiger Verhältnisse erlaubt und solange die Umgebungstemperatur über die gesamte wärmeübertragende Oberfläche gleich bleibt. Es handelt sich bei der Lösung (1.4-3.9) um eine gegenüber [BAE 10, Kap. 2.3.5.2] erweiterte Lösung, insofern sie auch innere Quellen/Senken $q_V = const.$ zu berücksichtigen gestattet.

Treten - wiederum bei einheitlicher Umgebungstemperatur - an der Körper- bzw. Mantelfläche A_M , zusammengesetzt aus k Mantel-Teilflächen A_{M_j} , lokal unterschiedliche Wärmeübergangsbedingungen auf, so ist in (1.4-3.9) der Wärmeübergangskoeffizient α durch das gewichtete Mittel der einzelnen k Oberflächen- und Wärmeübergangsanteile zu ersetzen:



$$\bar{\alpha} = \frac{\sum_{j=1}^k \alpha_j \cdot A_{Mj}}{A_M} \quad \text{mit} \quad A_M = \sum_{j=1}^k A_{Mj} . \quad (1.4-3.10)$$

Wie sich übrigens an Hand von (1.3-1) mit (1.3-3.2) und (1.3-4) leicht zeigen lässt, trifft die Aussage, dass sich runde und quadratische Querschnitte unter wärmetechnisch dünnwandigen Verhältnissen, wenn deren Durchmesser und Kantenlängen übereinstimmen, völlig gleichwertig verhalten, nicht nur für konvektive Wärmeübergänge zu, sondern genauso für Wärmeübertragung infolge Strahlungsaustauschs, d.h. diese beiden Geometrien erweisen sich für $d_{\square} = d_{\circ}$ auch invariant gegenüber der Art des Wärmeübergangs. Durch Induktion folgt schließlich, dass diese Aussage verallgemeinert für alle Stäbe mit Querschnitten zutrifft, deren Verhältnis aus Volumen zu Oberfläche bzw. Querschnitt zu Umfang unverändert bleibt. Diese allgemeine Aussage folgt auch aus einer entsprechenden Betrachtung zum Energieaustausch bzw. der Energiebilanzen.

1.4.2 Wärmeübertragung durch Wärmestrahlung

Wenn der konvektive Wärmeübertragungsanteil gegenüber dem der Strahlung vernachlässigt werden kann ($\alpha \rightarrow 0$), ist Gleichung (1.3-1) wieder nichtlinear und muss auf anderem Wege gelöst werden. Eine Lösung ist noch relativ einfach dann herzustellen, wenn der Strahlungsaustauschkoeffizient und die "Störfunktion" als von der Zeit unabhängig betrachtet werden können, d.h., wenn die Größen $C(t) = C = konst.$ und $f(t) = f = konst.$ bzw. wenn $\varphi(t) = \varphi = konst.$ gilt. Ausgehend von Dgl. (1.3-1) gelangt man durch Trennung der Variablen unmittelbar zu

$$\varpi \cdot \int_{\bar{\Theta}_A}^{\bar{\Theta}(t)} \frac{d\Theta}{\varphi^4 - C \cdot \Theta^4} = \int_{t_A}^t dt$$

bzw.
$$\boxed{\int_{\bar{\Theta}_A}^{\bar{\Theta}(t)} \frac{d\Theta}{\frac{\varphi^4}{C} - \Theta^4} = \frac{C}{\varpi} \cdot (t - t_A)} . \quad (1.4-4)$$

Die Lösung für das Integral linker Hand kann einer Integral-Formelsammlung entnommen werden, z.B. [ZEI 96, Kap. 0.9.5; Nr. 91], was auf die Gleichung

$$\ln \frac{\varphi + \sqrt[4]{C} \cdot \Theta}{\varphi - \sqrt[4]{C} \cdot \Theta} + 2 \cdot \arctan \frac{\sqrt[4]{C} \cdot \Theta}{\varphi} \left| \begin{array}{l} \Theta = \bar{\Theta}(t) \\ \Theta = \bar{\Theta}_A \end{array} \right. = 4 \cdot \frac{\varphi^3 \cdot \sqrt[4]{C}}{\varpi} \cdot (t - t_A) \quad (1.4-5.1)$$

bzw. unter Benutzung der Beharrungs- oder Ausgleichstemperatur

$$\bar{\Theta}_\infty \equiv \bar{\Theta}(t \rightarrow \infty) = \frac{\varphi}{\sqrt[4]{C}} \quad \text{mit} \quad \varphi = \varphi_{(\alpha=0)} \quad (1.4-5.2)$$

sowie durch Ansetzen einer Zeitkonstante

$$T_S = \frac{\varpi}{4 \cdot C \cdot \bar{\Theta}_\infty^3} \quad (1.4-5.3)$$

auf die Gleichung

$$\ln \frac{\left(1 - \frac{\bar{\Theta}_A}{\bar{\Theta}_\infty}\right) \cdot \left(1 + \frac{\bar{\Theta}(t)}{\bar{\Theta}_\infty}\right)}{\left(1 - \frac{\bar{\Theta}(t)}{\bar{\Theta}_\infty}\right) \cdot \left(1 + \frac{\bar{\Theta}_A}{\bar{\Theta}_\infty}\right)} + 2 \cdot \arctan \frac{\frac{\bar{\Theta}(t) - \bar{\Theta}_A}{\bar{\Theta}_\infty}}{1 + \frac{\bar{\Theta}_A \cdot \bar{\Theta}(t)}{\bar{\Theta}_\infty^2}} = \frac{t - t_A}{T_S} \quad (1.4-5.4)$$

führt⁸. Die Spezialisierung auf das ebene, das zylindersymmetrische oder das Rechteckprofil kann mit (1.3-2), (1.3-3) oder (1.3-4) vorgenommen werden.

Im Gegensatz zu gewohnten Darstellungen, in denen die Temperatur explizit gestellt werden kann, z.B. (1.4-1), (1.4-2), weist Lösung (1.4-5.4) eine bezüglich $\bar{\Theta}(t)$ implizite Form auf. Mit effizienten numerischen Algorithmen (Solver), über die heute bereits komfortablere Taschenrechner verfügen, lassen sich jedoch mit dieser Formel mühelos Temperaturen $\bar{\Theta}$ in Abhängigkeit von der Zeit t berechnen.

Als besonders anwenderfreundlich erweist sich die Lösung naturgemäß dann, wenn umgekehrt gefragt wird, nach welcher Zeit t eine bestimmte Temperatur $\bar{\Theta} \in (\bar{\Theta}_A, \bar{\Theta}_\infty)$ erreicht ist.

Es ist zu erkennen, dass Gleichung (1.4-5.4) - analog Gl. (1.4-3.3) - von den drei dimensionslosen Parametern $\bar{\Theta}_A / \bar{\Theta}_\infty$, $\bar{\Theta}(t) / \bar{\Theta}_\infty$ und $(t - t_A) / T_S$ abhängt. Das ermöglicht wiederum eine bequeme graphische Darstellung sowohl im Erwärmungsfall $0 \leq (\bar{\Theta}_A / \bar{\Theta}_\infty) \leq (\bar{\Theta}(t) / \bar{\Theta}_\infty) \leq 1$ (Bild 2a)

⁸ Eine entsprechende, allerdings nur für $q_V = 0$ und $\Theta_A = 0$ sowie auf anderem Wege hergeleitete Lösung findet sich in [BAN 66, S.339-344] oder ähnlich auch in [STE 87, (6.3-7)].

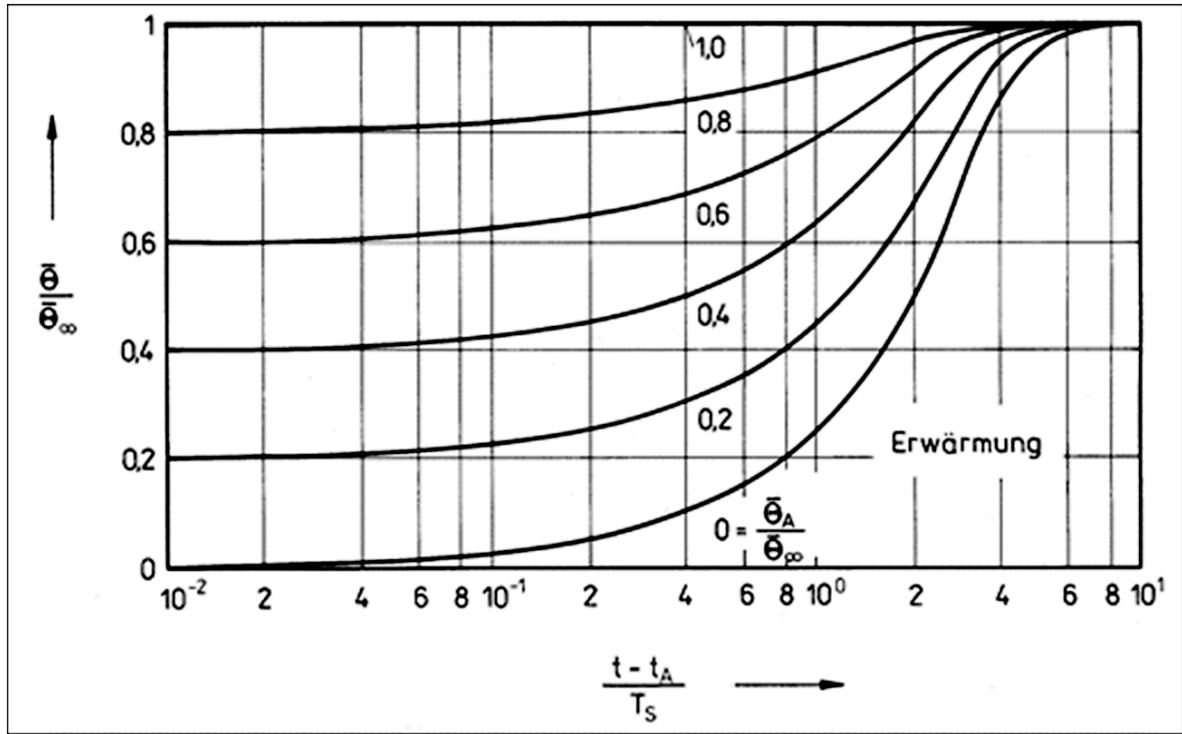


Bild 2a: Erwärmung bei Wärmeübertragung durch Wärmestrahlung

als auch bei Abkühlung $0 \leq (\bar{\Theta}_\infty / \bar{\Theta}_A) \leq (\bar{\Theta}_\infty / \bar{\Theta}(t)) \leq 1$ (Bild 2b).

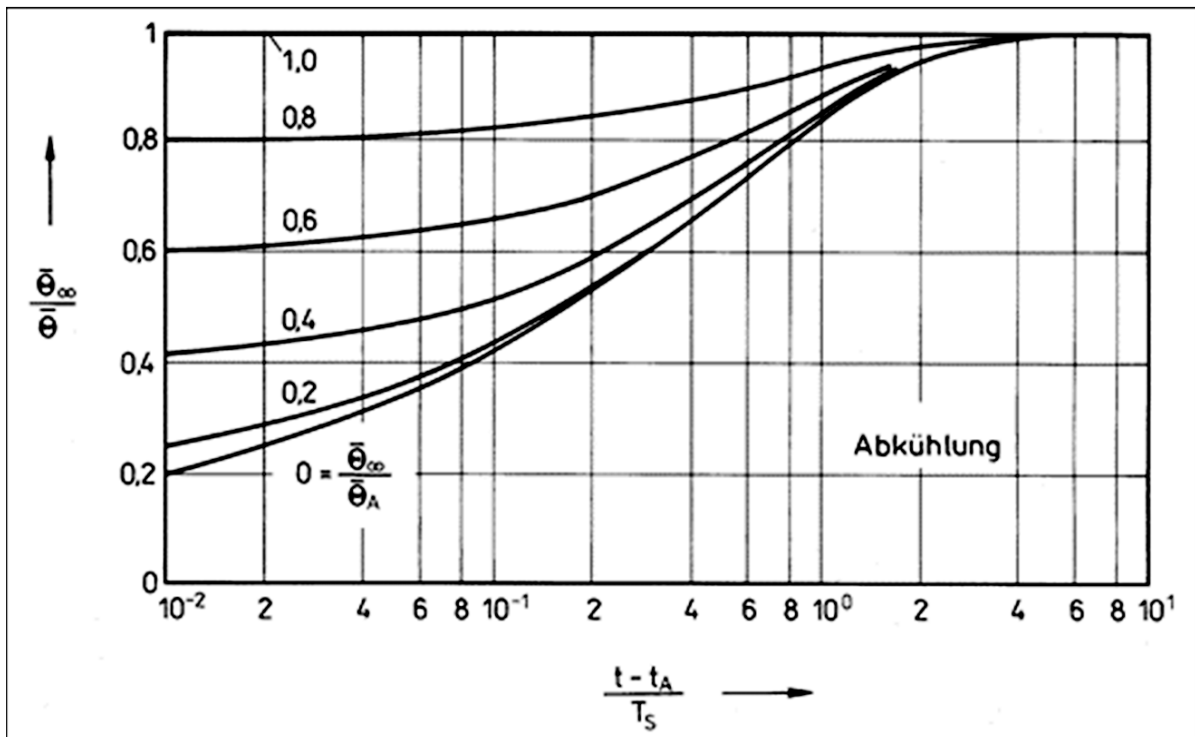


Bild 2b: Abkühlung bei Wärmeübertragung durch Wärmestrahlung

Die mit fortschreitender Zeit $t_A \rightarrow t \rightarrow \infty$ erfolgende Temperaturänderung $\bar{\Theta}_A \rightarrow \bar{\Theta}(t) \rightarrow \bar{\Theta}_\infty$ weist bezüglich Erwärmung und Abkühlung Asymmetrie

auf. Insbesondere geht Erwärmung wesentlich rascher vonstatten als Abkühlung. Diese Erscheinung wird durch die Nichtlinearität der Randbedingung(en) hervorgerufen⁹.

1.4.3 Wärmeübertragung durch Konvektion und Wärmestrahlung

Eine geschlossene Lösungsgleichung, die Konvektion und Wärmestrahlung gleichzeitig berücksichtigt, scheint im Fachschrifttum erstmals bei [MÜL 98, Kap. A2.3.3.2.3.1] angegeben worden zu sein. Deren Herleitung sei hier wiederholt. Außerdem kann zur Temperaturberechnung dünnwandigen Wärmegutes noch eine numerisch-iterativ anzuwendende Formel gefunden werden, was im Anschluss daran dargestellt wird.

1.4.3.1 Geschlossene Lösungsgleichung

Sind sowohl Konvektion als auch Wärmestrahlung an der Wärmeübertragung wesentlich beteiligt, so sind prinzipielle Vereinfachungen an Gleichung (1.3-1), wie sie in den beiden vorangegangenen Abschnitten vorgenommen wurden, nicht mehr zulässig und es muss versucht werden, eine Lösung des allgemeineren Problems zu finden. Allerdings werde vereinfachend wieder davon ausgegangen, dass die Koeffizienten und auch die "Störfunktion" zeitunabhängig sind, d.h., es soll $\alpha(t) = \alpha = konst.$, $C(t) = C = konst.$ und $f(t) = f = konst.$ bzw. $\varphi(t) = \varphi = konst.$ gelten¹⁰.

Damit lässt sich Gleichung (1.3-1) durch Trennung der Variablen in die Form

$$\int_{\bar{\Theta}_A}^{\bar{\Theta}(t)} \frac{d\Theta}{\frac{\varphi^4}{C} - \Theta^4 - \frac{\alpha}{C} \cdot \Theta} = \frac{C}{\varpi} \cdot (t - t_A) \quad (1.4-6)$$

überführen.

⁹ Beachte $T_S = T_S(\bar{\Theta}_\infty)$ und vgl. [MÜL 98, Anhang B: Zu Kapitel A2.3.3.2.2 „Wärmeübertragung durch Wärmestrahlung“]

¹⁰ Der Lösungsweg für variable Koeffizienten und "Störfunktion" wird in [KAM 61, C 1.55] skizziert.



Eine Lösungsmöglichkeit für diese Gleichung besteht in deren numerischer Integration. Ist man jedoch an einem symbolischen Ergebnis interessiert, so kann zunächst eine Partialbruchzerlegung des Integranden gemäß

$$\frac{-I}{x^4 + \frac{\alpha}{C} \cdot x - \frac{\varphi^4}{C}} = \sum_{j=1}^4 \frac{B_j}{x - x_j} \quad (1.4-6.1)$$

vorgenommen werden. Die Integration ergibt

$$\sum_{j=1}^4 B_j \cdot \ln \frac{\bar{\Theta} - x_j}{\Theta_A - x_j} = \frac{C}{\varpi} \cdot (t - t_A) \quad (1.4-6.2)$$

wobei die Koeffizienten B_j durch

$$\begin{aligned} B_1 &= [(x_2 - x_1)(x_3 - x_1)(x_4 - x_1)]^{-1} \\ B_2 &= [(x_1 - x_2)(x_3 - x_2)(x_4 - x_2)]^{-1} \\ B_3 &= [(x_1 - x_3)(x_2 - x_3)(x_4 - x_3)]^{-1} \\ B_4 &= [(x_1 - x_4)(x_2 - x_4)(x_3 - x_4)]^{-1} \end{aligned} \quad (1.4-6.3)$$

festgelegt sind. Die Wurzeln x_1 bis x_4 als Nullstellen des Nenners des Integranden werden aus der Gleichung 4. Grades

$$\boxed{x^4 + \frac{\alpha}{C} \cdot x - \frac{\varphi^4}{C} = 0} \quad (1.4-6.4)$$

bestimmt. Die linke Gleichungsseite lässt sich als Produkt zweier quadratischer Gleichungen darstellen

$$\left[x^2 + \sqrt{y_1} \cdot x + \frac{1}{2} \cdot \left(y_1 - \frac{\alpha}{C \cdot \sqrt{y_1}} \right) \right] \cdot \left[x^2 - \sqrt{y_1} \cdot x + \frac{1}{2} \cdot \left(y_1 + \frac{\alpha}{C \cdot \sqrt{y_1}} \right) \right] = 0 \quad (1.4-6.5)$$

wobei y_1 als einzige reelle Wurzel der kubischen Resolvente

$$\boxed{y^3 + 4 \cdot \frac{\varphi^4}{C} \cdot y - \left(\frac{\alpha}{C} \right)^2 = 0} \quad (1.4-6.6)$$

$$\text{zu } y_1 = \sqrt[3]{\sqrt{D} + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\alpha}{C} \right)^2} - \sqrt[3]{\sqrt{D} - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\alpha}{C} \right)^2} \geq 0;$$

$$\text{mit } D := \left(\frac{4}{3} \cdot \frac{\varphi^4}{C} \right)^3 + \frac{1}{4} \left(\frac{\alpha}{C} \right)^4 \quad (1.4-6.7)$$

erhalten wird. Die Wurzeln x_1 bis x_4 ergeben sich als Lösungen der beiden quadratischen Gleichungen (1.4-6.5) zu

$$\begin{aligned} x_{1,2} &= \frac{1}{2} \cdot \left(-\sqrt{y_1} \pm \sqrt{\frac{\alpha}{C} \cdot \frac{2}{\sqrt{y_1}} - y_1} \right) = \frac{1}{2} \cdot \left(-\sqrt{y_1} \pm \sqrt{2 \cdot \sqrt{4 \cdot \frac{\phi^4}{C} + y_1^2} - y_1} \right) \\ x_{3,4} &= \frac{1}{2} \cdot \left(\sqrt{y_1} \pm i \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{C} \cdot \frac{2}{\sqrt{y_1}} + y_1} \right) = \frac{1}{2} \cdot \left(\sqrt{y_1} \pm i \cdot \sqrt{2 \cdot \sqrt{4 \cdot \frac{\phi^4}{C} + y_1^2} + y_1} \right); \end{aligned} \quad (1.4-6.8)$$

die jeweils zweite Form der Lösung wurde durch Umformung mit der Gleichung (1.4-6.6) erhalten und ist numerisch unmittelbar anwendbar auch im Falle vernachlässigbarer Konvektion, das heißt für $\alpha \rightarrow 0$. Einsetzen der Wurzeln (1.4-6.8) in die Lösungsgleichung (1.4-6.2) führt infolge der konjugiert komplexen Wurzeln $x_{3,4}$ zunächst auf komplexwertige Terme, die durch geeignete Umformungen jedoch beseitigt werden können.

Durch Vergleich der Dgl. (1.3-1) mit Gl. (1.4-6.4) ist zu erkennen, dass speziell die Temperatur des Beharrungszustandes $\bar{\Theta}_\infty$ wegen $\bar{\Theta}'(t \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ unmittelbar aus der Gleichung (1.4-6.4) als eine der vier Wurzeln x_1 bis x_4 gemäß (1.4-6.8) zu erhalten ist. Während die komplexen Wurzeln $x_{3,4}$ von vornherein als Lösungen ausscheiden, ergibt eine Überprüfung von $x_{1,2}$ anhand Gl. (1.4-6.2), dass die Temperatur des Beharrungszustandes durch x_1 entsprechend $\bar{\Theta}(t \rightarrow \infty) = \bar{\Theta}_\infty \equiv x_1$ gegeben ist.

Mit den Abkürzungen

$$\tilde{\phi} = 4 \cdot \frac{\phi^4}{C} \quad \text{und} \quad \Phi = \sqrt{1 + \frac{\tilde{\phi}}{y_1^2}} \equiv \sqrt{1 + 4 \frac{\phi^4}{C \cdot y_1^2}} \quad (1.4-7.1)$$

lässt sich die Temperatur des Beharrungszustandes auch durch

$$\boxed{\bar{\Theta}_\infty = \frac{1}{2} \cdot \left(\sqrt{2 \cdot \Phi - 1} - 1 \right) \cdot \sqrt{y_1}} \quad (1.4-7.2)$$

ausdrücken.

Ähnlich wie bei Ergebnisgleichung (1.4-5.4) kann eine dimensionslose Form der Lösung hergestellt werden.



Zunächst lässt sich unter Verwendung der Abkürzung (1.4-7.1) die Wurzel x_2 als ein gebrochenes Vielfaches der Wurzel x_1 bzw. der Beharrungstemperatur

$$x_2 = \frac{1 + \sqrt{2\Phi - 1}}{1 - \sqrt{2\Phi - 1}} \cdot x_1 = \frac{1 + \sqrt{2\Phi - 1}}{1 - \sqrt{2\Phi - 1}} \cdot \bar{\Theta}_\infty \quad (1.4-7.3)$$

schreiben. Mit Einführung einer Zeitkonstante

$$T = \frac{(1 + \Phi) \cdot (\sqrt{2\Phi - 1} - 1)^3}{2 \cdot (2 + \Phi^2) \cdot \sqrt{2\Phi - 1}} \cdot \frac{\varpi}{4 \cdot C \cdot \bar{\Theta}_\infty^3} \quad (1.4-7.4)$$

wird schließlich die Lösung in dimensionsloser Form erhalten:

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{\sqrt{2\Phi - 1}}{\Phi + 1}\right) \cdot \ln \frac{\left(1 - \frac{\bar{\Theta}_A}{\bar{\Theta}_\infty}\right) \cdot \left(\frac{1 + \sqrt{2\Phi - 1}}{1 - \sqrt{2\Phi - 1}} - \frac{\bar{\Theta}(t)}{\bar{\Theta}_\infty}\right)}{\left(1 - \frac{\bar{\Theta}(t)}{\bar{\Theta}_\infty}\right) \cdot \left(\frac{1 + \sqrt{2\Phi - 1}}{1 - \sqrt{2\Phi - 1}} - \frac{\bar{\Theta}_A}{\bar{\Theta}_\infty}\right)} + \dots \\ & \dots \cdot \frac{\sqrt{2\Phi - 1}}{\Phi + 1} \cdot \ln \frac{\left(1 + \frac{\bar{\Theta}(t) \cdot (1 - \sqrt{2\Phi - 1})}{\bar{\Theta}_\infty}\right)^2 + 1 + 2\Phi}{\left(1 + \frac{\bar{\Theta}_A \cdot (1 - \sqrt{2\Phi - 1})}{\bar{\Theta}_\infty}\right)^2 + 1 + 2\Phi} + 2 \frac{(\Phi - 1) \sqrt{2\Phi - 1}}{(\Phi + 1) \sqrt{2\Phi + 1}} \cdot \\ & \cdot \arctan \frac{\frac{\bar{\Theta}(t) - \bar{\Theta}_A}{\bar{\Theta}_\infty} \cdot (\sqrt{2\Phi - 1} - 1) \cdot \sqrt{1 + 2\Phi}}{1 + 2\Phi + \left(1 + \frac{\bar{\Theta}(t) \cdot (1 - \sqrt{2\Phi - 1})}{\bar{\Theta}_\infty}\right) \cdot \left(1 + \frac{\bar{\Theta}_A \cdot (1 - \sqrt{2\Phi - 1})}{\bar{\Theta}_\infty}\right)} \\ & = \frac{t - t_A}{T} \end{aligned} \quad (1.4-7.5)$$

Speziell bei vernachlässigbarem Konvektionsanteil, d.h., für $\alpha \rightarrow 0$ und damit infolge (1.4-6.7) für $y_1 = 0$, geht Lösung (1.4-7.5) in die entsprechende weiter vorn angegebene Lösung (1.4-5.4) über, während umgekehrt für verschwindenden Strahlungsanteil $C \rightarrow 0$ wieder Lösung (1.4-3.3) gilt.

Die Spezialisierung auf das ebene, das zylindersymmetrische oder das Rechteckprofil kann mit (1.3-2), (1.3-3) oder (1.3-4), natürlich nur für zeitunabhängige Verhältnisse bzw. Zeitmittelwerte der Variablen, vorgenommen werden.

Diese Lösungsgleichung besitzt neben den drei Parametern, die bereits Lösung (1.4-5.4) aufweist, mit Φ einen weiteren, einen vierten dimensionslosen Parameter. Deshalb ist eine bildliche Darstellung hier so nicht möglich. Wie jedoch bereits für Lösung (1.4-5.4) ausgeführt, bereitet auch die Temperaturberechnung mit der Lösung (1.4-7.5) prinzipiell dann keine Probleme, wenn der Taschenrechner oder die Mathematiksoftware, wie z.B. MathCad oder Mathematica, über einen „Solver“-Algorithmus verfügt. Umgekehrt eignet sich Lösung (1.4-7.5) besonders gut zur Beantwortung der Frage, nach welcher Zeitspanne unter vorliegenden Wärmeübertragungsverhältnissen eine vorgegebene Temperatur tatsächlich erreicht wird.

Neben Wärmeübertragung durch Konvektion und Strahlung lassen sich mit der Gleichung (1.4-7.5) auch Wärmequellen q_V , solange sie als homogen und - in Zeitintervallen - als unveränderlich anzusehen sind, entsprechend (1-4) in Abhängigkeit vom Stab-, Band- bzw. Drahtquerschnitt gemäß (1.3-2), (1.3-3) oder (1.3-4) zusätzlich berücksichtigen¹¹.

1.4.3.2 Lösungsverfahren für iterative Berechnung

Zur Herleitung eines Lösungsverfahrens unter Verwendung eines Formel- ausdrucks von der Bauart (1.4-3.2), bei dem neben Wärmeübertragung durch Konvektion ($\alpha > 0$) nunmehr auch Wärmestrahlung ($C > 0$) gemäß der Randbedingungen (1.3-2), (1.3-3) oder (1.3-4) zu berücksichtigen ist, darf davon ausgegangen werden, dass Wärmeübertragungen durch Konvektion und Strahlung voneinander unabhängig sind und sich gegenseitig nicht beeinflussen [VDI 13, A-2.3.5]. Das erlaubt, ersatzweise einen wirk- samen bzw. effektiven Wärmeübergangskoeffizienten α einzuführen durch additive Überlagerung eines Konvektionsanteils α_K und eines Strahlungs- anteils α_S :

$$\alpha = \alpha_K + \alpha_S \quad . \quad (1.4-8)$$

¹¹ Auf den Pocket-PC *HP28* und *HP48/HP50* beansprucht eine Berechnung oft nur einige bis wenige zehn Sekunden. Die numerische Auswertung der Gleichungen (1.4-6.7), (1.4-6.8) zur Berechnung von y_1 , x_1 und x_2 kann in bestimmten Parameterbereichen durch Stellen- auslöschung zu ungenauen Ergebnissen führen. Es ist deshalb vorteilhaft, diese Ergebnisse auf der Grundlage der Ausgangsgleichungen (1.4-6.6) und (1.4-6.4) iterativ (bzw. mit Solver) nachzubessern.



Der explizit nicht vorgebbare Strahlungsanteil α_S kann z.B. im Falle von Band, Rohr, Draht oder Rechteckprofil formal erhalten werden durch Vergleich entsprechender vollständiger Randbedingung (1.2-1), (1.2-2) oder (1.2-3) mit der exakt selben Randbedingung für speziell $C = 0$ und α entsprechend Gl. (1.4-8), also durch Gleichsetzung mit einer linearen Randbedingung, wie sie Lösungen der Art (1.4-1) bzw. (1.4-3.2) zugrunde liegt. Da sich die beiden (links und rechts vom Gleichheitszeichen stehenden) rein konvektiven Terme $\alpha_K \cdot (\mathcal{G}_{UK} - \mathcal{G}_{Rand}(t))$ aufheben, verbleiben zur Ermittlung von α_S die Gleichungen:

- „breites“ **Band/dünne Platte:**

$$\alpha_{S_j} \cdot (\mathcal{G}_{UK_j} - \mathcal{G}((-1)^j \cdot X, t)) = C_j \cdot (\Theta_{US_j}^4 - \Theta^4((-1)^j \cdot X, t)) \quad (1.4-9.1)$$

- dünnwandiger **Hohlzylinder/Rohr:**

$$\alpha_{S_j} \cdot (\mathcal{G}_{UK_j} - \mathcal{G}(R_j, t)) = C_j \cdot (\Theta_{US_j}^4 - \Theta^4(R_j, t)) \quad (1.4-9.2.1)$$

- **Draht/dünner Stab:**

$$\alpha_S \cdot (\mathcal{G}_{UK} - \mathcal{G}(R, t)) = C \cdot (\Theta_{US}^4 - \Theta^4(R, t)) . \quad (1.4-9.2.2)$$

- **Rechteckprofil:**

$$\alpha_{S_{X_j}} \cdot (\mathcal{G}_{UK_{X_j}} - \mathcal{G}((-1)^j \cdot X, t)) = C_{X_j} \cdot (\Theta_{US_{X_j}}^4 - \Theta^4((-1)^j \cdot X, t)) \quad (1.4-9.3.1)$$

$$\alpha_{S_{Y_j}} \cdot (\mathcal{G}_{UK_{Y_j}} - \mathcal{G}((-1)^j \cdot Y, t)) = C_{Y_j} \cdot (\Theta_{US_{Y_j}}^4 - \Theta^4((-1)^j \cdot Y, t)) \quad (1.4-9.3.2)$$

Damit wird bei „geeigneter Wahl“ von α_S die allgemeingültigere, nicht-lineare „Strahlungsrandbedingung“ auf eine lineare „Konvektionsrandbedingung“ zurückgeführt. Allerdings zeigt sich, dass linke und rechte Seiten der Gleichungen (1.4-9.1), (1.4-9.2) oder (1.4-9.3) infolge der Möglichkeit, unterschiedliche Umgebungstemperaturen zugelassen zu haben, zu verschiedenen Zeitpunkten Nullstellen besitzen. Daraus resultiert für α_S ein Pol erster Ordnung bei $\mathcal{G}_{Rand}(t^*) = \mathcal{G}_{UK}$. Dieses Problem lässt sich anscheinend nur vermeiden, wenn man die weiteren Betrachtungen dahingehend einschränkt, dass die bisher beibehaltene Unterscheidung zwischen Umgebungstemperatur bezüglich Konvektion und Umgebungstemperatur bezüglich Strahlung fallengelassen und stattdessen vereinfachend $\mathcal{G}_{UK} = \mathcal{G}_{US} = \mathcal{G}_U$ vereinbart wird.

Werden die Körperwandtemperaturen im Hinblick auf den Näherungscharakter und die Einfachheit der angestrebten Lösung durch eine nicht nur über den Strangquerschnitt, sondern zusätzlich über einen gewissen Zeitbereich gemittelte Temperatur

$$\tilde{\bar{g}} = \frac{1}{\Delta t} \cdot \int_{(\Delta t)} \bar{g}(\tau) \cdot d\tau \quad (1.4-10)$$

ersetzt, so folgt mit (1.4-8) aus (1.4-9.1), (1.4-9.2) oder (1.4-9.3) für den Strahlungsanteil an der Wärmeübertragung:

- „breites“ **Band/dünne Platte** (Ober- und Unterseite):

$$\alpha_{Sj} = C_j \cdot \frac{\Theta_{Uj}^4 - \tilde{\Theta}^4}{\vartheta_{Uj} - \tilde{\bar{g}}} \equiv C_j \cdot \Theta_{Uj}^3 \cdot \sum_{k=0}^3 \left(\frac{\tilde{\Theta}}{\Theta_{Uj}} \right)^k ; \quad (1.4-11.1)$$

- dünnwandiger **Hohlzylinder/Rohr** (Innen- und Außenmantel):
wie (1.4-11.1);

- **Draht**:

$$\alpha_S = C \cdot \frac{\Theta_U^4 - \tilde{\Theta}^4}{\vartheta_U - \tilde{\bar{g}}} \equiv C \cdot \Theta_U^3 \cdot \sum_{k=0}^3 \left(\frac{\tilde{\Theta}}{\Theta_U} \right)^k ; \quad (1.4-11.2)$$

- **Rechteckprofil**:

$$\alpha_{SXj} = C_{Xj} \cdot \frac{\Theta_{UXj}^4 - \tilde{\Theta}^4}{\vartheta_{UXj} - \tilde{\bar{g}}}, \quad \alpha_{SYj} = C_{Yj} \cdot \frac{\Theta_{UYj}^4 - \tilde{\Theta}^4}{\vartheta_{UYj} - \tilde{\bar{g}}}; \quad (1.4-11.3)$$

Strahlungsaustauschkoeffizienten und Umgebungstemperaturen werden als zeitunabhängig betrachtet.

Die kalorische Temperatur gemäß (1.4-10) lässt sich mit (1.4-3.2) für ein Zeitintervall $\Delta t := t - t_A$ integrieren und durch

$$\tilde{\bar{g}} = \bar{g}_\infty - \frac{\varpi}{\alpha} \cdot \frac{\bar{g} - \vartheta_A}{t - t_A} \quad \text{mit} \quad \bar{g} \equiv \bar{g}(t) \quad (1.4-12)$$

explizit angeben¹².

¹² Für die Berechnung von \bar{g}_∞ ist in Gln. (1.3-2), (1.3-3) oder (1.3-4) der Strahlungsaustauschkoeffizient C jeweils Null zu setzen; er wird allein über Gl. (1.4-8) mit (1.4-11) eingeführt.



Andererseits lässt sich durch Umstellen und Logarithmieren von Gleichung (1.4-3.2) wie folgt substituieren:

$$\frac{\alpha}{\varpi} \cdot (t - t_A) = \ln \frac{\bar{\vartheta}_\infty - \bar{\vartheta}_A}{\bar{\vartheta}_\infty - \bar{\vartheta}}; \quad \text{siehe (1.4-3.3),} \quad (1.4-13)$$

so dass sich statt (1.4-12) auch

$$\tilde{\vartheta} = \bar{\vartheta}_\infty - (\bar{\vartheta} - \bar{\vartheta}_A) \cdot \ln^{-1} \left(\frac{\bar{\vartheta}_\infty - \bar{\vartheta}_A}{\bar{\vartheta}_\infty - \bar{\vartheta}} \right) \quad (1.4-14)$$

schreiben lässt¹³. Diese Gleichung enthält wegen (1.4-3.1) mit (1.4-8) indirekt weiterhin den unbekanntem Strahlungsanteil α_S und umgekehrt enthält (1.4-11) das erst noch zu berechnende kalorische Temperaturmittel $\tilde{\vartheta}$, so dass eine explizite Lösungsformel nicht angegeben werden kann.

Dagegen gelingt die Berechnung auf numerisch-iterativem Wege. Beginnend mit einem Näherungs-Startwert für den Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha^{(0)} := \alpha_K + \alpha_S^{(0)}$, wobei für den Strahlungsanteil als Anfangsnäherung z.B. $\alpha_S^{(0)} := 4C \cdot \Theta_U^3$ oder häufig noch besser $\alpha_S^{(0)}$ entsprechend (1.4-11.1) bzw. (1.4-11.2) mit (1.4-14) für $\bar{\vartheta}^{(0)} \approx \frac{1}{2} \cdot (\vartheta_A + \vartheta_U)$, $\bar{\vartheta}_\infty^{(0)} \approx \vartheta_U$ verwendet werden kann, werden zyklisch die Temperaturen (1.4-3.1), (1.4-3.2) und (1.4-14) berechnet, um damit gemäß (1.4-11.1) bzw. (1.4-11.2) jeweils verbesserte Ausgangswerte $\alpha_S^{(v)}$ für den Strahlungsanteil zu erhalten.

Das Iterationsverfahren kann beendet werden, wenn eine gewünschte Rechengenauigkeit - je nach Interessenlage - für den Wärmeübergangskoeffizienten α bzw. α_S , die kalorische Temperatur $\tilde{\vartheta}$ oder aber die wohl vorwiegend interessierende mittlere Temperatur $\bar{\vartheta}$ erreicht ist. Auf einen theoretisch geführten Konvergenznachweis kann hier verzichtet werden, da das Verfahren numerisch sehr gut konvergiert und Ergebnisse liefert, die denen geschlossener Formeln, z.B. (1.4-7.5), kaum an Genauigkeit noch an Geschwindigkeit der Berechnung nachstehen.

¹³ Es gilt speziell $\tilde{\vartheta}(t=t_A) = \lim_{\bar{\vartheta} \rightarrow \bar{\vartheta}_A} \tilde{\vartheta} = \bar{\vartheta}_A$.



1.4.4 Temperatur- oder zeitabhängige Einflussgrößen

Die Berücksichtigung temperaturabhängiger Stoffwerte kann näherungsweise auf numerisch-iterativem Wege erfolgen. Je nach Anforderungen an Genauigkeit und Rechenzeit wird die Temperaturberechnung in mehr oder weniger großen Zeitabschnitten vorgenommen, wobei die Endtemperatur eines gerade berechneten i -ten Zeitabschnittes unmittelbar als Ausgangstemperatur des Folgeabschnittes $i+1$ übernommen wird. Als Argument für die Temperaturabhängigkeit, z.B. der spezifischen Wärmekapazität, kann die für den betreffenden i -ten Zeitabschnitt geltende Mitteltemperatur $\bar{\vartheta}_{(i)}$ gemäß (1.4-14) oder näherungsweise auch die linear gemittelte Temperatur $\frac{1}{2} \cdot (\bar{\vartheta}_A + \bar{\vartheta})_{(i)}$ verwendet werden.

Diese Berücksichtigung temperaturabhängiger Stoffwerte lässt sich in das im vorangegangenen Kapitel 1.4.3.2 angegebene Iterationsverfahren unmittelbar einbinden. Analog kann aber auch bei der Temperaturberechnung mit den Formeln (1.4-5.4) oder universeller mit (1.4-7.5) verfahren werden.

Auf die gleiche Weise lassen sich dann auch Zeit- oder Temperaturabhängigkeiten weiterer Einflussgrößen, wie sie durch Quellterm q_V , Wärmeübergangs- und Strahlungsaustauschkoeffizient α und C sowie Umgebungstemperaturen ϑ_{UK} , ϑ_{US} gegeben sein können, in guter Näherung berücksichtigen.



2 Diffusionsmodell und Reaktionskinetik

Die atomare und kontinuumsmechanische Beschreibung spezieller Diffusionsmechanismen, wie sie in Festkörpern bei der Leerstellen-, Zwischen-gitter-, Korngrenzen- oder Oberflächendiffusion für konstante, orts- oder auch konzentrationsabhängige Diffusionskoeffizienten und thermodynamische Triebkräfte einzeln oder parallel in Erscheinung treten, läßt das komplexe Wechselspiel zwischen Werkstoffreaktion und Werkstoffeigenschaften erkennen. Diffusionsvorgänge besitzen darüberhinaus stets auch eine starke Temperaturabhängigkeit. Die Berücksichtigung dieser Temperaturabhängigkeit unter isothermen Bedingungen bereitet keinerlei zusätzliche mathematische Schwierigkeiten. Das ändert sich jedoch unter anisothermen Bedingungen. Ist die Temperatur z.B. eine zeitabhängige Prozessfunktion, was bei technischen Wärmebehandlungsabläufen i.allg. stets der Fall ist, so ist dann die instationäre Diffusionsgleichung für zeitabhängigen Diffusionskoeffizienten zu lösen.

Stellvertretend für Diffusionsabläufe, wie sie in polykristallinen Festkörpern stattfinden, wurden in [MÜL 98, *Kap. 3.3.1.1*] Diffusionsaufgaben zu drei Körpergeometrien betrachtet (siehe auch **Anhang**). Gegenüber Realverhältnissen stärker abstrahierend, waren die in einer Kristallmatrix eingebetteten Teilchen als platten- bzw. lamellenförmig, zylinder- bzw. faserförmig oder kugelförmig bzw. globulitisch angenommen worden. Dabei wurde insbesondere der Frage nachgegangen, welche Zeitabhängigkeiten diese Modellpartikel unter idealisierten Diffusionsbedingungen aufweisen und welche Verallgemeinerungen ggf. erlaubt sind. Dabei hat sich herausgestellt, dass bei zeitabhängigem Diffusionskoeffizienten $D = \mathbf{D}(t)$ das Diffusionsgeschehen generell durch eine Zeitabhängigkeit der Form

$\int_0^t \mathbf{D}(\tau) \cdot d\tau$ gesteuert wird¹⁴, also nicht momentanen sondern kumulativen Charakter besitzt. Dieses Ergebnis erscheint im Nachhinein logisch und ist sehr befriedigend, indem es stets den bis zum Zeitpunkt t vorangegangenen Diffusionsverlauf berücksichtigt.

¹⁴ Abgesehen von einem Faktor, der den Kehrwert des Quadrates einer charakteristischen Körperabmessung enthält; vgl. [MÜL 98, (*3.3.1.1-15.2*), (*3.3.1.1-20.2* bzw. *30.2*) und (*3.3.1.1-23.2* bzw. *45.2*)]

2.1 Diffusionstechnisch dünnwandiges Modell

Dieses zunächst für ortsabhängige bzw. dickwandige Diffusionsverhältnisse hergeleitete Resultat ist wichtig für alle folgenden Betrachtungen, die sich auf instationäre und insbesondere anisotherme Verhältnisse zur Reaktionskinetik beziehen. Deshalb werden diese Betrachtungen hier - analog der Situation bei wärmetechnisch dünnwandigen Verhältnissen - als diffusionsstechnisch dünnwandig behandelt, indem vereinfachend lediglich die Konzentrationsmittelwerte über den Partikelquerschnitt betrachtet werden. Damit ergeben sich für alle drei Modellpartikel aus den betreffenden partiellen Differentialgleichungen durch lokale Mittelung (analog Kap. 1.1) sowie unter Verwendung der jeweiligen Randbedingungen [MÜL 98, Kap. 3.3.1.1] (analog dem Vorgehen in Kap. 1.2) gewöhnliche lineare und inhomogene Differentialgleichungen 1. Ordnung der Gestalt

$$\bar{c}'(t) + \mathbf{g}(t) \cdot \bar{c}(t) = \mathbf{f}(t) \quad , \quad (2.1-1)$$

(analog der Dgl. (1.3-1) für $C = 0$)

deren Lösung bekanntlich durch

$$\bar{c}(t) = \bar{c}_A \cdot e^{-\int_0^t \mathbf{g}(\tau) \cdot d\tau} + \int_0^t \mathbf{f}(\tau) \cdot e^{-\int_\tau^t \mathbf{g}(\zeta) \cdot d\zeta} \cdot d\tau \quad (2.1-2)$$

gegeben ist; die beiden Zeitfunktionen $\mathbf{g}(t) := k \cdot \mathbf{D}(t)$ und

$\mathbf{f}(t) := \mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{r}(t) + \bar{\omega}(t)$ enthalten neben dem Diffusionskoeffizienten die Einflüsse an den jeweiligen Körperändern, zusammengefasst in dem neuen Koeffizienten $k = konst.$ und einer Randfunktion $\mathbf{r}(t)$, sowie das lokale Mittel ggf. vorhandener Quellen $\bar{\omega}(t)$. Dieses Resultat lässt sich natürlich auch einzeln für die betrachteten Geometrien durch lokale Mittelung

- für die Platte bzw. Lamelle $\bar{c}_L(t) = 1/L \cdot \int_0^L c(t,x) dx$,
- für den Stab bzw. die Faser $\bar{c}_F(t) = 2/R^2 \cdot \int_0^R r \cdot c(t,r) dr$ und
- für die Kugel bzw. globulit. Partikel $\bar{c}_K(t) = 3/R^3 \cdot \int_0^R r^2 \cdot c(t,r) dr$

mit den jeweiligen Lösungen aus [MÜL 98]¹⁵ gewinnen.

¹⁵ Ausgabe 1998: *Gln.* (3.3.1.1-15), (3.3.1.1-20) bzw. (3.3.1.1-23)
Nachdruck 2014: *Gln.* (3.3.1.1-15), (3.3.1.1-30) bzw. (3.3.1.1-45)



Speziell für $r = \bar{\omega} = 0$ gilt dann insbesondere:

$$\bar{c}(t) = \bar{c}_A \cdot e^{-k \cdot \mathcal{I}(t)} \quad (2.1-4.1)$$

$$\text{bzw. } \frac{\bar{c}_A - \bar{c}(t)}{\bar{c}_A} \Rightarrow X(t) = 1 - e^{-k \cdot \mathcal{I}(t)}, \quad (2.1-4.2)$$

$$\text{mit } \mathcal{I}(t) = \int_0^t D(\tau) \cdot d\tau, \quad (2.1-4.3)$$

wobei der umgesetzte Anteil X infolge Normierung mit der Anfangskonzentration \bar{c}_A auf das Intervall $0 \leq X \leq 1$ abgebildet wird.

Diese Form der Lösung repräsentiert einen reaktionskinetischen Ansatz, der einem ursprünglich für isotherme Verhältnisse formulierten *AVRAMI*-Ansatz mit $D(t) = \text{konst.}$ entspricht (abgesehen vom *AVRAMI*-Exponenten, der hier den – und deshalb nicht sichtbaren – Wert 1 hat.)

Damit gilt erwartungsgemäß auch unter „diffusionstechnisch dünnwandigen Bedingungen“, dass zumindest die betrachteten Modellpartikel insgesamt ein Zeitverhalten des Diffusionsgeschehens aufweisen, das ganz entscheidend, wenn nicht ausschließlich von der Funktion $\mathcal{I}(t)$ abhängt – zumindest solange die Umgebungskonzentration nicht deutlich zeitabhängig wird und solange Quellen/Senken fehlen.

Das ist eine wichtige Aussage insofern, als in realen polykristallinen Werkstoffen derartige strukturelle Bestandteile, wie z.B. Zementitlamellen, Sphärographit, Korngrenzen, Ausscheidungen u.ä., üblicherweise statistisch verteilt stets vorhanden sind. Damit nehmen diese Partikel am realen Diffusionsgeschehen, die sich hinsichtlich Art (*Diffusionskoeffizient*) und Form (*lamellar, faserförmig, sphäroidisch, prismatisch*) voneinander unterscheiden werden, gleichzeitig teil. Diese Partikel werden, zumindest zeitweise, unabhängig nebeneinander existieren oder zueinander in „Konkurrenz“ geraten.

Es ist damit zu erwarten, dass alle wesentlich diffusionsgesteuerten Eigenschaftsänderungen eine Zeitabhängigkeit der Form $\mathcal{I}(t)$ aufweisen, die also direkt und nahezu ausschließlich vom Diffusionskoeffizienten abhängt.

Allerdings ist der Diffusionskoeffizient ursprünglich nicht eine zeitabhängige, sondern eine orts-, konzentrations- und vor allem temperaturabhängige Größe. Seine Temperaturabhängigkeit kann z.B., wie allgemein üblich, durch einen *ARRHENIUS*-Ansatz

$$\boxed{D = D_0 \cdot e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta}}} \quad (2.1-5a)$$

oder - unter der empirisch gestützten Annahme, dass grundsätzlich erst oberhalb einer Mindest-Energie- bzw. -Temperaturschwelle Platzwechselvorgänge überhaupt ablaufen können - in modifizierter Form durch

$$D = \begin{cases} 0 & \text{für } \mathcal{G} \leq \mathcal{G}_B \\ D_0 \cdot e^{\frac{-Q_B}{\mathcal{R} \cdot (\mathcal{G} - \mathcal{G}_B)}} & \text{für } \mathcal{G} > \mathcal{G}_B \end{cases} \quad (2.1-5b)$$

ausgedrückt werden, wobei die thermodynamische Temperatur Θ [K] auch als zeitabhängige Prozessfunktion $\Theta(t)$ oder in *CELSIUS*-Skalierung als $\mathcal{G}(t)$ berücksichtigt werden kann; $\mathcal{R} = 8,315$ [J/(mol·K)] ist die universelle Gaskonstante, Q bzw. Q_B [J/mol] bezeichnen eine Aktivierungsenergie, die aufzubringen ist, um den atomaren bzw. molekularen Transport bei gegebenen Temperaturen \mathcal{G} oberhalb einer Grenztemperatur \mathcal{G}_B in Gang zu setzen und aufrechtzuerhalten, während D_0 [m²/s] die Empfindlichkeit der Zeitabhängigkeit beeinflusst; Aktivierungsenergie und Mengenfaktor werden i. allg. temperaturabhängig sein.

Der Ansatz (2.1-5b) ist nur eine andere Form von (2.1-5a), wenn Q als $Q = Q(\Theta)$ entsprechend gewählt bzw. interpretiert wird; siehe **Anhang**. Er enthält mit $\mathcal{G}_B = -273,15^\circ\text{C}$ den originären *ARRHENIUS*-Ansatz, berücksichtigt jedoch den empirisch bekannten Umstand, dass gewisse Werkstoffreaktionen immer erst dann ablaufen können, wenn eine materialabhängige Mindesttemperatur bzw. energetische Potentialschwelle überwunden wird (z.B. bei Rekristallisations- bzw. thermisch aktivierten Entfestigungsvorgängen oder auch bei Umwandlungsreaktionen). Der modifizierte Ansatz (2.1-5b) besitzt die gleiche Charakteristik wie der *ARRHENIUS*-Ansatz (2.1-5a), gestattet jedoch dessen Asymptote bei $\mathcal{G} = \mathcal{G}_B$ zu höheren Temperaturen $\mathcal{G}_B > -273,15^\circ\text{C}$ zu verschieben¹⁶ und damit den empirischen Befunden, d.h., der Modellanpassung an experimentelle Ergebnisse, oft besser zu entsprechen.

¹⁶ Zur Begründung der Modifizierung, d.h., zur Begründung der Einführung einer Grenz- bzw. Bezugstemperatur, siehe **Anhang** oder auch [MÜL 94, Kap. 3] bzw. [MÜL 98, Kap. 3.3.1.3].



2.2 Reaktionskinetische Vergleichbarkeit

Werden evtl. nicht ganz unberechtigte Bedenken, dass sich Werkstoffreaktionen allein auf der Grundlage von derart stark vereinfachten Diffusionsmodellen überhaupt hinreichend brauchbar beschreiben lassen, weiterhin zurückgestellt, so lässt sich folgern, dass unterschiedlichste Wärmebehandlungsprozesse, mit denen auf thermischem Wege zielgerichtete Werkstoffbeeinflussung herbeizuführen ist, unmittelbar über Beziehung (2.1-4.2) miteinander vergleichbar werden.

So wird zum Beispiel ein Werkstoff¹⁷ bestimmten Ausgangszustandes, der Wärmebehandlungen nach zwei unterschiedlichen Temperatur-Zeit-Verläufen erfährt, praktisch dennoch gleiche Endeigenschaften aufweisen, sofern nur die Bedingung

$$\int_0^{t_1} e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_1(\tau)}} \cdot d\tau = \int_0^{t_2} e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_2(\tau)}} \cdot d\tau \quad (2.2-6.1)$$

eingehalten wird. Diese Beziehung gestattet sowohl den Vergleich praktisch beliebiger anisothermer Wärmebehandlungen untereinander als natürlich auch den Vergleich von anisothermen und isothermen Bedingungen. Auf diese Weise lassen sich insbesondere eine Äquivalenztemperatur $\Theta_{\bar{A}}$ und eine Äquivalenzzeit $t_{\bar{A}}$ definieren, die angeben, welche Temperatur und Zeit unter isothermen Bedingungen einzuhalten sind, damit sich die gleichen Werkstoffeigenschaften wie im anisothermen Fall einstellen - oder umgekehrt:

$$t_{\bar{A}} \cdot e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_{\bar{A}}}} = \int_0^t e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta(\tau)}} d\tau \quad (2.2-6.2)$$

Im einfachsten Falle verhalten sich verschiedene rein isotherme Wärmebehandlungen genau dann zueinander äquivalent, wenn die Bedingung

$$t_1 \cdot e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_1}} = t_2 \cdot e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_2}} \quad (2.2-6.3)$$

¹⁷ Sofern er den Modellvoraussetzungen in etwa genügt, d.h., sofern die Umgebungskonzentration in erster Näherung zeitunabhängig ist und Konzentrationsquellen (bzw. -senken) weitgehend fehlen und sofern diese Verhältnisse dann auch durch veränderte Temperatur-Zeit-Zyklen nicht deutlich gestört werden!

erfüllt ist – bekannt als Regel von der bedingten Austauschbarkeit von Temperatur und Zeit, und zwar speziell unter isothermen Bedingungen. Dabei ist zu beachten, dass sich streng isotherme Verhältnisse in technisch realen Wärmebehandlungsprozessen bestenfalls näherungsweise realisieren lassen. Diese Problematik und deren Relevanz soll später in einem Beispiel in Kapitel 9 noch näher betrachtet werden.

