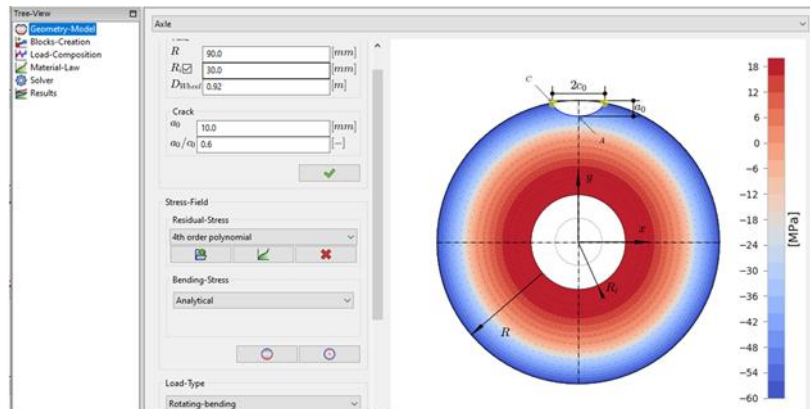


IC-MPPE / Integrated Computational Materials Process and Product Engineering

Programm: COMET – Competence Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET-Zentrum (K2)

Projekttyp: Multi-firm und strategische Projekte und MCL-interne Projekte



© Materials Center Leoben Forschung GmbH

INARA (Integrity Assessment for Railway Axles) beinhaltet ein analytisches Rissfortschrittsmodell für ein breites Anwendungsspektrum (z.B. schadenstolerante Auslegung oder prädiktive Instandhaltung von Eisenbahnwellen)

ENTWICKLUNG VON IC-MPPE RELEVANTEN SOFTWARE-TOOLS

INNOVATIVE SOFTWARELÖSUNGEN FÜR DIE MATERIAL-, PROZESS- UND PRODUKTENTWICKLUNG SIND IN INDUSTRIE UND WISSENSCHAFT ANERKANNT

Da die in Forschungsprojekten gewonnenen Ergebnisse oft in Form von Methoden, analytischen Lösungen, Programmcodes (Skripte) oder auch Tabellen vorliegen, ist eine Anwendung dieser Ergebnisse für Projektpartner oder Interessenten außerhalb der jeweiligen Projekte mitunter schwierig oder sogar nur mit vertieften Kenntnissen im entsprechenden Fachgebiet möglich. Aus diesem Grund hat sich das Materials Center Leoben (MCL) entschlossen, die Projektergebnisse verstärkt in verallgemeinerter Form in benutzerfreundliche Software-Tools zu integrieren. Diese Software-Tools arbeiten unabhängig von kommerziellen Programmpaketen und externen Programmbibliotheken von verschiedenen Anbietern.

Das MCL setzt damit verstärkt auf eine möglichst breite Verwertung von Forschungsergebnissen. Diese

Strategie trägt bereits erste Früchte, wie dies exemplarisch anhand von drei repräsentativen Software-Tools gezeigt werden soll. Diese Software-Tools sind auf Basis von Forschungsergebnissen aus mehreren firmenübergreifenden und strategischen COMET-Projekten sowie nachfolgenden internen Entwicklungsaktivitäten des MCL entstanden.

INARA - Integrity Assessment for Railway Axles

Basierend auf experimentellen Ergebnissen wurde ein Risswachstumsmodell entwickelt, das in der Lage ist, das Verhalten von halbelliptischen Rissen in Radsatzwellen auch bei nicht monotonen Belastungen (Kurvenfahrten, Bergauffahrten) vorherzusagen. Dieses Risswachstumsmodell wurde in das neue Softwaretool INARA (Integrity Assessment for Railway Axles) integriert, mit dem nun der Einfluss

SUCCESS STORY

von Lastfolgeeffekten auf die Rissausbreitung bewertet werden kann. INARA ist auch in der Lage, das Wachstum von Ermüdungsrissen unter benutzerdefinierter 2D-Spannungsverteilung in einem Eisenbahnwellenquerschnitt unter dem Einfluss von achsensymmetrischen Eigenspannungen vorherzusagen. Inzwischen wird INARA nicht nur von ehemaligen Projektpartnern genutzt, sondern ist auch an einige europäische Bahnbetreiber lizenziert worden - weitere Anfragen sind in Arbeit.

