



Luca Luberto

# **Entwicklung einer thermo- mechanischen Simulation des Laser Powder Bed Fusion Prozesses**

---

Herausgeber: Prof. Dr.-Ing. Kristin de Payrebrune  
Computational Physics in Engineering - Berichte  
Band 4 | 2025

**Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek**

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

**Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek**

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <https://dnb.dnb.de>.

**Computational Physics in Engineering - Berichte CPE**

Wissenschaftliche Schriftenreihe des  
Lehrstuhls Computational Physics in Engineering CPE  
der Rheinland-Pfälzischen Technischen Universität Kaiserslautern-Landau

Herausgeber: Lehrstuhl Computational Physics in Engineering CPE  
Prof. Dr.-Ing. Kristin de Payrebrune  
Postfach 3049  
Rheinland-Pfälzische Technische Universität Kaiserslautern-Landau  
67653 Kaiserslautern

Verfasser: Luca Luberto

Verlag: Rheinland-Pfälzische Technische Universität Kaiserslautern-Landau

Druck: Rheinland-Pfälzische Technische Universität Kaiserslautern-Landau  
Dezernat 5 Technik  
Abteilung 5.6 Foto-Repro-Druck

D-386

© Lehrstuhl Computational Physics in Engineering CPE, 2025  
Rheinland-Pfälzische Technische Universität Kaiserslautern-Landau  
Gottlieb-Daimler-Straße  
67663 Kaiserslautern

Alle Rechte vorbehalten, auch das des auszugsweisen Nachdrucks, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe (Photographie, Mikroskopie), der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und das der Übersetzung.

Als Manuskript gedruckt. Printed in Germany.

ISSN 2941-7066

# **Entwicklung einer thermo-mechanischen Simulation des Laser Powder Bed Fusion Prozesses**

Vom Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik  
der Rheinland-Pfälzischen Technischen Universität Kaiserslautern-Landau  
zur Verleihung des akademischen Grades

**Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)**

genehmigte

**Dissertation**

von  
Herrn  
Luca Luberto, M.Sc.  
aus Neunkirchen/Saar

|                                        |                                                                         |
|----------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|
| Dekan:                                 | Prof. Dr. Roland Ulber                                                  |
| Vorsitzender der Promotionskommission: | Prof. Dr.-Ing. Eberhard Kerscher                                        |
| Berichterstattende:                    | Prof. Dr.-Ing. Kristin M. de Payrebrune<br>Prof. Dr.-Ing. Jan C. Aurich |

|                             |            |
|-----------------------------|------------|
| Tag der mündlichen Prüfung: | 15.05.2025 |
|-----------------------------|------------|

D-386



# Zusammenfassung

*Laser Powder Bed Fusion*, im Deutschen als Laserstrahlschmelzen bezeichnet, ist ein additives Fertigungsverfahren zur Herstellung komplexer Bauteile. Dabei wird ein pulverförmiger Werkstoff schichtweise aufgetragen und mit Hilfe eines Lasers aufgeschmolzen. Durch den lokalen Lasereinsatz und die damit verbundene schnelle Abkühlung sowie die anschließende Wiedererwärmung können jedoch unerwünschte Eigenspannungen und Deformationen entstehen. Um diese zu vermeiden und gleichzeitig optimale Bauteileigenschaften sowie eine stabile Prozessführung zu gewährleisten, ist eine präzise Einstellung der Prozessparameter wie Laserleistung, Scangeschwindigkeit und Schichthöhe unerlässlich. Die Prozesssimulation stellt dabei eine effektive Methode zur Ermittlung der optimalen Parameter dar und spielt eine entscheidende Rolle bei der Sicherstellung der gewünschten Material- und Bauteileigenschaften. In der vorliegenden Arbeit wird ein Simulationsframework vorgestellt, das die thermo-mechanische Prozesssimulation auf Meso- und Makroskala mittels der Finite-Differenzen-Methode auf Grafikprozessoren ermöglicht. Das Simulationsframework wurde so entwickelt, dass das *Preprocessing* vollautomatisch allein auf Basis der Prozessparameter und des G-Codes durchgeführt wird. Dadurch wird der erhebliche Vorbereitungsaufwand, der bei herkömmlichen Programmen zur Simulation des Laserstrahlschmelzens erforderlich ist, deutlich reduziert. Neben der Modellierung und Implementierung umfasst die Arbeit auch die Validierung der Modelle mit experimentellen Daten sowie Parameterstudien, die zeigen, dass das entwickelte *Framework* eine solide Grundlage für zuverlässige Analysen bietet.



# Abstract

Laser powder bed fusion is an additive manufacturing process used for producing complex components. In this process, a powdered material is applied layer by layer and melted using a laser. However, due to the localized laser application and the associated rapid cooling and subsequent reheating, undesirable residual stresses and deformations can occur. To avoid these issues while ensuring optimal component properties and a stable process, precise adjustment of process parameters such as laser power, scanning speed, and layer thickness is essential. Process simulation serves as an effective method for determining the optimal parameters and plays a crucial role in ensuring the desired material and component properties. This work presents a simulation framework that enables thermo-mechanical process simulation at the meso- and macro-scale using the finite difference method on graphics processors. The simulation framework was developed to perform preprocessing fully automatically, based solely on process parameters and G-code. This significantly reduces the substantial preparation effort typically required by conventional programs for simulating laser beam melting. In addition to the modeling and implementation, the work also includes the validation of the models with experimental data as well as parameter studies, demonstrating that the developed framework provides a solid foundation for reliable analyses.



# Inhaltsverzeichnis

|                                                                           |             |
|---------------------------------------------------------------------------|-------------|
| <b>Zusammenfassung</b>                                                    | <b>iii</b>  |
| <b>Abstract</b>                                                           | <b>v</b>    |
| <b>Abkürzungen</b>                                                        | <b>xi</b>   |
| <b>Symbolverzeichnis</b>                                                  | <b>xiii</b> |
| <b>1 Einleitung</b>                                                       | <b>1</b>    |
| 1.1 Motivation . . . . .                                                  | 1           |
| 1.2 Ziele der Arbeit . . . . .                                            | 2           |
| 1.3 Aufbau der Arbeit . . . . .                                           | 3           |
| <b>2 Laser Powder Bed Fusion</b>                                          | <b>5</b>    |
| 2.1 Prozess des LPBF . . . . .                                            | 5           |
| 2.2 Defekte und Eigenspannungen . . . . .                                 | 7           |
| 2.3 Skalen und Simulation des LPBF . . . . .                              | 8           |
| 2.3.1 Detaillierte Mesoskalige Simulationsmodelle . . . . .               | 10          |
| 2.3.2 Einfache mesoskalige Simulationsmodelle . . . . .                   | 11          |
| 2.3.3 Makroskalige Simulationsmodelle . . . . .                           | 13          |
| 2.3.4 Prozesssimulation des LPBF mit Graphical Processing Units . . . . . | 15          |
| <b>3 LPBF Prozessmodell</b>                                               | <b>17</b>   |
| 3.1 Modellübersicht . . . . .                                             | 17          |
| 3.2 Thermisches Modell . . . . .                                          | 20          |
| 3.2.1 Mechanismen der Wärmeübertragung . . . . .                          | 20          |
| 3.2.2 Emissionsgrad des Pulverbetts . . . . .                             | 21          |
| 3.2.3 Effektive Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts . . . . .              | 22          |
| 3.2.4 Wärmequellen für mesoskalige Prozesssimulationen . . . . .          | 23          |
| 3.2.5 Wärmequellen für makroskalige Prozesssimulationen . . . . .         | 24          |
| 3.2.6 Wärmeleitungsgleichung . . . . .                                    | 26          |
| 3.3 Mechanisches Modell . . . . .                                         | 27          |
| 3.3.1 Verschiebungen und der linearisierte Dehnungstensor . . . . .       | 27          |
| 3.3.2 CAUCHY-Spannungstensor . . . . .                                    | 29          |
| 3.3.3 Gleichgewichtsbedingung . . . . .                                   | 30          |

|          |                                                                         |            |
|----------|-------------------------------------------------------------------------|------------|
| 3.3.4    | Elasto-Plastisches Materialgesetz . . . . .                             | 30         |
| 3.4      | Diskretisierung und Lösungen der Modellgleichungen . . . . .            | 34         |
| 3.4.1    | Finite-Differenzen-Methode . . . . .                                    | 35         |
| 3.4.2    | Größen im <i>Staggered Grid</i> . . . . .                               | 36         |
| 3.4.3    | Diskretisierung und Lösung des thermischen Modells . . . . .            | 37         |
| 3.4.4    | Diskretisierung und Lösung des mechanischen Modells . . . . .           | 41         |
| 3.4.5    | Elasto-plastische Berechnung mittels dynamischer Relaxation . . . . .   | 53         |
| 3.4.6    | Stabilitätsbedingungen der Modelle . . . . .                            | 54         |
| 3.5      | Materialdaten zu Ti6Al4V . . . . .                                      | 55         |
| 3.5.1    | Thermo-physikalische Eigenschaften . . . . .                            | 55         |
| 3.5.2    | Mechanische Eigenschaften . . . . .                                     | 57         |
| 3.6      | Verarbeitung des G-Code . . . . .                                       | 58         |
| 3.6.1    | Konzept der Materialmatrix . . . . .                                    | 58         |
| 3.6.2    | G-Code und der BRESENHAM-Algorithmus . . . . .                          | 59         |
| 3.7      | Programmablauf der LPBF Prozesssimulation . . . . .                     | 61         |
| <b>4</b> | <b>Modellierung der Mesoskala</b>                                       | <b>65</b>  |
| 4.1      | <i>Singletrack</i> Untersuchung . . . . .                               | 65         |
| 4.1.1    | Modellaufbau . . . . .                                                  | 65         |
| 4.1.2    | Einfluss der Laserleistung . . . . .                                    | 67         |
| 4.2      | <i>Multitrack</i> Untersuchung . . . . .                                | 69         |
| 4.2.1    | Modellaufbau . . . . .                                                  | 70         |
| 4.2.2    | Einfluss der Scanstrategie . . . . .                                    | 70         |
| 4.2.3    | Einfluss der Laserleistung bei gleicher VED . . . . .                   | 74         |
| 4.3      | <i>Singletrack</i> Untersuchung mit der PBE-Methode . . . . .           | 76         |
| 4.3.1    | Simulation des <i>Recoatings</i> . . . . .                              | 76         |
| 4.3.2    | Lokale Porosität und abgeleitete Größen . . . . .                       | 78         |
| 4.3.3    | Einfluss der PBE beim <i>Singletrack</i> -Experiment . . . . .          | 81         |
| <b>5</b> | <b>Modellierung der Makroskala</b>                                      | <b>85</b>  |
| 5.1      | Untersuchung zu Eigenspannungen bei <i>Multitrack</i> . . . . .         | 85         |
| 5.1.1    | Modellaufbau . . . . .                                                  | 86         |
| 5.1.2    | Einfluss der <i>Layerheating</i> -Methode . . . . .                     | 87         |
| 5.2      | Untersuchung zu Eigenspannungen an AM-Brücke . . . . .                  | 91         |
| 5.2.1    | Modellaufbau . . . . .                                                  | 92         |
| 5.2.2    | Temperaturverlauf und Eigenspannungen . . . . .                         | 92         |
| 5.2.3    | Temperaturverlauf und Eigenspannungen im vereinfachten Modell . . . . . | 97         |
| <b>6</b> | <b>Abschluss</b>                                                        | <b>103</b> |
| 6.1      | Zusammenfassung . . . . .                                               | 103        |
| 6.2      | Ausblick . . . . .                                                      | 104        |

|          |                                                        |            |
|----------|--------------------------------------------------------|------------|
| <b>7</b> | <b>Quellenverzeichnis</b>                              | <b>107</b> |
| <b>A</b> | <b>Anhang</b>                                          | <b>121</b> |
| A.1      | Verifikation des thermo-mechanischen Modells . . . . . | 121        |
| A.2      | DEM-Simulation des <i>Recoating</i> . . . . .          | 125        |
| A.3      | Beulen-Phänomene: Vergleich mit [126] . . . . .        | 126        |
| A.4      | Flussdiagramm des BRESENHAM-Algorithmus . . . . .      | 127        |



# Abkürzungen

|             |                                |
|-------------|--------------------------------|
| <b>AM</b>   | Additive Manufacturing         |
| <b>AWP</b>  | Anfangswertproblem             |
| <b>CAD</b>  | Computer-Aided Design          |
| <b>CFD</b>  | Computational Fluid Dynamics   |
| <b>CFL</b>  | Courant-Friedrichs-Lewy        |
| <b>CPU</b>  | Central Processing Unit        |
| <b>DEM</b>  | Diskrete-Elemente-Methode      |
| <b>DQ</b>   | Differenzenquotient            |
| <b>DIN</b>  | Deutsches Institut für Normung |
| <b>ES</b>   | Eigenspannungen                |
| <b>FDM</b>  | Finite-Differenzen-Methode     |
| <b>FE</b>   | Finite-Elemente                |
| <b>FEM</b>  | Finite-Elemente-Methode        |
| <b>FVM</b>  | Finite-Volumen-Methode         |
| <b>GPU</b>  | Graphical Processing Unit      |
| <b>HAZ</b>  | Heat-affected zones            |
| <b>HPC</b>  | High-Performance Computing     |
| <b>LBM</b>  | Lattice-Boltzmann-Methode      |
| <b>LPBF</b> | Laser Powder Bed Fusion        |
| <b>OPD</b>  | Optical Penetration Depth      |
| <b>RAM</b>  | Random-Access Memory           |

**RDQ** Rückwärts-Differenzenquotient

**RTE** Radiation Transfer Equation

**SG** Staggered Grid

**SPH** Smoothed Particle Hydrodynamics

**VED** Volumenenergiedichte

**VOF** Volume-of-Fluid-Methode

**VDQ** Vorwärts-Differenzenquotient

**ZDQ** Zentraler Differenzenquotient

# Symbolverzeichnis

Selten oder nur in begrenztem Kontext verwendete Symbole werden nicht im Symbolverzeichnis aufgeführt, sondern direkt im Text erläutert. Als Dezimaltrennzeichen wird sowohl im Text als auch in den Diagrammen der Punkt verwendet. Matrizen werden im Allgemeinen durch fette Buchstaben gekennzeichnet. Die Elemente einer Matrix treten im Text auch als skalare Größen auf und werden hier nicht redundant aufgeführt. Als Referenztemperatur gilt  $T_{\text{Ref}} = 293.15 \text{ K}$ .

## Griechische Symbole

|                                  |                                                      |                                  |
|----------------------------------|------------------------------------------------------|----------------------------------|
| $\alpha$                         | Konvektiver Wärmeübergangskoeffizient                | $\text{W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ |
| $\alpha_R$                       | Strahlungsbedingte Wärmeübergangskoeffizient         | $\text{W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ |
| $\alpha_{\text{therm}}$          | Thermischer Ausdehnungskoeffizient                   | $\text{K}^{-1}$                  |
| $\bar{\alpha}$                   | Kombinierter Wärmeübergangskoeffizient               | $\text{W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ |
| $\bar{\varepsilon}_p$            | Akkumulierten plastischen Dehnung                    | dimensionslos                    |
| $\beta$                          | Extinktionskoeffizient                               | $\text{m}^{-1}$                  |
| $\sigma$                         | CAUCHY-Spannungstensor                               | Pa                               |
| $\varepsilon$                    | Linearisierte Dehnungstensor                         | dimensionslos                    |
| $\varepsilon_E$                  | Elastische Komponente des Dehnungstensor             | dimensionslos                    |
| $\varepsilon_P$                  | Plastische Komponente des Dehnungstensor             | dimensionslos                    |
| $\varepsilon_T$                  | Thermische Komponente des Dehnungstensor             | dimensionslos                    |
| $\Delta$                         | Äquidistanter Gitterabstand                          | m                                |
| $\Delta h$                       | <i>Hatch</i> -Abstand                                | m                                |
| $\Delta t$                       | Zeitschritt                                          | s                                |
| $\Delta t_{\text{CFL,mech,max}}$ | Maximaler Zeitschritt für die mechanische Berechnung | s                                |
| $\Delta t_{\text{CFL,mech}}$     | Zeitschritt für die mechanische Berechnung           | s                                |

|                                   |                                                     |                                   |
|-----------------------------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------|
| $\Delta t_{\text{CFL,therm,max}}$ | Maximaler Zeitschritt für die thermische Berechnung | s                                 |
| $\Delta t_{\text{CFL,therm}}$     | Zeitschritt für die thermische Berechnung           | s                                 |
| $\Delta V$                        | Volumen aus $\Delta x, \Delta y, \Delta z$          | m <sup>3</sup>                    |
| $\Delta x$                        | Gitterabstand in $x$ -Richtung                      | m                                 |
| $\Delta y$                        | Gitterabstand in $y$ -Richtung                      | m                                 |
| $\Delta z$                        | Gitterabstand in $z$ -Richtung                      | m                                 |
| $\eta$                            | Absorptionsgrad                                     | dimensionslos                     |
| $\gamma$                          | Plastischer Multiplikator                           | dimensionslos                     |
| $\lambda$                         | Erste Lamé-Konstante                                | Pa                                |
| $\mu$                             | Zweite Lamé-Konstante                               | Pa                                |
| $\nu$                             | Querkontraktionszahl                                | dimensionslos                     |
| $\phi$                            | Füllgrad                                            | dimensionslos                     |
| $\psi$                            | Porosität                                           | dimensionslos                     |
| $\rho$                            | Dichte                                              | kg m <sup>-3</sup>                |
| $\rho_h$                          | Hemisphärische Reflexivität                         | dimensionslos                     |
| $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$    | Hauptspannungen                                     | Pa                                |
| $\sigma_{\text{vM}}$              | VON MISES-Vergleichsspannung                        | Pa                                |
| $\sigma_y$                        | Fließspannung                                       | Pa                                |
| $\sigma_H$                        | Hydrostatischer Teil des CAUCHY-Spannungstensors    | Pa                                |
| $\varepsilon_{\text{PB}}$         | Pulverbett Emissionsgrad                            | dimensionslos                     |
| $\bar{\kappa}$                    | Mittlere Wärmeleitfähigkeit                         | W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> |
| $\kappa_C$                        | Kontaktbedingte Wärmeleitfähigkeit                  | W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> |
| $\kappa_e$                        | Effektive Wärmeleitfähigkeit                        | W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> |
| $\kappa_g$                        | Wärmeleitfähigkeit des Gases                        | W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> |
| $\kappa_R$                        | Strahlungsbedingte Wärmeleitfähigkeit               | W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> |
| $\kappa_s$                        | Wärmeleitfähigkeit des Feststoffs                   | W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> |
| $\kappa$                          | Wärmeleitfähigkeit                                  | W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> |

### Lateinische Symbole

|                  |                                          |                                  |
|------------------|------------------------------------------|----------------------------------|
| $s$              | Spannungsdeviator                        | Pa                               |
| $\ddot{u}$       | Beschleunigung                           | $\text{m s}^{-2}$                |
| $\dot{u}$        | Geschwindigkeit                          | $\text{m s}^{-1}$                |
| $\mathbf{I}$     | Einheitstensor zweiter Stufe             | dimensionslos                    |
| $\mathbf{n}$     | Normalenvektor                           | dimensionslos                    |
| $\mathbf{u}$     | Verschiebung                             | m                                |
| $Bi$             | Biot-Zahl                                | dimensionslos                    |
| $B$              | Deformationsparameter                    | dimensionslos                    |
| $C_L$            | Longitudinale Wellengeschwindigkeit      | $\text{m s}^{-1}$                |
| $c_p$            | Isobare Wärmekapazität                   | $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ |
| $D$              | Schmelzbadtiefe                          | m                                |
| $D_m$            | Mittlerer Durchmesser der Pulverpartikel | m                                |
| $E$              | E-Modul                                  | Pa                               |
| $E_H$            | Linearer isotroper Verfestigungsmodul    | Pa                               |
| $F$              | Fließbedingung                           | Pa                               |
| $H$              | Enthalpie                                | $\text{J m}^{-3}$                |
| $M$              | Materialmatrix                           | dimensionslos                    |
| $N_x$            | Anzahl der Gitterpunkte in $x$ -Richtung | dimensionslos                    |
| $N_y$            | Anzahl der Gitterpunkte in $y$ -Richtung | dimensionslos                    |
| $N_z$            | Anzahl der Gitterpunkte in $z$ -Richtung | dimensionslos                    |
| $P_{\text{Las}}$ | Laserleistung                            | W                                |
| $Q$              | Wärmestrom                               | W                                |
| $q$              | Wärmestromdichte                         | $\text{W m}^{-2}$                |
| $q_C$            | Konvektive Wärmestromdichte              | $\text{W m}^{-2}$                |
| $q_R$            | Strahlungsbedingte Wärmestromdichte      | $\text{W m}^{-2}$                |

|                  |                                |                   |
|------------------|--------------------------------|-------------------|
| $q_V$            | Volumetrische Wärmestromdichte | $\text{W m}^{-3}$ |
| $r_{\text{Las}}$ | Laserradius                    | m                 |
| $T$              | Temperaturmatrix               | K                 |
| $T_\infty$       | Umgebungstemperatur            | K                 |
| $t_C$            | Abkühlzeit                     | sec               |
| $t_{\text{IL}}$  | <i>Interlayer</i> -Zeit        | sec               |
| $t_{\text{PB}}$  | Pulverbettdicke                | m                 |
| $T_{\text{Ref}}$ | Referenztemperatur             | K                 |
| $T_M$            | Schmelztemperatur              | K                 |
| $T_S$            | Temperatur Substratunterseite  | K                 |
| $T_V$            | Verdampfungstemperatur         | K                 |
| $v_{\text{Las}}$ | Lasergeschwindigkeit           | $\text{m s}^{-1}$ |
| $W$              | Schmelzbadbreite               | m                 |
| VED              | Volumenenergiedichte           | $\text{J m}^{-3}$ |

#### Hochgestellte und tiefgestellte Zeichen

|            |                                                   |               |
|------------|---------------------------------------------------|---------------|
| $()^t$     | Index des Zeitschritts für eine diskrete Größe    | dimensionslos |
| $()_i$     | Index einer diskreten Größe für die $x$ -Richtung | dimensionslos |
| $()_j$     | Index einer diskreten Größe für die $y$ -Richtung | dimensionslos |
| $()_k$     | Index einer diskreten Größe für die $z$ -Richtung | dimensionslos |
| $()_x$     | Komponenten in $x$ -Richtung                      | dimensionslos |
| $()_y$     | Komponenten in $y$ -Richtung                      | dimensionslos |
| $()_z$     | Komponenten in $z$ -Richtung                      | dimensionslos |
| $()^\cdot$ | Änderungsrate                                     | dimensionslos |

# 1 | Einleitung

## 1.1 Motivation

Die fortschreitende Digitalisierung und Automatisierung in der industriellen Fertigung eröffnet neue Möglichkeiten zur Herstellung hochkomplexer Bauteile. Insbesondere das Laserstrahlschmelzen (*Laser Powder Bed Fusion*, LPBF)<sup>1</sup> hat sich als vielversprechende Technologie im Bereich der additiven Fertigung (*Additive Manufacturing*, AM) etabliert. Das Verfahren ermöglicht die Herstellung von Bauteilen mit hoher geometrischer Komplexität und Funktionalität, die mit konventionellen Fertigungsmethoden nur schwer realisierbar sind. Dies macht das Verfahren besonders attraktiv, beispielsweise für die Luft- und Raumfahrtindustrie, da es die Herstellung komplexer, leichter und hochfester Bauteile ermöglicht. So konnte bei der Herstellung der Tragflächenhalterung eines Airbus A350 XWB durch den Einsatz einer Topologieoptimierung und von LPBF eine Gewichtseinsparung von 30% im Vergleich zum gefrästen Bauteil erreicht werden [1]. Bei einem Injektorkopf eines Raketenantriebs der Ariane 6 Rakete (vgl. Abbildung 1.1) konnte die Komplexität von 248 Einzelteilen auf ein einziges Bauteil reduziert werden [2]. Darüber hinaus kann LPBF die Prototypenentwicklung (*Rapid Prototyping*) beschleunigen und kostengünstiger gestalten sowie die Realisierung neuer Prozessketten (*Production on Demand*) ermöglichen [3].

Neben zusätzlichen Fertigungsschritten, wie dem Entfernen von Stützmaterial, dem heißisostatischen Pressen (HIP) oder einer Oberflächenbehandlung für besonders glatte Oberflächen [4] zählen Materialdefekte wie Poren und Risse sowie thermisch induzierte Eigenspannungen (ES) aufgrund ungeeigneter Prozessparameter [5, 6] zu den Nachteilen des LPBF Prozesses. Um das volle Potenzial des LPBF auszuschöpfen sind daher ideale Prozessparameter sowie Qualitätskontroll- und Qualifizierungsverfahren von additiv hergestellten Bauteilen erforderlich [7]. Prozesssimulationen stellen ein effektives Werkzeug dar, das kostspielige *Trial-and-Error*-Experimente deutlich reduzieren und so die Entwicklung von Qualitätskontroll- und Qualifizierungsverfahren verbessern kann.

---

<sup>1</sup>In dieser Arbeit wird überwiegend der international gebräuchliche Begriff *Laser Powder Bed Fusion* (LPBF) verwendet.



Abbildung 1.1: Injektorkopf eines Raketenantriebs der Ariane 6 Rakete als einzelnes Bauteil [2]; abgebildet mit Genehmigung von EOS und Ariane Group. Nicht Teil der übergeordneten CC-Lizenz.

### 1.2 Ziele der Arbeit

Herkömmliche Berechnungssoftware umfasst zahlreiche Programmpakete zur Simulation ingenieurtechnischer Problemstellungen. Diese sind jedoch nicht speziell für die Simulation des LPBF Prozesses ausgelegt und bieten daher nur eine begrenzte Auswahl an Methoden und Schnittstellen für eine effiziente Prozesssimulation. Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung und Implementierung einer automatisierten Prozesssimulation des LPBF. Im Mittelpunkt steht dabei die Entwicklung eines Simulationsframeworks, das die hohe Rechenleistung eines Grafikprozessors (*Graphical Processing Unit*, GPU) nutzen kann und gleichzeitig eine hohe Effizienz in der Vorbereitung einer LPBF Prozesssimulation gewährleistet. Für diese Arbeit werden die folgenden Ziele definiert:

- Entwicklung eines einheitlichen Simulationsframeworks zur Prozesssimulation des LPBF auf Meso- und Makroskala.
- Berücksichtigung der Bauteilgeometrie und Laserbahnen durch automatisierte Routinen.
- Berücksichtigung der Pulverbettcharakteristik und temperaturabhängigen Materialeigenschaften.
- Modellierung und Simulation der Temperaturverläufe während des LPBF Prozesses.
- Modellierung und Simulation der thermisch induzierten Verformungen, Dehnungen und Spannungen während des LPBF Prozesses.

Durch die Arbeit soll ein vertieftes Verständnis von LPBF erreicht und eine Grundlage für die Simulation von LPBF und anderen AM-Prozessen geschaffen werden.

### **1.3 Aufbau der Arbeit**

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in sechs Hauptteile und beginnt mit einem einleitenden Kapitel.

Im zweiten Kapitel werden die Grundlagen des LPBF präsentiert. Es enthält eine detaillierte Beschreibung des LPBF einschließlich der physikalischen Phänomene, die während des Prozesses auftreten. Zudem werden verschiedene Methoden vorgestellt, die sich für die Simulation der verschiedenen Skalen des Prozesses eignen.

Das dritte Kapitel behandelt das entwickelte LPBF Prozessmodell. Es umfasst das thermo-mechanische Modell sowie spezifische Teilmodelle, welche die Wechselwirkung zwischen Pulverbett und Laser sowie die Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts abbilden. Zudem werden Methoden zur automatisierten Verarbeitung der Bahnbewegungen des Lasers (G-Code) erläutert.

Im vierten Kapitel geht es um die Modellierung des Prozesses auf der Mesoskala. Dies umfasst die Entwicklung und Anwendung von Modellen, die die Vorgänge auf dieser Skala abbilden, einschließlich der Wechselwirkungen zwischen dem Pulverbett und dem Laser. Besondere Aufmerksamkeit wird dabei dem Temperaturfeld und dem Schmelzbad gewidmet.

Das fünfte Kapitel behandelt die Modellierung des Prozesses auf der Makroskala. Hier wird untersucht, wie sich das Temperaturfeld auf die Entwicklung von Eigenspannungen im LPBF auswirkt. Der Schwerpunkt liegt auf der systematischen Untersuchung des Übergangs von komplexen zu einfachen Modellierungsansätzen und deren Auswirkungen auf die Genauigkeit der Ergebnisse.

Das sechste Kapitel fasst die erzielten Ergebnisse zusammen und gibt einen Ausblick auf zukünftige Forschungsrichtungen. Es werden dabei die wichtigsten Erkenntnisse der Arbeit diskutiert und mögliche weiterführende Forschungsansätze aufgezeigt, die auf den gezeigten Ergebnissen aufbauen können.



## 2 | Laser Powder Bed Fusion

### Inhalt

|     |                                          |   |
|-----|------------------------------------------|---|
| 2.1 | Prozess des LPBF . . . . .               | 5 |
| 2.2 | Defekte und Eigenspannungen . . . . .    | 7 |
| 2.3 | Skalen und Simulation des LPBF . . . . . | 8 |

Im Folgenden Kapitel werden die Grundlagen des LPBF Prozesses dargestellt. Abschnitt 2.1 erläutert dabei grundlegend den LPBF Prozess. In Abschnitt 2.2 werden die Mechanismen zu den im LPBF vorkommenden Defekten und die Entwicklung von Eigenspannungen dargelegt. Der Abschnitt 2.3 erläutert die Skalen des Prozesses und gibt einen Einblick in den aktuellen Wissensstand zur Prozesssimulation des LPBF.

### 2.1 Prozess des LPBF

Das Laserstrahlschmelzen (*Laser Powder Bed Fusion*, LPBF), oder nach DIN EN ISO 52900:2022-03 pulverbettbasiertes Schmelzen mit Laserstrahl für metallische Werkstoffe (*Powder bed fusion with laser beam of metals*, PBF-LB/M), ist eine Fertigungstechnik der additiven Fertigung (*Additive Manufacturing*, AM), und zählt zu den sieben grundlegenden Verfahren dieser Technologie [8]<sup>2</sup>. Im Gegensatz zu konventionellen Fertigungsmethoden werden beim LPBF Prozess Bauteile schichtweise hergestellt. Der Prozessablauf des LPBF ist in Abbildung 2.1 dargestellt; das rechte Bild zeigt einen Detailausschnitt mit dem Schmelzbad und der Wärmeeinflusszone (*Heat Affected Zone*, HAZ). Zu Beginn des LPBF Prozesses wird eine Schicht des zu verarbeitenden Metallpulvers präzise auf die Bauplattform (Substrat) aufgetragen. Ein Rakel wird verwendet, um eine gleichmäßige Verteilung des Pulvers sicherzustellen. Dieser Vorgang wird auch als *Recoating* Prozess bezeichnet [9]. Ein Laserstrahl scant dann die Pulveroberfläche ab und schmilzt das Material selektiv nach einem vordefinierten Muster auf. Die schnelle Abkühlung führt zur Bildung einer festen Schicht, die dauerhaft mit der darunterliegenden Schicht verbunden ist. Durch Wiederholung dieser Schritte entsteht Schicht für Schicht ein dreidimensionales Bauteil.

Die erforderlichen Bahnen des Lasers werden durch das *Slicen*, schichtweise aus der Geometrie des herzustellenden Bauteils berechnet [11, 12]. Dabei wird zwischen

---

<sup>2</sup>In dieser Arbeit wird aus Gründen der Lesbarkeit die Abkürzung „LPBF“ verwendet, obwohl die DIN EN ISO 52900:2022-03 die Abkürzung „PBF-LB/M“ vorsieht [8].

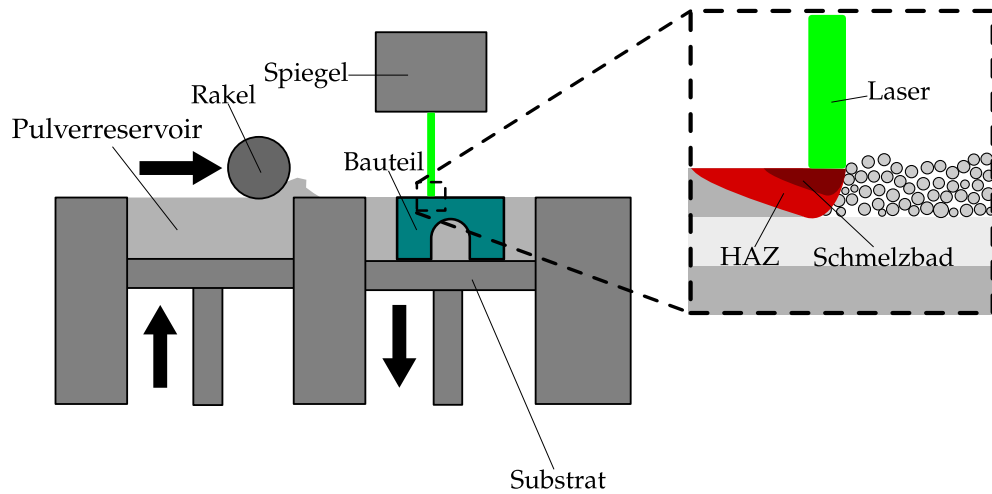


Abbildung 2.1: Illustration des LPBF Prozesses mit Detailansicht (rechts) des Schmelzbades und der Wärmebeeinflusszone (*Heat Affected Zone*, HAZ); übersetzt von [10], CC BY 4.0.

Kontur- und *Infill*-Bahnen unterschieden [6]. Kontur-Bahnen definieren die äußeren Grenzen des Bauteils, während *Infill*-Bahnen die inneren Strukturen füllen. Das *Infill* des Bauteils kann mit verschiedenen Scanstrategien umgesetzt werden, wie z. B. mit einer vollständigen oder teilstrukturierten Füllung. Der Abstand zwischen den Bahnen wird als *Hatch*-Abstand bezeichnet und steuert die Verbindung des aufgetragenen Materials in einer Ebene. Eine vereinfachte Darstellung eines Würfels nach dem *Slicen* ist in Abbildung 2.2 abgebildet. Neben der Wahl der Scanstrategie wird der LPBF Prozess durch die Parameter Laserleistung  $P_{\text{Las}}$ , Lasergeschwindigkeit  $v_{\text{Las}}$ , Laserradius  $r_{\text{Las}}$ , *Hatch*-Abstand  $\Delta h$  und Pulverschichtdicke  $t_{\text{PB}}$  gesteuert.

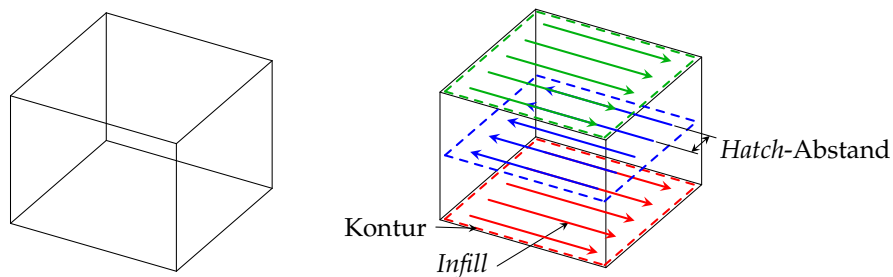


Abbildung 2.2: Illustrative Darstellungen des *Slicen* eines Würfels: links Ausgangsgeometrie, rechts die Kontur- und *Infill*-Bahnen nach dem *Slicen*.

Der schichtweise Prozess des LPBF ermöglicht die Herstellung sehr komplexer und funktionaler Bauteile [6]. Jedoch sind sowohl die Eigenschaften des Pulvers und die

Qualität des Pulverbetts [13] als auch die korrekt eingestellten Prozessparameter entscheidend für die endgültigen Eigenschaften der gedruckten Bauteile. Ungeeignete Parameter können zu Defekten und Eigenspannungen in den Bauteilen führen und die mechanischen Eigenschaften erheblich beeinträchtigen [14, 15].

## 2.2 Defekte und Eigenspannungen

Im LPBF Prozess beeinflussen die Prozessparameter Laserleistung, Scangeschwindigkeit, *Hatch*-Abstand, Pulverschichtdicke und Pulverbett maßgeblich die finalen Materialeigenschaften. Eine fehlerhafte Einstellung eines dieser Parameter führt zu unerwünschten Defekten. Die Defekte lassen sich dabei in drei Hauptkategorien einteilen: Poren, unvollständige Verschmelzung (*Lack of Fusion*, LOF) und Risse [14], dargestellt in Abbildung 2.3. **Poren** (Abbildung 2.3(a)) entstehen, wenn sich bei geringer Packungsdichte im Pulverbett, das Gas des Hohlraums im Schmelzbad löst, das aufgrund der schnellen Abkühlung nicht entweichen kann. Des Weiteren kann bei einer zu hohen Energiedichte das Material über die Verdampfungstemperatur hinaus erwärmt werden [14]. Dabei bilden sich Gasblasen, die ebenfalls nicht entweichen können und als *Keyhole*-Poren im Material verbleiben [16].

**Lack of Fusion** (Abbildung 2.3(b)) tritt auf, wenn die Energiedichte des Lasers zu gering ist, um das Pulver vollständig aufzuschmelzen. Dadurch kommt es zu einer unvollständigen Verbindung der Schichten und es verbleiben ungeschmolzene Pulverpartikel [14].

**Risse** (Abbildung 2.3(c)) entstehen durch die thermischen Spannungen die beim schnellen Abkühlen des Materials, mit bis zu  $10^8 \text{ K s}^{-1}$ , nach der Einwirkung des Lasers auftreten [14, 17].

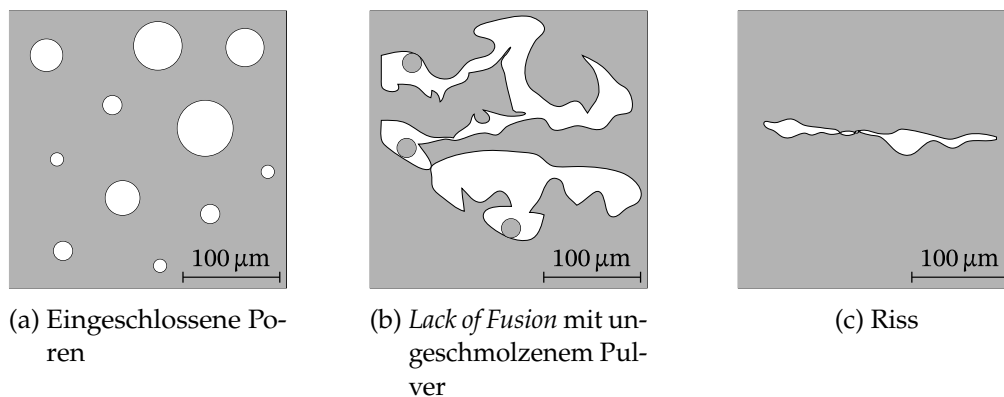


Abbildung 2.3: Illustration von Defekten im LPBF Prozess in Anlehnung an [5].

Neben den Defekten gehören auch Eigenspannungen zu den unerwünschten Erscheinungen im LPBF Prozess. Sie verursachen Verzug und können in Kombination mit Rissen die Lebensdauer des Bauteils reduzieren. Die Entwicklung von Eigenspannungen

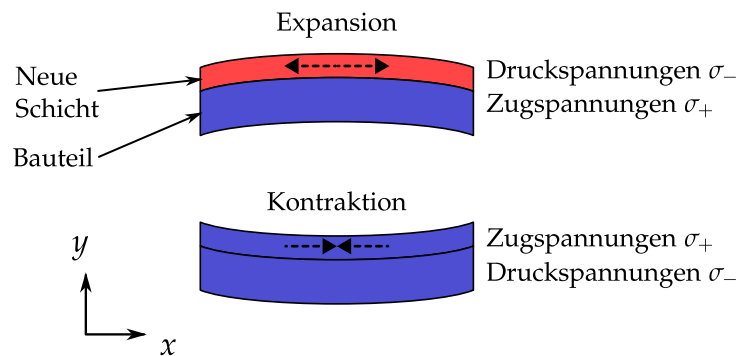


Abbildung 2.4: Veranschaulichung des Temperatur-Gradienten-Mechanismus (TGM) im LPBF Prozess in Anlehnung an [19].

kann anhand des Temperatur-Gradienten-Mechanismus (TGM) veranschaulicht werden, welcher in Abbildung 2.4 dargestellt ist. Der Ausgangspunkt ist eine homogene Temperaturverteilung im Bauteil. Das Aufbringen einer neuen Druckschicht wird durch einen plötzlichen Temperaturanstieg auf die Schmelztemperatur in der neuen Schicht dargestellt. Dies führt zu einer starken Expansion der Schicht, wobei das darunter liegende Bauteil die Temperaturänderung nicht erfährt und somit dieser Expansion entgegenwirkt [18, 19]. Daraus resultieren zunächst Druckspannungen  $\sigma_-$  sowie eine plastische Stauchung in der neuen Druckschicht und Zugspannungen  $\sigma_+$  im darunter liegenden Bauteil. Mit Beendigung des Druckvorgangs und Beginn des Abkühlvorgangs erfolgt eine schnelle Abkühlung der neuen Schicht, während das darunter liegende Bauteil dieser Kontraktion entgegenwirkt. Dies resultiert in Zugspannungen  $\sigma_+$  in der neuen Schicht und Druckspannungen  $\sigma_-$  im darunter liegenden Bauteil [18, 19]. Mit dem TGM kann die grundsätzliche Entstehung von Eigenspannungen im LPBF Prozess aufgezeigt werden. In der Regel kommt es jedoch, in Abhängigkeit der Scanstrategie, zu einer inhomogenen Aufheizung und Abkühlung im Bauteil, was entsprechend zu komplexen Eigenspannungsfeldern führt und durch den TGM nicht abgebildet werden kann [18].

Ein weiterer Mechanismus, der Eigenspannungen verursacht, ist die Abkühlphase der geschmolzenen Schichten. Aufgrund der thermischen Kontraktion neigen diese Schichten zu schrumpfen, was wiederum durch das darunterliegende Material behindert wird. Dadurch werden Zugspannungen in der hinzugefügten oberen Schicht und Druckspannungen darunter eingeführt [18].

## 2.3 Skalen und Simulation des LPBF

Um den LPBF Prozess umfassend zu verstehen und die Prozessparameter zu optimieren, ist es notwendig, die verschiedenen relevanten Längen- und Zeitskalen des Prozesses aufzulösen und zu modellieren. Üblicherweise wird zwischen der Mikro-, der Meso-

und der Makroskala unterschieden [20]. Die typischen Zeit- und Größenordnungen zu den oft betrachteten Skalen des LPBF Prozesses sind in Abbildung 2.5 dargestellt. Diese Simulationen konzentrieren sich dabei auf die dominierenden physikalischen Phänomene innerhalb einer Skala und bilden die prozessspezifischen Eigenschaften ab. Auch wenn alle Skalen des LPBF Prozesses miteinander verbunden sind, können sie nicht in einem Modell ganzheitlich gelöst werden. Daher ist eine Kopplungsstrategie erforderlich. Allgemein wird zwischen einer Ein- und Zweiwege-Kopplung unterschieden. Bei der Einwege-Kopplung wird die Lösung eines Modells als Eingangsgröße für das andere verwendet, ohne dass es zu einem weiteren Austausch kommt. Im Rahmen einer Zweiwege-Kopplung findet ein bidirektionaler Austausch statt, bei dem sich die Modelle gegenseitig die Lösungen als Eingangsgrößen austauschen [21]. Bei einer LPBF Prozesssimulation wird aufgrund des Berechnungsaufwandes häufig die Einwege-Kopplung verwendet, die Kopplungsgröße ist dabei das Temperaturfeld und dient als Eingabe für weiterführende mechanische Berechnungen der Eigenspannungen [22] oder der Ermittlung der Mikrostruktur [23, 24].

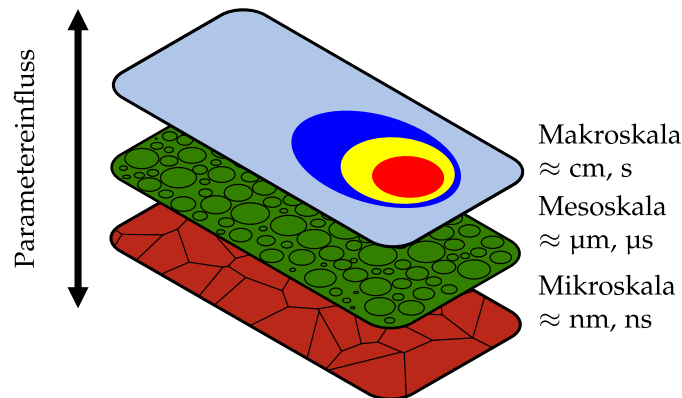


Abbildung 2.5: Illustration der typischen Zeit- und Dimensions-Größenordnungen eines LPBF Prozesses.