2.3 Rekristallisation und Kornwachstum

Es ist nicht verwunderlich, dass die diffusionstechnisch dünnwandige Näherungslösung (2.1-4.2) quasi auf eine *AVRAMI*-Beziehung geführt hat, gehen reaktionskinetische Ansätze doch ebenfalls von gewöhnlichen Differentialgleichungen der Form (2.1-1) aus – siehe z.B. [MÜL 98, Kap. 3.3.1.2]. Als Ergebnisse übernehmen wir die auf anisotherme Verhältnisse erweiterte *AVRAMI*-Lösung für den rekristallisierten Anteil in der Form

$$\boxed{X(t) = 1 - e^{-\left(\frac{I_X(t)}{q}\right)^q}} \quad (2.3-1.1)$$

mit der modifizierten Aktivierung

$$I_X(t) = \int_0^t k_X \cdot \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{solange } \mathcal{G}(\tau) \leq \mathcal{G}_X \\ e^{\frac{-Q_X}{\mathcal{R} \cdot (\mathcal{G}(\tau) - \mathcal{G}_X)}} & \text{wenn } \mathcal{G}(\tau) > \mathcal{G}_X \end{array} \right\} \cdot d\tau, \quad (2.3-1.2)$$

(*AVRAMI-Exponent* q , *Aktivierungsenergie* Q , *Vorfaktor* k)

sowie eine Wachstumsformel für die Korngröße, ebenfalls in der Erweiterung auf anisotherme Verhältnisse:

$$\boxed{\mathcal{D}(t) = \sqrt[n]{\mathcal{D}_0^n + I_D(t)}} \quad (2.3-2.1)$$

mit der modifizierten Aktivierung

$$I_D(t) = \int_0^t k_D \cdot \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{solange } \mathcal{G}(\tau) \leq \mathcal{G}_D \\ e^{\frac{-Q_D}{\mathcal{R} \cdot (\mathcal{G}(\tau) - \mathcal{G}_D)}} & \text{wenn } \mathcal{G}(\tau) > \mathcal{G}_D \end{array} \right\} \cdot d\tau \quad (2.3-2.2)$$

und Anfangskorngröße $\mathcal{D}_0 = \mathcal{D}(0)$ sowie dem Korngrößenexponenten n .

Angemerkt sei, dass sich die Ableitung der Aktivierung nach der Zeit, also die Aktivierungsgeschwindigkeit



$$\dot{\mathbf{I}}_j(t) = \frac{d\mathbf{I}_j(t)}{dt} = k_j \cdot e^{\frac{-Q_j}{\mathcal{R} \cdot (\mathcal{Q}(t) - \mathcal{Q}_j)}} \quad \text{für } \mathcal{Q}(t) > \mathcal{Q}_j, \text{ sonst } 0, \quad (2.3-3)$$

gegenüber dem Diffusionskoeffizienten der Form (2.1-5b) nur dadurch unterscheidet, dass letzterer mit D_0 die Dimension *Fläche je Zeiteinheit* besitzt, denn die Diffusion berücksichtigt ja explizit die Körpergeometrie.

Demgegenüber gelangten wir auf die Ebene der Reaktionskinetik, indem durch lokale Mittelwertbildung, wie eingangs des Kapitels 2.1 ausgeführt, vom Geometrieinfluss abstrahiert wurde. Deshalb repräsentiert der Faktor k die reziproke Größe einer Zeitkonstante mit der Dimension *Eins je Zeiteinheit*.

Außerdem ist festzustellen, dass die den Lösungen (2.3-1) und (2.3-2) zugrunde liegenden Dgln. – von ähnlicher Art wie (2.1-1), siehe [MÜL 98, (3.3.1.2-1), (3.3.1.2-5)] – weiterhin erfüllt bleiben, wenn die Parameter $k_v \rightarrow k_v(t)$, $Q_v \rightarrow Q_v(t)$ und $\mathcal{Q}_v \rightarrow \mathcal{Q}_v(t)$ einzeln oder insgesamt als zeitabhängige Größen geführt werden. Das wird z.B. erforderlich, wenn sich während der Wärmebehandlung am Reaktionsmechanismus und damit am reaktionskinetischen Verhalten des Werkstoffs etwas deutlich ändert – vgl. z.B. Kapitel 4, und damit auch dann, wenn eine Temperatur- bzw. Temperatur-Zeit-Abhängigkeit $\mathcal{Q}(t)$ dieser Parameter zu berücksichtigen ist.

2.4 Reaktionskinetische Modellierung von Werkstoffeigenschaften

Die Modellgleichungen für Rekristallisationsgrad und für Kornwachstum gelten zunächst nur für einphasige Werkstoffe. Bei mehrphasigen Werkstoffen dagegen ist stets davon auszugehen, dass die thermisch aktivierte, kumulative Werkstoffreaktion nicht nur von einem, sondern von verschiedenen, gleichzeitig oder auch zeitlich versetzt wirkenden Reaktionsmechanismen in entsprechender Weise beeinflusst wird. Unter diesen Bedingungen lassen sich diese Modelle erweitern und verallgemeinern, indem bei m unterschiedlichen Reaktionsmechanismen die betreffenden Aktivierungen $j = 1, 2, \dots, m$

$$\mathbf{I}_j(t) := \int_0^t \dot{\mathbf{I}}_j(t) dt = \int_0^t k_j \cdot \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{für } \mathcal{Q}(\tau) \leq \mathcal{Q}_j \\ e^{\frac{-Q_j}{\mathcal{R} \cdot (\mathcal{Q}(\tau) - \mathcal{Q}_j)}} & \text{für } \mathcal{Q}(\tau) > \mathcal{Q}_j \end{array} \right\} \cdot d\tau ; \quad (2.4-1.1)$$

zur Gesamtreaktion mit den Gewichten γ_j anteilig beitragen:

$$\mathbf{X} = \sum_{j=1}^m \gamma_j \cdot \mathbf{X}_j(\mathbf{I}_j(t)) \quad \text{mit} \quad \sum_{j=1}^m \gamma_j = 1 . \quad (2.4-1.2)$$

Die gesamte Werkstoffreaktion hängt damit, zumindest solange die m Reaktionsmechanismen vorwiegend wechselwirkungsfrei ablaufen, von der gewichteten Summe der Einzelreaktionen ab.

Da sich die thermisch aktivierten Entfestigungsvorgänge keineswegs nur auf den Rekristallisationsgrad oder das Kornwachstum, sondern ganz unmittelbar und nahezu proportional auf die Werkstoffeigenschaften insgesamt auswirken, ist zu erwarten, dass sich diese Eigenschaftsänderungen ganz analog modellieren lassen. Und tatsächlich lassen sich z.B. für betreffende Entfestigungsergebnisse aus der Werkstoffprüfung, also insbesondere hinsichtlich Spannungs- und Dehnungsgrößen, ganz analoge Modellgleichungen aufstellen [MÜL 98, Kap. 3.3.2.2]:

- Für Spannungsgrößen σ , z.B. Zugfestigkeit R_m oder 0,2-Dehngrenze $R_{p0,2}$:

$$\sigma(t) = \sigma_{MIN} + (\sigma_{MAX} - \sigma_{MIN}) \cdot \sum_{j=1}^{m_\sigma} \gamma_{\sigma_j} \cdot e^{-\left(\frac{I_{\sigma_j}(t)}{q_{\sigma_j}}\right)^{q_{\sigma_j}}} \quad (2.4-2)$$

- Für Dehnungsgrößen ε , z.B. Bruchdehnung A oder Bruchdehnung Z :

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_{MIN} + (\varepsilon_{MAX} - \varepsilon_{MIN}) \cdot \sum_{j=1}^{m_\varepsilon} \gamma_{\varepsilon_j} \cdot \left(1 - e^{-\left(\frac{I_{\varepsilon_j}(t)}{q_{\varepsilon_j}}\right)^{q_{\varepsilon_j}}}\right) \quad (2.4-3)$$

Die Aktivierungen $\mathbf{I}(t)$ nach (2.4-1.1) berücksichtigen den Temperatur-Zeit-Verlauf $\mathcal{I}(t)$, dem der Werkstoff während der gesamten Wärmebehandlung bis zum Zeitpunkt t - i. allg. bis zum Abschrecken bzw. Einfrieren des Entfestigungszustandes - ausgesetzt war.

Die Parameter *AVRAMI*-Exponent q_j [-], Mengenfaktor k_j [1/s], Bezugs- bzw. Grenztemperatur \mathcal{I}_j [°C], Aktivierungsenergie Q_j [J/mol] sowie die



Parameter für die Minima und Maxima der Werkstoffeigenschaften haben selbstverständlich jeweils einen konkreten metallphysikalischen Hintergrund. Dieser jedoch lässt sich z.Z. kaum analytisch direkt, explizit und quantitativ aus atomarer Ebene heraus zuverlässig erschließen, so dass diese Parameter auf der Grundlage von experimentellen Daten, d.h., in Verbindung mit den aus den Zugprüfversuchen ermittelten Werkstoffprüfwerten und in Abhängigkeit der vorangegangenen Wärmebehandlung, durch Parameteridentifikation zu berechnen sind; vgl. [MÜL 98, Kap. 3.3.2] und das Beispiel in Kapitel 5.

Zu beachten ist, dass die Aktivierungsgeschwindigkeit \dot{i} für thermisch aktivierte Entfestigungsvorgänge wie Rekristallisation und Kornwachstum mit dem *ARRHENIUS*-Ansatz – wie gezeigt mit (2.3-3) bzw. (2.4-1.1) - zu bilden ist, während für Umwandlungs- und Ausscheidungsvorgänge besser ein *ARRHENIUS*-Produktansatz verwendet wird – siehe Kapitel 3.2.

Die reaktionskinetisch begründeten Modellgleichungen berücksichtigen unterschiedliche, zeitlich und thermisch parallel oder auch versetzt ablaufende Entfestigungsmechanismen. Die Widerspiegelung der realen Werkstoffentfestigung erfolgt durch Superposition elementarer Reaktionsmechanismen vom sigmoidalen Typ, etwa vergleichbar dem Zusammensetzen einer komplexen Schwingungsform aus verschiedenen Grundschwingungen entsprechend einer *FOURIERS*chen Synthese. Eine elementare Vorstellung kann das schematische Beispiel geben:

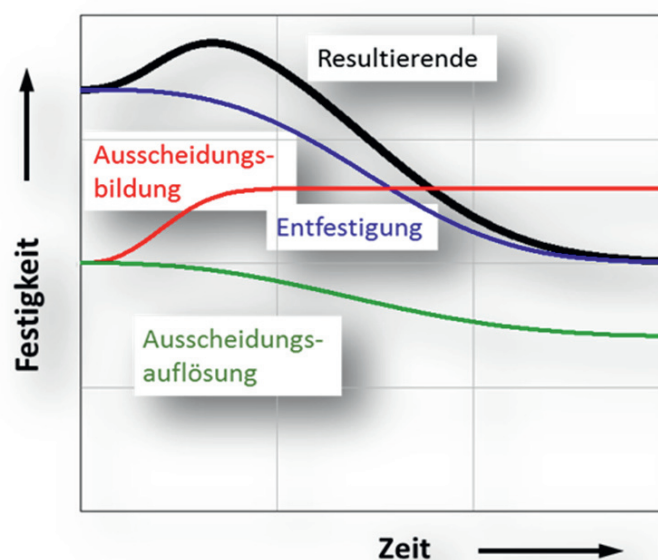


Bild 2.1: Überlagerung konkurrierender Mechanismen bei Mehrphasenmodellen (schematisch; statt Zeit allg. auch Aktivierung)

Auf dieser Basis der thermisch aktivierten reaktionskinetischen Modellierung lassen sich dann auch Werkstoffreaktionen beschreiben, die sowohl Entfestigungs- als auch Aushärtungsmechanismen unterliegen, wofür mit [MÜL 98, *Kap. 3.3.3*] sowie Kapitel 5 zwei Beispiele genannt seien.

Die Grundlage der Beschreibung solcher Mehrphasen- bzw. Mehrmechanismen-Modelle bilden die im **Anhang** angegebenen Gleichungen, deren Begründung ebenfalls in der genannten Quelle zu finden ist. Mit diesen reaktionskinetischen Modellgleichungen lassen sich sowohl thermisch aktivierte Entfestigungs- als auch temporär überlagerte Aushärtungsvorgänge für Spannungs- bzw. Festigkeits- sowie Dehnungsgrößen bei isothermer wie anisothermer Betrachtungsweise angemessen beschreiben.

Zu beachten ist, dass die Summen der Gewichte γ_j der Entfestigungs- und Aushärtungsterme nicht mehr den Wert 1 ergeben, wie das bei (2.4-1.2) der Fall ist, sondern einen Wert größer 1 haben werden, wobei die Gewichte selbst z.T. auch negative Werte annehmen können¹⁸.

2.5 Zeit-Temperatur-Unität

Die reaktionskinetischen Gleichungen der Art (2.3) und (2.4) zeigen, dass ein Reaktionsfortschritt ganz direkt von einer Variable I , Aktivierung genannt, abhängig ist. Sie bestimmt die Aktivität der Entfestigungs-, Aushärtungs oder auch der Umwandlungscharakteristik. Zeit und Temperatur(-verlauf) sind in dieser Variable enthalten, quasi zu einer gemeinsamen Größe verschmolzen. Für den reaktionskinetischen Verlauf ist nicht mehr allein die Zeit oder die Temperatur bestimmend, sondern beide tragen zur Veränderung der Werkstoffeigenschaften anteilig entsprechend der *ARRHENIUS*-Beziehung oder einer entsprechend modifizierten Beziehung bei. Anstelle der Vergleichsbedingungen (2.2-6) kann auch $I_1 = I_2$ bzw. noch allgemeiner eine Gleichungskette nach [MÜL 94, (5)] bzw. [MÜL 98, (3.3.1.1-26)] geschrieben werden, die die Einheit von Temperatur und Zeit noch einmal unterstreicht.

Mit diesen Feststellungen lässt sich einer weiteren Frage nachgehen, die den Zusammenhang zwischen Beginn und Ende einer Reaktion und der

¹⁸ Vgl. [MÜL 98, *Anhang B zu Kap.3.3.3, Bemerkung 2*]



Rolle der Aufheiz- oder Abkühlgeschwindigkeit betrifft. Im Fachschrifttum werden Werkstoffreaktionen gern in Abhängigkeit dieser Größen, auch Aufwärm- bzw. Abkühlrate genannt, untersucht und es wird ggf. insinuiert, als handele es sich neben Zeit und Temperatur um eine weitere unabhängige Variable, die zur Beschreibung erforderlich sei. Dass das nicht zutrifft, soll nachfolgend gezeigt werden. Hierzu werde das folgende Gedankenexperiment angeführt:

Wenn ein ganz bestimmter reaktionskinetischer Fortschritt zur Änderung einer Werkstoffeigenschaft, z.B. infolge Entfestigung, Aushärtung oder Phasenumwandlung, durch eine genau definierte Änderung der Aktivierung erfolgt, so bedeutet das, dass hierfür beliebig viele Temperatur-Zeit-Kombinationen existieren – siehe auch Bild 9.1. D.h., für die einzustellende Werkstoffeigenschaft ist allein die Größe der Aktivierung ausschlaggebend, während die konkreten Temperatur-Zeit-Verhältnisse – zumindest aus Werkstoffsicht - von nachrangiger Bedeutung sind, sofern nur „die Menge, das Quantum an Aktivierung“, also $I = konst.$, unverändert bleibt. Dabei ist generell klar, dass bei diesen diffusionsgesteuerten Vorgängen eine Verkürzung der Wärmebehandlungszeit, z.B. durch Steigerung der Aufheizgeschwindigkeit, durch eine entsprechende Temperaturerhöhung zu kompensieren ist. Das genau bringen die Ac-Umwandlungs- bzw. Phasenbegrenzungslinien der ZTA-Diagramme zum Ausdruck, indem sie bei Steigerung

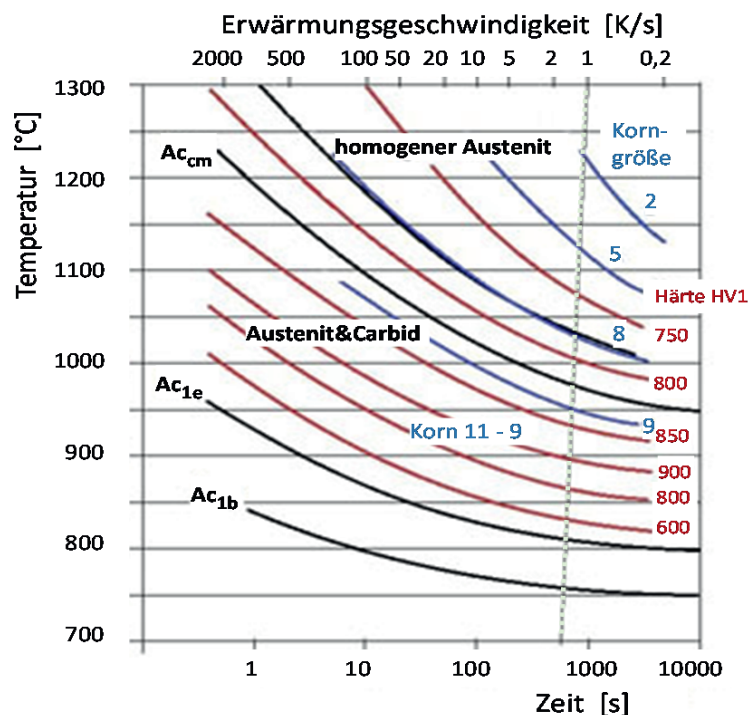


Bild 2.2: Zeit-Temperatur-Austenitisierungs-Diagramm [SCH 01]

der Aufheizgeschwindigkeit – und damit kürzerer Aufwärmzeit – mit einer entsprechenden Anhebung der Temperatur, dem Überhitzungseffekt einhergehen (Bild 2.2). Ebenso, jedoch umgekehrt, ist der Effekt zu erklären, der sich im Falle unterschiedlich rascher Abkühlung mit dem Unterkühlungseffekt hin zu kürzeren Abkühlzeiten einstellt – siehe **Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubild** (Bild 7.1).

Dass es sich bei der Aufheiz- (oder Abkühl-)geschwindigkeit aber neben Temperatur und Zeit nicht um eine neue unabhängige Variable handelt, drückt unmittelbar die Beziehung $I = konst.$ aus, indem auch hier eine Änderung der Aufheiz- oder Abkühlzeit bzw. -geschwindigkeit eine entsprechende Änderung der Temperatur bzw. des Temperaturverlaufs erzwingt (bzw. umgekehrt), und zwar genau in der beschriebenen Art. Damit ist gezeigt, dass allein der Temperaturverlauf und die Dauer der Wärmebehandlung einen konkreten Gefüge- und Werkstoffzustand bestimmen, während die Erwärmungs- bzw. Abkühlgeschwindigkeit (die ja keineswegs zeitlich konstant sein müssen) bereits durch den Temperaturverlauf bzw. den Temperaturzyklus festgelegt ist. Als Folge dessen werden beim Austenitisieren hin zu kürzeren Zeiten die Temperaturen angehoben werden müssen, während umgekehrt im Falle der Umwandlung beim Abkühlen eine entsprechende Unterkühlung stattfinden muss, damit die werkstofflichen Ergebnisse, konkret die diffusionsgesteuerten Werkstoffeigenschaften nach der Austenitisierung bzw. der Umwandlung gleich, d.h. unverändert erhalten werden – Bild 2.3.

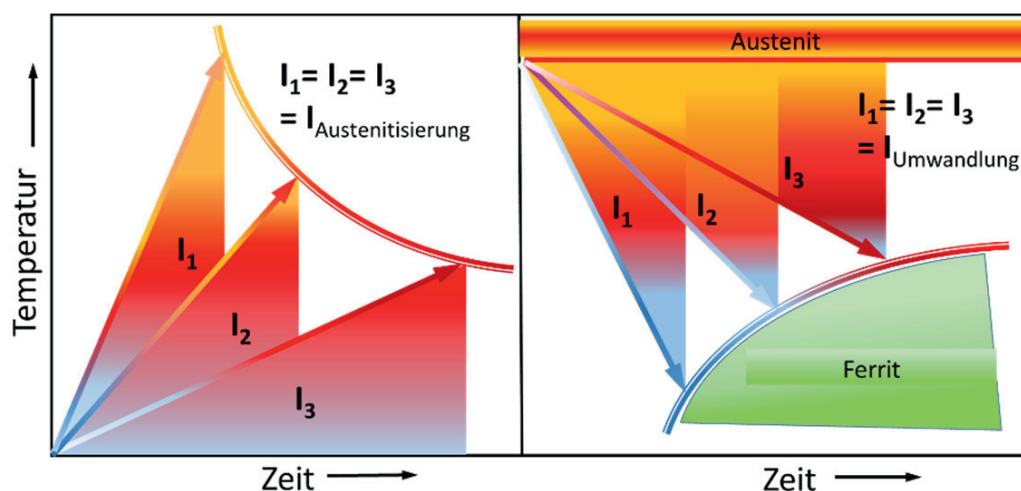


Bild 2.3: Aktivierungs-Diagramme: links ZTA, rechts ZTU (schematisch)

Etwas mathematischer formuliert heißt das, dass die Aktivierungsgeschwindigkeit (2.3-3) und die Zeitdauer der Aktivierung, d.h., der Abstand



zwischen oberer und unterer Integrationsgrenze, nur in ganz bestimmten Verhältnissen variiert werden können, damit die Integrale in (2.3-1.2), (2.3-2.2) oder auch in (2.4-1.1) die Bedingung $I = konst.$ erfüllen. Damit lässt sich das allgemeine Problem auf die mathematische Lösung einer Variationsaufgabe unter Nebenbedingung zurückführen.

Überleitung zu Teil B: Anwendungen

Svante August Arrhenius

(* 1859 bei Uppsala; † 1927 in Stockholm)

schwedischer Physiker und Chemiker,
Nobelpreisträger (1903) für Chemie.

Die nach ihm benannte **ARRHENIUS-Gleichung**,
hier in Abhängigkeit vom Zeitverlauf der Temperatur:

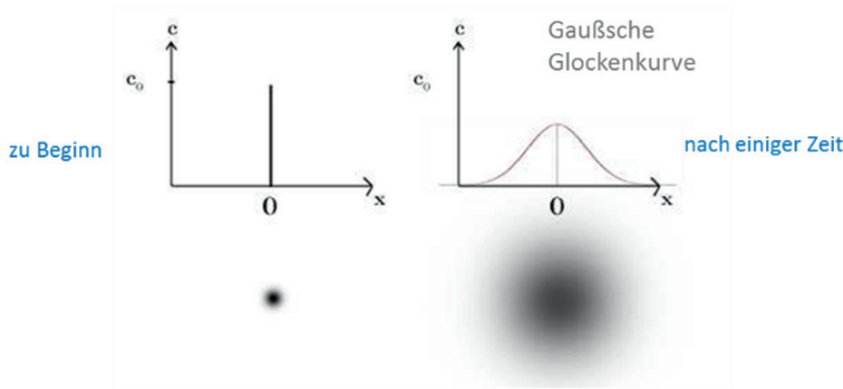
$$D(t) = D_0 \cdot e^{\frac{-Q}{R \cdot \Theta(t)}}$$

Beispiel: Konzentrationsausgleich im unendlich ausgedehnten Raum unter anisothermen Verhältnissen

Differentialgleichung:
$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D(t) \cdot \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}$$

Anfangsbedingung:
$$c(x,t=0) = \int_{-\infty}^{+\infty} c_0 \cdot \delta(x-0) \cdot dx = \begin{cases} c_0 & \text{bei } x=0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Lösung:
$$c(x,t) = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi \int_0^t D(\tau) \cdot d\tau}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4 \int_0^t D(\tau) \cdot d\tau}}$$



(siehe auch ein weiteres und ergänzendes Beispiel im **Anhang**)

Teil B: Thermisch aktivierte und reaktionskinetisch determinierte Anwendungen

3 Wärmetechnisch-reaktionskinetische Modellierung zum Schweißen

Die Temperaturverhältnisse beim Schweißen beeinflussen maßgeblich die Werkstoffeigenschaften im Nahbereich der Schweißnaht. Bei gegebenem Grundwerkstoff stellt sich ein Eigenschaftsgefälle senkrecht zur Schweißnaht in Abhängigkeit von Schweißzusatzwerkstoff, Schweißverfahren und Schweißtechnologie ein. Beim Elektronen- und insbesondere beim Laserschweißen ist die wärmebeeinflusste Zone relativ schmal und der Eigenschaftsgradient entsprechend hoch. Der Stahlwerkstoff der zu verbindenden Teile wird in einem örtlich sehr eng begrenzten Bereich aufgeschmolzen. Die Erwärmungs- und Abkühlgeschwindigkeiten sind groß und das sich raumzeitlich ausbildende Temperaturfeld ist hochinstationär. In einer hinreichend schweißnahtnahen Zone laufen infolge thermischer Anregung Diffusionsprozesse beschleunigt ab. Damit einhergehend finden sowohl Austenitkornwachstum als auch Phasenumwandlung statt. Diese auf metallphysikalischer Ebene erfolgenden Vorgänge spiegeln sich im resultierenden Gefüge und in den mechanisch-technologischen Eigenschaften wider. Darüberhinaus beeinflussen die Temperaturverhältnisse auch die lokalen thermisch und gefügebedingten Spannungen im Bereich der Schweißzone. Diese können zu Veränderungen des Spaltes vor der Schweißquelle bzw. zu Verwerfungen oder sogar Rissen in der Schweißverbindung führen.

Für eine zielgerichtete Verbesserung der Qualität eines geschweißten Konstruktionselements oder Bauteils ist es in jedem Falle erforderlich, die eintretenden Eigenschaftsänderungen zu kennen, zu berücksichtigen und geeignet zu beeinflussen. Dabei werden direkte und inverse Problemstellungen unterschieden, je nachdem, ob man von den Prozess- und Werkstückparametern ausgehend zum Prozessergebnis mit den Eigenschafts- und Qualitätsparametern gelangt oder aber, ob man umgekehrt letztere vorgibt, um die hierfür erforderlichen Werkstück- und Prozessparameter zu generieren. Diese inverse Problemstellung ist die für den Praktiker i.allg. interessantere und wichtigere.

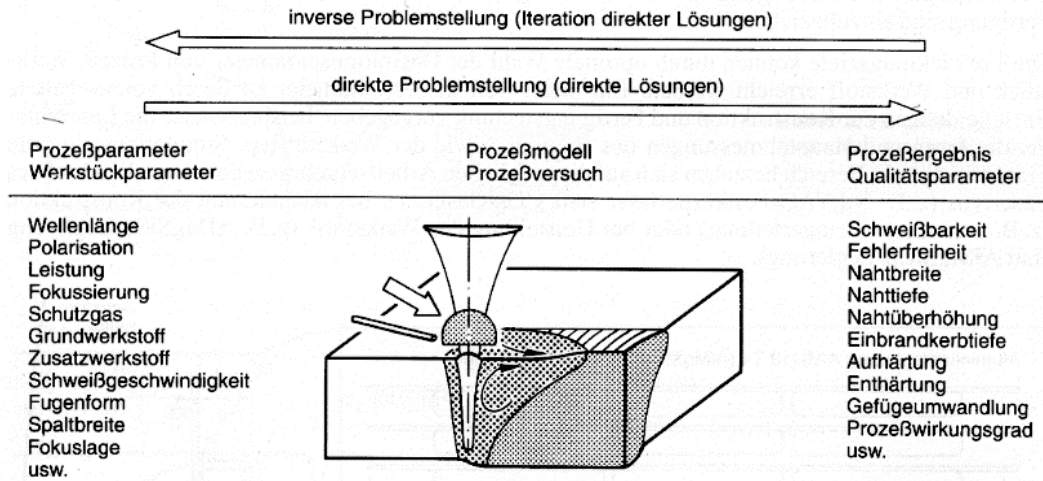


Bild 3.1: Direkte und inverse Problemstellung beim Laserschweißen
[RAD 99, Bild 6.35]

Zur Untersuchung solcher Problemstellungen ist es erforderlich, eine Reihe von Teilaufgaben zu formulieren, zu bearbeiten und die erhaltenen Ergebnisse miteinander geeignet zu verknüpfen. Für eine eigenschaftsorientierte numerische Simulation und Optimierung von Schweißnähten ist es besonders wichtig, die Abhängigkeiten zwischen Werkstoffausgangszustand, Prozessführung (Temperatur-Zeit-Belastung) und Endeigenschaften im wärmebeeinflussten Schweißnahtbereich genau genug zu kennen, wofür [SCH 91] mit Bild 3.2 die folgende Unterteilung vorschlägt.

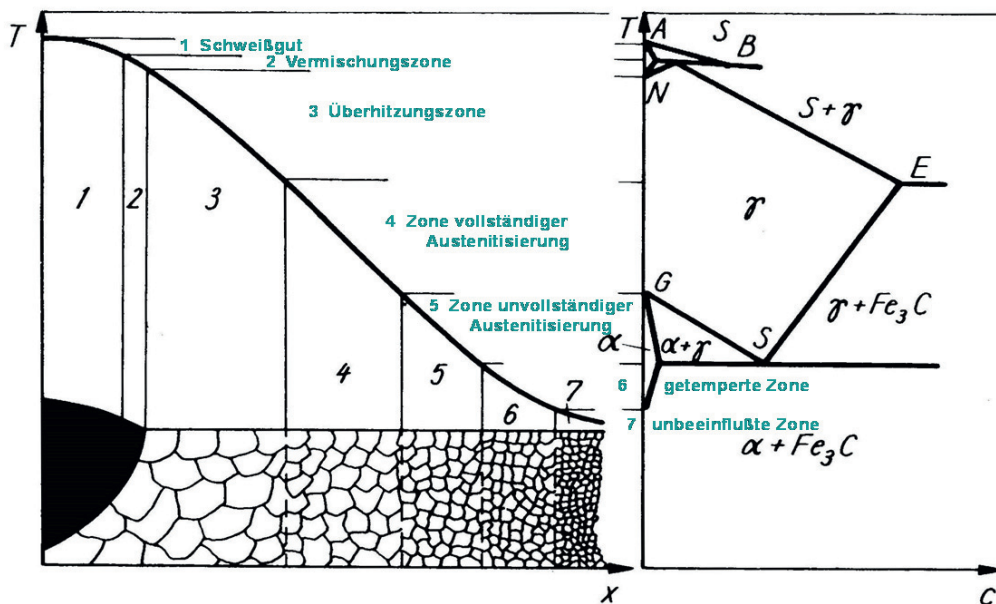


Bild 3.2: Gefügezonen (schematisch) [SCH 91, Bild 9.40]

Zur Beurteilung der Schweißnahteigenschaften in Abhängigkeit der Erwärmungs- und Abkühlungsbedingungen sind sowohl experimentelle als auch

wärmetechnisch-reaktionskinetische Modelluntersuchungen erforderlich. Im vorliegenden Zusammenhang wird vorzugsweise auf den wärmetechnischen und reaktionskinetischen Aspekt der Untersuchungen eingegangen.

3.1 Phasenumwandlung und Wärmetönung

Die Ausbildung des Schweißgefüges wird maßgeblich durch die Prozesse von Austenitkornwachstum beim Erhitzen sowie Phasenumwandlung und Ausscheidungsverhalten beim Abkühlen geprägt. Dabei werde hier infolge versuchstechnischer Gegebenheiten (kleine Abmessungen des Probenmaterials, hohe Aufheiz- und Abkühlgeschwindigkeiten) für die Kinetik der Phasenumwandlung nicht die Dilatation als Indikator herangezogen, sondern die mit ihr mehr oder weniger stark einhergehende Wärmetönung. Im vorliegenden Fall wurde das reaktionskinetische Verhalten von Tiefzieh- und Dualphasenstählen untersucht. Hierfür sind jeweils schmale Blechstreifen bzw. Drähte mit quadratischem Querschnitt durch Konduktionserwärmung innerhalb der Zeit von einer Sekunde auf eine vorgegebene Maximaltemperatur aufgeheizt und sofort anschließend mit unterschiedlich hohen Geschwindigkeiten abgekühlt worden. Die Verzögerung der Abkühlung durch Wärmefreisetzung infolge Phasenumwandlung (bei ferritischen Stählen z.B. als Austenit \rightarrow Ferrit, ggf. auch als Bainit bei höheren Abkühlgeschwindigkeiten) ist im Zeitintervall zwischen 2,6 und 3,6 s im folgenden Bild deutlich zu erkennen – siehe auch **Anhang**.

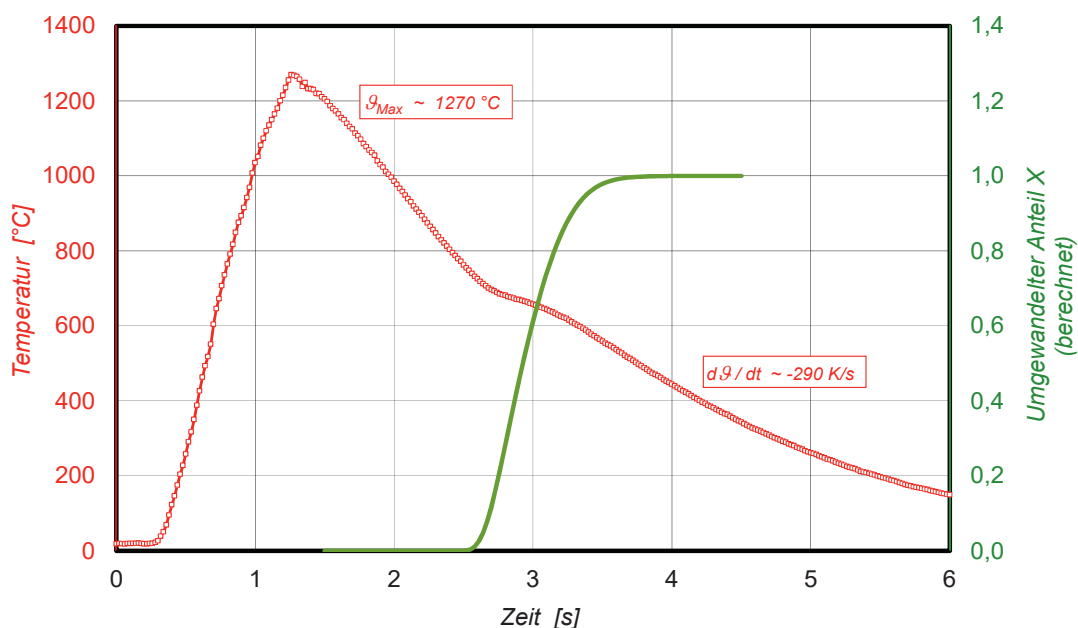


Bild 3.3: Beispiel zur Phasenumwandlung beim Abkühlen



Durch eine entsprechende thermisch-reaktionskinetische Modellierung mit den experimentell gewonnenen Ergebnissen lässt sich unter Berücksichtigung der Wärmefreisetzung auf die Kinetik der Phasenumwandlung schließen, wie nachfolgend gezeigt werden soll. Auf Untersuchungsergebnisse hinsichtlich Gefüge und mechanische Eigenschaften nach Abkühlung wird hier nicht näher eingegangen.

3.2 Modellgleichungen

Zur Beschreibung des thermisch-reaktionskinetischen Modells, das die Phasenumwandlung während Abkühlung widerspiegeln soll, werde der einfachstmögliche Fall angenommen: Der Test- bzw. Probekörper (Vierkantdraht) sei als wärmetechnisch dünnwandig anzusehen¹⁹. Dann berechnet sich die Temperatur \mathcal{G} zum Zeitpunkt $t \geq t_A$ entsprechend (1.4-1), hier für quadratischen Querschnitt, zu

$$\mathcal{G}(t) = \mathcal{G}_A \cdot e^{-\frac{4}{d} \int_{t_A}^t \frac{\alpha(\tau)}{\rho \cdot c} d\tau} + \int_{t_A}^t \frac{q_V(\tau) + \frac{4}{d} \cdot \alpha(\tau) \cdot \mathcal{G}_U(\tau)}{\rho \cdot c} \cdot e^{-\frac{4}{d} \int_{\tau}^t \frac{\alpha(\xi)}{\rho \cdot c} d\xi} d\tau$$

(3.2-1)

Dabei sind $\mathcal{G}_A = \mathcal{G}(t = t_A)$ die Anfangstemperatur, d die Kantenlänge des Vierkantquerschnitts, ρ die Dichte, c die spezif. Wärmekapazität, α der Wärmeübergangskoeffizient, \mathcal{G}_U die Umgebungstemperatur und q_V eine homogen über den Querschnitt verteilte Wärmequelle; die Zeitabhängigkeit der Stoffgrößen folgt aus jener der Temperatur, die versuchstechnisch zu steuern sowie messtechnisch zu erfassen war. Der Zusammenhang zur Wärmeentbindung infolge Phasenumwandlung beim Abkühlen wird hergestellt, indem die Wärmequellen q_V der Umwandlungsgeschwindigkeit \dot{X} direkt proportional anzunehmen sind, d.h., es gelte

$$q_V(t) = \kappa \cdot \dot{X}(t) ; \quad (3.2-2)$$

¹⁹ Eine Abschätzung der konkreten Proben- und Versuchsbedingungen ergab mit *BIOT*-Zahlen $< 0,1$ stets Bedingungen, die die Anwendung der Gleichungen für wärmetechnisch dünnwandige Verhältnisse rechtfertigte.

der Proportionalitätsfaktor κ ist materialabhängig und hängt von der latenten Wärme (Rekaleszenz) ab. Die Umwandlungsgeschwindigkeit ist durch $\dot{\mathbf{X}}(t) = d\mathbf{X}(t)/dt$ gegeben, wobei der umgewandelte Anteil bekanntlich der *AVRAMI*-Beziehung (2.3-1.1) folgt:

$$\boxed{\mathbf{X}(t) = 1 - e^{-(\mathbf{I}(t)/q)^q}}. \quad (3.2-3a)$$

Damit ergibt sich die Umwandlungsgeschwindigkeit explizit zu:

$$\dot{\mathbf{X}}(t) = \dot{\mathbf{X}}(t, \mathcal{G}(t)) = \left(\frac{\mathbf{I}(t)}{q}\right)^{q-1} \cdot e^{-\left(\frac{\mathbf{I}(t)}{q}\right)^q} \cdot \dot{\mathbf{I}}(t). \quad (3.2-3b)$$

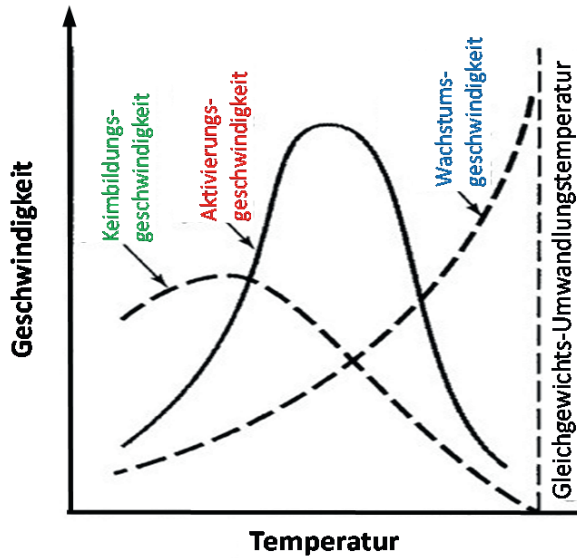
Die Aktivierung genannte Größe \mathbf{I} beinhaltet nicht mehr nur die Zeit und eine temperaturabhängige Konstante $k_{\text{isoth.}}$, wie unter isothermen Verhältnissen $\mathbf{I}(t) = k_{\text{isoth.}} \cdot t$, sondern sie berücksichtigt den vollständigen Temperatur-Zeit-Verlauf $\mathcal{G}(t)$:

$$\boxed{\mathbf{I}(t) = \int_0^t \dot{\mathbf{I}}(\mathcal{G}(\tau)) \cdot d\tau}. \quad (3.2-4)$$

Die Aktivierungsgeschwindigkeit $\dot{\mathbf{I}}$ wird von der Triebkraft der Umwandlung unmittelbar bestimmt. Bei diffusionsgesteuerten Vorgängen, wie z.B. bei der Rekristallisation, wird diese Triebkraft gewöhnlich durch eine *BOLTZMANN-ARRHENIUS*-Beziehung gemäß (2.1-5a) bzw. (2.1-5b) beschrieben:

$$\dot{\mathbf{I}}(\mathcal{G}(t)) := k_B \cdot e^{\frac{-Q_B}{\mathcal{R} \cdot (\mathcal{G}(t) - \mathcal{G}_B)}} \text{ für } \mathcal{G} > \mathcal{G}_B, \text{ sonst } 0. \quad (3.2-5.1)$$

Bei Umwandlungs- und Ausscheidungsvorgängen dagegen wird die Aktivierungsgeschwindigkeit durch das Produkt aus Keimbildungs- und Wachstumsgeschwindigkeit bestimmt. Während die Keimbildungsgeschwindigkeit mit zunehmender Unterkühlung wächst, verringert sich die Keimwachstumsgeschwindigkeit mit abnehmender Temperatur infolge sinkender Atombeweglichkeit bei der Diffusion [ASK 96, Kap. 11.2].



Das soll die nebenstehende Skizze veranschaulichen.

Sie zeigt, dass sowohl für Keimbildung als auch für Keimwachstum Ansätze nach *BOLTZMANN-ARRHENIUS* gelten, also nach der Art (3.2-5.1). Deren multiplikative Verknüpfung führt für die *Aktivierungsgeschwindigkeit* auf den folgenden Ausdruck:

$$\dot{i}(\vartheta(t)) := k_{BC} \cdot \begin{cases} 0 & \text{für } \vartheta_B \leq \vartheta(t) \leq \vartheta_C \\ e^{\frac{Q_B}{R \cdot (\vartheta(t) - \vartheta_B)}} \cdot e^{\frac{-Q_C}{R \cdot (\vartheta(t) - \vartheta_C)}} & \text{für } \vartheta_C < \vartheta(t) < \vartheta_B \\ \text{Keimbildung} & \text{Keimwachstum} \end{cases} \quad (3.2-5.2)$$

Die Temperaturabhängigkeit dieser Funktion ist jener qualitativ ähnlich, die durch eine Dichtefunktion vom *GAUß*-Typ

$$\dot{i}(\vartheta(t)) := k_G \cdot e^{-\left| \frac{\vartheta(t) - \vartheta_G}{\Delta \vartheta_G} \right|^{n_G}} \quad (3.2-5.3)$$

realisiert wird, allerdings mit dem Unterschied, dass (3.2-5.2) i.allg. einen in ϑ asymmetrischen Verlauf aufweist und damit dem tatsächlichen Geschehen deutlich besser entspricht. Außerdem besitzt der *ARRHENIUS*-Produktansatz den Vorteil, dass der Bereich der Phasenumwandlung durch Temperaturschranken für Umwandlungsbeginn ϑ_B und Umwandlungsende ϑ_C auf ein Temperaturintervall $\vartheta_B > \vartheta > \vartheta_C$ konkret eingegrenzt wird. Das Aktivierungsmaximum für (3.2-5.2) befindet sich innerhalb dieses Intervalls bei der Temperatur $\vartheta = \vartheta_{Max}$ mit

$$\vartheta_{Max} = \frac{\sqrt{Q_B} \cdot \vartheta_C + \sqrt{Q_C} \cdot \vartheta_B}{\sqrt{Q_C} + \sqrt{Q_B}}; \quad (3.2-5.2^*)$$

dabei bezeichnen Q_B und Q_C die Aktivierungsenergien für Keimbildung und Keimwachstum.

Werden bei der Temperaturberechnung (3.2-1) anstelle der zeit- bzw. temperatur-zeitabhängigen Stoffwerte und Randfunktionen vereinfachend

Mittelwerte verwendet, so erhält man mit der Zeitkonstante nach (1.4-3.9a)²⁰ anstelle (3.2-1) zunächst

$$\mathcal{G}(t) = \mathcal{G}_A + (\mathcal{G}_U - \mathcal{G}_A) \cdot \left(1 - e^{-\frac{t-t_A}{T}}\right) + \frac{l}{\rho c} \cdot \int_{t_A}^t \mathbf{q}_V(\tau) \cdot e^{-\frac{t-\tau}{T}} d\tau. \quad (3.2-6.1)$$

Dieses Resultat läßt sich unter Berücksichtigung der Wärmequellen (3.2-2) mit (3.2-3) durch partielle Integration und einige Zwischenschritte explizit zur Näherungsformel

$$\mathcal{G}(t) \approx \mathcal{G}_A + (\mathcal{G}_U - \mathcal{G}_A) \cdot \left(1 - e^{-\frac{t-t_A}{T_1}}\right) + \frac{\kappa}{\rho c} \cdot \left[\left(1 + e^{-\frac{t}{T_2}} - e^{-\frac{t_A}{T_2}}\right) \cdot \mathbf{X}(t) - e^{-\frac{t-t_A}{T_2}} \cdot \mathbf{X}_A \right] \quad (3.2-6.2)$$

vereinfachen; hierbei bezeichnen die beiden Parameter T_i Zeitkonstanten, die u.a. Stoffwerte, Abmessungen und Wärmeübergangsverhältnisse berücksichtigen, \mathcal{G}_A und \mathbf{X}_A bezeichnen Anfangstemperatur und Umwandlungsanteil zum Zeitpunkt $t = t_A$. Mit den Beziehungen (3.2-1) bis (3.2-5) bzw. näherungsweise (3.2-6.1) oder (3.2-6.2) statt (3.2-1) liegt das thermisch-reaktionskinetisch gekoppelte Modell in Form analytisch geschlossener Gleichungen komplett vor.

Die momentane Abkühlgeschwindigkeit $\dot{\mathcal{G}}(t) = d\mathcal{G}(t)/dt$, gebildet mit (3.2-6.1), ist explizit gegeben zu

$$\dot{\mathcal{G}}(t) = (\mathcal{G}_U - \mathcal{G}_A) \cdot \frac{e^{-\frac{t-t_A}{T}}}{T} + \frac{\mathbf{q}_V(t)}{\rho c} - \frac{l}{\rho c T} \int_{t_A}^t \mathbf{q}_V(\tau) \cdot e^{-\frac{t-\tau}{T}} d\tau. \quad (3.2-6.3)$$

Nach Ermittlung der kinetischen Parameter in Verbindung mit den experimentellen Ergebnissen liegt dann auch der umgewandelte Anteil $\mathbf{X} = \mathbf{X}(t, \mathcal{G}(t))$ mit dem auf anisotherme Verhältnisse verallgemeinerten *AVRAMI*-Ansatz (3.2-3) quantitativ vor.

Anmerkung: Unterliegen die Abkühlverläufe nicht den hier gegebenen konvektiven Verhältnissen, so sind entsprechende andere Approximationen der Temperaturverhältnisse vorzunehmen, während der reaktionskinetische Part davon unberührt bleibt.

²⁰ konkret mit $T = \frac{d}{4} \cdot \frac{\rho c}{\alpha}$



3.3 Reaktionskinetische Auswertung

Mit Bild 3.4 werden exemplarisch für zwei unterschiedlich rasch abgekühlte Proben neben einigen Temperatur-Messwerten die Ausschnitte der dazugehörigen mit (3.2-6) approximierten Temperaturverläufe im Bereich der Wärmetönung gezeigt. Weiterhin wurden die mit (3.2-3a) berechneten umgewandelten Anteile (gestrichelte sigmoidale Kurven) eingetragen.

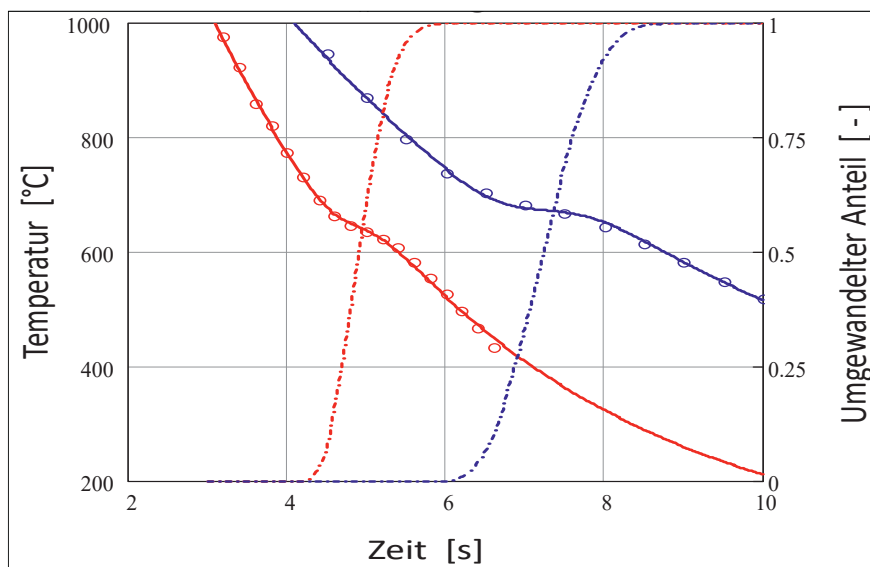


Bild 3.4: Modellergebnisse für Temperatur und umgewandelten Anteil

Um diese Resultate zu erhalten, ist ein unumgänglicher numerischer Zwischenschritt zu realisieren: die Parameteridentifikation. Dabei werden all jene Parameter, die sich nicht anderweitig festlegen lassen, dadurch bestimmt, dass sie mit mathematisch-numerischen Methoden der nicht-linearen Quadratmittelapproximation in Verbindung mit den Temperaturmesswerten durch Minimierung der Summe der Abstandsquadrate zwischen Modell- und Messdaten nach *GAUß* berechnet werden. Bei dieser mathematisch inversen Aufgabenstellung werden die kinetischen Parameter (Aktivierungsenergien, *AVRAMI*-Exponent usw.), vereinfacht ausgedrückt, durch Abgleich zwischen Modellfunktionen und Messwerten ermittelt. Hierfür lassen sich unterschiedliche numerische Minimierungs- oder Optimierungsalgorithmen heranziehen, so z.B. nach *GAUß-NEWTON*, als *Trust-Region-GAUß-NEWTON*-Verfahren oder regularisierte Varianten davon, wie das *MARQUARDT*- bzw. das *LEVENBERG-MARQUARDT*-Verfahren. Dabei ist zu berücksichtigen, dass bei der Parameteridentifikation stets die unangenehme Eigenschaft der *Mehrdeutigkeit und Instabilität der Lösungen* auftritt. Das ist eine prinzipielle mathematische Eigenschaft, die den inversen



nichtlinearen Quadratmittelproblemen inhärent ist. Sie wiederum ist eine Folge der *Inkorrektheit* der Aufgabenstellung, wie nach *HADAMARD* klassifiziert wird. Die Problematik inkorrekt gestellter Aufgaben ist ein Charakteristikum inverser Problemstellungen schlechthin [HOF 99, Kap. 1].