Neben Softwaretools für Produkte, wie am Beispiel der Radsatzwelle gezeigt, wurden auch Softwarelösungen für deutlich kleinere Maßstäbe entwickelt, nämlich Software für die Werkstoffentwicklung auf der atomaren Skala.

SEGROcalc – Grain boundary design tool

Mit SEGROcalc kann die Seigerung an Korngrenzen in Metallen berechnet werden, um grundlegende Rückschlüsse auf korngrenzendominierte Eigenschaften von Werkstoffen (Umformbarkeit, Festigkeit, Wasserstoffversprödung, Diffusion, Kornwachstum, Ausscheidungen und vieles mehr) zu ziehen. Die Software ermöglicht die Berechnung der zeitlichen Entwicklung der Konzentration von Legierungs- sowie Verunreinigungselementen an Korngrenzen in Abhängigkeit von der Temperatur und die daraus resultierenden Auswirkungen auf die Korngreneigenschaften. Dies ermöglicht nicht nur eine gezielte Design von Eigenschaften, sondern auch die computergestützte Auslegung von Wärmebehandlungen. Der zentrale Parameter, die Entmischungsenergie, wird aus einer Datenbank gewonnen, wobei Werte aus Experimenten, phänomenologischen Modellen oder aus hochpräziser atomistischer Modellierung zur Verfügung stehen.

Projektkoordination (Story)

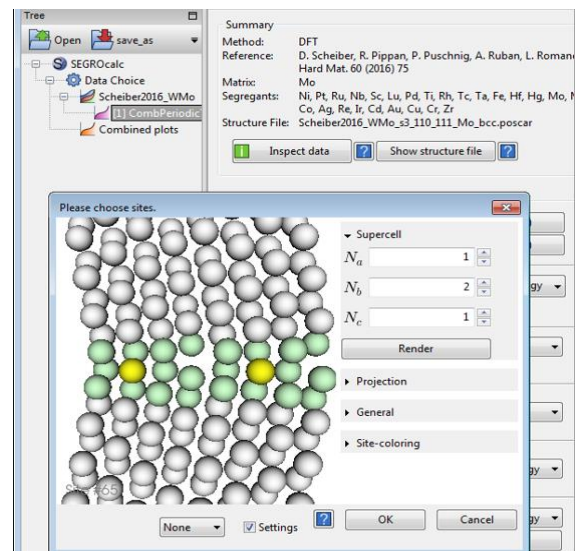
Dr. Jürgen Maierhofer
 Gruppenleiter Computational Product Reliability
 Department Simulation
 T +43 (0) 3842 45922 – 41
 Juergen.maierhofer@mcl.at

Projektpartner: An der Entwicklung der Software-Tools waren mehrere Wissenschafts- und Firmenpartner beteiligt.

Diese Success Story wurde von der Zentrumsleitung zur Veröffentlichung auf der FFG Website freigegeben. Weitere Informationen zu COMET: www.ffg.at/comet

GreenALM - High-throughput ab-initio solver

Mit GreenALM hat MCL einen hocheffizienten ab-initio-Solver für den speziellen Zweck der ab-initio-basierten Legierungsentwicklung mittels Berechnungen mit hohem Berechnungsdurchsatz entwickelt. GreenALM (Green's functions based Alloy Modeling) ist ein Software-Toolkit, das auf der Dichtefunktionaltheorie mit einem Greenschen Funktionen-Ansatz basiert. GreenALM ist besonders effizient und vielseitig für die Berechnung von chemisch und magnetisch komplexen Legierungen, einschließlich Mehrkomponenten-Legierungen und paramagnetischer Systeme. Darüber hinaus bietet GreenALM einen Workflow zur Berechnung der Thermodynamik von Legierungen.



© Materials Center Leoben Forschung GmbH, SEGROcalc

Demo-Versionen der drei beschriebenen Software-Tools sowie weitere Software-Lösungen finden Sie auf der MCL-Homepage (www.mlc.at/software).

Materials Center Leoben Forschung GmbH

COMET K2 Center IC-MPPE
 Roseggerstraße 12
 8700 Leoben
 T +43 (0) 3842 45922 – 0
 mclburo@mcl.at / www.mcl.at