Simulationen und Untersuchungen des LPBF Prozesses auf der Mikroskala beschäftigen sich häufig mit der Gefügeentwicklung unter zyklischer thermischer Beanspruchung mit hohen Spitzentemperaturen und steilen Temperaturgradienten [24–32], sind aber nicht Gegenstand dieser Arbeit.

Die folgenden Abschnitte widmen sich dem aktuellen Wissensstand zu LPBF Prozesssimulationen auf den anderen beiden Skalen. Zunächst werden in Abschnitt 2.3.1 und Abschnitt 2.3.2 aktuelle Ansätze für Simulationsmodelle der Mesoskala sowie in Abschnitt 2.3.3 Simulationsmodelle der Makroskala erläutert. Darüber hinaus werden in Abschnitt 2.3.4 Arbeiten zum Einsatz von GPUs für die LPBF Prozesssimulation vorgestellt.

### 2.3.1 Detaillierte Mesoskalige Simulationsmodelle

Die Simulation des LPBF Prozesses auf der Mesoskala konzentriert sich häufig auf das Pulverbett und das Schmelzbad. Die Untersuchung des Pulverbetts und des damit verbundenen *Recoating* Prozesses stellt einen eigenen Forschungsschwerpunkt in der Mesoskalen-Simulation des LPBF dar. Dabei unterliegen die Partikelgrößen jedes Pulvers einer Größenvariation was in den Untersuchungen durch eine Größenverteilung [33] abgebildet werden muss. Aufgrund der geringen Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts und der pulverbettabhängigen Absorption der Laserenergie [34] ist eine genaue Kenntnis der Pulveranordnung von großer Bedeutung und ein Qualitätsindikator für LPBF-gefertigte Bauteile [35]. Für die Simulation des *Recoating*-Prozesses wird häufig die Diskrete-Elemente-Methode (DEM) verwendet, die das Pulverbett durch einzelne Partikel modelliert. So zeigten Meier et al., dass sich eine erhöhte Pulverkohäsion, insbesondere bei feinkörnigen Pulvern, negativ auf die Beschichtungsqualität auswirkt [9]. Nan et al. untersuchten den Einfluss von Spalthöhe und Rakelgeschwindigkeit auf die Pulververteilung und identifizierten verschiedene Strömungsbereiche des Pulvers [36]. Phua et al. konzentrierten sich auf die Auswirkungen verschiedener Rakelgeometrien auf das Pulverbett und deren Einfluss auf die Bauteilqualität [35].

Beim Auftreffen des Lasers auf das Pulverbett kommt es zu einer starken Absorption der Laserenergie durch Mehrfachreflexion, illustriert in Abbildung 2.6. Sobald das Pulver die Schmelztemperatur des Materials erreicht, kommt es zu einer Phasenumwandlung von fest zu flüssig und es bildet sich ein Schmelzbad aus. Die Form und Dynamik des Schmelzbades ergibt sich aus der Oberflächenspannung, den Kapillarkräften, dem Benetzungsverhalten sowie den bereits erstarrten Bereichen [37]. Der Wärmefluss im Schmelzbad ist neben der Wärmeleitung durch die dominierende MARANGONI-Konvektion geprägt, die durch die temperaturabhängige Oberflächenspannung hervorgerufen wird [38]. Im Prozessverlauf kann es auch zu Temperaturen oberhalb der Verdampfungstemperatur kommen, was zu einem zusätzlichen Gasfluss und damit zu Störungen im Schmelzbad führt. Dieses Verhalten ist die Hauptursache für *Keyhole*-Poren [39, 40]. Das komplexe Verhalten des Schmelzbades kann durch *Computational Fluid Dynamics* (CFD) Simulationen, basierend auf der Finite-Volumen-Methode (FVM) [41, 42] oder der *Lattice-BOLTZMANN*-Methode (LBM) [43, 44], welche die NAVIER-STOKES-Gleichungen lösen, abgebildet werden. Die Modellierung der komplexen Absorption der Laserenergie durch Mehrfachreflexion im Pulverbett erfolgt mittels *Raytracing*. Diese Methode ermöglicht es, die Pfade der einzelnen Laserstrahlen zu verfolgen und alle auftretenden Reflexionen zu berücksichtigen [39, 44, 45]. Der Materialfluss wird in den Modellen häufig mit der *Volume-of-Fluid*-Methode (VOF-Methode) abgebildet [39, 42].

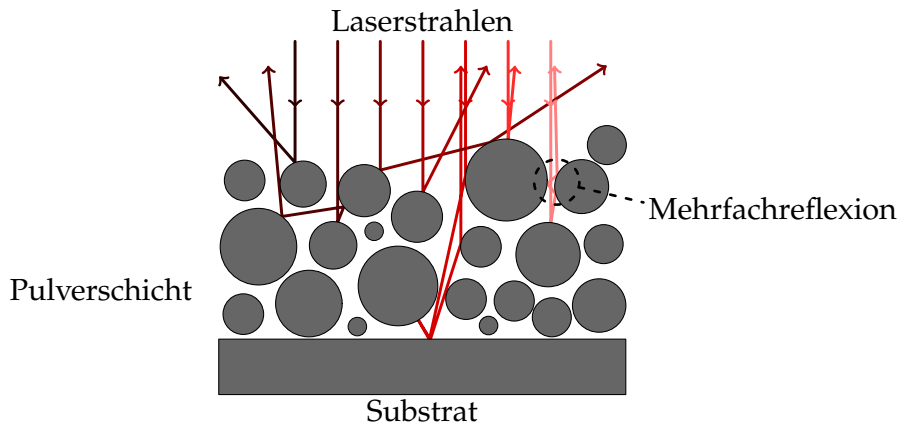


Abbildung 2.6: Mehrfachreflexion der auf das Pulverbett auftreffenden Laserstrahlen.

Eine weitere Möglichkeit in den detaillierten mesoskaligen Simulationsmodellen besteht darin, die Ergebnisse aus CFD- und DEM-Simulationen miteinander zu kombinieren, um die zufällige Anordnung des Pulvers aus dem *Recoating*-Prozess zu berücksichtigen [39, 41, 42]. Die Anwendung der *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) vereint die Stärken von DEM und CFD in einem Simulationsframework, was eine flexible Modellierung des Schmelzbadverhaltens ermöglicht [46].

Die LPBF Prozesssimulation auf der Mesoskala liefert wesentliche Erkenntnisse zur Optimierung des *Recoating* Prozesses sowie der Schmelzbad-Bildung. Dadurch können Prozessparameter, die unebene Oberflächenbeschaffenheit verursachen [42] oder zu Material-Porosität [43] führen, vorhergesagt und optimiert werden. Diese Simulationen sind jedoch aufgrund ihrer hohen Berechnungsintensität und dem Bedarf einer hohen zeitlichen und räumlichen Auflösung auf kleine Bereiche und einige wenige Schichten beschränkt.

### 2.3.2 Einfache mesoskalige Simulationsmodelle

Als Alternative zu rechenintensiven und detaillierten mesoskaligen Simulationsmodellen können einfache mesoskalige Simulationsmodelle auf der Basis der Wärmeleitungsgleichung eingesetzt werden. Dabei wird das Pulverbett nicht mehr als diskrete Partikel, sondern als ein Kontinuum mit effektiven thermo-physikalischen Größen modelliert. Anfangs weist das gesamte Gebiet die effektiven Materialeigenschaften des Pulvers auf. Bei Erreichen der Schmelztemperatur werden die temperaturabhängigen Eigenschaften des festen Materials verwendet – eine Technik, die auch als *Element-Birth-Death*-Technik bekannt ist [47, 48]. Die komplexe Wechselwirkung zwischen Laser und Material wird häufig über eine flächige oder volumetrische Wärmestromdichte vereinfacht, wobei teilweise auch die Begriffe 2D-Wärmequelle und 3D-Wärmequelle verwendet werden [49]. Aufgrund der Phasenumwandlungen im LPBF Prozess ist die Formulierung der

Wärmeleitungsgleichung über die Enthalpie zur Temperaturberechnung zweckmäßig. Daneben kann auch die *Apparent Heat Capacity*-Methode verwendet werden, um die Phasenumwandlungen über eine angepasste Wärmekapazität zu berücksichtigen [50]. Häufig wird in diesen Modellen nur der Wärmeübergang durch Konvektion berücksichtigt [51, 52]. Als numerische Werkzeuge werden sowohl *Inhouse*-Codes als auch kommerzielle Lösungen der Finite-Elemente- und Finite-Volumen-Methoden eingesetzt.

Li et al. führten auf der Mesoskala eine dreidimensionale Simulation des LPBF Prozesses mit reinem Titan-Pulver durch. Als Software wurde dabei das Finite-Elemente (FE) Programm Ansys genutzt [53]. Der Wärmeeintrag des Lasers wurde über eine flächige, gaußförmige Wärmestromdichte realisiert. Neben dem Phasenübergang wurde im Modell die geringere Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts sowie der Wärmeübergang via Konvektion und Wärmestrahlung berücksichtigt. Die Studie in der Arbeit konzentrierte sich darauf, wie sich Scangeschwindigkeit und Laserleistung auf das thermische Verhalten des LPBF Prozesses auswirken. Es zeigte sich, dass die Durchschnittstemperatur des Pulverbetts während des Prozesses fortlaufend anstieg.

In einem ähnlichen Modell von Liu et al. für Edelstahl 316L und von Huang et al. für die Titanlegierung Ti6Al4V, bei dem der schichtweise Auftrag berücksichtigt wurde, zeigte sich mit mehreren aufgetragenen Schichten ein Temperaturanstieg und damit verbunden ein größeres Schmelzbad durch die akkumulierte Wärme, während die Aufheiz- und Abkühlraten abnahmen [52, 54].

Da einfache mesoskalige Simulationsmodelle ausschließlich auf der Wärmeleitungsgleichung basieren, erfassen sie nicht die Schmelzbaddynamik, obwohl dies einen erheblichen Einfluss auf den Wärmeübergang zum umliegenden Material hat [51, 55]. Daher verwendeten Kamara et al. anisotrope Wärmeleitungskoeffizienten, die eine Erhöhung der Wärmeleitfähigkeit in den horizontalen Achsen vorsehen, während in der Tiefenrichtung keine Anpassung erfolgte. Dadurch konnte eine höhere Übereinstimmung der Schmelzbadgröße zwischen Simulation und Experiment erreicht werden [51]. Einen großen Einfluss auf das Temperaturfeld hat zudem die Modellierung der Wärmequelle. Durch Auftreffen des Laserstrahls auf das Pulverbett kommt es zu Mehrfachreflexionen, welche zu einer Energieabsorption in dessen Tiefe führt, was in flächigen Wärmequellen nicht berücksichtigt werden kann.

Foroozmehr et al. nutzen eine einfache 3D-Wärmequelle bei der die Laser-Eindringtiefe (*Optical Penetration Depth*, OPD) in Abhängigkeit der Pulvergröße mit der Software Ansys modelliert wurde [56]. Dabei wurde die OPD des FE-Modells durch ein Experiment mit 316L kalibriert und mehrere gradlinige Bahnen mit verschiedenen Scangeschwindigkeiten simuliert. Die Simulationsergebnisse zeigten eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten. Nach der dritten Bahn konnte ein stationäres Schmelzbad beobachtet werden, wobei sich die Tiefe des Schmelzbades über alle Bahnen hinweg nahezu konstant verhielt.

Gusarov et al. entwickelten ein 3D Finite-Differenzen-Modell (FDM) zur Vorhersage der Schmelzbadgröße von 316L, das auf der Strahlungstransfergleichung (*Radiation*

*Transfer Equation*, RTE) und der Enthalpie-Formulierung sowie der Verdampfung beruht [57]. Mit diesem Modell untersuchten sie den Einfluss verschiedener Scangeschwindigkeiten auf die Bildung und Größe der Schmelzbäder. Die Analysen zeigten, dass es einen optimalen Bereich von Scangeschwindigkeiten gab, innerhalb dessen die Schmelzbäder gleichmäßig und zusammenhängend sind. Außerhalb dieser Bereiche führte eine erhöhte Scangeschwindigkeit, aufgrund der PLATEAU-RAYLEIGH-Kapillarinstabilität, zu unterbrochenen Schmelzbädern. Die Destabilisierung wurde durch ein zunehmendes Länge-Breite-Verhältnis des Schmelzbads und eine verringerte Kontaktbreite mit dem Substrat begünstigt.

Die Arbeit von Verhaeghe et al. entwickelte, basierend auf der FVM, ein 3D-Modell für Ti6Al4V analog zur Arbeit von Gusarov et al. [57, 58]. Dabei wurde der Einfluss der Laserleistung auf die Schmelzbadgröße untersucht, wobei die Bedeutung der Verdampfung im Fokus stand. Der Vergleich mit experimentellen Daten zeigte, dass die Modellierung der Schmelzbadbreiten und -tiefen genauer war, wenn die Verdampfung berücksichtigt wurde. Allerdings konnte für die Schmelzbadtiefe, aufgrund der Vernachlässigung der MARANGONI-Konvektion, keine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation erreicht werden.

Zusammenfassend ergibt sich eine klare Modellstrategie für einfache mesoskalige Simulationsmodelle: Wesentlich sind die Einbeziehung pulverbasierter Materialeigenschaften und die Modellierung der Verdampfung über eine Enthalpie-Formulierung. Auch die Wahl der Wärmequelle kann zu einer verbesserten Vorhersagequalität der Simulationen, und damit zu einer besseren Übereinstimmung von Modell und Experiment, führen.

### 2.3.3 Makroskalige Simulationsmodelle

Im Gegensatz zu mesoskaligen Simulationsmodellen liegt der Fokus bei makroskaligen Simulationsmodellen einer LPBF Prozesssimulation auf der Vorhersage von überhitzten Bereichen und thermisch induzierten Eigenspannungen. Aufgrund des hohen Berechnungsaufwandes rückt die genaue Modellierung des Wärmeflusses im Schmelzbad, wie der MARANGONI-Konvektion, in den Hintergrund und wird häufig gar nicht in den makroskaligen Simulationsmodellen berücksichtigt. Zur Vorhersage der Eigenspannungen wird das Temperaturfeld als Eingangsgröße für eine mechanische Berechnung verwendet, bei der ein elasto-plastisches Materialgesetz sowie die Gleichgewichtsbedingungen gelöst werden. Die genaue Auflösung der physikalischen Pulverschichtdicke, des Laserpfades und des Schmelzbades sind bei diesen Modellen nur mit hohem numerischen Aufwand möglich. Deshalb werden häufig mehrere Pulverschichten zu einem Element zusammengefasst. Des Weiteren bestimmt die Elementgröße die Genauigkeit der Approximation des Laserpfades und entspricht, da die Elementgröße häufig größer ist als der Laserdurchmesser, einer skalierten Wärmequelle. Die LPBF Simulation in der Makroskala erfolgt üblicherweise in zwei grundlegenden Schritten.

Zunächst wird ein thermisches Problem gelöst, bei dem ein Temperaturfeld berechnet wird. Anschließend wird die mechanische Reaktion aufgrund dieses Temperaturfeldes berechnet (Einwege-Kopplung). Ähnlich wie im mesoskaligen Simulationsmodell wird auch hier die *Element-Birth-Death*-Technik eingesetzt, um das Wachstum des Bauteils zu berücksichtigen. Für die Simulation werden sowohl eigene Codes als auch kommerzielle Software verwendet, die auf FDM, FEM und FVM basieren.

Ganeriwala et al. simulierten in [59] mit der FE-Software Diabolo (Forschungscode) die thermisch induzierten Eigenspannungen für eine aus Ti6Al4V hergestellte Brückengeometrie (AM-Brücke) bei verschiedenen Scanstrategien und verglichen diese mit den Experimenten aus der Arbeit von [60]. Um dehnungsabhängige Effekte und Relaxationsverhalten bei höheren Temperaturen zu berücksichtigen, wurde ein visko-plastisches bzw. visko-elastisches Materialmodell mit einem von Mises-Fließkriterium verwendet. Um die Berechnungen zu beschleunigen wurden die Pulverschichtdicke auf 0.5 mm und der Laserradius  $r_{\text{Las}}$  auf 0.5 mm, nach dem Agglomerationsansatz [61], skaliert. Mit diesem Modell konnte eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation erreicht werden.

Yang et al. entwickelten ein FE-Modell mit dem Simulia AM-Paket basierend auf ABAQUS 2018 zur Vorhersage der Eigenspannungen eines balkenförmigen Bauteils (AM-Bank) aus Inconel 625 [47]. Bei der Simulation wurde der Laserpfad berücksichtigt und das Modell mit einer Elementgröße von 0.2 mm erstellt. Das verwendete Materialmodell wurde nicht exakt angegeben. Aufgrund der gegebenen Materialwerte ist davon auszugehen, dass ein elasto-plastisches Materialmodell mit einer linearen Verfestigung und einem von Mises-Fließkriterium verwendet wurde. Die Dehnungen aus dem Modell zeigten bei der Studie eine extrem hohe Übereinstimmung mit den Dehnungen aus dem Experiment [62].

Ein alternativer Ansatz für die LPBF Prozesssimulation auf der Makroskala vernachlässigt die individuellen Laserpfade und verteilt stattdessen die vom Laser eingebrachte Energie gleichmäßig über die gesamte Druckschicht. In diesem Zusammenhang ist sowohl eine Skalierung der Laserleistung als auch der Abkühlzeit erforderlich [63–65].

So simulierten Thorborg et al. die AM-Brücke mit der inhärenten Verzerrungsmethode und der FEM [64]. Diese aus dem Bereich der Schweißsimulation stammende Methode ermöglicht eine einfache und schnelle Berechnung, indem gemessene oder modellierte plastische Dehnungen direkt als Last in eine linear-elastische Berechnung einbezogen werden [66]. Das Modell lieferte eine gute Übereinstimmung zwischen dem Experiment aus [60] und der Simulation und bestätigt damit die These von [64], dass der Temperaturgradient in z-Richtung entscheidend für die Entstehung von Eigenspannungen sind. Obwohl die inhärente Verzerrungsmethode eine schnelle und einfache Berechnung ermöglicht, setzt sie voraus, dass die Dehnungsdaten stets aus vorherigen Messungen oder Simulationen verfügbar sind, was in der Praxis mit einem hohen Aufwand verbunden sein kann.

Psihoyos et al. simulierten in ihrer Arbeit [63] sowohl die AM-Brücke als auch die

AM-Bank und verglichen ihre Ergebnisse mit den experimentellen Daten von [60] und [62]. Dabei wurden mehrere Schichten in einem Element zusammengefasst und mit der Schmelztemperatur der verwendeten Legierung initialisiert. Dieser Ansatz basiert auf der Hypothese, dass ein Großteil der Schichten, kurz nach dem der Laser die Schicht vollständig abgescant hat, eine einheitliche Temperatur nahe dem Schmelzpunkt besitzt. Das verwendete Materialmodell wurde in der Arbeit nicht näher erläutert. Die Simulationsergebnisse spiegelten jedoch die Spannungen und Dehnungen aus den Experimenten gut wider, auch wenn bei den Maximalwerten größere Abweichungen festzustellen sind.

Bayat et al. [65] simulierten eine quaderförmige Geometrie, wobei eine schichtweise Berechnung durchgeführt wurde, die in der Arbeit als *Flash-Heating*-Methode bezeichnet wird. Diese Simulation wurde in ABAQUS 2018 mit einem elasto-plastischen Materialmodell unter Verwendung des von MISES-Fließkriteriums und einer linearen Verfestigung durchgeführt. Um die Vorhersagequalität des Modells zu verbessern, wurde das Konzept der schichtweisen Aktivierung weiterentwickelt und eine streifenweise Aktivierung eingeführt. Dadurch wurde eine deutlich höhere Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment erreicht.

Es zeigt sich, dass ein direkter Vergleich der thermo-mechanischen Modelle für die Prozesssimulation des LPBF auf der Makroskala aufgrund der Unterschiede in der Software sowie der fehlenden Informationen zur thermo-mechanischen Modellierung nur schlecht durchführbar ist. Die vorgestellten Ansätze zeigen, dass eine schichtweise Berechnung eine gängige Methode ist. Die komplexen thermischen Phänomene auf der Mesoskala sind für die Prozesssimulation des LPBF auf der Makroskala von untergeordneter Bedeutung und beeinflussen zumindest die charakteristische Form der Eigenspannungen kaum.

### 2.3.4 Prozesssimulation des LPBF mit Graphical Processing Units

Die Auflösung physikalischer Phänomene in der Mesoskala sowie die Berücksichtigung realer Bauteilgrößen resultieren in umfangreichen und komplexen Berechnungsmodellen für den LPBF Prozess. Die Lösung dieser Modelle erfordert eine ausreichende Berechnungskapazität. Diese hohe Berechnungskapazität kann durch den Einsatz von Grafikprozessoren (*Graphical Processing Units*, GPUs) bereitgestellt werden.

Zur Simulation des LPBF Prozesses auf der Makroskala nutzten Mozaffar et al. in ihrer Arbeit eine GPU-Beschleunigung für die FEM, um die transiente Wärmeleitungsgleichung zu lösen [67]. Dabei werden verschiedene Strategien und Optimierungen hinsichtlich der Assemblierung der globalen Matrix<sup>3</sup> verwendet. In der Arbeit wurde mit einer Größe von ca. 0.4 Mio. Knoten gerechnet und eine Beschleunigung von bis zu einem Faktor von 150 im Vergleich zum *Singlecore*-Code erzielt.

---

<sup>3</sup>Bei der Verwendung der FEM im mechanischen Kontext ist die globale Matrix unter dem Namen globale Steifigkeitsmatrix bekannt.

Die Untersuchung von Dugast et al. ist ähnlich zu der Arbeit von [67], jedoch wird eine matrix-freie FEM verwendet [68]. Bei matrix-freien Methoden wird das Speichern der Koeffizienten-Matrix vermieden und die Auswertung erfolgt durch Matrix-Vektor-Produkten, was vor allem bei großen Matrizen Rechenzeit einspart [69]. Mit einem vorkonditionierten konjugierten Gradientenverfahren (PCG-Verfahren) wurden Netze mit bis zu 8 Mio. Knoten um den Faktor 300 schneller gelöst als mit dem *Singlecore*-Code. Die matrix-freie Formulierung wirkte sich zudem begünstigend auf den Speicherverbrauch ( $3.8 \times$  geringer) aus.

Die Arbeit von Prabhune et al. löste, ebenfalls mit einer matrix-freien FEM Formulierung, die elasto-plastischen Gleichungen mit dem von Mises-Fließkriterium zur Berechnung von Eigenspannungen [70]. Dabei wurden bis zu 0.74 Mio. Knoten verwendet. Der Benchmark mit 1 Mio. Elementen erzielte eine  $2.3 \times$  schnellere Berechnung gegenüber dem *Singlecore*-Code.

Liao et al. wiederum lösten die elasto-plastischen Gleichungen unter Berücksichtigung des von Mises-Fließkriteriums mit einer voll vektorisierten Implementierung [71]. Mit einem konjugiertem Gradienten-Verfahren (CG Verfahren) ohne Vorkonditionierung wurde bei 0.15 Mio. Elementen eine Beschleunigung um den Faktor 25 erreicht.

Die vorgestellten Arbeiten von [67, 68, 70, 71] zeigen eine deutliche Steigerung der Berechnungsgeschwindigkeit von LPBF Prozesssimulationen auf der Makroskala durch die Verwendung von GPUs. Dabei wird auch sichtbar, dass matrix-freie Methoden für die Berechnung mit der GPU sehr gut geeignet ist.

Ebenfalls wurden für mesoskalige LBPF Prozesssimulationen GPU beschleunigte Programme verwendet. Weirather et al. simulierten mit SPH die Schmelzbaddynamik eines *Singletrack*-Experiments [72]. Dabei wurde das thermo-fluidische Problem mittels NAVIER-STOKES-Gleichungen und der transienten Wärmeleitungsgleichung abgebildet. Mittels GPU konnten bei dem 3D-Modell von Weirather et al. 11 Mio. SPH-Partikel verwendet werden.

Eine sehr ähnliche Arbeit von Fürstenau et al. berücksichtigte bei gleicher Auflösung ( $1 \mu\text{m}$ ) ein größeres Gebiet, was bereits zu 25.08 Mio. Partikeln führte [73].

Afrasiabi et al. berücksichtigen in ihrer Arbeit zusätzlich das Aufbringen mehrerer Schichten in einem 2D SPH-Modell, die Partikelanzahl geht aus der Studie jedoch nicht hervor [74].

In der Arbeit von Zakirov et al. wurde die LBM eingesetzt um ein *Singletrack*-Experiment zu simulieren [44]. Dabei wurde eine Auflösung von  $3 \mu\text{m}$  und ein Gitter mit 5 Mio. Zellen verwendet.

In den Studien von [44, 72–74] zur Modellierung des LPBF Prozesses auf der Mesoskala wurden keine expliziten Angaben zur erzielten Beschleunigung von GPU-basierten Codes im Vergleich zu CPU-basierten Codes gemacht. Dies legt den Schluss nahe, dass aufgrund der extrem hohen Anzahl an Freiheitsgraden eine effiziente Berechnung erst durch den Einsatz von GPUs möglich wurde.

# 3 | LPBF Prozessmodell

## Inhalt

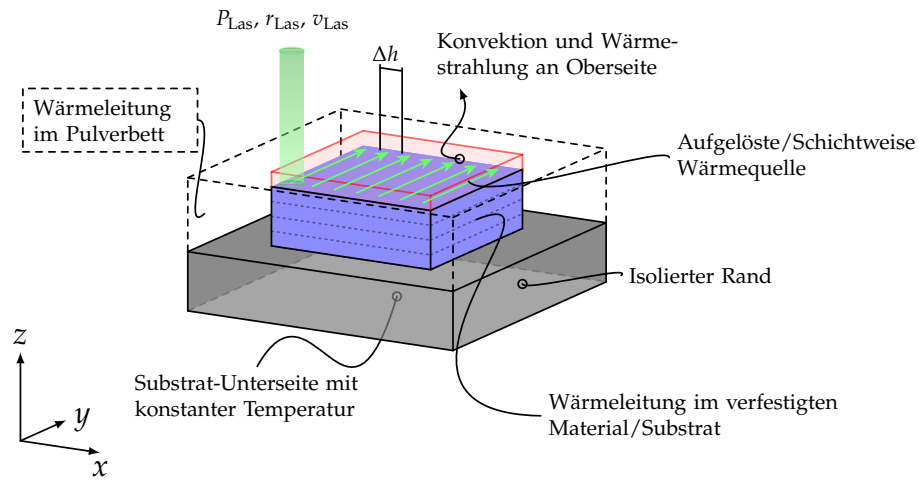
|     |                                                              |    |
|-----|--------------------------------------------------------------|----|
| 3.1 | Modellübersicht . . . . .                                    | 17 |
| 3.2 | Thermisches Modell . . . . .                                 | 20 |
| 3.3 | Mechanisches Modell . . . . .                                | 27 |
| 3.4 | Diskretisierung und Lösungen der Modellgleichungen . . . . . | 34 |
| 3.5 | Materialdaten zu Ti6Al4V . . . . .                           | 55 |
| 3.6 | Verarbeitung des G-Code . . . . .                            | 58 |
| 3.7 | Programmablauf der LPBF Prozesssimulation . . . . .          | 61 |

Dieses Kapitel behandelt die Modelle und Methoden des LPBF Prozessmodells zur Vorhersage der Temperaturverteilung und der daraus resultierenden Spannungen und Dehnungen für die Titanlegierung Ti6Al4V. Zunächst wird in Abschnitt 3.1 eine Übersicht des Modells gegeben. Anschließend werden das thermische und das mechanische Modell in Abschnitt 3.2 und Abschnitt 3.3 vorgestellt. Die Diskretisierung und Lösung der zuvor aufgestellten Gleichungen werden in Abschnitt 3.4 behandelt. In Abschnitt 3.5 werden die Materialdaten der verwendeten Titanlegierung Ti6Al4V beschrieben. Das vollautomatische *Preprocessing* basierend auf dem G-Code, wird in Abschnitt 3.6 thematisiert. Schließlich wird der finale Programmablauf der LPBF Prozesssimulation in Abschnitt 3.7 erläutert und zusammengefasst.

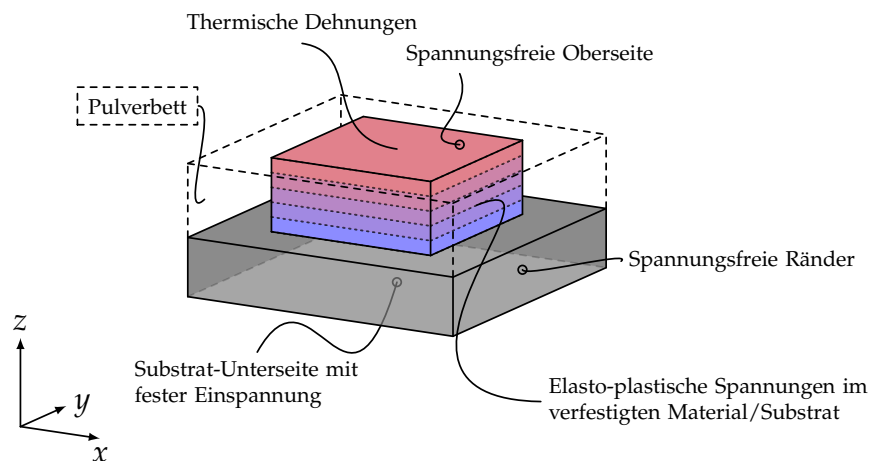
## 3.1 Modellübersicht

Das LPBF Prozessmodell zur Vorhersage der Temperaturverteilung und der daraus resultierenden temperaturinduzierten Spannungen und Dehnungen umfasst ein thermisches und ein mechanisches Modell, die über eine Ein-Wege-Kopplung miteinander verbunden sind. Abbildung 3.1 zeigt dabei die einzelnen zu modellierenden Phänomene und Randbedingungen des thermischen (Abbildung 3.1(a)) bzw. mechanischen Modells (Abbildung 3.1(b)).

Zunächst wird die Wärmequelle abhängig von der betrachteten Skala und gewählten Prozessparameter modelliert. Auf der Mesoskala wird eine aufgelöste Wärmequelle verwendet, die die Verteilung der Laserenergie im Material berücksichtigt. Dies ist entscheidend für die genaue Erfassung von Temperaturspitzen und der Größe des Schmelzbades. Auf der Makroskala hingegen erfolgt die Modellierung der Wärmequelle



(a) Thermisches Modell



(b) Mechanisches Modell

Abbildung 3.1: Phänomene und Randbedingungen des thermo-mechanischen LPBF Prozessmodells.

schichtweise, was die Simulation größerer Bereiche effizienter gestaltet und die globalen thermischen Effekte auf das gesamte Bauteil erfasst.

Des Weiteren wird die Wärmeleitung im thermischen Modell für das Pulverbett, das Substrat und das verfestigte Bauteil über temperaturabhängige Materialwerte berücksichtigt, wobei die geringe Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts durch ein spezifisches Modell erfasst wird. Diese geringe Leitfähigkeit führt zu Isolationseffekten, wodurch die Wärme nur langsam abgeführt wird, was zu hohen lokalen Temperaturen führen

kann und die Schmelz- und Erstarrungsvorgänge sowie die thermischen Spannungen im Bauteil beeinflusst.

Als Randbedingungen des thermischen Modells werden eine konstante Temperatur an der Unterseite des Substrates sowie Konvektion und Wärmestrahlung an der Oberseite des Bauteils vorgegeben. Die seitlichen Ränder werden thermisch isoliert, da das Pulverbett aufgrund seiner geringen Wärmeleitfähigkeit diese Isolationseffekte auf natürliche Weise erzeugt.

Um den schichtweisen Aufbau des Bauteils realistisch zu simulieren, wird im thermischen Modell die *Element-Birth-Death*-Technik angewendet, die es ermöglicht, den aktuellen Fertigungsfortschritt des Bauteils darzustellen, indem neue Elemente in Abhängigkeit der Temperatur und der Laserposition aktiviert werden.

Im mechanischen Modell werden die durch das thermische Modell berechneten Temperaturverteilungen verwendet, um die resultierenden Spannungen und Verformungen im Bauteil zu berechnen. Die thermischen Dehnungen, die durch die Temperaturänderungen verursacht werden, führen zu mechanischen Spannungen, die sowohl elastische als auch plastische Verformungen im Material erzeugen können.

Das Modell berücksichtigt das elasto-plastische Materialverhalten, wobei das Material bei Überschreiten der Fließgrenze plastisch verformt wird. Die Materialeigenschaften werden dabei ebenfalls temperaturabhängig modelliert, um den Einfluss wechselnder Temperaturen auf die Spannungs- und Dehnungsbildung während des Prozesses realistisch abzubilden.

Als Randbedingungen des mechanischen Modells wird die Unterseite des Substrats als fest eingespannt betrachtet. Die seitlichen Ränder werden als spannungsfrei angenommen, um realistische Verformungs- und Spannungsverteilungen zu ermöglichen.

Abbildung 3.2 zeigt die Struktur und den Ablauf des gesamten Prozessmodells. Im *Preprocessing* werden die wesentlichen Eingangsdaten wie Prozessparameter und Materialdaten aufbereitet, die anschließend in das thermisch-mechanische Modell einfließen. Dieses Modell, bestehend aus einem thermischen und einem mechanischen Teil, ermöglicht die Berechnung der Temperaturen und der daraus resultierenden Spannungen und Dehnungen im Bauteil. Eine detaillierte Betrachtung dieser Modelle, einschließlich der Abbildung der oben beschriebenen Phänomene und Randbedingungen, erfolgt in den nachfolgenden Kapiteln.

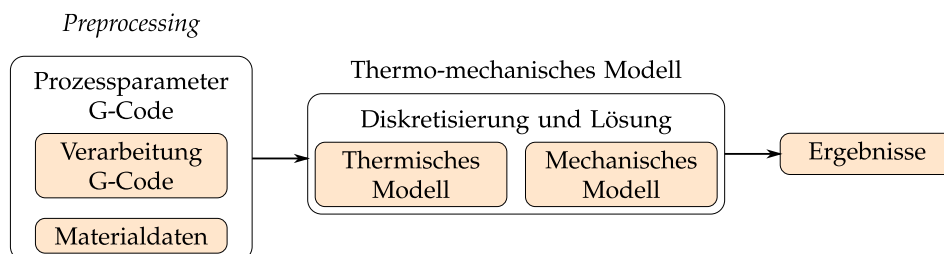


Abbildung 3.2: Übersicht der LPBF Prozesssimulation.

## 3.2 Thermisches Modell

Das thermische Modell stellt den wesentlichen Bestandteil der LPBF Prozesssimulation dar. Die folgenden Gleichungen basieren auf den Werken [75–77]. Ausführliche Details, weiterführende Hintergründe und Herleitungen sind in den genannten Werken zu finden.

### 3.2.1 Mechanismen der Wärmeübertragung

Die Übertragung von Wärme basiert allgemein auf drei unterschiedliche Mechanismen: Wärmeleitung, Konvektion und Wärmestrahlung [77]. Im Folgenden werden diese drei Mechanismen der Wärmeübertragung kurz erläutert.

#### Wärmeleitung

Die Wärmeleitung ist ein Phänomen, das auftritt, sobald ein Temperaturgradient in einem Stoff vorhanden ist [77]. Die Wärmestromdichte  $q$ , die durch Temperaturdifferenzen innerhalb eines isotropen Körpers bei der Wärmeleitung entsteht, folgt dem FOURIERSCHEN Gesetz

$$q = -\kappa \nabla T. \quad (3.1)$$

Die Wärmestromdichte  $q$  ist zur Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$  des Materials direkt proportional und hängt von der räumlichen Änderung der Temperatur, dargestellt durch den Temperaturgradienten  $\nabla T$ , ab. Dabei ist die Richtung des Wärmeflusses entgegengesetzt zur Richtung des Temperaturanstiegs.

#### Konvektion

Neben der Wärmeleitung kann Wärme auch durch Konvektion in einem Fluid (Flüssigkeit oder Gas) übertragen werden, was häufig als Randbedingung verwendet wird [77]. Die konvektive Wärmestromdichte  $q_C$  kann mit der Beziehung

$$q_C = \alpha(T_O - T_F) \quad (3.2)$$

berechnet werden [77]. Dabei repräsentiert  $T_O$  die Oberflächentemperatur,  $T_F$  die Fluidtemperatur im hinreichenden Abstand zur Oberfläche und damit oberhalb der Temperaturgrenzschicht, und  $\alpha$  den Wärmeübergangskoeffizienten [77].

#### Wärmestrahlung

Bei dem Mechanismus der Wärmeübertragung durch Wärmestrahlung erfolgt der Transport der Energie durch elektromagnetische Wellen [77]. Unter der Annahme eines

grauen Strahlers in einer schwarzen Umgebung kann die Strahlungs-Wärmestromdichte  $q_R$  mit der Beziehung

$$q_R = \varepsilon \sigma (T_O^4 - T_\infty^4). \quad (3.3)$$

berechnet werden [77]. Dabei entspricht  $T_O$  der Oberflächentemperatur,  $T_\infty$  der Umgebungstemperatur,  $\varepsilon$  dem Emissionsgrad des Materials und  $\sigma = 5.670374 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$  der STEFAN-BOLTZMANN-Konstante [77].

Die Wärmeübertragung durch Konvektion und Wärmestrahlung finden simultan statt, sodass der gesamte übertragene Wärmestrom sich mit

$$q = q_R + q_C = \alpha (T_O - T_F) + \varepsilon \sigma (T_O^4 - T_\infty^4) \quad (3.4)$$

berechnet [77]. Häufig gilt die Annahme  $T_F \approx T_\infty$  sodass der konvektive Wärmeübergang und die Wärmestrahlung zu einem Wärmestrom mit

$$q = (\alpha + \alpha_R)(T_O - T_\infty) \quad (3.5)$$

zusammengefasst werden können [77].  $\alpha_R$  entspricht dabei dem strahlungsbedingten Wärmeübergangskoeffizienten der aus Gleichung (3.4) und Gleichung (3.5) berechnet wird:

$$\alpha_R = \varepsilon \sigma \frac{T_O^4 - T_\infty^4}{T_O - T_\infty} = \varepsilon \sigma (T_O^2 + T_\infty^2)(T_O + T_\infty). \quad (3.6)$$

Um die LPBF-spezifischen Temperaturphänomene abzubilden, werden im Folgenden der Emissionsgrad und die effektive Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts sowie die Wärmequellen für die verschiedenen Prozessskalen erläutert.

### 3.2.2 Emissionsgrad des Pulverbetts

Der Emissionsgrad eines Materials beschreibt das Verhältnis der von einer Oberfläche pro Flächeneinheit abgestrahlten Wärmemenge zu der Wärmemenge, die von einem schwarzen Strahler gleicher Temperatur abgestrahlt wird [77]. Zur Berücksichtigung der Pulverbett-Emission wurden die Zusammenhänge aus [78] verwendet. Die Grundlage bildet der Emissionsgrad des homogenen Feststoffs  $\varepsilon_s$  und die Porosität des Pulverbetts  $\psi$ . Unter der Annahme, dass das Substrat ausreichend von Pulver bedeckt ist, sodass kein Emissionsbeitrag des Substrats berücksichtigt werden muss, gilt für den Emissionsgrad des Pulverbetts  $\varepsilon_{PB}$

$$\varepsilon_{PB} = A_h \varepsilon_h + (1 - A_h) \varepsilon_s. \quad (3.7)$$

Dabei repräsentiert  $A_h$  den Flächenanteil und  $\varepsilon_h$  die Emissivität der strahlungsemittierenden Öffnungen. Beide Größen können aus der Porosität des Pulverbetts  $\psi$  durch

$$A_h = \frac{0.908\psi^2}{1.908\psi^2 - 2\psi + 1} \quad (3.8)$$

$$\varepsilon_h = \frac{\varepsilon_s \left( 2.0 + 3.082 \left( \frac{1-\psi}{\psi} \right)^2 \right)}{\varepsilon_s \left( 1.0 + 3.082 \left( \frac{1-\psi}{\psi} \right)^2 \right) + 1.0} \quad (3.9)$$

berechnet werden [78].

Der Emissionsgrad des Pulverbetts ist somit eine Größe, die in guter Näherung, nur von der Porosität des Pulverbetts und der Emissivität des homogenen Feststoffs abhängt. Die Porosität kann durch eine DEM-Simulation bestimmt werden, wie im späteren Verlauf in Unterabschnitt 4.3.1 gezeigt wird.

### 3.2.3 Effektive Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts

Die Wärmeleitung im Pulverbett ist ein wesentlicher Faktor bei der Untersuchung des thermischen Verhaltens des LPBF Prozesses. Aufgrund der geringen Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts hat diese einen signifikanten Einfluss auf die Temperaturverteilung. Die Modellierung der effektiven Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts  $\kappa_e$  erfolgt in dieser Arbeit nach [79] mit

$$\frac{\kappa_e}{\kappa_g} = \left( 1 - \sqrt{1 - \psi} \right) \left( 1 + \frac{\psi \kappa_R}{\kappa_g} \right) + \sqrt{1 - \psi} \left\{ (1 - S) \left[ \frac{2}{1 - B \frac{\kappa_g}{\kappa_s}} \left( \frac{B}{(1 - B \frac{\kappa_g}{\kappa_s})^2} \right. \right. \right. \quad (3.10)$$

$$\left. \left. \left( 1 - \frac{\kappa_g}{\kappa_s} \right) \ln \frac{\kappa_s}{B \kappa_g} - \frac{B + 1}{2} - \frac{B - 1}{1 - B \frac{\kappa_g}{\kappa_s}} \right) + \frac{\kappa_R}{\kappa_g} \right] + S \frac{\kappa_C}{\kappa_g} \right\}.$$

Dabei repräsentiert  $\kappa_s$  die temperaturabhängige Feststoffwärmeleitfähigkeit und  $\kappa_g$  die Wärmeleitfähigkeit des umgebenden Gases.  $\kappa_R$  ist die strahlungsbedingte Wärmeleitfähigkeit und berechnet sich mit dem Sichtfaktor  $1/(1/\varepsilon_{PB} - 0.132)$  [80], und dem Emissionsgrad des Pulverbetts  $\varepsilon_{PB}$  sowie dem mittleren Durchmesser der Pulverpartikel  $D_m$  durch

$$\kappa_R = \frac{4\varepsilon_{PB}\sigma T^3 D_m}{1 - 0.132\varepsilon_{PB}}. \quad (3.11)$$

Des Weiteren entspricht  $B$  dem Deformationsparameter des Partikels, der sich aus der Porosität des Pulverbetts mit dem Zusammenhang

$$B \approx 1.25 \left( \frac{1 - \psi}{\psi} \right)^{\frac{10}{9}} \quad (3.12)$$

berechnet. Die Kontaktwärmeleitfähigkeit im Pulverbett  $\kappa_C$  wird, unter Berücksichtigung des geglätteten Oberflächenanteils  $S$  eines Partikels im Kontakt mit einem anderen Partikel, durch

$$\kappa_C = 18S\kappa_s \quad (3.13)$$

berechnet, dabei gilt für ein Pulver im Anlieferungszustand  $S = 1 \times 10^{-5}$  [80, 81].

### 3.2.4 Wärmequellen für mesoskalige Prozesssimulationen

Neben dem Pulverbett beeinflusst auch die Modellierung der Wärmequellen das Temperaturfeld. Eine umfangreiche Übersicht bietet die Arbeit von [82], welche die wesentlichen Wärmequellen und deren Einflüsse auf das Schmelzbad untersucht.

Die gaußförmige 2D-Wärmequelle stellt die einfachste Form der Wärmequelle in der LPBF Prozesssimulation dar. Dabei repräsentiert die modellierte Gaußverteilung  $q_0$  die dominante Laser-Grundmode TEM00 [49]

$$q_0 = \frac{2\eta P_{\text{Las}}}{\pi r_{\text{Las}}^2} \exp \left\{ \frac{-2((x - x_{\text{Las}})^2 + (y - y_{\text{Las}})^2)}{r_{\text{Las}}^2} \right\}. \quad (3.14)$$

Hierbei repräsentiert  $P_{\text{Las}}$  die Leistung des Lasers,  $\eta$  den Absorptionsgrad<sup>4</sup>,  $r_{\text{Las}}$  den Radius des Lasers, und  $x_{\text{Las}}$ ,  $y_{\text{Las}}$  die Position des Lasers im  $x$ - $y$ -Koordinatensystem. Diese Wärmequelle hat ihren Ursprung in der Schweißsimulation [84–86], jedoch kann sie die Absorption der Energie in die Pulverbett-Tiefe nicht adäquat berücksichtigen und führt zu einer starken Überschätzung der Schmelzbad-Temperatur [87]. Aus diesem Grund ist es zweckmäßig, volumetrische Wärmequellen in der LPBF Prozesssimulation zu verwenden.

In der vorliegenden Arbeit wird die volumetrische Wärmequellen nach [57] genutzt, die sich aus der eindimensionalen Strahlungstransportgleichung ableitet. Dabei wird das Pulverbett als optisches Medium mit einem Extinktionskoeffizienten  $\beta$  modelliert. Die Wärmequelle setzt sich dann aus der gaußförmigen 2D-Wärmequelle sowie einem Absorptionsprofil  $\frac{dE_R(\xi)}{d\xi}$  über der Tiefe in  $z$ -Richtung durch

$$q_V = -\beta \frac{2P_{\text{Las}}}{\pi r_{\text{Las}}^2} \exp \left\{ \frac{-2((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)}{r_{\text{Las}}^2} \right\} \frac{dE_R(\xi)}{d\xi} \quad (3.15)$$

zusammen.