Nachdem die freien Parameter mit einer dieser numerisch-iterativen Methoden ermittelt wurden, liegen alle Gleichungen (3.2-1) bis (3.2-6) geschlossen vor und beschreiben damit sowohl den Temperatur- als auch den Umwandlungsverlauf beim Abkühlen treffend (Bild 3.4). Unter Einbeziehung mehrerer Versuchsreihen mit unterschiedlichen Abkühlgeschwindigkeiten, z.B. durch Variation des Wärmeübergangs (durch Änderung der Strömungsgeschwindigkeit des Kühlmediums oder dessen Zusammensetzung), wird auch auf diese Weise die Modellierung von Dilatometerversuchsreihen sowie unter Einbeziehung von Resultaten zum metallographischen Gefügestatus die analytische Beschreibung von ZTU-Diagrammen möglich. Ebenso gelingt die reaktionskinetische Beschreibung von Kornwachstum und Härte bzw. Festigkeitseigenschaften. Hier das komprimierte Ergebnistableau für Aufheiz- und Akühlverläufe, wie sie beim Laserschweißen im Sekundenzeitraum stattfinden:

g(t)-Vorgabe

Aktivierung: $I(t) = \int_0^t \dot{I}(g(\tau)) \cdot d\tau$	kinetische Parameter	
	Stahl A	Stahl B
Umwandlungskinetik $X(I) = 1 - e^{-\left(\frac{I}{q}\right)^q}$ mit ARRHENIUS-Produktansatz	$q = 1,06; k_{BC} = 51$ $Q_C = 2521; g_C = 803$ $Q_B = 1782; g_B = 253$	$q = 1,36; k_{BC} = 92$ $Q_C = 3030; g_C = 564$ $Q_B = 509; g_B = 121$
Austenitkornkinetik $D(I) = \sqrt[n]{D_0^n + I}$ mit ARRHENIUS-Ansatz	<i>Austenitkornbestimmung war infolge niedrigen C-Gehalts nicht möglich</i>	$D_0 = 3,85; k_D = 749,1$ $g_D = 866,0; Q_D = 5563$ $n = 1,59$
Festigkeitskinetik $R_m(I) = R_{m0} \cdot I^m$ mit ARRHENIUS-Produktansatz	$R_{m0} = 534$ $m = -0,073$ kinet. Parameter aus Umwandlungskinetik	$R_{m0} = 1475$ $m = -0,088$ kinet. Parameter aus Umwandlungskinetik

Bild 3.5: Ergebnistableau einer reaktionskinetischen Auswertung für zwei ferritische Stähle A und B; \dot{I} siehe (3.2-5.1) bzw. (3.2-5.2)

Angemerkt sei, dass in der Praxis der Dilatometrie üblicherweise die Temperatur beim Abkühlen linear ausgeregelt wird, so dass als Reaktionsgröße nicht das Signal der Rekaleszenz herangezogen wird, sondern die äquivalente Größe der Dilatation, für die lange bewährte Methoden der Auswertung genutzt werden [MÜL 00]. Dagegen ermöglicht es die hier angewandte Methode der Kombination von wärme- und reaktionskinetischem Modell mit vergleichsweise einfachen Mitteln, eine analytisch geschlossene Auswertung auch in solchen Fällen durchzuführen, in denen sich – aus welchen Gründen auch immer – keine standardisierten Dilatometerproben herstellen lassen, wie das z.B. bei den Untersuchungen zum Laserschweißen dünner Bänder bzw. Bleche der Fall war.

Das Austenitkornwachstum in Abhängigkeit von der Aktivierung zeigt für den Stahl B das folgende Bild (Stahl A wies zu wenig C-Gehalt auf, um die Korngrenzen hinreichend anätzen zu können).

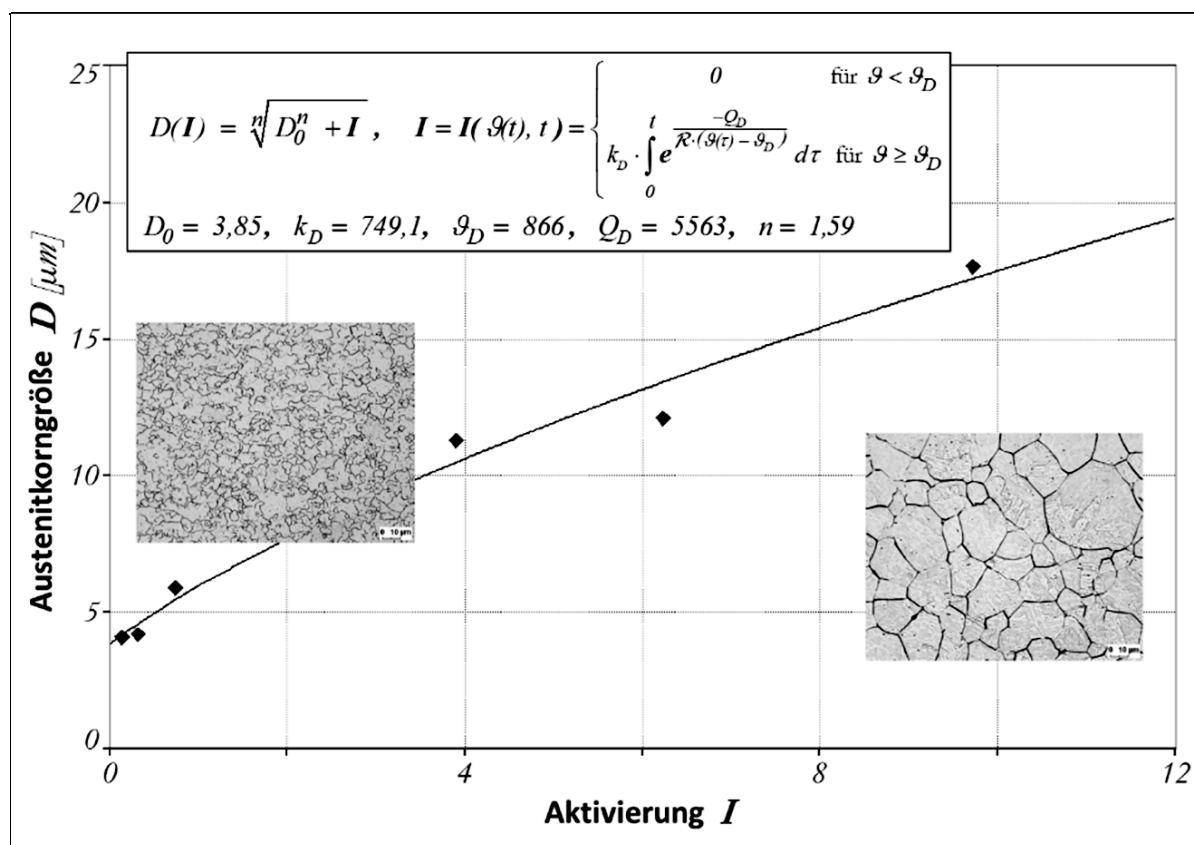
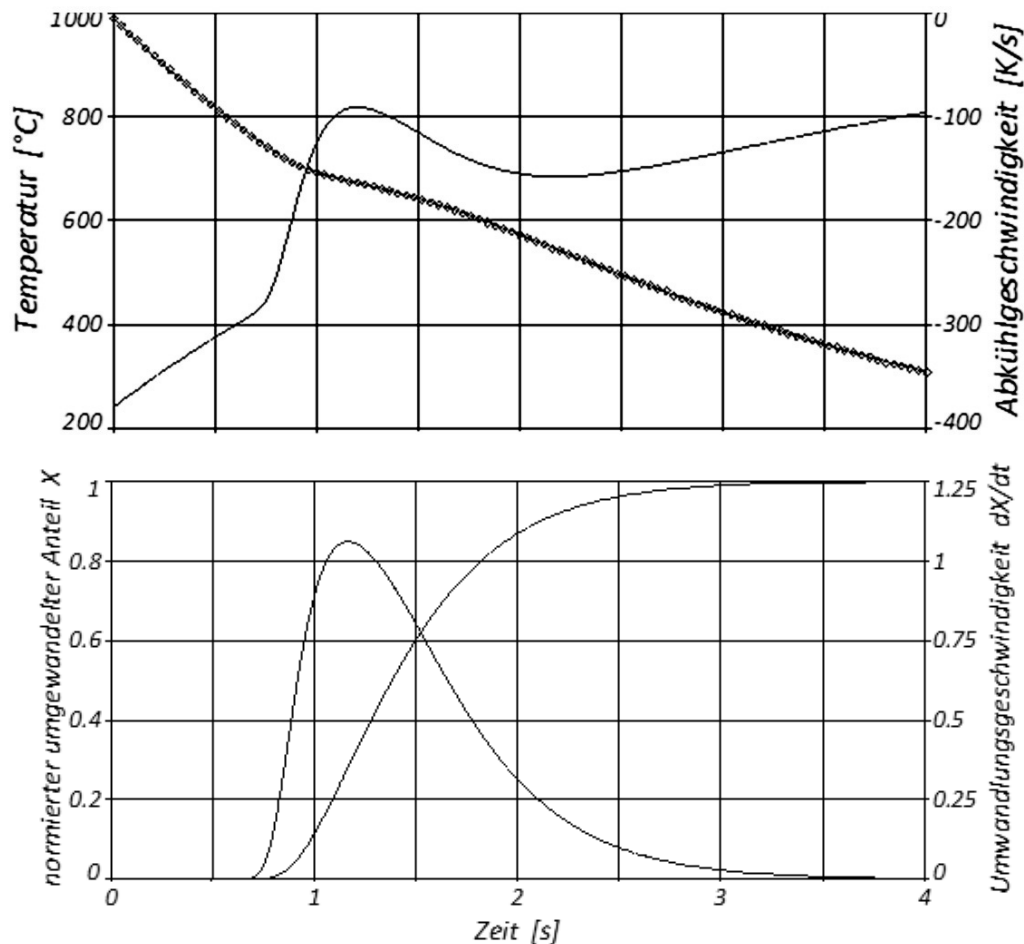


Bild 3.6: Kornwachstum von Stahl B, (Aufheizzeit 1 s, Abkühlgeschwindigkeit $\sim 2400\text{K/s}$)

Diese Darstellungsweise verallgemeinert insofern, als sie statt konkreter Temperatur-Zeit-Bedingungen die Aktivierung als Bezugsgröße heranzieht. Damit wird die gesamte Schar reaktionskinetisch äquivalenter Temperatur-

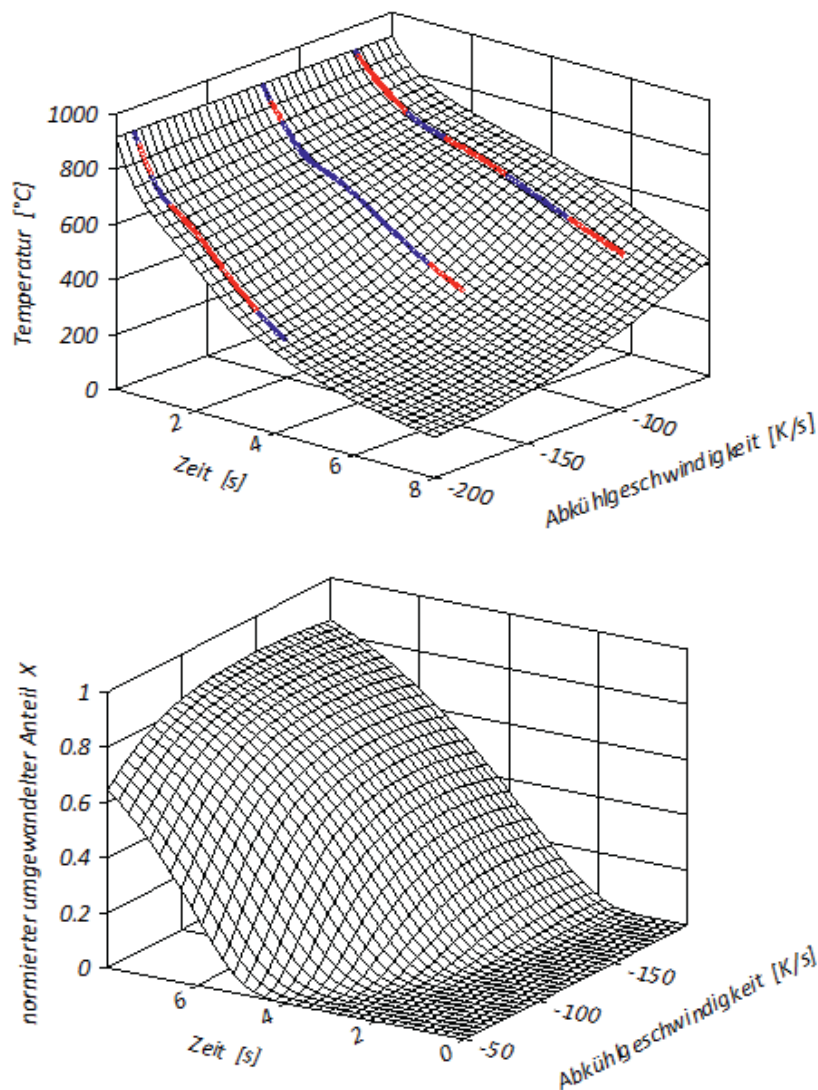
Zeit-Verhältnisse zugelassen, auch jene, die experimentell nicht untersucht wurden, die jedoch das jeweilige Quantum von I erfüllen.

Hier noch weitere Beispiele und Resultate zur Phasenumwandlung:



Bilder 3.7: Reaktionskinetisch modellierte Abkühlung und Umwandlung eines Stahls A (Versuch 10 von 15)

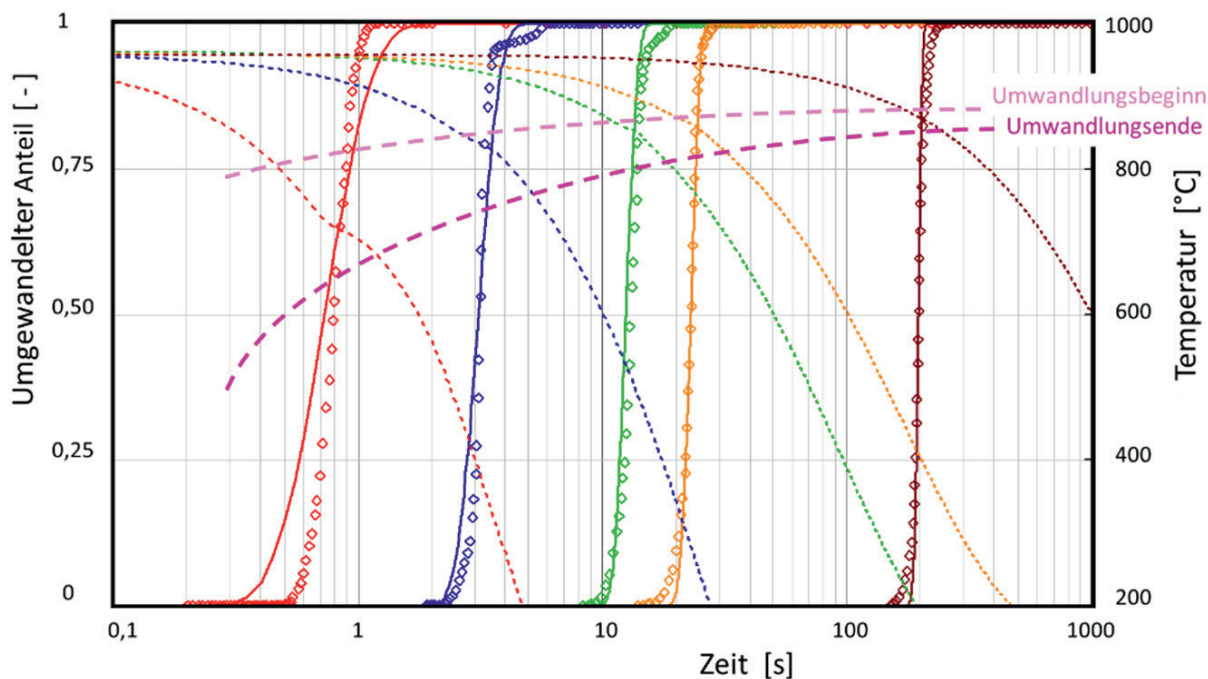
Neben der reaktionskinetischen Einzelauswertung von Abkühlverläufen läßt sich ebenso eine Parameteridentifikation unter Einbeziehung mehrerer Abkühlverläufe vornehmen (Bild 3.8). Eine solche kombinierte Auswertung zeigt beispielshalber Stahl A. Zu drei gemessenen Abkühlkurven wurden die Modellparameter berechnet und die Regressionsfläche gezeichnet, wobei als neue Variable die Abkühlgeschwindigkeit (oder der Wärmeübergang) hinzukommt. Damit gelingt die modellhafte Überdeckung und Beschreibung eines größeren Zeit-Abkühlgeschwindigkeits- (bzw. Wärmeübergangs-) Bereichs bis hin zu Teilbereichen von ZTU-Diagrammen.



Bilder 3.8: Abkühlung und Umwandlung; siehe auch Anhang

Während in den bisher gezeigten Beispielen als Basis der reaktionskinetischen Auswertung die Abkühlverläufe mit den Wärmetönungen (bzw. die Austenitkorngrößen oder in Zugfestigkeiten umgerechnete Härtewerte) herangezogen worden waren, lassen sich ebenso die umgewandelten Anteile, wie sie normalerweise dem Dilatometerversuch entnommen werden, zum Ausgangspunkt der Modellierung mit (3.2-3a), (3.2-4) und (3.2-5.2) machen, wie es das folgende Bild 3.9 zeigt; abgesehen von den separaten wärmetechnischen Modellparametern der fünf Abkühlkurven beschreibt im Beispiel ein einziger Parametersatz aus den sechs reaktionskinetischen Parametern $q = 2$, $k_{BC} = 7,2$, $\mathcal{G}_B = 890$, $Q_B = 558$, $\mathcal{G}_C = 111$, $Q_C = 93$ den Verlauf der Umwandlung mit einem Bestimmtheitsmaß von 0,98 und einer Standardabweichung von 0,06. Das Modell der Umwandlungskinetik

(3.2-3a) gilt jetzt sogar nicht mehr nur für die konkreten fünf Abkühlverläufe, die experimentell verwirklicht wurden, sondern für den insgesamt überdeckten Bereich *NEWTON*'scher Abkühlregimes und darüberhinaus wohl auch für ähnliche Abkühlverläufe, und das jedenfalls innerhalb des durch die Versuche abgedeckten Bereichs.



Bid 3.9: Austenit-Ferrit-Umwandlung eines Kohlenstoffstahles

Umwandlungsbeginn und Umwandlungsende besitzen jene Charakteristik, wofür bereits mit der Argumentation zu Bild 2.3 (rechts) eine Begründung gegeben wurde.

Damit existiert für die Austenit-Ferrit-Umwandlung ein Modell, das die thermisch aktivierte Reaktionskinetik zutreffend beschreibt, auch wenn der gefundene Parametersatz nicht der einzige und vermutlich auch nicht der beste sein wird (im Sinne der Minimierung der Abweichungsquadratsumme von Mess- und Modellwerten). Das liegt an der unvermeidlichen Problematik inverser nichtlinearer Aufgabenstellungen, die sich der mathematisch-numerischen Methoden der nichtlinearen Quadratittelapproximation bedienen, worauf ja mit [HOF 99] bereits hingewiesen wurde.

4 Wärmetechnisch-reaktionskinetische Modellierung bei Oxidationsprozessen

Als Ausgangsbasis zur Beschreibung der Oxidation bzw. Verzunderung von Metalloberflächen wird häufig eine Wachstumsformel, wie sie u.a. aus Lösungen der *FICK*'schen Differentialgleichung folgt, herangezogen:

$$\boxed{s(t) = \sqrt[n]{s_0^n + I_D(t)}}; \quad (4-1)$$

die Aktivierung entsprechend (2.3-2.2). Diese Beziehung stimmt formal mit jener des Kornwachstums (2.3-2.1) überein. Dabei wird nach dem parabolischen bzw. quadratischen Wachstumsgesetz für den Wurzelausdruck zumeist der Wachstumsexponent $n=2$ angenommen (vgl. **Anhang**), was infolge mannigfacher Einflüsse weder zweckmäßig noch notwendig ist.

Die Integration in (2.3-2.2) ist bei gegebenem Temperatur-Zeit-Verlauf entweder numerisch durchzuführen oder für bestimmte einfache Verläufe, z.B. lineare oder exponentielle, wie sie bei dünnwandigem Wärmgut auftreten, auch analytisch geschlossen möglich [MÜL 94, Kap. 3.2]. Außerdem wird für die Bezugstemperatur i.allg. $\vartheta_B = -273,15^\circ\text{C}$ vorgegeben, was bedeutet, dass alle Oberflächenreaktionen, die beim absoluten Temperaturnullpunkt der thermodynamischen Temperaturskala beginnen, einbezogen werden. Bild 4.1 zeigt das Resultat einer auf der Basis von Labor-Verzunderungsversuchen an Luft erfolgten Modellbildung mit (4-1).

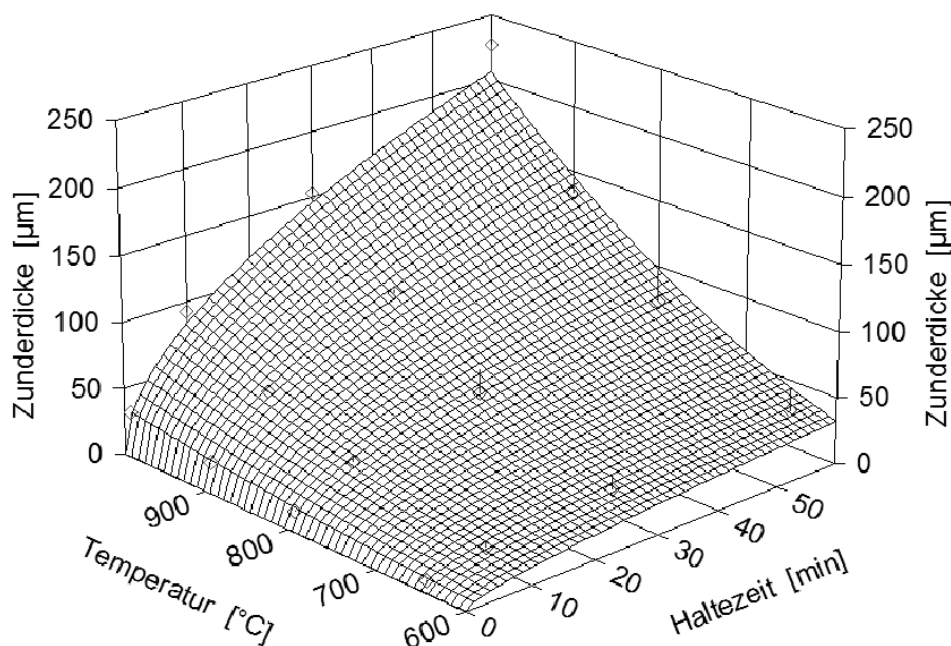


Bild 4.1: Modellergebnis zum Verzundern eines NE-Werkstoffs

Der Hintergrund für diese Untersuchung war zunächst der Wunsch, festzustellen, wie sich in einer NE-Metall-Bandgießanlage unterschiedliche Temperaturverhältnisse auf das Oxidationsverhalten des Bandes auswirken. Für eines von mehreren Temperaturszenarien zeigt Bild 4.2, dass sich bis zum Warmwalzwerk u.U. eine Schicht von ca. 60 μm aufbauen kann; Zunder, der Materialverlust bedeutet und der noch andere negative Auswirkungen im Produktionsprozess nach sich zieht.

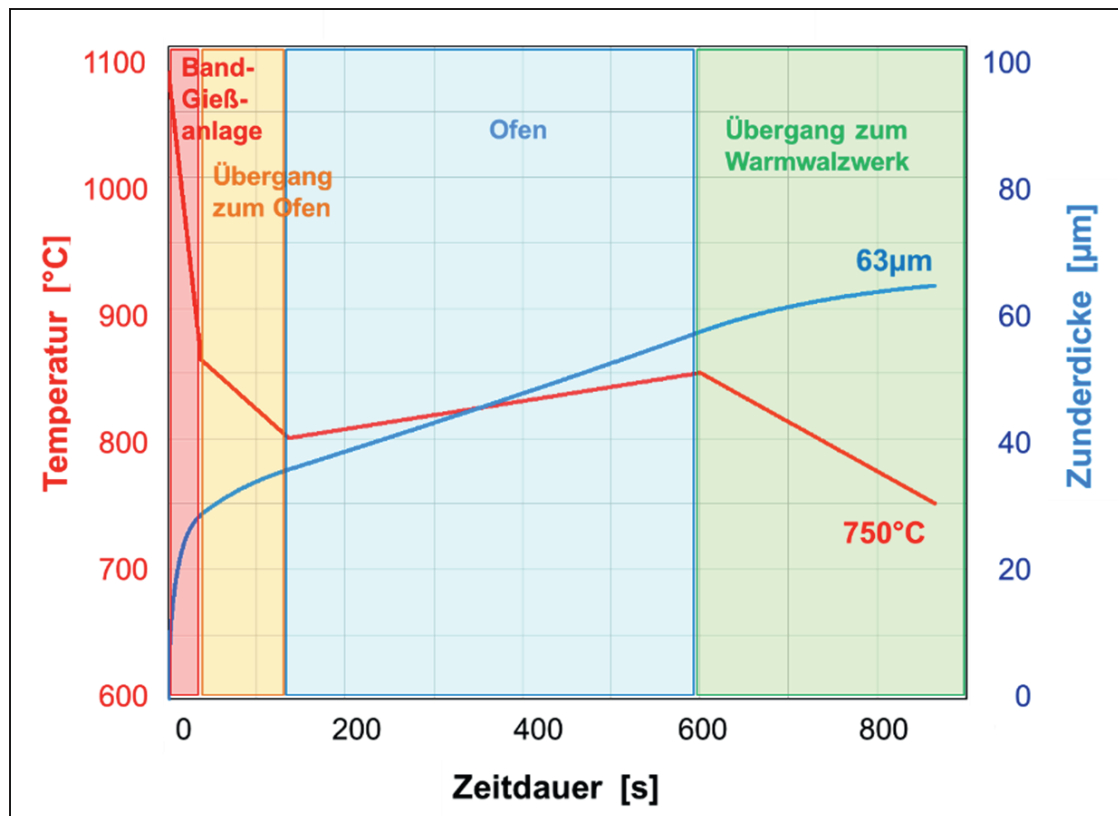


Bild 4.2: Modellergebnis zum Verzundern eines NE-Werkstoffs einer Gießwalzanlage an Luft

In weiteren Berechnungen wurden neben den Temperaturen auch die Sauerstoffpartialdrücke variiert, um zu sehen, wie im Rahmen der Spannweite hinsichtlich eines technologisch umsetzbaren Spektrums eine Zunderreduktion zu erreichen ist.

Dafür wurden zunächst erneut Verzunderungsversuche im Labormaßstab durchgeführt, jetzt allerdings unter Atmosphären mit reduzierten Sauerstoffanteilen von 10 und 3% als Voraussetzung, die hierfür zutreffenden Modellparameter zu ermitteln. Das erfolgte mit dem Ziel, in Simulationsrechnungen herauszufinden, welche Abschnitte der Bandgießanlage ggf.

sinnvoll gekapselt und mit verminderten Sauerstoffpartialdrücken betrieben werden sollten. Für diese Simulation waren die kinetischen Parameter als zeitabhängig zu betrachten, wenn auch nur abschnittsweise. Damit war die Aktivierung (2.3-2.2) zu modifizieren, indem jetzt – wie bereits am Ende von Kap. 2.3 angegeben – die Parameter als zeitabhängig gelten.

$$I_D(t) = \int_0^t k_D(\tau) \cdot e^{\frac{-Q_D(\tau)}{R \cdot (\vartheta(\tau) - \vartheta_D(\tau))}} d\tau \quad \text{für } \vartheta(\tau) > \vartheta_D(\tau), \text{ sonst. } 0 \quad (4-2)$$

Damit konnte gezeigt werden, dass die Temperaturabsenkung und selbst die Reduzierung des Sauerstoffanteils im gekapselten Ausgleichsofen noch zu keiner wirklich befriedigenden Zunderverminderung führt (Bild 4.3).

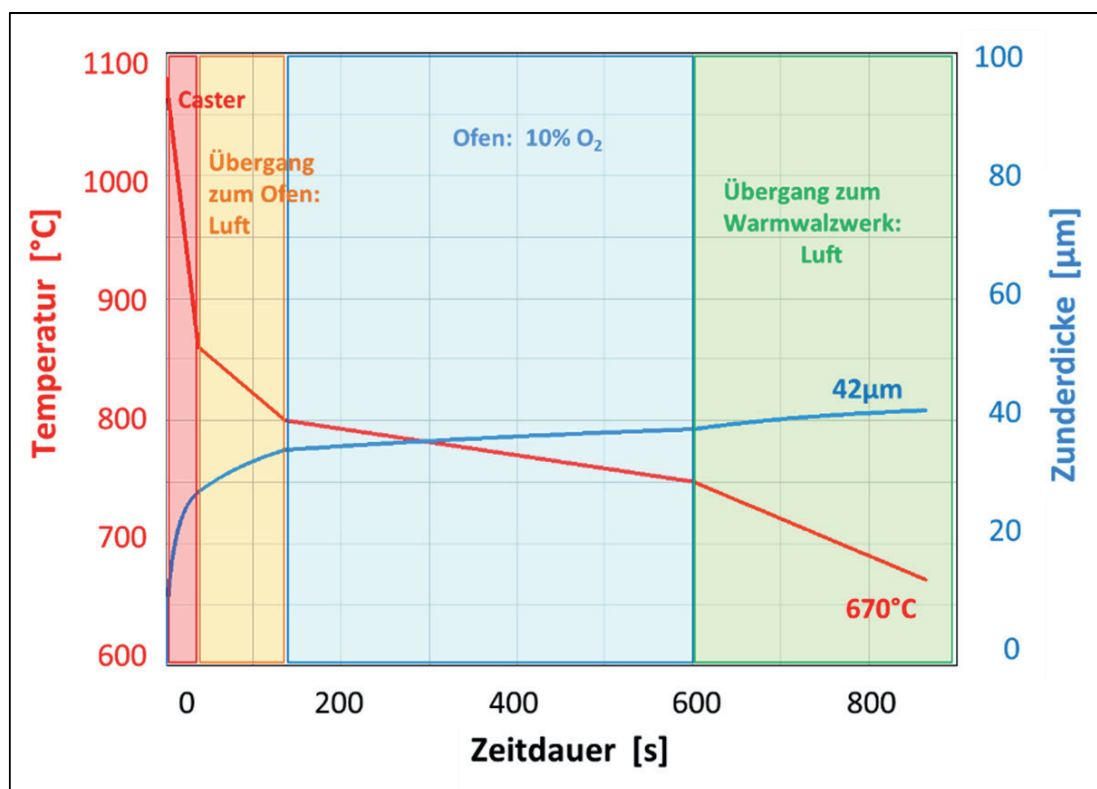


Bild 4.3: Modellergebnis zum Verzundern eines NE-Werkstoffs an einer Gießwalzanlage unter teilweise reduziertem Sauerstoffanteil und bei abgesenkten Temperaturen

Denn bereits die sehr rasche Verzunderung unmittelbar nach der Gießanlage bei den dort herrschenden unvermeidlich hohen Temperaturen ist später natürlich nicht mehr zu kompensieren. Erst die Abschottung und Verminderung des Sauerstoffgehaltes in dieser Region bringt dann tatsächlich einen gewissen technologisch verwertbaren Erfolg (Bild 4.4).

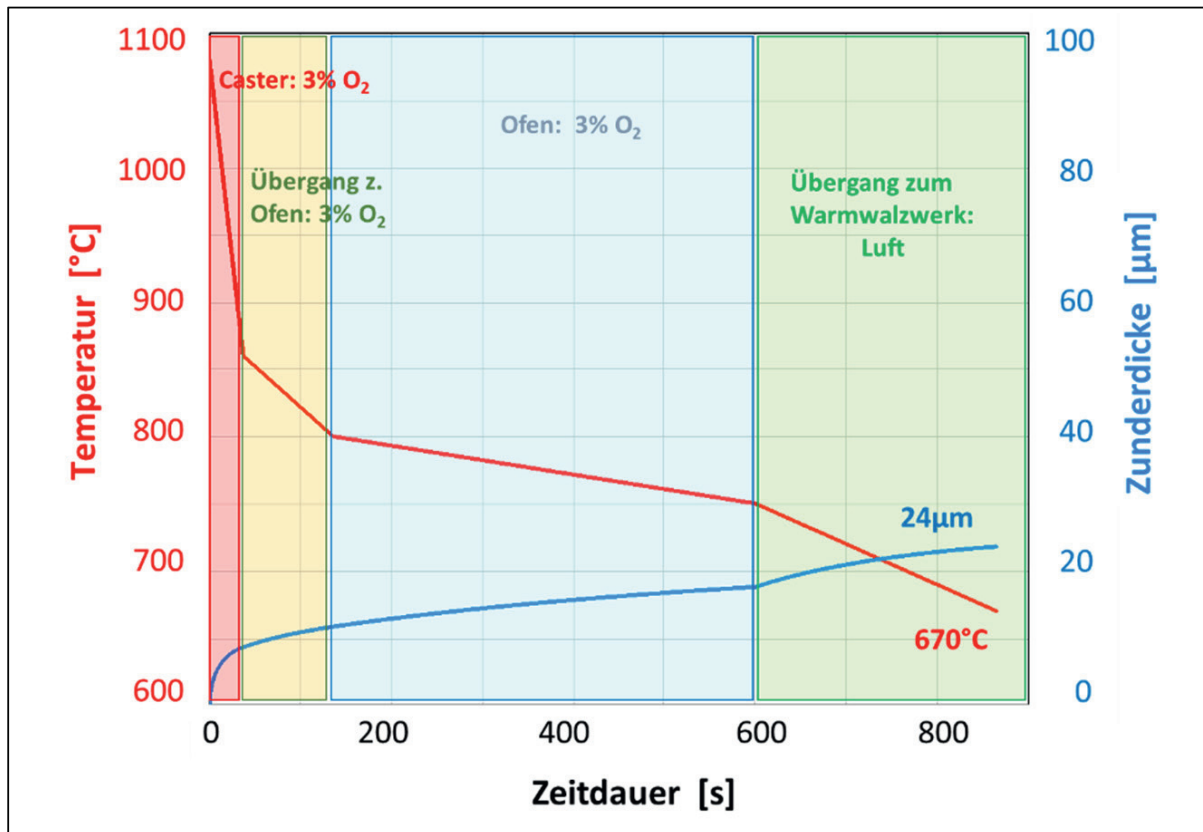


Bild 4.4: Modellergebnis zum Verzundern eines NE-Werkstoffs an einer Gießwalzanlage unter überwiegend reduziertem Sauerstoffanteil und bei abgesenkten Temperaturen

Anstelle einer Sauerstoffreduktion durch Abschottung einzelner Bandabschnitte kann natürlich auch untersucht werden, welchen Fortschritt der Einsatz einer reduzierenden Atmosphäre erbringen würde. Allerdings steht einem jeden Erfolg und Nutzen bei der Verminderung einer Oxid- bzw. Zunderschicht der zu betreibende anlagentechnische Aufwand entgegen, so dass die Entscheidung für oder gegen eine mögliche Variante nicht zuletzt aus betriebswirtschaftlicher Sicht zu beurteilen ist.

Hier jedoch sollte aus methodischem Blickwinkel an einem möglichst leicht nachvollziehbaren Beispiel vor allem gezeigt werden, dass auch die Änderung der reaktionskinetischen Parameter und deren zeitabhängige Berücksichtigung - wenn hier auch nur abschnittsweise diskret - mit einem solchen Modellansatz generell möglich ist.

5 Reaktionskinetische Beschreibung mechanischer Werkstoffeigenschaften in Abhängigkeit von der Glühbehandlung

Für einen durch Umformung verfestigten Messingdraht CuZn37 (\varnothing 0,9mm) sollen die mechanischen Eigenschaften, wie sie sich nach einer entfestigenden Glühbehandlung in Abhängigkeit von Temperatur und Zeit herausgebildet haben, experimentell bestimmt und anschließend mit einem reaktionskinetischen Modellansatz approximiert werden²¹. Im Beispiel sind die Änderung der mechanischen Eigenschaften Zugfestigkeit und Bruchdehnung nach Ofenglühung bei verschiedenen Ofentemperaturen und Verweildauern zu beobachten und deren Abhängigkeiten von den Temperaturverhältnissen zu untersuchen. Dazu werden die Messingdrähte bei Raumtemperatur in den bereits vorgeheizten Ofen eingesetzt und jeweils auf bestimmte Temperaturniveaus aufgewärmt sowie für bestimmte Zeit dort im Ofen belassen.

Die Drahttemperaturverläufe lassen sich mit Lösung (1.4-3.9b) für $q_V = 0$ und mit einer Zeitkonstante nach (1.4-3.9a) berechnen. Sie wurde jedoch auch ganz ähnlich zu $T \approx 20$ s auf der Basis gemessener Aufheizverläufe erhalten, die bei den betreffenden Ofentemperaturen gewonnen wurden²².

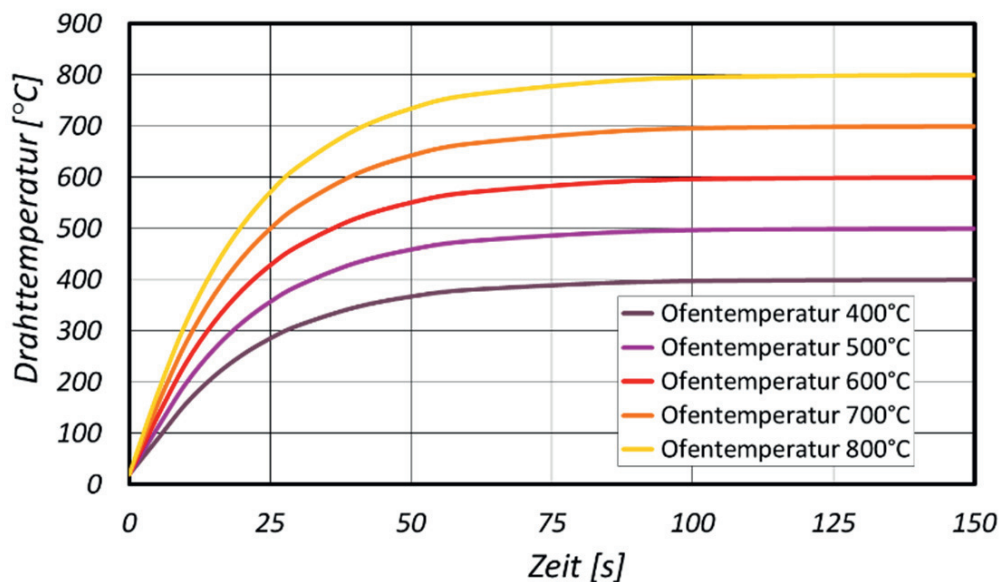


Bild 5.1: Drahttemperaturen bei Wärmebehandlung im Laborofen

²¹ Aufgabe für ein ca. dreistündiges Praktikum zur Rekristallisation.

²² Die Messung der Drahttemperaturen erfolgte, indem Mikromantelthermoelemente geeignet an Referenzdrähte angebracht worden waren.

Die folgende Tabelle zeigt die Versuchsmatrix hinsichtlich Verweildauer der Messingdrähte im Ofen und eingestellter Ofentemperatur.

Versuchsplan Ofenzeit [s]	Ofentemperatur [°C]				
	400	500	600	700	800
10					x
20			x	x	
30		x			x
40				x	
60			x		
90		x			
120	x				x
180			x	x	
240	x	x			

Im Ergebnis der Glühungen und der Werkstoffprüfung wurden die folgenden Ergebnisse gefunden:

Zugfestigkeit R_m [MPa]	Ofentemperatur [°C]					
	20	400	500	600	700	800
Ofenzeit [s]						
0	749,2	749,2	749,2	749,2	749,2	749,2
10	749,2					523,3
20	749,2			507,0	434,2	
30	749,2		516,2			467,8
40	749,2				400,4	
60	749,2			410,1		
90	749,2		420,1			
120	749,2	435,0				423,4
180	749,2			392,6	398,3	
240	749,2	424,4	415,2			

Bruchdehnung A [%]	Ofentemperatur [°C]					
	20	400	500	600	700	800
Ofenzeit [s]						
0	3,1	3,1	3,1	3,1	3,1	3,1
10	3,1					11,5
20	3,1			12,3	42,6	
30	3,1		22,3			83,5
40	3,1				76,8	
60	3,1			79,8		
90	3,1		70,2			
120	3,1	85,3				79,8
180	3,1			79,8	80,6	
240	3,1	83,0	87,4			

Um auf Grundlage der punktuellen Mess- bzw. Prüfergebnisse schnell einen Überblick über den gesamten Versuchsbereich zu bekommen, wurde für die Festigkeits- und die Dehnungswerte je ein reaktionskinetisches Modell durch Parameteridentifikation entsprechend der Ansätze (2.4-2), (2.4-3) mit (2.4-1) aus Kapitel 2.4 aufgestellt. Die erforderlichen Integrationen können sowohl numerisch als auch, unter Einbeziehung der Exponential-



Integral-Funktion²³, auf analytisch geschlossenem Wege berechnet werden – siehe [MÜL 94, Kap. 3.2, Gln. (18), (24)]. Denn für einen quellenfreien exponentiellen Temperaturverlauf der Form (1.4-3.9b)

$$\mathcal{G}(t) = \mathcal{G}_A + (\mathcal{G}_U - \mathcal{G}_A) \cdot (1 - e^{-t/T}) \quad (5.1)$$

lässt sich für den Integralausdruck der Aktivierung die folgende geschlossene Lösung finden:

$$\int_0^t \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{solange } \mathcal{G}(\tau) \leq \mathcal{G}_B \\ e^{\frac{-Q_B}{\mathcal{R} \cdot (\mathcal{G}(\tau) - \mathcal{G}_B)}} & \text{wenn } \mathcal{G}(\tau) > \mathcal{G}_B \end{array} \right\} \cdot d\tau =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} 0 \quad \text{solange } \mathcal{G}(t) \leq \mathcal{G}_B, \quad \text{sonst:} \\ T \cdot \left(\text{Ei}\left(\frac{-Q_B}{\mathcal{R} \cdot (\mathcal{G}(t) - \mathcal{G}_B)}\right) - e^{\frac{-Q_B}{\mathcal{R} \cdot (\mathcal{G}_U - \mathcal{G}_B)}} \cdot \text{Ei}\left(\frac{-Q_B}{\mathcal{R}} \cdot \left(\frac{1}{\mathcal{G}(t) - \mathcal{G}_B} - \frac{1}{\mathcal{G}_U - \mathcal{G}_B}\right)\right) \right) \end{array} \right\} \quad (5.2)$$

Wie bereits angeführt, muss die Ermittlung der Modellparameter auf Grund der Tatsache, dass es sich hierbei um ein mathematisch inverses Problem der nichtlinearen Quadratmittelapproximation handelt, ausschließlich numerisch erfolgen. Für diese Aufgabenklasse existiert in einschlägigen Programmbibliotheken geeignete Software, oder aber es wird von vornherein auf kommerziell erhältliche numerische Mathematiksoftware, wie z.B. TableCurve 3D (begrenzt auf max. 10 Parameter), SigmaPlot, MathCad, Mathematica oder MATLAB zurückgegriffen. Ein Charakteristikum nichtlinearer Quadratmittel- bzw. mehrparametriger Optimierungsprobleme besteht darin, dass für die freien Parameter Vorgaben zu schätzen sind²⁴. Als Indikator schließlich für die Qualität eines konkreten Modells kann das Modell-Bestimmtheitsmaß r^2 herangezogen werden; je näher es an den Wert 1 herankommt, desto geringer ist durchschnittlich der Abstand zwischen Mess- und Modellwerten, womit gleichsam das Vertrauen in das ermittelte Modell wächst.

²³ Weitere Hinweise siehe **Anhang**. Gegenüber der numerischen Integration benötigt die explizite Lösung weit weniger Rechenzeit, was insbesondere bei Einsatz von programmierbaren Taschenrechnern vorteilhaft ist.

²⁴ Vgl. hierzu die knappen Bemerkungen in Kap. 3.3, in [MÜL 98. Kap. 3.3.2 und Anhang B - zu Kap. 3.3.2.1] sowie die umfassende Analyse in [HOF 99].

Für die im Beispiel mit der Software TableCurve 3D ermittelten Parameter wurden die folgenden Werte ermittelt:

	σ_{MIN} ε_{MIN}	σ_{MAX} ε_{MAX}	q_j	k_j	g_j	Q_j	r^2
Zugfestigkeit	393	749	0,13	4554	-8,0	30471	0,987
Bruchdehnung	4,2	80,6	2,63	40,3	19,8	15474	0,986

Hierbei hat die Modellierung bereits mit nur einem Reaktionsmechanismus, d.h., mit $m = j = 1$, ein adäquates Abbild ergeben, wie der visuelle Vergleich zwischen Modellfläche und Prüfwerten von Zugfestigkeit und Bruchdehnung mit den Bildern 5.2 und 5.3 zeigt und wie das hohe Bestimmtheitsmaß bestätigt.

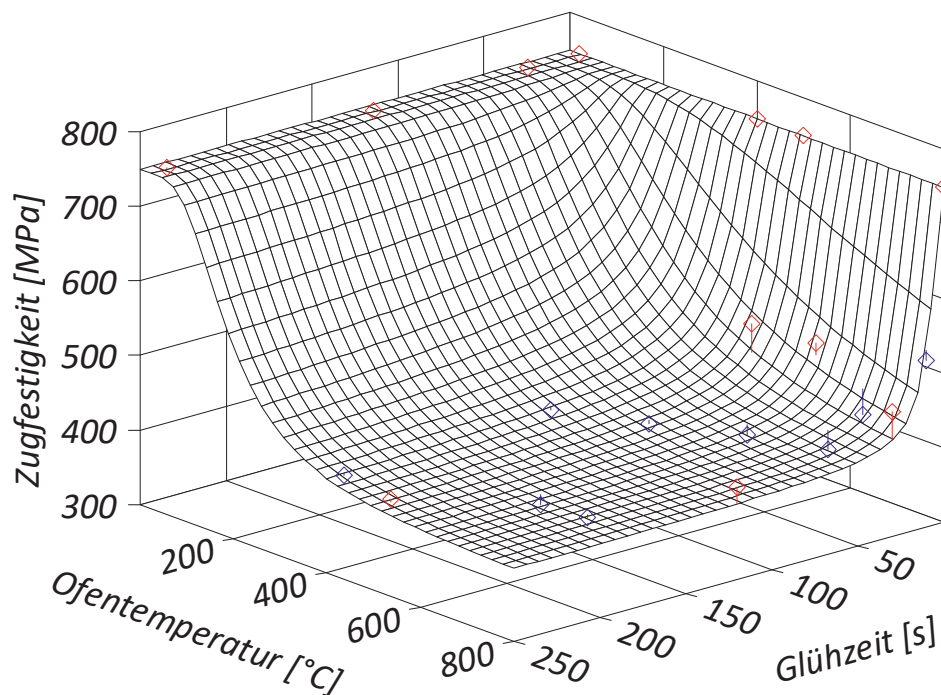


Bild 5.2: Zur Entfestigungskinetik der Zugfestigkeit

Bei diesen Bildern wurden Zugfestigkeit und Bruchdehnung in Abhängigkeit von Ofentemperatur und Glühzeit dargestellt. Einzelne Messwerte als kleine Rautensymbole (blau und rot) zeigen an, wie weitgehend die „Modellfläche“ die Messdaten einschließt bzw. ihnen nahekommt (blaue Rautensymbole liegen etwas unterhalb, rote knapp oberhalb der Modellfläche, was ebenso auf betreffende Bilder der Kapitel 3, 4, 8, 14 und 15 zutrifft).



Es wird aber auch sichtbar, in welchem Temperatur-Zeitbereich zur Stabilisierung des Modellergebnisses noch weitere ergänzende Messungen sinnvoll positioniert werden sollten. Diese adaptiv-schrittweise Vorgehensweise zwischen Versuchsdurchführung und Modellbildung ist effizient und kann selbst bei dem Wunsch nach hoher Modellgüte dennoch den experimentellen Aufwand vermindern helfen.

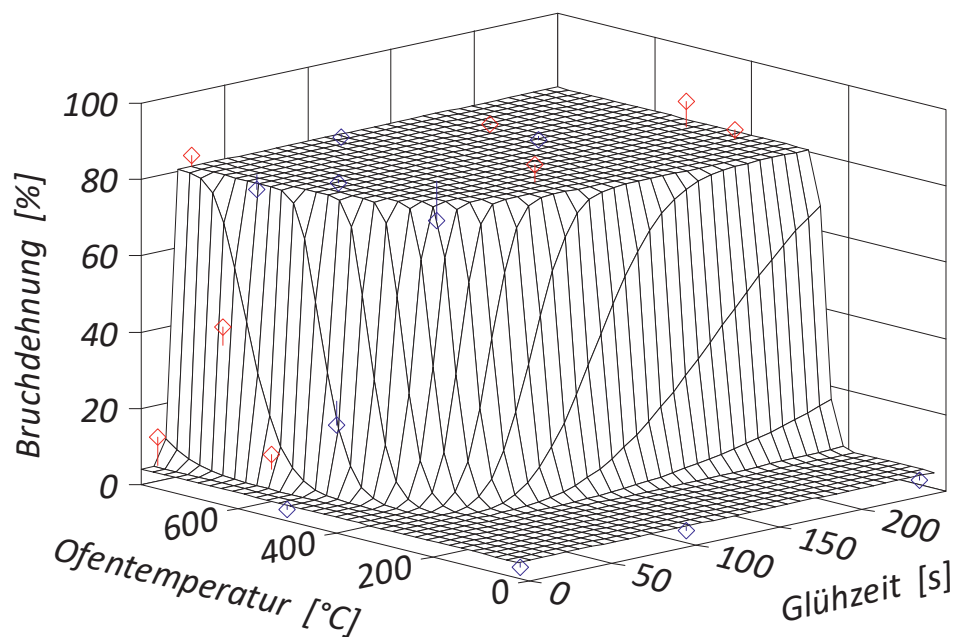


Bild 5.3: Zur Entfestigungskinetik der Bruchdehnung

Die Bilder zeigen anschaulich, wie sich die ausgewählten Festigkeits- und Dehnungsgrößen in Abhängigkeit der Ofentemperatur (einschließlich Aufheizphase) bis zum Zeitpunkt, an dem das Glühen beendet wird und die Proben rasch abgekühlt sind, herausgebildet haben. Mit den Gleichungen (2.4-1.1), (2.4-2) bzw. (2.4-3) sowie den numerisch vorliegenden Parametern besitzt man reaktionskinetische Modellansätze, mit denen sich für anisotherme Bedingungen präzise Voraussagen über das thermisch aktivierte Entfestigungsverhalten treffen lassen. Damit erhält man u.a. eine physikalisch und numerisch gesicherte Basis als Voraussetzung zur Bearbeitung und Lösung von Wärmebehandlungsproblemen, bei denen die Festkörperdiffusion den dominanten Prozess darstellt.

Weiter zu diesem Problemkreis werde - ohne Einzelheiten - das Ergebnis zur Kinetik des statisch entfestigten Anteils eines durch elektrolytische Raffination hergestellten, sauerstoffhaltigen Kupfers nach Umformung und Ofenerwärmung angeführt. Auch hier sind in die Berechnung die konkreten

Erwärmungskurven anisotherm eingeflossen, auch wenn aus Darstellungsgründen die Entfestigung ebenfalls nur über Zeit und Ofentemperatur erfolgen konnte. Sehr schön sind die Bereiche zu erkennen, in denen Erholung, Rekristallisation und beginnendes Kornwachstum erfolgen.

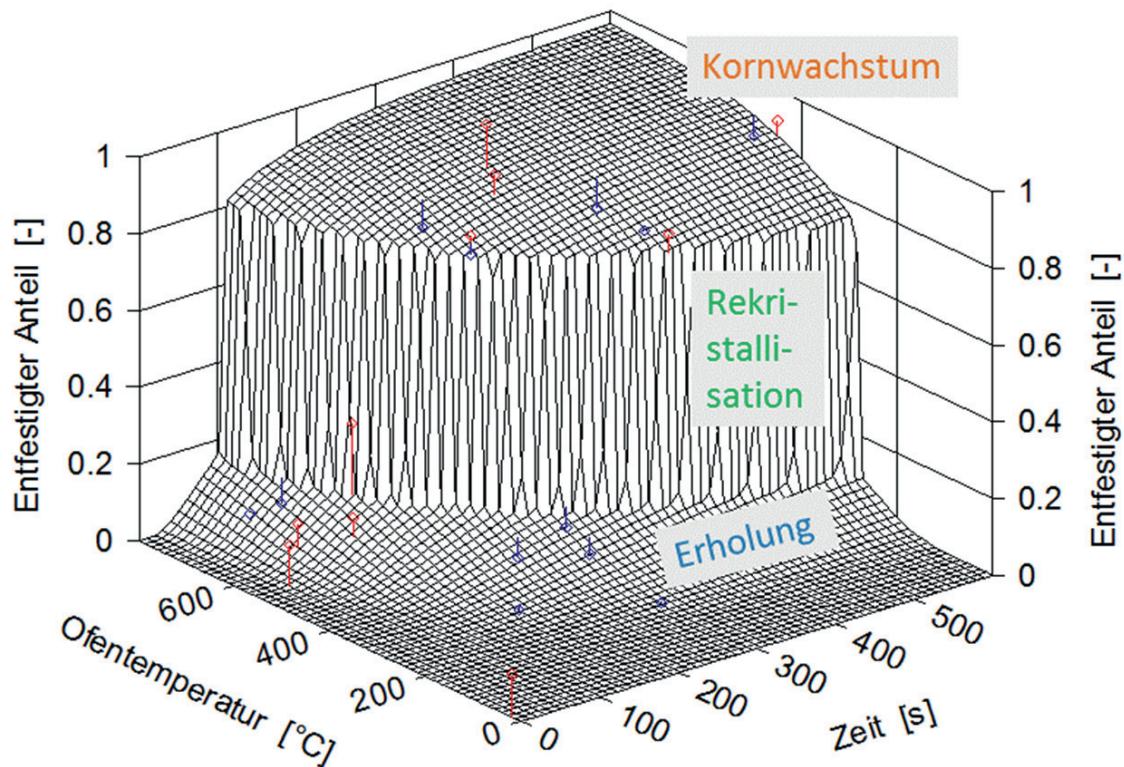


Bild 5.4: Modelldarstellung der Entfestigungskinetik bei Ofenerwärmung

Um diesen aus drei Teilen (Erholung, Rekristallisation, Kornwachstum) bestehenden Entfestigungsprozess angemessen modellieren zu können, war eine Superposition dieser reaktionskinetischen Teilprozesse vorgenommen worden, wie in Kapitel 2.4 angegeben ist bzw. wie es bereits in [MÜL 98, Kap. 3.3.1.3 und 3.3.2.2] ausführlicher dargestellt wurde.

Wie sich im folgenden Beispiel (ohne die Einzelheiten darzulegen) zeigt, lassen sich – ebenfalls durch geeignete Superposition mehrerer Mechanismen – auch thermisch aktivierte Entfestigungsvorgänge modellieren, die sich – hier bei einem FeSi-Elektrostahl – unmittelbar an eine Warmumformung anschließen und bei denen neben entfestigenden temporär z.B. auch festigkeitssteigernde Reaktionen ablaufen (Bild 5.5). Diese können bedingt sein z.B. in Umwandlungs- oder Aushärtungsprozessen, die den



dominanten Entfestigungsmechanismus zeitweise zu verzögern oder sogar partiell aufzuheben vermögen – siehe auch [MÜL 98, Kap. 3.3.3].

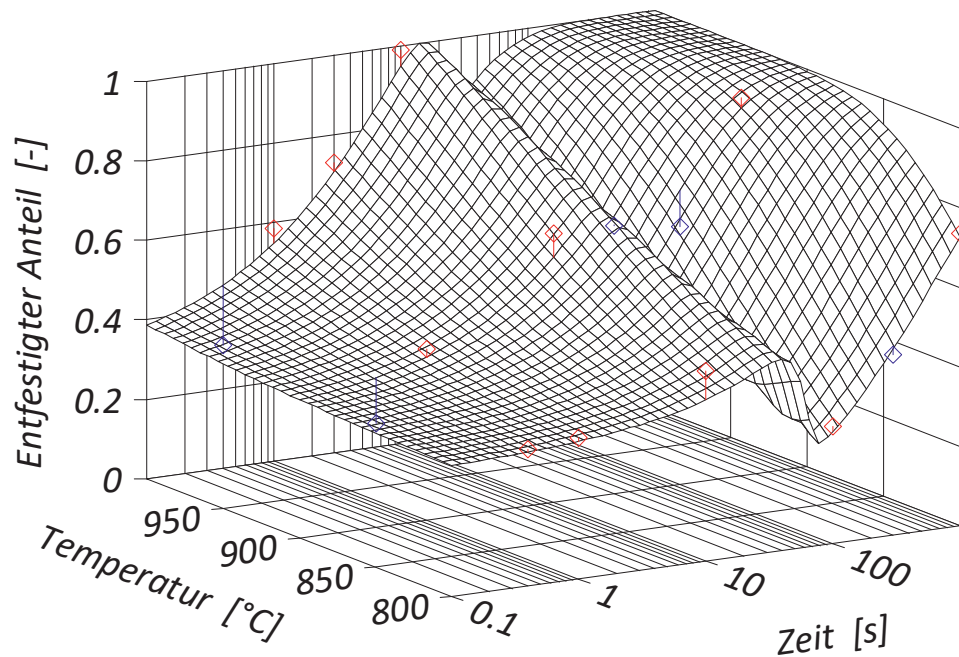


Bild 5.5: Modelldarstellung der Entfestigungskinetik bei temporärer Aushärtung nach Ofenerwärmung

Wie unter Verwendung der gezeigten teilphysikalischen Modelle deutlich wird, lässt sich auf einer reaktionskinetisch modifizierten Basis ein weitreichendes Potenzial zur Modellierung der Werkstoffeigenschaften durch Wärmebehandlung nach Kalt- oder Halbwarmumformung erschließen. Dabei können sowohl anisotherme Verhältnisse als auch mehrere, ggf. konkurrierende Diffusions- und Reaktionsmechanismen berücksichtigt werden.

Solche reaktionskinetischen Modellierungen auf der Grundlage experimenteller Ergebnisse mit nachfolgender Identifikation der Modellparameter haben sich bei vielen Fragestellungen in Forschung und Industrie als zweckdienliches Instrument zur gezielten Werkstoffbeeinflussung bewährt. Dazu finden sich weitere Beispiele in Forschungsberichten und Dissertationen, so z.B. in [HEY 12] und [YAN 13] – vgl. Kapitel 8 und 12. In der Arbeit [ZIL 13] werden entsprechende Modelle betrachtet, die zur Gefüge- und Eigenschaftsoptimierung von niedriglegierten Kupferbasislegierungen, insbesondere zwischen Festigkeit und elektrischer Leitfähigkeit beitragen; vgl. Kapitel 14.

6 Beispiel zur Erwärmung in einem Luftumwälzofen unter Berücksichtigung von Konvektion und Wärmestrahlung

Im folgenden Beispiel soll gezeigt werden, welchen Einfluss Konvektion und Strahlung auf das Erwärmungsverhalten ausüben. Hierfür werde angenommen, dass ein Draht bzw. Stab aus Kupfer mit einem Durchmesser von 6 mm in einem bereits im Beharrungszustand befindlichen Luftumwälzofen erwärmt wird. Das *BIOT*-Kriterium ergibt einen Wert kleiner 0,001 ($\ll 0,1$), so dass die Berechnung als wärmetechnisch dünnwandig erfolgen kann. Hierfür bietet sich die Gleichung (1.4-7.5) an, die jene verstrichene Zeit explizit angibt, die verstreicht, um eine bestimmte Temperatur zu erreichen. Aber auch die numerische Integration von Gleichung (1.4-6) oder (1.3-1) ist – in der Spezifikation für Runddraht – möglich.

Für die Berechnungen wurden folgende physikalische Eigenschaften verwendet:

Dichte:	$\rho = 8964 \text{ kg/m}^3$
Spezif. Wärmekapazität:	$c = 380 \text{ J/(kg}\cdot\text{K)}$
Wärmeübergangskoeffizient:	$\alpha = 0/100 \text{ W/(m}^2\cdot\text{K)}$
Emissionsgrad:	$\varepsilon = 0/0,75/0,90$
Strahlungsaustauschkoeffizient:	$C \approx \sigma \cdot \varepsilon$
<i>STEFAN-BOLTZMANN</i> -Konstante:	$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/(m}^2\text{K}^4)$

Der mit $\varepsilon = 0,75$ für Kupferoberflächen recht hoch angenommene Emissionsgrad resultiert daraus, dass der Draht bereits mit einer Zunderhaut in den Ofen eingesetzt wird, d.h. als voroxidiert (entspiegelt) angenommen wird. Der konvektive Wärmeübergang ergibt sich aus einer Abschätzung für Wärmegut an bewegter Luft, wie sie in einem Luftumwälzofen zum besseren Temperatenausgleich und zur Beschleunigung des Aufwärmens erzeugt wird.

Für die Modellrechnungen wurden als Umgebungstemperaturen drei Ofenwand- und Lufttemperaturen ausgewählt zu $\mathcal{G}_U = 600/800/1000^\circ\text{C}$. Wärmequellen im Drahtinneren sind hier naturgemäß nicht vorhanden, d.h., $q_V = 0 \text{ W/m}^3$. Die drei nachfolgenden Bilder zeigen das Ergebnis der Berechnungen sowohl bei gleichzeitiger Berücksichtigung von Konvektion und Strahlung als auch im Vergleich der einzelnen Anteile.

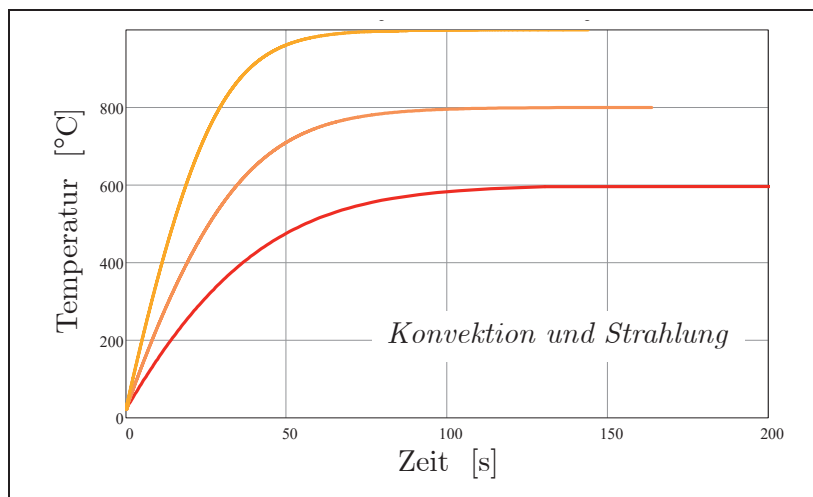


Bild 6.1a: Drahterwärmung infolge Konvektion und Strahlung
($\varepsilon = 0,75$)

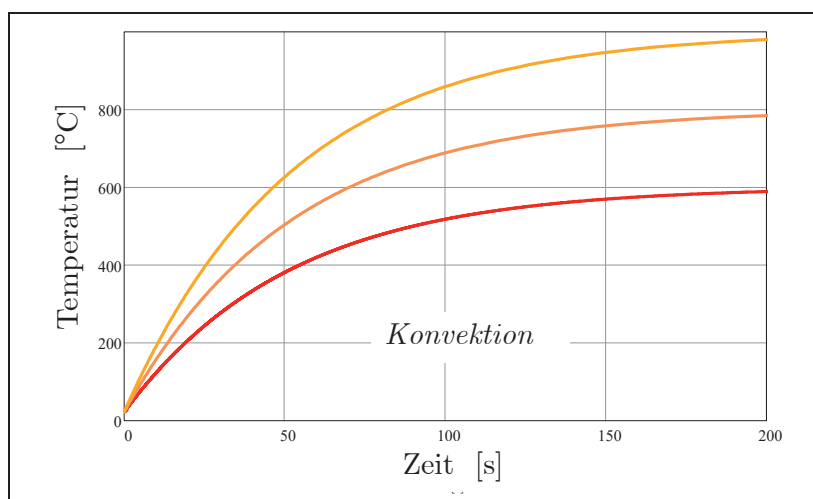


Bild 6.2a: Drahterwärmung infolge Konvektion ($\varepsilon = 0$);
(das gleiche Resultat wie mit (1.4-3.9) für $T=51,3s$)

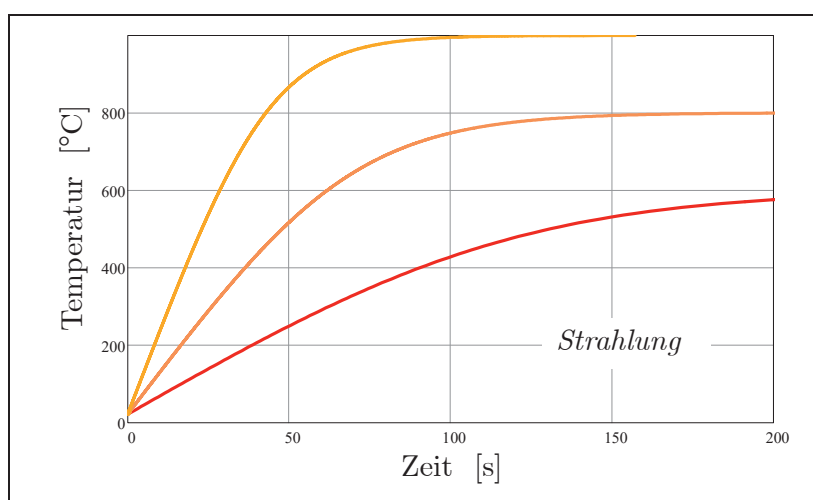


Bild 6.3a: Drahterwärmung infolge Strahlung ($\varepsilon = 0,75$)

Wird lediglich der Emissionsgrad von 0,75 auf 0,90 angehoben, so erfolgt die Erwärmung erwartungsgemäß entsprechend schneller, wie der Vergleich der Bilder 6.1a und 6.1b sowie 6.3a und 6.3b ergibt:

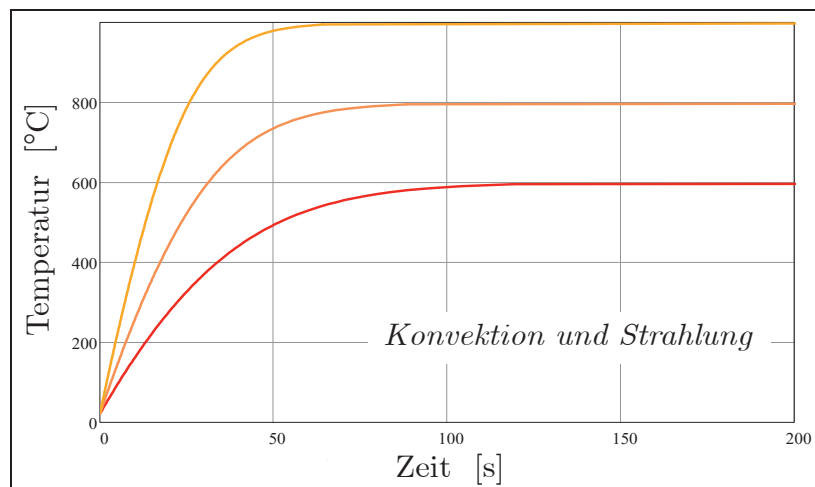


Bild 6.1b: Drahterwärmung infolge Konvektion und Strahlung ($\varepsilon = 0,9$)

Bild 6.2b: wie Bild 6.2a, da der Konvektionsanteil davon natürlich unberührt bleibt.

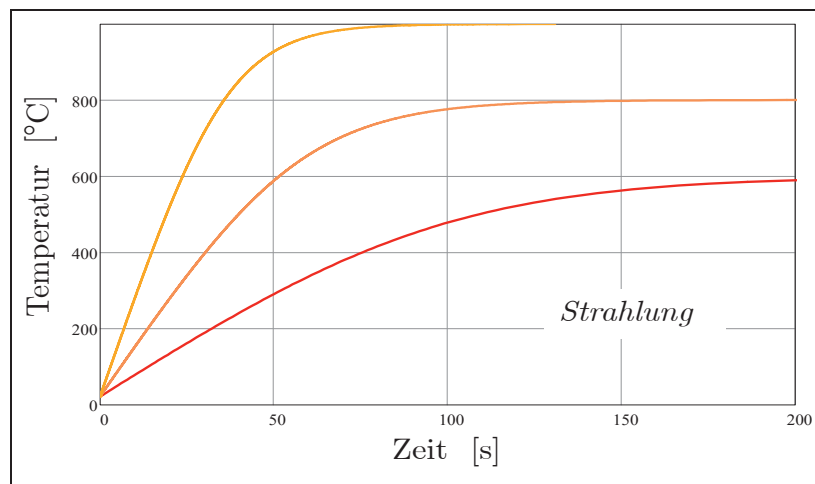


Bild 6.3b: Drahterwärmung infolge Strahlung ($\varepsilon = 0,9$)

Selbstverständlich erfolgt die Erwärmung am raschesten, wenn die beiden Wirkmechanismen Konvektion und Strahlung zugleich in Rechnung gestellt werden. Beim Vergleich von Konvektion und Strahlung bestätigt sich die bekannte Tatsache, dass der Strahlungseinfluss bei niedrigen Umgebungstemperaturen ($\vartheta_U = 600^\circ\text{C}$) hinter dem durch Konvektion zurückbleibt, ein Trend, der sich mit höheren Temperaturen umkehrt. Das erklärt sich aus



dem Umstand, dass mit steigender Temperatur der Strahlungseinfluss mit der vierten Potenz wächst, während die Konvektionsrandbedingung nach *NEWTON* nur lineares Verhalten mit ansteigender Temperatur zulässt – vgl. z.B. Gleichung (1.3-1) und [MÜL 98, *Anhang B: Zu Kap. A2.3.3.2.2*].

Während im Beispiel vereinfachend mit zeit- und temperaturunabhängigen Wärmeübergangskoeffizienten und Emissionsgraden gerechnet wurde, finden beim Erwärmen reaktionskinetisch bedingt stets mehr oder weniger große Änderungen dieser Parameter statt. Wird z.B. ein zunächst blanker Kupferdraht in den Ofen eingesetzt, so wird im Verlauf der Erwärmung die Oberfläche des Wärmgutes durch den Luftsauerstoff oxidieren, eine Zunderschicht wird entstehen und wachsen – vgl. Kapitel 4, so dass sich Absorptions- und Emissionsvermögen und damit der Emissionsgrad mit dem Erwärmungsfortschritt entsprechend erhöhen. Um diesen Effekten Rechnung zu tragen, sind genaugenommen Strahlungsaustausch- und ggf. auch Wärmeübergangskoeffizienten reaktionskinetisch und damit zeit- und temperaturabhängig zu formulieren, also z.B. $C(t) \rightarrow C(t, \Theta) \sim \varepsilon(t, \Theta(t))$. Die Näherungsgleichung (1.3-1) ist zu modifizieren in

$$\boxed{\bar{\Theta}' + \frac{C(t, \bar{\Theta})}{\varpi} \cdot \bar{\Theta}^4 + \frac{\alpha(t, \bar{\Theta})}{\varpi} \cdot \bar{\Theta} = f(t, \bar{\Theta})}. \quad (6-1a)$$

mit $f(t, \bar{\Theta}) = \frac{1}{\varpi} (\alpha(t) \cdot \Theta_U + C(t, \bar{\Theta}) \cdot \Theta_U^4)$ gemäß (1.3-3.2).

Eine Lösung dieser nichtlinearen Dgl. kann z.B. auf das Lösen der äquivalenten Integralgleichung

$$\bar{\Theta}(t) = \bar{\Theta}_A + \int_0^t \left[f(\tau, \bar{\Theta}(\tau)) - \frac{\alpha(\tau, \bar{\Theta}(\tau))}{\varpi} \cdot \bar{\Theta}(\tau) - \frac{C(\tau, \bar{\Theta}(\tau))}{\varpi} \cdot \bar{\Theta}(\tau)^4 \right] \cdot d\tau$$

mit $\bar{\Theta}(0) = \bar{\Theta}_A$ (6-1b)

hinauslaufen, was auf iterativem Wege möglich sein sollte. Allerdings wird hier die numerische Integration von (6-1a) bevorzugt.

Wie ein mit dem Wachstum einer Zunderschicht sich ändernder Emissionsgrad berücksichtigt werden kann, zeigt das folgende Beispiel. Das Zunderwachstum werde entsprechend Kapitel 4 gemäß einer reaktionskinetischen Beziehung (4-1) beschrieben. Der Emissionsgrad (bzw. Strahlungsaustauschkoeffizient) ist naturgemäß eng an Bildung und Wachstum der Zunderschicht gebunden. Phänomenologisch eignet sich hierfür ein sigmo-

idaler Ansatz, z.B. in der Form $\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 \cdot \tanh(\varepsilon_2 \cdot (s(t) - s_V))$, so dass hier für den Strahlungsaustauschkoeffizienten

$$C(t, \Theta) \approx \sigma \cdot \varepsilon = \sigma \cdot \left[\varepsilon_0 + \varepsilon_1 \cdot \tanh(\varepsilon_2 \cdot (s(t, \Theta(t)) - s_V)) \right], \quad (6-2)$$

der die gesuchte Temperatur mit der Schichtdicke s entsprechend (4-1) mit (4-2) implizit enthält, gelten soll. Der Wärmeübergangskoeffizient sei wieder mit $\alpha = 100 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{K})$ gegeben. Die vier Parameter, die den Zusammenhang des Emissionsgrades zur Oxidschicht quantitativ herstellen, müssen, wenn sie noch nicht bekannt sind, vorab unter Einbeziehung experimenteller Daten bestimmt werden. Bild 6.4 zeigt exemplarisch den Zusammenhang zwischen Drahterwärmung, Zunderwachstum und Emissionsgrad für die Umgebungs- bzw. Beharrungstemperatur von 800°C unter den sonstigen Bedingungen von Bild 6.1a.

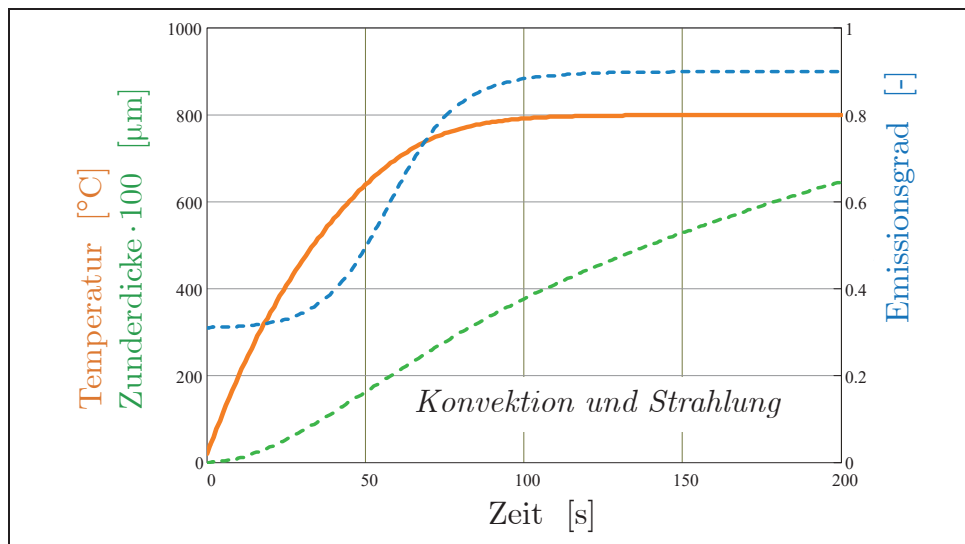


Bild 6.4: Drahterwärmung infolge Konvektion und Strahlung bei an das Zunderwachstum gekoppeltem Emissionsgrad

Es ist zu erkennen, dass sich mit fortschreitender Erwärmung der Oxidationszustand und damit auch der von der Zunderschicht abhängende Emissionskoeffizient ändert. Er steigt hier im Beispiel von ca. 0,3 bis auf 0,9 und bewirkt damit gegenüber einem konstanten Emissionsgrad von 0,75, wie er u.a. für Bild 6.1a angenommen worden war, dass die Erwärmung erwartungsgemäß etwas langsamer erfolgt – vgl. Temperaturen bei der Zeit von 50s.

Die mit der Dgl. (6-1a) angestellten Berechnungen erforderten deren numerisches Lösen, wofür, wie für die übrigen Berechnungen gleichfalls, die Software „MathCad“ verwendet wurde.

7 Physikalische Stoffwerte abhängig von der Umwandlungskinetik

In den letzten Jahren haben sich die Möglichkeiten zur adäquaten Beschreibung technischer Prozessabläufe stetig erweitert. Allerdings stoßen die Bestrebungen nach einer zunehmend realitätstreueren Abbildung technisch anspruchsvoller Prozesse durch entsprechende Modelle stets dort an Grenzen, wo die Ausbildung der Werkstoffstruktur in direkter Verbindung zum Fertigungsprozess steht und in ihrer Temperatur-Zeitabhängigkeit zu berücksichtigen ist. Insbesondere fällt auf, dass bereits die exakte Berücksichtigung scheinbar elementarer physikalischer Stoffgrößen, wie z.B. die Wärme- und Temperaturleitfähigkeit oder die spezifische Wärmekapazität bzw. Enthalpie, unter bestimmten Fertigungs- bzw. Verarbeitungsbedingungen nicht hinreichend genau für entsprechende Modelle und Simulationen vorliegen. Denn immer dann, wenn während thermischer Prozesse Entfestigungs-, Umwandlungs- und Ausscheidungsvorgänge im Werkstoff ablaufen, verändert sich deren Gefügestruktur, wovon wiederum die Stoffeigenschaften und Stoffgrößen selbst unmittelbar berührt werden. In all diesen Fällen ist es strenggenommen nicht ausreichend, mit allein temperaturabhängigen Stoffgrößen zu rechnen.

Die beim Aufwärmen oder Abkühlen auftretenden Phasenumwandlungen lassen sich anschaulich z.B. mit **Zeit-Temperatur-Austenitisierungs-Schaubildern** (ZTA beim Aufwärmen) oder **Zeit-Temperatur-Umwandlungs-Diagrammen** (ZTU beim Abkühlen) darstellen. Das Beispiel in Bild 7.1 für einen Stahl mit einem Kohlenstoffgehalt von 0,45% zeigt dessen ZTU-Diagramm (linke Seite) die verschiedenen Umwandlungen des Austenits (A) in Ferrit (F), Perlit (P), Bainit (B) und schließlich in Martensit in Abhängigkeit von Temperatur und Zeit. Es sind stellvertretend drei Abkühlkurven (gelb-rot) mit einer erkennbaren Wärmetönung infolge Freisetzung der Umwandlungswärme eingezeichnet. Sie durchziehen die Umwandlungsbereiche der betreffenden Gefüge unterschiedlich rasch und bestimmen damit die betreffenden Mengenverhältnisse der umgewandelten Gefügearten nach dem Abkühlen, die für die Eigenschaften der Stähle nach dem Abkühlen unmittelbar verantwortlich sind. Der Grenzfall der Umwandlungskinetik wird bei extrem langsamer Abkühlung erreicht und ist als Zustands- bzw. Gleichgewichtsschaubild ebenfalls anschaulich in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehalts festgehalten (rechte Seite Bild 7.1).

Die verschiedenen Umwandlungs- und Gefügebereiche sind hier beispielsweise durch eine blaue, braune, grüne und schwarze Linie voneinander getrennt. Wie bereits erwähnt, zeigen die Abkühlkurven, wie sich teilweise im Abkühlverlauf eine geringe Verzögerung bemerkbar macht, hervorgerufen durch freigesetzte Wärme (Rekaleszenz) während der Umwandlung. Der mittleren Abkühlkurve folgend erkennt man, wie sich das Gefüge von Austenit über Ferrit, Perlit und Bainit schließlich zu hartem Martensit umwandelt und ggf. welche Mengenanteile dabei jeweils entstehen.

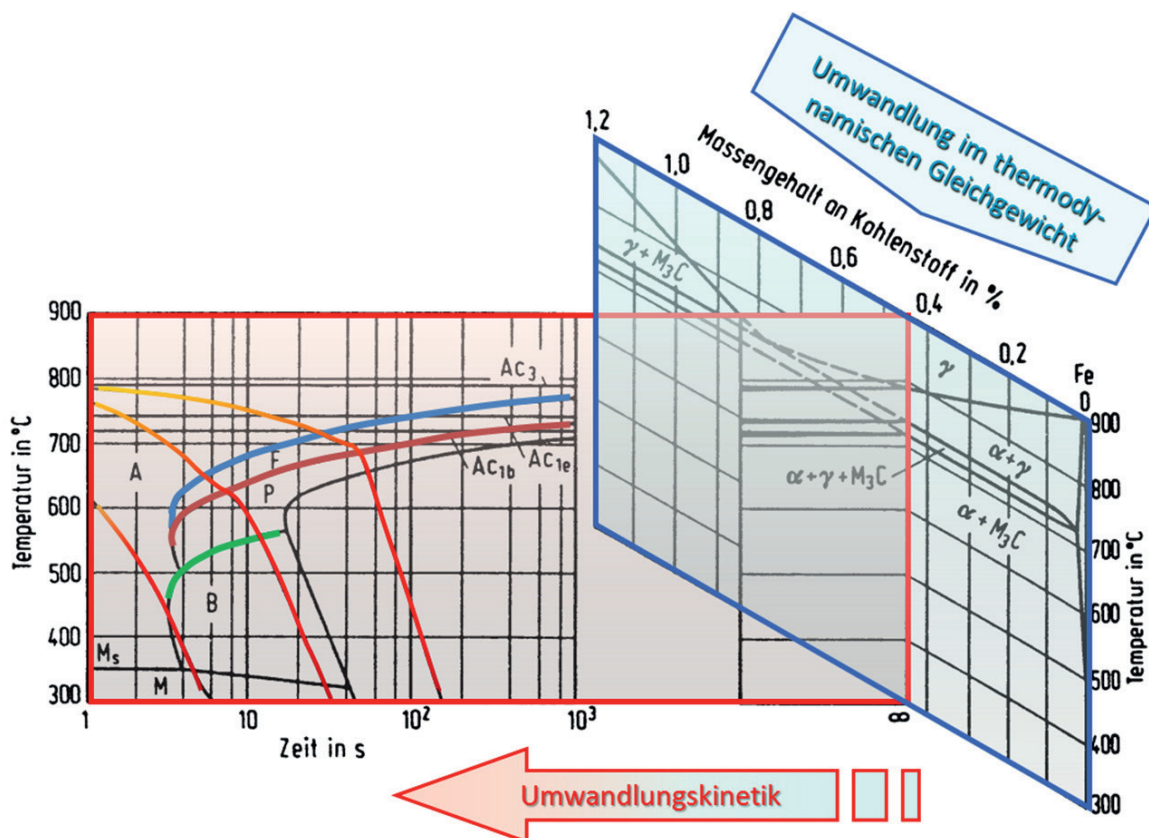


Bild 7.1: ZTU- und Gleichgewichtsdiagramm nach [HOU 90]

Die verschiedenen Gefügearten haben i. allg. unterschiedliche Gitterkonstanten und Diffusionsgeschwindigkeiten zur Folge, was sich unmittelbar auf die Werkstoffeigenschaften – mechanische, thermische und elektrische – und deren reaktionskinetisches Verhalten während der Umwandlung ganz direkt auswirkt.

Das legt nahe, dass bei allen thermisch aktivierten Werkstoffuntersuchungen, die in situ erfolgen, die kinetischen Abhängigkeiten zu berücksichtigen sind. Denn sofern Umwandlungsvorgänge im Werkstoff durch eine entsprechende temperatur-zeitabhängige Beeinflussung bzw. Aktivierung



ausgelöst werden, sind diese überwiegend diffusionsgesteuerten Vorgänge der Phänomenologie der Reaktionskinetik unterworfen.

Davon sind thermophysikalische Stoffgrößen, die mit thermischen Analysemethoden untersucht werden, wie z.B. Wärme- und Temperaturleitfähigkeit, betroffen. Das heißt, in der Art, in der Werkstoffgefüge und mechanische Eigenschaften an die Kinetik von Umwandlung und Ausscheidung gebunden sind, sind es grundsätzlich auch die thermophysikalischen Stoffeigenschaften. Während jedoch der Einfluss von Entfestigungs- und Umwandlungskinetik auf Gefüge und mechanische Eigenschaften heute bereits ausführlich untersucht und durch entsprechende Modellierung berücksichtigt wird, findet dieser Aspekt hinsichtlich der thermophysikalischen Stoffwerte möglicherweise noch nicht unbedingt die nötige Aufmerksamkeit. Hierfür ist vermutlich verantwortlich, dass es einerseits nicht immer einfach ist, Fehler und Ungenauigkeiten, die durch Vernachlässigung einer thermophysikalischen Stoffgrößen-Kinetik auftreten, von anderen Effekten sauber genug abzutrennen und auf genau diese Ursache zurückzuführen, und dass es aus diesem Grunde hinreichend flexibler Anlagen und thermophysikalischer Messmethoden bedarf, um entsprechend aufwendige thermokinetische Untersuchungen unter diesem Aspekt überhaupt durchführen, detektieren und geeignet auswerten zu können.

Ein weiterführender Weg kann deshalb darin bestehen, Experimente und Modelle zur kinetischen Eigenschaftsbeschreibung, wie sie hinsichtlich Gefüge und mechanischer Eigenschaften bereits existieren, auf entsprechende thermophysikalische Stoffgrößen, wie z.B. Wärme-, Temperaturleitfähigkeit und spezifische Wärmekapazität, auszuweiten.

Auf diesen Umstand konnte und sollte hier nur aufmerksam gemacht werden. Zur Berücksichtigung thermophysikalischer Aspekte der beschriebenen Art dürften sich prinzipiell die zugrunde liegenden Temperatur- und Diffusionsverhältnisse vorteilhaft mit den im Teil A hergeleiteten Ergebnissen beschreiben und approximieren lassen.

8 Sinterkinetik

Ein Beispiel zum Sinterverhalten und seiner Modellierung soll als wesentlich diffusionsbedingter Vorgang, wie in Kapitel 2.4 allgemein angegeben, mit entsprechenden reaktionskinetischen Berechnungsgleichungen angeführt werden. Vereinfachend werde hier angenommen, dass die Aufheiz- und Abkühlvorgänge im Vergleich zum isothermen Halten zu kurz sind, um einen nennenswerten Einfluss auf das Sintergeschehen auszuüben. Experimentell erfasst und als Modell beschrieben wurde der Zusammenhang zwischen der (relativen) Dichte des Sintergutes nach erfolgtem Sintern und der Ofentemperatur sowie der Sinterdauer. Untersucht wurden pulvermetallurgisch hergestellte Metallmatrix-Keramik-Verbunde (MMC). Das Pulver bestand aus einer Kombination von austenitischem rostfreiem Stahl (Stahlschlüssel 1.4301) und verschiedenen Dotierungen mit ZrO_2 -Keramikpulver. Dieser als Matrixwerkstoff vorgesehene metastabile Stahl hat die für zahlreiche Anwendungen positive Eigenschaft, dass er sich unter dem Einfluss einer mechanischen Formgebung in eingeschränkten Temperaturbereichen nur teilweise martensitisch umwandelt, was trotz eines Festigkeitszuwachses mit einer zugleich steigenden Plastizität einhergeht. Diese prinzipiell bekannten Effekte der spannungs- und verformungsinduzierten Martensitbildung, wie sie in der Fachliteratur als TRIP, TWIP oder SBIP-Effekte analysiert wurden, sind in der Arbeit [YAN 13] für diese MMC's konkret charakterisiert worden. Hier sollen deshalb lediglich einige Resultate knapp wiederholt werden.

Als Modellgleichung für die reaktionskinetisch beeinflusste Dichte wurde ein Ansatz der Form (2.4-3) gewählt, wobei die Berücksichtigung nur eines Reaktionsmechanismus ausreichte, um den Sinterprozess angemessen zu beschreiben. Da bezüglich der ZrO_2 -Abhängigkeit keine physikalisch begründete Charakteristik bekannt war, wurde diese heuristisch als quadratischer Ansatz multiplikativ eingeführt mit der Variable Z und den zusätzlichen Parametern z_1 und z_2 in der Gestalt

$$\rho(t, \vartheta, Z) = \left(1 + z_1 \cdot Z + z_2 \cdot Z^2\right) \cdot \left(\rho_{MIN} + (\rho_{MAX} - \rho_{MIN}) \cdot \left(1 - e^{-\left(\mathbf{I}(t, \vartheta)/q\right)^q}\right)\right) \quad (8-1)$$

Mit Bild 8.1 wird die Sinterkinetik zunächst für den undotierten Stahl gezeigt.

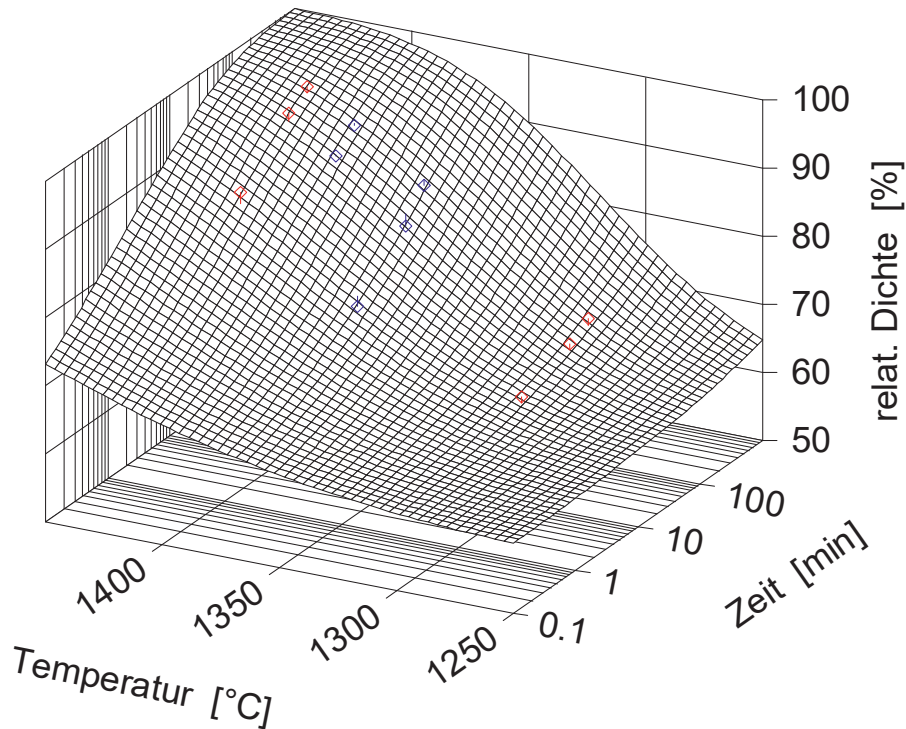


Bild 8.1: Relative Dichte (extrapoliert) von Stahl in Abhängigkeit von Sintertemperatur und -zeit (0% ZrO_2)

Die von den Messwerten in Verbindung mit dem reaktionskinetischen Ansatz (8.1) nach Parameterbestimmung aufgespannte doppelt sigmoidale Modellfläche wurde hier über den experimentellen Bereich hinaus extrapoliert und dargestellt. Sie spiegelt den grundsätzlichen qualitativen und quantitativen Zusammenhang zwischen relativer Dichte des Werkstoffes, der Sinterdauer und der Temperatur anschaulich wider.

Die entsprechenden Modellergebnisse für einen mit 10% ZrO_2 dotierten MMC10 zeigen im untersuchten Bereich eine insgesamt höhere Dichte im Vergleich zu reinem Stahl (Bild 8.2).

Sowohl bei niedrigeren Temperaturen von z.B. 1250°C und längeren Zeiten als auch bei noch höheren Temperaturen von mehr als 1400°C und verkürzter Sinterdauer liegt die Dichte um ca. 10% bzw. 20% höher als bei undotiertem Stahl.

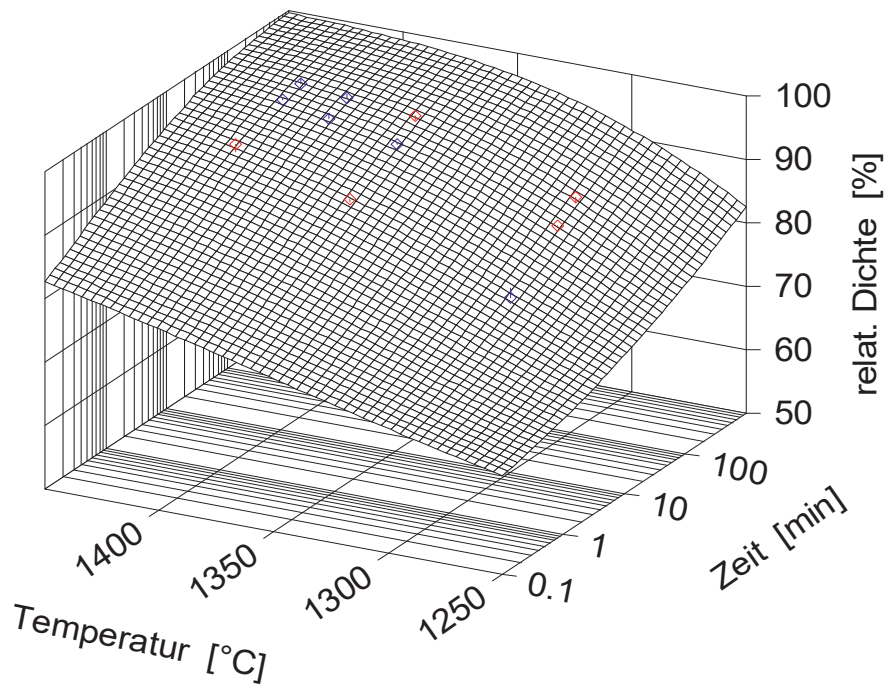


Bild 8.2: Relative Dichte von MMC10 in Abhängigkeit von Sinter Temperatur und -zeit (10% ZrO_2)

Bild 8.3 stellt die Modellfläche für einen MMC30 dar. Gegenüber undotiertem Stahl und einem MMC10 liegt die relative Dichte von MMC30 im untersuchten Temperaturbereich um bis zu 15% niedriger.

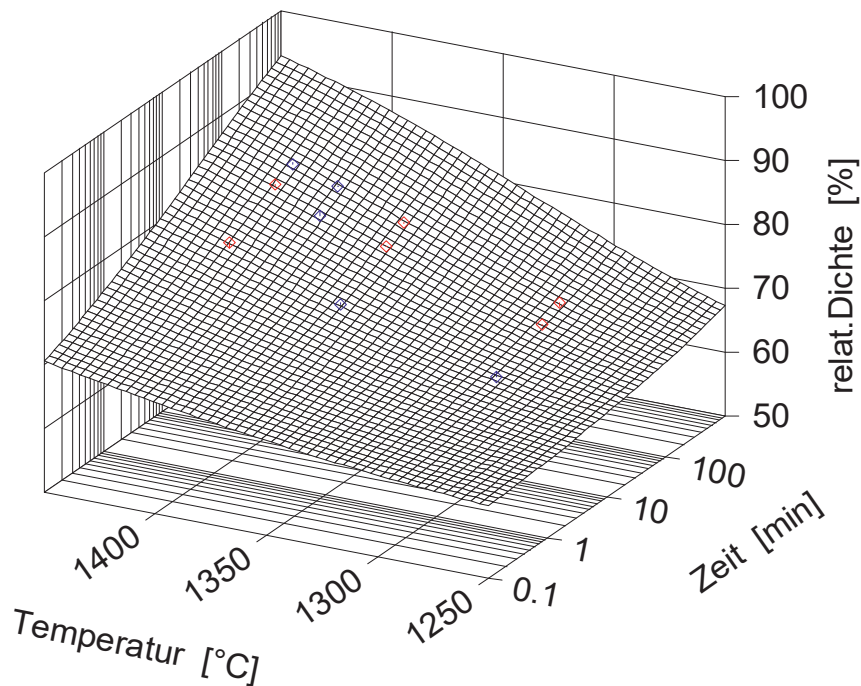


Bild 8.3: Relative Dichte von MMC30 in Abhängigkeit von Sinter Temperatur und -zeit (30% ZrO_2)



Mit einem solchen Modell lässt sich z.B. explizit auch der Zusammenhang von Sinterdichte zu Sinterzeit und ZrO_2 -Gehalt veranschaulichen, Bilder 8.4 – 8.6, dargestellt für ausgewählte Sintertemperaturen.

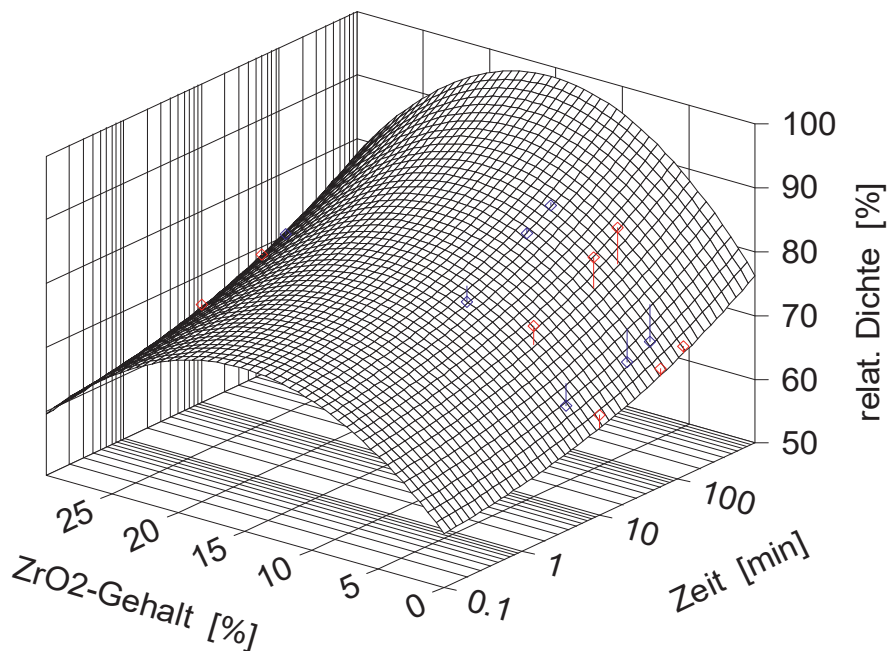


Bild 8.4: Relative Dichte in Abhängigkeit von Sinterzeit und ZrO_2 -Gehalt (Sintertemperatur 1300°C)

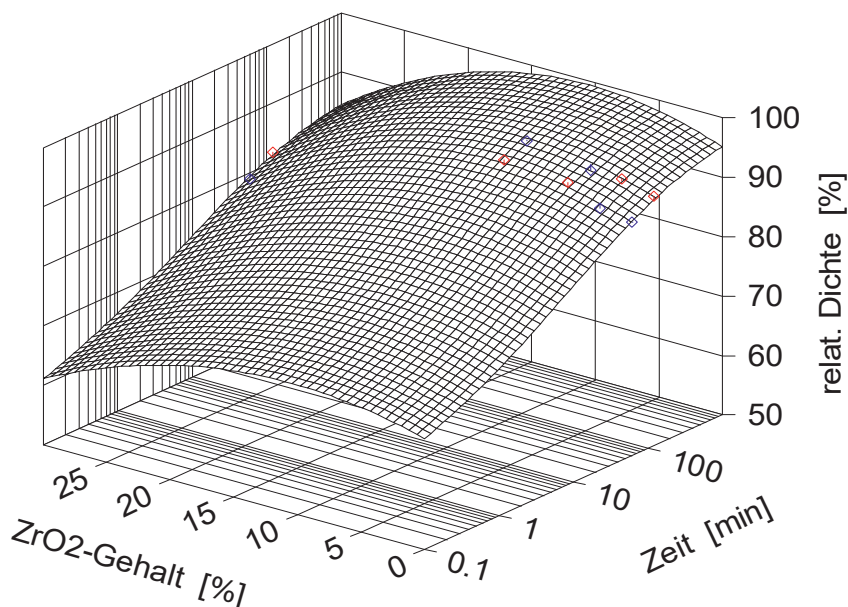


Bild 8.5: Relative Dichte in Abhängigkeit von Sinterzeit und ZrO_2 -Gehalt (Sintertemperatur 1400°C)

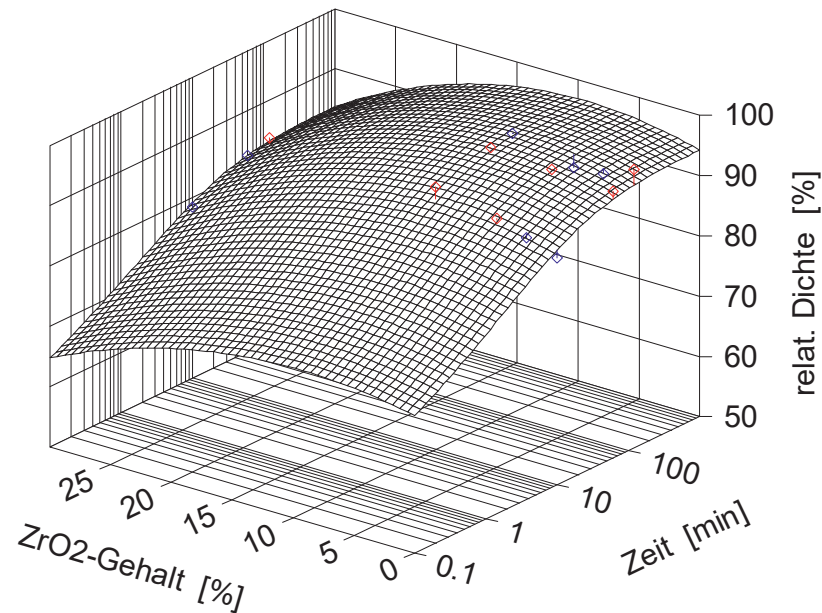


Bild 8.6: Relative Dichte in Abhängigkeit von Sinterzeit und ZrO_2 -Gehalt (Sintertemperatur 1420°C)

Die metallkundlichen Ursachen und Zusammenhänge für Verhalten und Abhängigkeiten der Sinterdichte werden in der genannten Arbeit [YAN 13] ausführlich diskutiert hinsichtlich der realisierten Sinterbedingungen wie Sintertemperatur, Sinterzeit, Sinteratmosphäre, ZrO_2 -Anteil, Phasenzusammensetzung der Stahlmatrix und der darin enthaltenen ZrO_2 -Partikel sowie deren Einflüsse auf die mechanischen Eigenschaften, wie sie sich nach dem Sintern ergeben haben.

Im vorliegenden Zusammenhang sollte exemplarisch und stark verkürzt lediglich gezeigt werden, welche Möglichkeiten eine entsprechende reaktionskinetische Modellierung auf Grundlage der Beziehungen aus Kapitel 2 auch im Zusammenhang mit pulvermetallurgischen Prozessen, wie dem Sintern, bietet.

9 Zur bedingten Austauschbarkeit von Temperatur und Zeit

Frage²⁵: Im Zusammenhang mit Rationalisierungsmaßnahmen ist in einem größeren Drahtunternehmen der NE-Metall-Branche vorgesehen, einen Teil der Drahtproduktion aus einem Zweigbetrieb zurück in den Stammbetrieb zu verlagern. Dabei ist u.a. folgende Frage vorab zu klären:

Kann die *teilrekristallisierende Glühung* einer CuZn-Legierung, wie sie im Zweigbetrieb im Durchlaufverfahren bisher durchgeführt wird, ohne Umsetzung der Ofenanlage (Platzbedarf!) auf einer der im Stammbetrieb vorhandenen, aber mit anderem Drahtmaterial nur teilbelegten Wärmebehandlungsanlage gleicher Bauart (*16-Drahtader-Rohrofen*) unter Beibehaltung der bisherigen Temperatur des Stammwerkofens allein durch Änderung der Durchlaufgeschwindigkeit mit gleichem Ergebnis, d.h., mit gleichen Festigkeitseigenschaften vorgenommen werden, wenn folgende Randbedingungen hinzunehmen bzw. einzuhalten sind:

- Durchsatzleistung \dot{m} der umzulagernden Produktion: nicht unter 10 kg/h ; Drahtdurchmesser $d = 1,2 \text{ mm}$, Dichte $\rho = 8470 \text{ kg/m}^3$, Aktivierungsenergie $Q = 40 \text{ kJ/mol}$
- Ofen Stammbetrieb: 16-Drahtader-Durchlauf-Rohrofen, davon nur elf Rohre belegt
Ofenlänge $l_S = 9,5 \text{ m}$
Ofentemperatur $\vartheta_S = 562^\circ\text{C}$ bzw. $\Theta_S = 835 \text{ K}$
- Ofen Zweigbetrieb: 12-Drahtader-Durchlauf-Rohrofen, davon nur vier Rohre belegt
Ofenlänge $l_Z = 10 \text{ m}$
Ofentemperatur $\vartheta_Z = 587^\circ\text{C}$ bzw. $\Theta_Z = 860 \text{ K}$
Durchlaufgeschwindigkeit $v_Z = 0,08 \text{ m/s}$.

Damit ist die Frage zu beantworten, welche Durchlaufgeschwindigkeit für das Material aus dem Zweigwerk zu wählen ist, damit trotz niedrigerer Ofentemperatur des Stammwerkes die gleichen Werkstoffeigenschaften erreicht werden?

²⁵ Diese Problemstellung lässt sich z.B. in einem Seminar zur Rekristallisation behandeln.

Zu welchem Ergebnis führt Ihre Recherche und welchen Vorschlag unterbreiten Sie der Produktionsleitung zur Realisierung der Rationalisierungsmaßnahme?