$E_R(\xi)$  stellt die dimensionslose Strahlungsenergiedichte in Abhängigkeit der lokalen Tiefe  $\xi = \beta z$  dar und berechnet sich aus der hemisphärischen Reflexivität  $\rho_h$ , der

<sup>4</sup>Der Absorptionsgrad  $\eta$  muss experimentell bestimmt werden und liegt im Bereich 0.3-0.77 [34, 59, 83], abhängig von Material und Prozessbedingungen.

Pulverbett Dicke  $t_{PB}$  sowie der optischen Dicke  $\lambda = \beta t_{PB}$  durch

$$E_R(\xi) = \frac{\rho_h a}{(4\rho_h - 3) D} \left( [1 - \rho_h^2] e^{-\lambda} \left[ (1 - a) e^{-2a\xi} + (1 + a) e^{2a\xi} \right] \right. \\ \left. - \left[ 3 + \rho_h e^{-(2\lambda)} \right] \left[ (1 + a - \rho_h(1 - a)) e^{2a(\lambda - \xi)} + (1 - a - \rho_h(1 + a)) e^{2a(\xi - \lambda)} \right] \right) \\ - \frac{3(1 - \rho_h)(e^{-\xi} - \rho_h e^{\xi - 2\lambda})}{4\rho_h - 3}, \quad (3.16)$$

mit den Hilfsternen  $D = (1 - a)[1 - a - \rho_h(1 - a)]e^{-2a\lambda} - (1 + a)[1 + a - \rho_h(1 - a)]e^{2a\lambda}$  und  $a = \sqrt{1 - \rho_h}$ . Die optische Dicke  $\lambda$  und der Extinktionskoeffizient  $\beta$  können aus der Pulverbett Dicke  $t_{PB}$ , dem mittleren Durchmesser der Pulverpartikel  $D_m$  sowie der Porosität des Pulverbetts  $\psi$  mit

$$\beta = \frac{3}{2} \frac{1 - \psi}{\psi} \frac{1}{D_m} \quad (3.17)$$

berechnet werden. Die volumetrische Wärmequelle nach [57] bietet ein effizientes Modell zur Berücksichtigung der komplexen Wechselwirkungen zwischen Laser und Pulverbett in der Pulverbetttiefe.

### 3.2.5 Wärmequellen für makroskalige Prozesssimulationen

Im Gegensatz zur Mesoskala, wird für die Prozesssimulation auf der Makroskala eine stark vereinfachte Wärmequelle verwendet. Mit dem Ziel, Bauteile in der Größenordnung von mehreren Zentimetern zu berechnen, würde die Auflösung der physikalischen Pulverschichtdicke mit 30  $\mu\text{m}$  bis 100  $\mu\text{m}$  zu einer sehr hohen Gitterauflösung und damit verbundenen Rechenzeit führen. Daher ist es üblich, die Laserbahnen nur noch teilweise oder gar nicht mehr abzubilden und mehrere Pulverschichten zu einer aggregierten Schicht zusammenzufassen [63–65]. Jedoch müssen die Prozessparameter in dieser Schicht angepasst werden, sodass die Prozesscharakteristik erhalten bleibt. Im Folgenden wird dieses Vorgehen als *Layerheating* bzw. *Layerheating*-Methode bezeichnet.

In dieser Arbeit erfolgt die Simulation des LPBF Prozesses auf der Makroskala mit Hilfe der Wärmequellen nach Zhang et al. [88] und Gouge et al. [89]. Beide Modelle aggregieren mehrere Schichten und verzichten auf eine detaillierte Auflösung des Laserpfades. Die Anpassung der Prozessparameter basiert auf einer Energiebilanz über die herzustellenden Schichten. Das Modell nach [88] nimmt an, dass jeder Materialpunkt einer effektiven Scanzeit  $t_H$  ausgesetzt ist, die sich aus dem Radius  $r_{Las}$  und der Geschwindigkeit  $v_{Las}$  des Lasers durch

$$t_H = \frac{2r_{Las}}{v_{Las}} \quad (3.18)$$

berechnet. Die Scanzeit pro Schicht  $t_L$  kann wiederum aus der Lasergeschwindigkeit  $v_{\text{Las}}$ , dem *Hatch*-Abstand  $\Delta h$  und der zu bearbeitenden Fläche  $A_L$  über

$$t_L = \frac{A_L}{\Delta h v_{\text{Las}}} \quad (3.19)$$

ermittelt werden. Die Scanzeit pro Schicht  $t_L$  multipliziert mit der Laserleistung  $P$  und dem Absorptionsgrad  $\eta$  muss gemäß der Energiebilanz gleich der Energie sein, die vom Material während der effektiven Scanzeit  $t_H$  absorbiert wird

$$\eta P t_L = q_V V_L t_H = q_V n_L t_{\text{PB}} A_L t_H. \quad (3.20)$$

Das Volumen  $V_L$  ist das Produkt aus der tatsächlichen Schichthöhe  $t_{\text{PB}}$ , der Fläche  $A_L$  und der Anzahl der Schichten  $n_L$ . Werden die vorangegangenen Gleichungen miteinander kombiniert resultiert der Ausdruck für die Wärmequelle  $q_V$

$$q_V = \frac{\eta P}{\Delta h t_{\text{PB}} 2 r_{\text{Las}} n_L} = \frac{\eta P}{\Delta h \Delta z 2 r_{\text{Las}}}, \quad (3.21)$$

die über eine Dauer von  $t_H$  im thermischen Modell einwirkt. Die Abkühlzeit  $t_C$  berechnet sich aus der Scanzeit pro herzustellender Schicht  $t_L$ , der Zeit für das Auftragen einer neuen Pulverschicht, auch bekannt als *Interlayer*-Zeit  $t_{\text{IL}}$ , sowie der effektiven Scanzeit  $t_H$  mit

$$t_C = t_L - t_H + t_{\text{IL}}. \quad (3.22)$$

Werden  $n_L$  Schichten zusammengefasst, gilt für die Abkühlzeit  $t_C$

$$t_C = t_L n_L - t_H + t_{\text{IL}} n_L = (t_L + t_{\text{IL}}) n_L - t_H. \quad (3.23)$$

Das Modell nach [89] stellt keine Wärmequelle im eigentlichen Sinne, sondern mehr eine zeitabhängige Temperaturrandbedingung zur Initialisierung einer neuen Schicht dar

$$T = T_\infty + \frac{\eta P}{\rho c_p t_{\text{PB}} \Delta h v_{\text{Las}}}. \quad (3.24)$$

Der hintere Teil der Gleichung (3.24) gibt dabei die Temperaturüberhöhung zur Umgebungstemperatur an und lässt sich, analog zu Gleichung (3.21), aus einer Energiebilanz mit abgeschätzten Materialparameter herleiten. Der wesentliche Vorteil dieser Methode liegt in ihrer einfachen Anwendung. Allerdings kann es aufgrund der auf eine spezifische Temperatur geschätzten Materialparameter zu einer gewissen Ungenauigkeit kommen, insbesondere da der Prozess einen breiten Temperaturbereich durchläuft, in dem diese Materialparameter variieren.

Das Temperaturfeld  $T$  zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t$  und an einem Ort  $(x, y, z)$  wird durch die Wärmeleitungsgleichung beschrieben, welche im Folgenden erläutert wird. Diese berücksichtigt die zuvor beschriebenen thermischen Eigenschaften wie den Emissionsgrad, die effektive Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts sowie die Wärmequelle.

### 3.2.6 Wärmeleitungsgleichung

Die Herleitung der Wärmeleitungsgleichung basiert auf dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik, der für ein abgeschlossenes System die Erhaltung der Energie fordert [77]. Für das abgeschlossene und ruhende System, in dem weder Bewegung stattfindet noch mechanische Arbeit verrichtet wird (vgl. Abbildung 3.3) entspricht die zeitliche Änderung der thermischen inneren Energie  $\dot{U}$  in dem infinitesimalen Kontrollvolumen

$$\dot{U} = Q_x - Q_{x+dx} + Q_y - Q_{y+dy} + Q_z - Q_{z+dz} + Q \quad (3.25)$$

dem Nettowärmeübertrag durch ein- und austretende Wärmeströme in das System sowie wirksamen Wärmequellen  $Q$  [77].

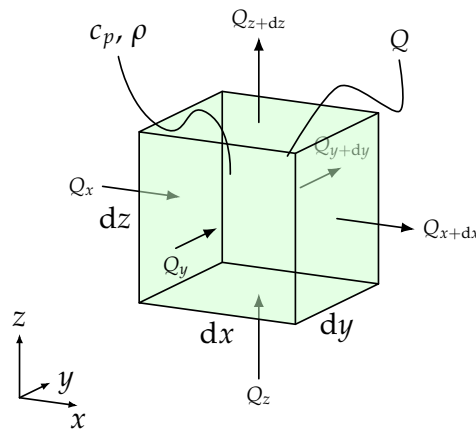


Abbildung 3.3: Ein- und ausfließende Wärmeströme in einem Kontrollvolumen  $dV$ .

Die Änderungsrate der thermischen inneren Energie  $\dot{U}$  eines homogenen, isotropen Mediums mit der Dichte  $\rho$  und der Wärmekapazität  $c_p$  innerhalb des Kontrollvolumens  $dV = dxdydz$  wird mit

$$\dot{U} = \rho c_p dV \frac{\partial T}{\partial t} = \rho c_p dxdydz \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.26)$$

beschrieben [75]. Werden nun alle eintretenden Wärmeströme mit

$$Q_x = q_x dydz, \dots, Q_z = q_z dxdy$$

und alle austretenden Wärmeströme über eine abgebrochene TAYLORreihen-Entwicklung mit

$$Q_{x+dx} = \left[ q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} dx \right] dydz, \dots, Q_{z+dz} = \left[ q_z + \frac{\partial q_z}{\partial z} dz \right] dxdy$$

berücksichtigt [75], folgt zusammen mit Gleichung (3.26) aus Gleichung (3.25)

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = - \left( \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) + \frac{Q}{dxdydz} = - \nabla \cdot \vec{q} + \frac{Q}{dxdydz}. \quad (3.27)$$

Mit dem FOURIERSCHEN Gesetz, Gleichung (3.1), sowie der volumetrischen Wärmestromdichte  $q_V = \frac{Q}{dx dy dz}$  kann aus Gleichung (3.27) die Wärmeleitungsgleichung für ein isotropes und homogenes Material

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + q_V \quad (3.28)$$

formuliert werden.

Oftmals ist es möglich, die Druckabhängigkeit der Enthalpie zu vernachlässigen, insbesondere bei Flüssigkeiten und Feststoffen [76]. Dadurch entspricht die innere Energie  $U$  der (volumetrischen) Enthalpie  $H$  des Systems und es kann eine Enthalpie-Formulierung der Wärmeleitungsgleichung mit

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + q_V \quad (3.29)$$

angegeben werden [58]. Da der LPBF Prozess großen Temperaturänderungen und das Material damit einem Phasenwechsel unterliegt, erweist sich die Enthalpie-Formulierung der Gleichung (3.28) als nützlich, um den festen und flüssigen Bereich in einer Gleichung abzubilden und zu lösen. Sowohl Gleichung (3.28) als auch Gleichung (3.29) beschreiben die Energieerhaltung die überall im betrachteten homogenen Körper erfüllt sein müssen.

Damit sind alle Grundgleichungen des thermischen Modells beschrieben. Sowohl die diskrete Form als auch die Randbedingungen der Wärmeleitungsgleichung werden mit der Energiebilanz-Methode in Abschnitt 3.4.3 hergeleitet.

### 3.3 Mechanisches Modell

Die Berechnung thermisch induzierter Dehnungen und Spannungen erfordert die Verwendung eines mechanischen Modells. In diesem Modell wird das zuvor berechnete Temperaturfeld als Eingangsgröße verwendet. Basierend auf dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten wird eine thermische Dehnung in den Knoten ermittelt. Da in der Energiebilanz in Gleichung (3.25) weder Volumenarbeit noch sonstige mechanische Einflüsse berücksichtigt werden, entspricht die Verbindung zwischen dem mechanischen und thermischen Modell der Einwege-Kopplung. Dieser Ansatz wird häufig in der thermo-mechanischen Simulation des LPBF Prozesses verwendet [59, 61, 63–65].

In den folgenden Abschnitten werden nur die grundlegenden Gleichungen des mechanischen Modells vorgestellt, die auf den Arbeiten [90–93] basieren, auf die für detaillierte Informationen, weiterführende Hintergründe und vollständige Herleitungen verwiesen wird.

#### 3.3.1 Verschiebungen und der linearisierte Dehnungstensor

In der Kontinuumsmechanik wird ein Körper als zusammenhängende Menge materieller Punkte in einem EUKLIDISCHEN Raum  $\mathbb{R}^3$  definiert [91]. Wie in Abbildung 3.4 illustriert,

wird zwischen der Referenzkonfiguration  $\Omega_0$  und der Momentankonfiguration  $\Omega$  unterschieden. Die zu  $\Omega_0$  gehörenden materiellen Punkte  $P_0$  werden mit den Ortsvektoren  $\mathbf{X}$ , die materiellen Punkte  $P$  aus  $\Omega$  mit den Ortsvektoren  $\mathbf{x}$  beschrieben. Die Verschiebung  $\mathbf{u}$  der materiellen Punkte bei einer Deformation des Körpers wird durch

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X} \quad (3.30)$$

bestimmt und stellt die Differenz zwischen der aktuellen Lage  $\mathbf{x}$  und der Lage  $\mathbf{X}$  in der Referenzkonfiguration dar [92].

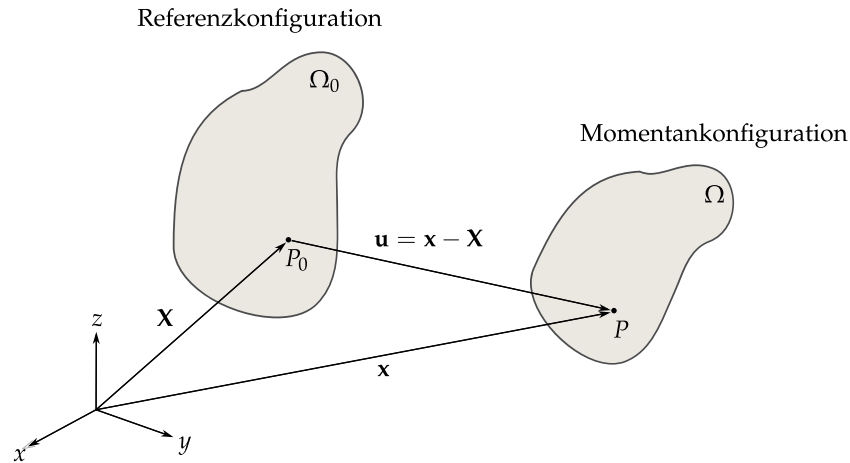


Abbildung 3.4: Darstellung der Deformation eines Körpers in der Referenz- und Momentankonfiguration in Anlehnung an [92].

Der Deformationsgradient  $\nabla \mathbf{u}$  kann dabei über die materielle (LAGRANGESCHE) oder räumliche (EULERSCHE) Betrachtungsweise dargestellt werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden nur kleine Verschiebungen berücksichtigt (geometrisch lineare Theorie), sodass nicht zwischen materieller und räumlicher Darstellung unterschieden werden muss [91]. Unter dieser Annahme lässt sich der Dehnungstensor  $\varepsilon$  durch den Deformationsgradienten mit

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{\partial u_y}{\partial y} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.31)$$

beschreiben.

### 3.3.2 CAUCHY-Spannungstensor

In der Regel muss ein Körper Randbedingungen erfüllen und es können äußere Belastungen auf ihn einwirken. Dadurch entsteht in seinem Inneren ein Beanspruchungszustand (vgl. Abbildung 3.5). Die lokale Beanspruchung an jedem Punkt des Körpers wird durch die dort herrschende Spannung bestimmt und kann mathematisch durch den CAUCHY-Spannungstensor beschrieben werden [91]. Der CAUCHY-Spannungstensor  $\sigma$  leitet sich aus den Spannungsvektoren dreier orthogonaler Schnitte durch einen Punkt eines infinitesimalen Volumenelements her [91] und stellt sich als Matrix

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

dar [93]. Hierbei stehen  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$  für die Normalspannungen und  $\sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}$  für die Schubspannungen (vgl. Abbildung 3.5).

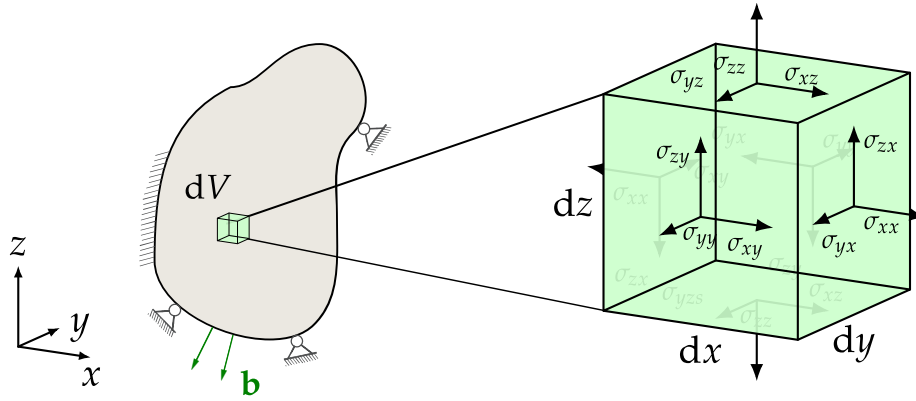


Abbildung 3.5: Körper unter Belastung (links) und Spannungszustand an einem infinitesimalen Volumenelement für einen beliebigen Körperpunkt (rechts), beschrieben durch den CAUCHY-Spannungstensor.

Der CAUCHY-Spannungstensor kann in einen hydrostatischen und einen deviatorischen Anteil zerlegt werden, der zur Formulierung elasto-plastischer Materialgesetze verwendet wird [90]. Der hydrostatische Anteil  $\sigma_H$  des Tensors berechnet sich aus den Normalspannungen durch

$$\sigma_H = \frac{1}{3} \text{tr}(\sigma) = \frac{1}{3} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}). \quad (3.33)$$

Damit lässt sich der CAUCHY-Spannungstensor  $\sigma$  entsprechend

$$\sigma = \underbrace{\sigma_H \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\sigma_H \mathbf{I}} + \underbrace{\begin{bmatrix} \sigma_{xx} - \sigma_H & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} - \sigma_H & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} - \sigma_H \end{bmatrix}}_s \quad (3.34)$$

aufteilen. Der Anteil  $\sigma_H \mathbf{I}$  beschreibt den hydrostatischen Spannungszustand und wird als Kugeltensor bezeichnet; der zweite Anteil  $s$ , der die Abweichung vom hydrostatischen Teil beschreibt, ist der Spannungsdeviator [93].

Da sowohl der Dehnungstensor als auch der CAUCHY-Spannungstensor und der Spannungsdeviator symmetrisch sind, gilt für die entsprechenden Elemente auf der Nebendiagonalen – hier für die Dehnungen dargestellt –  $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx}$ ,  $\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx}$  und  $\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy}$ , wodurch diese Tensoren jeweils nur sechs unabhängige Komponenten besitzen [91]. Das Materialgesetz beschreibt den Zusammenhang zwischen Spannungen und Dehnungen und wird in Abschnitt 3.3.4 erläutert.

### 3.3.3 Gleichgewichtsbedingung

Die Gleichgewichtsbedingung leitet sich aus der Impulserhaltung her und ist Grundbestandteil der Kontinuumsmechanik [91]. Ein System im statischen Gleichgewicht kann durch

$$\mathbf{0} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} \quad (3.35)$$

beschrieben werden [91]. Dabei entspricht  $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$  der Divergenz des CAUCHY-Spannungstensors und  $\mathbf{b}$  den angreifenden Volumenkräften. Gleichung (3.35) gilt für jeden materiellen Punkt im statischen Gleichgewicht [91].

Damit sind alle notwendigen kinematischen Gleichungen aufgestellt und müssen nun um das Materialgesetz ergänzt werden, das in Abschnitt 3.3.4 erläutert wird.

### 3.3.4 Elasto-Plastisches Materialgesetz

Wie bereits erwähnt sind die Spannungen und Dehnungen durch das Materialgesetz verknüpft. Das elasto-plastische Materialgesetz setzt sich aus folgenden Bestandteilen zusammen:

1. Elastisches Materialverhalten:
  - 1.1 Additive Aufspaltung der Dehnung,
  - 1.2 Verallgemeinertes HOOKESCHES Gesetz,
2. Plastisches Materialverhalten:
  - 2.1 Fließbedingung,
  - 2.2 Fließregel,
  - 2.3 Verfestigungsgesetz.

Die folgende Darstellung des elasto-plastischen Materialgesetzes beschränkt sich auf eine kompakte Darstellung der für die Implementierung notwendigen Bestandteile der VON MISES-Plastizität. Auf ausführliche Herleitungen und tiefere theoretische Konzepte wird verzichtet und auf [90, 94] verwiesen.

### Additive Aufspaltung der Dehnung

Zur Behandlung von elasto-plastischen Problemen ist es zweckmäßig die Gesamtdehnung  $\varepsilon$  in einen elastischen  $\varepsilon_E$ , plastischen  $\varepsilon_P$  und thermischen Anteil  $\varepsilon_T$  durch

$$\varepsilon = \varepsilon_E + \varepsilon_T + \varepsilon_P \quad (3.36)$$

additiv aufzuspalten [90].

Der thermische Anteil der Dehnung  $\varepsilon_T$  ergibt sich aus dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten  $\alpha_{\text{therm}}$  und der Temperaturdifferenz  $\Delta T = T - T_{\text{ref}}$  und wird durch den Zusammenhang

$$\varepsilon_T = \alpha_{\text{therm}} \Delta T \mathbf{I} \quad (3.37)$$

berechnet [95].  $T_{\text{ref}}$  stellt dabei die Referenztemperatur dar, bei der keine thermisch induzierte Dehnung auftritt;  $\mathbf{I}$  repräsentiert den Einheitstensor zweiter Stufe.

Die elastische Dehnung lässt sich durch die Kombination von Gleichung (3.36) und Gleichung (3.37) in der Form

$$\varepsilon_E = \varepsilon - \alpha_{\text{therm}} \Delta T \mathbf{I} - \varepsilon_P \quad (3.38)$$

darstellen. Die Ratenform der elastischen Dehnung

$$\dot{\varepsilon}_E = \dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}_T - \dot{\varepsilon}_P \quad (3.39)$$

ergibt sich aus der zeitlichen Ableitung von Gleichung (3.38) [90]. Der Zusammenhang zwischen den Dehnungsanteilen und den Spannungen wird im Folgenden erläutert.

### Verallgemeinertes HOOKESCHES Gesetz

Ein linear-elastisches Materialverhalten lässt sich mit dem verallgemeinerten HOOKESCHEN Gesetz durch

$$\sigma = 2\mu \varepsilon_E + \lambda \text{tr}(\varepsilon_E) \mathbf{I} \quad (3.40)$$

beschreiben [91]. Dabei entsprechen  $\mathbf{I}$  dem Einheitstensor zweiter Stufe,  $\mu$  und  $\lambda$  der ersten und der zweiten Lamé-Konstante, die sich aus dem E-Modul  $E$  und der Querkontraktionszahl  $\nu$  über die Zusammenhänge

$$\lambda = \frac{E \cdot \nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}$$

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}$$

berechnen lassen. Um den Einfluss der plastischen Dehnungen auf die Spannungen zu berücksichtigen, werden zusätzlich die Fließbedingung, die Fließregel und das Verfestigungsgesetz benötigt.

**Fließbedingung**

Das Auftreten plastischen Fließens wird durch den vorliegenden Spannungszustand  $\sigma$  bestimmt. Überschreitet der Spannungszustand eine kritische Vergleichsspannung, hier definiert durch die von MISES-Vergleichsspannung  $\sigma_{vM}$ , setzt plastisches Fließen ein. Die Bedingung, unter der plastisches Fließen auftritt, wird durch die Fließbedingung

$$F(\sigma) = \sigma_{vM} - \sigma_y \quad (3.41)$$

beschrieben [90]. Dabei repräsentieren  $\sigma_y$  die (momentan) Fließspannung und

$$\sigma_{vM} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{xz}^2) \right)} \quad (3.42)$$

die von MISES-Vergleichsspannung [93]. Die Fließbedingung kann je nach Spannungszustand die folgenden Werte annehmen [90]:

- $F(\sigma) < 0$ : Der Werkstoff befindet sich im elastischen Bereich.
- $F(\sigma) = 0$ : Die Fließgrenze ist erreicht; plastisches Fließen beginnt.
- $F(\sigma) > 0$ : Unzulässiger Spannungszustand.

**Fließregel**

Die Fließregel beschreibt die Entwicklung der plastischen Dehnungen und lässt sich aus der Fließbedingung ableiten (assoziative Fließregel) [90]. Für die plastische Dehnung ist die Evolutionsgleichung durch

$$\dot{\epsilon}_P = \dot{\gamma} \frac{\partial F(\sigma)}{\partial \sigma} \quad (3.43)$$

gegeben [90]. Dabei repräsentiert  $\dot{\epsilon}_P$  die plastische Dehnungsrate und  $\dot{\gamma}$  die Rate des plastischen Multiplikators. Durch die assoziative Fließregel ergibt sich, dass die plastische Dehnungsrate  $\dot{\epsilon}_P$  normal zur Fließfläche steht, wie in Abbildung 3.6 illustriert.

Wird als Fließbedingung das Kriterium nach von MISES angewendet (Gleichung (3.41)), ergibt sich die folgende Fließregel

$$\dot{\epsilon}_P = \dot{\gamma} \frac{\partial F(\sigma)}{\partial \sigma} = \dot{\gamma} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\mathbf{s}}{\|\mathbf{s}\|} \quad (3.44)$$

als Evolutionsgleichung für die plastische Dehnung [90]. Dabei entspricht

$$\|\mathbf{s}\| = \sqrt{s_{11}^2 + s_{22}^2 + s_{33}^2 + 2(s_{12}^2 + s_{13}^2 + s_{23}^2)} \quad (3.45)$$

der Norm des Spannungsdeviators.

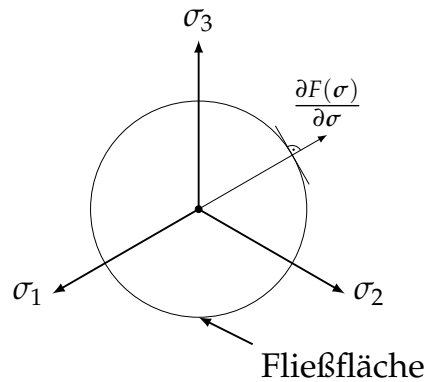


Abbildung 3.6: Fließfläche für die von Mises-Fließbedingung und Fließrichtung der plastischen Dehnungsrate  $\dot{\epsilon}_p$  im Hauptspannungsraum in Anlehnung an [90].

### Verfestigungsgesetz

Das Verfestigungsgesetz wird benötigt, um durch Plastizität vergrößerte Fließspannungen abzubilden. Für die vorliegende Arbeit wird ideales und isotropes Plastizitätsverhalten berücksichtigt. Bei der isotropen Verfestigung wird, wie in Abbildung 3.7 links dargestellt, eine gleichmäßige Aufweitung der Fließfläche modelliert, der Fließflächenmittelpunkt verbleibt dabei immer im Ursprung. Wird keine Verfestigung modelliert, liegt ideale Plastizität vor, sodass die Fließfläche im Ausgangszustand verbleibt.

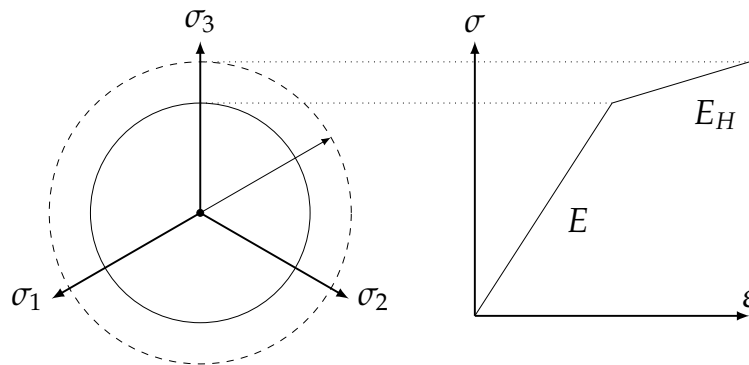


Abbildung 3.7: Fließfläche im Hauptspannungsraum mit isotroper inkrementeller Aufweitung (gestrichelte Linie) und dazugehöriger Spannungs-Dehnungs-Diagramm mit linearer Verfestigung in Anlehnung an [90].

Die isotrope Aufweitung der Fließkurve wird über eine lineare Verfestigung realisiert

und ist eine Funktion der akkumulierten plastischen Dehnung  $\bar{\epsilon}_P$ , die als

$$\bar{\epsilon}_P = \int_0^t \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\epsilon}_P\| dt, \quad (3.46)$$

bzw. in Ratenform als

$$\dot{\bar{\epsilon}}_P = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\epsilon}_P\| \quad (3.47)$$

definiert ist [90]. Für die von Mises-Plastizität ergibt sich für die akkumulierten plastischen Dehnungs-Rate

$$\dot{\bar{\epsilon}}_P = \dot{\gamma}. \quad (3.48)$$

Mit der initialen Materialstreckgrenze  $\sigma_0$  und dem linearen isotropen Verfestigungsmodul  $E_H$  folgt für die dehnungsverfestigte Fließspannung

$$\sigma_y(\bar{\epsilon}_P) = \sigma_0 + E_H \bar{\epsilon}_P. \quad (3.49)$$

Der Zusammenhang zwischen dem linearen isotropen Verfestigungsmodul  $E_H$  und der Aufweitung der Fließgrenze ist in Abbildung 3.7 mit einem Spannungs-Dehnungs-Diagramm dargestellt. Die Aufweitung verhält sich proportional zur akkumulierten plastischen Dehnung  $\bar{\epsilon}_P$  und wird durch den linearen isotropen Verfestigungsmodul  $E_H$  skaliert.

Die bisher vorgestellten Gleichungen bilden ein konstitutives elasto-plastisches Anfangswertproblem [90] für die von Mises-Plastizität mit linearer Verfestigung:

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_E(t) &= \dot{\epsilon}(t) - \dot{\epsilon}_T(t) - \dot{\epsilon}_P(t) \\ \dot{\bar{\epsilon}}_P(t) &= \dot{\gamma}(t) \\ \dot{\gamma}(t) &\geq 0, \quad F(\sigma(t)) \leq 0 \end{aligned} \quad (3.50)$$

Somit sind alle mathematischen Gleichungen zur Berechnung thermo-mechanischer Probleme bereitgestellt. Ihre Lösung erfolgt üblicherweise durch numerische Verfahren.

### 3.4 Diskretisierung und Lösungen der Modellgleichungen

Zur numerischen Lösung der Modellgleichungen aus Abschnitt 3.2 und Abschnitt 3.3 ist eine räumliche und eine zeitliche Diskretisierung erforderlich. Dabei müssen die Eigenschaften des LPBF Prozesses wie das schichtweise Wachstum des Bauteils und die Bewegung der Wärmequelle berücksichtigt werden. Zur Berechnung auf der GPU wird die iterative *Stencil*-Berechnung (*Iterative Stencil Loops*, ISL) verwendet [96]. Diese Methode basiert auf der Finiten-Differenzen-Methode und kann als matrix-freier Ansatz aufgefasst werden, da bei der ISL die neue Lösung iterativ aus den Werten der benachbarten Knoten berechnet wird und daher ohne eine explizite Speicherung der Koeffizienten-Matrix auskommt.

### 3.4.1 Finite-Differenzen-Methode

Im folgenden Abschnitt werden die grundlegenden Formeln der Finite-Differenzen-Methode in Anlehnung an [97, 98] vorgestellt. Weitere Erläuterungen und zusätzliche Hintergrundinformationen zu diesem Thema sind in den bereits genannten Werken [97, 98] sowie in zahlreichen anderen Publikationen, wie z. B. [99, 100], verfügbar.

Die FDM ist eine Methode zur Lösung von partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen. Der Kern der Methode liegt darin, die Ableitungen der zu lösenden Gleichungen durch einen Differenzenquotienten (DQ) zu approximieren und die Gleichungen auf diskreten Gitterpunkten zu berechnen. Die genutzten DQ bestimmen dabei die Fehlerordnung  $\mathcal{O}$ , sowie die zur Approximation benötigte Anzahl an Gitterpunkten. Die drei grundlegenden DQ-Formen zur Approximation einer ersten Ableitung  $f'(x)$  einer Funktion  $f(x)$  sind beispielhaft in Abbildung 3.8 dargestellt. Sie berechnen sich mathematisch aus den Funktionswerten unter Verwendung eines festen Gitterabstandes  $h$  mit

$$\text{Vorwärts-Differenzenquotient (VDQ)} \quad f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \mathcal{O}(h), \quad (3.51)$$

$$\text{Rückwärts-Differenzenquotient (RDQ)} \quad f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h), \quad (3.52)$$

$$\text{zentraler Differenzenquotient (ZDQ)} \quad f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.53)$$

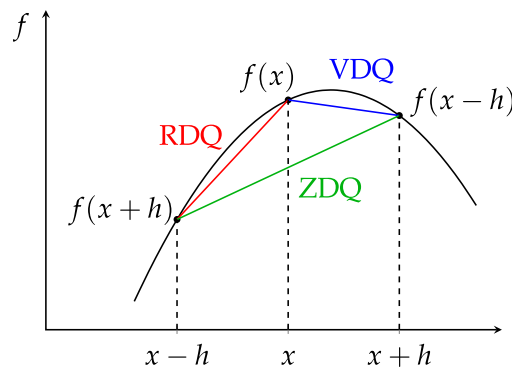


Abbildung 3.8: Illustration des Vorwärts- (VDQ), Rückwärts- (RDQ) und des zentralen Differenzenquotienten (ZDQ).

Die DQ können für jede Ableitungsordnung aus einer TAYLORreihe oder bereits existierenden DQ konstruiert werden, hier am Beispiel für die zweite Ableitung  $f''(x)$

mittels VDQ und RDK von  $f'(x)$ :

$$f''(x) \approx \frac{f'(x+h) - f'(x-h)}{h} \approx \frac{\frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{f(x)-f(x-h)}{h}}{h} = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}. \quad (3.54)$$

DQ können auch zur zeitlichen Diskretisierung eingesetzt werden. Ein bekanntes Beispiel für die Anwendung von DQ für die Berechnung der zeitlichen Ableitung ist das explizite EULER-Verfahren. Dieses nutzt den VDQ um die zeitliche Entwicklung eines zeitabhängigen Systems abzubilden und wird zur Lösung von Anfangswertproblemen (AWP) eingesetzt.

### 3.4.2 Größen im Staggered Grid

Das *Staggered Grid* (SG) (gestaffeltes Gitter) ist ein spezielles Schema für die Anordnung der Knotenpunkte auf einem Gitter diskreter Größen und wurde erstmals von [101] in der Strömungsmechanik eingesetzt. Abbildung 3.9 zeigt ein *Staggered Grid* mit einer einzelnen Zelle sowie ein Gitter bestehend aus mehreren Zellen. Die Verschiebungen  $u_x, u_y, u_z$  werden an den Flächenschwerpunkten der Zelle diskretisiert. Im Zentrum der Zelle erfolgt die Diskretisierung der Normalspannungen  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ , der Normaldehnungen  $\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}$  und der Temperatur  $T$ . Die Schubspannungen  $\sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}$  sowie die Schubdehnungen  $\varepsilon_{xy}, \varepsilon_{xz}, \varepsilon_{yz}$  werden an den Kantenmitten der Zellberandung diskretisiert. Zur besseren Übersichtlichkeit sind die mit den Spannungen zusammenfallenden Dehnungen in Abbildung 3.9 nicht dargestellt.

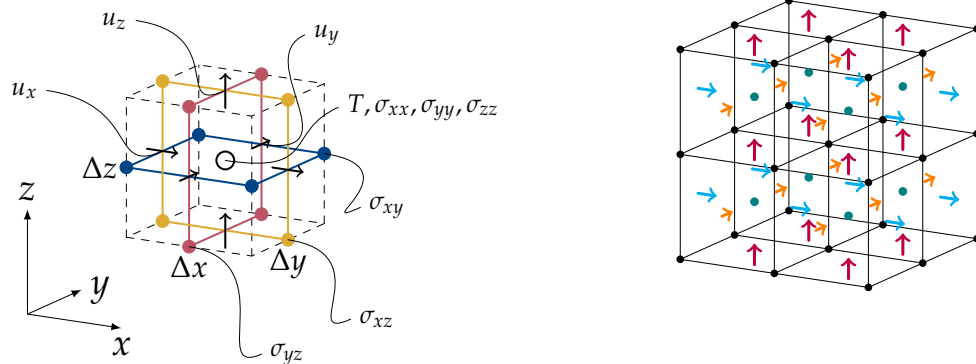


Abbildung 3.9: Knotenanordnung bei einem *Staggered Grid* bei einer einzelnen Zelle (links), und mehreren Zellen (rechts).

Die Berechnung im SG wird häufig mit der Hilfe eines *Stencils* durchgeführt. Ein *Stencil*, wie in Abbildung 3.10 dargestellt, repräsentiert eine spezifische geometrische Anordnung von Knotenpunkten, die in numerischen Verfahren genutzt wird, um

Beziehungen zu einem zentralen Punkt herzustellen. Diese Technik findet vor allem in der FDM zur Lösung partieller Differentialgleichungen, in der Bildverarbeitung und bei zellulären Automaten Anwendung [102]. Die Besonderheit des *Stencils* besteht darin, dass neue Zustände aus benachbarten Knoten berechnet werden, wodurch *Stencil*-basierte Algorithmen sehr gut parallelisierbar sind. Bei wiederholter Anwendung, z. B. zur Darstellung der zeitlichen Entwicklung eines Zustandes, werden *Stencils* auch als *Iterative Stencil Loops* (ISL) bezeichnet [96].

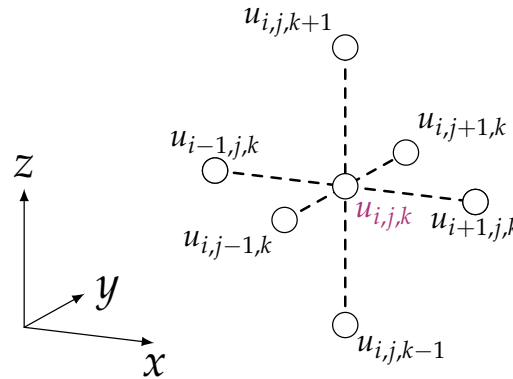


Abbildung 3.10: Illustration eines *Stencils* zur Berechnung der Größe  $u_{i,j,k}$ .

Basierend auf den DQ aus Abschnitt 3.4.1 und unter Berücksichtigung des SG werden in Abschnitt 3.4.3 und Abschnitt 3.4.4 die Gleichungen des thermischen und des mechanischen Modells diskretisiert. Zur Indizierung der Knoten werden die tiefgestellte Buchstaben  $i, j$  und  $k$  für die  $x, y$ - und  $z$ -Richtung eingeführt, vgl. Abbildung 3.10. Die Zeit wird durch die hochgestellten Indizes  $t$  und  $t + \Delta t$  dargestellt. Handelt es sich um eine Pseudo-Zeit, bei der ein Zwischenschritt nur zur Berechnung der stationären Lösung verwendet wird, werden die hochgestellten Indizes  $n$  und  $n + 1$  verwendet.

### 3.4.3 Diskretisierung und Lösung des thermischen Modells

Kernstück der LPBF Prozesssimulation ist die Berechnung des thermischen Feldes. Zur Berücksichtigung der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit erfolgt die Herleitung der diskreten Gleichungen über die Energiebilanz-Methode. Die Diskretisierung der Wärmeströme mittels FDM führt zur diskreten Wärmeleitungsgleichung, die ein Anfangswertproblem in der Temperatur darstellt. Zur Lösung des AWP wird das explizite EULER-Verfahren verwendet.

#### Mittlere Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$  ist stark temperaturabhängig. Nur bei sehr geringen thermischen Gradienten kann sie als konstant angenommen werden, was beim LPBF Prozess

nicht gegeben ist. Um die Temperaturabhängigkeit adäquat abzubilden wird für jede Raumrichtung eine mittlere Wärmeleitfähigkeit  $\bar{\kappa}$  benötigt. Diese wird über die Energiebilanz-Methode [75], hier exemplarisch für die  $x$ -Richtung, hergeleitet. Abbildung 3.11 zeigt zwei Zellen  $i$  und  $i + 1$  mit ihren jeweiligen Temperaturen und ihrer jeweiligen Wärmeleitfähigkeit. Der Index  $X$  repräsentiert genau die Mitte zwischen den beiden Knoten  $i$  und  $i + 1$  und wird im weiteren Verlauf für die Herleitung benötigt. Zur besseren Übersichtlichkeit werden die Indizes  $j$  und  $k$  in Abbildung 3.11 und der Herleitung nicht dargestellt.

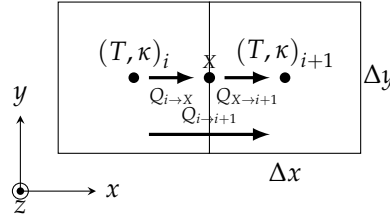


Abbildung 3.11: Zwei Zellen in der  $x$ -Richtung zur exemplarischen Herleitung der mittleren Wärmeleitfähigkeit über die Energiebilanz-Methode.