Antwort:

Die Beantwortung der Frage lässt sich unter Heranziehung der Regel von der bedingten Austauschbarkeit von Temperatur und Zeit gemäß der Beziehungen (2.2-6.1) - (2.2-6.3) herbeiführen. Diese Regel besagt, dass in gewissen Temperatur-Zeit-Bereichen, in denen der Werkstoff mit seinen Eigenschaften sensibel auf Änderungen der Wärmebehandlungsbedingungen reagiert, immer dann etwa gleiche Werkstoffeigenschaften erzielt werden, wenn Temperatur und Zeitdauer der Wärmebehandlung in ganz bestimmtem Verhältnis zueinander stehen. Veranschaulichen lässt sich das mit einem dreidimensionalen *AVRAMI*-Diagramm:

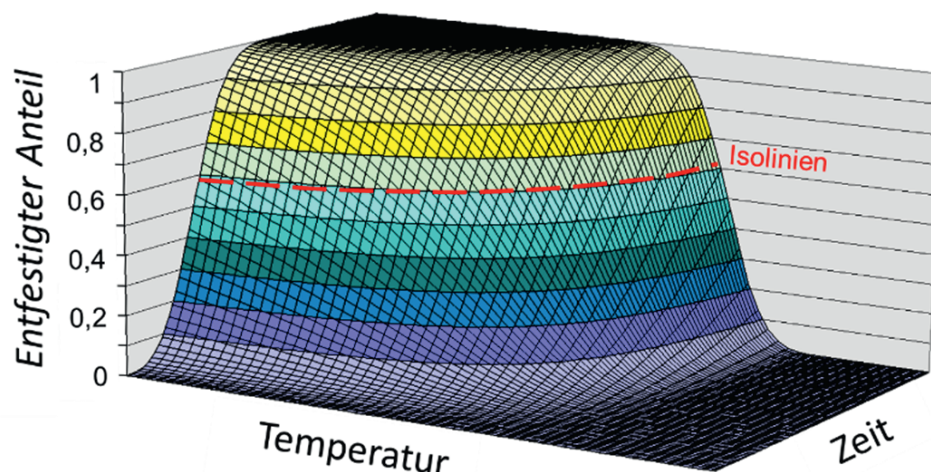


Bild 9.1: 3D-*AVRAMI*-Diagramm

Vergleichbar der Regel der Mechanik, bei der die 'Waage-Beziehung' *Last mal Lastarm ist gleich Kraft mal Kraftarm* gilt, trifft hier ähnlich zu, dass gleiche Entfestigungs- bzw. Rekristallisationsgrade stets dann erreicht werden, wenn die Temperatur-Zeit-Verhältnisse so gewählt werden, dass sie auf einer entsprechenden Isolinie liegen.

Zunächst werde der Vorgang vereinfachend als isotherm betrachtet, d.h., die stark anisothermen Bereiche der Drahterwärmung am Ofeneingang und der Drahtabkühlung am Ofenausritt werden gegenüber dem thermisch nahezu stationären Abschnitt im mittleren Bereich des Durchlaufofens als vernachlässigbar angesehen. Damit wird die Beziehung (2.2-6.3) anwendbar

und wegen $t_s = t_z \cdot e^{-\frac{Q}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{\Theta_z} - \frac{1}{\Theta_s} \right)}$ bzw. mit $t_s = \frac{l_s}{v_s}$, $t_z = \frac{l_z}{v_z}$ ergibt sich die äquivalente Durchlaufgeschwindigkeit für den Ofen des Stammwerks zu:

$$v_s = v_z \cdot \frac{l_s}{l_z} \cdot e^{-\frac{Q}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{\Theta_s} - \frac{1}{\Theta_z} \right)} = 0,0643 \text{ m/s}.$$

Damit erhält man den Durchsatz je Ader zu

$$\dot{m}_s = v_s \cdot A \cdot \rho = 6,13 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kg}}{\text{s}} = 2,21 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \quad \text{mit} \quad A = \frac{\pi}{4} \cdot d^2 = 1,131 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \quad \text{bzw.}$$

für vier Drahtadern einen stündlichen Durchsatz von $\dot{m}_{\text{Ist}} = 4 \cdot 2,21 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$

$= 8,84 \frac{\text{kg}}{\text{h}} < 10 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = \dot{m}_{\text{Soll}}$, d.h., die Sollmenge wird auf diese Weise nicht erreicht. Allerdings ist noch ein Rohr für eine weitere Drahtader frei. Damit scheint es die Möglichkeit zu geben, den Ofen des Stammwerkes entweder mit einer zusätzlichen fünften Ader zu beschicken oder aber die Ofentemperatur entsprechend anzuheben, wobei diese zweite Variante die Möglichkeit zur Erhöhung der Durchlaufgeschwindigkeit der elf ursprünglichen Adern erfordert.

Bei dieser Betrachtung waren vereinfachend isotherme Verhältnisse vorausgesetzt worden. Deshalb soll noch überprüft werden, ob diese Näherung im Nachhinein zu rechtfertigen ist. Hierfür müssen die tatsächlichen Temperatur-Zeit-Verläufe, die der Draht während seiner Reise durch den Ofen erfährt, bekannt sein. Diese können einerseits aus Temperaturmessungen stammen, wie sie z.B. mit hinreichend langen Mantelthermodrähten (sog. Schlepplementen), deren Thermofühler in engem Kontakt zum Werkstoff des wärmebehandelten Drahtes anzubringen sind, bei der gemeinsamen Ofenpassage erhalten werden. Dieses Verfahren ist nur bedingt genau und versagt naturgemäß zunehmend bei dünneren Drähten. In diesen Fällen lässt sich immerhin auf die Temperaturberechnung zurückgreifen. Dafür lassen sich die Formeln (1.4-3.9) oder auch (1.4-7.5) heranziehen, wobei auch hier die Genauigkeit begrenzt ist durch Annahmen hinsichtlich der Randbedingungen, was z.B. Wärmeübergänge und Emissionsgrade anlangt; hierfür lassen sich jedoch treffende Abschätzungen vornehmen, indem einschlägige Nachschlagewerke wie z.B. [VDI 13] herangezogen werden. Im vorliegenden Fall erhält man für Gl. (1.4-3.9) mit $q_V = 0$ bzw. für (5.1) eine Zeitkonstante $T = 30,6 \text{ s}$ (für isotherme Näherung gilt $T \rightarrow 0$).

Die mit der Beziehung (2.2-6.3) für den *isothermen* Vergleich erhaltenen Ergebnisse sind jetzt mit der *isotherm* \leftrightarrow *anisotherm*-Beziehung (2.2-6.2) auf anisotherme Verhältnisse zu übertragen. Dabei verlängern sich die für isotherme Bedingungen ermittelten Haltezeiten des Zweigbetriebes $t_{Z_{iso}} = 125,0\text{ s}$ und des Stammbetriebes $t_{S_{iso}} = 147,8\text{ s}$ auf $t_{Z_{aniso}} = 187,1\text{ s}$ und $t_{S_{aniso}} = 210,3\text{ s}$ deutlich. Die Temperatur-Zeit-Verhältnisse veranschaulicht Bild 9.2. Das bedeutet, dass etwa gleiche Werkstoffeigenschaften durch die Wärmebehandlung gegenüber der ursprünglich isothermen Näherungsbetrachtung zu erhalten sind, indem beim Realvorgang der Erwärmung die Ofenzeiten wie angegeben verlängert werden.

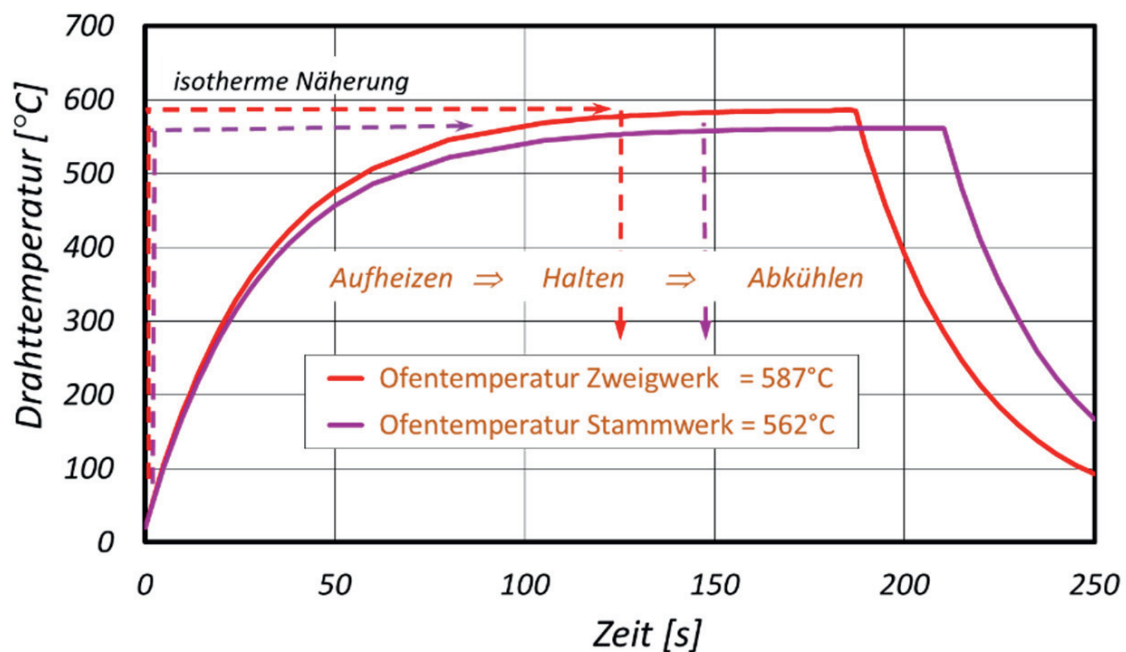


Bild 9.2: Drahterwärmung im Ofen; Abkühlbeginn aus Rechnung

Fragt man nicht, wie soeben, nach der Veränderung der Aufenthaltszeiten im Ofen bei unveränderten Ofentemperaturen, sondern danach, wie unter Beibehaltung der Zeit die Ofen- bzw. Umgebungstemperaturen anzupassen sind, so ergibt die *isotherm* \rightarrow *anisotherm*-Rechnung eine Temperaturerhöhung bei 147,8 s von 562°C auf 646°C für den Stammbetrieb und entsprechend bedeutet das für den Zweigbetrieb bei 125 s eine erhebliche Anhebung von 587°C auf 698°C, vgl. Bild 9.3.

Dieses Ergebnis macht deutlich, dass es durchaus lohnt, die unrealistische Annahme isothermer Bedingungen sowie die Vernachlässigung der Anlaufphase zu hinterfragen und dass gegenüber dem *isotherm* \leftrightarrow *isotherm*-

Vergleich mit (2.2-6.3) Zurückhaltung geboten ist – auch wenn es Bedingungen (Aktivierungsenergie) geben mag, unter denen die Unterschiede weniger krass als hier im konstruierten Beispiel ausfallen.

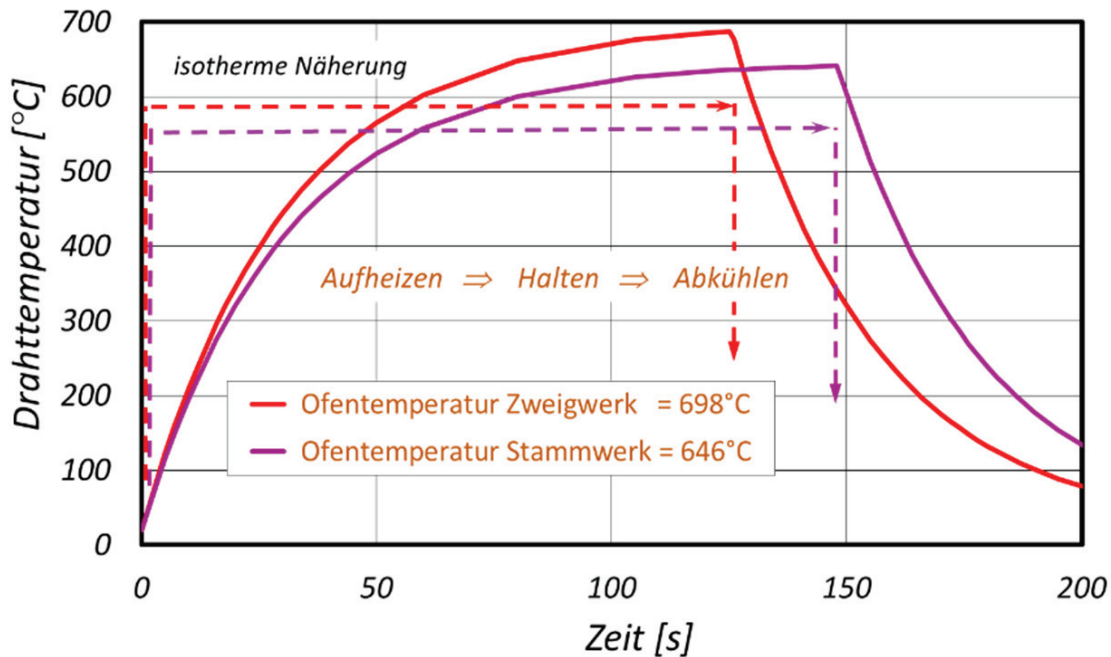


Bild 9.3: Drahterwärmung im Ofen; Ofentemperatur aus Rechnung

Das zeigt recht deutlich und direkt, dass statt der Vergleichsbeziehungen *isotherm* ↔ *isotherm* (2.2-6.3) und *isotherm* ↔ *anisotherm* (2.2-6.2) von vornherein die *anisotherm* ↔ *anisotherm*-Beziehung (2.2-6.1) herangezogen werden sollte:

$$\int_0^{t_S} e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_S(\tau)}} \cdot d\tau \stackrel{!}{=} \int_0^{t_Z} e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_Z(\tau)}} \cdot d\tau \quad (9.1a)$$

bzw. mit der modifizierten *ARRHENIUS*-Beziehung:

$$\int_0^{t_S} e^{\frac{-Q_B}{\mathcal{R} \cdot (\vartheta_S(\tau) - \vartheta_B)}} \cdot d\tau \stackrel{!}{=} \int_0^{t_Z} e^{\frac{-Q_B}{\mathcal{R} \cdot (\vartheta_Z(\tau) - \vartheta_B)}} \cdot d\tau \quad (9.1b)$$

Wenn die Drahterwärmung, wie hier im Beispiel, im Ofen gemäß (5.1) stattfindet, muss die Integration nicht numerisch erfolgen, sondern kann analog der Beziehung (5.2) geschlossen analytisch vorgenommen werden. Im vorliegenden Zusammenhang werde die Bezugs- bzw. Grenztemperatur ϑ_B wiederum als Temperatur beim absoluten Nullpunkt, d.h. mit

$\vartheta_B = -273,15 \text{ }^\circ\text{C}$ angenommen. Entsprechend (5.2) lassen sich die Integrale von (9.1a) durch

$$\int_0^t e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta(\tau)}} \cdot d\tau := T \cdot \left(\mathbf{Ei}\left(\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta(t)}\right) - e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_U}} \cdot \mathbf{Ei}\left(\frac{-Q}{\mathcal{R}} \cdot \left(\frac{1}{\Theta(t)} - \frac{1}{\Theta_U}\right)\right) \right) \quad (9.2)$$

ersetzen. Damit kann statt (9.1a) der Vergleich auch mit

$$\begin{aligned} T_S \cdot \left[\mathbf{Ei}\left(\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_S(t_S)}\right) - e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_{US}}} \cdot \mathbf{Ei}\left(\frac{-Q}{\mathcal{R}} \cdot \left(\frac{1}{\Theta_S(t_S)} - \frac{1}{\Theta_{US}}\right)\right) \right] \\ \stackrel{!}{=} T_Z \cdot \left[\mathbf{Ei}\left(\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_Z(t_Z)}\right) - e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta_{UZ}}} \cdot \mathbf{Ei}\left(\frac{-Q}{\mathcal{R}} \cdot \left(\frac{1}{\Theta_Z(t_Z)} - \frac{1}{\Theta_{UZ}}\right)\right) \right] \quad (9.3) \end{aligned}$$

geführt werden; naturgemäß stimmen bei exponentieller Aufheizcharakteristik gemäß (1.4-3.9) die Temperaturen des Beharrungszustandes $\Theta(t \rightarrow \infty)$ mit den betreffenden Umgebungs- bzw. Ofentemperaturen überein, d.h., $\Theta_S(t \rightarrow \infty) = \Theta_{US}$ und $\Theta_Z(t \rightarrow \infty) = \Theta_{UZ}$. Außerdem werde angenommen, dass sich die Zeitkonstanten der Drahterwärmung von Stammwerk T_S und Zweigwerk T_Z infolge baugleicher Öfen praktisch nicht unterscheiden und damit gleichgesetzt werden können.

Wenn man von der oben berechneten Zeit $t_{S_{aniso}} = 210,3 \text{ s}$ ausgeht, erhält man für die Durchlaufgeschwindigkeit des Stammwerkes statt $v_S = 0,064 \text{ m/s}$ nur noch $v_S = 0,045 \text{ m/s}$. Damit ergibt sich ein gegenüber der rein isothermen Betrachtung noch deutlich geringerer Durchsatz je Ader zu $\dot{m}_S = v_S \cdot A \cdot \rho = 4,31 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kg}}{\text{s}} = 1,55 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$ bzw. für vier Drahtadern ein stündlicher Durchsatz von $\dot{m}_{Ist} = 4 \cdot 1,55 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = 6,21 \frac{\text{kg}}{\text{h}} < 10 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = \dot{m}_{Soll}$, d.h., um die Sollmenge zu erreichen, ist der Ofen des Stammwerkes entweder mit zusätzlichen Drahtadern zu beschicken (sieben statt vier bzw. fünf, wie es die isotherme Schätzung noch als möglich erscheinen ließ; dafür müsste der Ofen allerdings um wenigstens zwei Rohre erweitert werden) oder aber die Ofentemperatur ist anzuheben, wobei diese zweite Variante die Möglichkeit zur Erhöhung der Durchlaufgeschwindigkeit der elf ursprünglichen Adern erfordert. Der Technologe wird darüber hinaus zu bedenken haben, dass bei einer Fahrweise des Ofens bei höherer Temperatur Anlagenverschleiß



und Energiebedarf steigen, während umgekehrt die Verlängerung der Glühzeit bei abgesenkter Temperatur mit einer Anlagenvergrößerung und damit steigendem Platzbedarf verbunden sein wird. Aber auch hierfür, nämlich die Optimierung des Wärmebehandlungsregimes unter den konkreten betrieblichen Restriktionen, können die angegebenen Beziehungen weiterführende Hilfestellung sein, indem eine ganze Palette an Temperatur-Zeit-Realisationen, die über jene der Bilder 9.2 und 9.3 weit hinausgehen, zur Verfügung stehen. Das funktioniert allerdings nur dann, wenn für den betreffenden Werkstoff die Aktivierungsenergie bereits bekannt ist, d.h., wenn für den Werkstoff und seinen konkreten Ausgangszustand (z.B. hinsichtlich Kaltumformgrad) bereits einmal Wärmebehandlungsversuche durchgeführt worden waren, auf deren Grundlage eine Identifikation der Aktivierungsenergie bereits einmal vorgenommen wurde – siehe Kapitel 5 oder [MÜL 98, *Kap. 3.3.2* und *Anhang B zu Kap. 3.3.2.1*].

Angemerkt sei abschließend hierzu, dass bei den Berechnungen der exponentielle Abkühlbereich vernachlässigt werden konnte, da er gegenüber dem beim Aufheizen von wesentlich geringerem Einfluss ist. Denn beim exponentiellen Abkühlen sinkt die Temperatur im oberen Temperaturbereich, in dem die Werkstoffreaktionen infolge thermischer Aktivierung noch besonders rasch ablaufen, deutlich schneller ab, als sie umgekehrt beim Aufheizen im oberen Temperaturbereich ansteigt – wie auch den Bildern 9.2 und 9.3 zu entnehmen ist. Ist die Abkühlung demgegenüber ggf. jedoch deutlich verzögert, so ist auch dieser Bereich bei der Berechnung mit zu berücksichtigen.

10 Diffusion zwischen zwei sich in Kontakt befindlichen Körpern

Werden zwei stofflich unterschiedliche Körper über ihre Oberflächen (bzw. Teilbereiche davon) miteinander in Kontakt gebracht, so erfolgt zwischen ihnen ein mehr oder weniger rascher Wärme- und Konzentrationsaustausch. Dieser Austausch lässt sich in der Anfangsphase, solange sich die Wirkungen gegenüber anderen vorhandenen Ober- bzw. Grenzflächen noch nicht oder nur kaum bemerkbar machen, vergleichsweise einfach mit dem Modell zweier sich berührender halboneendlich ausgedehnter Körper beschreiben. Hierfür liegt bereits eine weitreichende Lösung für das Wärmeübertragungsproblem mit [MÜL 98, *Anhang B, zu Kapitel 3.1.1.1*] vor²⁶. Dessen Übertragung auf die Fragestellung der Diffusion ist leicht möglich, wenn mit den Indizes der Halbräume $j = 1, 2$ entsprechende Substitutionen sinngemäß als $a_j \rightarrow D_j$, $b_j \rightarrow \sqrt{D_j}$ vorgenommen werden. Eine sinnvolle Spezialisierung kann darin bestehen, an der Kontaktfläche bei $x = 0$ Kontinuität herzustellen. Das wird erreicht, indem die Grenzübergänge $k_j \rightarrow \infty$ (\Rightarrow *ungebremster Stoffaustausch an der Kontaktfläche bei $x = 0$*) ausgeführt werden²⁷. Weiter werde angenommen, dass die beiden Diffusionskoeffizienten in einem festen Verhältnis zueinander stehen, d.h., sie unterscheiden sich nur um einen Faktor k , d.h., $D_2 = k \cdot D_1$. Damit folgen analog [MÜL 98, (*B3.1.1.1-1.8.1*) und (*B3.1.1.1-1.8.2*)] die Lösungen:

$$c_1(t, x) = c_{1A} + (c_{2A} - c_{1A}) \cdot \frac{\sqrt{k}}{1 + \sqrt{k}} \operatorname{erfc}\left(\frac{-x}{2\sqrt{D_1 \cdot t}}\right) \quad \text{für } x < 0, \quad (10.1)$$

$$c_2(t, x) = c_{2A} - (c_{2A} - c_{1A}) \cdot \frac{1}{1 + \sqrt{k}} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{k} \cdot \sqrt{D_1 \cdot t}}\right) \quad \text{für } x \geq 0; \quad (10.2)$$

die Anfangskonzentrationen sind durch $c_1(0, x) = c_{1A} = \text{konst.}$ und durch $c_2(0, x) = c_{2A} = \text{konst.}$ gegeben. Die Gleichungen (10.1) und (10.2) gelten für zeitunabhängige Diffusionskoeffizienten²⁸.

²⁶ Im Unterschied zur Lösung aus [HAH 12, *Exemple 10-7*] wird ein Temperatur- resp. Konzentrationssprung an der Kontaktfläche bei $x = 0$ zugelassen (Randbedingung 3. Art).

²⁷ Diese Lösung ist jetzt gleichbedeutend mit der aus [HAH 12, *Exemple 10-7*], sofern dort Kontinuität des Wärmeflusses, d.h., $k_1 = k_2$ sowie $T_0 \rightarrow c_{2A}$ und $c_{1A} = 0$, vereinbart werden.

²⁸ Zum komplementären Fehlerintegral $\operatorname{erfc}(z)$ siehe **Anhang**.



Beachte: Während bei den vorangegangenen Kapiteln von einer Ortsabhängigkeit in der Folge lokaler Mittelung bewusst abgesehen wurde, wird sie hier, so wie im folgenden Kapitel 11, eindimensional berücksichtigt.

Erwähnt sei an dieser Stelle, dass die Orte gleicher Konzentration durch die Bedingung gegeben sind, dass sich das Argument des Fehlerintegrals nicht ändert, so dass der Ausdruck $|x| \sim \sqrt{D_I \cdot t}$ bzw. $x^2 \sim D_I \cdot t$ bis auf eine Konstante einzuhalten ist, weshalb diese Bedingung auch als 'quadratisches Wachstumsgesetz' bezeichnet wird – siehe **Anhang**.

Wiederholt wurde in den vorangegangenen Beispielen zu zeigen versucht, dass in technischen Anwendungen infolge praktisch stets mehr oder weniger anisothermer Prozesse der Diffusionskoeffizient und damit ebenso die Aktivierung vom Temperatur-Zeitverlauf direkt abhängen, während konstante Diffusionskoeffizienten einer isothermen Betrachtungsweise entsprechen, die mit mehr oder weniger großen Fehlern behaftet ist. Es lässt sich nun zeigen, dass auch im ortsabhängigen Fall analytisch geschlossene Lösungen für zeitabhängige Diffusionskoeffizienten existieren.

So erhält man mit der Aktivierung entsprechend (2.1-4.3), also mit $\mathcal{I}_1(t) = \int_0^t D_I(\tau) \cdot d\tau$, gegenüber (10.1) und (10.2) als Verallgemeinerung die beiden expliziten Lösungen für anisotherme Kinetik²⁹:

$$c_1(t, x) = c_{1A} + (c_{2A} - c_{1A}) \cdot \frac{\sqrt{k}}{1 + \sqrt{k}} \operatorname{erfc}\left(\frac{-x}{2\sqrt{\mathcal{I}_1(t)}}\right) \quad \text{für } x < 0 \quad (10.3)$$

$$c_2(t, x) = c_{2A} - (c_{2A} - c_{1A}) \cdot \frac{1}{1 + \sqrt{k}} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{k} \cdot \sqrt{\mathcal{I}_1(t)}}\right) \quad \text{für } x \geq 0 \quad (10.4)$$

Auch im anisothermen Fall ergeben sich Isolinien der Konzentration, indem – wiederum bis auf eine Konstante – die Beziehung $|x| \sim \sqrt{\mathcal{I}_1(t)}$ bzw. $x^2 \sim \mathcal{I}_1(t) = \int_0^t D_I(\tau) \cdot d\tau$ eingehalten wird, allerdings mit dem Unterschied, dass jetzt nicht allein die Zeit, sondern der Temperatur-Zeit-Verlauf die Bahnlinie des Ortes steuert.

²⁹ Siehe im **Anhang** „Transformation der Diffusionsgleichung“



Zur Veranschaulichung werde hier ein Fallbeispiel numerisch berechnet. Dafür seien die folgenden Annahmen getroffen:

- Der Halbraum 1 für $x < 0$ bestehe aus Zink, das in den Halbraum 2, z.B. aus Kupfer, für $x > 0$ durch thermische Anregung diffundiert.
- Der Diffusionskoeffizient $D_1(t)$ des Halbraums 1 werde entsprechend (2.1-5a) gebildet mit Mengenfaktor $D_{10} = 6 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ und der Aktivierungsenergie $Q_1 = 144500 \text{ J/mol}$
- Erwärmung von Anfangstemperatur $\vartheta_A = 20^\circ\text{C}$ auf Umgebungs- bzw. Ofentemperatur $\vartheta_U = 550^\circ\text{C}$; Zeitkonstante $T = 40 \text{ s}$
- Es werde $D_2(t) = D_1(t)$ gesetzt, d.h., es gilt $k = 1$.

Den angenommenen anisothermen Temperaturverlauf nach Art der Ofenerwärmung gemäß (1.4-3.9) bzw. (5.1) zeigt das folgende Bild:

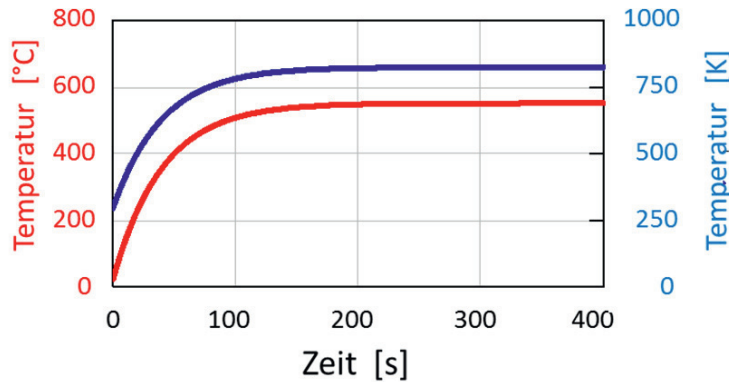
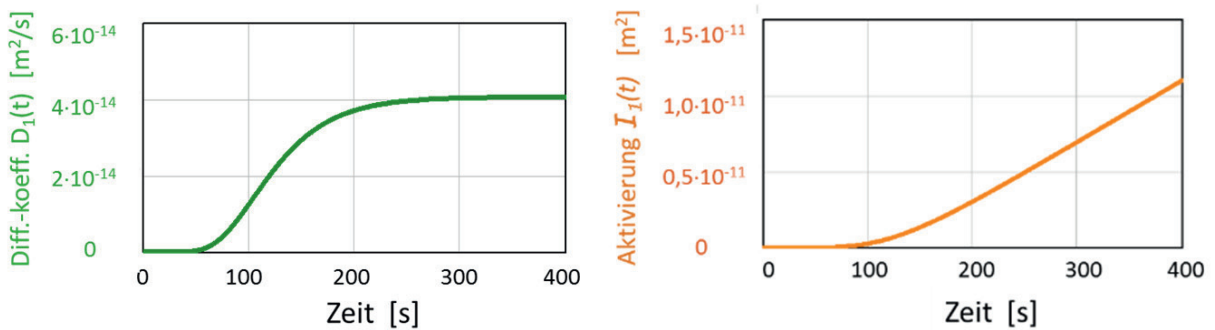


Bild 10.1: Temperaturverlauf wie bei Ofenerwärmung

Der Diffusionskoeffizient und die Aktivierung reagieren darauf mit den folgenden Verläufen:



Bilder 10.2 und 10.3: Diffusionskoeffizient und Aktivierung unter anisothermen Bedingungen

Den Diffusionsfortschritt zeigen in Abhängigkeit von Ort und Zeit die beiden folgenden Darstellungen, die normierend mit den Anfangskonzentrationen $c_{1A} = 1$ und $c_{2A} = 0$ berechnet wurden.

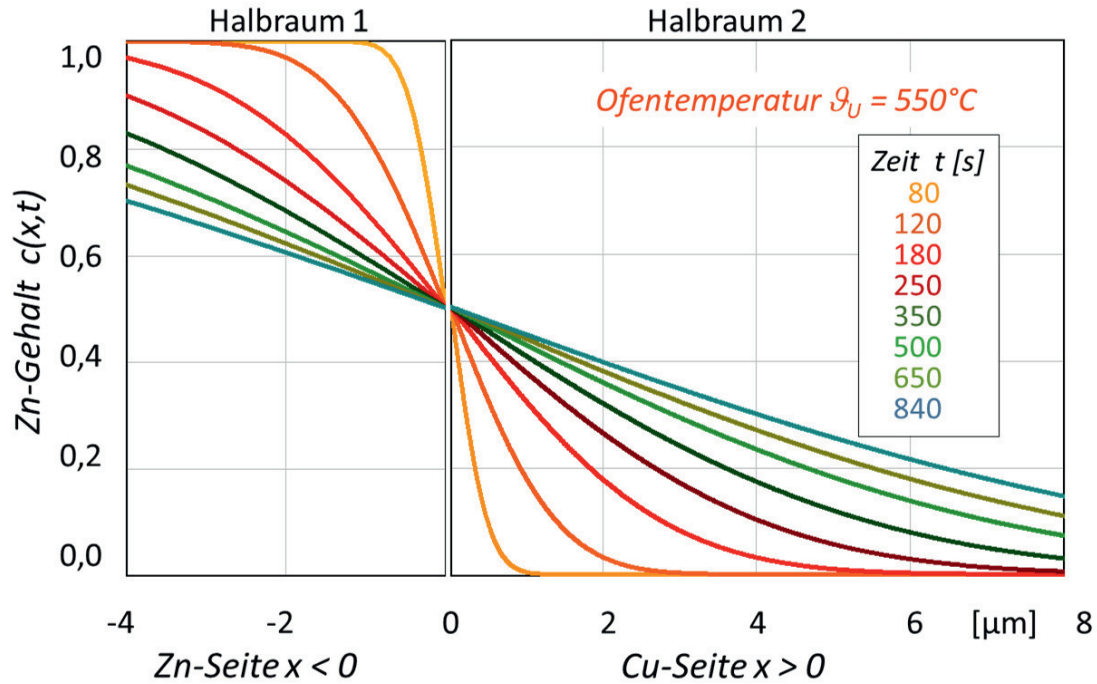


Bild 10.4: Thermisch aktivierter Diffusionsverlauf in Abhängigkeit vom Abstand zur Kontaktfläche unter anisothermen Bedingungen

Den Konzentrations-Zeitverlauf vermittelt folgende Darstellung:

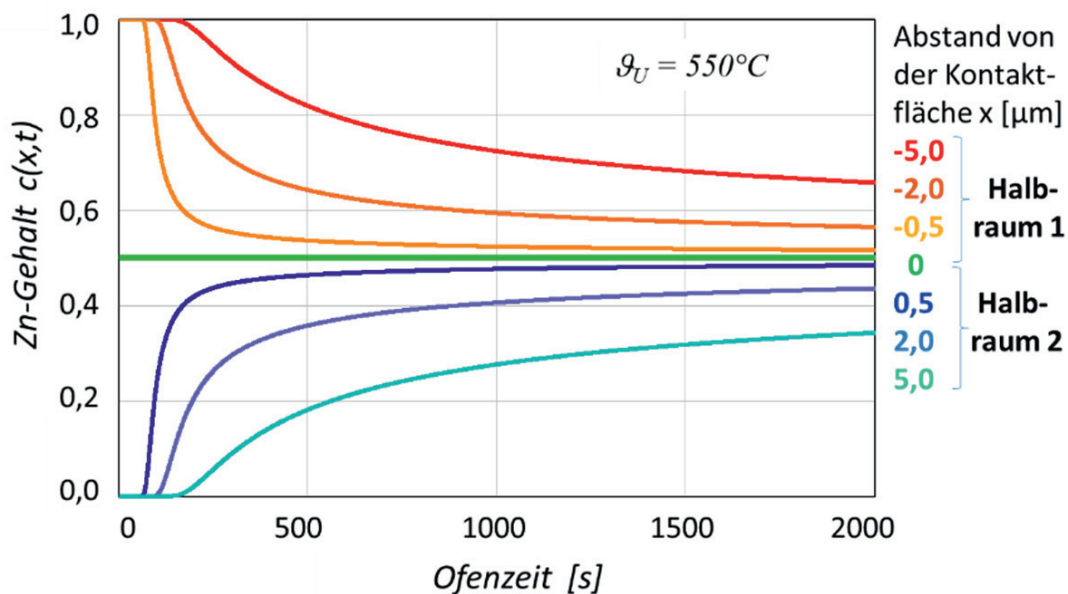


Bild 10.5: Diffusionsverlauf in Abhängigkeit von der Zeit

Werden anstelle anisothermer Erwärmung vereinfachend isotherme Bedingungen, d.h., sprunghafte Erwärmung, angenommen ($T \rightarrow 0s$), so erhält man die folgenden Verläufe:

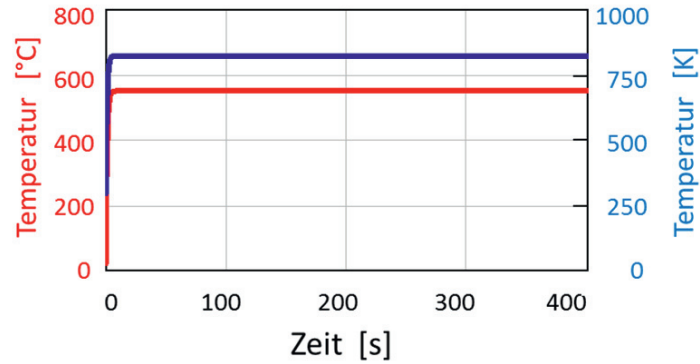
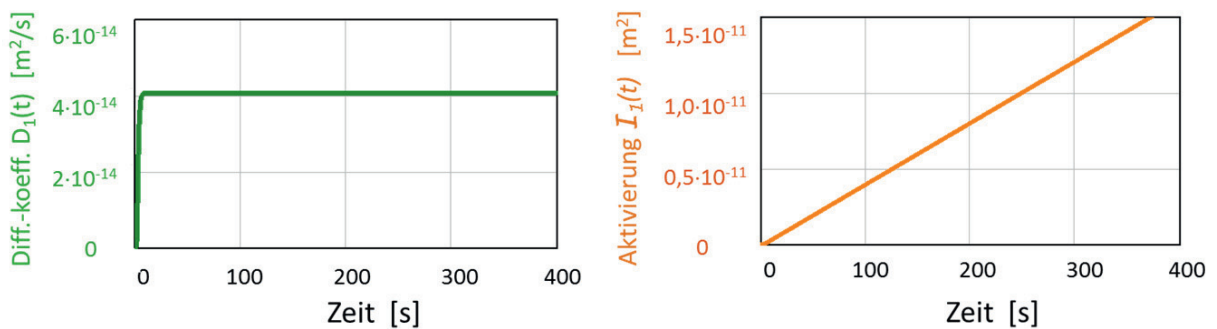


Bild 10.6: Temperaturverlauf bei isothermer Simulation



Bilder 10.7 und 10.8: Diffusionskoeffizient und Aktivierung unter isothermen Bedingungen

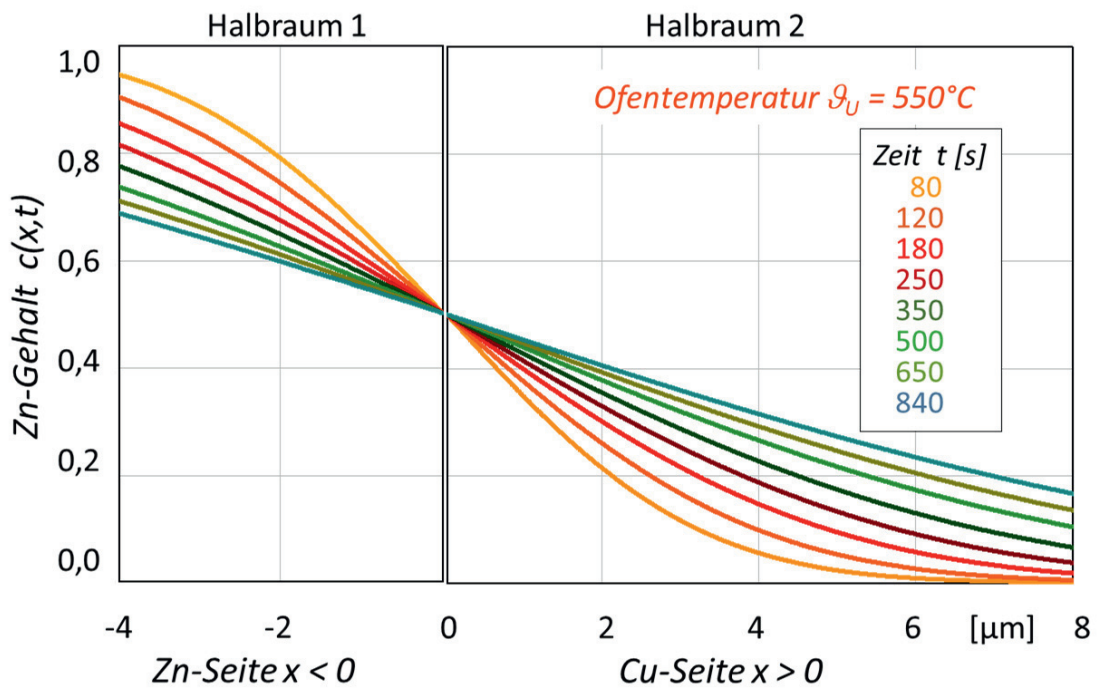


Bild 10.9: Thermisch aktivierter Diffusionsverlauf in Abhängigkeit vom Abstand zur Kontaktfläche unter isothermen Bedingungen

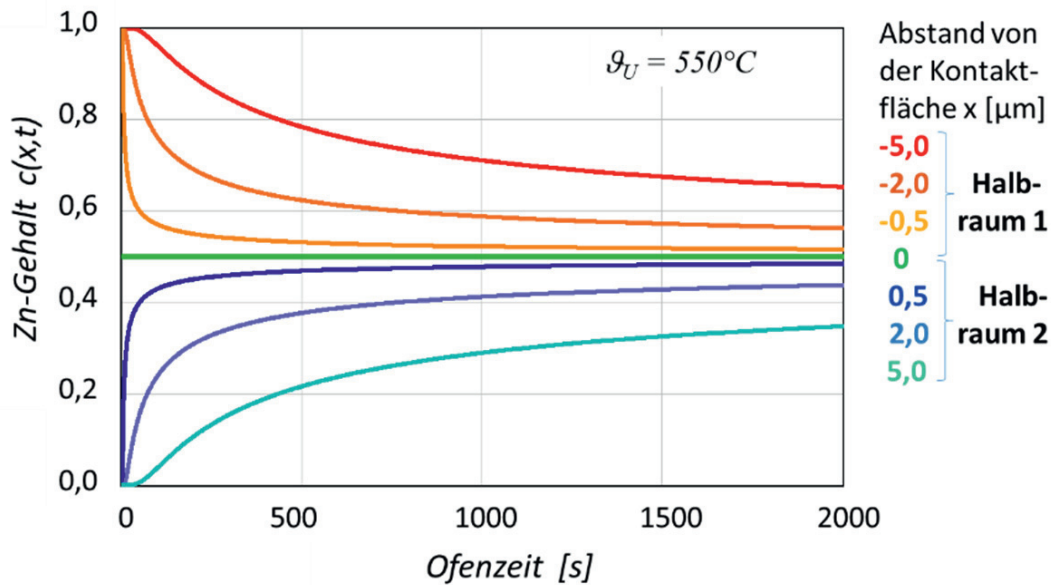


Bild 10.10: Diffusionsverlauf in Abhängigkeit von der Zeit unter isothermen Bedingungen

Beim Vergleich von Bild 10.4 mit 10.9 sowie von Bild 10.5 mit 10.10 wird unmittelbar deutlich, dass insbesondere hin zu kürzeren Zeiten die Übereinstimmung dramatisch abnimmt. Das genau war in dieser Weise zu erwarten gewesen, denn die Erwärmungsphase, die hier unter den simulierten Bedingungen wenigstens 100 s beträgt (Bild 10.1), trägt zunächst nur wenig zur Aktivierung bei (Bild 10.3). Demgegenüber findet deren Akkumulation unter isothermen Bedingungen von Anbeginn maximal statt (Bild 10.8), so dass die Diffusion entsprechend (unrealistisch) stark einsetzt.

Als Schlussfolgerung ergibt sich, dass die isotherme Näherung nur berechtigt ist, wenn der tatsächlich ausgeprägte nahezu isotherme Zeitabschnitt gegenüber dem der aufheizenden Anlaufphase wesentlich größer ist. In allen anderen Fällen sollten die realen Aufwärmbedingungen auch realitätsnah in der Rechnung berücksichtigt werden. Mit diesem durchgerechneten Beispiel soll insbesondere der in der Praxis stehende Technologe auf diese Problematik aufmerksam gemacht und dafür sensibilisiert werden. Eine entsprechende Praxisanwendung bringt das folgende Kapitel, bei dem ausnahmsweise wiederum ganz bewusst die Ortsabhängigkeit nicht vernachlässigt wird, da für die angestrebten qualitativen und quantitativen Aussagen die Betrachtung der Ortsabhängigkeit hier zwingend ist. Andernfalls wäre eine lokale Mittelung der Art $\bar{c}(t) = \frac{l}{X_2 - X_1} \cdot \int_{X_1}^{X_2} c(t, x) dx$ durchzuführen, die allerdings mit einem Informationsverlust verbunden ist.

11 Diffusion von Oberflächenschichten

In der Industrie werden mannigfach beschichtete Bänder und Drähte für unterschiedlichste Anwendungen benötigt. Bei einem Teil davon wird diese meist nur sehr dünne Deckschicht durch eine Diffusions-Wärmebehandlung modifiziert. Als Beispiel diene hier die Herstellung von sog. Cementdraht. Dabei wird ein galvanisch verzinkter Kupferdraht einer definierten Glühbehandlung ausgesetzt, entweder ruhend im Ofen, bewegt bei einem Ofendurchlauf oder auch mit elektrischer Durchlauf-Widerstandserwärmung. Die thermisch angeregte Diffusion des Zinks in die Kupfermatrix bewirkt die Bildung einer Messingschicht, deren Zn-Gehalt von der Oberfläche in Richtung zur Kupfermatrix abnimmt. Die Diffusionsbedingungen sind dabei so zu wählen, dass direkt an der Oberfläche ein Zinkgehalt von etwa 20 . . . 25 Masse% erhalten wird. Dann besitzt die Drahtoberfläche die gewünschte goldgelbe Färbung, vorausgesetzt man hat unter Schutzgas geglüht oder die oberflächigen Oxide wurden mit einer Beizung eliminiert.

Im gewählten Beispiel lautet die zentrale Frage, welche Diffusionsbedingungen hinsichtlich Temperatur und Zeit einzustellen sind, damit bei vorgegebener Dicke $L = R_0 - R$ der Zn-Auflage vor der Diffusionsglühung später nach der Glühung an der Drahtoberfläche ein Zn-Gehalt bzw. eine Messingauflage im angestrebten Bereich erhalten wird, wobei R_0 den Draht-Halbmesser (*Drahtoberfläche*) und R den Halbmesser bzw. Radius des Cu-Kerndrahtes bezeichnen.

Zur adäquaten Beschreibung dieser Aufgabe ist das Diffusionsproblem mathematisch zu formulieren und dann zu lösen. Dabei handelt es sich um ein über die Randbedingungen gekoppeltes partielles Dgl.-System in Zylinderkoordinaten von der Art

$$\frac{\partial c_1(r,t)}{\partial t} = D_1(t) \cdot \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_1(r,t)}{\partial r} \right) \quad \text{für } 0 < R < r < R_0 \quad (11.1-1.1)$$

$$\frac{\partial c_2(r,t)}{\partial t} = D_2(t) \cdot \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_2(r,t)}{\partial r} \right) \quad \text{für } 0 < r < R \quad (11.1-1.2)$$

mit folgenden Anfangsbedingungen

$$c_1(r,t=0) = c_{1A}(r) \quad \text{für } R < r < R_0, \quad (11.1-2.1)$$

$$c_2(r,t=0) = c_{2A}(r) \quad \text{für } 0 < r < R, \quad (11.1-2.2)$$



und den Randbedingungen

$$c_1(r=R,t) = c_2(r=R,t) \quad (\text{Kontinuität bei } r = R) \quad (11.1-3.1)$$

$$k_1 \frac{\partial c_1(r=R)}{\partial r} = k_2 \frac{\partial c_2(r=R)}{\partial r} \quad (\text{Kontinuität bei } r = R) \quad (11.1-3.2)$$

$$k_0 \frac{\partial c_1(r=R_0)}{\partial r} = 0 \quad (\text{Diffusionssperre bei } r = R_0) \quad (11.1-3.3)$$

sowie einer Symmetriebedingung $\frac{\partial}{\partial r} c_2(r=0,t) = 0$. (11.1-4)

Das ist die Formulierung für einen „unendlich“ langen Zylinder mit beliebig starker Schichtauflage. Als Besonderheit wurden die Diffusionskoeffizienten, aus demselben Grund wie in Kapitel 2, als zeitabhängig deklariert.

Ein einfacheres Ersatzsystem ist stets dann möglich, wenn die Schichtauflage im Verhältnis zum gesamten Drahtquerschnitt hinreichend dünn ist und die Diffusionszeit nicht ausreicht, um die Teilchen der Deckschicht bis ins Zentrum des Drahtes bei $r=0$ zu transportieren. Damit wird die Diffusion auch weitestgehend von der Krümmung der Drahtoberfläche unabhängig und es ist gestattet, das Problem als eben zu betrachten und darüberhinaus den Bereich des Kerndrahtes durch den eines halbbendlichen Körpers zu ersetzen. Die mathematische Formulierung lautet dann in kartesischen Koordinaten:

$$\frac{\partial c_1(x,t)}{\partial t} = D_1(t) \cdot \frac{\partial^2 c_1(x,t)}{\partial x^2} \quad \text{für } 0 < x < L \quad (11.2-1.1)$$

$$\frac{\partial c_2(x,t)}{\partial t} = D_2(t) \cdot \frac{\partial^2 c_2(x,t)}{\partial x^2} \quad \text{für } L < x < \infty \quad (11.2-1.2)$$

mit folgenden Anfangsbedingungen

$$c_1(x,t=0) = c_{1A}(x) \quad \text{für } 0 < x < L, \quad (11.2-2.1)$$

$$c_2(x,t=0) = c_{2A}(x) \quad \text{für } L < x < \infty, \quad (11.2-2.2)$$

und den Randbedingungen

$$c_1(x=L,t) = c_2(x=L,t) \quad (\text{Kontinuität bei } x = L) \quad (11.2-3.1)$$

$$k_1 \frac{\partial c_1(x=L)}{\partial x} = k_2 \frac{\partial c_2(x=L)}{\partial x} \quad (\text{Kontinuität bei } x = L) \quad (11.2-3.2)$$

$$\frac{\partial c_1(x=0)}{\partial x} = 0 \quad (\text{Diffusionssperre bei } x=0) \quad (11.2-3.3)$$

sowie statt der Symmetriebedingung

$$c_2(x \rightarrow \infty, t) \rightarrow 0. \quad (11.2-4)$$

Dieses Modell ist für das Szenario der Diffusion einer nur wenige Mikrometer dicken Zinkschicht in eine weiträumige Kupfermatrix gut geeignet. Vereinfachend werde weiter angenommen, dass die beiden zeitabhängigen Diffusionskoeffizienten in einem festen Verhältnis zueinander stehen, d.h., sie unterscheiden sich nur um einen Faktor k (nicht zu verwechseln mit dem Mengenfaktor k bzw. D_0 des *ARRHENIUS*-Ansatzes) gemäß $D_2(t) = k \cdot D_1(t)$. Die Lösungen für die beiden x -Bereiche werden hier ohne Herleitung nur mitgeteilt³⁰:

$$c_1(x,t) = c_{1A} + (c_{2A} - c_{1A}) \frac{1-\kappa}{2} \sum_{n=0}^m \kappa^n \cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{(2n+1)L-x}{2 \cdot \sqrt{\mathcal{I}_1(t)}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{(2n+1)L+x}{2 \cdot \sqrt{\mathcal{I}_1(t)}}\right) \right] \\ \text{für } 0 < x < L, \quad (11.2-5.1)$$

$$c_2(x,t) = c_{2A} - (c_{2A} - c_{1A}) \cdot \\ \cdot \frac{1-\kappa}{2} \cdot \sum_{n=0}^m \kappa^n \cdot \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{2nL + \eta \cdot (x-L)}{2 \cdot \sqrt{\mathcal{I}_1(t)}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{(2n+2)L + \eta \cdot (x-L)}{2 \cdot \sqrt{\mathcal{I}_1(t)}}\right) \right] \\ \text{für } L < x < \infty. \quad (11.2-5.2)$$

Der Zähler der Summationsobergrenze $m \rightarrow \infty$ wird in Abhängigkeit der numerischen Konvergenz der Reihen auf einige der ersten Glieder zu begrenzen sein.

Die Parameter κ und η sind mit

$$\kappa = \frac{k_1 \sqrt{k} - k_2}{k_1 \sqrt{k} + k_2}, \quad \eta = \sqrt{l/k} \quad (11.2-5.3)$$

festgelegt und für die Aktivierung gelte wiederum entsprechend (2.1-4.3)

³⁰ In [HAH 12, *Example 10-8*] wird eine Lösung für das entsprechende Wärmeleitproblem angegeben, allerdings nur für zeitunabhängige Temperaturleitfähigkeit resp. konstanten Diffusionskoeffizienten. Eine Möglichkeit zur Erweiterung auf zeitabhängige Koeffizienten ganz allgemein siehe [JOS 72, *Transformation (1-9)*] und die Bemerkung im **Anhang**.



$$\mathcal{I}_1(t) = \int_0^t D_1(\tau) \cdot d\tau . \quad (11.2-5.4)$$

Für zeitunabhängigen Diffusionskoeffizienten $D_1(t) = D_1 = konst.$ ergibt sich daraus als Aktivierung unmittelbar das bereits bekannte Ergebnis $\mathcal{I}_1(t) = D_1 \cdot t$. Für den Diffusionskoeffizienten kann wieder der *ARRHENIUS*-Ansatz (2.1-5a) oder auch in der modifizierten Form (2.1-5b) – dann wegen Vergleichbarkeit mit $\mathcal{G}_B = -273,15$ - verwendet werden. Damit ergibt sich die Aktivierung (11.2-5.4) formal zu (2.4-1.1), wenn dort der Mengenfaktor k durch D_0 ersetzt wird. Da die Erwärmung des Drahtes im Ofen entsprechend (1.4-3.9b) bzw. (5.1) erfolgt, lässt sich die Integration gemäß Beziehung (5.2) umgehen.