Der Wärmestrom  $Q_{i \rightarrow i+1} = q_{i \rightarrow i+1} \Delta y \Delta z$  zwischen den Knoten  $i$  und  $i + 1$  ergibt sich gemäß dem FOURIERSCHEN Gesetz und dem VDQ zu

$$Q_{i \rightarrow i+1} = q_{i \rightarrow i+1} \Delta y \Delta z = -\bar{\kappa}_{i+1} \frac{\partial T}{\partial x} \Delta y \Delta z \approx -\bar{\kappa}_{i+1} \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} \Delta y \Delta z. \quad (3.55)$$

Dabei entspricht  $\bar{\kappa}_{i+1}$  der mittleren Wärmeleitfähigkeit zwischen den Knoten  $i$  und  $i + 1$ . Werden weiter die Wärmeströme zwischen  $i, X$  und  $X, i + 1$  auf die gleiche Weise formuliert, folgt für  $Q_{i \rightarrow X}$  und  $Q_{X \rightarrow i+1}$

$$Q_{i \rightarrow X} = q_{i \rightarrow X} \Delta y \Delta z \approx -\kappa_i \frac{T_X - T_i}{\frac{1}{2} \Delta x} \Delta y \Delta z, \quad (3.56)$$

$$Q_{X \rightarrow i+1} = q_{X \rightarrow i+1} \Delta y \Delta z \approx -\kappa_{i+1} \frac{T_{i+1} - T_X}{\frac{1}{2} \Delta x} \Delta y \Delta z. \quad (3.57)$$

Da der Wärmestrom im Gitter und somit zwischen  $i$  und  $i + 1$  konstant bleiben muss, gilt  $Q_{i \rightarrow i+1} = Q_{i \rightarrow X} = Q_{X \rightarrow i+1}$ . Damit kann nach der mittleren Wärmeleitfähigkeit  $\bar{\kappa}_{i+1}$ , in Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeiten  $\kappa_i$  und  $\kappa_{i+1}$ , umgestellt werden und es folgt

$$\bar{\kappa}_{i+1} = 2 \frac{\kappa_i \kappa_{i+1}}{\kappa_i + \kappa_{i+1}}. \quad (3.58)$$

Dieser Ausdruck ist als harmonisches Mittel bekannt und wird in [77] als temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit empfohlen. In gleicher Weise kann die mittlere

Wärmeleitfähigkeit für die anderen Richtungen bestimmt werden. Die mittleren Wärmeleitfähigkeiten für alle Richtungen ergeben sich zu

$$\bar{\kappa}_{i+1,j,k} = 2 \frac{\kappa_{i+1,j,k} \kappa_{i,j,k}}{\kappa_{i+1,j,k} + \kappa_{i,j,k}}, \quad (3.59)$$

$$\bar{\kappa}_{i-1,j,k} = 2 \frac{\kappa_{i-1,j,k} \kappa_{i,j,k}}{\kappa_{i-1,j,k} + \kappa_{i,j,k}}, \quad (3.60)$$

$$\bar{\kappa}_{i,j+1,k} = 2 \frac{\kappa_{i,j+1,k} \kappa_{i,j,k}}{\kappa_{i,j+1,k} + \kappa_{i,j,k}}, \quad (3.61)$$

$$\bar{\kappa}_{i,j-1,k} = 2 \frac{\kappa_{i,j-1,k} \kappa_{i,j,k}}{\kappa_{i,j-1,k} + \kappa_{i,j,k}}, \quad (3.62)$$

$$\bar{\kappa}_{i,j,k+1} = 2 \frac{\kappa_{i,j,k+1} \kappa_{i,j,k}}{\kappa_{i,j,k+1} + \kappa_{i,j,k}}, \quad (3.63)$$

$$\bar{\kappa}_{i,j,k-1} = 2 \frac{\kappa_{i,j,k-1} \kappa_{i,j,k}}{\kappa_{i,j,k-1} + \kappa_{i,j,k}}. \quad (3.64)$$

### Diskrete Wärmeleitungsgleichung

Die Herleitung der diskreten Wärmeleitungsgleichung basiert ebenfalls auf der Energiebilanz-Methode [75]. Für ein Volumen  $\Delta V$  mit der Größe  $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$  unter der Berücksichtigung der volumetrischen Enthalpie  $H$  folgt die Energiebilanz

$$\Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial H}{\partial t} = Q_{i-1,j,k} - Q_{i+1,j,k} + Q_{i,j-1,k} - Q_{i,j+1,k} + Q_{i,j,k-1} - Q_{i,j,k+1} + Q_{i,j,k}. \quad (3.65)$$

Dabei fast  $Q_{i,j,k}$  alle wirkenden Wärmequellen im Volumen  $\Delta V$  zusammen. Unter Berücksichtigung der richtungsabhängigen mittleren Wärmeleitfähigkeiten sowie dem FOURIERSCHEN Gesetz folgt aus Gleichung (3.65)

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial H}{\partial t} \approx & \bar{\kappa}_{i-1,j,k} \frac{T_{i-1,j,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta x} \Delta y \Delta z + \bar{\kappa}_{i+1,j,k} \frac{T_{i+1,j,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta x} \Delta y \Delta z + \\ & \bar{\kappa}_{i,j-1,k} \frac{T_{i,j-1,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta y} \Delta x \Delta z + \bar{\kappa}_{i,j+1,k} \frac{T_{i,j+1,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta y} \Delta x \Delta z + \\ & \bar{\kappa}_{i,j,k-1} \frac{T_{i,j,k-1}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta z} \Delta x \Delta y + \bar{\kappa}_{i,j,k+1} \frac{T_{i,j,k+1}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta z} \Delta x \Delta y + Q_{i,j,k}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Unter Verwendung des expliziten EULER-Verfahrens folgt für die linke Seite von Gleichung (3.65)

$$\Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial H}{\partial t} \approx \Delta x \Delta y \Delta z \frac{H_{i,j,k}^{t+\Delta t} - H_{i,j,k}^t}{\Delta t}. \quad (3.67)$$

Schlussendlich folgt aus Gleichung (3.66) und Gleichung (3.67) der Zusammenhang

$$\begin{aligned} \frac{H_{i,j,k}^{t+\Delta t} - H_{i,j,k}^t}{\Delta t} \approx & \bar{\kappa}_{i-1,j,k} \frac{T_{i-1,j,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta x^2} + \bar{\kappa}_{i+1,j,k} \frac{T_{i+1,j,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta x^2} + \\ & \bar{\kappa}_{i,j-1,k} \frac{T_{i,j-1,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta y^2} + \bar{\kappa}_{i,j+1,k} \frac{T_{i,j+1,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta y^2} + \\ & \bar{\kappa}_{i,j,k-1} \frac{T_{i,j,k-1}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta z^2} + \bar{\kappa}_{i,j,k+1} \frac{T_{i,j,k+1}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta z^2} + \frac{Q_{i,j,k}}{\Delta x \Delta y \Delta z} \end{aligned} \quad (3.68)$$

für die diskrete Form der Wärmeleitungsgleichung.

Die Gleichung (3.68) ist nur für innere Knoten anwendbar. Für die Berechnung der Randknoten müssen angepasste diskrete Gleichungen gelöst werden. Im Folgenden werden die Randbedingungen für isolierte Ränder sowie für Ränder, entlang derer ein Wärmeübergang durch Konvektion und Wärmestrahlung stattfindet, diskretisiert.

### Diskrete Randbedingungen der Wärmeleitungsgleichung

Zur Lösung der Gleichung (3.68) werden Anfangs- und Randbedingungen benötigt. Die Randbedingungen können in DIRICHLET- und NEUMANN-Randbedingungen unterschieden werden.

Bei DIRICHLET-Randbedingungen handelt es sich um vorgeschriebene Funktionswerte, also die Temperaturwerte  $T_c$  auf dem Rand

$$T = T_c. \quad (3.69)$$

NEUMANN-Randbedingungen sind dadurch charakterisiert, dass eine Wärmestromdichte in Normalenrichtung  $\mathbf{n}$  auf dem Rand vorgegeben wird. Isolierte Ränder sind ein Spezialfall der NEUMANN-Randbedingungen, bei denen kein Wärmefluss über die Grenze stattfindet. Dies wird durch die Gleichung

$$-\kappa \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad (3.70)$$

ausgedrückt [75]. Unter Verwendung eines VDOs folgt, hier am Beispiel für die positive  $x$ -Richtung ( $\mathbf{e}_x = [1 \ 0 \ 0]^T$ ), aus Gleichung (3.70)

$$-\kappa \frac{\partial T}{\partial \mathbf{e}_x} \approx -\kappa \frac{T_{i+1,j,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta x} = 0, \quad (3.71)$$

und schließlich die Beziehung

$$T_{i+1,j,k}^t = T_{i,j,k}^t. \quad (3.72)$$

Die Gleichung (3.72) zeigt, dass kein Temperaturgradient in den Randknoten senkrecht zur Berandung vorhanden sein darf, um einen isolierten Rand zu realisieren. Dieses

Vorgehen lässt sich auch auf die  $y$ -Richtung übertragen. Wie bereits erwähnt, ist diese Randbedingung aufgrund der geringen Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts für die LPBF Prozesssimulation zweckmäßig.

Für die aktuelle oberste Knotenschicht<sup>5</sup> in positiver  $z$ -Richtung findet ein Wärmeübergang durch Konvektion und Wärmestrahlung und damit ein Wärmestrom statt. Zur Diskretisierung dieses Wärmestroms wird der Term  $-Q_{i,j,k+1}$  durch den Wärmestrom  $Q_\alpha = \bar{\alpha}_{i,j,k}(T_{i,j,k} - T_\infty)\Delta x\Delta y$  ausgetauscht. Ansonsten bleibt die Bilanz aus Gleichung (3.65) unverändert wodurch sich die finale Form direkt aus Gleichung (3.68) zu

$$\begin{aligned} \frac{H_{i,j,k}^{t+\Delta t} - H_{i,j,k}^t}{\Delta t} \approx & \bar{\kappa}_{i-1,j,k} \frac{T_{i-1,j,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta x^2} + \bar{\kappa}_{i+1,j,k} \frac{T_{i+1,j,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta x^2} + \\ & \bar{\kappa}_{i,j-1,k} \frac{T_{i,j-1,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta y^2} + \bar{\kappa}_{i,j+1,k} \frac{T_{i,j+1,k}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta y^2} + \\ & \bar{\kappa}_{i,j,k-1} \frac{T_{i,j,k-1}^t - T_{i,j,k}^t}{\Delta z^2} - \bar{\alpha}_{i,j,k} \frac{T_{i,j,k}^t - T_\infty}{\Delta z} + \frac{Q_{i,j,k}}{\Delta x\Delta y\Delta z}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

ergibt.  $\bar{\alpha}_{i,j,k}$  entspricht dem kombinierten Wärmeübergangskoeffizienten bezüglich des Mittelpunkts  $i, j, k$  bestehend aus dem strahlungsbedingten Wärmeübergangskoeffizient  $\alpha_{i,j,k}^R$  aus Gleichung (3.6) und dem konvektiven Wärmeübergangskoeffizient  $\alpha$ . Der kombinierte Wärmeübergangskoeffizient kann auf analoge Weise wie die mittlere Wärmeleitfähigkeit hergeleitet werden, wodurch sich der Zusammenhang

$$\bar{\alpha}_{i,j,k} = \left( \frac{1}{\alpha + \alpha_{i,j,k}^R} + \frac{\Delta z}{2\kappa_{i,j,k}} \right)^{-1} \quad (3.74)$$

ergibt.

### 3.4.4 Diskretisierung und Lösung des mechanischen Modells

Zur Lösung des mechanischen Problems unter Berücksichtigung des Temperaturfeldes wird das Verfahren der dynamischen Relaxation in Kombination mit der matrix-freien FDM auf einem *Staggered Grid* von [103] angewendet. Die diskreten Gleichungen entsprechen einem expliziten EULER-Verfahren und stammen aus [103]. Zur Berücksichtigung der Plastizität werden die Gleichungen um die zusätzlichen Formeln der Elasto-Plastizität erweitert. Bei der matrix-freien FDM ist keine Assemblierung der Koeffizientenmatrix notwendig, weshalb sich diese Formulierung sehr gut zur Berücksichtigung des schichtweisen Aufbaus des Bauteils und zur Berechnung mit einer GPU eignet.

<sup>5</sup>Durch das schichtweise Wachstum des Bauteils verschiebt sich immer der Index  $k$  mit der aktuellen Druck-Schicht.

### Zuordnung im Staggered Grid

Die folgende Detailansicht in Abbildung 3.12(a) zeigt die Größen einer 3D-Zelle des *Staggered Grid*. Zur besseren Übersicht werden für die Diskretisierung der thermomechanischen Gleichung 2D-Schnitte verwendet, visualisiert in Abbildung 3.12(b) - Abbildung 3.12(d). Dabei repräsentiert die blaue Farbe die  $xy$ -, die gelbe Farbe die  $xz$ - und die rote Farbe die  $yz$ -Ebene.

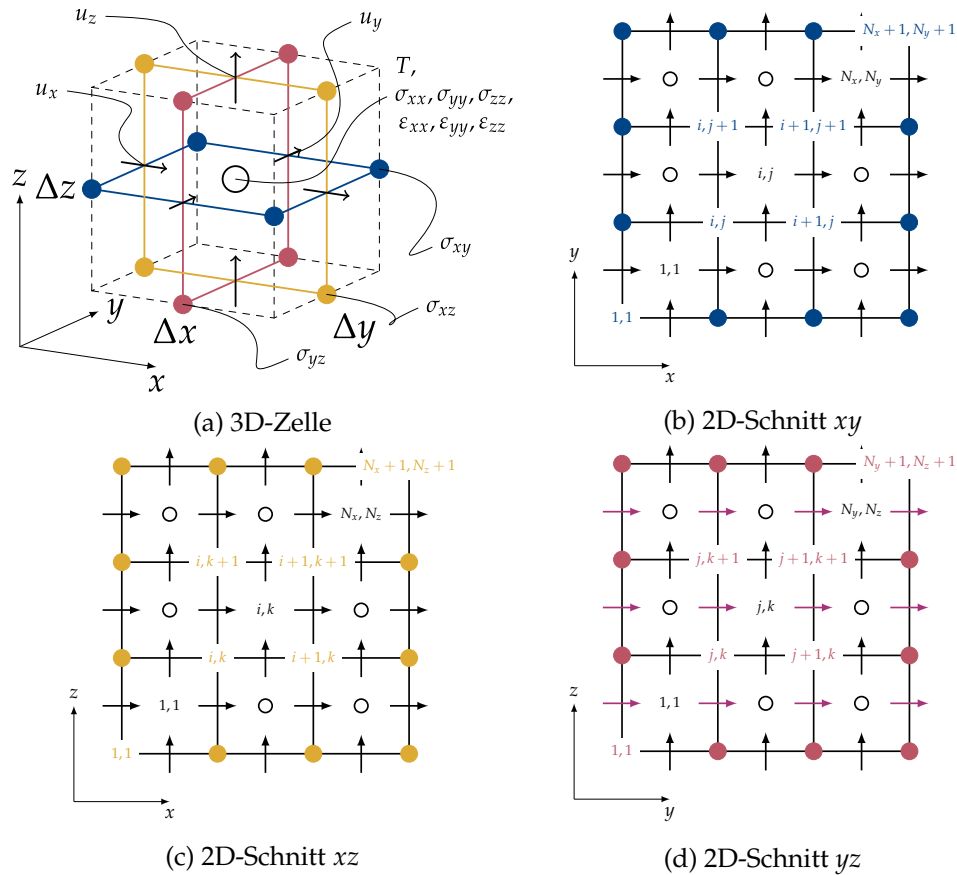


Abbildung 3.12: Knotenanordnung der Verschiebungen, Dehnungen, Spannungen und der Temperatur: Auf den Mittelpunkten befinden sich die Normaldehnungen bzw. Normalspannungen, auf den Eckpunkten eingefärbt die Schubdehnungen bzw. Schubspannungen.

Jedes Feld der mechanischen Berechnung ist durch eine spezifische Nachbarschaftsbeziehung im *Staggered Grid* verknüpft. Für ein Gitter mit  $N_x, N_y, N_z$  Zellen ergeben sich

für die Arrays der Verschiebungen  $\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y, \mathbf{u}_z$  die Dimensionen

$$\mathbf{u}_x \in \mathbb{R}^{(N_x+1) \times N_y \times N_z},$$

$$\mathbf{u}_y \in \mathbb{R}^{N_x \times (N_y+1) \times N_z},$$

$$\mathbf{u}_z \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y \times (N_z+1)}.$$

Die Arrays der Normalspannungen  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$  und der Schubspannungen  $\sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}$  besitzen die Dimensionen:

$$\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y \times N_z},$$

$$\sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz} \in \mathbb{R}^{(N_x+1) \times (N_y+1) \times (N_z+1)}.$$

Um die Übersichtlichkeit zu verbessern, werden im Folgenden Ausschnitte des Gitters gezeigt, bei denen nur die erforderlichen Informationen dargestellt sind, um die Diskretisierung der einzelnen Größen zu demonstrieren.

### Diskretisierung des linearisierten Dehnungstensors

Zur Berechnung des CAUCHY-Spannungstensors über Gleichung (3.40) wird der linearisierte Dehnungstensor benötigt. Die Diskretisierung des linearisierten Dehnungstensors  $\varepsilon$  auf dem *Staggered Grid* erfolgt mit Hilfe des ZDQ. Im Folgenden wird die Herleitung der diskreten Gleichungen für die  $xy$ -Ebene beschrieben. Die Herleitung für die  $xz$ - und  $yz$ -Ebenen erfolgt analog. Für die betrachtete Ebene gelten nach Gleichung (3.31) für die Komponenten  $\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}$  und  $\varepsilon_{xy}$  die Zusammenhänge

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad (3.75)$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad (3.76)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right). \quad (3.77)$$

Zunächst werden nur die Gleichungen für einen beliebigen inneren Knoten  $i, j, k$  berücksichtigt bei denen eine vollständige Diskretisierung möglich ist. Beispielfhaft werden dazu in Abbildung 3.13 die Normaldehnungen  $\varepsilon_{xx,i,j,k}$  ( $\varepsilon_{yy,i,j,k}$  mit  $\varepsilon_{xx,i,j,k}$  deckungsgleich) und Schubdehnungen  $\varepsilon_{xy,i,j,k}$  in grün und die dazugehörigen Bereiche farblich hinterlegt dargestellt.

Zur Diskretisierung der Normaldehnungen  $\varepsilon_{xx,i,j,k}$  und  $\varepsilon_{yy,i,j,k}$  wird das graue Feld betrachtet. Unter Berücksichtigung der Gitterweite und der dazugehörigen Knotenzuordnung zwischen den Feldern ergibt sich für den ZDQ der Dehnungen

$$\varepsilon_{xx,i,j,k} \approx \frac{u_{x,i+1,j,k} - u_{x,i,j,k}}{\Delta x}, \quad (3.78)$$

$$\varepsilon_{yy,i,j,k} \approx \frac{u_{y,i,j+1,k} - u_{y,i,j,k}}{\Delta y}. \quad (3.79)$$

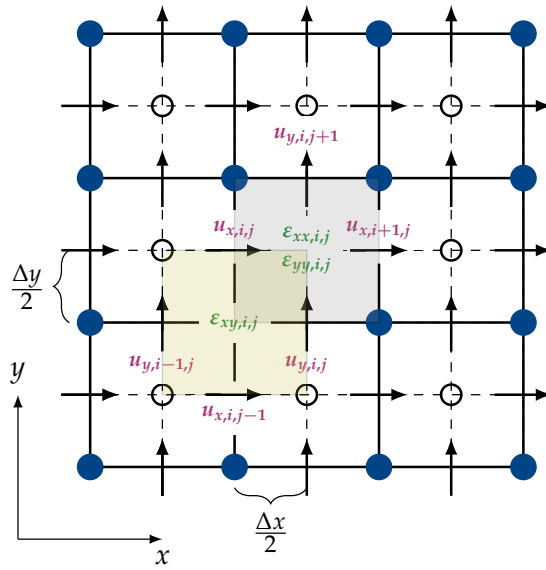


Abbildung 3.13: 2D-Gitter zur Diskretisierung des linearisierten Dehnungstensors für Größen in der  $xy$ -Ebene.

In ähnlicher Weise wird für die Schubdehnung  $\varepsilon_{xy,i,j,k}$  das gelbe Feld betrachtet und es folgt die diskrete Gleichung

$$\varepsilon_{xy,i,j,k} \approx \frac{1}{2} \left( \frac{u_{x,i,j,k} - u_{x,i,j-1,k}}{\Delta y} + \frac{u_{y,i,j,k} - u_{y,i-1,j,k}}{\Delta x} \right). \quad (3.80)$$

Die übrigen Größen  $\varepsilon_{zz,i,j,k}$ ,  $\varepsilon_{xz,i,j,k}$ ,  $\varepsilon_{yz,i,j,k}$  können aus der  $xz$ - und  $yz$ -Ebene hergeleitet werden und ergeben sich entsprechend zu

$$\varepsilon_{zz,i,j,k} \approx \frac{u_{z,i,j,k+1} - u_{z,i,j,k}}{\Delta z}, \quad (3.81)$$

$$\varepsilon_{xz,i,j,k} \approx \frac{1}{2} \left( \frac{u_{x,i,j,k} - u_{x,i,j,k-1}}{\Delta z} + \frac{u_{z,i,j,k} - u_{z,i-1,j,k}}{\Delta x} \right), \quad (3.82)$$

$$\varepsilon_{yz,i,j,k} \approx \frac{1}{2} \left( \frac{u_{y,i,j,k} - u_{y,i,j,k-1}}{\Delta z} + \frac{u_{z,i,j,k} - u_{z,i,j-1,k}}{\Delta y} \right). \quad (3.83)$$

Unter Berücksichtigung der plastischen Dehnung  $\varepsilon_P$  und der thermischen Dehnung  $\alpha_{\text{therm}} \Delta T \mathbf{I}$  kann der elastische Dehnungsanteil  $\varepsilon_E$  nach Gleichung (3.36) auch in diskreter

Form ausgedrückt werden durch

$$\varepsilon_{E_{xx},i,j,k} \approx \frac{u_{x,i+1,j,k} - u_{x,i,j,k}}{\Delta x} - \alpha_{\text{therm},i,j,k} \cdot \Delta T_{i,j,k} - \varepsilon_{P_{xx},i,j,k}, \quad (3.84)$$

$$\varepsilon_{E_{yy},i,j,k} \approx \frac{u_{y,i,j+1,k} - u_{y,i,j,k}}{\Delta y} - \alpha_{\text{therm},i,j,k} \cdot \Delta T_{i,j,k} - \varepsilon_{P_{yy},i,j,k}, \quad (3.85)$$

$$\varepsilon_{E_{zz},i,j,k} \approx \frac{u_{z,i,j,k+1} - u_{z,i,j,k}}{\Delta z} - \alpha_{\text{therm},i,j,k} \cdot \Delta T_{i,j,k} - \varepsilon_{P_{zz},i,j,k}, \quad (3.86)$$

$$\varepsilon_{E_{xy},i,j,k} \approx \frac{1}{2} \left( \frac{u_{x,i,j,k} - u_{x,i,j-1,k}}{\Delta y} + \frac{u_{y,i,j,k} - u_{y,i-1,j,k}}{\Delta x} \right) - \varepsilon_{P_{xy},i,j,k}, \quad (3.87)$$

$$\varepsilon_{E_{xz},i,j,k} \approx \frac{1}{2} \left( \frac{u_{x,i,j,k} - u_{x,i,j,k-1}}{\Delta z} + \frac{u_{z,i,j,k} - u_{z,i-1,j,k}}{\Delta x} \right) - \varepsilon_{P_{xz},i,j,k}, \quad (3.88)$$

$$\varepsilon_{E_{yz},i,j,k} \approx \frac{1}{2} \left( \frac{u_{y,i,j,k} - u_{y,i,j,k-1}}{\Delta z} + \frac{u_{z,i,j,k} - u_{z,i,j-1,k}}{\Delta y} \right) - \varepsilon_{P_{yz},i,j,k}. \quad (3.89)$$

### Darstellung der Normal- und Schubspannungen in diskreter Form

Die Komponenten des CAUCHY-Spannungstensors einer Zelle lassen sich mithilfe von Gleichung (3.40) aus den diskreten Dehnungen sowie den Lamé-Konstanten  $\lambda$  und  $\mu$  mit

$$\sigma_{xx,i,j,k} \approx \lambda_{i,j,k} \left( \varepsilon_{E_{xx},i,j,k} + \varepsilon_{E_{yy},i,j,k} + \varepsilon_{E_{zz},i,j,k} \right) + 2\mu_{i,j,k} \varepsilon_{E_{xx},i,j,k}, \quad (3.90)$$

$$\sigma_{yy,i,j,k} \approx \lambda_{i,j,k} \left( \varepsilon_{E_{xx},i,j,k} + \varepsilon_{E_{yy},i,j,k} + \varepsilon_{E_{zz},i,j,k} \right) + 2\mu_{i,j,k} \varepsilon_{E_{yy},i,j,k}, \quad (3.91)$$

$$\sigma_{zz,i,j,k} \approx \lambda_{i,j,k} \left( \varepsilon_{E_{xx},i,j,k} + \varepsilon_{E_{yy},i,j,k} + \varepsilon_{E_{zz},i,j,k} \right) + 2\mu_{i,j,k} \varepsilon_{E_{zz},i,j,k}, \quad (3.92)$$

$$\sigma_{xy,i,j,k} \approx 2\mu_{i,j,k} \varepsilon_{E_{xy},i,j,k}, \quad (3.93)$$

$$\sigma_{xz,i,j,k} \approx 2\mu_{i,j,k} \varepsilon_{E_{xz},i,j,k}, \quad (3.94)$$

$$\sigma_{yz,i,j,k} \approx 2\mu_{i,j,k} \varepsilon_{E_{yz},i,j,k}, \quad (3.95)$$

berechnen.

### Diskrete Randbedingungen des mechanischen Modells

Um äußere Knoten in der mechanischen Berechnung zu berücksichtigen, müssen sowohl Verschiebungs- als auch Spannungsrandbedingungen gesetzt werden. Zum einen muss ein spannungsfreier Rand am Umfang sowie an der Oberseite des Bauteils gewährleistet werden, zum anderen wird das Bauteil fest an der Unterseite eingespannt. Der spannungsfreie Rand wird durch den Spannungstensor  $\sigma$  und den Normalenvektor  $\mathbf{n}$  mit  $\sigma \mathbf{n} = \mathbf{0}$  definiert. Für Berandungen des Körpers senkrecht zu den Normalenvektoren  $\mathbf{e}_x = [1\ 0\ 0]^T$ ,  $\mathbf{e}_y = [0\ 1\ 0]^T$  und  $\mathbf{e}_z = [0\ 0\ 1]^T$  ergeben sich damit die Spannungskompo-

nenten

$$\sigma \mathbf{e}_x = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yx} \\ \sigma_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.96)$$

$$\sigma \mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.97)$$

$$\sigma \mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.98)$$

Die Schubspannungen  $\sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}$  können am Rand durch die Initialisierung auf null gesetzt werden. Die Normalspannungen  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$  hingegen liegen innerhalb der Zelle, sodass die Randbedingungen für diese Spannungen über das Konzept der *Ghost-Nodes* realisiert werden müssen [99]. Bei *Ghost-Nodes* wird das *Staggered Grid* in jeder Richtung um fiktive Knoten erweitert, wie in Abbildung 3.14 durch die gestrichelte Linie der äußersten Zellen dargestellt.

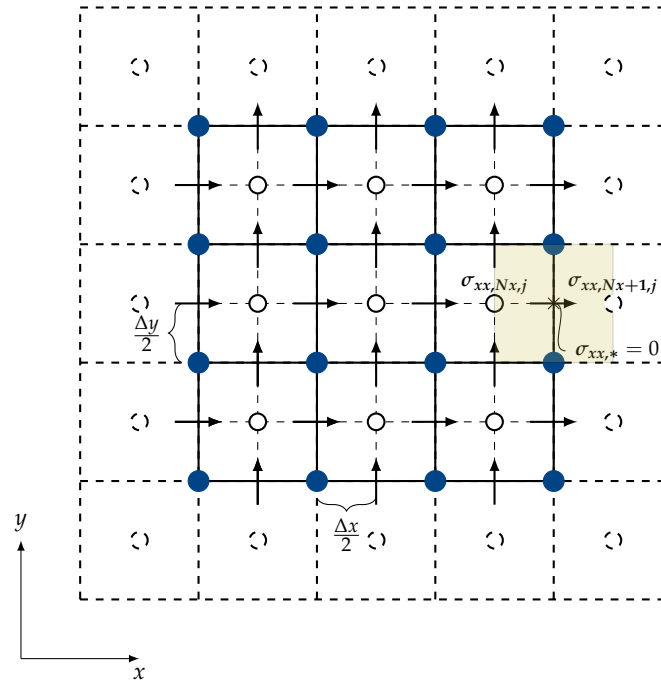


Abbildung 3.14: *Staggered Grid* erweitert um *Ghost-Nodes* zur Realisierung von Randbedingungen für Normalspannungen.

Zur Herleitung der konkreten Spannungswerte in einem *Ghost-Node*, beispielhaft für die Spannungskomponente  $\sigma_{xx}$ , wird eine lineare Extrapolation verwendet. Unter

Anwendung dieser Gleichung vom letzten Spannungsknoten  $\sigma_{xx,N_x,j,k}$  zum Spannungsknoten  $\sigma_{xx,N_x+1,j,k}$ , unter Berücksichtigung von  $\sigma_{xx,*}$  auf dem Rand, sowie dem Abstand  $\Delta x/2$  und dem Spannungswert  $\sigma_{xx,N_x,j,k}$  am letzten Knoten folgt für die Spannung im *Ghost-Node*

$$\sigma_{xx,N_x+1,j,k} \approx \frac{\sigma_{xx,*} - \sigma_{xx,N_x,j,k}}{\Delta x/2} \Delta x + \sigma_{xx,N_x,j,k}. \quad (3.99)$$

Im weiteren Verlauf ergibt sich mit  $\sigma_{xx,*} = 0$

$$\sigma_{xx,N_x+1,j,k} \approx -2\sigma_{xx,N_x,j,k} + \sigma_{xx,N_x,j,k} \approx -\sigma_{xx,N_x,j,k}. \quad (3.100)$$

Dieses Ergebnis zeigt, dass der Wert im *Ghost-Node* genau dem negativen Wert der Spannung  $\sigma_{xx,N_x,j,k}$  entsprechen muss, um die Randbedingung eines freien Randes mit Normalspannung null zu erfüllen. Gleichung (3.100) kann in analoger Weise für die Normalspannungen  $\sigma_{yy}$  und  $\sigma_{zz}$  verwendet werden. Mit der gleichen Vorgehensweise lassen sich auch die Gleichungen für eine feste Einspannung an der Unterseite und für die Ecken des Bauteils herleiten.

### Diskretisierung der Gleichgewichtsbedingung

Die Erfüllung des lokalen mechanischen Gleichgewichts mit Gleichung (3.35) erfordert die numerische Berechnung der Spannungsdivergenz. Die Berechnung erfolgt durch einen dreidimensionalen ZDQ, nachfolgend in Abbildung 3.15 für die  $x$ -Richtung eines Knotens  $i, j, k$  dargestellt. Zur besseren Visualisierung der *Stencils* wird das Gitter dreidimensional (Abbildung 3.15(a)) und für zwei senkrecht zueinander stehenden Schnittansichten (Abbildung 3.15(b), Abbildung 3.15(c)) nur mit den benötigten Spannungen dargestellt. Unter Vernachlässigung der Volumenkräfte folgt aus Gleichung (3.35) für die  $x$ -Richtung

$$0 = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z}. \quad (3.101)$$

Durch die Anordnung der Spannungsknoten in Abbildung 3.15 führt die Auswertung des ZDQs, unter der Berücksichtigung der Gitterweiten  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ , zu folgenden Ableitungsapproximationen der Komponenten

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \approx \frac{\sigma_{xx,i,j,k} - \sigma_{xx,i-1,j,k}}{\Delta x}, \quad (3.102)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} \approx \frac{\sigma_{xy,i,j+1,k} - \sigma_{xy,i,j,k}}{\Delta y}, \quad (3.103)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \approx \frac{\sigma_{xz,i,j,k+1} - \sigma_{xz,i,j,k}}{\Delta z}, \quad (3.104)$$

und für das lokale Gleichgewicht in  $x$ -Richtung gilt mit Gleichung (3.101) die Beziehung

$$0 \approx \frac{\sigma_{xx,i,j,1} - \sigma_{xx,i-1,j,k}}{\Delta x} + \frac{\sigma_{xy,i,j+1,k} - \sigma_{xy,i,j,k}}{\Delta y} + \frac{\sigma_{xz,i,j,k+1} - \sigma_{xz,i,j,k}}{\Delta z}. \quad (3.105)$$

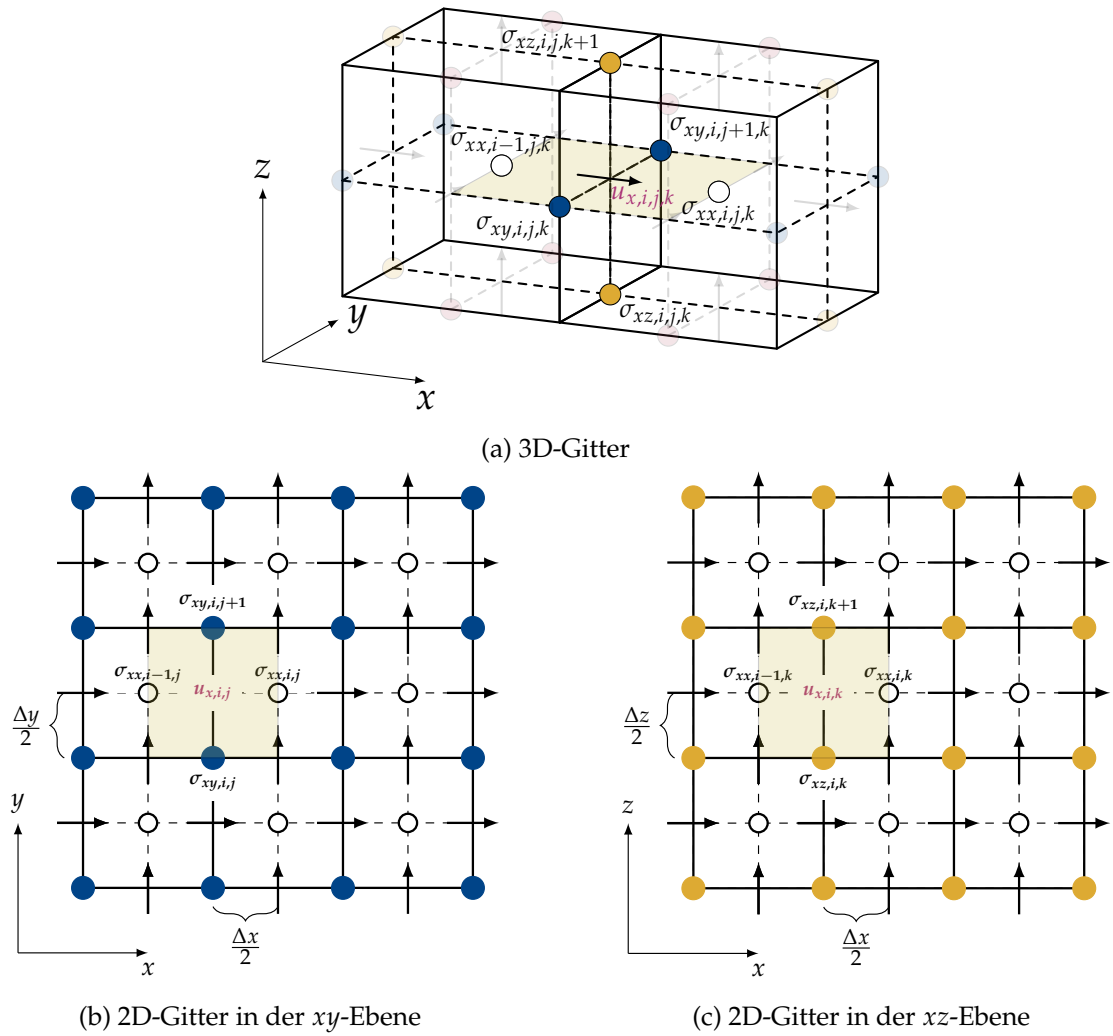


Abbildung 3.15: Gitter zur Diskretisierung der Gleichgewichtsbedingung.

Analog ergibt sich für die  $y$ - und  $z$ -Richtung

$$0 \approx \frac{\sigma_{xy,i+1,j,k} - \sigma_{xy,i,j,k}}{\Delta x} + \frac{\sigma_{yy,i,j,k} - \sigma_{yy,i,j-1,k}}{\Delta y} + \frac{\sigma_{yz,i,j,k+1} - \sigma_{yz,i,j,k}}{\Delta z}, \quad (3.106)$$

$$0 \approx \frac{\sigma_{xz,i+1,j,k} - \sigma_{xz,i,j,k}}{\Delta x} + \frac{\sigma_{yz,i,j+1,k} - \sigma_{yz,i,j,k}}{\Delta y} + \frac{\sigma_{zz,i,j,k} - \sigma_{zz,i,j,k-1}}{\Delta z}. \quad (3.107)$$

Für die weitere Berechnung ist eine Interpolation erforderlich, um den vollständigen Spannungstensor an jedem Knoten zu bestimmen.

### Interpolation zwischen den Knotenpunkten

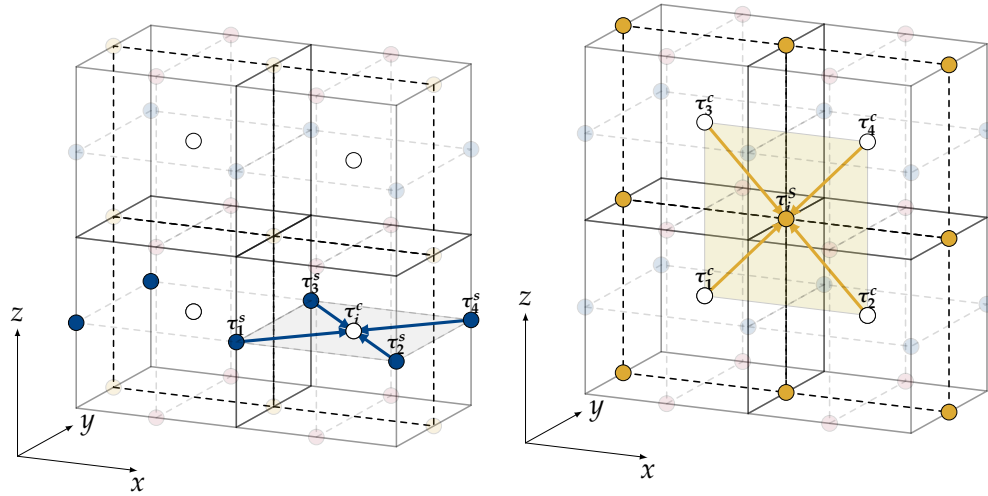
Durch die Verwendung eines *Staggered Grid* müssen die Komponenten des Spannungstensors zwischen den verschiedenen Knotenpunkten mittels bilinearer Interpolation übergeben werden, um beispielsweise die Vergleichsspannung in einem Punkt ermitteln zu können. Das Polynom zur Interpolation einer gesuchten Größe  $I(u, v)$  folgt zu

$$I(u, v) = V_{11}(1 - u)(1 - v) + V_{21}u(1 - v) + V_{12}(1 - u)v + V_{22}uv, \quad (3.108)$$

hierbei repräsentiert  $u$  und  $v$  die normalisierten Koordinaten, die Koeffizienten  $V_{11}$ ,  $V_{21}$ ,  $V_{12}$  und  $V_{22}$  die Werte an den Eckpunkten des Interpolationsbereichs. Für den vorliegenden Fall befindet sich die zu interpolierende Größe stets in der Mitte des Gitters, wodurch sich das Polynom zum arithmetischen Mittelwert vereinfacht

$$I(0.5, 0.5) = \frac{1}{4}(V_{11} + V_{21} + V_{12} + V_{22}). \quad (3.109)$$

Abbildung 3.16(a) zeigt die Interpolation einer beliebigen Spannungskomponente  $\tau^s$  von den Kantenmittelpunkten des *Staggered Grid* auf den Zellmittelpunkt, Abbildung 3.16(b) die Interpolation einer beliebigen Spannungskomponente  $\tau^c$  von den Zellmittelpunkten auf einen Kantenmittelpunkt des *Staggered Grid*.



(a) Interpolation zum Zellenmittelpunkt. (b) Interpolation zu einem Kantenmittelpunkt

Abbildung 3.16: Interpolationen im *Staggered Grid*.

Damit wird es nun möglich, an jeden Zellkanten- und Zellmittelpunktsknoten alle benötigten Informationen zur dynamischen Relaxation und elasto-plastischen Berechnung bereitzustellen.

### Dynamische Relaxation

Nachdem alle relevanten thermo-mechanischen diskreten Gleichungen aufgestellt sind, folgt deren Lösung mittels dynamischer Relaxation. Bei dieser Methode wird der zu berechnende Gleichgewichtszustand ausgehend von einem Nicht-Gleichgewichtszustand iterativ gelöst. Diese Methode geht auf die Arbeit von Otter zurück und wurde ursprünglich verwendet, um die Spannungen und Verschiebungen in einem Betondruckbehälter und einer Bogenstaumauer zu berechnen [103, 104]. Räss et al. bezeichnete dieses Verfahren als Pseudo-Transiente Methode und setzte es ein, um geo-mechanische Problemstellungen mithilfe von mehreren tausend GPUs zu berechnen [105].

Ausgangspunkt der dynamischen Relaxation ist der Nicht-Gleichgewichtszustand des Systems, so dass die linke Seite der Gleichung (3.35) Trägheitsterme enthalten muss und in die Bewegungsgleichung übergeht. Zur Vermeidung von numerischen Oszillationen während des Lösungsprozesses wird zusätzlich ein Dämpfungsterm  $\rho \frac{K}{\Delta t} \dot{\mathbf{u}}$  eingeführt [104] und Gleichung (3.35) geht mit  $\ddot{\mathbf{u}} = \frac{\partial \dot{\mathbf{u}}}{\partial t}$

$$\rho \frac{\partial \dot{\mathbf{u}}}{\partial t} + \rho \frac{K}{\Delta t} \dot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.110)$$

in die gedämpfte Wellengleichung über [103, 104]. Im statischen Gleichgewicht gilt  $\ddot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{u}} = 0$  und die gedämpfte Wellengleichung vereinfacht sich wieder zur statischen Gleichgewichtsbedingung. Dadurch sind die Parameter  $\rho, K, \Delta t$  rein numerische Parameter und bestimmen Konvergenzgeschwindigkeit und Stabilität des Verfahrens.

Gleichung (3.110) stellt ein AWP für  $\mathbf{u}$  dar, das mittels explizitem EULER-Verfahren diskretisiert und gelöst wird

$$\rho \left( \frac{\dot{\mathbf{u}}^{n+1} - \dot{\mathbf{u}}^n}{\Delta t} \right) + \rho \frac{K}{\Delta t} \dot{\mathbf{u}}^n \approx \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n \quad (3.111)$$

$$\dot{\mathbf{u}}^{n+1} \approx \dot{\mathbf{u}}^n (1 - K) + \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n. \quad (3.112)$$

Gleichung (3.112) liefert eine explizite Berechnungsformel für die Geschwindigkeit  $\dot{\mathbf{u}}^{n+1}$  zum nächsten Pseudo-Zeitschritt  $n + 1$ . Aus der Geschwindigkeit  $\dot{\mathbf{u}}^{n+1}$  lässt sich die Verschiebung  $\mathbf{u}^{n+1}$  ebenfalls mit dem explizitem EULER-Verfahren durch

$$\mathbf{u}^{n+1} \approx \mathbf{u}^n + \Delta t \dot{\mathbf{u}}^{n+1} \quad (3.113)$$

berechnen.

Aufgrund der iterativen und expliziten Berechnung von Gleichung (3.112) und Gleichung (3.113) kommt die dynamische Relaxation ohne Invertierung der Koeffizientenmatrix aus. Die Größen eines neuen Zeitschrittes ergeben sich jeweils aus den vorhergehenden Größen bzw. aus einem Anfangswert. Die iterative Berechnung gemäß Gleichung (3.112) und Gleichung (3.113) wird fortgesetzt, bis das System unter Einhaltung der vorgegebenen Toleranzen einen Gleichgewichtszustand erreicht, sodass Gleichung (3.35) näherungsweise erfüllt ist.

### Diskretisierung der elasto-plastischen Gleichungen

Um das plastische Verhalten des Materials abzubilden, müssen die Gleichungen aus Abschnitt 3.3.4 diskretisiert werden. Hierfür wird das konstitutive elasto-plastische AWP für die von Mises-Plastizität mit linearer Verfestigung über ein implizites EULER-Verfahren diskretisiert. Für einen gegebenen Anfangszustand mit  $\epsilon_E^n, \bar{\epsilon}_p^n$  und einer inkrementellen Dehnung  $\Delta\epsilon$  über das Pseudo-Zeit Intervall  $[t^n, t^{n+1}]$  folgt das inkrementelle elasto-plastische konstitutive Problem [90]

$$\begin{aligned}\epsilon_E^{n+1} &= \epsilon_E^n + \Delta\epsilon - \Delta\gamma \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{s}{||s||} \\ \bar{\epsilon}_p^{n+1} &= \bar{\epsilon}_p^n + \Delta\gamma\end{aligned}\quad (3.114)$$

für die Unbekannten Größen  $\epsilon_E^{n+1}, \bar{\epsilon}_p^{n+1}, \Delta\gamma$  unter Berücksichtigung von

$$\Delta\gamma \geq 0, \quad F(\sigma^{n+1}) \leq 0. \quad (3.115)$$

Die Lösung des inkrementellen elasto-plastischen konstitutiven Problems erfolgt mit dem Prädiktor-Korrektor-Verfahren, welches sich in zwei Schritte untergliedert [90]:

1. Prädiktor-Schritt: In diesem Schritt wird eine Schätzung der Zustandsgrößen durchgeführt, wobei angenommen wird, dass im Inkrement  $\Delta\epsilon$  nur elastische Dehnungen auftreten. Dies führt zu den Versuchsgrößen der Spannungen  $\sigma^{Tr,n+1}$  und der Dehnungen  $\epsilon_E^{Tr,n+1}$ , anhand derer die Fließbedingung  $F(\sigma^{Tr,n+1})$  überprüft wird.
2. Korrektor-Schritt: Für den Fall  $F(\sigma^{Tr,n+1}) < 0$ , handelt es sich um einen rein elastischen Schritt und die berechneten Versuchsgrößen im Knotenpunkt entsprechen den elastischen Größen, sodass keine Korrektur benötigt wird ( $\Delta\gamma = 0$ ). Für den Fall das  $F(\sigma^{Tr,n+1}) > 0$ , handelt es sich um einen elastisch-plastischen Schritt und die Versuchsgrößen müssen mit dem plastischen Multiplikator  $\Delta\gamma$  korrigiert werden.

Abbildung 3.17 veranschaulicht das Prädiktor-Korrektor-Verfahren für Szenarien mit Plastizität unter Berücksichtigung der Verfestigung (Abbildung 3.17(a)), bei denen sich der Bereich der Fließfläche erweitert, sowie für ideale Plastizität mit statischer Fließfläche (Abbildung 3.17(b)). In beiden Fällen ist stets sichergestellt, dass nach dem Korrektor-Schritt die Fließbedingung  $F(\sigma^{Tr,n+1}) \leq 0$  erfüllt ist.

Unter der besonderen Voraussetzung, dass ausschließlich die von Mises-Fließbedingung und lineare Verfestigung im Plastizitätsmodell berücksichtigt werden, kann eine geschlossene Form des plastischen Multiplikators  $\Delta\gamma$  hergeleitet werden [90]. Damit kann der plastische Multiplikator  $\Delta\gamma$  mit der Fließbedingung  $F(\sigma^{Tr,n+1})$ , der zweiten Lamé-Konstante  $\mu$  und dem linearen Verfestigungsmodul  $E_H$  durch

$$\Delta\gamma = \frac{F(\sigma^{Tr,n+1})}{3\mu + E_H} \quad (3.116)$$

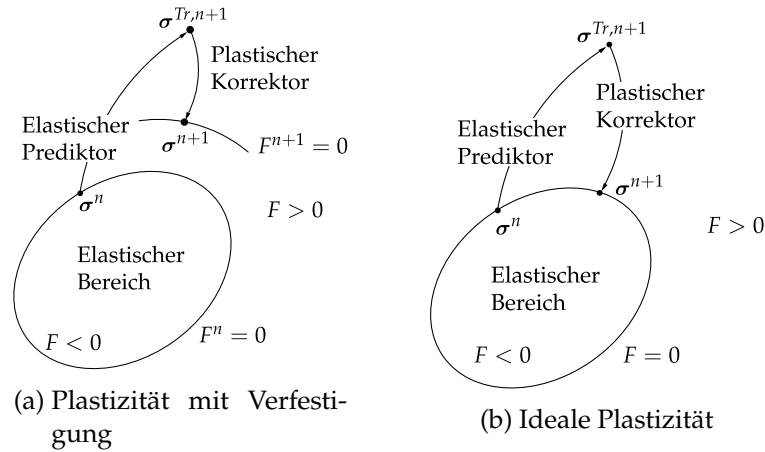


Abbildung 3.17: Geometrische Interpretation des Prädiktor-Korrektor-Verfahrens in Anlehnung an [90].

berechnet werden [90]. Bei der idealen Plastizität gilt für den Verfestigungsmodul  $E_H = 0$  [90] und die Gleichung (3.116) vereinfacht sich zu

$$\Delta\gamma = \frac{F(\sigma^{Tr,n+1})}{3\mu}. \quad (3.117)$$

Die Realisierung einer komplexeren Verfestigung ist möglich, jedoch muss  $\Delta\gamma$  dann durch eine iterative Methode, wie z. B. dem NEWTON-Algorithmus bestimmt werden [90].

Unter Berücksichtigung des plastischen Multiplikators  $\Delta\gamma$  über Gleichung (3.116) oder Gleichung (3.117) können die Versuchsgrößen des Spannungstensors entsprechend angepasst werden:

$$\mathbf{s}^{n+1} = \left(1 - \frac{3\mu\Delta\gamma}{F(\sigma^{Tr,n+1})}\right) \mathbf{s}^{Tr,n+1}, \quad (3.118)$$

$$\sigma^{n+1} = \mathbf{s}^{n+1} + \sigma_H (\sigma^{Tr,n+1}) \mathbf{I}. \quad (3.119)$$

Die akkumulierte plastische Dehnung  $\bar{\epsilon}_p^{n+1}$  sowie die plastischen Dehnungen  $\epsilon^{p,n+1}$  werden durch

$$\bar{\epsilon}_p^{n+1} = \bar{\epsilon}_p^n + \Delta\gamma, \quad (3.120)$$

$$\epsilon^{p,n+1} = \epsilon^{p,n} + \frac{3\Delta\gamma}{2F(\sigma^{Tr,n+1})} \mathbf{s}^{Tr,n+1} \quad (3.121)$$

aktualisiert.

Damit sind alle Komponenten des mechanischen Modells zur Berechnung elasto-plastischer Spannungen und Dehnungen vorhanden. Im Folgenden wird der Ablauf der dynamischen Relaxation mit dem elasto-plastischen Materialgesetz erläutert.

### 3.4.5 Elasto-plastische Berechnung mittels dynamischer Relaxation

Abbildung 3.18 zeigt die elasto-plastische Berechnung mittels dynamischer Relaxation. Zunächst wird aus dem Temperaturfeld  $T^{n+1}$  zum Zeitpunkt  $t^{n+1}$  eine thermische

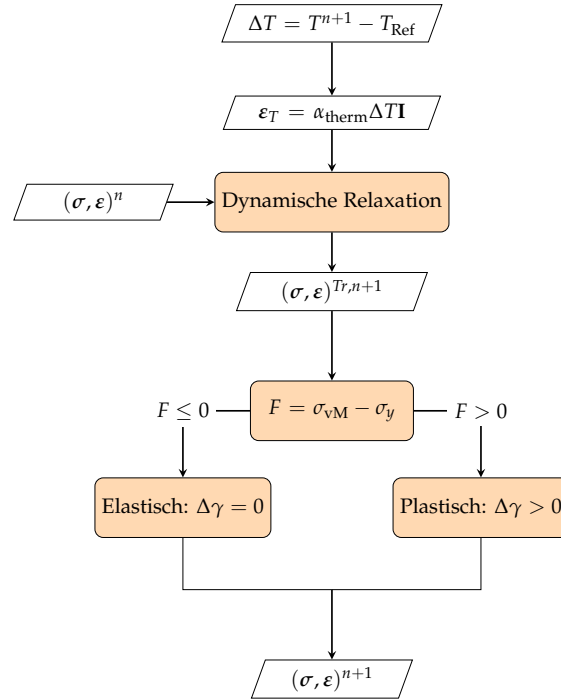


Abbildung 3.18: Flussdiagramm der elasto-plastischen Berechnung mittels Dynamischer Relaxation.

Dehnung berechnet, die dann zusammen mit den Spannungen und Dehnungen aus dem letzten Zeitschritt  $(\sigma, \epsilon)^n$  als Startlösung an den *Solver* übergeben wird. Die Startlösung stellt aufgrund der veränderten thermischen Dehnung infolge der Temperaturänderung zwischen Zeitschritt  $t^n$  und  $t^{n+1}$  einen Nicht-Gleichgewichtszustand des Systems dar und die Gleichung (3.112) wird unter Berücksichtigung der Randbedingungen so lange berechnet bis das Residuum den definierten Grenzwert unterschreitet oder die maximale Anzahl an Iterationen erreicht wurde. Als Residuum wird die quadratisch gemittelte Geschwindigkeit

$$\|\dot{\mathbf{u}}\|_R = \max(\|\bar{\dot{\mathbf{u}}}_x\|_2, \|\bar{\dot{\mathbf{u}}}_y\|_2, \|\bar{\dot{\mathbf{u}}}_z\|_2) \leq \|\dot{\mathbf{u}}\|_{R, \max} \text{ mit } \|\bar{\dot{\mathbf{u}}}\|_2 = \frac{\sqrt{\sum_{ii=1}^{N_x N_y N_z} \dot{u}_{ii}^2}}{N_x N_y N_z} \quad (3.122)$$

über dem Simulationsgebiet verwendet.

Die aus der dynamischen Relaxation resultierenden Lösung entspricht den Versuchsgrößen  $(\sigma, \epsilon)^{Tr, n+1}$  mit denen dann die Fließbedingung (Gleichung (3.41)) ausgewertet

wird. Im Falle von  $F(\sigma, \epsilon)^{Tr, n+1} \leq 0$  liegt ein elastischer Schritt vor und die Versuchsgrößen werden direkt als neue Größen  $(\sigma, \epsilon)^{n+1}$  übernommen; im Fall  $F(\sigma, \epsilon)^{Tr, n+1} > 0$  handelt es sich um einen plastischen Schritt und die Versuchsgrößen werden mithilfe des plastischen Multiplikators  $\Delta\gamma$  direkt in einem Schritt korrigiert (vgl. Gleichung (3.118) – Gleichung (3.121)). Die fehlenden Knotengrößen im *Staggered Grid* werden dann durch Interpolation aus den bereits korrigierten Werten berechnet, was den erforderlichen Speicherbedarf entsprechend reduziert.

Die bisher verwendeten expliziten EULER-Verfahren sind nicht bedingungslos stabil und müssen bedingte Stabilitätsbedingungen erfüllen, die im Folgenden erläutert werden.

### 3.4.6 Stabilitätsbedingungen der Modelle

Ein Verfahren zur numerischen Lösung von Differentialgleichungen muss stabil, das bedeutet unempfindlich gegenüber Rundungsfehlern sein [77]. Explizite EULER-Verfahren sind nicht bedingungslos stabil und unterliegen dem COURANT-FRIEDRICHS-LEWY-Kriterium (CFL-Kriterium) [106, 107]. Laut diesem Kriterium darf die Informationsübertragungsgeschwindigkeit im Gitter nicht größer sein als die des Mediums. Daher kann der Zeitschritt nicht beliebig groß sein, sondern wird in Abhängigkeit von der Gittergröße und den numerischen Parametern beschränkt, um die Stabilitätsbedingung einzuhalten.

Bei dem thermischen Modell werden sowohl die Wärmeleitung als auch der konvektive und strahlungsbedingte Wärmeübergang an der Oberfläche berücksichtigt. Die BIOT-Zahl  $Bi$  ist ein Parameter, der das Verhältnis zwischen dem Wärmeübergangswiderstand und dem internen Wärmewiderstand beschreibt [77]. Ein kleiner Gitterabstand führt zu  $Bi \ll 1$  und impliziert, dass die Wärmeleitung deutlich schneller als der Wärmeübergang erfolgt, und daher die Temperatur in der Zelle als konstant angenommen werden kann [75]. Der maximale Zeitschritt  $\Delta t_{\text{CFL,therm,max}}$  muss die Bedingung

$$\Delta t_{\text{CFL,therm,max}} \leq \frac{1}{6} \min(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta z^2) \frac{\rho c_p}{\kappa} \quad (3.123)$$

für eine stabile Berechnung erfüllen [77]. Um die Stabilität des Verfahrens zu garantieren wird der Ausdruck mit dem kleinsten Gitterabstand  $\min(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta z^2)$  und den temperaturabhängigen Materialparametern  $\rho, c_p, \kappa$  bei der Referenztemperatur  $T_{\text{Ref}} = 293.15 \text{ K}$  ausgewertet. Der finale Zeitschritt wird mit  $\Delta t_{\text{CFL,therm}} = 0.95 \Delta t_{\text{CFL,therm,max}}$  definiert, wodurch eine robuste Berechnung gewährleistet ist.

Für die Auflösung der Laserbewegung wird der Zeitschritt bei der Prozesssimulation auf der Mesoskala in Abhängigkeit der Lasergeschwindigkeit  $v_{\text{Las}}$  und dem kleinsten Gitterabstand aus  $\Delta x$  und  $\Delta y$  mit

$$\Delta t_{\text{Las}} = \frac{\min(\Delta x, \Delta y)}{v_{\text{Las}}} \quad (3.124)$$

berechnet. Die Auflösung der Laserbewegung erfordert eine kleine Gittergröße  $\Delta x$  und  $\Delta y$ , was dazu führt, dass der aus Gleichung (3.124) berechnete Zeitschritt deutlich kleiner

ist als der aus Gleichung (3.123) berechnete Zeitschritt und so eine stabile Berechnung gewährleistet wird.

Der für die iterative Berechnung des mechanischen Modells verwendete Zeitschritt muss ebenfalls das CFL-Kriterium erfüllen. Der explizite Zeitschritt  $\Delta t_{\text{CFL,mech}}$  leitet sich aus der longitudinalen Wellengeschwindigkeit  $C_L = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$  des Materials ab. Für eine stabile Berechnung muss der maximale Zeitschritt der mechanischen Berechnung  $\Delta t_{\text{CFL,mech,max}}$  die Bedingung

$$\Delta t_{\text{CFL,mech,max}} \leq \frac{1}{C_L} \left\{ \left( \frac{1}{\Delta x} \right)^2 + \left( \frac{1}{\Delta y} \right)^2 + \left( \frac{1}{\Delta z} \right)^2 \right\}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.125)$$

erfüllen [103]. Wie bei dem thermischen Modell wird auch bei der Berechnung des mechanischen Modells nur 95% des maximalen Zeitschritts verwendet mit  $\Delta t_{\text{CFL,mech}} = 0.95 \Delta t_{\text{CFL,mech,max}}$ .

Für die Lösung des thermo-mechanischen Prozessmodells sind Materialdaten über einen breiten Temperaturbereich erforderlich. Die spezifischen Materialdaten von Ti6Al4V werden nachfolgend detailliert erläutert.

## 3.5 Materialdaten zu Ti6Al4V

Eines der am häufigsten verwendeten Materialien im LPBF Prozess ist die Titanlegierung Ti6Al4V, bestehend aus Titan, 6 Masseprozent Aluminium und 4 Masseprozent Vanadium. Aufgrund ihrer sehr guten Eigenschaften, wie hoher Festigkeit, niedriger Dichte und sehr guter Biokompatibilität [108], findet die Legierung breite Anwendungsmöglichkeiten. Besonders gut geeignet ist sie für Anwendungen in der Luft- und Raumfahrt [109], im Automobilbau [110] sowie in der Medizintechnik, insbesondere für Implantate [111] und Prothesen [112]. Durch die weite Verbreitung sind umfangreiche temperaturabhängige Materialdaten verfügbar, die für die LPBF Prozesssimulation unerlässlich sind. Dabei dient vor allem die Arbeit von [113] als Grundlage. Werte, die über eine bestimmte Temperaturgrenze hinaus unbekannt sind, werden gemäß dem letzten verfügbaren Datenpunkt als konstant angenommen (vgl. Abbildung 3.19 und Abbildung 3.20).

### 3.5.1 Thermo-physikalische Eigenschaften

Für das thermische Modell der LPBF Prozesssimulation zeigen die vier Plots in Abbildung 3.19 die grundlegenden temperaturabhängigen Materialdaten von Ti6Al4V. Die Berechnung der Temperatur erfolgt durch die Enthalpie-Temperatur-Funktion aus [114], gezeigt oben links in Abbildung 3.19. Diese Kurve weist bei der Schmelztemperatur  $T_M = 1928.0 \text{ K}$  und der Verdampfungstemperatur  $T_V = 3533.0 \text{ K}$  zwei charakteristische Sprünge, aufgrund der benötigten Schmelz- und Verdampfungsenthalpie, auf.

Die im weiteren Verlauf erforderlichen temperaturabhängigen Daten, wie die Dichte  $\rho$ , die isobare Wärmekapazität  $c_p$  sowie die Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$ , stammen aus [113],

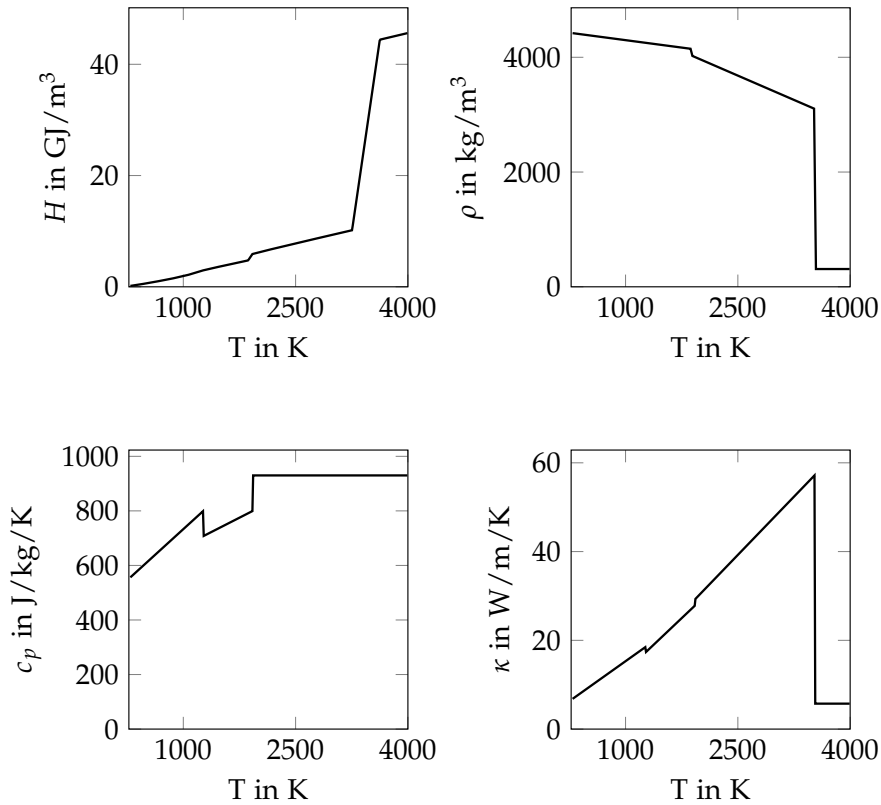


Abbildung 3.19: Enthalpie  $H$  aus [114] sowie Dichte  $\rho$ , isobare Wärmekapazität  $c_p$  und Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$  aus [113] für Ti6Al4V über der Temperatur; [10], CC BY 4.0.

und werden nach der Temperaturbestimmung über  $H$  in einem nachfolgenden Schritt berechnet. Die Funktionsverläufe für  $\rho$  und  $c_p$  zeigen drei Abschnitte im Funktionsverlauf, die die feste, flüssige und gasförmige Phase repräsentieren. Für die Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$  wird neben der festen, flüssigen und gasförmigen Phase auch die für Ti6Al4V typische  $\beta$ -Phase im Modell berücksichtigt [113]. Die Dichte und die isobare Wärmekapazität, die oberhalb der Verdampfungstemperatur unbekannt sind, werden gemäß dem letzten verfügbaren Datenpunkt als konstant angenommen. Für die Wärmeleitfähigkeit wird oberhalb der Verdampfungstemperatur angenommen, dass sie sich wie ein isolierendes Gas verhält, das nahezu keine Wärme leitet.

Streng genommen existiert ein Übergang von der vollständigen Schmelze zum Feststoff, der durch die Liquidus- und Solidustemperatur definiert ist. Im Modell werden diese genauen Phasenanteile jedoch nicht dargestellt, sondern nur die Schmelztemperatur  $T_M$  zur Unterscheidung der Phasen verwendet. Dadurch kann der Übergangsbereich

zwar nicht im Modell abgebildet werden, diese Vereinfachung ermöglicht jedoch eine Reduktion der Modellkomplexität und erleichtert die numerische Berechnung.

Die im Modell verwendete Emissivität von Ti6Al4V basiert auf der Arbeit [115] und wird mit einem konstanten Wert von  $\varepsilon_s = 0.35$  angenommen.

### 3.5.2 Mechanische Eigenschaften

Der E-Modul  $E$ , der thermische Ausdehnungskoeffizient  $\alpha_{\text{therm}}$ , die Fließspannung  $\sigma_y$  und die Querkontraktion  $\nu$  sind die mechanischen Materialkennwerte. Diese temperaturabhängigen Größen basieren ebenfalls auf der Veröffentlichung [113] und wurden in Abbildung 3.20 über der Temperatur visualisiert. Auch für diese Größen sind drei charakteristische Funktionsverläufe für die jeweiligen Phasen erkennbar.

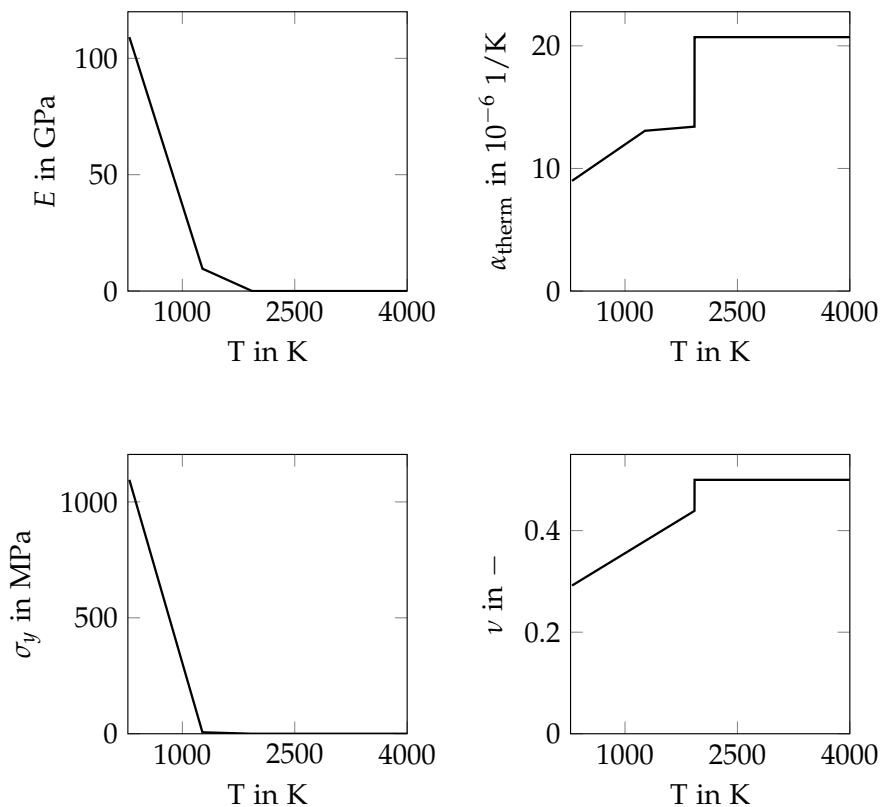


Abbildung 3.20: Mechanische Materialdaten für Ti6Al4V als Funktion der Temperatur aus [113].

Mit steigender Temperatur ist eine deutliche Abnahme des E-Moduls und der Fließspannung zu beobachten, bis das Material praktisch verflüssigt ist. Im Vergleich zum festen Zustand ist der E-Modul bzw. die Fließspannung daher sehr niedrig. Oberhalb

der Schmelztemperatur wird der letzte verfügbare Wert als konstant angenommen. Die Annahme konstanter Werte oberhalb der Schmelztemperatur ist physikalisch nicht korrekt, aber weitgehend irrelevant, da E-Modul und Fließspannung in diesem Bereich gegen null gehen.

Das vollautomatische *Preprocessing* basiert auf dem G-Code. Zur Verarbeitung werden bestimmte Methoden und Konzepte benötigt die in Abschnitt 3.6 erläutert werden.

## 3.6 Verarbeitung des G-Code

Das folgende Kapitel behandelt die Konzepte und Methoden zur Verarbeitung des G-Codes, die eine entscheidende Grundlage für das vollautomatische *Preprocessing* der LPBF Prozesssimulation darstellen und somit von zentraler Bedeutung sind.

### 3.6.1 Konzept der Materialmatrix

Das Array  $M \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y \times N_z}$ , im Folgenden als Materialmatrix bezeichnet, ist die Darstellung eines physikalischen Objekts, in dem jeder *Array*-Eintrag die Eigenschaften eines bestimmten Punktes des Objekts repräsentiert. Die Größe des *Arrays* richtet sich nach der gewählten Gitterauflösung. Die Eigenschaften umfassen die Materialpräsenz, die Dichte, die Wärmekapazität und die Wärmeleitfähigkeit. Wenn ein Punkt im Material bereits geschmolzen oder erstarrt ist, wird dieser in der Materialmatrix mit

$$M_{i,j,k} = 1 \quad (3.126)$$

gekennzeichnet und als aktiviert bezeichnet. Im Gegensatz dazu zeigt

$$M_{i,j,k} = 0 \quad (3.127)$$

an, dass noch die Eigenschaften des Pulverbetts vorliegen. Durch die Materialmatrix können die lokalen thermischen Eigenschaften durch eine Linearkombination aus den Eigenschaften von Pulver und Feststoff berechnet werden. Dies wird am Beispiel der Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{i,j,k}$  demonstriert, die in Abhängigkeit von der Wärmeleitfähigkeit des Pulvers  $\kappa_P$  und des Feststoffs  $\kappa_F$  über

$$\kappa_{i,j,k} = (1 - M_{i,j,k})\kappa_P + M_{i,j,k}\kappa_S \quad (3.128)$$

berechnet wird.

Die Materialmatrix ermöglicht somit die Berücksichtigung der jeweiligen Materialzustände sowie ihrer aktuellen thermischen Eigenschaften. Darüber hinaus ermöglicht diese Methode die Abbildung des schichtweisen Aufbaus eines Bauteils. Die Kombination aus Materialmatrix und dem Aufbauprozess wird häufig als *Element-Birth-Death*-Technik bezeichnet [47, 48]. Die Steuerung, zu welchem Zeitpunkt eine Zelle aktiviert wird, erfolgt entweder durch das Erreichen einer definierten Grenztemperatur oder ist abhängig von der Laserbewegung, die wiederum durch den G-Code definiert ist.

### 3.6.2 G-Code und der BRESENHAM-Algorithmus

Der G-Code ist eine ISO-standardisierte (RS274D/ISO 6983) Programmiersprache zur Steuerung von Werkzeugmaschinen [116]. Der Steuerungscode beinhaltet Bearbeitungsfunktionen sowie Bahnbewegungsbefehle des Lasers und wird in Abhängigkeit der Prozessparameter wie Scanstrategie, Pulverschichtdicke, *Hatch*-Abstand und Stützstruktur, mit dem *Slicer* erzeugt, wie in Abbildung 3.21 dargestellt. Dabei zerlegt der *Slicer* die Geometrie des 3D-Modells schichtweise und berechnet die notwendigen Bahnbewegungen des Lasers. Der *Slicer* beschreibt die Geometrie und damit die Bahnbewegungen mit Liniensegmenten. Aus jeder 3D-Geometrie entstehen dadurch 2D-Schnitte, die aus vielen kleinen Liniensegmenten in einer diskreten Abfolge bestehen. Der für diese Arbeit verwendete G-Code wird mit dem Programm Autodesk Netfabb [117] erzeugt und wird von Netfabb als Laservektor (LSR) Datei bezeichnet [118].

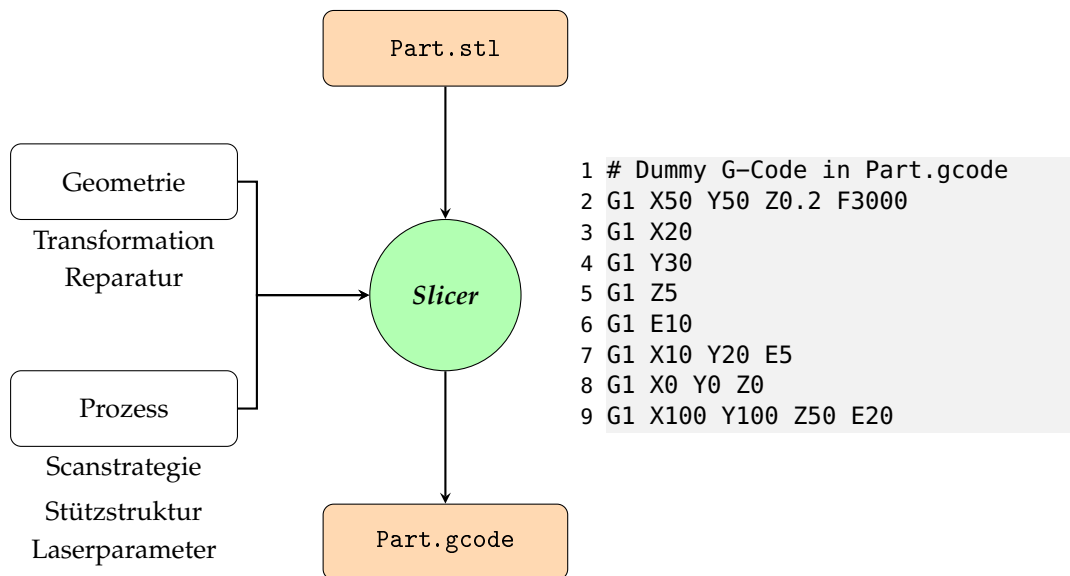


Abbildung 3.21: Programmablauf im *Slicer* (links) und *Dummy* G-Code (rechts).

Die Struktur des G-Codes ermöglicht die Generierung der Materialmatrix und die Festlegung der Aktivierungsreihenfolge durch die Bewegungsbahnen des Lasers. Gleichzeitig stellt der G-Code durch Aufteilung der 3D-Geometrie in 2D-Schnitte die Geometrie des zu fertigenden Bauteils dar. Die Umwandlung des G-Codes in die Materialmatrix basiert auf dem BRESENHAM-Algorithmus.

Der BRESENHAM-Algorithmus [119] ermöglicht es, eine Linie zwischen zwei Punkten in einem vorgegebenen Gitter darzustellen, indem die Zellen des Gitters ausgewählt werden, die der Linie am nächsten liegen. Die Grundidee des BRESENHAM-Algorithmus besteht darin, den Fehler zwischen der tatsächlichen Linie und der idealen Linie zu überwachen und dann die Zellen auszuwählen, die den Fehler minimieren. Durch die

Verwendung von Inkrementen in  $x$ - und  $y$ -Richtung wird der Fehler aktualisiert, um die nächste Zelle zu bestimmen. Auf diese Weise wird sichergestellt, dass die Linie so nah wie möglich an der idealen Linie liegt. Das Flussdiagramm des BRESENHAM-Algorithmus ist im Anhang in Abbildung A.6 dargestellt.

Der Algorithmus ist einfach in der Implementierung und effizient in der Ausführung, jedoch muss bei einer komplexeren Geometrie eine feine Gitterauflösung verwendet werden, um eine gute Approximation der Geometrie zu erzielen. In Abbildung 3.22 wird dies beispielhaft an der Diskretisierung eines Impellers [120] gezeigt, bei dem die komplexe Flügelform nur durch eine hohe Gitterauflösung abgebildet werden kann.

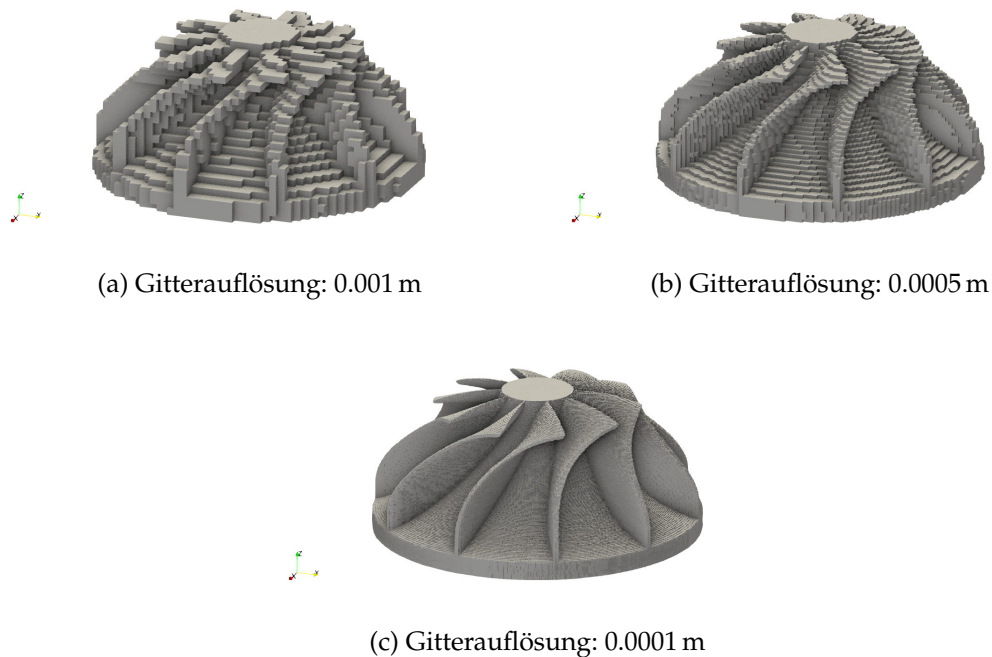


Abbildung 3.22: Diskretisierung eines Impellers [120] mit dem BRESENHAM-Algorithmus.

Der BRESENHAM-Algorithmus wird in Abhängigkeit von der betrachteten Skala unterschiedlich eingesetzt. In der Prozesssimulation auf der Mesoskala werden sowohl die Kontur- als auch die *Infill*-Pfade samt ihrer Aktivierungsreihenfolge gespeichert. Im Gegensatz dazu folgt die Prozesssimulation auf Makroskala einem schichtweisen Ansatz und ignoriert dabei die Scanstrategie. In diesem Fall verarbeitet der BRESENHAM-Algorithmus lediglich die Konturpfade, während der Zwischenraum direkt mithilfe des Bildverarbeitungswerkzeugs aus dem Julia-Paket *ImageMorphology.jl* aktiviert wird.

Die Verarbeitung des G-Codes mit dem BRESENHAM-Algorithmus erfolgt vollautomatisch und ermöglicht die LPBF Prozesssimulation komplexer Geometrien ohne zusätzliche Verarbeitungsschritte oder Programme – allein auf Basis des G-Codes. Dadurch wird die

konventionelle Vernetzung überflüssig, und der Fokus des Anwenders verlagert sich auf den G-Code und die Prozessparameter, was die Simulationskette wesentlich effizienter macht.

Im Folgenden wird der gesamte Programmablauf der LPBF Prozesssimulation einschließlich der Informationsflüsse zwischen den zuvor eingeführten Modellen erläutert.

### 3.7 Programmablauf der LPBF Prozesssimulation

Die Informationsströme der LPBF Prozesssimulation sind in Abbildung 3.23 dargestellt, die in weißer Farbe dargestellten Kästen repräsentieren die Ein- und Ausgabegrößen, während die orangefarbenen Kästen die Methoden und Modelle veranschaulichen.

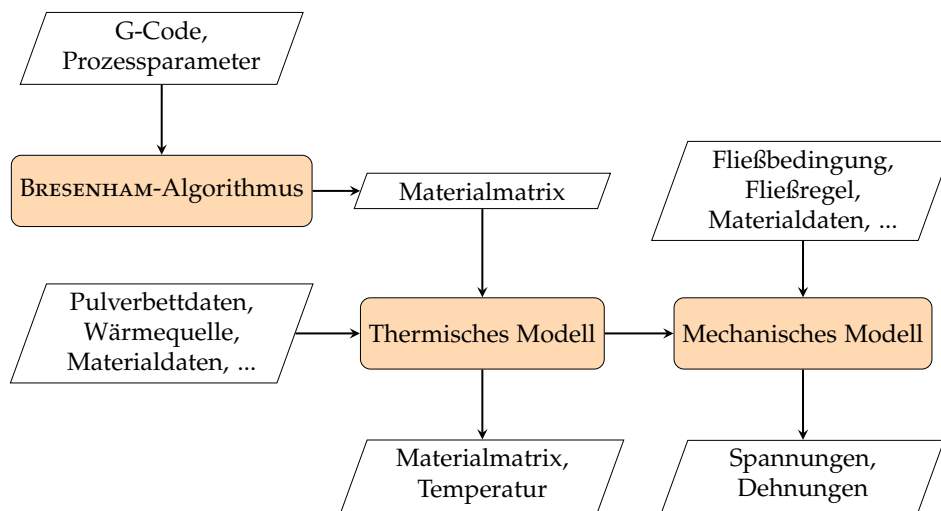


Abbildung 3.23: Informationsströme der LPBF Prozesssimulation.

- **BRESENHAM-Algorithmus:** Mit dieser Methode werden aus dem G-Code und den Prozessparametern vollautomatisch die Aktivierungsreihenfolge sowie die Materialmatrix und damit die *Array*-Dimensionen für die Simulation bestimmt. Dieser Schritt initialisiert die LPBF Prozesssimulation und stellt das *Preprocessing* dar.
- **Thermisches Modell:** Mit diesem Modell wird die Temperaturberechnung auf Basis der Materialmatrix umgesetzt. Im thermischen Modell werden dabei sowohl die effektive Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts als auch die Wärmequelle für die Meso- und Makroskala genutzt. Zusätzlich werden die Materialparameter in Abhängigkeit von der berechneten Temperatur bestimmt. Als Ergebnis liefert das Modell das Temperaturfeld sowie eine aktualisierte Materialmatrix, die das gedruckte Bauteil abbildet.

- **Mechanisches Modell:** Dieses Modell dient der Berechnung von Spannungen und Dehnungen, die sich aus der vorgegebenen Materialmatrix sowie dem Temperaturfeld des thermischen Modells ergeben. Die Spannungen werden mittels dynamischer Relaxation berechnet, während unter Berücksichtigung der temperaturabhängigen Materialparameter die Fließbedingung ausgewertet und das elastisch-plastische Materialverhalten abgebildet wird. Als Ergebnis liefert das Modell die Spannungen und Dehnungen im Material.

Das finale thermo-mechanische LPBF Prozessmodell, einschließlich der zu lösenden Gleichungen und des verwendeten Gitters ist in Abbildung 3.24 dargestellt. Es ermöglicht die Simulation auf der Meso- und Makroskala.

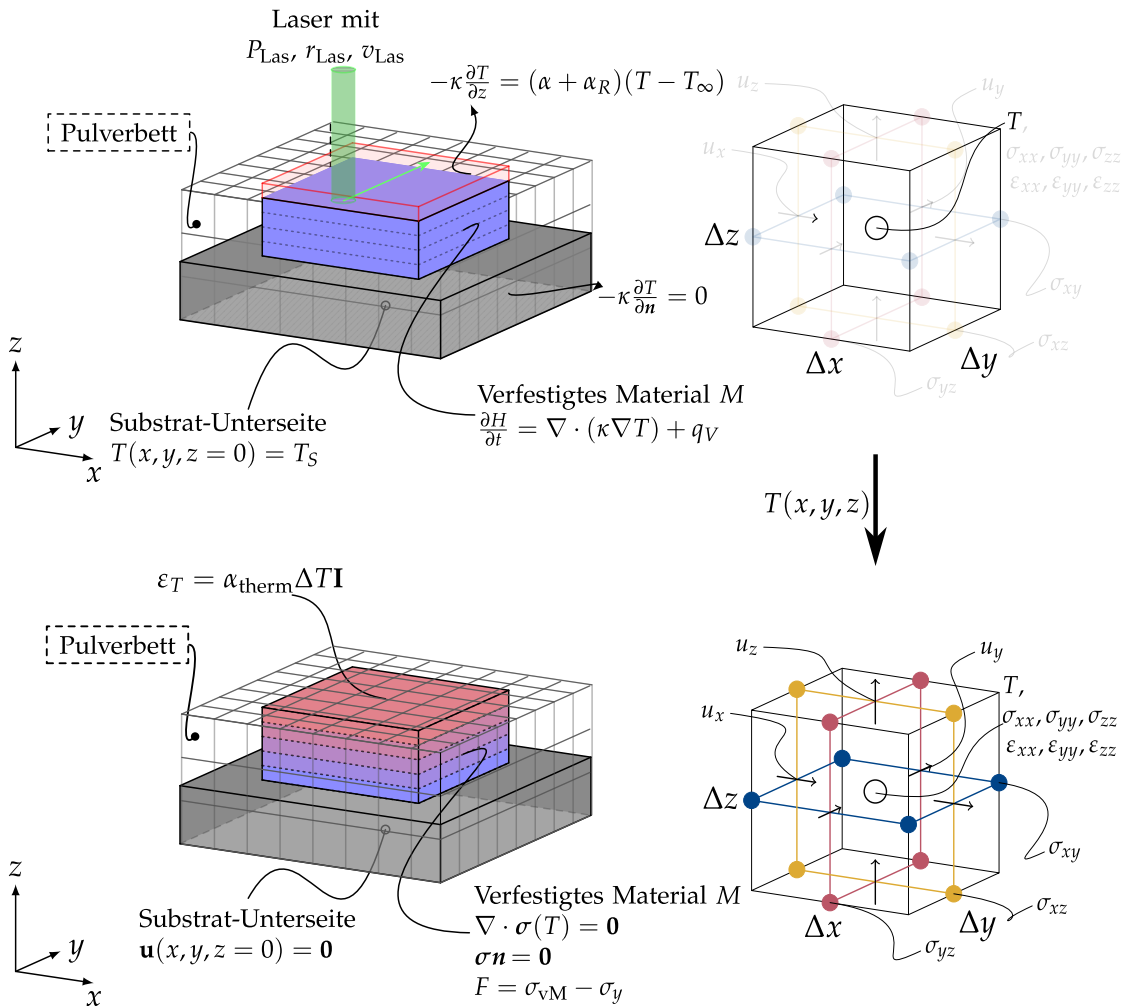


Abbildung 3.24: Illustration des finalen thermo-mechanischen LPBF Prozessmodells: Darstellung der zugrunde liegenden Gleichungen, des verwendeten Gitters und der Temperatur als Kopplungsgröße.

Das LPBF Prozessmodell wurde mit der Julia Version 1.6.7 (2022-07-19) auf Basis des Julia-Pakets `ParallelStencil.jl` von [121] entwickelt. Während andere Prozesse, wie die G-Code-Verarbeitung, seriell ablaufen, wird für die thermo-mechanische Berechnung eine GPU-Beschleunigung genutzt. Alle Berechnungen erfolgten auf einer Nvidia Quadro RTX 6000 Grafikkarte mit 24 GB Arbeitsspeicher [122].

Die Verifizierung des thermo-mechanischen Modells erfolgte durch eine FEM-Berechnung eines Würfels mit einer aufgetragenen Temperaturüberhöhung. Dabei zeigte sich, dass die Ergebnisse beider Ansätze mit feinerer Gitterauflösung zunehmend übereinstimmen, was die korrekte Implementierung des Modells bestätigt. Details dazu finden sich in Abschnitt A.1.



# 4 | Modellierung der Mesoskala

## Inhalt

|     |                                                               |    |
|-----|---------------------------------------------------------------|----|
| 4.1 | <i>Singletrack</i> Untersuchung . . . . .                     | 65 |
| 4.2 | <i>Multitrack</i> Untersuchung . . . . .                      | 69 |
| 4.3 | <i>Singletrack</i> Untersuchung mit der PBE-Methode . . . . . | 76 |

Das vorliegende Kapitel befasst sich mit der Modellierung und der Simulation des LPBF Prozesses auf der Mesoskala. Der Einfluss verschiedener Prozessparameter auf die Temperatur wird anhand von *Single*- und *Multitrack*-Experimenten untersucht. Darüber hinaus wird der Einfluss der Homogenisierung und der Variation der Materialeigenschaften, die aus dem Pulverbett abgeleitet werden, mithilfe von Pulverbettelementen (PBE) analysiert.

## 4.1 *Singletrack* Untersuchung

Bei einem *Singletrack*-Experiment wird lediglich eine einzelne Laserbahn modelliert. Der Laser bewegt sich dabei von links nach rechts und schmilzt das Pulverbett auf. Durch die Abbildung der einzelnen Laserbahn kann eine hohe räumliche Auflösung für die Simulation verwendet werden, zudem können die Simulationsergebnisse sehr gut mit realen Experimenten verglichen werden. Damit eignet sich das *Singletrack*-Experiment zur Validierung des Simulationsmodells auf der Mesoskala.

Ziel ist die Modellvalidierung anhand experimenteller Daten von [58] sowie die Untersuchung des Einflusses von Prozessparametern und die Pulverbett-Homogenisierung auf Temperatur und Schmelzbadentwicklung.

### 4.1.1 Modellaufbau

Das grundlegende Modell ist schematisch in Abbildung 4.1 dargestellt. Das Gebiet besitzt eine quadratische Grundfläche von  $0.6\text{ mm} \times 0.6\text{ mm}$  und eine Höhe von  $0.1\text{ mm}$ . In der Materialmatrix  $M$  sind die Elemente, die die oberste Schicht repräsentieren, zunächst deaktiviert (rot eingefärbter Bereich in Abbildung 4.1). Alle Matricelemente, die Bereiche unterhalb der obersten Schichtdicke repräsentieren, sind bereits aktiviert. Ein Element der Materialmatrix wird aktiviert, sobald die Schmelztemperatur im

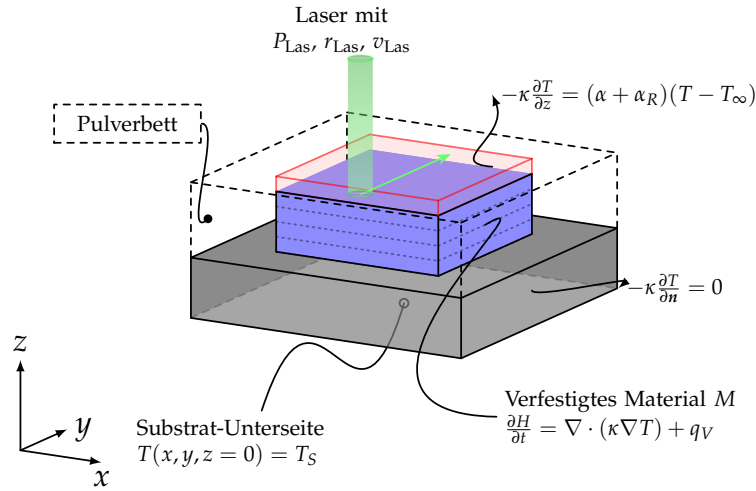


Abbildung 4.1: Modellaufbau des *Singletrack*-Experiments; übersetzt von [10], CC BY 4.0.

Knoten erreicht wird (1928 K). Eine Bedingung stellt sicher, dass bereits geschmolzenes Pulver nicht wieder in Pulver umgewandelt werden kann. Die seitlichen Ränder des Modells sind thermisch isoliert und eine Wärmeübertragung durch Konvektion und Strahlung findet nur an der Oberseite statt. Die Unterseite des Substrats besitzt eine konstante Temperatur  $T_S = 293.15$  K. Um den Phasenübergang zu berücksichtigen wird die Temperatur über die Enthalpie  $H$  berechnet. Die verwendeten Prozessparameter basieren auf [58]. Hierbei wird die Laserleistung mit  $P_{\text{Las}} = \{20, 40, 60, 80\}$  W variiert, während der Laserdurchmesser  $r_{\text{Las}} = 26 \mu\text{m}$ , die Geschwindigkeit  $v_{\text{Las}} = 0.2 \text{ m s}^{-1}$  und die Pulverschichtdicke mit  $t_{\text{PB}} = 30 \mu\text{m}$  entsprechend konstant bleiben. Für den konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha$  wird ein Wert von  $40 \text{ W/m}^2/\text{K}$  verwendet und die Raumtemperatur mit  $T_\infty = 293.15$  K als konstant modelliert. Abgesehen vom Emissionsgrad werden die Materialwerte des verfestigten Pulvers entsprechend der Temperatur bei jedem Zeitschritt aktualisiert. Alle Prozessparameter des Modells sind in der Tabelle 4.1 zusammengefasst. Die Simulationen werden unter Verwendung einer Zellgröße von  $2 \mu\text{m}$  durchgeführt.