Für die weiteren Berechnungen wurden die folgenden Vorgaben getroffen:

- Drahtdurchmesser $d = 0,0014 \text{ m}$
- Zn-Schichtdicke $L = 0,0000035 \text{ m} = 3,5 \mu\text{m}$
- Erwärmung von Anfangstemperatur, $\mathcal{G}_A = 20^\circ\text{C}$
- Umgebungs- bzw. Ofentemperatur $\mathcal{G}_U = 550, 650, 750^\circ\text{C}$ (da bei diesen Temperaturen von experimentell durchgeführten Diffusionsglühungen metallographisch bewertete Querschliffe zum vergleichenden Diffusionsfortschritt vorlagen)
- Zeitkonstante der Erwärmung $T = 40 \text{ s}$
- *ARRHENIUS*-Vorfaktor des Diffusionskoeffizienten $D_1(t)$:
 $D_{10} = 6 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
- Aktivierungsenergie von $D_1(t)$: $Q_1 = 144500 \text{ J/mol}$.
*(Die beiden ARRHENIUS-Parameter D_{10} und Q_1 wurden nicht als Tabellenwerte dem Schrifttum entnommen, sondern über das Diffusionsmodell an die eigenen experimentellen Befunde angepasst. Das war nicht nur sinnvoll, sondern notwendig, da die konkreten Werte empfindlich von den Ausgangsbedingungen der Werkstoffe, wie z.B. Raffinationszustand und Umformgrad des Kupfers, Abscheidungs-
zustand des Zinks usw. beeinflusst sind, ohne hierauf näher eingehen zu können.)*
- Es werde, mangels genauerer Kenntnis, $D_2(t) = D_1(t)$ gesetzt, d.h. es gilt $k = 1$.

- Die beiden Lösungen (11.2-5.1) und (11.2-5.2) lassen sich besserer Übersichtlichkeit wegen z.B. auf den normierten Zn-Bereich $0 < c/c_{IA} < 1$ einschränken, oder aber, um direkte Vergleichbarkeit mit den Berechnungen des vorangegangenen Kapitels zu gewährleisten, wiederum auf die Anfangskonzentrationen $c_{IA} = 1$ und $c_{2A} = 0$ spezifizieren, womit sich das Augenmerk der Diffusion erneut auf die Orts- und Zeitabhängigkeit des Zinkgehalts fokussiert.

Ebenso werden am Interface zwischen Zinkschicht und Kupfermatrix die Diffusionsflüsse von einem Bereich in den anderen einander gleichgesetzt, d.h. $k_2 = k_1$, wodurch infolge postuliertem $k = 1$ der Wert von κ entsprechend (11.2-5.3) zu $\kappa = 0$ entartet. Das hat unerwartet den Charme, dass sich die Summationen in (11.2-5.1) und (11.2-5.2) ausschließlich auf den Index $m = n = 0$ reduzieren und die Lösungen sich damit auf den jeweils ersten Summanden der Reihen beschränken. Damit wird das Ergebnis vom Konvergenzverhalten der Reihen unabhängig und statt (11.2-5.1) und (11.2-5.2) gilt kürzer:

$$c_1(x < L, t) = c_{IA} + \frac{c_{2A} - c_{IA}}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{L-x}{2 \cdot \sqrt{I_1(t)}} + \operatorname{erfc} \frac{L+x}{2 \cdot \sqrt{I_1(t)}} \right] \quad (11.2-5.5)$$

$$c_2(x > L, t) = c_{2A} - \frac{c_{2A} - c_{IA}}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{x-L}{2 \cdot \sqrt{I_1(t)}} - \operatorname{erfc} \frac{x+L}{2 \cdot \sqrt{I_1(t)}} \right]. \quad (11.2-5.6)$$

In den beiden folgenden Bildern 11.1 und 11.2 werden einerseits die Drahttemperaturverläufe angegeben, wie sie sich unter den vorliegenden Bedingungen der Ofenerwärmung darstellen,

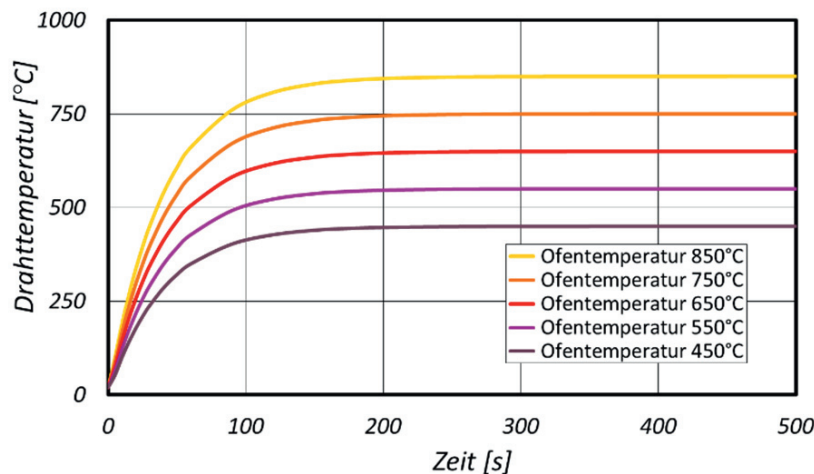


Bild 11.1: Erwärmungsverläufe des Drahtes im Ofen

sowie andererseits, wie sich die Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Zeit resp. Temperatur ändern.

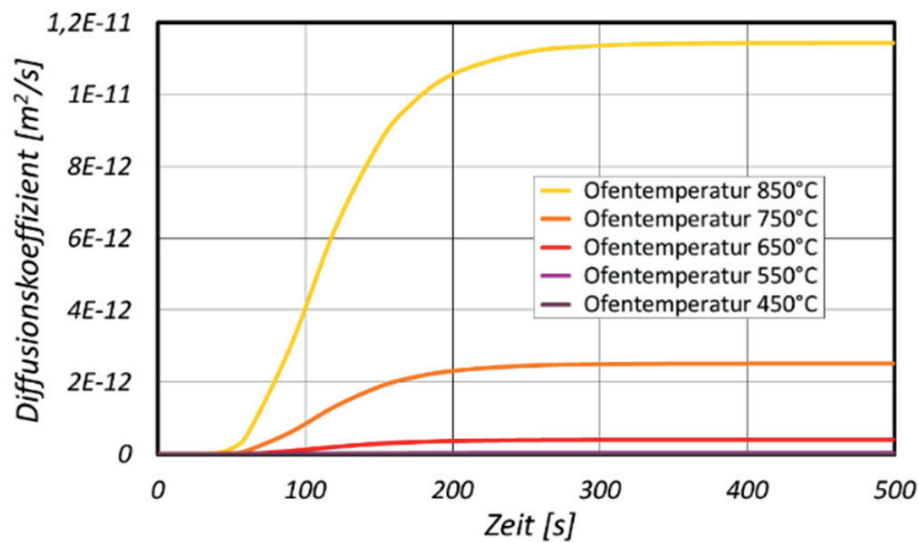


Bild 11.2: Diffusionskoeffizienten $D_1(t) = D_2(t)$ infolge $\vartheta(t)$

Die in Abhängigkeit von Temperatur und Zeit berechneten Konzentrationsverläufe zeigen die drei folgenden Bilder.

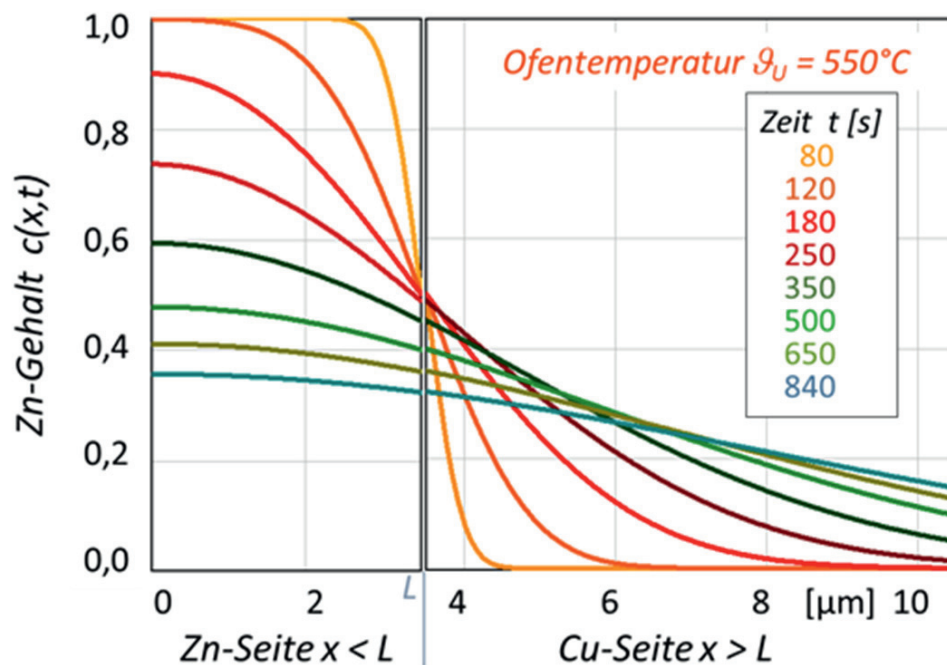
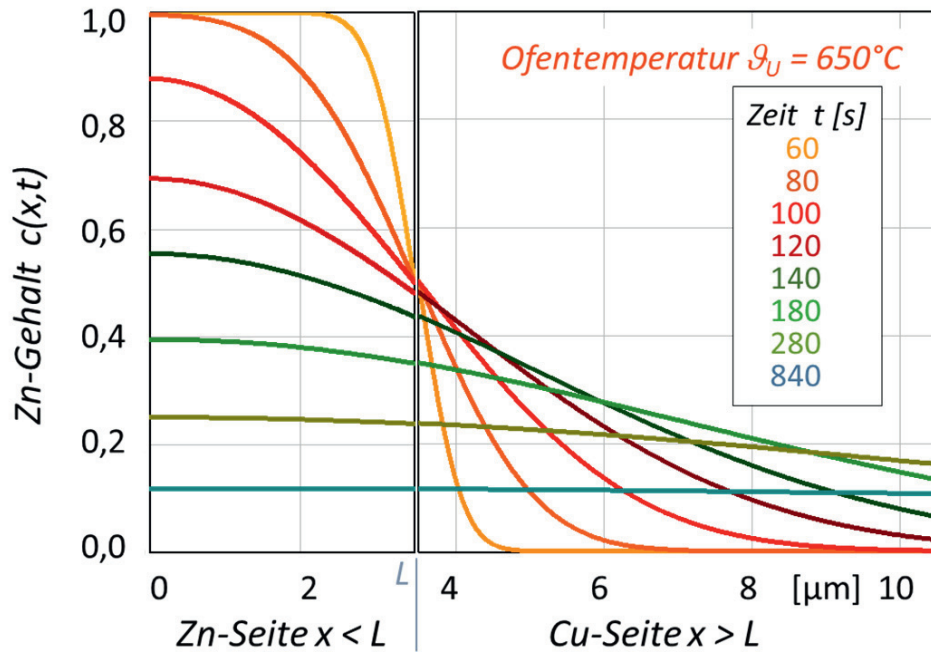
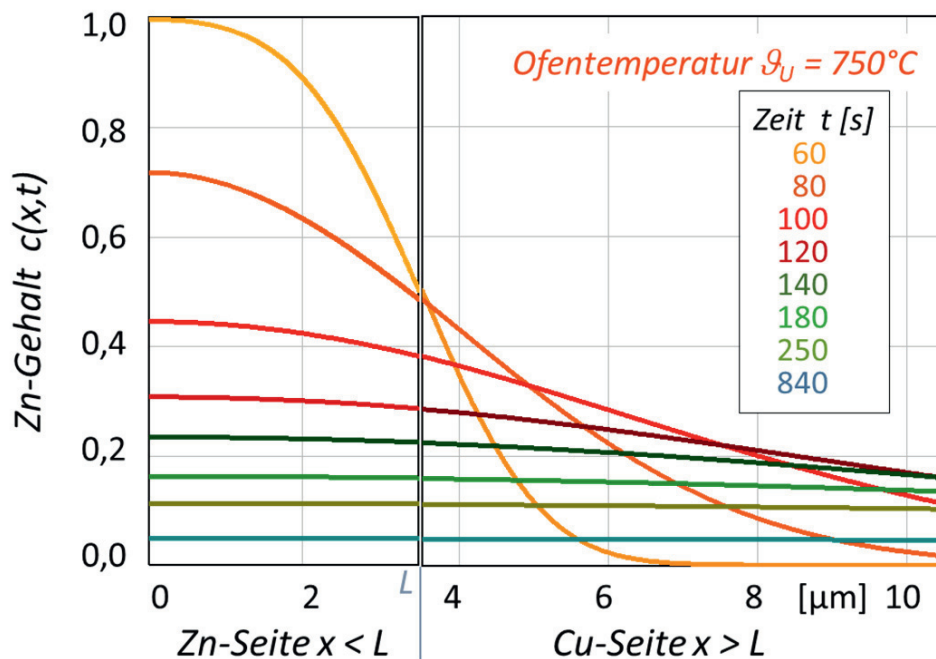


Bild 11.3: Verlauf des Zn-Gehaltes bei Ofentemp. von 550°C

Bild 11.4: Verlauf des Zn-Gehaltes bei Ofentemp. von 650°C Bild 11.5: Verlauf des Zn-Gehaltes bei Ofentemp. von 750°C

Die experimentellen Befunde ergaben, dass unter den Diffusionsglühungen bei 550°C und nach 840 s an der Oberfläche noch ein Zn-Gehalt von 36%, bei 650°C und 280 s noch 26% und bei 750°C und 140 s etwa noch 23%



vorlagen. Damit erfüllte insbesondere die letzte der drei Versuchsreihen die Bedingung, bei der sich eine goldgelbe Drahtoberfläche einstellt.

Mit dem Diffusionsmodell fällt es jetzt leicht, nahezu beliebige weitere Temperatur-Zeit-Kombinationen festzulegen, die diese Bedingung ebenfalls realisieren. So würde die Glühung bei 550°C etwa 1800 s benötigen, um ebenfalls in den betreffenden Bereich der goldgefärbten Messingoberfläche zu gelangen. Für diese Betrachtungen, bei der zu gegebener Ofentemperatur die erforderliche Ofenzeit gesucht ist, bietet sich besser auch folgende Darstellung an. Zum vorgegebenen Konzentrationsbereich des Zinks von 0,20-0,25 an der Drahtoberfläche lässt sich das erforderliche Zeitfenster auf der roten Kurve direkt ablesen.

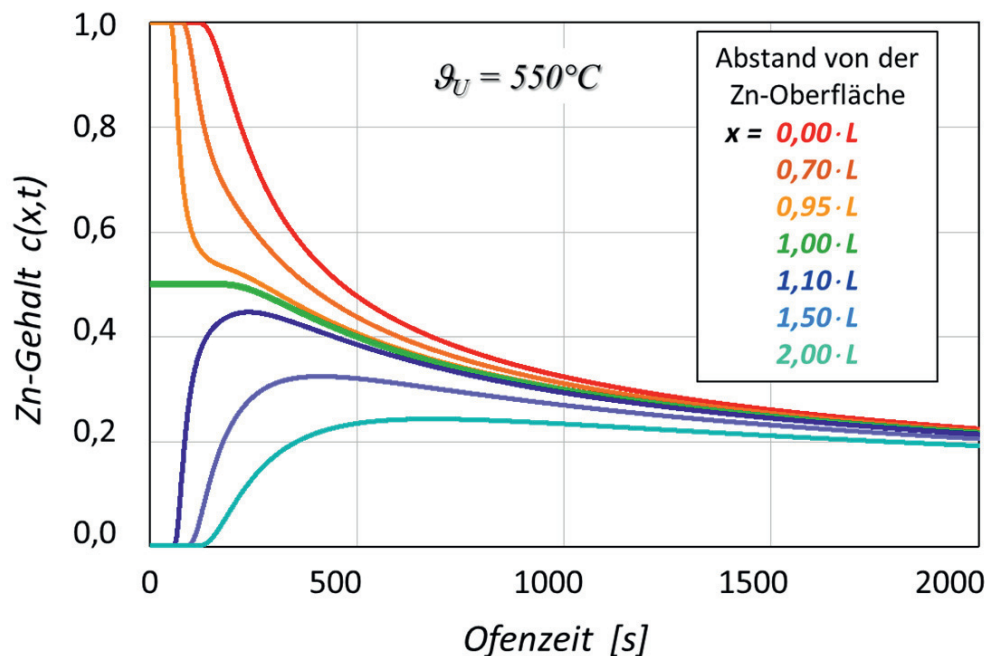


Bild 11.6: Zeitverlauf des Zn-Gehaltes bei Ofentemp. von 550°C

Abschließend soll noch gefragt werden, welche Auswirkungen es hat, wenn statt der Berücksichtigung des gesamten Aufheizverlaufs der Vorgang vereinfachend als isotherm, d.h., mit konstantem Diffusionskoeffizienten, betrachtet wird. Für die Drahttemperaturen gelten dann die technisch nicht zu realisierenden Verläufe von Bild 11.7, die hier ganz einfach mit der extrem kleinen Zeitkonstante $T = 1\text{ s}$ simuliert wurden.

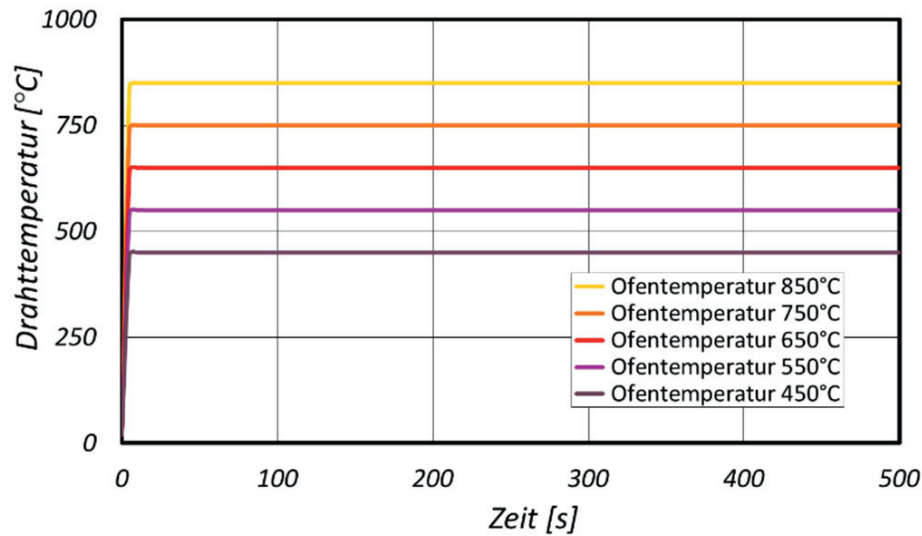


Bild 11.7: Drahttemperaturverläufe bei isothermer Simulation

Die Zeitabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten, wie sie Bild 11.2 zeigt, geht im isothermen Fall verloren – Bild 11.8.

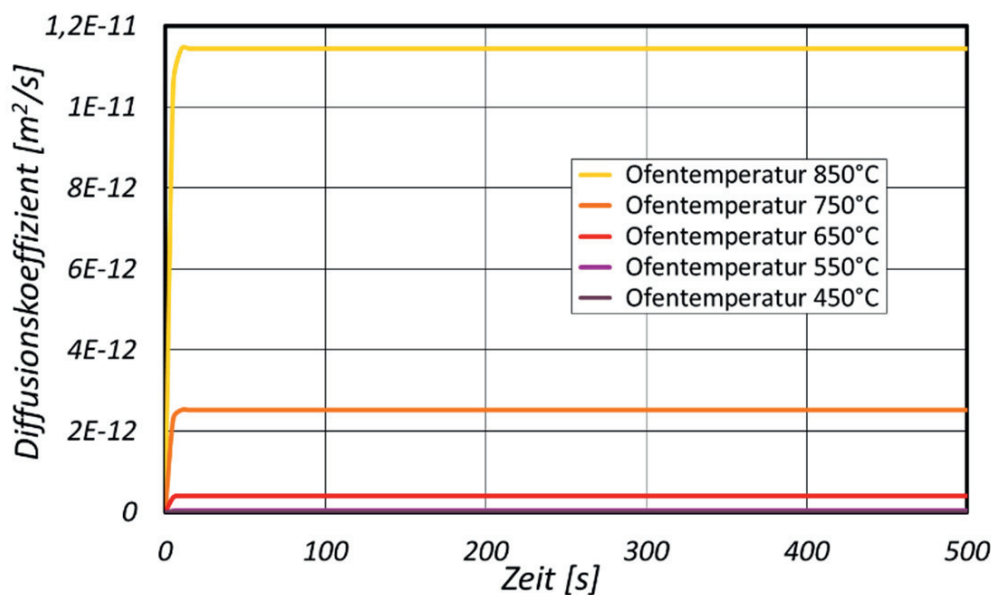


Bild 11.8: Diffusionskoeffizienten $D_1(t) = D_2(t)$ infolge $\vartheta(t) = konst.$

Das mit Bild 11.3 zu vergleichende Bild 11.9 zur Zeitabhängigkeit der Zn-Konzentration lässt erkennen, dass insbesondere in Richtung hin zu kürzeren Zeiten die Diffusion deutlich schneller fortschreitet. Das ist ganz einfach deshalb so, weil es keine allmähliche Erwärmungsphase gibt, sondern der Draht die Ofentemperatur bereits zum Zeitnullpunkt schlagartig, d.h., unrealistisch annimmt. Damit wirkt sich die isotherme



Näherung im Vergleich zum anisothermen Realvorgang erwartungsgemäß besonders dann umso merklicher aus, je größer der Zeitanteil der Erwärmung gegenüber dem der gesamten Glühzeit bemessen ist. Diesem Umstand ist es im gewählten Beispiel geschuldet, dass bei der langen Glühzeit von 840 s der Unterschied zur anisothermen Glühung nur noch etwa 3% Differenz in der Zn-Konzentration an der Oberfläche ausmacht. Für die unter diesen Bedingungen erforderliche Glühzeit von 1800 s, um in den goldgelben Bereich von 20 bis 25% Zink zu gelangen, reduziert sich der Konzentrationsunterschied auf dann nur noch ca. 1%.

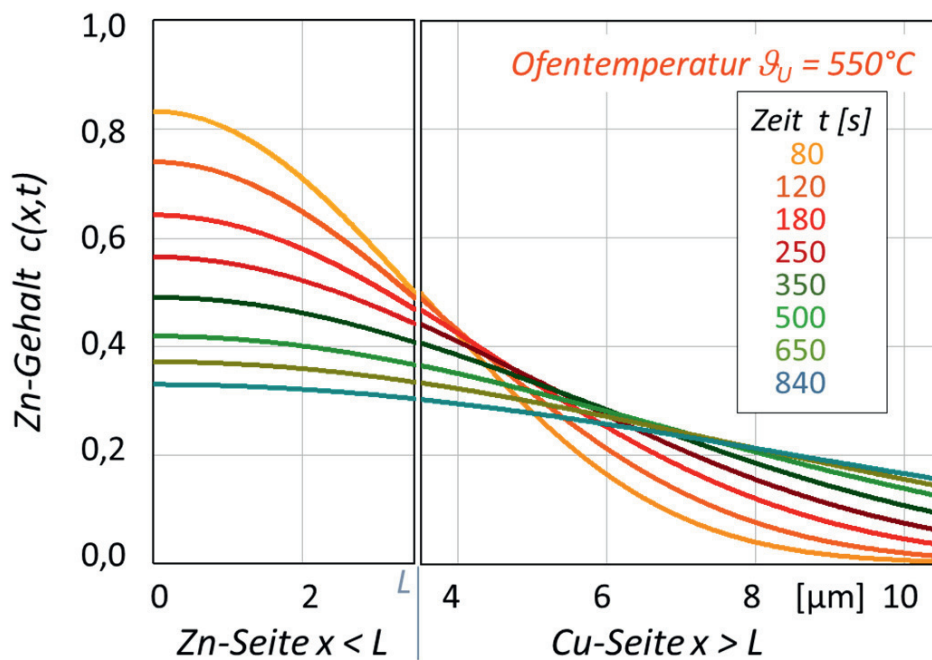


Bild 11.9: Verlauf des Zn-Gehaltes bei Ofentemp. von 550°C , jedoch gegenüber Bild 11.3 bei isothermer Glühung

Es zeigt sich damit erwartungsgemäß, dass die isotherme Näherung bei langen Glühzeiten, bei denen die instationäre Erwärmungsphase gegenüber dem gesamten Zeitraum, in dem der Draht im Ofen verbleibt, deutlich zurücktritt, ganz gute Näherungsergebnisse liefert. Umgekehrt erkennt man aber genauso, dass hin zu kürzeren Ofenzeiten und gleichzeitig damit hin zu einem wachsenden anisothermen Anteil des Erwärmungsbereichs die isotherme Näherung immer ungenauer und schließlich unbrauchbar wird. Deshalb wird man sicherheitshalber von vornherein die realen, d.h., die anisothermen Aufheizbedingungen zu berücksichtigen versuchen.

Da für die Berechnungen von Kapitel 10 und 11 die gleichen Stoffwerte verwendet wurden, zeigen die Unterschiede zwischen den Bildern 11.3 und 10.4 sowie 11.9 und 10.9, wie sich die unterschiedliche Körpergeometrie auswirkt. Während die Zn-Menge der 3,5 μm dicken Oberflächenschicht endlich, d.h., sehr gering ist, stellt jene des bis ins Unendliche reichenden Halbraumes 1, d.h. für $-\infty < x < 0$, im Beispiel von Kapitel 10 quasi ein unerschöpfliches Zn-Reservoir dar, weshalb der Zinkgehalt dort deutlich langsamer abnimmt, als im Deckschichtmodell. Deshalb war es im Nachhinein nicht nur richtig, sondern erforderlich, für die Modellierung der Diffusion dünner Oberflächenschichten das „Modell mit Deckschicht“, wie es im vorliegenden Kapitel vorgestellt wurde, anzuwenden.

Die Frage, ob das Modell des beschichteten einseitig unendlich ausgedehnten Körpers auch in der Lage ist, die Verhältnisse stellvertretend für einen Runddraht zu beschreiben, hängt wesentlich davon ab, ob und nach welcher Zeit das Zink der Deckschicht im Zentrum des Runddrahtes anzulangen beginnt. Denn erst ab diesem Zeitpunkt würde die Zn-Konzentration in Drahtmitte stärker ansteigen, als das im Modell des halbunendlichen Körpers in einer Tiefe von 0,7 mm, dem Drahthalbmesser, der Fall wäre. Die Rechnung mit demselben Modell zeigt, dass das bei einer Temperatur von 750°C erst nach der Dauer von etwa einem Tag erfolgt. Demgegenüber sind die Diffusionszeiten, um einen goldgelben „Cementdraht“ zu erhalten, mit zwei bis dreißig Minuten, je nach der Temperatur, vergleichsweise sehr gering. Das zeigt darüberhinaus, dass auch der Fehler, der durch Ignorieren der Oberflächenkrümmung des Drahtes verbleibt, im vorliegenden Fall völlig vernachlässigbar ist.

Auch die in diesem Kapitel angestellten Untersuchungen zum Diffusionsverhalten dünner Schichten sollten zeigen, dass es bereits auf der Grundlage relativ einfacher, analytisch geschlossener Modellvorstellungen gelingt, thermisch aktivierte Werkstoffreaktionen insbesondere auch unter anisothermen Verhältnissen zu untersuchen, um den realen Verhältnissen, wie sie in der Praxis vorliegen, zu entsprechen und um die dabei gewonnenen Ergebnisse für die Praxis anzuwenden.



12 Lokale Wärmebehandlung - Presshärten

Zur Verbesserung der Umform- und Funktionseigenschaften von höchstfesten Stählen durch lokale Wärmebehandlung wurde ab dem Jahre 2008 durch ein aus mehreren Instituten gebildetes Konsortium das Forschungsprojekt *LOKWAB* initiiert. In diesem Projekt standen mehrere Werkstoffe im Fokus der Untersuchungen. Einerseits sollte die Möglichkeit einer Festigkeitsreduzierung von hoch- und höchstfesten Stählen näher charakterisiert werden, während andererseits zu klären war, was ein nachträgliches Erwärmen von pressgehärteten Bauteilen aus den Stählen 22MnB5 bzw. 35MnB5 bewirkt und in welchem Maße eine Festigkeitsverminderung möglich ist. Der Boranteil von 5 ppm führt zur gewünschten Verschiebung der Austenit-Martensit-Umwandlung hin zu längeren Umwandlungszeiten. Der Kohlenstoffanteil von 0,22 bzw. 0,35% sorgt für eine ausreichend hohe Härteeignung, so dass mit diesen Werkstoffen Zugfestigkeiten um die 1500 MPa erreicht werden.

Bei den hoch- und höchstfesten Stählen handelt es sich um Mehrphasenstähle, die sich in ihrer Zusammensetzung relativ ähnlich sind. Während in der Dissertation [HEY 12] die versuchs- und werkstofftechnischen Aspekte ausführlich dargestellt sind, soll hier beispielshalber zum Rekristallisationsglühen des Komplexphasenstahls CP-W800 noch einmal exemplarisch und knapp eine weitere Möglichkeit gezeigt werden, wie sich die Ergebnisse der reaktionskinetischen Modellierung darstellen lassen.

Für die Durchführung der gezielt variierten Wärmebehandlung von Zugproben wurde das Wärmebehandlungssimulationssystem Gleeble HDS-V40 am Institut für Metallformung der TU Bergakademie Freiberg genutzt. Diese Anlage ermöglicht Aufheiz- und Abkühlenszenarien in einem breiten Temperatur-Zeit-Bereich. Bei den Wärmebehandlungsversuchen, die als rekristallisierende Glühung im Kurzzeitbereich bezeichnet werden kann, erfolgte die Aufheizung der Proben konduktiv. Dabei ermöglichte die Anlage Aufheizgeschwindigkeiten von bis zu 1000 K/s. Die Abkühlrate ließ sich anlagenseitig bis etwa zu 1000 K/s einstellen. Die Kühldüsen waren ober- und unterhalb der Probe so angebracht, dass die Kühlung möglichst gleichmäßig erfolgte. Eine Vorstellung der realisierten Temperaturverläufe, denen die Proben während insgesamt fünfzig Versuchen ausgesetzt waren, vermittelt das folgende Bild. Das Schema der Wärmezyklen bestand stets aus einer nahezu linearen Aufheizphase, einer kurzen Haltephase und schließlich einer erzwungenen Abkühlung.

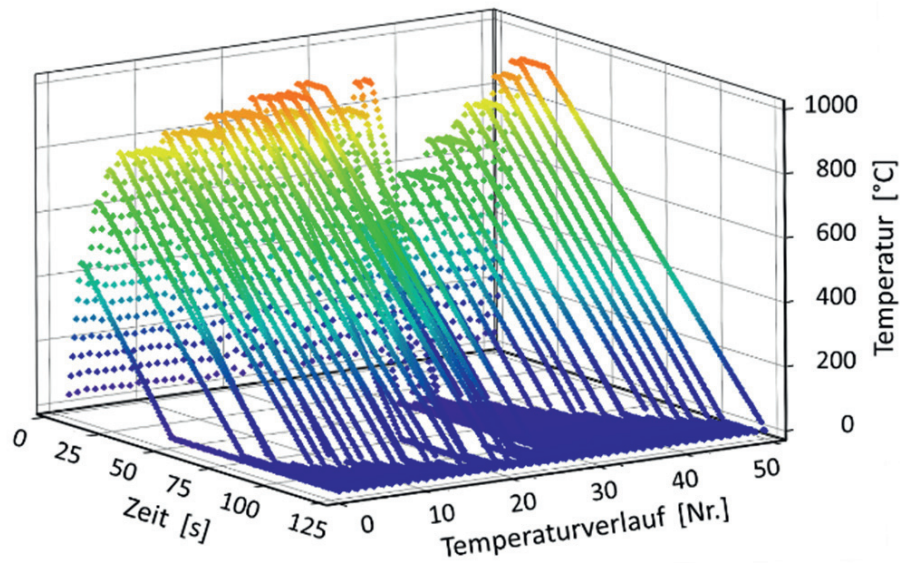


Bild 12.1: Fünfzig Temperaturzyklen mit dem Stahl CP-W800

Zielgrößen nach den Versuchen waren jeweils die Werkstoffprüfgrößen Zugfestigkeit und Gleichmaßdehnung. Auf deren Grundlage in Verbindung mit den Temperaturzyklen erfolgte die reaktionskinetische Auswertung und Modellierung entsprechend der Gleichungen im **Anhang** „Zu Kapitel 2.4: Mehrphasenmodelle“. Dabei wurde zur Approximation der Modelle an die Datenlage die Kombination mehrerer Reaktionsmechanismen realisiert, indem z.B. ein oder zwei Entfestigungsmechanismen mit einem oder zwei Aushärtungsmechanismen gekoppelt wurden - oder umgekehrt.

Eine bildliche Darstellung der Zielgröße (z.B. Zugfestigkeit, 0,2-Dehngrenze oder Bruchdehnung) in Abhängigkeit der Temperaturverläufe ist zwar nicht möglich, das Resultat lässt sich jedoch versuchsabhängig zuordnen:

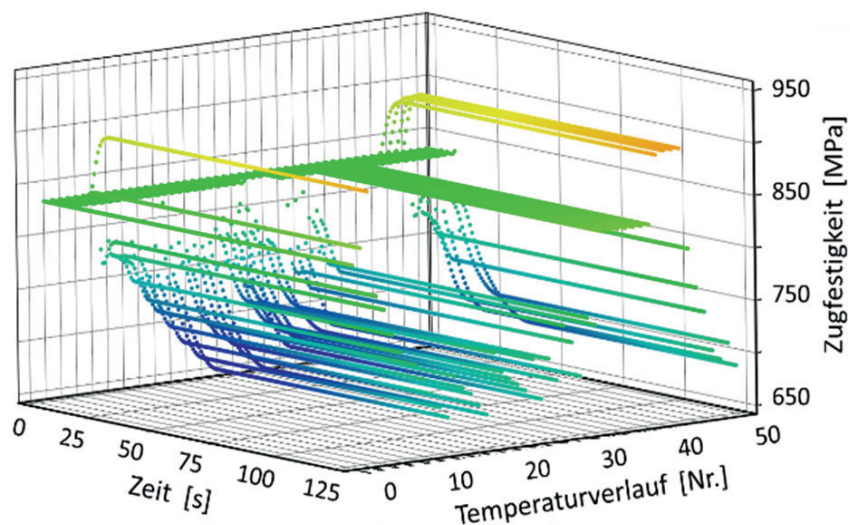


Bild 12.2: Reaktionskinetische Verläufe der Zugfestigkeit in Abhängigkeit vom Temperaturzyklus bzw. je Versuch



Für die Güte des Modells, d.h., mit welcher Qualität es die durch die Messergebnisse vorgegebene Realität widerspiegelt, lässt sich neben dem Bestimmtheitsmaß auch der direkte Vergleich zwischen Modell- und Messwerten heranziehen.

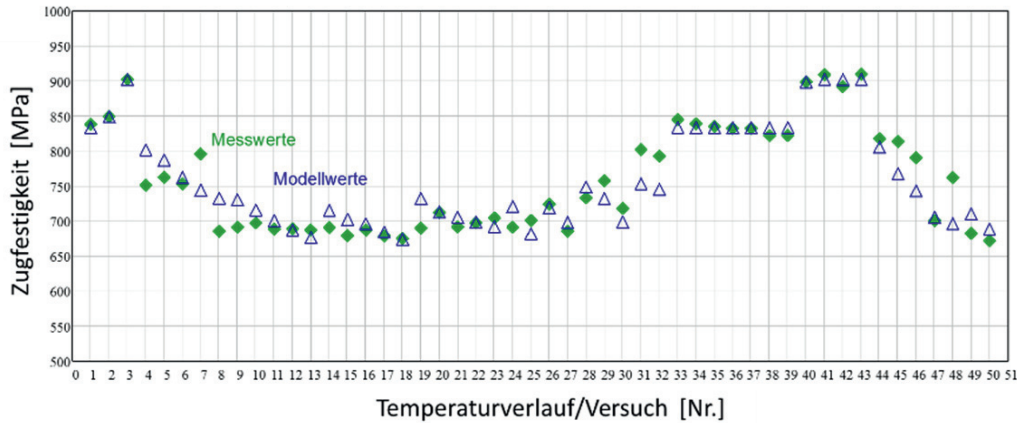


Bild 12.3: Modell-Messwert-Vergleich

Diese Darstellung zeigt, wo bei einzelnen Versuchen größere Unterschiede zwischen Modell- und Messwert, sog. Ausreißer auftreten. Das kann u.U. Hinweise liefern, um nach Fehlerquellen bei einzelnen Versuchen zu suchen und diese ggf. zu wiederholen. Eine weitere Möglichkeit der 3D-Visualisierung der Abhängigkeit der Zielgröße von der Wärmebehandlung kann auch darin bestehen, dass charakteristische Eigenschaften der Temperatur-Zeit-Zyklen als konstante Plot-Parameter herangezogen werden.

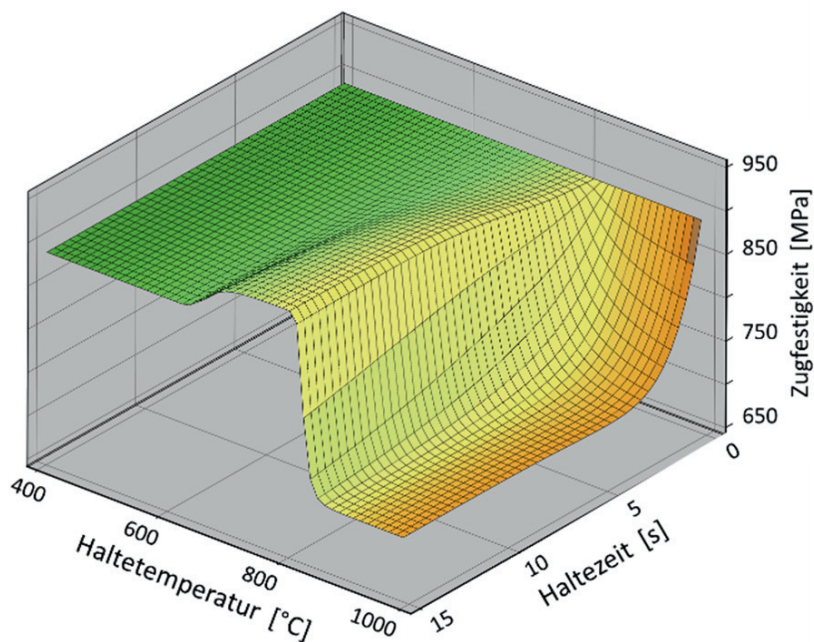


Bild 12.4: Modellfläche der Zielgröße in Abhängigkeit von Hilfsgrößen der Temperatur-Zeit-Zyklen

Im vorliegenden Zusammenhang eignen sich hierfür Haltetemperatur und Haltezeit, die einen besonders starken Einfluss auf die Ausprägung der Werkstoffeigenschaften haben. Das sind beim rekristallisierenden Glühen jene Abschnitte des Temperatur-Zeit-Regimes, bei denen die Aktivierung auf die Werkstoffreaktion besonders ausgeprägt ist, d.h., wo z.B. hohe Temperaturen über einen gewissen Zeitraum ihre reaktionskinetische Wirkung besonders effektiv ausüben. Damit bekommt man zumeist einen recht guten Überblick über die Bereiche, in denen Entfestigungs- oder/und Aushärtungsreaktionen stattfinden. Die reaktionskinetisch anisotherme Berechnung zur quantitativen Ermittlung der Werkstoffeffekte kann dadurch dennoch nicht ersetzt werden.

Da die Versuchsreihenfolge aus unterschiedlichen Gründen nicht immer ganz systematisch erfolgen muss, wie auch bereits Bild 12.1 vermuten lässt, kann es, um eine bessere Anschauung über den gesamten Versuchsbereich zu bekommen, hilfreich sein, wenn die Reihenfolge der Versuche bzw. Temperaturzyklen umsortiert wird. Als Kriterium hierfür kann z.B. eine Aktivierung oder deren Summe, nach aufsteigender Quantität sortiert, dienen. Damit berücksichtigt man, dass nicht Temperatur oder Zeit für sich genommen eine Werkstoffreaktion bewirken, sondern dass hier deren unitäre Betrachtung weit eher angemessen ist, womit die Größe „Aktivierung“ zum Maßstab der Ordnung avanciert. Hierfür sind Beispiele bereits in [MÜL 98, Kap. 3.3.2.2 Bilder 3.3-5 bis 3.3-7] gebracht worden. Allerdings findet auch diese Art der bildlichen Darstellung ihre Grenzen, nämlich dann, wenn das Modell mehr als zwei Reaktionsmechanismen bzw. Aktivierungen aufweist. Außerdem ist selbst im Falle, dass nur zwei Aktivierungen vorliegen, zu beachten, dass diese über die Temperatur-Zeit-Bedingungen miteinander gekoppelt sind und damit nicht unabhängig voneinander variiert werden dürfen. Damit zeigt sich, dass diese reaktionskinetischen Modelle i. allg. komplexer sind, als es die beschränkten Mittel der grafischen Darstellung zum Ausdruck zu bringen gestatten. Der Ausweg besteht dann darin, durch numerische Auswertung der Modellgleichungen in ausgewählten Bereichen von Temperatur-Zeit-Verläufen bzw. Aktivierungen jene Bedingungen einzugrenzen, die für eine technische Umsetzung die betreffenden Werkstoffeigenschaften garantieren.

13 Elektrisches Durchlauf-Widerstandsglühen – Ziehlühen

In der Arbeit [MÜL 98, Kap. 3.2] wird auf das direkt mit dem Drahtziehen gekoppelte thermische Entfestigen durch konduktive Kurzzeiterwärmung eingegangen. Dieses energetisch vorteilhafte Verfahren wird immer dann gern beim Ziehen von umwandlungsfreien und nicht aushärtenden NE-Werkstoffen angewendet, wenn der hochverfestigte Draht sein Umformvermögen weitgehend erschöpft hat und durch eine Zwischenglühung für weitere Umformstufen entfestigt werden muss. Oder aber der Draht wird im Durchlauf schlussgeglüht, um in einer bestimmten Festigkeitsstufe, z.B. weich, $\frac{1}{2}$ -hart oder $\frac{3}{4}$ -hart ausgeliefert werden zu können. Ebenso ist es natürlich auch möglich, einen zuvor entfestigend geglühten Draht auf Endfestigkeit zu ziehen. Die Aufgabe des Technologen besteht dann vorzugsweise darin, die Ziehfolgen bzw. Umformstufen, ausgehend vom Ausgangszustand (Festigkeit, Durchmesser), so aufzuteilen, dass der geforderte End- bzw. Fertigzustand hinsichtlich der mechanischen Eigenschaften und des Drahtdurchmessers möglichst ökonomisch erreicht wird. Hierbei sind zusätzlich gewisse durch Ausrüstung und Zustand der Zieh- und Wärmebehandlungsanlagen gegebene Restriktionen zu berücksichtigen. Insofern handelt es sich bei diesem direkt gekoppelten Problem zwischen Ver- und Entfestigung um eine komplexe Aufgabe der Fertigungsoptimierung.

Während sich der durch das Drahtziehen einstellende Verfestigungszustand relativ einfach auf der Grundlage der Werkstoffprüfung verfolgen lässt, ist das bei der thermisch aktivierten Entfestigung des Drahtes nicht ganz so einfach. Denn der durch das Drahtziehen herbeigeführte Kaltverfestigungszustand wird vollständig oder teilweise aufgehoben, indem man dem Werkstoff eine bestimmte Menge an thermischer Energie in Form eines geeigneten Temperatur-Zeit-Zyklus zuführt. Wie sich zeigen wird, lässt sich auch hier im Beispiel die bedingte Austauschbarkeit von Temperatur und Zeit durch den reaktionskinetischen Terminus der Aktivierung treffend charakterisieren. Nachfolgend sollen noch einmal die wichtigsten Bearbeitungsschritte - vom Rechengang bis hin zur Ergebnisdarstellung - im Überblick von experimenteller und numerischer Simulation angegeben werden.

Im vorliegenden Beispiel wurde einheitlich kaltverfestigter Zinnbronzedraht (CuSn6-Legierung) von 0,2mm Durchmesser unterschiedlichen thermischen

Entfestigungsglühungen unterzogen. In Anlehnung an die Verhältnisse in Durchlauf-Widerstands-Glühen wurden fünfzehn Kurzzeitversuche durchgeführt. Als Versuchsanlage diente eine sog. Labor-Blitzglühe (siehe **Anhang** zu Kap. 13). Als Temperatur-Zeit-Zyklen wurden trapezförmige Temperaturverläufe mit unterschiedlichen Haltezeiten realisiert. Die nahezu linearen Erwärmungsabschnitte, wie sie Bild 13.1 zeigt, konnten auf Grund des geringen Drahtdurchmessers messtechnisch nicht erfasst werden und sind deshalb jeweils aus der abgerufenen elektrischen Leistung berechnet worden. Dabei konnten die Temperaturverhältnisse infolge der sehr kurzen Erwärmungs- und Haltezeiten ($< \frac{1}{2}$ s) als adiabatische Näherung behandelt werden.

Realisiert wurden drei Versuchsgruppen zu je fünf Versuchen, wobei Aufheizzeiten von 0,2 und knapp 0,4 s und Haltezeiten von 0 s (Ausgangszustand), von ca. 0,15 s sowie von 0,35 s bei Maximaltemperaturen zwischen 570 und 750°C eingestellt worden waren. Die Aufheizgeschwindigkeiten lagen damit etwa zwischen 2000 und 3600 K/s, während die Abkühlrate, erzeugt durch Wasserschwallkühlung, dem Betrag nach noch um mindestens eine Zehnerpotenz größer war; damit hatte die Abkühlphase auf die thermische Entfestigung praktisch keinen messbaren Einfluss.

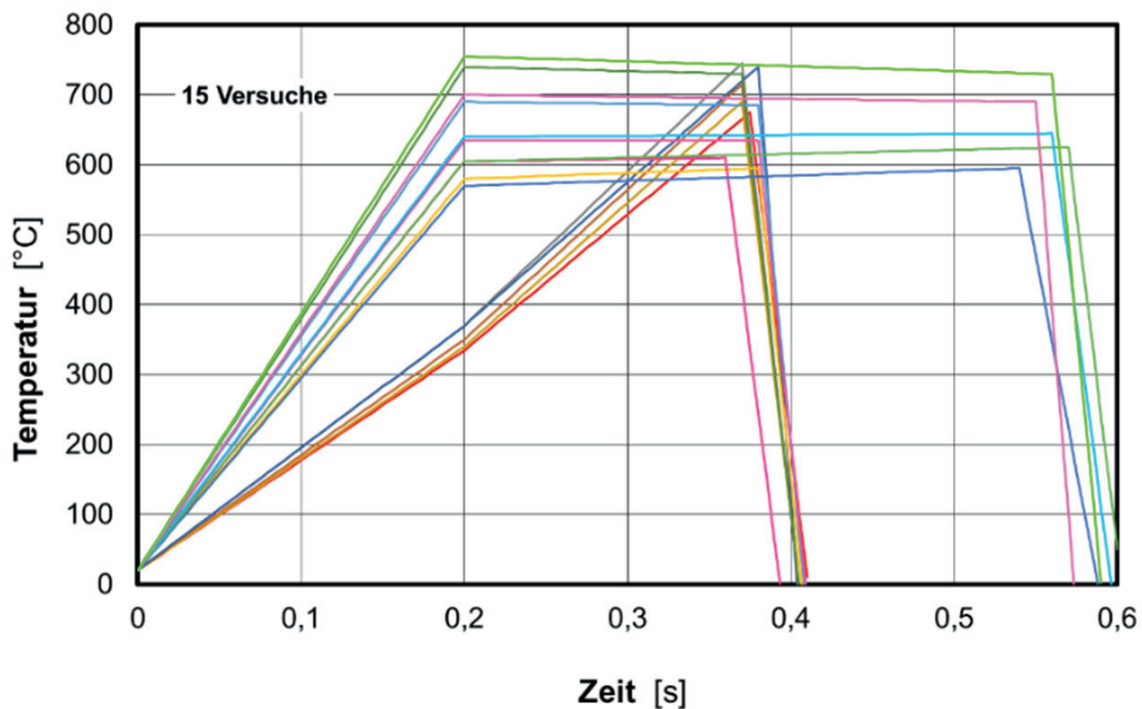


Bild 13.1: Temperatur-Zeit-Zyklen beim elektr. Widerstandsglühen von CuSn6-Draht (Draht- $\varnothing = 0,2$ mm)



Mit der folgenden Darstellung soll auf Basis der Software „MathCad“ überblicksartig gezeigt werden, welche Bearbeitungs- bzw. Berechnungsschritte auf Basis der MathCad-Syntax durchzuführen sind, um das reaktionskinetische Entfestigungsmodell quantitativ bestimmen zu können.

Der erste Bearbeitungsschritt besteht darin, eine Datenmatrix mit den Temperatur- und Werkstoffdaten (Zugfestigkeit, Bruchdehnung vor und nach Glühung) als Text (txt- bzw. prn-Datei) zu generieren.

ORIGIN := 1

data :=

D:\...Blitzglühen CuSn6_(mit Ausgangsdaten).prn

Nr := data (1)	t ₁ := data (2)	t ₂ := data (3)	t _g := data (4)	a ₀ := data (5)	a ₁ := data (6)	a ₂ := data (7)	a ₃ := data (8)	a ₄ := data (9)	a ₅ := data (10)	Rm := data (11)	A := data (12)
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1 1	1 0.2	1 0.375	1 0.41	1 20	1 1575	1 335	1 1942.9	1 675	1 -19000	1 454	1 33.3
2 2	2 0.2	2 0.37	2 0.405	2 20	2 1650	2 350	2 2147.1	2 715	2 -20500	2 435.7	2 44
3 3	3 0.2	3 0.37	3 0.405	3 20	3 1750	3 370	3 2205.9	3 745	3 -21500	3 422	3 48.7
4 4	4 0.2	4 0.37	4 0.405	4 20	4 1600	4 340	4 2058.8	4 690	4 -19667	4 451	4 38.3
5 5	5 0.2	5 0.38	5 0.405	5 20	5 1750	5 370	5 2055.6	5 740	5 -31000	5 422	5 47
6 6	6 0.2	6 0.37	6 0.405	6 20	6 3600	6 740	6 -58.8	6 730	6 -21000	6 402	6 62.3
7 7	7 0.2	7 0.38	7 0.41	7 20	7 3350	7 690	7 -27.8	7 685	7 -24250	7 423	7 58
8 8	8 0.2	8 0.38	8 0.41	8 20	8 3075	8 635	8 0	8 635	8 -21750	8 457	8 51.3
9 9	9 0.2	9 0.36	9 0.395	9 20	9 2925	9 605	9 31.3	9 610	9 -18214	9 477	9 47.7
10 10	10 0.2	10 0.38	10 0.41	10 20	10 2800	10 580	10 83.3	10 595	10 -22250	10 490	10 43
11 11	11 0.2	11 0.54	11 0.59	11 20	11 2750	11 570	11 73.5	11 595	11 -12375	11 485	11 46.3
12 12	12 0.2	12 0.57	12 0.605	12 20	12 2925	12 605	12 54.1	12 625	12 -19167	12 465	12 50
13 13	13 0.2	13 0.56	13 0.6	13 20	13 3100	13 640	13 13.9	13 645	13 -17800	13 446	13 54.7
14 14	14 0.2	14 0.55	14 0.575	14 20	14 3400	14 700	14 -28.6	14 690	14 -29500	14 414	14 62
15 15	15 0.2	15 0.56	15 0.59	15 20	15 3675	15 755	15 -69.4	15 730	15 -24231	15 390.7	15 63.3
16 16	16 0	16 0	16 0	16 20	16 0	16 0	16 0	16 0	16 0	16 1150	16 2
17 17	17 100	17 100	17 100	17 20	17 0	17 0	17 0	17 0	17 0	17 1150	17 2

n := länge(Nr) = 17 i := 1..n $\theta(t, j) := \text{wenn}[t < t_1, a_0 + a_1 \cdot t, \text{wenn}[t < t_2, a_2 + a_3 \cdot (t - t_1), \text{wenn}[t < t_g, a_4 + a_5 \cdot (t - t_2), 20]]]$ Temperaturverläufe

Einen Überblick über die realisierten Temperaturverläufe einschließlich zweier „Kaltversuche“ (Ausgangswerte) sollte man sich anschließend verschaffen, wobei ggf. entstandene Fehler entdeckt und korrigiert werden.