Tabelle 4.1: Prozessparameter des *Singletrack*-Experiments

| $P_{\text{Las}}$  | $r_{\text{Las}}$ | $v_{\text{Las}}$       | $\Delta h$ | $t_{\text{PB}}$  | $T_S$              | $\alpha$                    | $T_\infty$         |
|-------------------|------------------|------------------------|------------|------------------|--------------------|-----------------------------|--------------------|
| $\{20, \dots\}$ W | $26 \mu\text{m}$ | $0.2 \text{ m s}^{-1}$ | -          | $30 \mu\text{m}$ | $293.15 \text{ K}$ | $40 \text{ W/m}^2/\text{K}$ | $293.15 \text{ K}$ |

### 4.1.2 Einfluss der Laserleistung

Die Schmelzbadbreite  $W$  und die Schmelzbadtiefe  $D$  werden, wie in Abbildung 4.2 dargestellt, für jeden Zeitschritt anhand der Knotentemperatur im verfestigten Material unterhalb der Pulverschicht ausgewertet. Die Schmelzbadlänge  $L$  wird bei der *Singletrack* Untersuchung nicht analysiert.

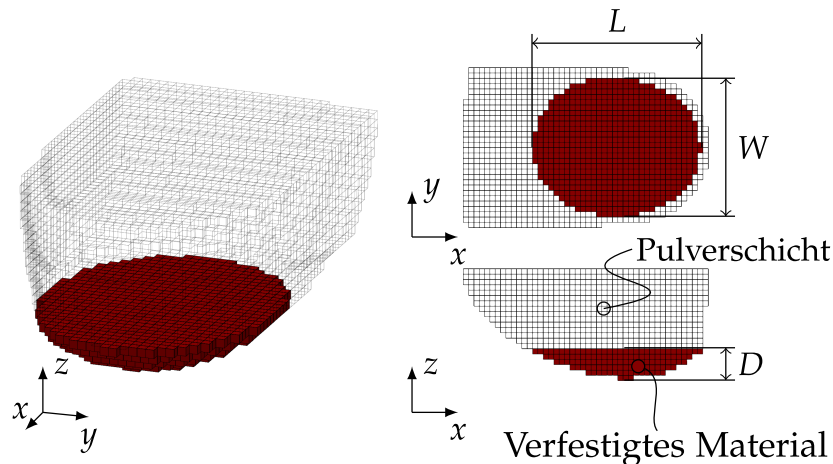


Abbildung 4.2: Darstellung der Schmelzbadlänge  $L$ , Schmelzbadbreite  $W$  und der Schmelzbadtiefe  $D$  im verfestigten Material; [10], CC BY 4.0.

Die Auswertung in Abbildung 4.3 zeigt die Schmelzbäder für die Laserleistungen  $P_{\text{Las}} = \{20, 40, 60, 80\} \text{ W}$ , die von links nach rechts angeordnet sind, zum Zeitpunkt  $t = 0.0016 \text{ s}$ . Grüne Bereiche visualisieren Temperaturen oberhalb der Verdampfungstemperatur  $T_V = 3533 \text{ K}$ , blaue Bereiche Temperaturen oberhalb der Schmelztemperatur  $T_M = 1928 \text{ K}$  im Substrat.

Zunächst ist bei allen Schmelzbädern ein kometenähnlicher Schweiß zu beobachten. Das in Bewegungsrichtung vor dem Laser liegende Pulver sowie das bereits flüssige bzw. erstarrte Material dahinter bewirken eine unterschiedliche Wärmeleitfähigkeit entlang der Bewegungsrichtung. Dies führt dazu, dass die entstehende Wärme nach hinten abgeleitet wird, während sich vor dem Laser ein Wärmestau bildet. So werden insgesamt höhere Temperaturen erzielt und das Pulver schmilzt bereits kurz vor dem Fokuspunkt des Lasers. Dabei können auch bei geringer Laserleistung, im vorliegenden Fall bei  $P_{\text{Las}} = 20 \text{ W}$ , Temperaturen oberhalb der Verdampfungstemperatur erreicht werden. Mit zunehmender Laserleistung ist eine Erweiterung des aufgeschmolzenen Substrates sowie das Auftreten von Bereichen mit Temperaturen oberhalb der Verdampfungstemperatur zu beobachten. Dies begünstigt zwar eine wirksame Verbindung zwischen der bereits vorhandenen und der neu zu druckenden Schicht, vergrößert aber auch den Bereich, in dem Verdampfung auftritt. Dies birgt das Risiko der Entstehung von *Keyhole*-Poren, welche die Leistungsfähigkeit des Bauteils beeinträchtigen können [14]. Um die Schmelz-

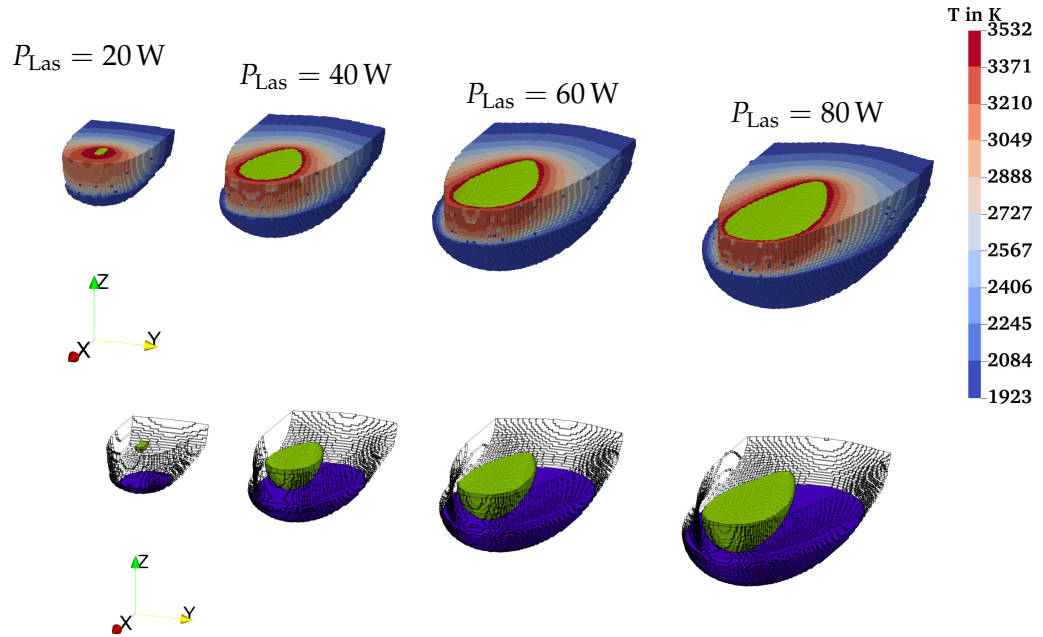


Abbildung 4.3: Schmelzbäder mit Temperaturverteilung und Phasenanteile für die Laserleistungen  $P_{\text{Las}} = \{20, 40, 60, 80\}$  W zum Zeitpunkt  $t = 0.0016$  s. Grüne Bereiche kennzeichnen Temperaturen über  $T_V = 3533$  K, blaue Bereiche Temperaturen über  $T_M = 1928$  K.

bäder quantitativ miteinander zu Vergleichen, wird die maximale Breite und Tiefe in Abbildung 4.4 über der Zeit betrachtet.

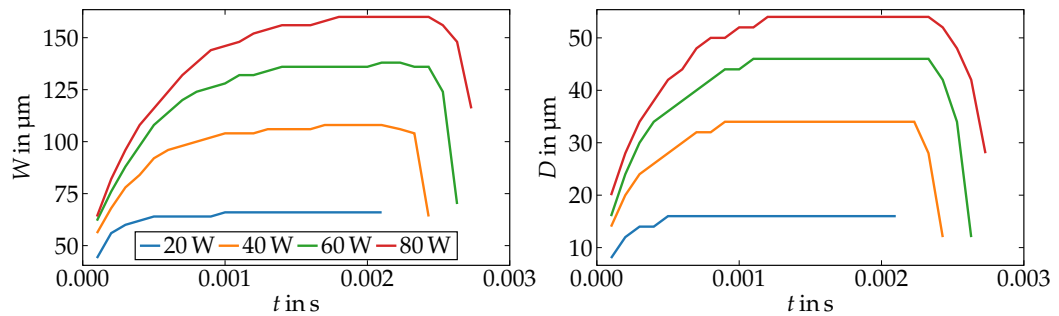


Abbildung 4.4: Schmelzbadbreite  $W$  (links) und Schmelzbadtiefe  $D$  (rechts) über der Zeit, der *Singletrack*-Experimente bei den Laserleistungen  $P_{\text{Las}} = \{20, 40, 60, 80\}$  W.

Auch hier wird deutlich, dass höhere Leistungen zu einer größeren Schmelzbadbreite  $W$  und Schmelzbadtiefe  $D$  führen. Außerdem hat die höhere Leistung eine längere Ab-

kühlzeit und damit eine längere Lebensdauer des Schmelzbades zur Folge. Unabhängig von der Leistung erreicht jedes Schmelzbad einen quasi-stationären Zustand, sodass die maximale Breite und Tiefe als geeignete Vergleichswerte zwischen Experiment und Simulation genutzt werden können, wie in Abbildung 4.5 dargestellt.

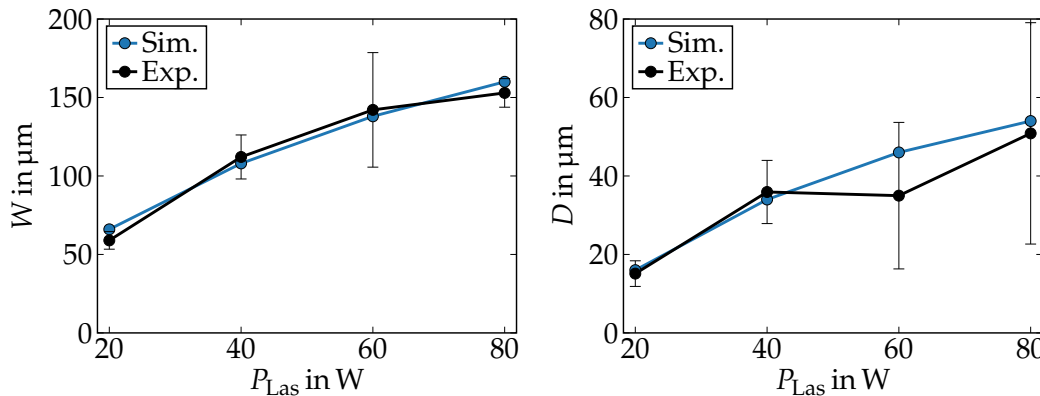


Abbildung 4.5: Experimentelle [58] und simulative Ergebnisse der Schmelzbadbreite  $W$  (links) und der Schmelzbadtiefe  $D$  (rechts) des *Singletrack*-Experiments für die Laserleistungen  $P_{\text{Las}} = \{20, 40, 60, 80\}$  W.

Generell zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation für die Schmelzbadbreite  $W$ . Die Schmelzbadtiefe  $D$  wird im Vergleich zur Schmelzbadbreite etwas schlechter reproduziert, wobei die Werte noch innerhalb der Messunsicherheiten liegen. Damit ist das vorliegende Modell für die Legierung Ti6Al4V validiert und bildet die Grundlage für weitere Simulationen und Untersuchungen.

## 4.2 Multitrack Untersuchung

*Singletrack*-Experimente bieten zwar einen einfachen Ansatz zur Untersuchung des Schmelzbades und können gut zur Validierung von Simulationen eingesetzt werden, haben aber vorwiegend einen akademischen Charakter. Ein realistischeres Temperaturfeld beim LPBF Prozess kann durch *Multitrack*-Experimente erreicht werden, die mehrere Laserbahnen und die Scanstrategie berücksichtigen. Die Schmelzbadabmessungen in diesen Experimenten sind entscheidend, da sie breiter als der gewählte *Hatch*-Abstand sein müssen, um eine Verbindung zwischen den Laserbahnen zu gewährleisten. Die Analyse von Temperaturen oberhalb der Verdampfungstemperatur kann auf kritische Bereiche hinweisen, in denen Poren im fertigen Bauteil auftreten können.

Ziel der *Multitrack* Untersuchung ist es, den Einfluss verschiedener Scanstrategien sowie das Verhalten von Laserleistung und Scangeschwindigkeit bei konstanter Volumenenergiedichte (VED) auf das Temperaturfeld und eine mögliche Porenbildung zu untersuchen.

### 4.2.1 Modellaufbau

Zur Simulation des *Multitrack*-Experiments wird das Modell des *Singletrack*-Experiments verwendet und in der Größe erweitert. Zur Anwendung verschiedener Scanstrategien wird ein Gebiet mit einer quadratischen Grundfläche von  $1.0\text{ mm} \times 1.0\text{ mm}$  und eine Höhe von  $0.2\text{ mm}$ , bei einer Gitterweite von  $5\text{ }\mu\text{m}$  verwendet. Dabei kommen bei der Untersuchung drei G-Codes, illustriert in Abbildung 4.6, zum Einsatz: *Simple-Hatch* (Scanstrategie 1, S1), *Checkerboard* (Scanstrategie 2, S2) und ein angepasstes *Checkerboard*, das eine *Quad-Island*-Strategie (Scanstrategie 3, S3) nachahmen soll. Die Erstellung aller G-Codes erfolgt mit der Software Netfabb. Die verwendeten Prozessparameter sind in Tabelle 4.2 zusammengefasst. Für alle Scanstrategien wird eine einheitliche Abkühlzeit von  $t_C = 0.03\text{ s}$  verwendet.

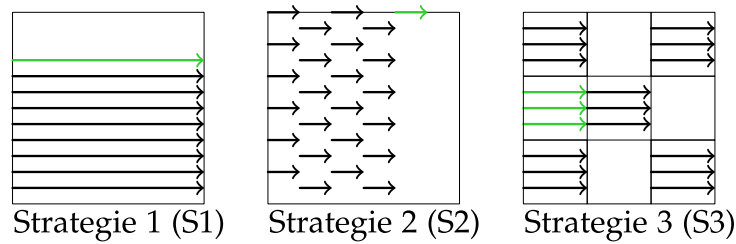


Abbildung 4.6: *Simple-Hatch*, *Checkerboard* und *Quad-Island* Scanstrategie für *Multitrack*-Experimente.

Tabelle 4.2: Prozessparameter des *Multitrack*-Experiments

| $P_{\text{Las}}$ | $r_{\text{Las}}$        | $v_{\text{Las}}$      | $\Delta h$              | $t_{\text{PB}}$         | $T_S$    | $\alpha$                   | $T_\infty$ |
|------------------|-------------------------|-----------------------|-------------------------|-------------------------|----------|----------------------------|------------|
| 100 W            | $26\text{ }\mu\text{m}$ | $1.0\text{ m s}^{-1}$ | $50\text{ }\mu\text{m}$ | $30\text{ }\mu\text{m}$ | 293.15 K | $40\text{ W/m}^2/\text{K}$ | 293.15 K   |

Zur Bewertung der Ergebnisse werden neben den Schmelzbadgrößen auch die mittleren und maximalen Bauteiltemperaturen sowie die Volumenanteile von Schmelze und Dampf analysiert und miteinander verglichen.

### 4.2.2 Einfluss der Scanstrategie

Im ersten Teil der Untersuchung geht es um den Einfluss der Scanstrategie auf das Temperaturfeld und die Schmelzbadgröße. Die Prozessparameter  $P_{\text{Las}} = 100\text{ W}$ ,  $\Delta h = 50\text{ }\mu\text{m}$  und  $v_{\text{Las}} = 1.0\text{ m s}^{-1}$  sind während der Studie konstant.

Abbildung 4.7 zeigt von oben nach unten, die Temperaturfelder zu den Zeitpunkten  $t = \{0.0002, 0.002, 0.005\}\text{ s}$ . Jede Spalte in Abbildung 4.7 stellt von links nach rechts die Scanstrategien S1, S2 und S3 dar. Abbildung 4.8 zeigt zur besseren Darstellung des Temperaturfeldes, den letzten Zeitschritt bei  $t = 0.038\text{ s}$ , mit einer geänderter Farbskala.

In allen Abbildungen ist die Pulverschicht ausgeblendet, so dass nur das aufgeschmolzene bzw. feste Material sichtbar ist.

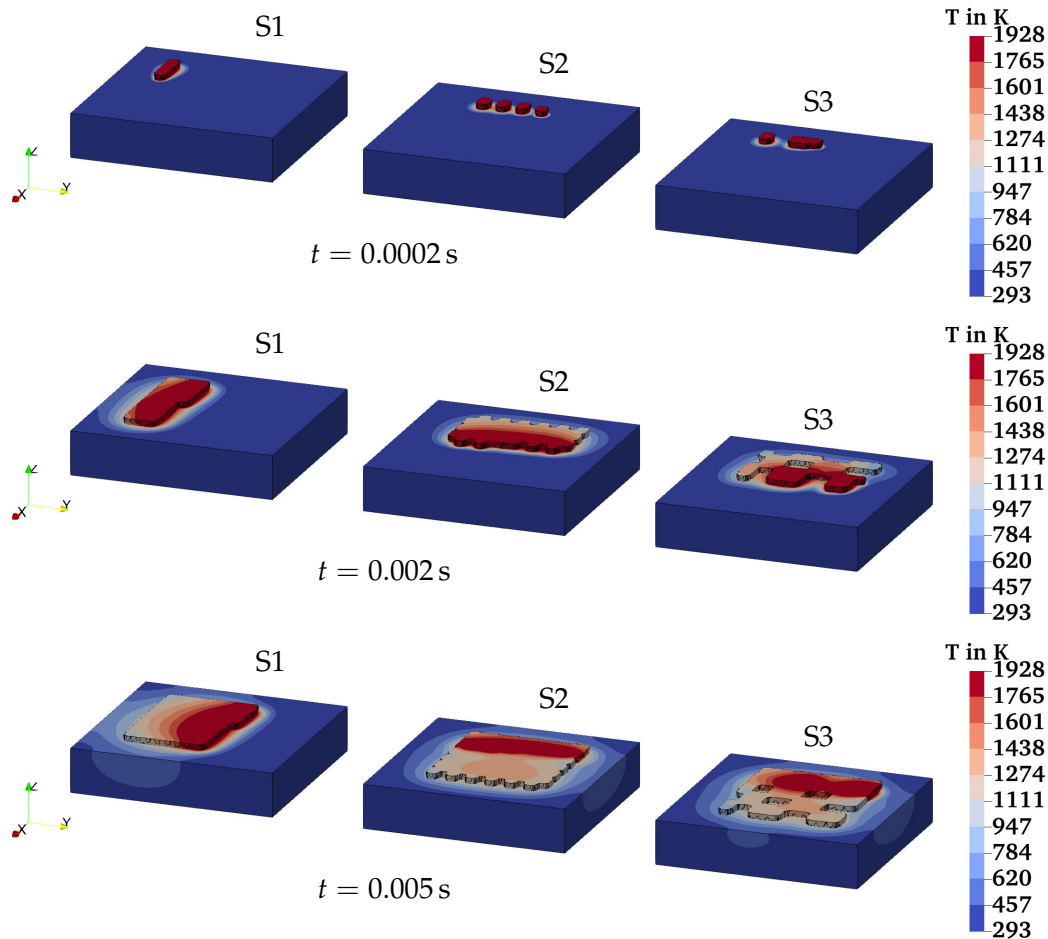


Abbildung 4.7: Temperaturfelder zu den Zeitpunkten  $t = \{0.0002, 0.002, 0.005\} \text{ s}$  für die verschiedenen Scanstrategien S1 – S3.

An den drei verschiedenen Spalten lässt sich die eingesetzte Scanstrategie gut beobachten. S1 ganz links zeigt, von oben nach unten, wie sich die Schicht streifenweise in der positiven  $y$ -Richtung aufbaut. Entsprechend weist der rechte Rand der Schicht immer die höchste Temperatur auf und ein Temperaturgradient mit abnehmenden Werten in negativer  $y$ -Richtung entsteht. Bei S2 handelt es sich um eine Erweiterung von S1, in dem die Linien in zwei Schritten in einem Schachbrett-Muster aufgebaut werden. Die Schicht entsteht hier effektiv schneller in der  $y$ - als in der  $x$ -Richtung. Das Schachbrett-Muster kann nur leicht erahnt werden, da die Schmelzbadgröße bereits die Zwischenräume des Musters einnimmt. Durch das Schachbrett-Muster wird eine gleichmäßigere Wärmever-

teilung erreicht, so dass der Temperaturgradient einen isotropen Charakter aufweist. Für S3 ist die versetzte Füllung der einzelnen Inseln gut erkennbar. Der heißeste Punkt im Material entsteht immer innerhalb einer der zu druckenden Inseln.

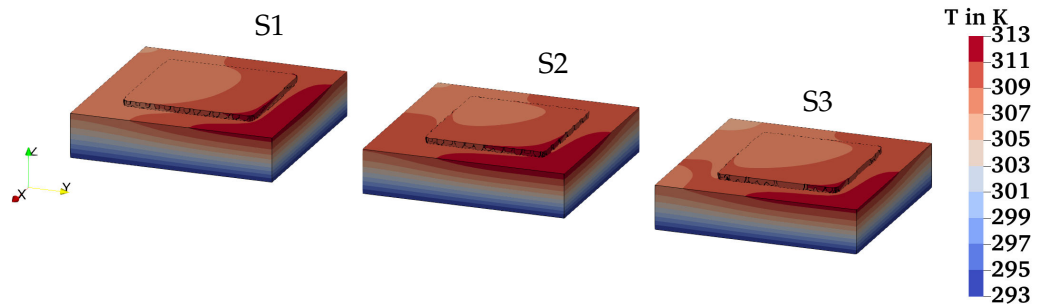


Abbildung 4.8: Finale Temperaturfelder nach der Abkühlzeit 0.03 s für die verschiedenen Scanstrategien S1 – S3.

Die Restwärme nach einer Abkühlzeit von 0.03 s im finalen Temperaturfeld, dargestellt in Abbildung 4.8, zeigt trotz unterschiedlicher Scanstrategien eine sehr ähnliche Temperaturverteilung. Alle Bereiche haben ihren höchsten Temperaturwert in der oberen Ecke, wobei in diesem Bereich nur noch eine Überhöhung von 10 K gegenüber der Raumtemperatur vorhanden ist.

Im Folgenden wird das Schmelzbad analysiert. Dazu zeigen die Plots in Abbildung 4.9 die Schmelzbad-Dimensionen. Die Ermittlung der Schmelzbadgröße erfolgt analog zu der in Abschnitt 4.1, (vgl. Abbildung 4.2), in  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Richtung über der normierten Zeit. Aufgrund der komplexen Bewegung des Lasers kann jedoch nicht mehr von einer konkreten Schmelzbadbreite gesprochen werden, weshalb die maximale Schmelzbadgröße pro Zeitschritt in  $x$ - und  $y$ -Richtung (entsprechend assoziiert mit  $L$  und  $W$  in Abbildung 4.2) in Abbildung 4.9 betrachtet werden.

Zunächst lässt sich die dominante Bewegungsrichtung der Scanstrategie aus dem Plot ableiten. So ist bei S1 und S2, jeweils verdreht, eine dominante Schmelzbadgröße in  $x$ - bzw.  $y$ -Richtung zu beobachten, wohingegen S3 keine dominante Schmelzbadgröße in einer der Richtungen aufweist und die größte Amplitudenvarianz besitzt. Für die Schmelzbadtiefe weist S2 den geringsten Wert auf, wohingegen S1 und S2 ähnliche Tiefen mit einem zeitlichen Versatz generieren.

Zum weiteren Vergleich der Scanstrategien wird die Temperatur im Bauteil über der normierten Zeit analysiert. Dazu zeigt Abbildung 4.10 oben links die Maximaltemperatur und oben rechts die mittlere Temperatur. Zur Identifizierung möglicher Poren zeigt der untere Plot das Verhältnis  $R = \frac{V_V}{V_M + V_V}$  des verdampften Volumens  $V_V$  zum Gesamtvolumen, das aus der Summe von verdampftem Volumen  $V_V$  und geschmolzenem Volumen  $V_M$  berechnet wird.

Bei allen Scanstrategien liegen die Maximaltemperaturen in einem ähnlichen Bereich

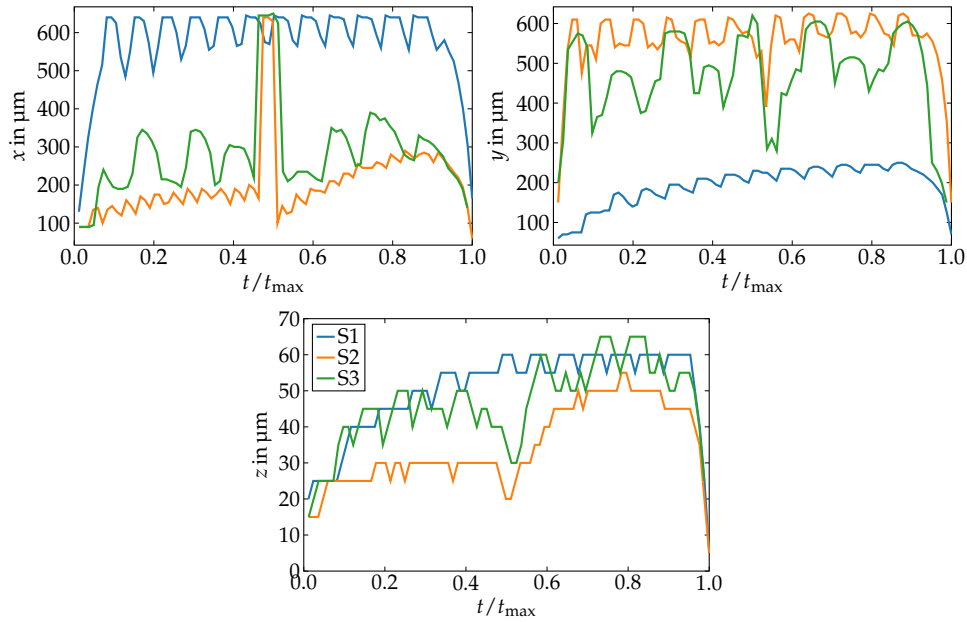


Abbildung 4.9: Schmelzbadgröße in  $x$  (links), in  $y$  (rechts) und in  $z$  (unten) über der normierten Zeit im Vergleich für die Scanstrategien S1 – S3.

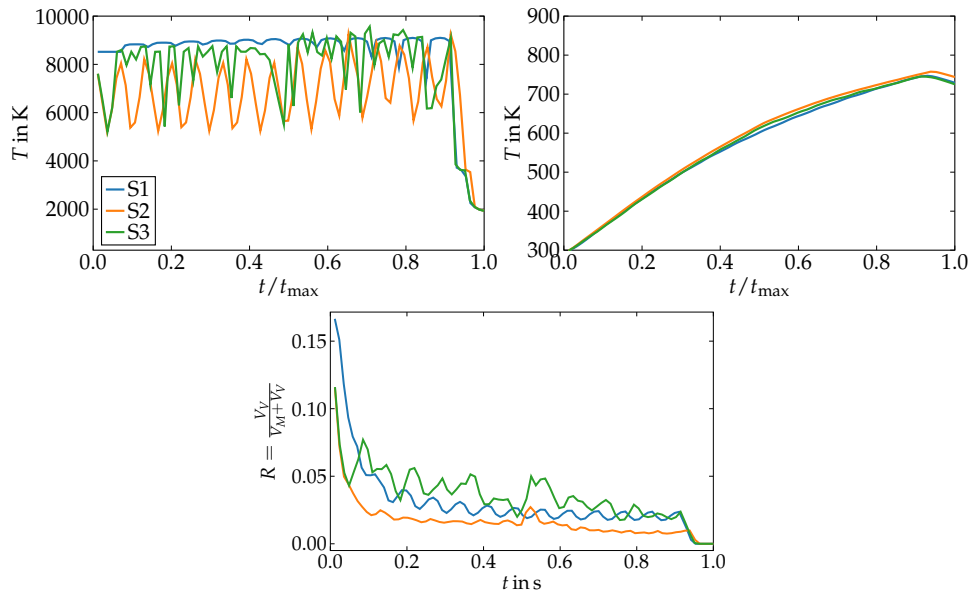


Abbildung 4.10: Maximale (links) und mittlere Temperatur (rechts) sowie das Verhältnis  $R = V_V / (V_M + V_V)$  über der normierten Zeit, im Vergleich für die Scanstrategien S1 – S3.

und deutlich über der Verdampfungstemperatur, wobei S1 die meisten Höchstwerte verzeichnet. Die geringsten Höchstwerte zeigt sich bei der Scanstrategie S2, wobei S3 die stärkste Varianz und den maximalen Höchstwert aufweist. Die mittlere Temperatur, im Plot oben rechts, weist für alle Scanstrategien einen ähnlichen Wert auf. Beim Verhältnis  $R$ , im unteren Plot, zeigt sich, dass S1 durch die relativ hohen Werte zu Beginn das höchste Risiko für Poren aufweist. Mit der Zeit verringert sich dieser Effekt, und S3 erreicht die höchsten Werte. S2 hingegen weist durchgehend die niedrigsten Verhältnisse  $R$  auf. Da das Modell die Strömungsdynamik im Schmelzbad nicht abbildet, sondern nur die Temperaturverteilung, kann diese Auswertung nur als grobe Orientierung dienen. Die Untersuchung zeigt jedoch bereits Unterschiede in Abhängigkeit von der Scanstrategie und verdeutlicht damit, dass die Wahl der Scanstrategie entscheidend ist, um die Wärme schnell an das umgebende Material abzugeben und somit das Risiko eines Wärmestaus und damit verbundener Porenbildung zu vermeiden.

### 4.2.3 Einfluss der Laserleistung bei gleicher VED

In diesem Teil der Untersuchung wird das Modell mit der Scanstrategie S1 verwendet, um den Einfluss von Laserleistung und Scangeschwindigkeit bei gleicher Volumenenergie-dichte (VED) auf das Schmelzbad und die Temperatur zu analysieren. Die VED wird durch die Beziehung

$$\text{VED} = \frac{P_{\text{Las}}}{v_{\text{Las}} \Delta h t_{\text{PB}}} \quad (4.1)$$

aus den Prozessparametern berechnet [123], womit sich bei den hier verwendeten Parametern eine VED von  $66.67 \text{ J mm}^{-3}$  ergibt. Für die Untersuchung werden die Laserleistung und Scangeschwindigkeit mit  $P_{\text{Las}} = \{100, 150, 200\} \text{ W}$  und  $v_{\text{Las}} = \{1.0, 1.5, 2.0\} \text{ m s}^{-1}$  verwendet, so dass jede Simulation die gleiche VED aufweist. Bei gleicher Abkühlzeit können dadurch Bauteile schneller erzeugt werden. Abbildung 4.11 zeigt die Schmelzbadgröße für die  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Richtung über der Zeit. Bei der verwendeten Scanstrategie können die  $x$ -Richtung als Länge und die  $y$ -Richtung als Breite des Schmelzbades betrachtet werden. Für die  $x$ -Richtung erreichen alle den gleichen Maximalwert, wobei sich mit zunehmender Leistung und Geschwindigkeit eine kürzere Lebensdauer des Schmelzbades beobachten lässt. Für die  $y$ - und die  $z$ -Richtung ist eine Vergrößerung des Schmelzbades mit steigender Leistung und Geschwindigkeit zu erkennen.

In Abbildung 4.12, wird die Maximaltemperatur, sowie die mittlere Temperatur und das Verhältnis  $R$  über der normierten Zeit dargestellt. Es ist ein deutlicher Anstieg der Maximaltemperatur bei höheren Laserleistungen und Geschwindigkeiten zu erkennen, wobei der größte Anstieg von  $P_{\text{Las}} = 100 \text{ W}$  mit  $v_{\text{Las}} = 1.0 \text{ m s}^{-1}$  auf  $P_{\text{Las}} = 150 \text{ W}$  mit  $v_{\text{Las}} = 1.5 \text{ m s}^{-1}$  zu beobachten ist. Auch bei der mittleren Bauteiltemperatur zeigt sich ein ähnlicher Trend, wobei die Temperatur bei  $P_{\text{Las}} = 200 \text{ W}$  mit  $v_{\text{Las}} = 2.0 \text{ m s}^{-1}$  trotz gleicher VED um  $100 \text{ K}$  höher ist als bei  $P_{\text{Las}} = 100 \text{ W}$  mit  $v_{\text{Las}} = 1.0 \text{ m s}^{-1}$ . Für das Verhältnis  $R$  ist ein steigender Anteil mit höherer Leistung und Scangeschwindigkeit zu

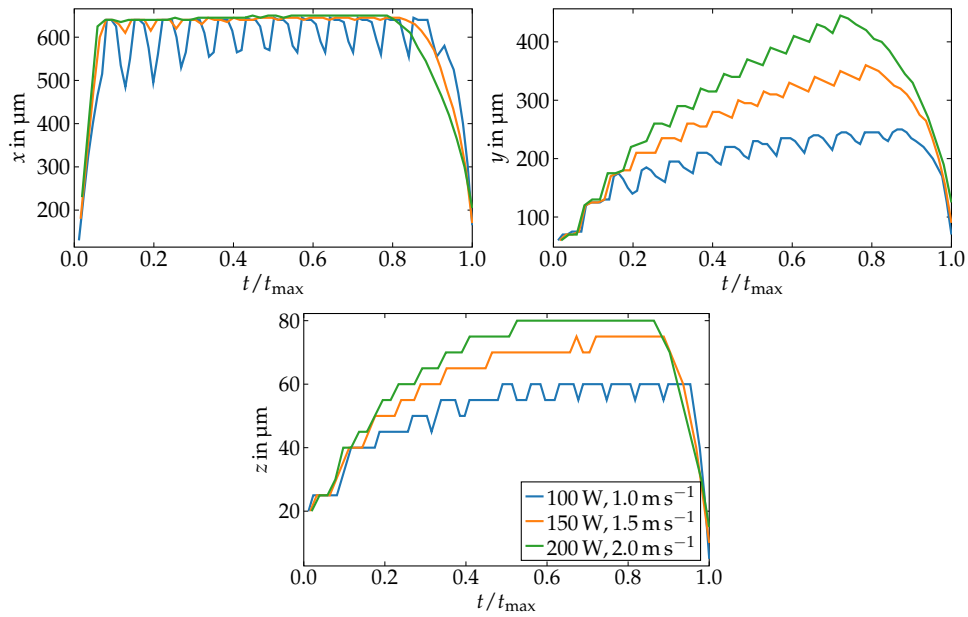


Abbildung 4.11: Schmelzbadgröße in  $x$  (links), in  $y$  (rechts) und in  $z$  (unten) über der normierten Zeit, im Vergleich für die drei Prozessparameter-Kombinationen.

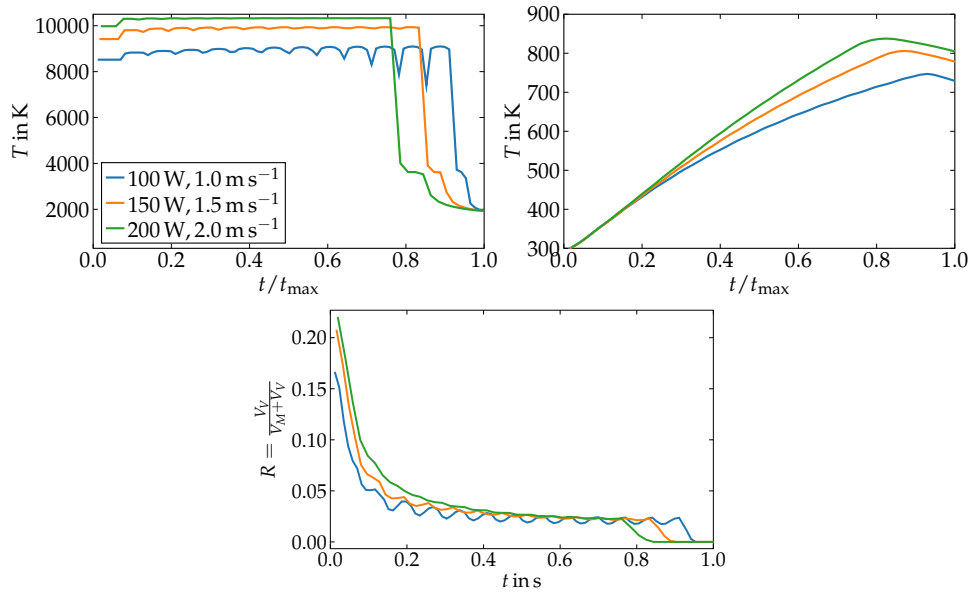


Abbildung 4.12: Maximale (links) und mittlere Temperatur (rechts) über der normierten Zeit, im Vergleich für die drei Prozessparameter-Kombinationen.

beobachten. Dies verdeutlicht, dass eine konstante Volumenenergiedichte nur in einem begrenzten Rahmen zur Gesamtbewertung des LPBF Prozesses herangezogen werden kann.

Die *Multitrack* Untersuchung zeigt die signifikante Veränderung der Prozessbedingungen, die bereits durch Anpassungen der Scanstrategie und der Volumenenergiedichte hervorgerufen werden kann. Insbesondere übt die ausgewählte Scanstrategie einen wesentlichen Einfluss auf das thermische Verhalten aus, da sie maßgeblich die Wärmeabfuhr im Material steuert. Die Volumenenergiedichte ist dagegen nur bedingt aussagekräftig, da selbst bei konstant gehaltenem Wert deutliche Unterschiede im Temperaturbereich und in den Schmelzbädern zu beobachten sind.

### 4.3 *Singletrack* Untersuchung mit der PBE-Methode

Alle bisherigen Untersuchungen basierten auf Materialwerten, die über das gesamte Pulverbett als homogen angenommen wurden. Auch wenn homogenisierte Modelle eine effiziente Berechnungsmethode für mesoskalige LPBF Prozesssimulationen bieten, ist bislang nicht vollständig bekannt, wie sich diese Vereinfachung auf das Temperaturfeld auswirkt. Wie in [9] gezeigt, unterliegt die Porosität des Pulverbetts Schwankungen, die sich auf die Eigenschaften des Materials auswirken.

Um die Schwankungen des Pulverbetts in der mesoskaligen LPBF Prozesssimulation zu berücksichtigen wird das *Recoating* zunächst mittels DEM simuliert. Im Nachgang wird dann dieses Pulverbett in kleine quaderförmige Bereiche, Pulverbettelemente (PBE), aufgeteilt, für die dann eine lokale Porosität berechnet wird. Basierend auf dieser Porosität werden dann die lokale Absorption und Wärmeleitung berechnet und in einem Modell zur Simulation des *Singletrack*-Experiments genutzt.

Das Ziel dieses Kapitels ist es, die Auswirkungen von Größenschwankungen im Pulverbett auf das Schmelzbad zu analysieren, wobei die Ergebnisse aus Abschnitt 4.1 zum Vergleich herangezogen werden.

#### 4.3.1 Simulation des *Recoatings*

Das *Recoating* wird mit dem *Open-Source*-Programm Liggghts [124] simuliert. Das Hauptziel besteht darin, realitätsnahe, mehrschichtige Pulverbette für den LPBF Prozess zu erzeugen, um in der darauffolgenden Simulation repräsentative Schwankungen des Pulverbetts zu berücksichtigen. Die Simulation des *Recoatings*, dargestellt in Abbildung 4.13, basiert auf den Parametern aus der Arbeit [125] und ist für die Legierung Ti6Al4V angepasst. Die DEM-Simulationsparameter sind in Tabelle 4.3 aufgeführt.

Die Partikelgrößenverteilung der DEM-Simulation basiert auf dem kommerziellen Pulver von [33] und wird in Abbildung 4.14 dargestellt. Aus Platzgründen sind weitere Erläuterungen zur DEM-Simulation des *Recoating* im Anhang A.2 dargestellt und einsehbar.

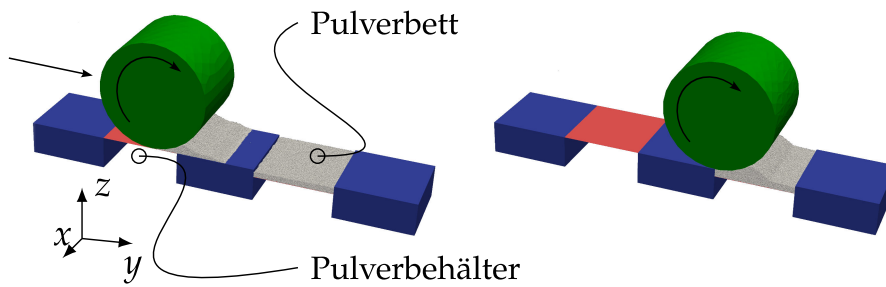


Abbildung 4.13: Aufbau des DEM-Modells zur Simulation des *Recoating*; übersetzt von [10], CC BY 4.0.

Tabelle 4.3: DEM-Simulationsparameter; übersetzt von [10], CC BY 4.0.

| Parameter                                         | Werte                    |
|---------------------------------------------------|--------------------------|
| Partikeldichte, $\rho$                            | 4470 kg/m <sup>3</sup>   |
| Elastizitätsmodul, $E$                            | 1.1 GPa                  |
| Querkontraktionszahl, $\nu$                       | 0.34                     |
| Stoßziffer, $e$                                   | 0.5                      |
| Haftreibungskoeffizient, $\mu_r$                  | 0.4                      |
| Rollreibungskoeffizient, $\mu_{rolling}$          | 0.1                      |
| Koeffizient der viskosen Rolldämpfung, $\mu_{rd}$ | 0.001                    |
| Durchmesser der Rolle [125]                       | 7.0 mm                   |
| Translationsgeschwindigkeit der Rolle [125]       | 30.0 mm s <sup>-1</sup>  |
| Rotationsgeschwindigkeit der Rolle [125]          | 0.74 s <sup>-1</sup>     |
| Dimension des Pulverbetts                         | 5.0 mm × 5.0 mm × 0.5 mm |

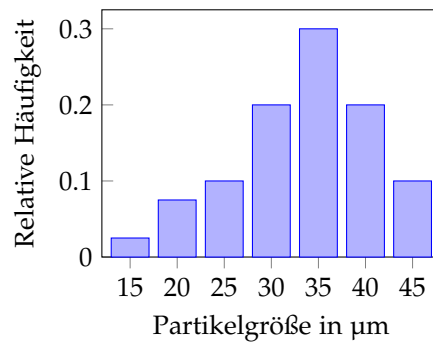


Abbildung 4.14: Partikelgrößenverteilung in der DEM-Simulation; übersetzt von [10], CC BY 4.0.

Zur Validierung der DEM-Simulationen werden die experimentell gemessenen Profilhohlraumvolumina aus [13] in mittlere Höhen umgerechnet. Diese werden dann mit der mittleren Höhe aus der DEM-Simulation verglichen und in Abbildung 4.15 dargestellt. Dabei entspricht die durchgezogene Linie der mittleren und die gestrichelte Linie der Standardabweichung der Höhe des simulierten Pulverbetts. Es ist deutlich zu erkennen, dass die mittlere Profilhöhe des simulierten Pulverbettes quantitativ ähnlich den Profilhöhen der als hochwertig eingestuften Pulverbetten der Typen 1 und 2 ist und die Ergebnisse qualitativ übereinstimmen. Eine signifikante Abweichung zeigt sich jedoch bei Typ 3, der jedoch als ungeeignet für den LPBF Prozess eingestuft wird [13] und diese Messungen daher nicht als repräsentative Pulverbett gelten. Die Ergebnisse der DEM-Simulation können daher als repräsentative Pulverbette zur Bestimmung der lokalen Materialeigenschaften verwendet werden.

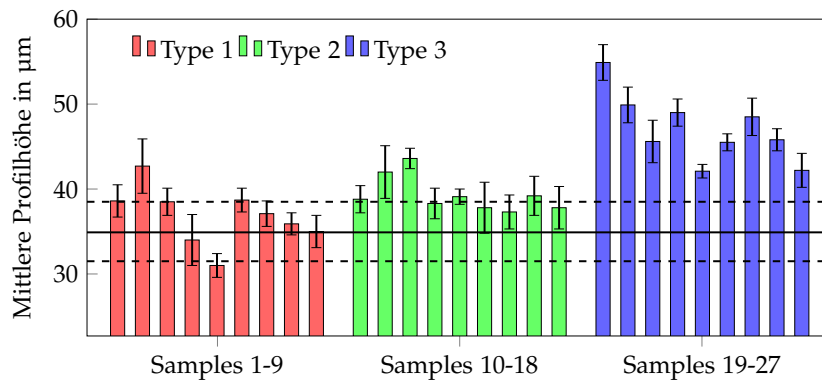


Abbildung 4.15: Mittlere Höhen aus [13] und aus der DEM-Simulation; mittlere Höhe durchgezogene, Standardabweichungen gestrichelte Linie; übersetzt von [10], CC BY 4.0.

Alle nachfolgenden Untersuchungen beziehen sich immer auf das gleiche Pulverbett aus der durchgeführten DEM-Simulation.

### 4.3.2 Lokale Porosität und abgeleitete Größen

Um die lokalen Eigenschaften des Pulverbetts zu erfassen, wird das Pulverbett in Pulverbettelemente (PBE) unterteilt. Diese Elemente sind quaderförmige Bereiche, für die Porosität, optische Dicke und Emissivität berechnet werden. Die Größe dieser Elemente orientiert sich dabei an der Partikelgrößenverteilung und der Schmelzbadgröße. Die Unterteilung in PBE ermöglicht eine Variation der Materialeigenschaft, die aus dem Pulverbett resultiert, ohne das Pulverbett direkt in der LPBF Prozesssimulation aufzulösen. Um bei der Auswertung Randeffekte zu vermeiden, wird ein Bereich von  $678 \mu\text{m} \times 678 \mu\text{m}$  aus dem mittleren Pulverbettbereich zufällig ausgewählt. Die Analyse

der PBE in Tiefenrichtung erfolgt ab einer mittleren Höhe von 450  $\mu\text{m}$ . Zur Ermittlung der lokalen Eigenschaften werden dann  $x_{\text{PBE}} = y_{\text{PBE}} = \{250 \mu\text{m}, 125 \mu\text{m}, 80 \mu\text{m}\}$  als planare und  $z_{\text{PBE}} = 50 \mu\text{m}$  als vertikale PBE-Größe verwendet. Die Porosität  $\psi$  wird aus der Packungsdichte  $\phi$  berechnet, die durch Kugeln mit dem Radius  $r_i$  in einem bestimmten Volumen entsteht

$$\phi = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{4}{3} \pi r_i^3}{V}, \quad (4.2)$$

$$\psi = 1 - \phi. \quad (4.3)$$

Um die Packungsdichte für ein beliebiges Volumen möglichst genau zu berechnen, wird eine voxel-basierte Methode verwendet. Bei dieser Methode wird ein Gitter, wie in Abbildung 4.16 dargestellt, über das Volumen gelegt. Jedes Voxel, das von einem Partikel bedeckt ist, wird als '1' markiert und entsprechend gezählt. Die Packungsdichte kann dann über den Zusammenhang

$$\phi = \frac{\text{Belegte Voxel}}{\text{Gesamtanzahl der Voxel}} \quad (4.4)$$

berechnet werden. Diese Methode ermöglicht eine präzise Bestimmung der Packungsdichte und damit der Porosität des betrachteten PBE-Volumens.

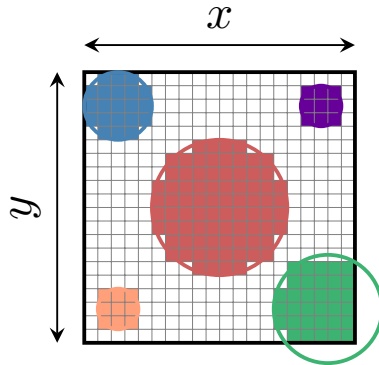


Abbildung 4.16: Illustration der voxel-basierten Methode zur Bestimmung der Packungsdichte  $\phi$ ; [10], CC BY 4.0.

Abbildung 4.17 zeigt die Dichteverteilungen des mittleren Durchmessers der Pulverpartikel  $D_m$  und der Porosität des Pulverbetts  $\psi$  für verschiedene PBE-Größen. Zunächst wird die tatsächliche Verteilung mittels einer Kernel-Dichteschätzung (KDE) ermittelt. Anschließend werden die Normalverteilungen mit entsprechenden Parameter durch *Fitting* an die Daten bestimmt.

Sowohl für den mittleren Durchmesser der Pulverpartikel  $D_m$  als auch für die Porosität des Pulverbetts  $\psi$  zeigen sich normalverteilte Dichteverläufe. Diese weisen für alle PBE-

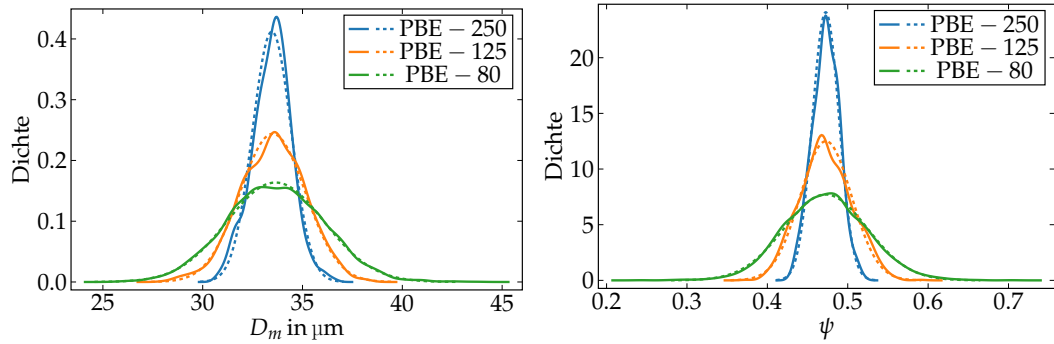


Abbildung 4.17: Dichteverteilungen des mittleren Durchmessers der Pulverpartikel  $D_m$  und Porosität des Pulverbetts  $\psi$  für verschiedene PBE-Größen.

Größen einen vergleichbaren Mittelwert auf, wobei die Variabilität mit abnehmender PBE-Größe zunimmt, was sich in einer breiteren Verteilung widerspiegelt. Die angepassten Normalverteilungen werden als Basis für die Generierung (*Sampling*) der nachfolgenden *Heatmaps* in Abbildung 4.18 und Abbildung 4.19 verwendet.

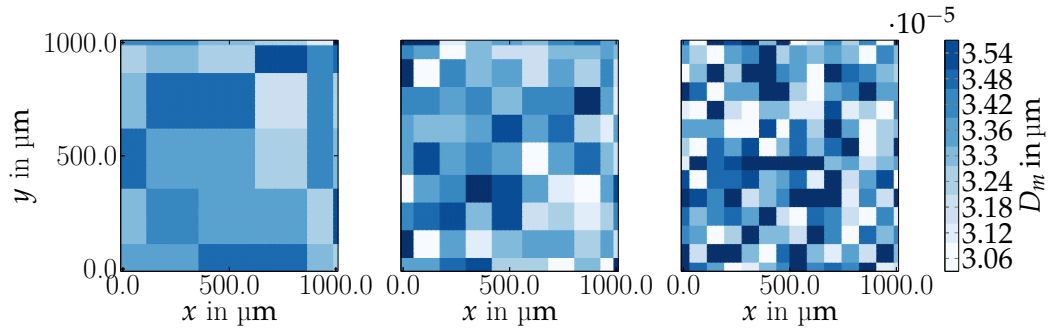


Abbildung 4.18: *Heatmap* des mittleren Durchmessers der Pulverpartikel  $D_m$  für verschiedene PBE-Größen.

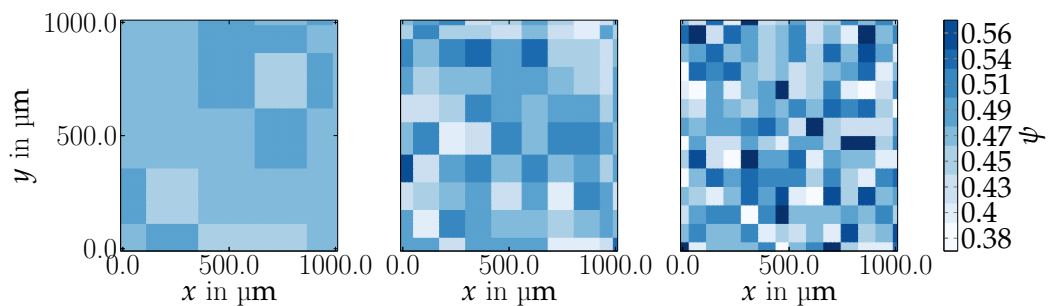


Abbildung 4.19: *Heatmap* der Porosität des Pulverbetts  $\psi$  für verschiedene PBE-Größen.

Wie bereits zuvor beobachtet, nimmt die Variabilität und das Auftreten von rauschar-tigen Mustern mit abnehmender PBE-Größe zu. Bei größeren PBE hingegen zeigen sich gleichmäßigere Bilder, was auf eine geringere Variabilität hinweist. Die Berücksichtigung der lokalen Porosität führt zu einer lokalen Wärmeleitfähigkeit und, durch die Wahl der Wärmequelle nach [57], zu einer lokalen Absorption der Laserenergie.

### 4.3.3 Einfluss der PBE beim *Singletrack*-Experiment

Um den Einfluss der PBE-Methode auf das Schmelzbad zu untersuchen, werden die gleichen Simulationen wie bei der Untersuchung des *Singletrack*-Experiments aus Abschnitt 4.1 durchgeführt und mit diesen Ergebnissen verglichen. Testsimulationen des *Singletrack*-Experiments mit PBE ergaben, dass sich die größeren PBE aufgrund der beschränkten Größe des Simulationsgebiets nahezu wie homogene Bereiche verhielten. Deshalb wird in dieser Analyse ausschließlich die PBE-Größe von  $80\text{ }\mu\text{m} \times 80\text{ }\mu\text{m}$  verwendet. Die Temperaturverteilung und die Phasenzustände des Schmelzbades für die Laserleistungen 20 W bis 80 W sind in Abbildung 4.20 dargestellt. Die Ergebnisse sind von links nach rechts mit steigender Leistung angeordnet.

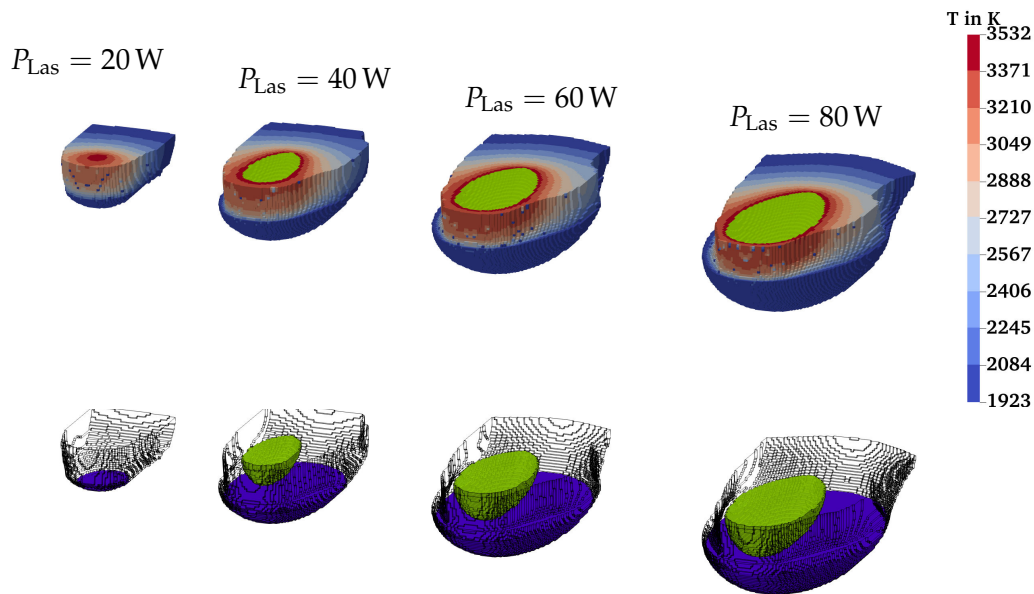


Abbildung 4.20: Schmelzbäder mit Temperaturverteilung und Phasenanteile für 20 W bis 80 W mit PBE-Größe  $80\text{ }\mu\text{m} \times 80\text{ }\mu\text{m}$ .

Auch wenn die Ergebnisse den kometenähnlichen Schweif wie im ersten *Singletrack*-Experiment beibehalten, sind deutliche Unterschiede zu erkennen. Neben dem kleineren

Schmelzbad sind auch kleinere grüne Bereiche zu beobachten, d. h. weniger kritische Temperaturen oberhalb der Verdampfungstemperatur. Des Weiteren ist für die höhere Laserleistung eine deutlich unsymmetrischere Geometrie sichtbar.

Um die Ergebnisse quantitativ zu untersuchen, wird die Breite und Tiefe des Schmelzbades über der Zeit in Abbildung 4.21 dargestellt. Linien derselben Farbe repräsentieren identische Laserleistungen. Dabei kennzeichnet die durchgezogene Linie die Ergebnisse aus Abschnitt 4.1, die gestrichelte Linie die Ergebnisse mit der PBE-Methode.

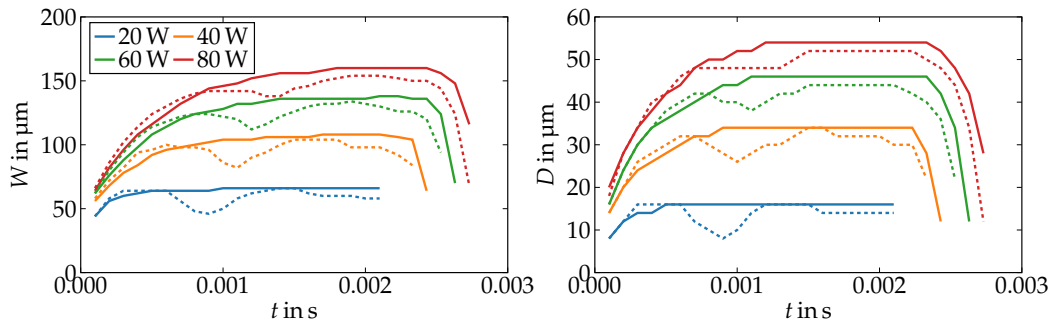


Abbildung 4.21: Schmelzbadbreite  $W$  (links) und Schmelzbadtiefe  $D$  (rechts) über der Zeit aus *Singletrack*-Experimenten mit und ohne der PBE-Methode, für Laserleistungen  $P_{\text{Las}} = \{20, 40, 60, 80\}$  W.

Bei allen Ergebnissen, die mittels der PBE-Methode erzielt werden, lassen sich durchweg kleinere und variabelere Verläufe über der Zeit feststellen. Dabei besitzen alle Kurven einen Knick um  $t \approx 0.0008$  s, was auf eine lokal veränderte Wärmeleitfähigkeit und Absorption der Laserenergie hindeutet. Generell zeigen alle Kurven, auch bei unterschiedlichen Laserleistungen, eine ähnliche Variabilität, daher resultiert der wesentliche Unterschied zwischen der PBE- und der homogenisierten Lösung vor allem aus der lokal veränderten Wärmeleitfähigkeit.

Abbildung 4.22 zeigt die maximale Schmelzbadgröße der *Singletrack*-Experimente mit bzw. ohne der PBE-Methode sowie den experimentellen Werten von [58].

Eine erste Betrachtung der Ergebnisse zeigt, dass die Simulation mit der PBE-Methode keine direkte Verbesserung gegenüber den Experimenten bietet. Insgesamt sind mit der PBE-Methode tendenziell geringfügig kleinere Schmelzbadbreiten und -tiefen zu beobachten.

Da bereits mit homogenisierten Werten sehr gute Ergebnisse erzielt werden, ist der erhöhte Aufwand der PBE-Methode für *Singletrack*-Experimente nicht verhältnismäßig. Der Ansatz bestätigt jedoch, dass die Verwendung homogenisierter Werte eine valide Simulationsannahme für mesoskalige LPBF-Prozessmodelle ist. Bei *Multitrack*-Experimenten könnte jedoch das asymmetrische Schmelzbad die Verbindung benachbarter Laserpfade beeinflussen, was mit der PBE-Methode in Zukunft untersucht werden kann.

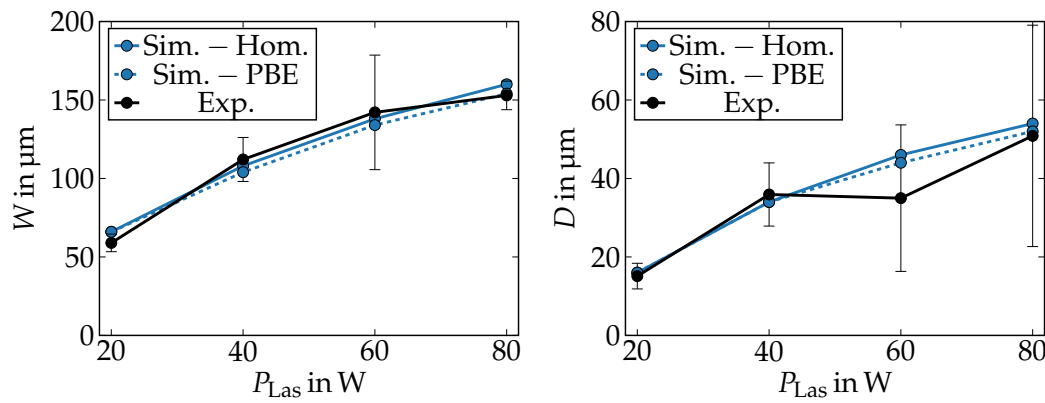


Abbildung 4.22: Experimentelle aus [58] und simulative Ergebnisse der Schmelzbadbreite  $W$  (links) und Schmelzbadtiefe  $D$  (rechts) aus *Singletrack*-Experimente bei unterschiedlichen Laserleistungen.



# 5 | Modellierung der Makroskala

## Inhalt

|     |                                                                 |    |
|-----|-----------------------------------------------------------------|----|
| 5.1 | Untersuchung zu Eigenspannungen bei <i>Multitrack</i> . . . . . | 85 |
| 5.2 | Untersuchung zu Eigenspannungen an AM-Brücke . . . . .          | 91 |

Dieses Kapitel befasst sich mit der Modellierung und der Simulation des LPBF Prozesses auf der Makroskala. Zunächst wird über das in Abschnitt 4.2 verwendete *Multitrack*-Experiment der Einfluss einer schichtweisen Wärmequelle, *Layerheating*-Methode, auf die Eigenspannungen in einer Schicht untersucht. Anschließend wird die AM-Brücke simuliert, wobei ebenfalls der Einfluss der Wärmequelle und der Relaxationstemperatur auf die Eigenspannungen im Bauteil analysiert wird.

In den hier vorgestellten thermo-mechanischen Modellen wird das plastische Materialverhalten durch ideale Plastizität ( $E_H = 0$ ) abgebildet. Als Konvergenzkriterium wird ein maximal zulässiges Residuum von  $\|\dot{u}\|_{R,\max} \leq 1 \times 10^{-7}$  festgelegt (vgl. Gleichung (3.122)). Die Berechnungen enden automatisch nach höchstens 10000 Iterationen, als Dämpfungswert wird  $K = 0.1$  verwendet. Sowohl die Abbruchkriterien als auch der Dämpfungswert wurden heuristisch auf der Grundlage früherer Testsimulationen festgelegt und gelten für alle folgenden Modelle.

## 5.1 Untersuchung zu Eigenspannungen bei *Multitrack*

Auch wenn bei der *Multitrack* Untersuchung aus Abschnitt 4.2 nur eine Schicht untersucht wurde, bietet diese Studie einen idealen Ausgangspunkt für die Untersuchung der Eigenspannungsentwicklung beim LPBF Prozess. Durch die Analyse einer einzelnen Schicht werden die komplexen Wechselwirkungen einer mehrschichtigen Ausführung vermieden. Auf diese Weise können die Eigenspannungen des Modells mit aufgelöster Wärmequelle direkt mit denen des mit der *Layerheating*-Methode berechneten Modells verglichen werden. So werden die Auswirkungen der vereinfachten Modellierung deutlich sichtbar.

Dieses Kapitel zielt darauf ab, ein Verständnis der LPBF-spezifischen Eigenspannungen zu entwickeln und den Einfluss der *Layerheating*-Methode auf diese zu analysieren. Dazu wird das thermo-mechanische Modell sowohl mit der aufgelösten Wärmequelle

unter Anwendung der Scanstrategie S1 als auch mit der *Layerheating*-Methode nach Zhang et al. [88] und Gouge et al. [89] simuliert und verglichen. Diese Untersuchung ist besonders relevant, da für die Simulation auf der Makroskala keine Scanstrategie mehr berücksichtigt wird.

### 5.1.1 Modellaufbau

Das in Abbildung 5.1 visualisierte Modell zur Untersuchung der Eigenspannungen im *Multitrack*-Experiment basiert im Wesentlichen auf dem Modell zur Temperaturberechnung aus Abschnitt 4.2, wird jedoch um das mechanische Modell erweitert. Alle seitlichen Ränder und die Oberseite des Modells sind spannungsfrei ( $\sigma \mathbf{n} = \mathbf{0}$ ) und die Unterseite des Substrats ist fest eingespannt ( $\mathbf{u}(x, y, z = 0) = \mathbf{0}$ ). Der generelle Aufbau des thermischen Modells bleibt gegenüber der Vorgängerversion unverändert: Alle seitlichen Ränder sind thermisch isoliert und der Wärmeaustausch durch Konvektion und Strahlung findet ausschließlich an der Oberseite statt, während die Unterseite des Substrats auf konstanter Temperatur gehalten wird. Als Abkühlzeit wird für alle Modelle  $t_C = 0.03$  s angenommen. Für Modelle mit der *Layerheating*-Methode wird der Absorptionsgrad mit  $\eta = 0.8$  verwendet. Alle Prozessparameter sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

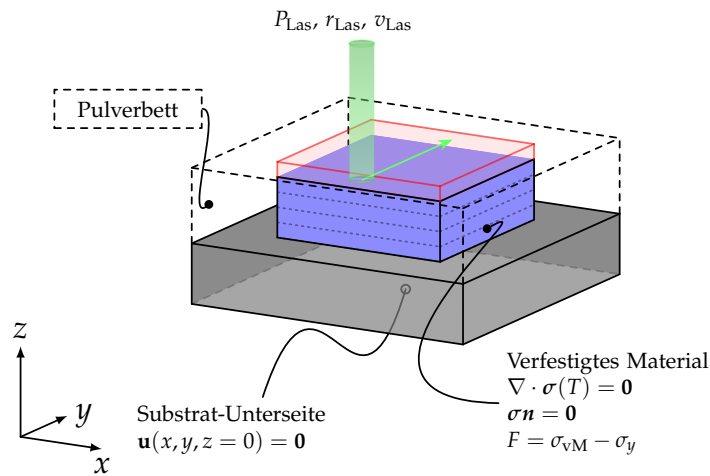


Abbildung 5.1: Modellaufbau des *Multitrack*-Experiments.

Tabelle 5.1: Prozessparameter des *Multitrack*-Experiments

| $\eta$ | $P_{\text{Las}}$ | $r_{\text{Las}}$ | $v_{\text{Las}}$      | $\Delta h$       | $t_{\text{PB}}$  | $T_S$    | $\alpha$               | $T_\infty$ |
|--------|------------------|------------------|-----------------------|------------------|------------------|----------|------------------------|------------|
| 0.8    | 100 W            | 26 $\mu\text{m}$ | 1.0 m s <sup>-1</sup> | 50 $\mu\text{m}$ | 30 $\mu\text{m}$ | 293.15 K | 40 W/m <sup>2</sup> /K | 293.15 K   |

### 5.1.2 Einfluss der *Layerheating*-Methode

Die folgende Abbildung 5.2 zeigt das Temperaturfeld und das zugehörige Spannungsfeld  $\sigma_{yy}$  (in der Abbildung mit  $S_{yy}$  bezeichnet) für die verschiedenen Zeitschritte und die verschiedenen Modelle, welche mit der entsprechenden Wärmequelle simuliert wurden. Zur besseren Sichtbarkeit wird in jeder Abbildung eine angepasste Temperaturskala verwendet.

Abbildung 5.2 zeigt bei 0.001 s und 0.005 s Unterschiede in den Temperaturfeldern der beiden *Layerheating*-Methoden. Der Ansatz von Gouge et al. führt zu höheren Temperaturen, da die Temperaturaufbringung direkt in einem Schritt erfolgt, bevor die Abkühlung und Wärmeleitung ins Substrat beginnt. Im Gegensatz dazu berücksichtigt der Ansatz von Zhang et al. die Wärmeleitung bereits in der Aufheizphase, was zu einem Wärmeausgleich im Material führt. Aufgrund der Temperaturen über dem Schmelzpunkt treten in den Schichten keine Spannungen auf, während im Substrat durch Temperaturunterschiede Spannungen entstehen.

Zu den Zeitpunkten 0.010 s und 0.020 s in Abbildung 5.3 liegen die Temperaturen deutlich unter dem Schmelzpunkt. Dabei zeigen beide *Layerheating*-Methoden ein annähernd symmetrisches Temperaturfeld in  $x, y$ -Richtung; leichte Asymmetrien resultieren aus numerischen Ungenauigkeiten bei der G-Code-Diskretisierung durch den BRESENHAM-Algorithmus. Im Gegensatz dazu zeigt die aufgelöste Simulation aufgrund der Scanstrategie einen ausgeprägten Temperaturgradienten. Der Temperaturgradient in  $z$ -Richtung verhält sich in allen Simulationen jedoch ähnlich. Bezüglich des Spannungsfeldes  $\sigma_{yy}$  zeigen die Schichtzentren Zugspannungen, während an den Rändern und im oberen Substrat Druckspannungen vorherrschen. Diese Verteilung ist charakteristisch für die thermisch induzierten Spannungen im LPBF Prozess (vgl. Abschnitt 2.2).

Die beiden Modelle mit der *Layerheating*-Methode zeigen aufgrund des symmetrischen Temperaturfeldes ein kreisförmiges Spannungsmuster. Im Gegensatz dazu zeigt die aufgelöste Simulation ein weniger symmetrisches, streifenförmiges Spannungsmuster. Die Größenordnung der Spannungen sind bei allen Simulationen vergleichbar. Eine besondere Beobachtung bei den Modellen mit der *Layerheating*-Methode ist die Bildung von kreisförmigen Mustern, die auf das Phänomen des Beulen hinweisen. Dieses Phänomen tritt vor allem bei Dünnschicht-Substrat-Systemen auf und wird durch die ungleiche thermische Ausdehnung sowie erhebliche Steifigkeitsunterschiede zwischen der Schicht und dem Substrat verursacht [126, 127]. Der betroffene Bereich kann mit  $R_B \approx 20 t_{PB}$  abgeschätzt werden [126], was der Größe des äußersten Rings in Abbildung 5.3 entspricht (vgl. Abschnitt A.3).

Abbildung 5.4 zeigt die Ergebnisse der Modelle zum Zeitpunkt 0.037 s. Dabei weist die Simulation mit der *Layerheating*-Methode nach Gouge et al. höhere Temperaturwerte im Vergleich zur Simulation nach Zhang et al. Die höchsten Temperaturwerte erreicht jedoch das Modell mit der aufgelösten Wärmequelle. Der Temperaturverlauf in  $x, y$ -Richtung ist annähernd homogen, während die  $z$ -Richtung einen deutlichen Gradienten zeigt, der in allen drei Simulationen ähnlich verläuft.

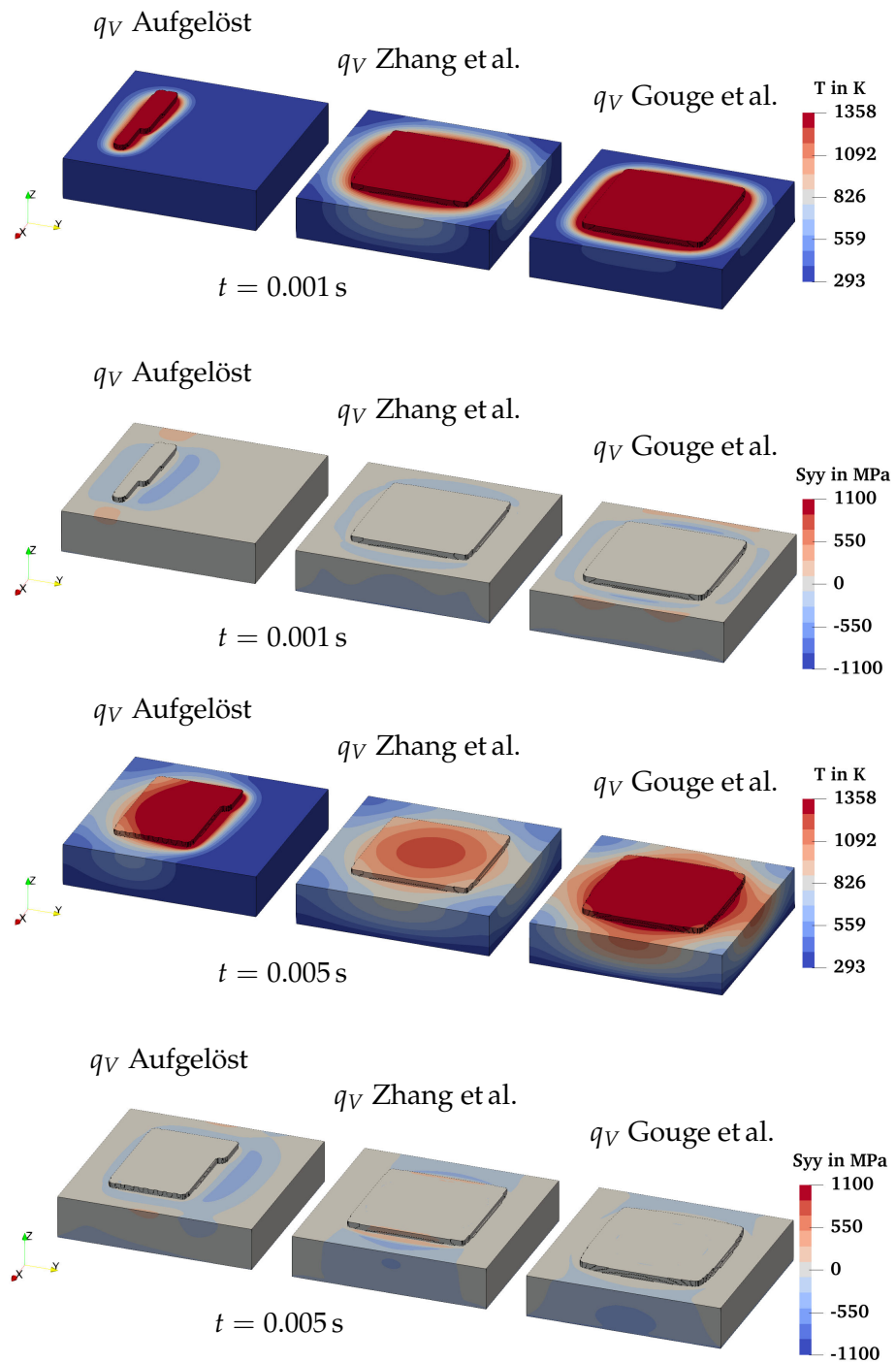


Abbildung 5.2: Temperatur- und  $\sigma_{yy}$ -Spannungsfelder bei 0.001 s und 0.005 s.

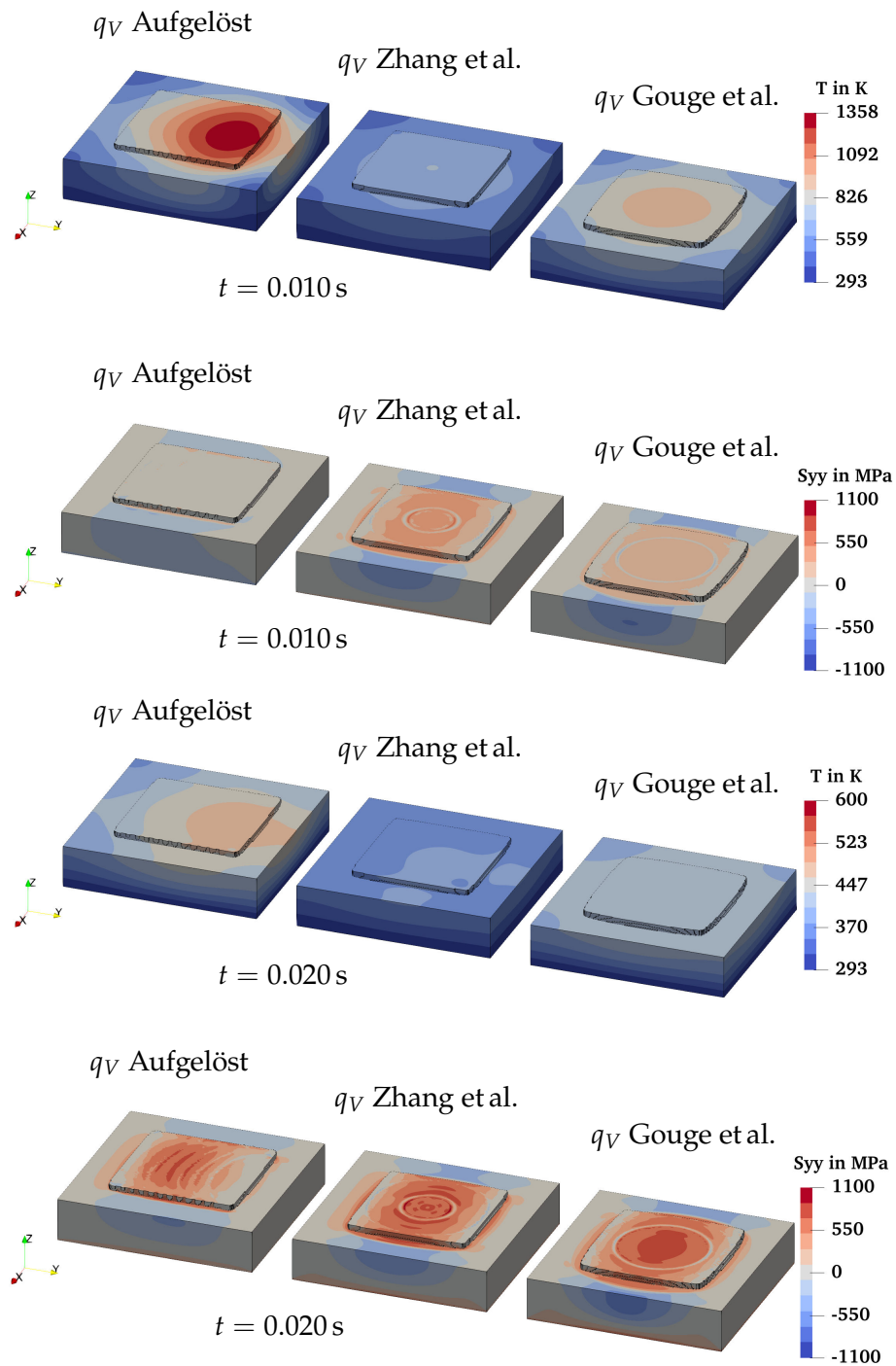


Abbildung 5.3: Temperatur- und  $\sigma_{yy}$ -Spannungsfelder bei 0.010 s und 0.020 s.

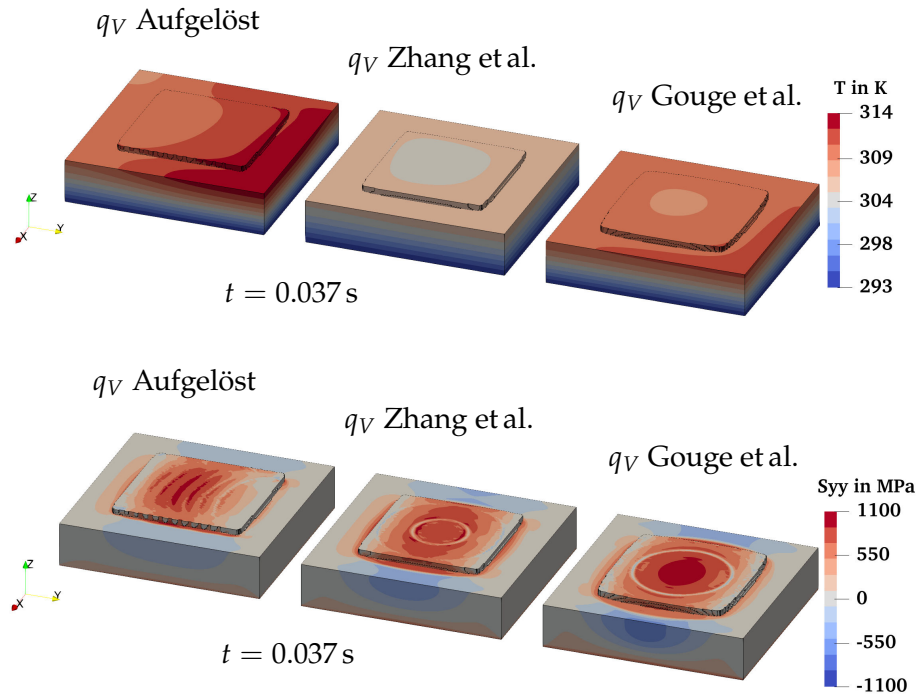


Abbildung 5.4: Temperatur- und  $\sigma_{yy}$ -Spannungsfelder zum Abschluss der Simulation bei 0.037 s.

Für die Spannung  $\sigma_{yy}$  ist im Kern- und Randbereich der Simulationsgebiete, im Vergleich zum vorherigen Zeitpunkt, eine weitere Zunahme der Druck- und Zugcharakteristik erkennbar. Dabei zeigen die Spannungsfelder mit der aufgelösten Simulation und der *Layerheating*-Methode nach Gouge et al. die höchsten Zugspannungen in der Schichtmitte. Die symmetrische Spannungsverteilung sowie die ringförmigen Muster, die bereits zu früheren Zeitpunkten sichtbar waren, sind auch im finalen Zeitschritt für die Simulationen mit der *Layerheating*-Methode sichtbar, wohingegen die aufgelöste Simulationen ein streifenförmiges Muster aufweist.

Obwohl die Berechnungen mit der *Layerheating*-Methode keine spezifische Scanstrategie berücksichtigen, zeigen sich dennoch ähnliche Temperaturfelder und Spannungscharakteristika in vergleichbarer Größenordnung. Diese umfassen die typischen Druck- und Zugbereiche, sind jedoch aufgrund der flächigen Wärmeaufbringung symmetrisch, wodurch bestimmte Merkmale der Scanstrategie verloren gehen.

In dieser Untersuchung wurde das Phänomen des Beulens beobachtet, das bei Dünnschicht-Substrat-Systemen durch Steifigkeitsunterschiede zwischen Schicht und Substrat entsteht. In der Simulation auf der Makroskala, bei der sich mehrere Schichten überlagern und die Schichthöhe zunimmt, gleichen sich diese Unterschiede zunehmend aus, wodurch das Beulen im weiteren Verlauf der Simulation an Bedeutung verliert

und schließlich vernachlässigbar wird. Die *Layerheating*-Methode erweist sich daher als vielversprechende Methode für Prozesssimulationen in der Makroskala. Für eine abschließende Bewertung ist jedoch die Durchführung von Simulationen an realen Bauteilen sowie ein Vergleich mit Experimenten erforderlich, um den Einfluss der *Layerheating*-Methode auf die Entwicklung von Eigenspannungen über mehrere Schichten hinweg beurteilen zu können.

## 5.2 Untersuchung zu Eigenspannungen an AM-Brücke

Die AM-Brücke, dargestellt in Abbildung 5.5, ist eine brückenähnliche Geometrie die durch das *Lawrence Livermore National Laboratory* mittels LPBF hergestellt und durch Röntgendiffraktometrie auf Eigenspannungen und Eigendehnungen untersucht wurde [60, 128]. Aufgrund der hochauflösenden Messungen wird die AM-Brücke zur Validierung für die thermo-mechanische LPBF Prozesssimulation verwendet. Abbildung 5.5 zeigt die Abmessungen in mm und die grün markierte Messfläche in der Mitte der  $y$ -Achse. Ebenfalls sind die Messpunkte P1 ((3.75, 2.5, 0) mm), P2 ((3.75, 2.5, 2.75) mm) und P3 ((3.75, 2.5, 7.75) mm) sowie die roten Linien, auf denen Temperaturen und mechanische Größen später abgetragen werden, dargestellt.

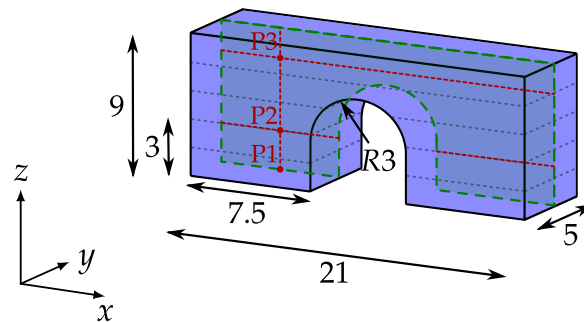


Abbildung 5.5: AM-Brücke mit Abmessungen in mm und Messmarkierungen zur Validierung der thermo-mechanischen LPBF Prozesssimulation.

Zur Herstellung der AM-Brücke wurde eine Laserleistung von 100 W, eine Lasergeschwindigkeit von  $600 \text{ mm s}^{-1}$  und eine Schichtdicke von  $30 \mu\text{m}$  verwendet [60]. Als Scanstrategie kam das *Simple-Hatch* zum Einsatz, das in einem Winkel von  $45^\circ$  zur  $x$ -Achse ausgeführt wurde. Dabei wurde direkt auf das Ti6Al4V-Substrat ohne Stützstrukturen gedruckt, und die Scanrichtung in jeder Schicht um  $90^\circ$  gedreht.

Das Ziel dieses Modells ist die Reproduktion der Dehnungs- und Spannungsfelder aus dem Experiment von [60]. Darüber hinaus wird der Einfluss von zwei vereinfachten Temperaturberechnungen auf die Entwicklung der Dehnungen und Spannungen analysiert.

### 5.2.1 Modellaufbau

Das Simulationsmodell der AM-Brücke basiert auf der zuvor durchgeführten thermo-mechanischen Simulation des *Multitrack*-Experiments und übernimmt dabei dieselben numerischen Parameter, Randbedingungen und das plastische Materialmodell. Die Prozessparameter stammen aus [60] und sind in der Tabelle 5.2 zusammengefasst. Aufgrund der deutlich größeren Geometrie wird eine Zellgröße von  $500\text{ }\mu\text{m}$  verwendet, was 16.67 realen Schichten pro Zelle entspricht. Das Substrat wird mit einer Höhe von  $97\text{ mm}$  modelliert und als Wärmequelle wird die *Layerheating*-Methode von Gouge et al. [89] mit einem Absorptionsgrad  $\eta = 0.8$  verwendet. Da im Experiment weder die *Interlayer*-Zeit  $t_{\text{IL}}$  noch die Abkühlzeit  $t_{\text{C}}$  spezifiziert wurden, werden hier  $t_{\text{IL}} = 1\text{ s}$  und  $t_{\text{C}} = 5\text{ s}$  angenommen.

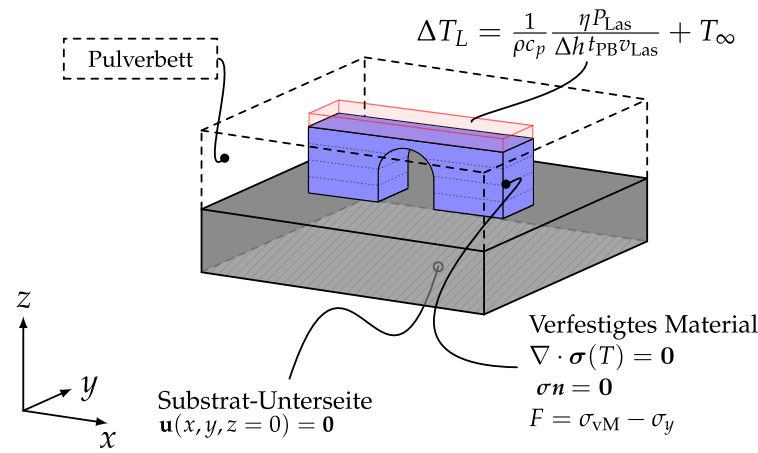


Abbildung 5.6: Modellaufbau der LPBF Prozesssimulation für die AM-Brücke.

Tabelle 5.2: Prozessparameter der AM-Brücke [60].

| $\eta$ | $P_{\text{Las}}$ | $r_{\text{Las}}$        | $v_{\text{Las}}$      | $\Delta h$               | $t_{\text{PB}}$         | $T_{\text{S}}$ | $\alpha$                   | $T_{\infty}$ |
|--------|------------------|-------------------------|-----------------------|--------------------------|-------------------------|----------------|----------------------------|--------------|
| 0.8    | 100 W            | $27\text{ }\mu\text{m}$ | $0.6\text{ m s}^{-1}$ | $105\text{ }\mu\text{m}$ | $30\text{ }\mu\text{m}$ | 293.15 K       | $40\text{ W/m}^2/\text{K}$ | 293.15 K     |

### 5.2.2 Temperaturverlauf und Eigenspannungen

Im ersten Schritt der Untersuchung wurde der Temperaturverlauf während des Herstellungsprozesses analysiert, da dieser entscheidend für die Spannungsentwicklung im Material ist. Der folgende Plot in Abbildung 5.7 zeigt den Temperaturverlauf der drei Messpunkte P1, P2 und P3 über der Zeit.