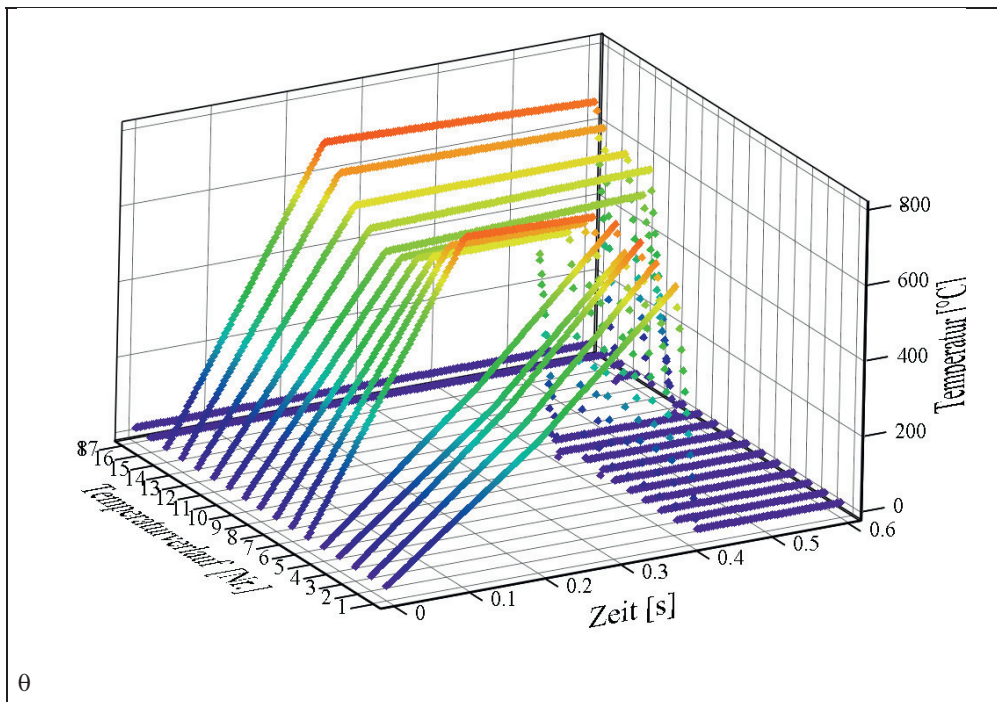
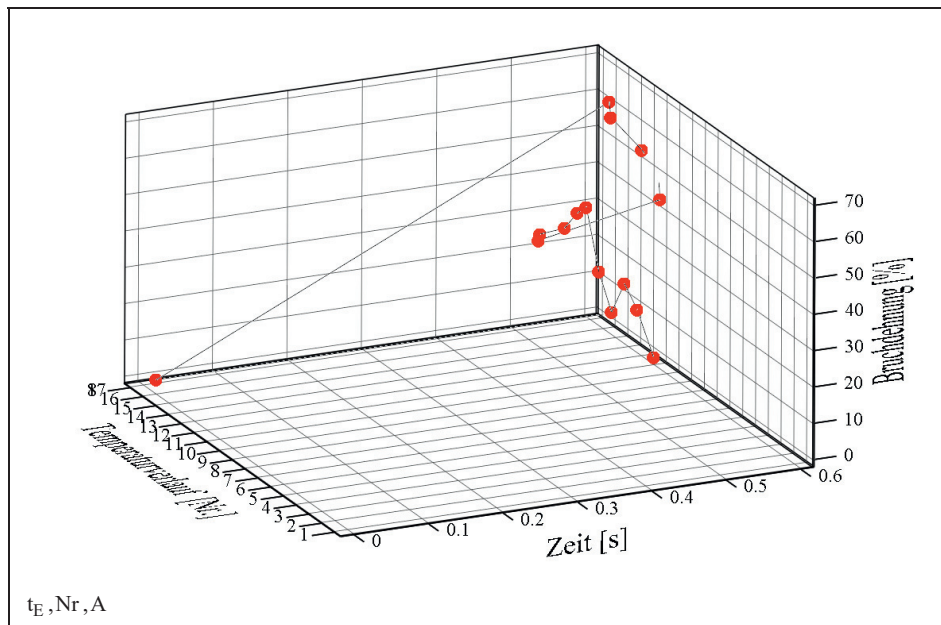


Bild 13.2: Temperatur-Zeit-Zyklen als MathCad-3D-Plot

Auch die Lage der Werkstoffprüfdaten (Bruchdehnung, Zugfestigkeit), wie sie nach der entfestigenden Kurzzeitglühung erhalten worden waren, lässt sich visuell überprüfen und einschätzen.



Nachdem die Datenlage kontrolliert wurde, folgt die Formulierung der Modellgleichungen. Hierbei zeigt MathCad seine nutzerfreundliche Stärke, die u.a. darin besteht, dass die Formeln in mathematisch gewohnter Schreibweise eingegeben werden können. Zu beachten ist, dass neben den Prozessparametern der Temperaturzyklen und der Zeit die numerisch erst noch zu ermittelnden reaktionskinetischen Parameter q , k , θ_B , Q (resp. Q_B) als Argumente der Modellfunktionen (hier für die Bruchdehnung) entsprechend benannt sind.

Aus Gründen der numerischen Genauigkeit kann es zweckmäßig oder sogar notwendig sein, das Aktivierungsintegral in mehrere Abschnitte zu zerlegen und als Summe der Teilintegrale zu berechnen; im Beispiel wurde das Aktivierungsintegral in $m = 9$ äquidistante Intervalle zerlegt.

Die numerische Integration lässt sich vermeiden, wenn von [MÜL 94, Kap. 3.2, Gl. (22.1-22.3)] Gebrauch gemacht wird. Der folgende MathCad-Block mit den Modellfunktionen sieht die numerische Integration vor.

In Vorbereitung der Parameterberechnung (Identifikation) der vier bzw. sechs reaktionskinetischen Parameter sind die Testgleichungen (Bestimmtheitsmaß, Standardabweichung) zur Beurteilung der Güte der Übereinstimmung von Modell- und Mess- bzw. Prüfwerten bereitzustellen.



Umdefinition der Temperaturverläufe: $\theta(t, t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) := \text{wenn}[t < t_1, a_0 + a_1 \cdot t, \text{wenn}[t < t_2, a_2 + a_3 \cdot (t - t_1), \text{wenn}[t < t_E, a_4 + a_5 \cdot (t - t_2), 20]]]$

Modellfunktionen - anisotherme Behandlung:

$R_{\infty} := 8.315$ (Universelle Gaskonstante)

$$I(t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, k, \theta_B, Q) := k \cdot \int_{t_0}^{t_E} \text{wenn} \left[\theta(\tau, t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) \leq \theta_B, 0, e^{\frac{-Q}{R \cdot (\theta(\tau, t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) - \theta_B)}} \right] d\tau$$

wird aus Gründen höherer numerischer Genauigkeit ersetzt durch die Summe von m Teilintegralen, hier mit 9 Intervallen: $m := 9$

$$I(t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, k, \theta_B, Q) := k \cdot \sum_{p=1}^m \int_{\frac{p-1}{m} \cdot (t_E - t_0) + t_0}^{\frac{p}{m} \cdot (t_E - t_0) + t_0} \text{wenn} \left[\theta(\tau, t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) \leq \theta_B, 0, e^{\frac{-Q}{R \cdot (\theta(\tau, t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) - \theta_B)}} \right] d\tau$$

Bruchdehnung: $A_B(t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) := A_{\min} + (A_{\max} - A_{\min}) \cdot \left[1 - e^{-\left(\frac{I(t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, k, \theta_B, Q)}{q} \right)^q} \right]$

Modellfehler bzw. Modell-Messwert-Korrelation:

Summe der Abweichungsquadrate: $SSE(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) := \sum_{i=1}^n (A_i - A_B(t_1, t_2, t_E, a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}))^2$ $n_x := 6$ (Anzahl der Parameter)

$$A_{\psi} := \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n A_i \quad \text{DOF} := n - n_x \quad \text{SSM} := \sum_{i=1}^n (A_i - A_{\psi})^2 \quad \text{MSE}(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) := \frac{SSE(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max})}{\text{DOF}}$$

Bestimmtheitsmaß $B = r^2$:

$$B(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) := 1 - \frac{SSE(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max})}{\text{SSM}}$$

korrigiertes Bestimmtheitsmaß $B_{\text{kor}} = r^2$:

$$B_{\text{kor}}(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) := 1 - \frac{n-1}{n-n_x-1} \cdot \frac{SSE(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max})}{\text{SSM}}$$

Standardabweichung S_e :

$$S_e(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) := \sqrt{\text{MSE}(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max})}$$

Damit sind die Voraussetzungen für die Berechnung der reaktionskinetischen Parameter geschaffen. Wie bei nichtlinearen Quadratmittelaufgaben generell, sind für die zu bestimmenden Parameter Schätzwerte vorzugeben. Der Lösungsblock mit der Funktion *Minfehl* minimiert die Summe der Abweichungsquadrate *SSE* nach *GAUß*, wobei als Minimierungsalgorithmen jene nach *LEVENBERG-MARQUARDT*, als konjugierte Gradienten oder, wie im Beispiel, als *Quasi-NEWTON* gewählt werden können. Mit grob geschätzten Parameter-Startwerten, die meist nur durch Probieren zu erhalten sind, ergibt sich für die gesuchten Parameter neben ähnlich guten numerischen Ergebnissen z.B. die folgende Lösung:

Parameter-Startwerte:					
$q := 1.5$	$k := 20$	$\theta_B := -273$	$Q := 9000$	$A_{\min} := \min(A) = 2$	$A_{\max} := \max(A) = 63.3$
r^2 vor Identifikation: $B(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) = 0.142$			Standardabw.: $S_e(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) = 20.1$		
Parameteridentifikation - Lösungsblock:					
Vorgabe $SSE(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) = 0$		$0 < A_{\min} < A_{\max} < 64$		$\theta_B \geq -273.15$	
$\begin{pmatrix} q \\ k \\ \theta_B \\ Q \\ A_{\min} \\ A_{\max} \end{pmatrix} := \text{Minfehl}(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max})$			Quasi-Newton		
berechnete Parameter:					
$q = 0.496$	$k = 3301$	$\theta_B = 244.8$	$Q = 20530$	$A_{\min} = 2.03$	$A_{\max} = 64$
r^2 nach Identifikation: $B(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) = 0.988$			Standardabw.: $S_e(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) = 2.4$		
r_{kor}^2 nach Identifikation: $B_{\text{kor}}(q, k, \theta_B, Q, A_{\min}, A_{\max}) = 0.981$					

(Zum korrigierten Bestimmtheitsmaß siehe z.B.

<https://de.wikipedia.org/wiki/Bestimmtheitsmaß>)

Das Ergebnis der Parameterberechnung hängt bei Aufgabenstellungen dieses Typs naturgemäß auch von den vorgegebenen Startparametern ab. Denn die Eigenart besteht u.a. darin, dass nicht nur ein Minimum von *SSE* existiert, sondern dass es stets eine größere Anzahl lokaler Minima gibt. Es lohnt sich also durchaus, die Startparameter zu variieren, um neue und bessere Minima zu lokalisieren. Vom Ehrgeiz allerdings, das tiefste, das globale Minimum zu finden, sollte man besser ablassen, denn das wird mit



Sicherheit einen zu hohen Zeit- und Rechenaufwand bedingen, ohne dass man sicher sein kann, das globale Minimum dann tatsächlich gefunden zu haben – vgl. [HOF 99, Kap. 2.2.1]. Dabei ist außerdem zu berücksichtigen, dass einerseits die eingeflossenen Mess- bzw. Prüfergebnisse empirischer Natur und damit stets mehr oder weniger fehlerbehaftet sind, und andererseits, dass auch das reaktionskinetische Modell auf Annahmen beruht, die z.T. nur Näherungscharakter beanspruchen können. Bestimmtheitsmaße r^2 etwa von $> 0,92$ bis $\leq 1,0$ dürfen i.allg. als akzeptabel bis hin zu sehr gut angesehen werden. Im Beispiel ist dieser Wert mit 0,988 (bzw. 0,981) ein Beleg dafür, dass das Modell eine gute oder sogar sehr gute Anpassung an die Messwerte besitzt und dass es damit diese entsprechend realistisch abbildet.

Damit lassen sich die Ergebnisse genauer betrachten, wobei die infolge der Parameterberechnung zunächst erforderliche schwerfällige Schreibweise der besseren Übersicht wegen jetzt verlassen werden kann. Die Modellgleichungen von oben schreiben sich damit kürzer als:

Ergebnisse: Versuche: $j := 1, 2.. 17$

Modellfunktionen:

Temperaturverläufe:

$$\theta(t, j) := \text{wenn}[t < t_{1j}, a_{0j} + a_{1j} \cdot t, \text{wenn}[t < t_{2j}, a_{2j} + a_{3j} \cdot (t - t_{1j}), \text{wenn}[t < t_{Ej}, a_{4j} + a_{5j} \cdot (t - t_{2j}), 20]]]$$

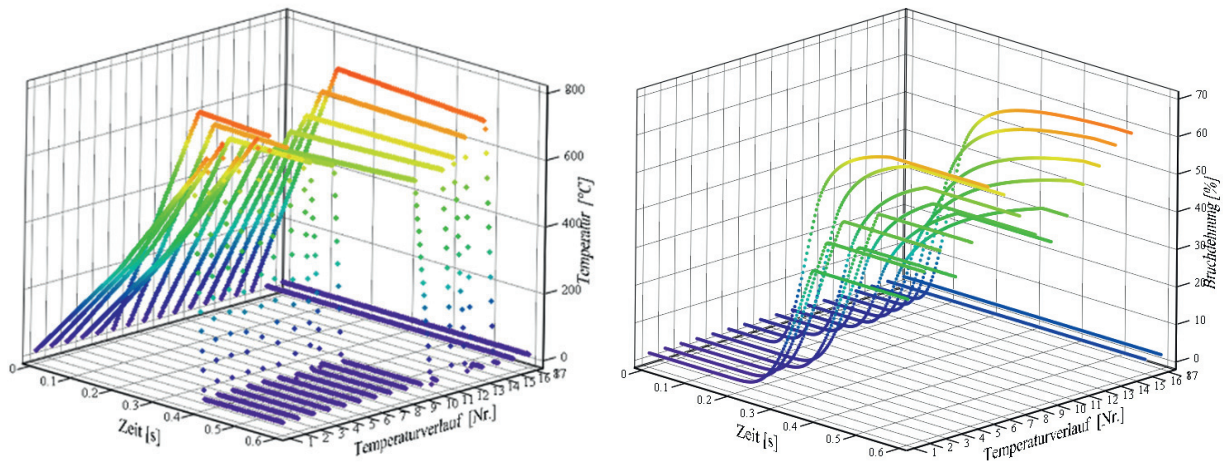
Aktivierungsintegral:
$$I(t, j) := k \cdot \int_{t_0}^t \text{wenn}[\theta(\tau, j) \leq \theta_B, 0, e^{\frac{-Q}{R \cdot (\theta(\tau, j) - \theta_B)}}] d\tau$$

ersetzt durch $m := 9$ Summanden bzw. Teilintegrale

$$I(t, j) := k \cdot \sum_{p=1}^m \int_{\frac{p-1}{m} \cdot (t-t_0) + t_0}^{\frac{p}{m} \cdot (t-t_0) + t_0} \text{wenn}[\theta(\tau, j) \leq \theta_B, 0, e^{\frac{-Q}{R \cdot (\theta(\tau, j) - \theta_B)}}] d\tau$$

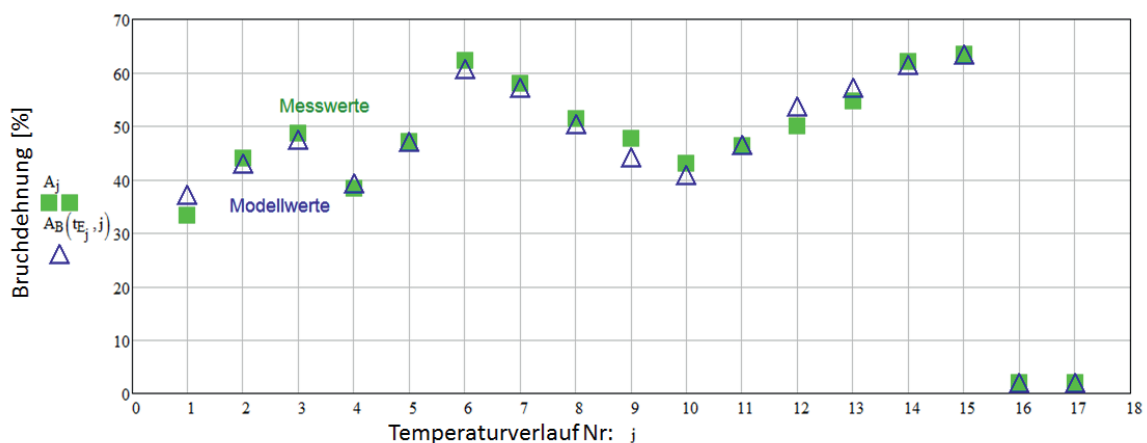
Bruchdehnung:
$$A_B(t, j) := A_{\min} + (A_{\max} - A_{\min}) \cdot \left[1 - e^{-\left(\frac{I(t, j)}{q}\right)^q} \right]$$

Die Kinetik der Bruchdehnung den Temperaturzyklen gegenübergestellt, zeigen für jeden Versuch (Temperaturverlauf) die folgenden beiden Grafiken:

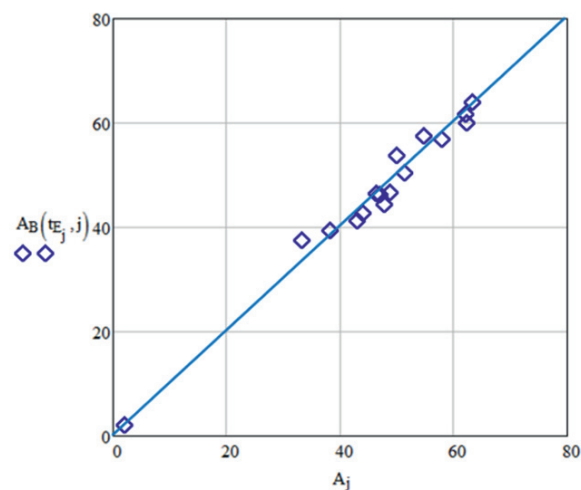


Es ist sehr schön zu sehen, wie sich die Temperatur-Zeit-Verläufe in der thermisch angestoßenen Entfestigungsreaktion unmittelbar widerspiegeln.

Die Abweichungen zwischen Mess- und Modellwerten je Versuch veranschaulicht die folgende Grafik.



Eine weitere Darstellung wird zur Beurteilung der Übereinstimmung von Mess- und Modellwerten ebenfalls gern herangezogen:

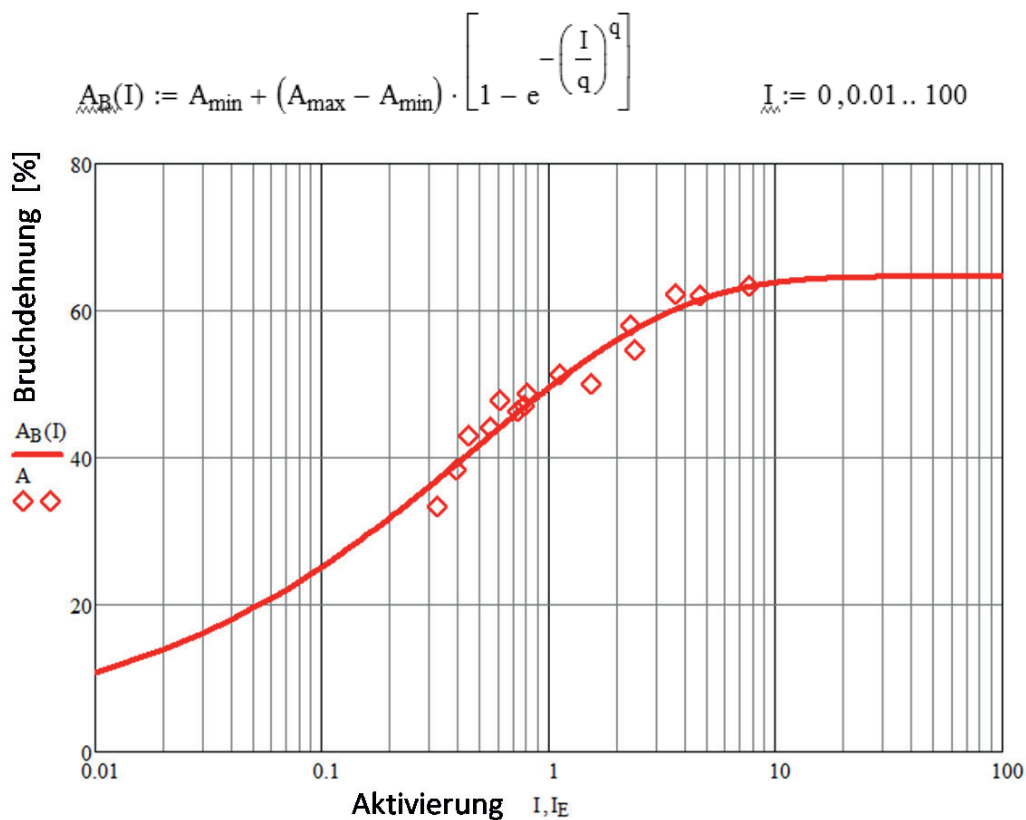




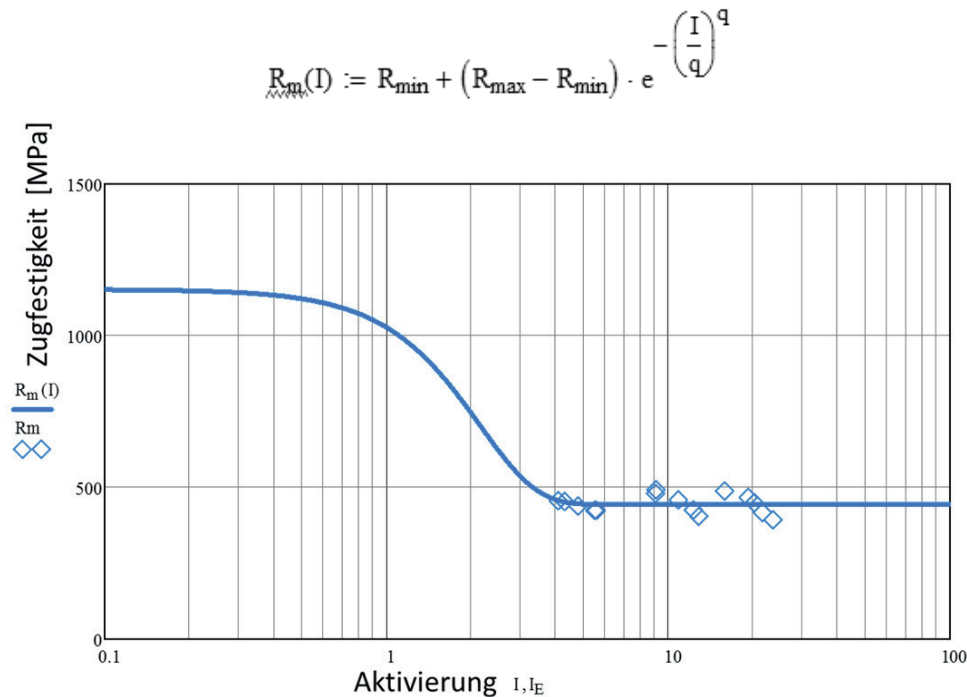
Insgesamt zeigt sich, dass Mess- und Modellwerte recht gut korrespondieren und damit das Modell, wie schon das Bestimmtheitsmaß vermittelte, als repräsentativ gelten kann.

Letztlich erhebt sich die Frage nach einer möglichst zweckmäßigen Darstellung des reaktionskinetischen Entfestigungsverhaltens. Dafür bietet sich hier besonders an, die Bruchdehnung über der Aktivierung aufzutragen. Diese Darstellung trägt insbesondere dem Umstand Rechnung, dass es weniger auf einen bestimmten Temperaturverlauf und eine konkrete Zeitdauer der Glühbehandlung ankommt, sondern nur darauf, dass ein bestimmter Entfestigungszustand einer Aktivierung eindeutig zuzuordnen ist, während die betreffende Aktivierung infolge der bedingten Austauschbarkeit von Temperatur und Zeit auf mannigfachen Pfaden der Wärmebehandlung zu erreichen ist.

Diese Darstellung weist bei logarithmischer Skalierung der Aktivierungsachse für die Bruchdehnung den bekannten sigmoidalen Verlauf auf. Der Plot der Mess- und Funktionswerte der Bruchdehnung ergibt damit die folgende Abhängigkeit.



Ebenso erhält man für die Zugfestigkeit die entsprechende Abhängigkeit, jetzt natürlich mit entsprechend anderen reaktionskinetischen Parametern.



Es zeigt sich, dass die Entfestigung hinsichtlich Bruchdehnung und Zugfestigkeit nicht gänzlich konform abläuft. Während die Bruchdehnung noch eine deutliche Differenzierung in Abhängigkeit von der Aktivierung erkennen lässt, zeigt die Zugfestigkeit, dass die Aktivierungen, die während der Versuche erzielt wurden, bereits ausgereicht haben, um praktisch eine vollständige Entfestigung zu bewirken. Dabei ist mangels Versuchen mit geringerer Aktivierung $I < 3$ der Verlauf dort als nicht gesichert anzusehen. Hierfür sollten genaugenommen einige wenige Versuche mit entsprechend geringerem Energieeintrag ergänzt werden.

Der Vorteil dieser Modellbetrachtung liegt nun auch darin, dass man jetzt, um einen bestimmten Entfestigungszustand einzustellen, nicht mehr an die konkreten thermischen Versuchsbedingungen gebunden ist, sondern mit dem Modell nahezu beliebige, jedoch solche Temperatur-Zeit-Kombinationen aufsuchen kann, die die zum gewünschten Entfestigungszustand entsprechende Aktivierung $I = I_{const}$ ergeben, d.h., es ist lediglich erforderlich, die Gleichung (2.3-1.2) für $I_X = I_{const}$ zu erfüllen. Damit wird es dem Verfahreningenieur möglich, aus dem Vorrat möglicher Temperaturverläufe jene herauszusuchen und zu favorisieren, die im technologischen Ablauf auf ggf. weitere Restriktionen, z.B. hinsichtlich der Ofenbauart oder aber energetischer Art, Rücksicht nehmen.



14 Eigenschaftsoptimierung von niedriglegierten Kupferlegierungen

Im Rahmen der Arbeit [ZIL 13] werden niedriglegierte Kupferbasislegierungen, insbesondere aus der Legierungsgruppe Kupfer-Magnesium, daraufhin untersucht, dass neben guter Verarbeitbarkeit die Bedingungen zur Anhebung solcher Eigenschaften, wie Festigkeit und elektrischer Leitfähigkeit ermittelt werden. Ein konkreter Anwendungsfall dieser Legierungen ist der Einsatz als Oberleitungs-Leitmaterial für elektrische Bahnen. Speziell die Legierung auf Kupfer-Magnesium-Basis ist an Hochgeschwindigkeitsstrecken, wo die dynamische Belastung besonders hoch ist, weltweit im Einsatz. Die Arbeit [ZIL 13], aus der hier zitiert wird, leistet einen Beitrag zur Optimierung und Weiterentwicklung der Legierungsgruppe Kupfer-Magnesium im Hinblick auf eine erhöhte Festigkeit bei gleichzeitig verbesserter el. Leitfähigkeit.

Während sich mittels Umformung mit wachsendem Umformgrad die Festigkeit durch Versetzungsbildung erheblich steigern lässt, sinkt in etwa demselben Maße die elektrische Leitfähigkeit. Das ist im vorliegenden Zusammenhang jedoch höchst unerwünscht. Deshalb wird ein anderer Weg beschritten, indem die Festigkeitssteigerung durch eine Ausscheidungshärtung vorgenommen wird, die den Vorzug aufweist, dass sich zugleich die elektrische Leitfähigkeit verbessert. Den Beitrag, den in diesem Zusammenhang die statische Rekristallisation durch Kornfeinung und Aushärtung beisteuert, zeigt sich hier mit der reaktionskinetischen Modellierung der Legierung CuMg_{2,5}. Voruntersuchungen hatten das folgende Umform- und Wärmebehandlungsschema nahegelegt.

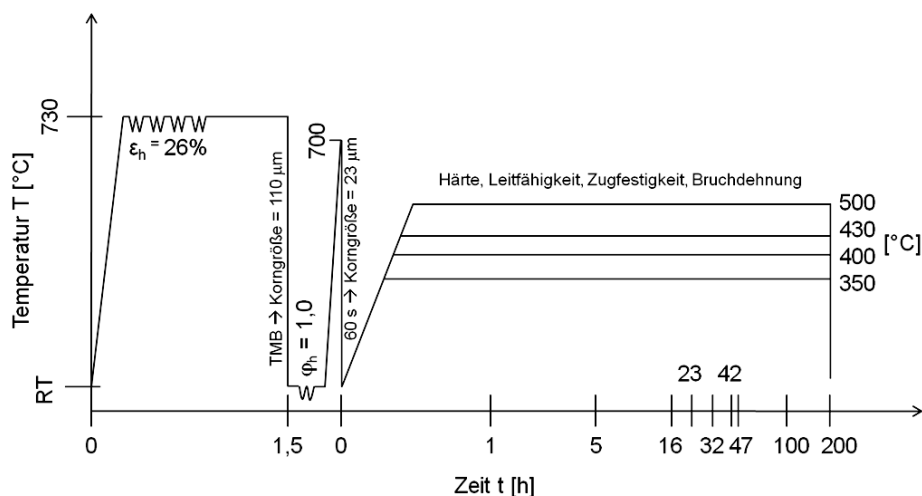


Bild 14.1: Temperatur-Zeit-Verhältnisse während der statischen Rekristallisation (rechts, schematisch)

Die Wärmebehandlung der Proben erfolgte experimentell im Bereich bei Zeiten von 1 bis fast 200 Stunden und Temperaturen von 350 – 500°C. Die Werkstoffprüfung ermittelte anschließend die Werte hinsichtlich Zugfestigkeit, Bruchdehnung, Härte und el. Leitfähigkeit. Für diese Versuchsergebnisse erfolgte dann die reaktionskinetische Modellierung. Dabei wurden hier von vornherein die Anwärm- und Abkühlauern im Verhältnis zu den Haltezeiten vernachlässigt und der Vorgang damit vereinfacht als isotherm betrachtet. Zur Modellierung wurden nur zwei Modellterme verwendet, einer für rekristallisierende Entfestigung und ein zweiter zur Berücksichtigung der Ausscheidungshärtung (siehe Kapitel 2.4 sowie Tafel zu Kap. 2.4 im **Anhang**). Damit sind die Modellgleichungen für die Werkstoffeigenschaften Härte und Konduktivität von gleicher Bauart:

$$\gamma := \gamma_1 \cdot \left(1 - e^{-\left(\frac{I_1(t)}{q_1}\right)^{q_1}} \right) + \gamma_2 \cdot e^{-\left(\frac{I_2(t)}{q_2}\right)^{q_2}} \quad (14.1a)$$

mit den Aktivierungen

$$I_n(t) = k_n \cdot t \cdot e^{\frac{-Q_n}{\mathcal{R} \cdot (\vartheta - \vartheta_n)}} \quad \text{für } \vartheta - \vartheta_n > 0, \quad \text{sonst } 0, \quad n = 1 \vee 2. \quad (14.1b)$$

Die durch Minimierung des Abstands zwischen Mess- und Modellwerten nach GAUß quantifizierten zehn Modellparameter (je Werkstoffeigenschaft) wurden mit der Software TableCurve 3D berechnet und sind in [ZIL 13, Kap. 5.3.5.4] angegeben.

Für die Aussage, welche Temperatur-Zeit-Verhältnisse für hohe Festigkeit bei gleichzeitig hoher Konduktivität zu bevorzugen sind, lassen sich die mit (14.1) berechneten 3D-Grafiken vorteilhaft heranziehen. Insbesondere der Vergleich von Zugfestigkeit bzw. Härte mit der Konduktivität ist aufschlussreich (siehe Bilder 14.2). Man erkennt, dass durch die Ausscheidungsbildung die Temperatur-Zeitbereiche für das Ansteigen von Festigkeit und Konduktivität durch die Wärmebehandlung praktisch deckungsgleich verlaufen, wie es aus metallphysikalischen Überlegungen auch zu erwarten war. Es ist zu erkennen, dass sich auf diese Weise sowohl die Festigkeit als auch die el. Leitfähigkeit jeweils um etwa ein Drittel steigern lassen, was einen beträchtlichen Zuwachs bedeutet. Wie unmittelbar zu sehen ist, beginnen beide Größen nennenswert anzusteigen nach etwa zehn Stunden der Auslagerung im Temperaturbereich oberhalb von 350°C. Dieser Vorgang erreicht sein Maximum dann etwa nach 100 Stunden. Oberhalb

von 400°C verringert sich der Festigkeits- bzw. Leitfähigkeitszuwachs wieder infolge zunehmender Koagulation der Ausscheidungen.

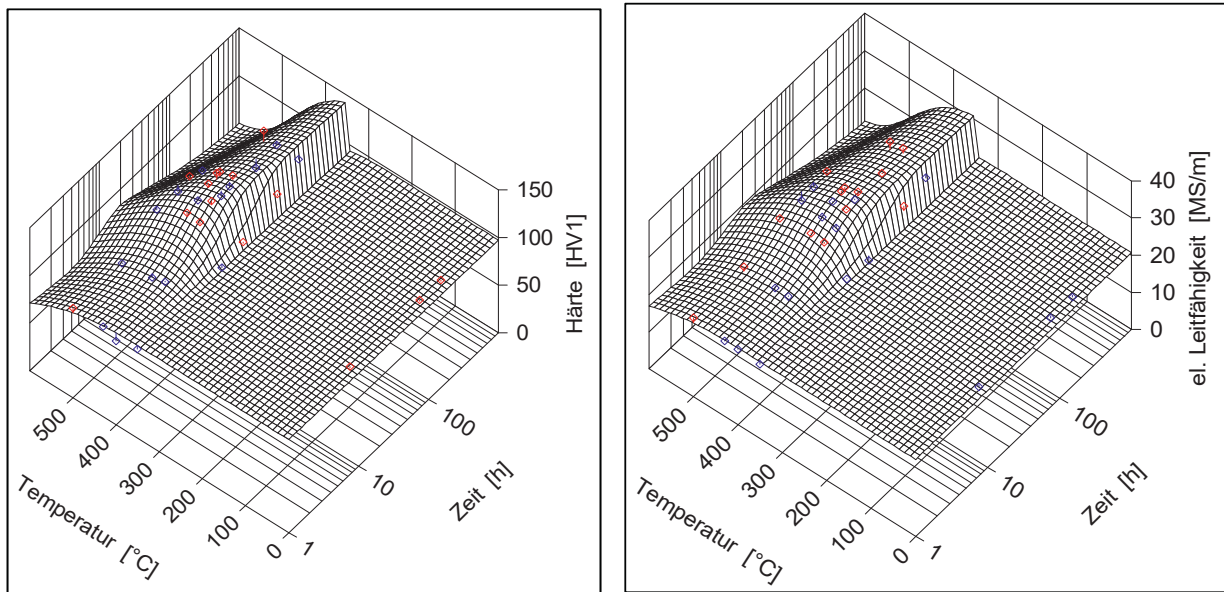


Bild 14.2: Temperatur-Zeit-Abhängigkeit von Härte (links) und Konduktivität

Insofern zeigen die reaktionskinetischen Modelle zu Festigkeit (Zugfestigkeit und Härte) einerseits und zu elektrischer Leitfähigkeit andererseits nicht nur rechnerisch, sondern ganz anschaulich und direkt, welche Temperatur-Zeit-Bedingungen zur Optimierung der betreffenden Eigenschaften einzustellen sind.

15 Innenhochdruckumformen von Kupfer und Simulation der thermisch aktivierten Entfestigung

Die reaktionskinetische Modellierung mit der halbempirischen bzw. semi-physikalischen Methode, wie sie in den verschiedenen Beispielen bisher gezeigt wurde, hat i. allg. zur stillschweigenden Voraussetzung, dass die Temperatur-Zeit-Verläufe, denen der Werkstoff ausgesetzt wird, hinreichend genau bekannt sind. In diesem Fall sind die Modelle „werkstofftreu“, d.h., eine Übertragung auf andere Temperatur-Zeit-Verhältnisse, als sie im Versuchsbereich vorgelegen hatten, ist prinzipiell möglich. Dabei ist klar, dass eine solche Extrapolation umso eher an Vertrauensgrenzen stößt, je enger der ursprüngliche Versuchsbereich im Verhältnis zum Extrapolationsbereich gezogen worden war. Für eine bildliche Darstellung sind die anisothermen Modelle nur bedingt geeignet, da es ja keine unmittelbaren Temperaturfixpunkte gibt. Immerhin lassen sich die bereits in Kapitel 13 angegebenen Möglichkeiten der Darstellung nutzen.

Sind bei einer wesentlich isothermen Wärmebehandlung die Zeiten des Aufwärmens bzw. Abkühlens im Vergleich zu denen des Haltens hinreichend kurz, so darf von vornherein mit den Modellgleichungen für isotherme Verhältnisse gerechnet werden, ohne damit einen merklichen Fehler zu machen. Die bildliche Darstellung der Reaktionsgröße (z.B. Entfestigung, Aushärtung) erfolgt dann direkt in Abhängigkeit der Wärmebehandlungsvariablen Temperatur und Zeit.

Es kann aber auch vorkommen, dass die Temperatur-Zeit-Verläufe, die der Werkstoff z.B. bei einem Durchlauf durch den Tunnel eines Mehrzonen-Kammerofens erfährt, nicht annähernd bekannt sind und im Ablauf der betrieblichen Praxis nicht oder nur sehr ungenau gemessen werden können. In diesen Fällen bleibt dann nur übrig, die Modellrechnung isotherm vorzunehmen und für die Betriebsversuche als Basis der Wärmebehandlungsverhältnisse die Ofentemperaturen und Durchlaufgeschwindigkeiten zu variieren. Dann allerdings sind die kinetischen Modelle nicht mehr werkstoffbezogen, sondern ausschließlich anlagengebunden zu verwenden. Die Möglichkeit der Extrapolation muss sich dann bestenfalls auf die konkrete Anlage beschränken, weshalb man nicht mehr von einem werkstofftreuen Modell, sondern nur noch von einem anlagen- bzw. verfahrensgewundenen Modell sprechen kann.



Dass sich auch unter solchen stark eingeschränkten Randbedingungen sinnvolle technologische Aussagen erzielen lassen, soll im folgenden Beispiel gezeigt werden, bei dem es im Zusammenhang mit dem Verfahren des Innenhochdruckumformens um entfestigende Zwischenglühungen von Kupferwerkstoffen für ein mittelständiges Unternehmen ging.

Da im vorliegenden Beispiel nur versuchsweise ganz wenige Temperaturmessungen mit Schleppelementen möglich waren, wurden zur reaktionskinetischen Modellierung stellvertretend die jeweils vorgegebenen konstanten Ofen-Maximaltemperaturen, im Bild 15.2 als Glühtemperaturen bezeichnet, und die Durchlauf- bzw. Glühzeiten vereinfachend herangezogen und zur Grundlage der nunmehr ausschließlich anlagenbezogenen Betrachtung gemacht. Die wenigen Temperaturaufzeichnungen zeigten immerhin, dass die Temperatur des Schleppelements selbst am Ofenausgang noch nicht annähernd die eingestellte Ofentemperatur erreicht hatte.

Als Reaktionsgröße in Abhängigkeit dieser Durchlaufglühungen diente hier die Berstdehnung, die im Nachgang an die Wärmebehandlung als relevante Eigenschaft der Innenhochdruckumformung auf einem speziellen Prüfstand ermittelt wurde. Einige Beispielbilder für geborstene Rohrproben zeigt Bild 15.1.

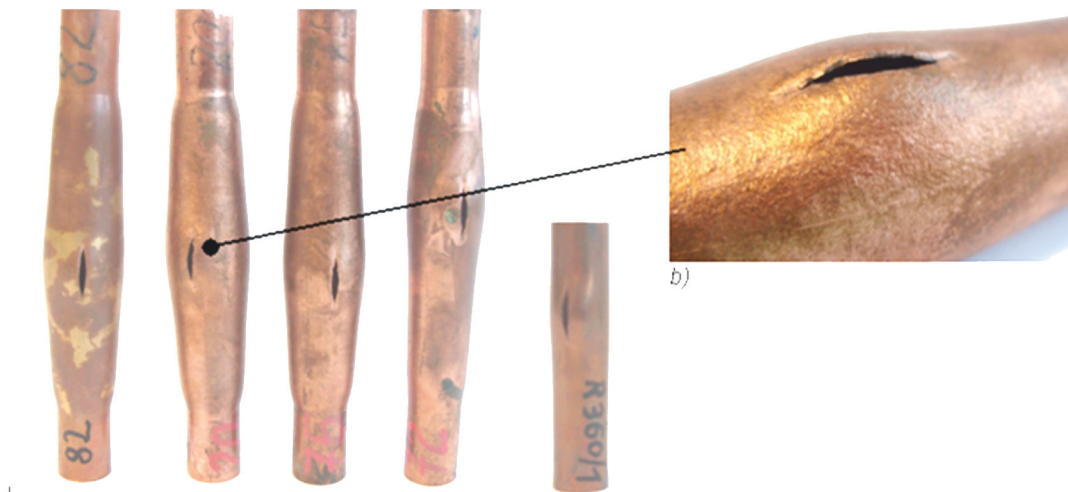


Bild 15.1: Berstproben nach der Prüfung

Im vorliegenden Fall wurden die ermittelten Berstdehnungen in Abhängigkeit von (Ofen-)temperatur und Glühzeit mit Ansatz (2.4-3) approximiert, aus den genannten Gründen jedoch als isotherme Betrachtung, d.h., für $\mathcal{G}(t) = \mathcal{G} = const.$, sowie reduziert auf zwei Aktivierungsmechanismen, d.h.

$m = 2$, $j = 1, 2$, mit den Aktivierungen $I_j(t) = k_{Bj} \cdot t \cdot e^{\frac{-Q_{Bj}}{R \cdot (9 - 9_{Bj})}}$ und mit den beiden Gewichten γ_1 und $\gamma_2 = 1 - \gamma_1$. Da sich der ε_{MAX} -Wert infolge ungenauer oder fehlender Messwerte häufig nicht eindeutig vorgeben lässt, kann man diesen Wert auch als zusätzlichen Parameter auffassen und in die Parameteridentifikation mit einbeziehen.

Die Darstellung mit Bild 15.2 ist jener in Bild 5.4 prinzipiell ähnlich, wenngleich im jetzigen Beispiel die Datenlage zu lückenhaft war, um neben den Bereichen von Rekristallisation und beginnendem Kornwachstum auch den vorgelagerten Bereich der Erholung abbilden zu können; hierfür wären offenbar noch ein paar Messergebnisse im Steilanstieg der Rekristallisation und knapp davor nötig gewesen.

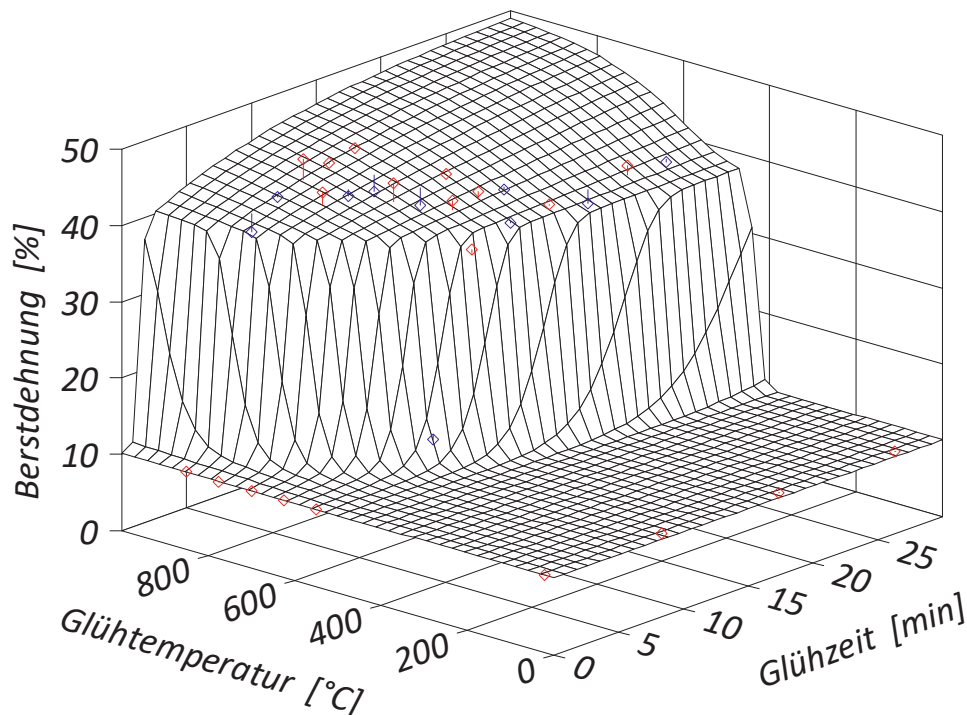


Bild 15.2: Berstdehnung nach Wärmebehandlung

Dennoch lässt sich dem Bild bereits entnehmen, welche Kombinationen von Glühzeit und Ofentemperatur (hier als Glühtemperatur bezeichnet) seitens der Technologie vorzugeben sind, damit gewünschte, d.h., i.allg. entsprechend hohe Entfestigungen bzw. Berstdehnungen erhalten werden, indem der technologische Spielraum, den die bedingte Austauschbarkeit von Temperatur und Zeit bietet, entsprechend ausgenutzt werden kann; die Notation der reaktionskinetischen Gleichung im Code der *TC3D-Software* siehe **Anhang**.

Resümee

Die vorangegangenen Ausführungen sollten zeigen, dass sich kinetische Aspekte von Wärmeleitung, Temperatúrausgleich, Diffusion und Materialeigenschaften auf weitgehend ähnlicher physikalischer Grundlage beschreiben lassen. Dabei wurde von Näherungslösungen der Wärmeleitungs- und Diffusionstheorie Gebrauch gemacht, indem die Ortsabhängigkeiten von Temperatur- und Diffusionsgradient als nachrangig bis vernachlässigbar angesehen wurden. Das ist stets dann gerechtfertigt, wenn die Körperabmessungen klein genug und die Wärmeleitfähigkeit bzw. die Teilchenbeweglichkeit hoch genug sind, so dass dann für das *BIOT*-Kriterium hinreichend kleine Werte in der Größenordnung von etwa unter 10^{-1} vorliegen. In diesen Fällen, in denen die Realität dieser Bedingung nahekommt, ist es nicht nur gestattet, sondern, wie gezeigt wurde, sehr sinnvoll, die einfacheren und anschaulicheren Modellbeziehungen zur Anwendung zu bringen.

Die in Kapitel 2 zu Diffusion und Reaktionskinetik zusammengestellten Modellansätze und die im Teil B gezeigten Anwendungen sollen wenigstens einen kleinen Ausschnitt aus einem sehr weiten Umfeld thermisch aktivierter Werkstoffbeeinflussung vermitteln. Dabei können die Modellabstraktionen der beschriebenen Art vor allem immer dann vorteilhaft eingesetzt werden, wenn eine metallphysikalisch tiefergehende Betrachtung nicht möglich oder zu aufwendig wäre. Auch wenn die Forschung in den Werkstoffwissenschaften fortwährend Fortschritte macht, indem die Modellbildung z.B. zunehmend auf der Grundlage der Werkstoff-Mikrostruktur erfolgt als *ab initio*-Modellierung (z.B. DFG-Sonderforschungsbereich 761), wird sich die vereinfachende reaktionskinetische Betrachtungsweise für viele ingenieurtechnische Fragestellungen generell wohl auch künftig vorteilhaft anwenden lassen. Dabei wird das reaktionskinetische Modell stets am konkreten Experiment ausgerichtet, mittels Parameteridentifikation quasi justiert. Und umgekehrt zeigt das Modell, in welchen Versuchsbereichen es zweckmäßig sein kann, weitere Versuche vorzusehen bzw. zu ergänzen. Insbesondere aber können solche Modelle aufzeigen, welche Verfahrenseinstellungen vorzunehmen sind, um z.B. gewünschte Werkstoffeigenschaften zielgerichtet anzusteuern und erhalten zu können.



Ein jeder reaktionskinetische Modellansatz mit den an das thermische Verfahren gebundenen konkreten Temperatur-Zeit-Verhältnissen sowie mit den auf experimenteller Basis ermittelten Parametern charakterisiert jeweils einen spezifischen Teilraum in einem wohl unerschöpflichen material- und werkstoffbezogenen „Kosmos“ mit einer grenzenlosen Vielfalt an Gestaltungsmöglichkeiten. Jedoch erst die wissenschaftliche Herangehensweise in Verbindung mit einer gezielt ingenieurmäßigen Einflussnahme lässt die gewünschten Werkstoffeigenschaften und ein optimiertes Materialdesign entstehen sowie den geeignetsten Entwicklungspfad dorthin erkennen.

Die Grundlagen der physikalisch-mathematischen Beschreibung sind bekannt. Dennoch ist der theoretische und experimentelle Aufwand zur Erforschung realer Systeme i. allg. recht hoch. Dabei bedienen sich Forschung und industrielle Anwendungen auf dem umfangreichen Gebiet der Werkstoffwissenschaften der Gesetze von Diffusion und thermisch aktivierter Reaktionskinetik jeweils mit dem Ziel, interessierende Werkstoffeigenschaften nach thermischer Beeinflussung quantitativ beschreiben und zielgerichtet beeinflussen zu können.

Erinnern wir uns nicht zuletzt auch bewundernd daran, dass unsere Umwelt, wir selbst und das gesamte Universum maßgeblich durch Prozesse der Diffusion beeinflusst, gestaltet, gesteuert, ja überhaupt erst ermöglicht werden. Insbesondere alle Lebensvorgänge sind ohne Wärmetransportvorgänge und diffusiven Stoffaustausch nicht möglich, auch wenn wir es kaum bewusst zur Kenntnis nehmen. Mindestens ebenso staunen dürfen wir darüber, dass sich diese universellen Vorgänge, die, wenn auch lokal und temporär eng begrenzt, zur Vermehrung der Entropie beitragen, immerhin näherungsweise bereits mit so vergleichsweise einfachen mathematischen Strukturen beschreiben lassen, wie es die sich dem Entropietod entgegenstellende selbstorganisierende biologische Materie herausgefunden zu haben glaubt.

Übrigens: Die Gesetzmäßigkeiten von Diffusions- und Ausgleichsvorgängen gelten phänomenologisch ähnlich auch im gesellschaftlichen Bereich. Werden diese Gesetze stark verletzt oder mutwillig außer Kraft gesetzt, indem gewisse Gruppen einseitig begünstigt und andere dafür umso deutlicher benachteiligt werden, so sind gesellschaftliche Konflikte, die sich dann oft eruptiv und schmerzlich entladen, nahezu unvermeidlich.

Quellen

- [ASK 96] Askeland, Donald R.: Materialwissenschaften
Spektrum Akademischer Verlag Berlin Oxford 1996
- [BAE 10] Baehr, H. D./Stephan, K.: Wärme- und Stoffübertragung.
Springer-Verlag Berlin·Heidelberg·NewYork 2010 (7. Aufl.)
- [BAN 66] Banga, U. H./Mesman, W.: Durchlauföfen für Stabmaterial.
Philips Techn. Rundschau 1966
- [CAR 59] Carslaw, H. S./Jaeger, J. C.: Conduction of heat in solids.
Oxford University Press 1959
- [GEG 77] Geguzin, Ja. E.: Grundzüge der Diffusion in Kristallen.
VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig 1977
- [GEG 05] Gegner, J.: Komplexe Diffusionsprozesse in Metallen.
Expert verlag, Renningen 2006
- [HAH 12] Hahn, D. W./Özisik, M. N.: Heat Conduction.
John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey 2012
- [HEI 51] Heiligenstaedt, W.: Wärmetechnische Berechnungen für Industrieöfen. Verl. Stahleisen, Düsseldorf 1951
- [HEU 92] Heumann, Th.: Diffusion in Metallen.
Springer-Verlag, Berlin 1992
- [HEY 12] Heyde, M.: Beschreibung der Gefüge- und Eigenschaftsveränderung von höchstfesten Stählen durch eine lokale Wärmebehandlung und die Auswirkung auf die Umformung.
Dissertation, TU Bergakademie Freiberg 2012
- [HOF 99] Hofmann, B.: Mathematik inverser Probleme.
B.G. Teubner Stuttgart u. Leipzig 1999
- [HOU 90] Hougardy, H. P.: Umwandlung und Gefüge unlegierter Stähle.
Verlag Stahleisen mbH, Düsseldorf 1990
- [JÄC 61] Jäckel, H.: Nichtlineare Theorie der Wärmeleitung in festen Körpern. *Wiss. Z. der Hochschule für Maschinenbau Karl-Marx-Stadt* **3**(1961)2, S. 23-40

- [JOS 72] Jost, W./Hauffe, K.: Diffusion – Methoden der Messung und Auswertung. Steinkopff-Verlag Darmstadt 1972 (2. Auflage)
- [KAM 61] Kamke, E.: Differentialgleichungen, Lösungsmethoden u. Lösungen. *Bd. I*, Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig 1961
- [KRÄ 07] Kräger, J.: Leipzig, Einstein, Diffusion. Leipziger Universitätsverlag GmbH 2007
- [MÜL 94] Müller, W.: Beitrag zur quantitativen Bewertung thermisch aktivierter Werkstoffreaktionen. *Z. Mat.-wiss. u. Werkstofftechnik* **25**(1994)8, S. 341-348
- [MÜL 98] Müller, W.: Temperaturverhältnisse und Reaktionskinetik beim Ziehen und Wärmebehandeln von Draht. Freiburger Forschungshefte B292, TU Bergakademie Freiberg 1998 (Vgl. auch korrigierten und vom Autor ergänzten Nachdruck 2014; *siehe Universitätsbibliothek der TU BAF oder Internet: [http://www.qucosa.de/recherche/frontdoor/?tx_slubopus4frontend\[id\]=urn:nbn:de:swb:105-4336622](http://www.qucosa.de/recherche/frontdoor/?tx_slubopus4frontend[id]=urn:nbn:de:swb:105-4336622)* bzw. [http://www.qucosa.de/fileadmin/data/qucosa/documents/12708/FFH%20B292%20\(13%2005%202014\).pdf](http://www.qucosa.de/fileadmin/data/qucosa/documents/12708/FFH%20B292%20(13%2005%202014).pdf))
- In diesem ergänzten Nachdruck wird auf den bereits in [MÜL 94] und [MÜL 98] genannten sehr engen Zusammenhang zwischen Diffusion und Reaktionskinetik explizit eingegangen, indem die zunächst für Platten-, Zylinder- und Kugelgeometrie hergeleiteten orts- und zeitabhängigen Diffusionsgleichungen vereinfachend auf diffusionstechnisch dünnwandige und damit ortsunabhängige Verhältnisse gemäß Gln. (3.3.1.1-47) reduziert werden.*
- [MÜL 00] Müller, W.: Zur Modellierung der Abkühlprozesse bei thermisch aktivierten Umwandlungs- und Ausscheidungsvorgängen. In: Freiburger Forschungshefte B 306, TU Bergakademie Freiberg 2000
- [MÜL 05] Müller, W./Kawalla, R.: Zu Stand, Perspektiven und Grenzen bei der Simulation und Modellierung der Phasenumwandlung von Stählen beim Abkühlen. In: Freiburger Forschungshefte B 332, TU Bergakademie Freiberg 2005



- [NÖL 62] Nölting, J.: Die Messung von Diffusionskoeffizienten in Festkörpern bei verschiedenen Temperaturen mit einem kontinuierlichen Verfahren nach der Methode der radioaktiven Oberfläche.
Z. f. Physik. Chemie, Neue Folge **32**(1962)S. 154-167
- [RAD 99] Radaj, D.: Schweißprozeßsimulation - Grundlagen und Anwendungen. Fachbuchreihe Schweißtechnik Band 141
DVS-Verlag GmbH, Düsseldorf 1999
- [SCH 91] Schmidt, R.: Ausscheidungsphänomene in Werkstoffen.
DVG Leipzig 1991
- [SCH 01] <https://www.stahlundseide.de/html/harten.html>
- [STE 87] Steinhardt u.a.: Grundlagen der Industrieofentechnik.
Verlag für Gundstoffindustrie Leipzig 1987,
- [TAO 81] Tao, L. N.: Heat conduction with nonlinear boundary condition. J. of Applied Mathematics and Physics (ZAMP) **32**(1981), S. 144-155
- [TAU 71] Tautz, H.: Wärmeleitung und Temperatúrausgleich.
Akademie-Verlag Berlin 1971
- [VDI 13] VDI-Wärmeatlas: Berechnungsunterlagen für Wärme- und Stoffübertragung. 11. Aufl., Springer-Verlag, 2013
- [YAN 13] Yanina, A.: Herstellung von TRIP-Matrix-Compositen auf der Basis unterschiedlicher Sinterverfahren und deren Vergleich. Dissertation, TU Bergakademie Freiberg 2013
Internet:
<http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:105-qucosa-124883>
- [ZEI 96] Zeidler, E. (Hrsg.): Teubner-Taschenbuch der Mathematik (2 Bände). B.G. Teubner Stuttgart·Leipzig 1996
- [ZIL 13] Zilly, A.: Beitrag zur Gefüge- und Eigenschaftsoptimierung von niedriglegierten Kupferbasislegierungen.
Freiberger Forschungshefte B 352,
TU Bergakademie Freiberg 2013



Anhang

Zu Kapitel 2: Diffusionsmodell und Reaktionskinetik

Analytische Berechnung einer Konzentrationsänderung in Abhängigkeit von Ort und Zeit infolge Diffusionsprozessen mit zeitabhängigem Diffusionskoeffizienten

Formulierung der Aufgabe am Beispiel einer Platte bzw. Lamelle:

Gesucht ist die zeitabhängige Konzentrationsverteilung

$$c(t,x) \text{ für } t \geq 0 \text{ und } 0 \leq x \leq L$$

- Diffusionsgleichung
(= 2. Ficksches Gesetz):

$$\frac{\partial c(t,x)}{\partial t} = D(t) \cdot \frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}$$

- Anfangsbedingung: $c(0,x) = c_A(x)$; $0 \leq x \leq L$

- Randbedingungen:

$$\frac{\partial c(t,0)}{\partial x} = k_0 \cdot c(t,0) \quad \text{bei } x = 0$$

$$\frac{\partial c(t,L)}{\partial x} = -k_L \cdot c(t,L) \quad \text{bei } x = L$$

Lösen des ARW-
Problems mit der
FOURIER'schen
Methode

W. Müller: Freiburger Forschungs-
hefte B 292, TU BAF 1998 u. 2014

Zu Kapitel 2: Diffusionsmodell und Reaktionskinetik (Forts.)

Zeitabhängigkeit der Diffusion in einem lamellenförmigen Partikel:

$$c(t,x) = \int_0^L \mathbf{g}(t,x,\xi) \cdot c_A(\xi) \cdot d\xi + \dots$$

$$\mathbf{g}(t,x,\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{X_n(x) \cdot X_n(\xi)}{\int_0^L X_n^2(\xi) \cdot d\xi} \cdot e^{-\left(\frac{v_n}{L}\right)^2 \int_0^t D(\zeta) \cdot d\zeta}$$

$$I(t) = \int_0^t D(\zeta) \cdot d\zeta$$

Diffusion in einem zylinder- bzw. faserförmigen Partikel:

$$c(t,r) = \int_0^R \mathbf{g}(t,r,\rho) \cdot c_A(\rho) \cdot d\rho + \dots$$

$$\mathbf{g}(t,r,\rho) = \rho \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\mu_n \frac{r}{R}\right) \cdot J_0\left(\mu_n \frac{\rho}{R}\right)}{\int_0^R \rho \cdot J_0^2\left(\mu_n \frac{\rho}{R}\right) \cdot d\rho} \cdot e^{-\left(\frac{\mu_n}{R}\right)^2 \int_0^t D(\zeta) \cdot d\zeta}$$

Diffusion in einem kugelförmigen bzw. globularen Partikel:

$$c(t,r) = \int_0^R \mathbf{g}(t,r,\rho) \cdot c_A(\rho) \cdot d\rho + \dots$$

$$\mathbf{g}(t,r,\rho) = \frac{\rho}{r} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left(v_n \frac{r}{R}\right) \cdot \sin\left(v_n \frac{\rho}{R}\right)}{\int_0^R \sin^2\left(v_n \frac{\rho}{R}\right) \cdot d\rho} \cdot e^{-\left(\frac{v_n}{R}\right)^2 \int_0^t D(\zeta) \cdot d\zeta}$$



Zu Kapitel 2.1: Zum *ARRHENIUS*-Ansatz

Der *ARRHENIUS*-Ansatz wird gemeinhin in der Form $k \cdot e^{\frac{-Q}{\mathcal{R} \cdot \Theta}}$ angegeben, wobei neben der universellen Gaskonstante \mathcal{R} und der absoluten bzw. thermodynamischen Temperatur Θ die beiden Parameter k (bzw. D_0 in (2.1-5a)) als sogen. Frequenz-, Mengen- oder schlicht als Vorfaktor und Q als Aktivierungsenergie enthalten sind. Die beiden Parameter sind jedoch nicht generell als Konstanten anzusehen. Denn sie hängen mehr oder weniger empfindlich von den konkreten Materialeigenschaften ab und sind damit insbesondere als orts-, konzentrations- und vor allem temperaturabhängige Größen anzusehen; vgl. [MÜL 98, Seite 81 bzw. *korr. Ausgabe 2014 S. 79*].

Im vorliegenden Zusammenhang werde die Temperaturabhängigkeit, die sich z.B. im Laufe von Wärmebehandlungsabläufen stark ändern kann, bevorzugt betrachtet. Dann nimmt der *ARRHENIUS*-Ansatz die Form

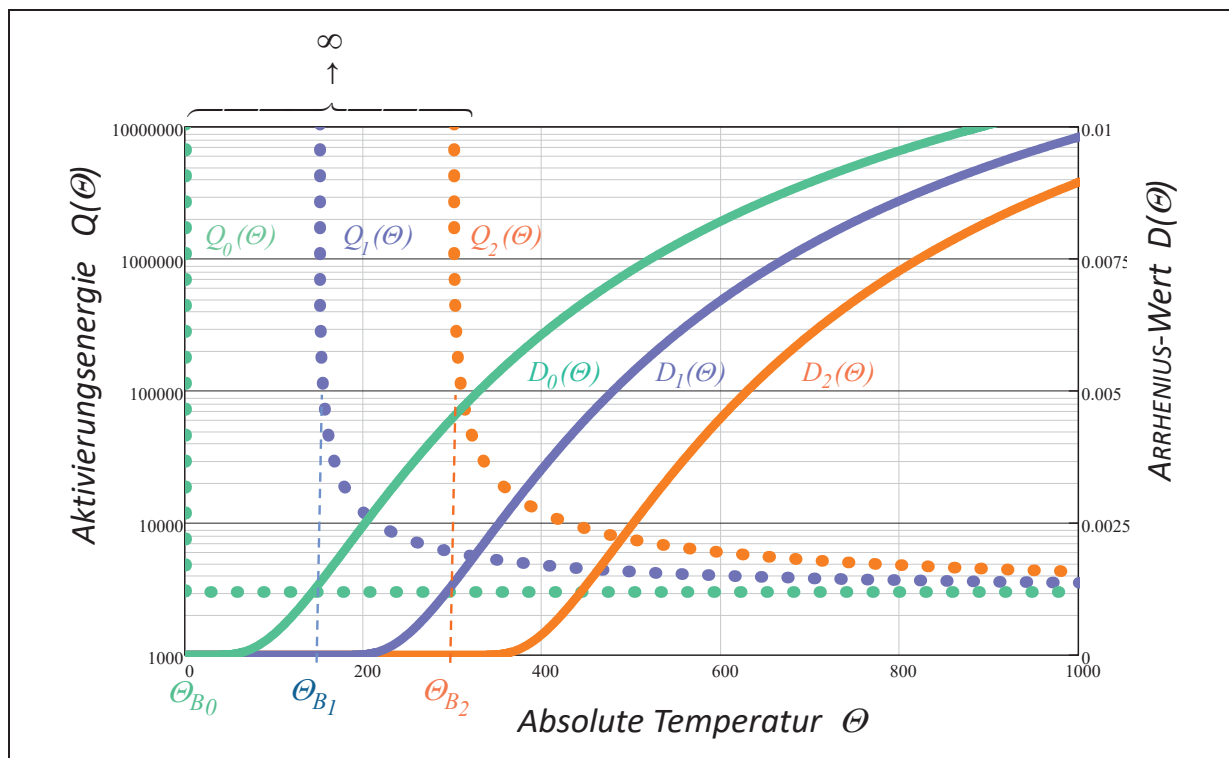
$D_0(\Theta) \cdot e^{\frac{-Q(\Theta)}{\mathcal{R} \cdot \Theta}}$ bzw. $k(\Theta) \cdot e^{\frac{-Q(\Theta)}{\mathcal{R} \cdot \Theta}}$ an, wobei D_0 bzw. k und insbesondere Q temperaturabhängige Parameterfunktionen sind. Dabei ist die Temperatur selbst, wie in technischen Prozessen überwiegend, keine Konstante, sondern eine zeitabhängige Funktion $\Theta = \Theta(t)$. Außerdem ist zu berücksichtigen, dass Rekristallisations- bzw. thermisch aktivierte Entfestigungsprozesse oder auch Phasenumwandlungen stets in mehr oder weniger eingeschränkten Temperaturbereichen ablaufen. So wird es statistisch immer unwahrscheinlicher, dass unterhalb gewisser Grenztemperaturen bzw. Energieschwellen kinetisch bedingte Werkstoffreaktionen überhaupt ablaufen können. Mit anderen Worten, unterhalb solcher Grenz- bzw. Bezugstemperaturen Θ_B strebt die erforderliche Aktivierungsenergie, bei der thermisch angestoßene Werkstoffreaktionen gerade noch stattfinden können, gegen Unendlich. Damit kommt dort jede Werkstoffreaktion zum Erliegen, und zwar bereits oberhalb des absoluten Temperaturnullpunkts bei $0 \text{ K} < \Theta \leq \Theta_B$ bzw. $-273,15 \text{ °C} < \vartheta \leq \vartheta_B$. Dieser Umstand lässt sich dadurch berücksichtigen, dass die Aktivierungsenergie durch einen Aus-

druck der Form
$$Q(\Theta) = \begin{cases} +\infty & \text{für } \Theta \leq \Theta_B \\ Q_B \cdot \frac{\Theta}{\Theta - \Theta_B} & \text{für } \Theta > \Theta_B \end{cases} \quad (*)$$

beschrieben wird. Die Bezugstemperatur selbst ist vom Werkstoff und dessen thermodynamischem Zustand abhängig und kann insofern alle

Werte $\Theta_B \geq 0\text{ K}$ bzw. $\vartheta_B \geq -273,15\text{ °C}$ annehmen. Berücksichtigt man noch, dass die Temperaturdifferenz $\Theta - \Theta_B$ auf der Celsiuskala mit $\vartheta - \vartheta_B$ unverändert gilt, so folgt aus der allgemeinen *ARRHENIUS*-Beziehung (2.1-5a) unmittelbar die modifizierte Form (2.1-5b) - und umgekehrt. Entsprechend ist eine Umrechnung der Aktivierungsenergien Q und Q_B bei der Temperatur Θ mit der Transformation (*) unmittelbar gegeben. Wie sich damit zugleich zeigt, sind die Beziehungen (2.1-5a) und (2.1-5b) mit der Aktivierungsenergie (*) nur zwei verschiedene, praktisch jedoch äquivalente mathematische Ausdrucksformen der Tatsache, dass gewisse Werkstoffreaktionen erst oberhalb einer Grenz- bzw. Bezugstemperatur $\Theta_B \geq 0\text{ K}$ bzw. $\vartheta_B \geq -273,15\text{ °C}$ ablaufen können.

Die temperaturabhängigen Funktionsverläufe von Aktivierungsenergie und *ARRHENIUS*-Funktion zeigt das folgende Bild exemplarisch (berechnet für $Q_B = 3000 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$, $\Theta_B = 0, 150, 300\text{ K}$, $k = 0,015\text{ s}^{-1}$ bzw. $D_0 = 0,015 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$).



Erst mit fallender Aktivierungsenergie bei Temperaturen $\Theta > \Theta_B$ ist die thermische Anregung groß genug, um Platzwechsellvorgänge in der Mikrostruktur des Werkstoffs und damit Diffusionsprozesse in Gang kommen zu lassen. Die Intensität der davon abhängenden Prozesse, wie z.B. jene der Rekristallisation, Entfestigung, Ausscheidung oder Umwandlung, wird



vom Wert der *ARRHENIUS*-Funktion bestimmt. Die typische Charakteristik des *ARRHENIUS*-Verlaufs bleibt auch für $\Theta > \Theta_B > 0$ erhalten.

Insgesamt sei hier daran erinnert, dass die Beschreibung von diffusionsbedingten Werkstoffreaktionen mit den Mitteln der Reaktionskinetik nur Näherungscharakter beanspruchen kann. Das trifft auch auf die hier getroffene Festlegung der *ARRHENIUS*-Funktion (2.1-5a) zu, die in den Beispielen jeweils durch einen konstanten Vorfaktor und eine temperaturabhängige Aktivierungsenergie (*) repräsentiert wird. Diese konkrete Form realisiert, wie ausgeführt, eine untere Temperaturschranke Θ_B bzw. \mathcal{G}_B , unterhalb der Werkstoffeigenschaften infolge zu geringer thermischer Anregung, phänomenologisch betrachtet, praktisch nicht mehr stattfinden können – siehe S. 13 unten. Das drückt auch der mit (2.1-5a) äquivalente Ansatz (2.1-5b) aus. Die Berechtigung für diesen heuristischen Ansatz liefert nicht zuletzt die mit den halbempirischen Modellen überwiegend deutlich geringere Abweichung zwischen Messwertbasis und Modellfehler gegenüber einem zunächst benutzten Ansatz mit konstanter Aktivierungsenergie. Das bestätigten immer wieder die numerischen Resultate zur Beschreibung ausgewählter Werkstoffeigenschaften.

Erwähnt sei jedoch, dass auch andere Festlegungen denkbar sind, bei denen z.B. auch der Vor- bzw. Mengenfaktor, wie bereits erwähnt, als temperaturabhängige Funktion eingeführt wird. So wird im Schrifttum angegeben, dass der Anlaufprozess am unteren Temperaturende, also bei $\Theta \geq \Theta_B \geq 0$, zu modifizieren sei dergestalt, dass der Vorfaktor einer temperaturabhängigen Potenzfunktion genügt

$$k(\Theta) = \begin{cases} 0 & \text{für } \Theta \leq \Theta_B \\ k_0 \cdot (\Theta - \Theta_B)^n & \text{für } \Theta > \Theta_B \end{cases}, \quad (**)$$

wobei der Exponent vorzugsweise in der Nähe von $n \sim 0,5$ zu finden sein sollte; auch hier wieder formuliert mit der Möglichkeit einer Parallelverschiebung um Θ_B . Abgesehen aber davon, dass mit n ein weiterer Parameter zu identifizieren ist, womit einerseits das numerische Quadratmittelpfadproblem einen zusätzlichen Freiheitsgrad erhält, andererseits aber auch eine zusätzliche Schätzung und damit höheren Rechenaufwand erfordert, wurde im vorliegenden Zusammenhang von dieser oder ähnlichen Modifikationen Abstand genommen. Generell sei daran erinnert, dass Modelle nicht die Wirklichkeit sind, sondern diese nur annähern können.

Zu Kapitel 2.4: Mehrphasenmodelle

Reaktionskinetische Modellgleichungen zur Beschreibung thermisch aktivierter Entfestigungs- und Aushärtungsvorgänge unter isothermen wie anisothermen Bedingungen $\vartheta = \vartheta(t)$

- Mehrphasenmodelle -

$$\text{Werkstoffeigenschaft} = \sum \text{Entfestigung} + \sum \text{Aushärtung}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{MIN} + (\boldsymbol{\sigma}_{MAX} - \boldsymbol{\sigma}_{MIN}) \cdot \left\{ \sum_{j=1}^{m_E} \gamma_j \cdot \mathbf{e} \cdot \left[-\left(\frac{I_j(t, \vartheta(t))}{q_j} \right)^{q_j} \right] + \sum_{j=1}^{m_A} \gamma_{m_E+j} \cdot (1 - \mathbf{e}) \cdot \left[-\left(\frac{I_{m_E+j}(t, \vartheta(t))}{q_{m_E+j}} \right)^{q_{m_E+j}} \right] \right\}$$

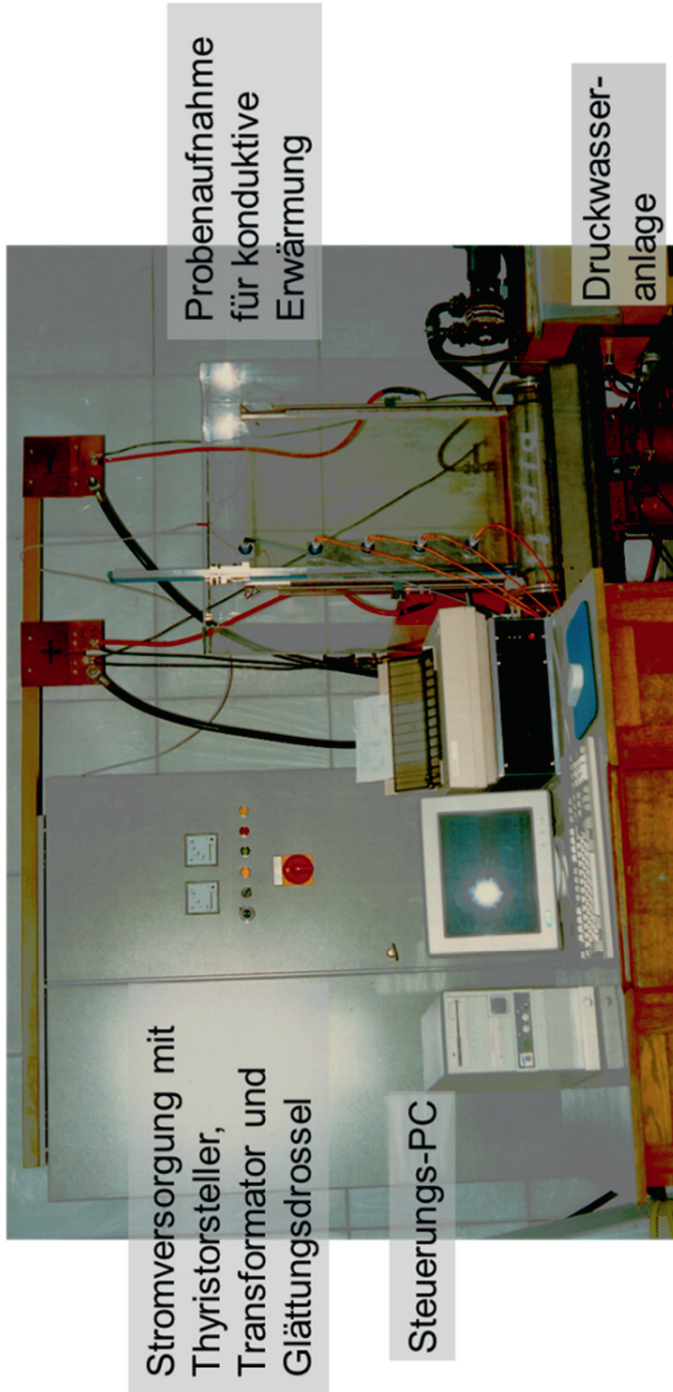
$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_{MIN} + (\boldsymbol{\varepsilon}_{MAX} - \boldsymbol{\varepsilon}_{MIN}) \cdot \left\{ \sum_{j=1}^{m_E} \gamma_j \cdot (1 - \mathbf{e}) \cdot \left[-\left(\frac{I_j(t, \vartheta(t))}{q_j} \right)^{q_j} \right] + \sum_{j=1}^{m_A} \gamma_{m_E+j} \cdot \mathbf{e} \cdot \left[-\left(\frac{I_{m_E+j}(t, \vartheta(t))}{q_{m_E+j}} \right)^{q_{m_E+j}} \right] \right\}$$

Aktivierungen:

$$I_j(t) = k_{Bj} \cdot \int_0^t \frac{e^{-Q_{Bj}/R \cdot (\vartheta(\tau) - \vartheta_{Bj})}}{\vartheta(\tau) - \vartheta_{Bj}} \cdot d\tau \quad \text{für } \vartheta > \vartheta_{Bj}, \text{ sonst } 0$$

Zu Kapitel 3.1 und Kap. 13: Phasenumwandlung und Wärmetönung

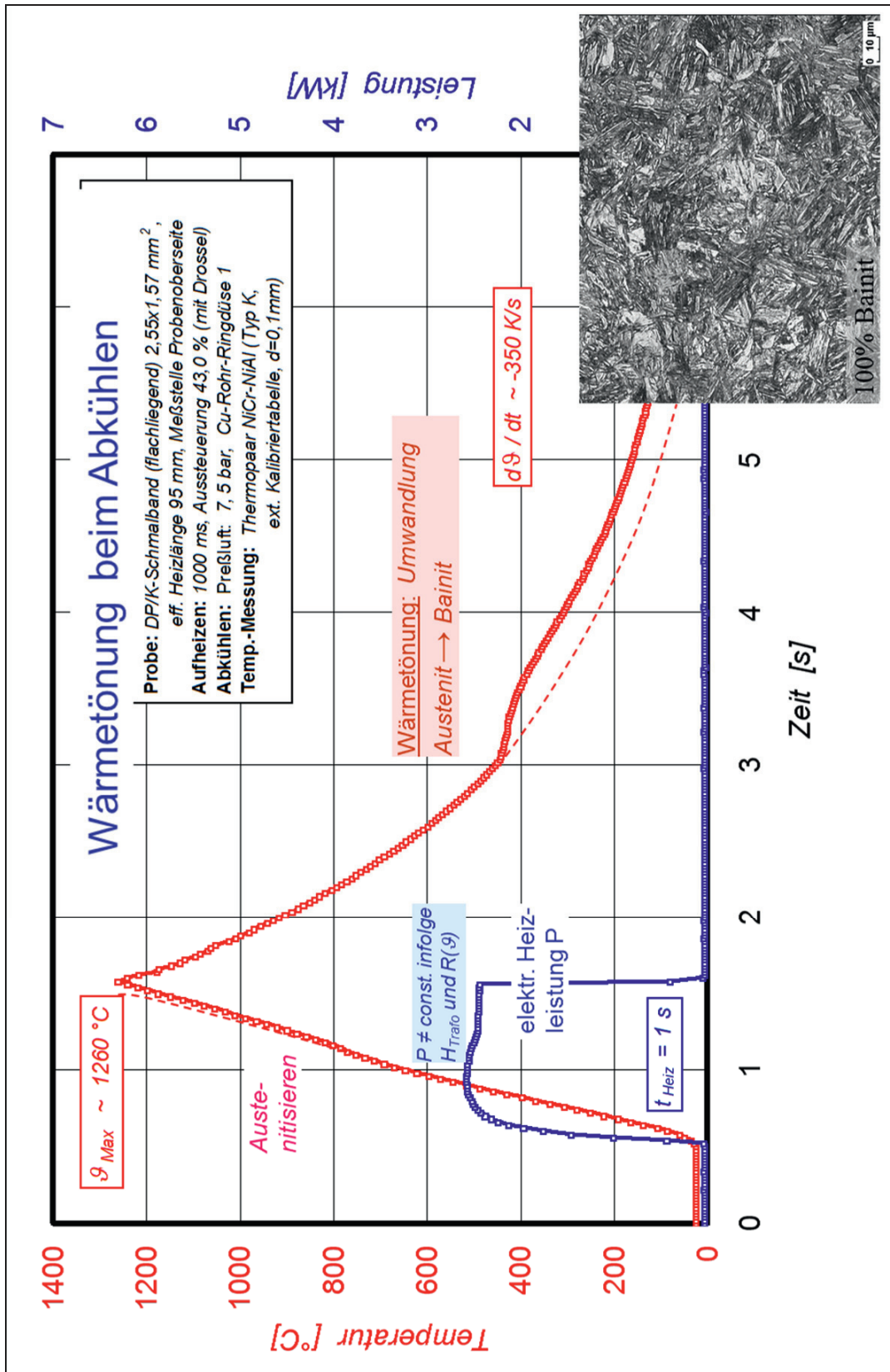
Schnellerwärmungsanlage für drahtförmige Proben



Technische Daten:

Elektrische Heizspannung:	$\leq 50 \text{ V}$
Elektrische Heizleistung:	$\leq 40 \text{ kW}$
Aufheizgeschwindigkeit:	$100 \dots 10000 \text{ K/s}$
Heizzeit:	$> 0,1 \text{ s}$
Probenquerschnitt:	$\sim 1 \dots 5 \text{ mm}^2$
Abkühlmedium:	Wasser, Druckgase (z.B. Luft, Helium)
Druckdüse:	Vollkegel, Flachstrahl, Ringform
Temperaturmessung:	NiCr-NiAl Thermoelement, Meßdraht- $\varnothing 0,1 \text{ mm}$

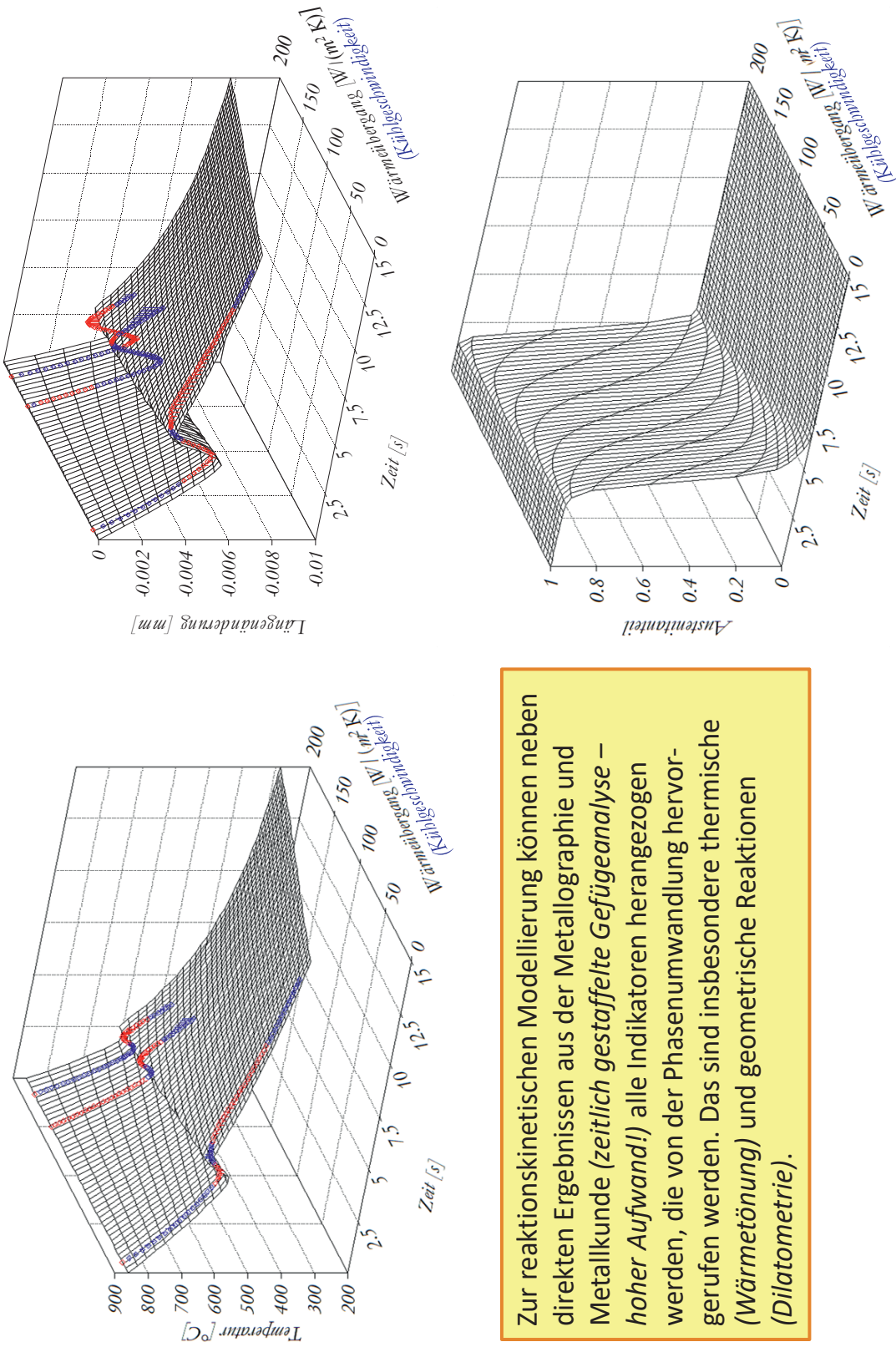
Zu Kapitel 3.1: Beispiel zur Schnellerwärmung





Zu Kapitel 3.3: Beispiel zu Längenänderung und Umwandlung beim Abkühlen von Stählen

Temperatur-Zeit- und Längenänderung-Zeit-Verlauf beim Abkühlen



Zur reaktionskinetischen Modellierung können neben direkten Ergebnissen aus der Metallographie und Metallkunde (*zeitlich gestaffelte Gefügeanalyse – hoher Aufwand!*) alle Indikatoren herangezogen werden, die von der Phasenumwandlung hervorgerufen werden. Das sind insbesondere thermische (*Wärmetönung*) und geometrische Reaktionen (*Dilatometrie*).

Zu Kapiteln 4, 10 und 11: Zum Oxid- bzw. Zunderschichtwachstum

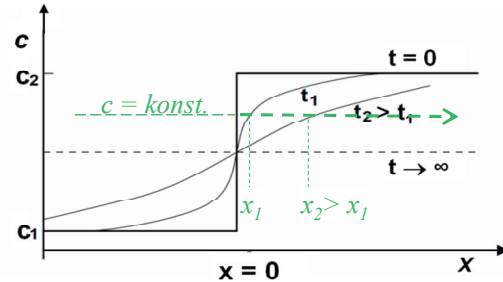
Es werde gefragt, bei welchen Abständen x und Zeiten t zweier sich bei $x = 0$ berührenden halbinendlichen Körper ($-\infty < x < \infty$) konstante Konzentrationen $c(t,x) = konst.$ vorliegen und welcher funktionale Zusammenhang zwischen Ort x und Zeit t diese Konzentrationskonstanz $x = x(t)|_{c=konst.}$ realisiert?

Das Konzentrationsfeld wird im isothermen Fall durch die Lösung

$$\frac{c(t,x) - c_1}{c_2 - c_1} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}}\right) \stackrel{!}{=} konst.$$

beschrieben. Das bedeutet, dass

$$x = x(t) \sim \sqrt{D \cdot t} \text{ gelten muss.}$$



Demnach wächst die Oxidschicht proportional der Quadratwurzel aus dem Produkt von Diffusionskoeffizient und Zeit, solange Diffusionsmechanismen bestimmend sind. Dieser Zusammenhang wird auch als parabolisches Wachstumsgesetz bezeichnet: $x^2 \sim D \cdot t$.

Mit der Anfangsbedingung $s(t=0) = s_0$ und der Annahme $s^2(t) - s_0^2 = D \cdot t$ ergibt sich für das Schichtdickenwachstum die Lösung:

$$\longrightarrow s(t) = \sqrt{s_0^2 + D \cdot t}$$

Oder reaktionskinetisch begründet und auf anisotherme Verhältnisse verall-

gemeinert - vgl. [MÜL 98, Kap. 3.3.1.2.2]: $s(t) = \sqrt[n]{s_0^n + I(t)}$

Andere Wachstumsformeln gehen bei der Herleitung nicht von der Schichtdicke, sondern vom Schichtdickenzuwachs $\Delta s = \Delta s(t) = s(t) - s_0$ aus:

Dann folgt aus dem Ansatz $\Delta s^2 = I(t)$

die Schichtdicken-Wachstumsformel $s(t) = s_0 + \sqrt{I(t)}$.

Eine weitere Annahme berücksichtigt, dass der Schichtdickenzuwachs Δs neben dem quadratischen Anteil auch einen linearen, der ggf. am Oxidationsbeginn auftritt, aufweist. Beide sind der thermischen Aktivierung I wiederum direkt proportional, d.h.

$$\Delta s^2 + 2k \cdot \Delta s = I(t).$$

Damit ergibt sich die Wachstumsformel $s(t) = s_0 + \sqrt{k^2 + I(t)} - k$

mit der Aktivierung $I(t) = \int_0^t D(\tau) \cdot d\tau$

und dem Diffusionskoeffizienten $D(t) = D_0 \cdot e^{-\frac{Q}{R \cdot (g(t) - g_B)}}$.

Wesentlich weiterführend siehe [GEG 05].



Zu den Kapiteln 5 und 9: Das Exponentialintegral

Definition:

$$Ei(-x) = - \int_x^{\infty} \frac{e^{-\xi}}{\xi} d\xi; \quad x \text{ reell}$$

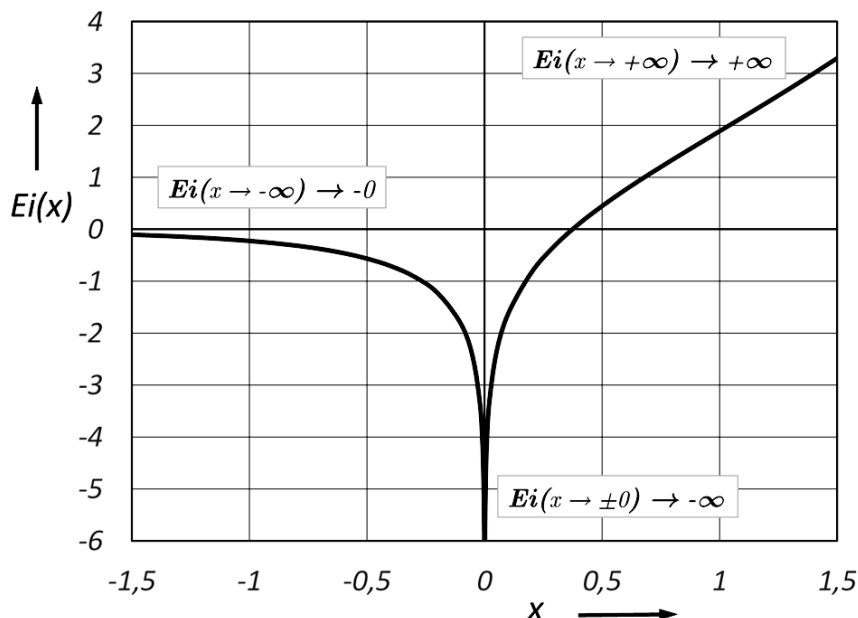
Daraus folgt:

$$Ei(x) = - \int_{-\infty}^x \frac{e^{-\xi}}{\xi} d\xi = \int_{\infty}^{-x} \frac{e^{-\xi}}{\xi} d\xi = \int_{-\infty}^x \frac{e^{+\xi}}{\xi} d\xi$$

Reihendarstellung: mit *EULER*'s Konstante $\gamma = e^C = 1,78107241799$

$$Ei(x) = \begin{cases} \ln|\gamma \cdot x| + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x^k}{k \cdot k!} & \text{für kleinere } |x| \\ \sim \frac{e^x}{x} \cdot \sum_{k=0}^N \frac{k!}{x^k} & \text{für größere und große } |x| \end{cases}$$

In der Mathematiksoftware MathCad ist diese Funktion implementiert und steht dort sowohl für algebraische als auch für numerische Berechnungen zur Verfügung; der Graph im Bereich um $x \sim 0$:



Ein entsprechendes Programm für die Taschencomputer HP48 oder HP50 für reelles Argument x in speicherplatzsparender umgekehrter polnischer Notation ist nachfolgend angegeben.

HP48/HP50-Programm 'Ei':CAS-Modes: *Numeric, Approx, Complex.*

```

<< → x
  << IF x →NUM TYPE 0 ==
    THEN RCLF -22 SF
      IF x ABS IF x 0 <
        THEN 8
        ELSE 14
        END <
      THEN 1 1 1 DO SWAP ROT 1 + SWAP OVER /
        x * DUP2 SWAP / 4 PICK +
        UNTIL 4 ROLL OVER ==
        END
        3 ROLLD DROP2 x * x ABS
        1.78107241799 * LN +
      ELSE IF x 1152 >
        THEN MAXR →NUM
        ELSE 0 1 1 DO SWAP ROT 1 + DUP2 *
          x / DUP 5 PICK +
          UNTIL OVER ABS 5 ROLL
          ABS > OVER 6 ROLL == OR
          END
          SWAP DUP x * 4 ROLL / 3 ROLLD
          - DUP ROT - + 2 / x EXP * x /
        END
      END
    SWAP STOF
  ELSE "Exponentialintegral :
      
$$Ei(x) = - \int_{-x}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt$$

      "
    GROB 131 64 00000... Pict31
  END
>>
>>

```

³¹ Das kurze Unterprogramm *Pict* steuert die Anzeige eines HP-Graphikobjekts *GROB*. Es zeigt bei Eingabe eines Fragezeichens den Funktionsgraphen in der Nähe von $x=0$. Das betreffende Graphikobjekt dazu ist allerdings zu umfangreich, um die Ziffernkolonnen hier wiederzugeben. Weitergabe der Programmsoftware auf Anfrage beim Autor.



Zu den Kapiteln 10 und 11: Das Fehlerintegral

Das normierte Fehlerintegral ist definiert durch

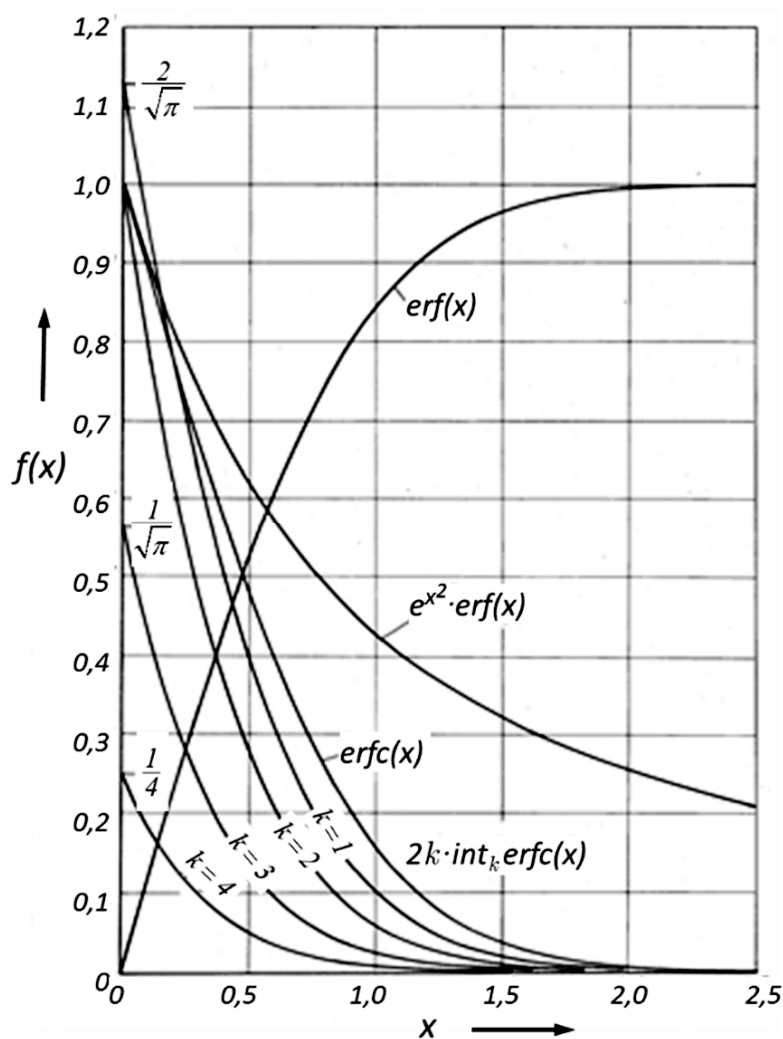
$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\xi^2} d\xi, \quad z = x + i \cdot y.$$

Das komplementäre Fehlerintegral ergibt sich damit zu:

$$\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty e^{-\xi^2} d\xi; \quad \operatorname{erfc}(-z) = 2 - \operatorname{erfc}(z).$$

Auch diese Funktionen stehen sowohl in der Software MathCad als auch als HP-Programmversion des Autors zur Verfügung: → nächste Seite.

Hier ein Ausschnitt der Funktionsverläufe dieser beiden Fehlerfunktionen (engl. *error functions*) für reelles Argument x bzw. $(x, 0)$ und davon abgeleiteter Funktionen – vgl. [TAU 71] und [MÜL 98, Kap. A2.3.2.8]:





HP48/HP50-Programm 'erfc' für reelles oder komplexes Argument

$z = x + i \cdot y$, Eingabe bei reellem Argument als x -Wert, bei komplexem Argument in der Form (x, y) ; CAS-Modes: *Numeric, Approx, Complex*.

```

<< → z << IF z →NUM TYPE DUP 0 == SWAP 1 == OR
      THEN IF z RE 0 ≥
        THEN z DUP SQ 2 * NEG → z v
          << IF z ABS 3 ≤
            THEN 1 1 1
              DO SWAP 2 + SWAP OVER /
                v NEG * ROT DUP2 +
              UNTIL DUP 5 ROLLD ==
              END
              DROP2 2 * π →NUM √ / z
              * z SQ EXP / 1 - NEG
            ELSE IF v ABS 1.E12 >
              THEN 1
              ELSE 1 1 1
                DO SWAP ROT 2 +
                  DUP2 * v / DUP 5
                  PICK +
                UNTIL OVER ABS 5
                  ROLL ABS >
                  OVER 6
                  ROLL == OR
                END
                SWAP DUP v * 4 ROLL
                / 3 ROLLD - DUP ROT
                - + 2 /
              END
              v / 1 + z / z SQ EXP /
              π →NUM √ /
            END
          >>
        ELSE 2 z NEG erfc -
        END
      ELSE CLLCD "Komplementäres Fehler-
        integral:

        erfc(z)=1-erf(z)

        z=x+i·y"
      1 DISP 3 FREEZE
    END
  >>
>>

```




Zu Kapiteln 10, 11: Transformation der Diffusionsgleichung

Die allermeisten Aufgaben der Wärmeleitungs- und Diffusionsgleichung wurden ausschließlich für zeitunabhängige Temperaturleitfähigkeit bzw. Diffusionskoeffizienten gelöst. Benötigt man dagegen die entsprechenden Ergebnisse für zeitabhängige Koeffizienten, so kann man sich auf die bekannten Lösungen für konstante Koeffizienten stützen, indem man sich folgender bei [JOS 72, Kap. 1.9] erwähnten Transformation bedient:

Die Dgl. $\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D(t) \cdot \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}$, $t > 0$, $D(t) \neq 0$ wird durch die Substitution $d\xi := D(t) \cdot dt$ (bzw. $\xi := \int_0^\xi D(t) \cdot dt$) in die koeffizientenfreie Form $\frac{\partial c(x,\xi)}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 c(x,\xi)}{\partial x^2}$ transformiert. Diese Dgl. besitzt die gleiche Gestalt wie jene ursprüngliche von oben, jetzt allerdings speziell für konstanten Koeffizienten $D(t) = 1$.

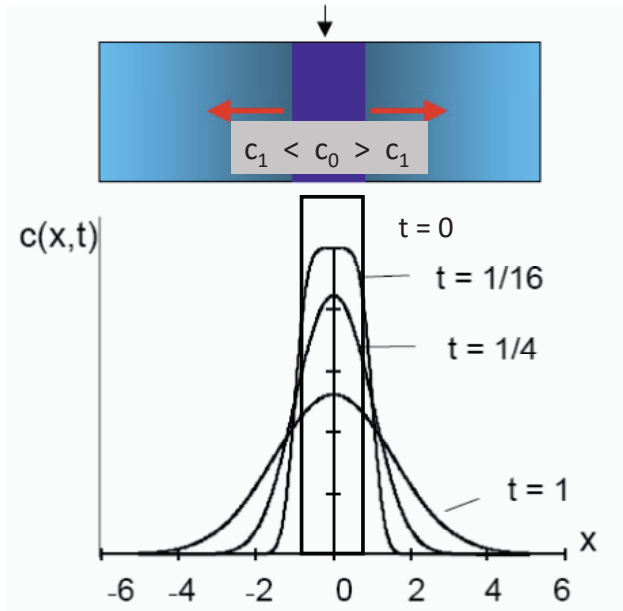
Besitzt man demzufolge hierfür (oder auch für $D = konst.$) bereits eine Lösung $c(x,\xi)$, so folgt die für zeitabhängigen Koeffizienten gesuchte Lösung durch Rücksubstitution mit $\xi := \int_0^t D(\tau) \cdot d\tau$. Die spezielle Lösung für konstanten Diffusionskoeffizienten, d.h., für $D = konst.$, ist dann mit $\xi := D \cdot \int_0^t d\tau = D \cdot t$ ebenfalls enthalten.

Zahlreiche Beispiele der voranstehenden Kapitel haben gezeigt, dass bei vielen Anwendungen die Prozessfunktion Temperatur auch näherungsweise besser nicht als konstant angesehen werden sollte, was bedeutet, dass der *ARRHENIUS*-Ansatz und damit auch der Diffusionskoeffizient bzw. die Aktivierungsgeschwindigkeit als zeitabhängig zu betrachten sind. Eine weitere Anwendung, bei der ein zeitabhängiger Diffusionskoeffizient eine Rolle spielt, wurde bereits in einer früheren Arbeit [NÖL 62] zur quantitativen Bestimmung von Diffusionskoeffizienten mitgeteilt.

Ein weiteres Beispiel zur Diffusion (siehe auch Überleitung zu Teil B)

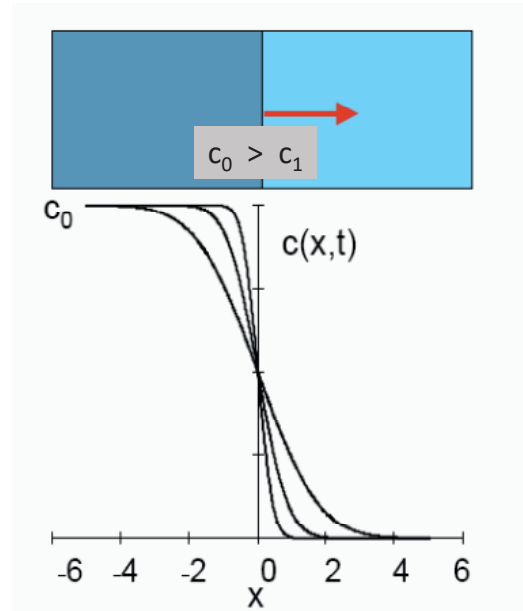
Diffusion unter anisothermen Bedingungen (zeitabhäng. Diff.-koeffizient):

Folie zwischen zwei Halbunendlichen Körpern



$$c(x,t) = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi \int_0^t D(\tau) \cdot d\tau}} \cdot e^{\frac{-x^2}{4 \int_0^t D(\tau) \cdot d\tau}}$$

Zwei sich berührende Halbunendliche Körper unterschiedlicher Konzentration



$$c(x,t) = \frac{c_0}{2} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\int_0^t D(\tau) \cdot d\tau}}\right)$$

Gezeichnet wurden die schematischen Graphiken für zeitunabhängige Diffusionskoeffizienten, während die Formeln den allgemeineren Fall zeitabhängiger Koeffizienten beschreiben. Hierfür kann z.B. wieder ein *ARRHENIUS*-Ansatz mit zeitabhängigem Temperaturverlauf stehen.



Zu Kapitel 15: Innenhochdruckumformen von Kupfer

Bei Berücksichtigung von zwei Aktivierungsmechanismen lautet der betreffende TC3D-Lösungsblock *mit den Funktionstermen*:

$$\begin{aligned}
 F1 &= IF(Y < \#C, 0, EXP(-\#D / (R * (Y - \#C)))) \\
 F2 &= IF(Y < \#G, 0, EXP(-\#H / (R * (Y - \#G)))) \\
 F3 &= 1 - EXP(-(\#B / \#A * X * F1) ^ \#A) \\
 F4 &= 1 - EXP(-(\#F / \#E * X * F2) ^ \#E) \\
 Z &= EPSMIN + (\#J - EPSMIN) * (\#I * F3 + (1 - \#I) * F4);
 \end{aligned}$$

die zu identifizierenden Parameter sind die mit Doppelkreuz versehenen Buchstaben von A bis J , die noch vor dem Lösungsblock zu vereinbaren sind ebenso wie die universelle Gaskonstante $R = 8.315$:

$$\begin{aligned}
 \#A &=: q_1, \quad \#B =: k_{B1}, \quad \#C =: \mathcal{G}_{B1}, \quad \#D =: Q_{B1}, \\
 \#E &=: q_2, \quad \#F =: k_{B2}, \quad \#G =: \mathcal{G}_{B2}, \quad \#H =: Q_{B2}, \quad \#I =: \gamma_1, \quad \#J =: \varepsilon_{MAX}
 \end{aligned}$$

Die Variable X bezeichnet die Zeit, während Y für die Temperatur und Z für die Dehnung stehen. Unter $EPSMIN$ ($= \varepsilon_{MIN}$) ist jener Berstdehnungswert zu verstehen, der im durch Umformung verfestigten Zustand vor der Glühung vorliegt.

Wie bereits allgemein ausgeführt, setzt die nichtlineare Parameteridentifikation prinzipiell, d.h. unabhängig von der verwendeten Software, die Kenntnis von Schätz- bzw. Näherungswerten - zumindest hinsichtlich der Größenordnung - für die Modellparameter vor Rechnungsbeginn voraus, hier also die mit vorangestelltem $\#$ gekennzeichneten Größen. Mittels mathematischer Minimierungsverfahren versucht dann der Solveralgorithmus des betreffenden Rechenprogramms durch geeignete Variation der numerischen Parameterwerte ein sogen. lokales Minimum anzusteuern bzw. durch entsprechende Anpassung zu finden. Die „Tiefe“ des Minimums - und damit der Modellfehler - hängt leider oft auch von den vorgegebenen Parameter-Startwerten ab. Es lohnt sich deshalb, mehrere Rechnungen mit variierten Startwerten durchzuführen, um eine möglichst gute Modellanpassung zu erreichen.