Der Temperaturverlauf in Abbildung 5.7 zeigt ein zyklisches Aufheizen und Abkühlen an den drei Messpunkten. Solange an den Messpunkten P2 und P3 keine Schicht

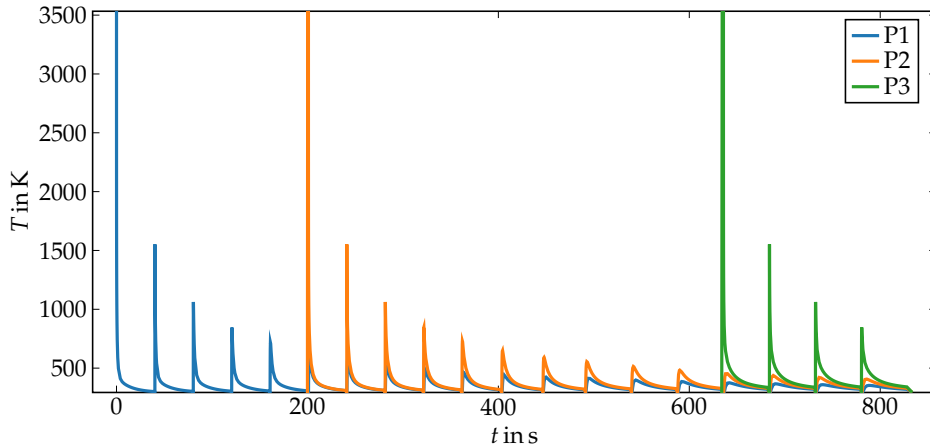


Abbildung 5.7: Temperatur-Zeitverlauf über der Zeit, an drei Messpunkten P1, P2 und P3.

gedruckt wird, verbleiben die Temperaturen dieser Knoten auf Raumtemperatur. Erst beim Druck in einer entsprechenden Schichthöhe erfolgt eine Aufheizung von P2 und P3, bei der die Temperatur kurzzeitig über die Schmelztemperatur ansteigt. Anschließend ist ein schneller, exponentieller Temperaturabfall Richtung Raumtemperatur zu beobachten. Im zeitlichen Verlauf ist erkennbar, dass das Bauteil wiederholt erwärmt wird. Dieser Effekt nimmt jedoch mit zunehmendem Abstand zwischen Messpunkt und Lasereinwirkungspunkt sowie mit fortschreitender Zeit ab.

Aus dem Temperaturverlauf ergeben sich die Spannungen und Dehnungen, die in den Konturplots in Abbildung 5.8 und Abbildung 5.9 dargestellt sind. Die Abbildungen zeigen die Größen im letzten Simulationsschritt nach der Abkühlung in der Messfläche der AM-Brücke (vgl. Abbildung 5.5). Die ersten beiden Zeilen enthalten die gemessenen (Exp.S.2018) und simulierten (Sim.S.2018) Ergebnisse aus [60], während die letzte Zeile die Ergebnisse der entwickelten thermo-mechanischen LPBF Prozesssimulation (JuliaAM) zeigt. Zur besseren Übersicht ist das Substrat ausgeblendet.

Die Ergebnisse aus [60] stimmen qualitativ sehr gut mit den in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen überein. Abbildung 5.8 zeigt jedoch, dass sowohl die Simulation aus [60] als auch das hier entwickelte Modell dazu neigen, die Messungen der schwach ausgeprägten Zug- und Druckspannungen zu überschätzen. Besonders auffällig ist dies bei  $\sigma_{yy}$ , wo die Simulationen durchweg ein ausgeprägtes Druckfeld und eine höhere Varianz der Felder als die Messungen zeigen. Ein ähnlicher Trend ist auch bei den Dehnungen in Abbildung 5.9 zu beobachten, wo die Simulationen ebenfalls eine größere Variabilität und überwiegend höhere negative Dehnungswerte als die Messungen zeigen.

Für einen quantitativen Vergleich zeigt Abbildung 5.10 die Dehnungen  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$  und  $\varepsilon_{zz}$  über der Bauteilhöhe im Punkt  $x = 3.75$  mm und über der Bauteillänge in den Höhen  $z = 2.75$  mm und  $z = 7.75$  mm.

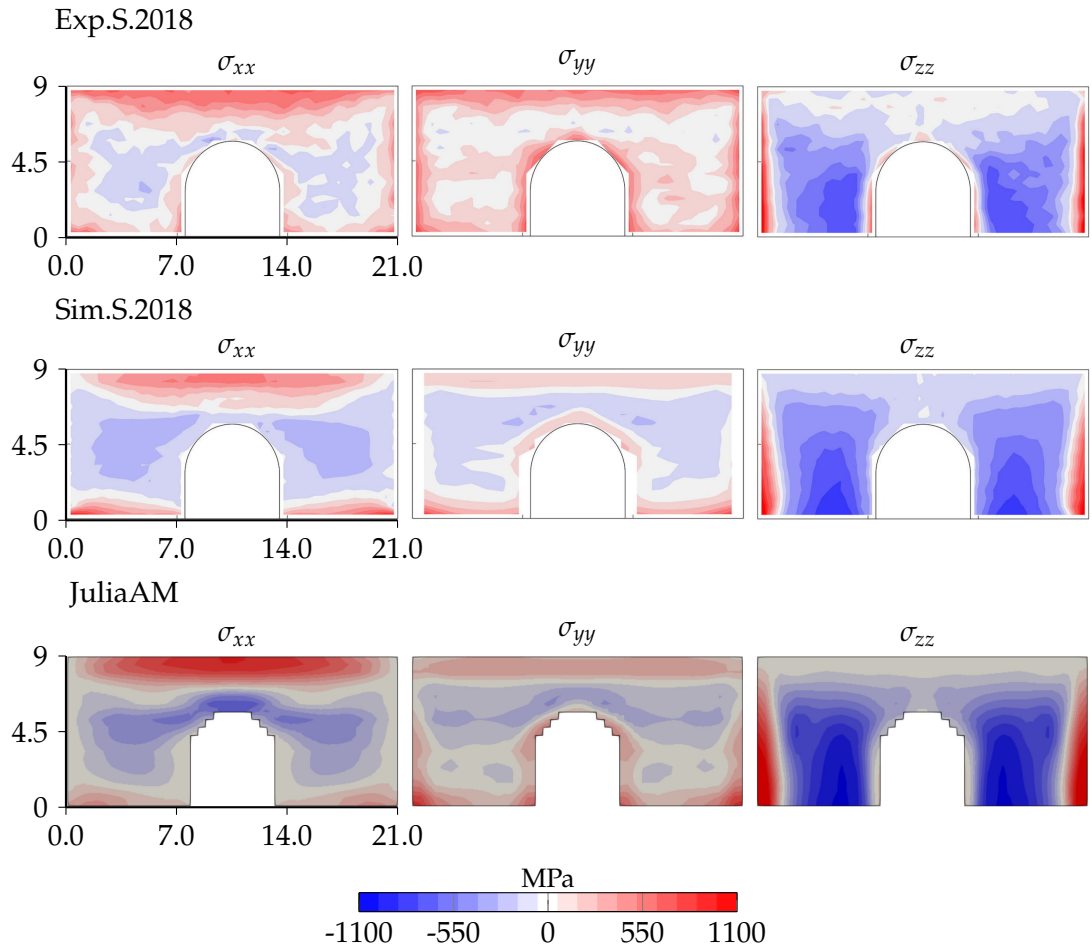


Abbildung 5.8: Spannungsfelder aus [60] und der entwickelten thermo-mechanischen LPBF Prozesssimulation; nachgedruckt aus *Materials Letters*, Band 231, Strantz et al., „Coupled experimental and computational study of residual stresses in additively manufactured Ti-6Al-4V components“, S. 221–224, © 2018, mit Genehmigung von Elsevier. Nicht Teil der übergeordneten CC-Lizenz.

Die Plots über der Bauteilhöhe sowie der Bauteilbreite bestätigen die vorherigen Konturplots und zeigen in den meisten Fällen eine hohe Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen aus [60] und dem entwickelten Prozessmodell. Die größten Abweichungen zwischen der Simulation und den Ergebnissen aus [60] treten an den Bauteilgrenzen für die Dehnungen  $\varepsilon_{zz}$  auf. Dies zeigt sich sowohl über der Bauteilhöhe in Abbildung 5.10(c) als auch über der Bauteillänge, bei einer Höhe von  $z = 2.75$  mm, in Abbildung 5.10(f). Ein möglicher Grund dafür könnte die Verwendung der *Layerheating*-Methode sein, die ein homogenes Temperaturfeld erzeugt und dabei die Scanstrategie vernachlässigt.

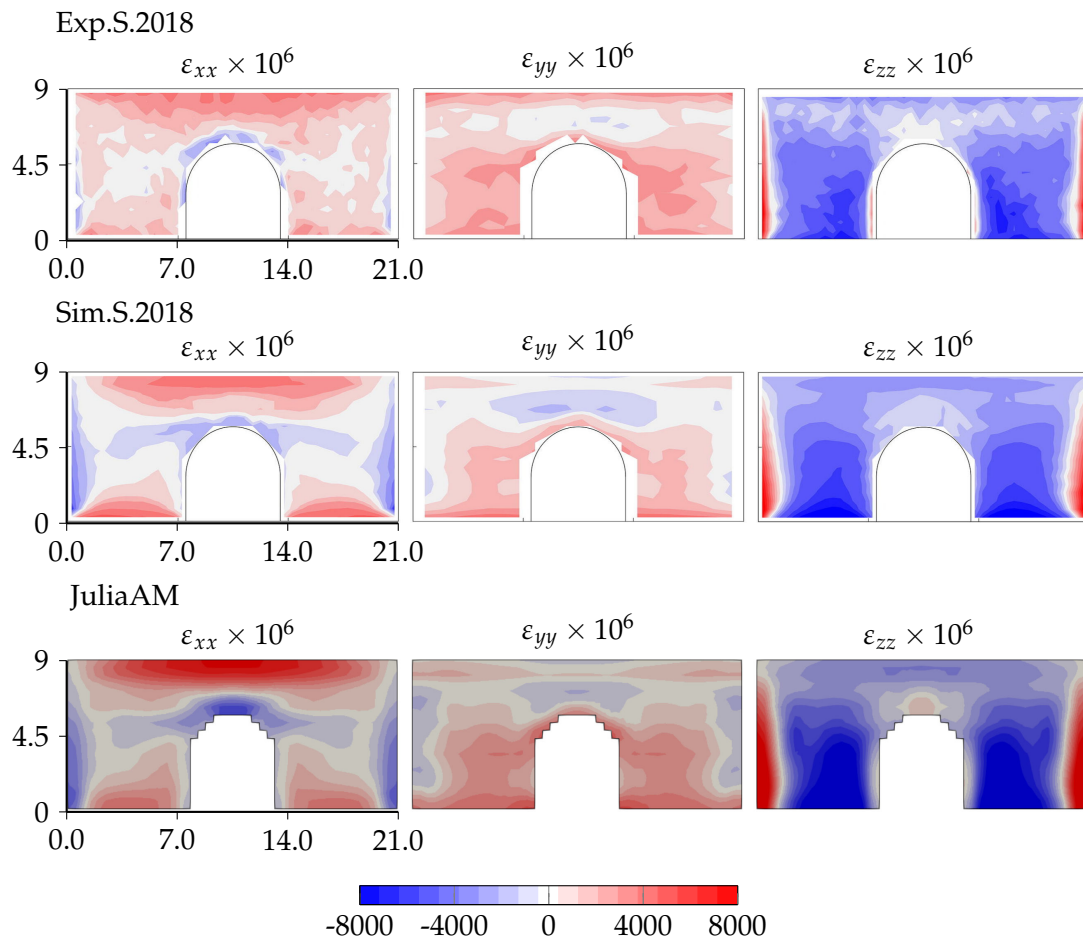


Abbildung 5.9: Dehnungsfelder aus [60] und der entwickelten thermo-mechanischen LPBF Prozesssimulation; nachgedruckt aus *Materials Letters*, Band 231, Strantza et al., „Coupled experimental and computational study of residual stresses in additively manufactured Ti-6Al-4V components“, S. 221–224, © 2018, mit Genehmigung von Elsevier. Nicht Teil der übergeordneten CC-Lizenz.

Zudem könnte die Simulation die realen Bedingungen des Experiments, einschließlich der Bauteil-Substrat-Interaktion, unzureichend erfassen und veränderte Materialeigenschaften im Übergang vom Substrat zum Bauteil nicht berücksichtigen.

Aufgrund der hohen Übereinstimmung der Dehnungs- und Spannungsfelder kann die thermo-mechanische LPBF-Prozesssimulation mit Ti6Al4V als validiert angesehen und für weitere Untersuchungen genutzt werden. Im nächsten Schritt soll der Einfluss einer weiteren Vereinfachung der Wärmequelle auf die Dehnungen und Spannungen analysiert werden.

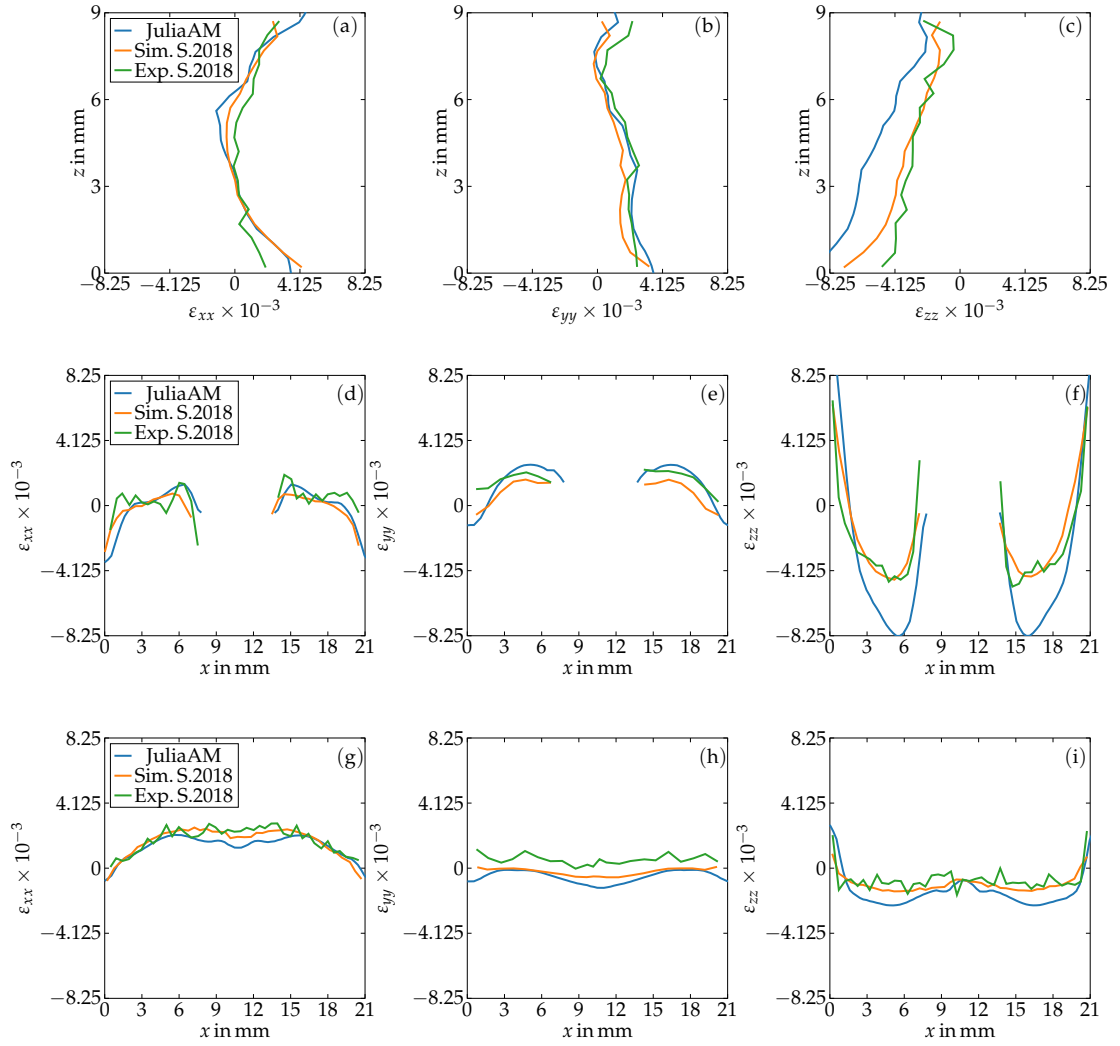


Abbildung 5.10: Dehnungen über der Bauteilhöhe bei  $x = 3.75$  mm ((a) – (c)) und der Bauteillänge in der Höhe  $z = 2.75$  mm ((d) – (f)) und  $z = 7.75$  mm ((g) – (i)).

### 5.2.3 Temperaturverlauf und Eigenspannungen im vereinfachten Modell

Die Literatur zeigt, dass oberhalb einer bestimmten Temperatur, der sogenannten Relaxationstemperatur, keine Spannungen aufgebaut werden [47, 129]. Dieses Erkenntnis kann genutzt werden, um das Modell zu vereinfachen und damit die Simulation zu beschleunigen. Dabei wird die herzustellende Schicht direkt mit der Relaxationstemperatur initialisiert, die unter der Schmelztemperatur des Materials liegt, und anschließend von dort abgekühlt. Dies vereinfacht den Simulationsprozess, da nicht der gesamte Temperaturbereich von einer sehr hohen Ausgangstemperatur bis zur Endtemperatur simuliert werden muss. Stattdessen beginnt die Simulation bei der Relaxationstemperatur, die für das Endergebnis als ausreichend erkannt wurde. Die Ermittlung der Relaxationstemperatur erfolgt über Vorversuche oder Experimente. Im vorliegenden Fall wird die Relaxationstemperatur über dem Temperatur- und dem von Mises-Vergleichsspannungs-Zeitverlauf am Messpunkt P1 der AM-Brücke in Abbildung 5.11 abgeschätzt.

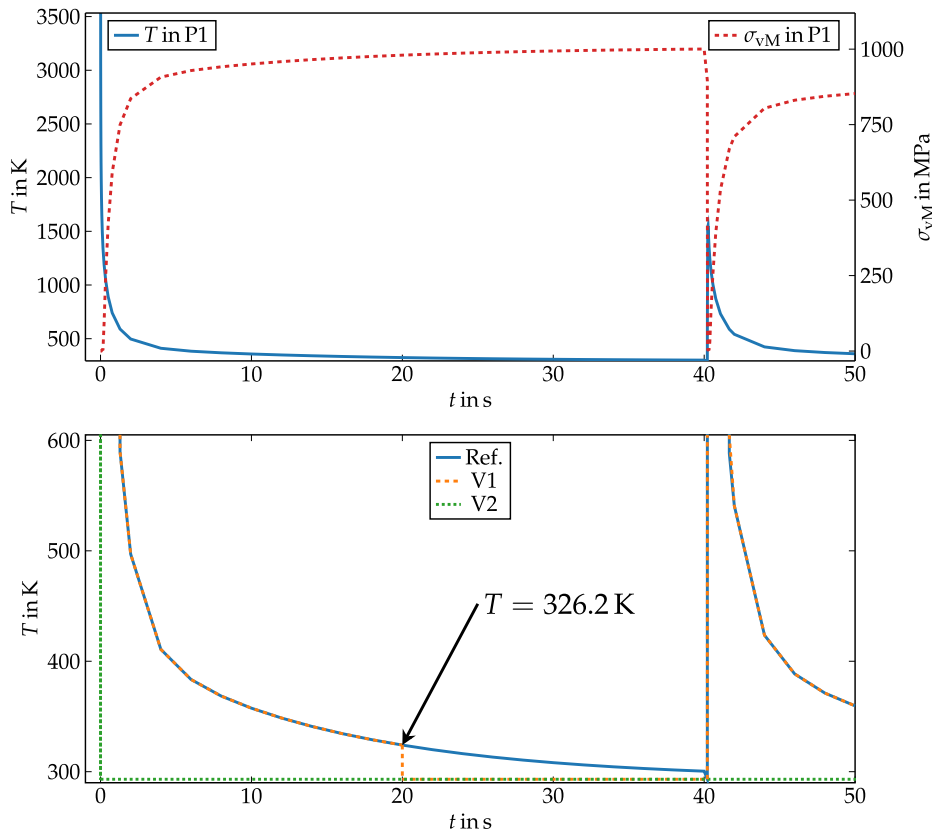


Abbildung 5.11: Temperatur- und von Mises-Vergleichsspannungs-Zeitverlauf am Messpunkt P1 der AM-Brücke.

Im Temperatur- und von Mises-Vergleichsspannungs-Zeitverlauf ist zu erkennen,

dass die Spannung am Punkt P1 bei hohen Temperaturen zu Beginn einer neuen Schicht annähernd null ist. Erst mit sinkender Temperatur ist ein Spannungsaufbau zu beobachten. Bei der zweiten Temperaturspitze, verursacht durch eine neue Druckschicht, fällt die Spannung wieder nahe null, und baut sich dann wieder mit sinkender Temperatur auf. Da der zweite Temperatur-Peak etwa bei 1500 K liegt und hier dementsprechend eine Nullspannung zu beobachten ist, wird diese Temperatur in der nachfolgenden Simulation als Relaxationstemperatur zur Initialisierung einer neuen Schicht verwendet.

Darüber hinaus können aus dem Temperatur-Zeit-Verlauf weitere Vereinfachungen für die Simulation getroffen werden. Es zeigt sich, dass die Temperatur im Bauteil exponentiell abnimmt und sich der Raumtemperatur annähert. Das Niveau der Raumtemperatur wird bereits deutlich vor Beginn einer neuen Druckschicht erreicht. Aus dieser Beobachtung lassen sich zwei Vereinfachungen für die Abkühlung formulieren:

- V1: Die tatsächliche Abkühlung wird nur für 20 s berechnet, danach wird direkt auf Raumtemperatur abgekühlt (orange gestrichelte Linie in Abbildung 5.11).
- V2: Die Abkühlung erfolgt abrupt auf Raumtemperatur, wobei weder die Wärmeleitung im Bauteil noch der Wärmeübergang aus dem Bauteil berücksichtigt werden (grün gepunktete Linie in Abbildung 5.11).

Die restlichen Prozess- und Modellparameter bleiben unverändert. Basierend auf der Initialisierungstemperatur von 1500 K und den Vereinfachungen V1 und V2 zur Abkühlung wird die Simulation der AM-Brücke erneut durchgeführt. Zunächst wird der Temperaturverlauf über der Zeit in Abbildung 5.12 am Messpunkt P1 betrachtet. Die Ergebnisse des vorangegangenen Referenzmodells wird fortan als Ref. bezeichnet, die Ergebnisse der Modelle mit den Annahmen V1 und V2 entsprechend.

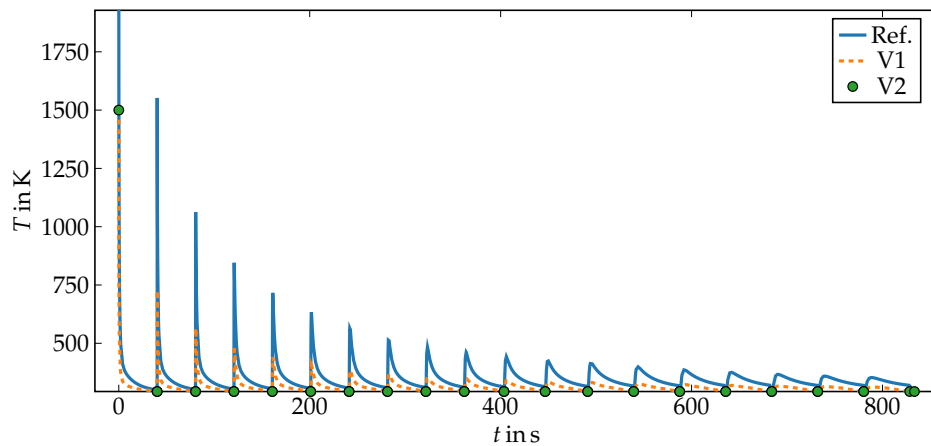


Abbildung 5.12: Temperatur-Zeitverlauf am Messpunkt P1 des Referenzmodells und der Modelle mit V1 und V2.

Der Temperaturverlauf des Referenzmodells (Ref.) sowie dem Modell mit V1 zeigt eine ähnliche Charakteristik. Es ist jedoch erkennbar, dass die Kurve des Modells mit V1 aufgrund der geringen Initialisierungstemperatur flacher verläuft und deutlich geringere Temperaturspitzen aufweist als die Referenzsimulation. Dadurch verlieren die Wärmeleitung und der Wärmeübergang aufgrund der geringen Temperaturgradienten im Bauteil an Intensität, was ebenfalls zu flacheren Temperaturverläufen führt. Die Knoten unter einer Druckschicht erfahren dadurch einen geringeren Energieeintrag, sodass im weiteren Zeitverlauf kaum noch eine Temperaturerhöhung zu beobachten ist. Für das Modell mit V2 zeigt sich ein stark vereinfachter Temperaturverlauf. Abgesehen von der Initialisierungstemperatur zu Beginn einer neuen Druckschicht, sind keine weiteren Temperaturanstiege zu beobachten, da weder Wärmeleitung noch Wärmeübergang berücksichtigt werden. Dieses Szenario kann daher als Grenzfall mit besonders schneller Abkühlung betrachtet werden.

Die folgenden Konturplots zeigen die Spannungen  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$  in Abbildung 5.13 und Dehnungen  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$ ,  $\varepsilon_{zz}$  in Abbildung 5.14 der drei Modelle zum finalen Zeitpunkt.

Für die Modelle mit V1 und V2 bleibt die charakteristische Verteilung der Zug- und Druckspannungen in den Rändern und im Kern erhalten. Bei Betrachtung der Zugspannungen lässt sich eine Zunahme sowohl der Bereiche als auch der Werte feststellen. Eine noch größere Zunahme ist bei den Druckspannungen zu beobachten, wobei das Modell mit V2 den größten Bereich und die größte Wertzunahme aufweist. Die Hauptursache für dieses Verhalten liegt in den stark veränderten Temperaturgradienten, die sich durch die künstliche Abkühlung ergeben. Wie bereits erläutert, zeigt sich bei dem Modell mit V1 ein flacherer Temperaturgradient, wohingegen bei dem Modell mit V2 gar kein Temperaturgradient existiert. Dies führt dazu, dass Schichten, die bei höheren Temperaturen normalerweise weicher wären, sich steifer verhalten und somit höhere Spannungen aufweisen.

Ähnlich wie bei den Spannungen ist auch eine Änderung der Dehnungen in Abbildung 5.14 zu beobachten. Da der Ausdehnungskoeffizient mit steigender Temperatur zunimmt, entsteht ein weiterer Fehler durch die Nichtberücksichtigung der Temperaturerhöhung in den tieferen Schichten des Bauteils. Durch den schichtweisen Aufbau des Bauteils addieren sich diese Effekte, so dass am Ende der Simulation deutlich größere Bereiche mit höheren Werten in den Dehnungsfeldern auftreten.

Abbildung 5.15 zeigt zur quantitativen Beurteilung, analog zum vorherigen Kapitel, die Dehnungen  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$ ,  $\varepsilon_{zz}$  über der Bauteilhöhe am Punkt  $x = 3.75$  mm sowie über der Bauteillänge in den Höhen  $z = 2.75$  mm und  $z = 7.75$  mm.

Die in Abbildung 5.15 dargestellten Dehnungen weisen teilweise eine ähnliche Charakteristik auf, zeigen jedoch auch deutliche Unterschiede zum Referenzmodell, sodass keine allgemeine Aussage darüber getroffen werden kann, welche Vereinfachung welche Auswirkungen auf die Ergebnisse hat. So erzeugt z. B. das Modell mit V1 in Abbildung 5.15(f) oder auch das Modell mit V2 in Abbildung 5.15(d) die betragsmäßig größten Abweichungen zur Dehnung des Referenzmodells.

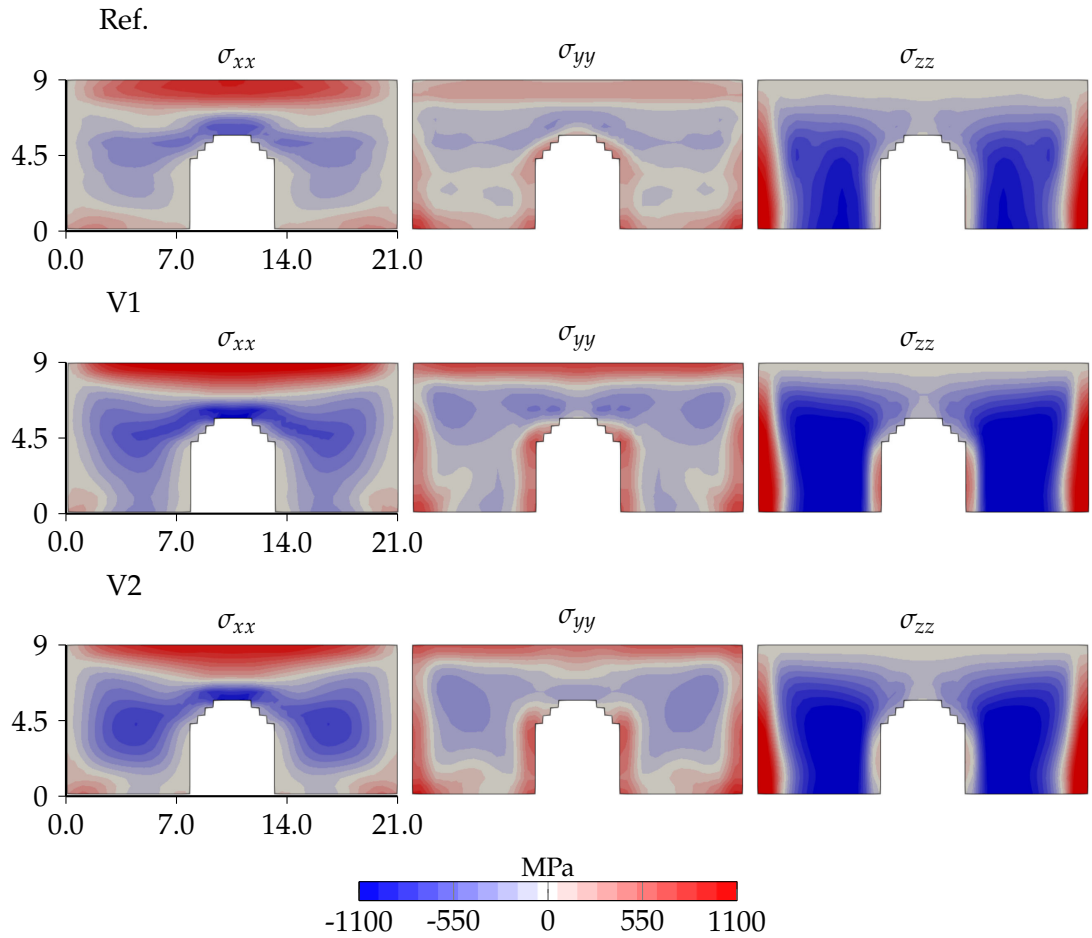


Abbildung 5.13: Spannungsfelder des Referenzmodells und der Modelle mit V1 und V2.

Hinsichtlich der Simulationszeit ist eine deutliche Reduktion festzustellen. So kann mit dem Modell mit V1 die Rechenzeit auf ca. 1 Stunde und mit V2 sogar auf unter 10 Minuten reduziert werden, während das Referenzmodell ca. 3 Stunden benötigt.

Zusammenfassend zeigt diese Studie die entscheidende Rolle des Temperaturgradienten bei der Entstehung und Entwicklung der Eigenspannungen. Dies ist insbesondere für temperaturabhängige Materialwerte von Bedeutung, die sich ohne einen Temperaturgradienten deutlich zu steif verhalten. Der Hauptmechanismus für die Spannungs- und Dehnungscharakteristik ergibt sich aus dem zyklischen Aufheizprozess, der auch im Extremfall ohne Wärmeleitung und Wärmeübergang nahezu erhalten bleibt. Aufgrund der ähnlichen Spannungs- und Dehnungscharakteristik, ist das vereinfachte Modell basierend auf der Relaxationstemperatur und der vereinfachten Abkühlung eine gute Möglichkeit für eine schnelle und effiziente thermo-mechanische LPBF Prozesssimulation auf der Makroskala.

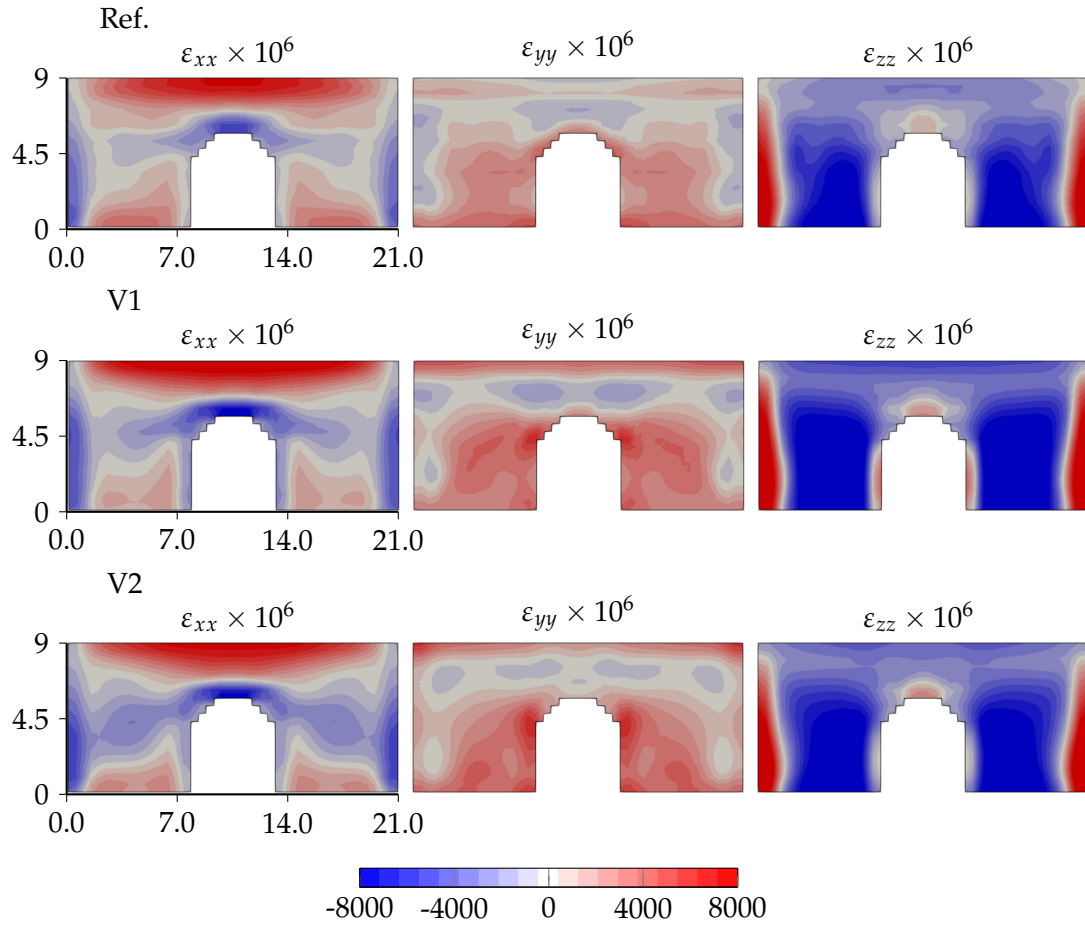


Abbildung 5.14: Dehnungsfelder des Referenzmodells und der Modelle mit V1 und V2.

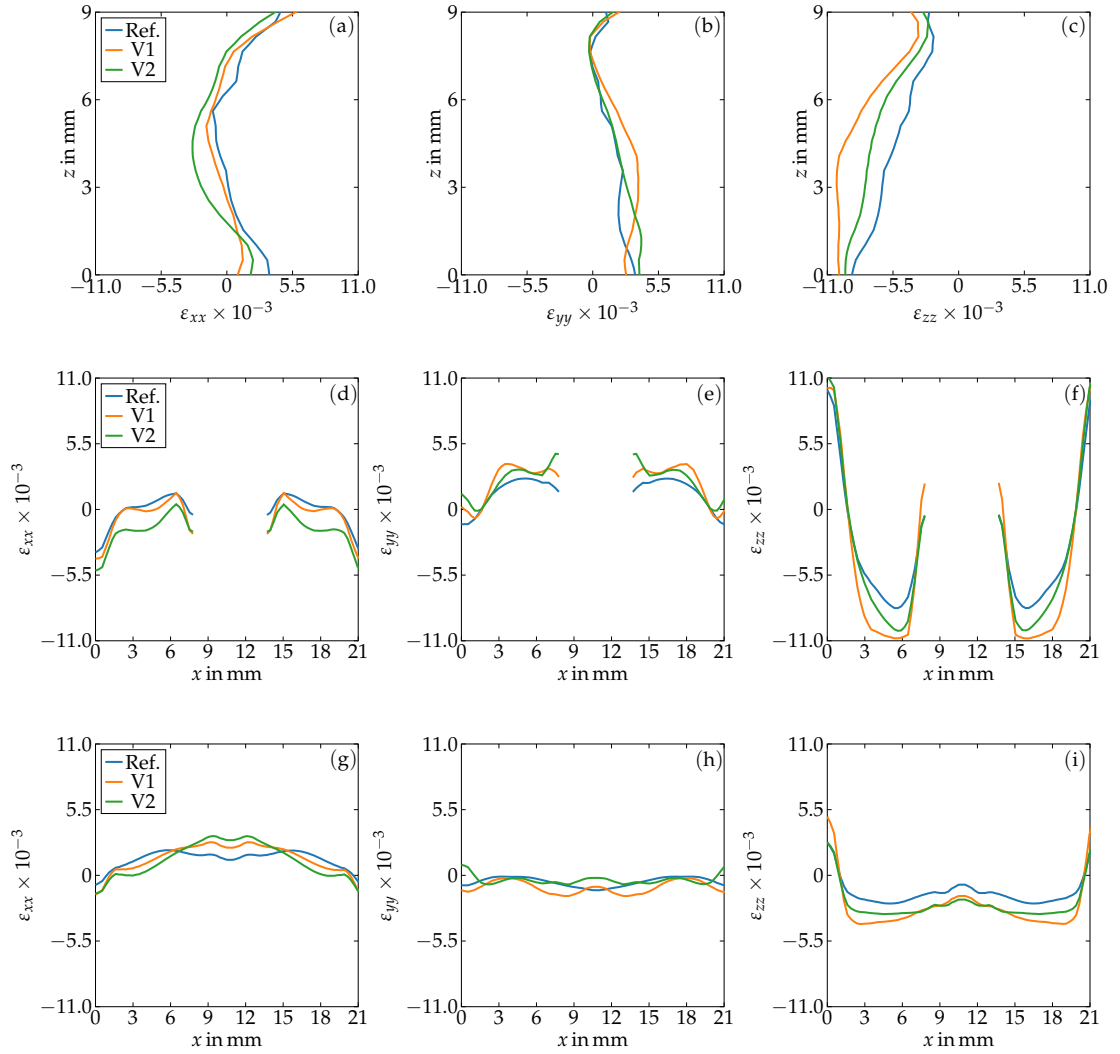


Abbildung 5.15: Dehnungen über der Bauteilhöhe bei  $x = 3.75$  mm ((a) – (c)) und der Bauteillänge in der Höhe  $z = 2.75$  mm ((d) – (f)) und  $z = 7.75$  mm ((g) – (i)).

# 6 | Abschluss

Das abschließende Kapitel fasst die Kerninhalte und wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit zusammen. Darüber hinaus bietet es einen Ausblick auf mögliche zukünftige Forschungsfragen.

## 6.1 Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung eines Simulationsframework, dass die Simulation des LPBF Prozesses sowohl auf Meso- als auch auf Makroskala ermöglicht. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Nutzung des G-Codes, um den hohen Vorbereitungsaufwand, der typischerweise mit diesen Modellen verbunden ist, zu minimieren und den Prozess zu automatisieren. Zusätzlich sollte der Einsatz von Grafikprozessoreinheiten sicherstellen, dass Simulationen auch bei großen Modellen mit vielen Knoten, die durch große Bauteile oder eine hohe geometrische Auflösung entstehen, nicht nur durchführbar, sondern auch effizient ausführbar sind.

Dazu wurde das thermo-mechanische Modell mit der Finite-Differenzen-Methode auf einem *Staggered-Grid* diskretisiert und anschließend mit einem expliziten *Euler*-Verfahren und der dynamischen Relaxation gelöst. Dabei wurden neben der Wärmeleitungsgleichung auch der Wärmeübergang durch Konvektion und Strahlung sowie das plastische Materialverhalten im Modell berücksichtigt. Zur Realisierung des Materialaufbaus wurde die *Element-Birth-Death*-Technik eingesetzt, bei der Zellen und Schichten temperaturabhängig aktiviert werden. Alle für diesen Ansatz notwendigen Informationen wurden mit Hilfe des *Bresenham*-Algorithmus automatisch aus dem G-Code generiert. Die Wärmequelle auf der Mesoskala basierte auf der Formulierung nach [57], auf der Makroskala wurde eine vereinfachte Wärmequelle nach [89] bzw. [88] verwendet. Die geringe Wärmeleitfähigkeit des Pulverbetts wurde durch das Modell nach [79] berücksichtigt. Für die Modelle der Meso- und Makroskala wurde zunächst eine Validierung anhand von Experimenten durchgeführt. Anschließend wurden verschiedene Studien zum Einfluss von Prozessparametern und Modellierungsansätzen durchgeführt.

Zunächst wurde zur Validierung des thermischen Modells auf der Mesoskala ein *Singletrack*-Experiment aus [58] nachgestellt und die Schmelzbadbreite und die Schmelzbadtiefe für verschiedene Laserleistungen verglichen. Dabei konnte eine hohe Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment erzielt werden. In dem durchgeführten *Multitrack*-Experiment wurde der Einfluss verschiedener Scanstrategien und der Volu-

menenergiedichte auf die Schmelzbadgröße, die mittlere und maximale Temperatur und das Verhältnis von Verdampfungs- zu Schmelzbadvolumen im Bauteil untersucht. Es wurde deutlich, dass die Wahl der Scanstrategien sich entscheidend auf die Temperaturen und Prozessbedingungen niederschlägt. Es zeigte sich auch, dass eine Prozesssteuerung allein über die Volumenenergiedichte unzureichend ist und nicht-lineare Effekte in diesem Wert keine Berücksichtigung finden können. Im letzten Modell zur Mesoskala wurde durch Pulverbett-Elemente untersucht, wie sich lokale Porositätsunterschiede im Pulverbett auf die Größe und Form des Schmelzbades auswirken. Obwohl die Größe der Schmelzbäder sehr ähnlich war, traten deutliche Asymmetrien und Schwankungen auf, die auf lokale Änderungen der Wärmeleitfähigkeit zurückgeführt wurden.

Das Modell des *Multitrack*-Experiments diente als Ausgangspunkt für die Untersuchung der schichtweisen Wärmequelle von [89] und [88] auf Spannungen und Dehnungen im Vergleich zu einer aufgelösten Wärmequelle für eine Schicht. Es zeigte sich, dass die schichtweise Wärmequelle zwar die generelle Spannungscharakteristik beibehält, aber die durch die Scanstrategie bedingten Spannungsverläufe verloren gehen und die Werte größer sind als bei der Simulation mit der aufgelösten Wärmequelle. Der Einfluss der schichtweisen Wärmequelle auf das Spannungs- und Dehnungsfeld ganzer Bauteile wurde bei der Simulation der AM-Brücke untersucht. Dieses Modell diente gleichzeitig als Validierung, da durch die Arbeit von [60] gemessene und simulierte Spannungs- und Dehnungsfelder in hoher Auflösung und mit Prozessparametern zur Verfügung standen. Die in der Simulation reproduzierten Spannungen und Dehnungen zeigten eine hohe Übereinstimmung mit den Messwerten. Die Abweichungen im Substratbereich waren vor allem auf die schichtweise Wärmequelle und die Verbindung zwischen Substrat und Bauteil zurückzuführen, die durch die Materialparameter in der Simulation unzureichend erfasst wurden. Im letzten Modell wurde die AM-Brücke mit einer Relaxationstemperatur sowie einer vereinfachten Abkühlung simuliert. Die Relaxationstemperatur wurde dabei aus der vorangegangenen Simulation ermittelt, indem der Temperatur- und von Mises-Vergleichsspannungs-Zeitverlauf analysiert wurde. Die Simulation zeigte, dass die charakteristischen Spannungs- und Dehnungsfelder erhalten blieben, jedoch die Spannungen und Dehnungen aufgrund der vereinfachten Abkühlung und der daraus resultierenden fehlenden Temperaturgradienten überbewertet wurden.

## 6.2 Ausblick

Das in dieser Arbeit entwickelte und experimentell validierte Simulationsframework bildet eine ideale Grundlage für weitere Untersuchungen des LPBF Prozesses mit Ti6Al4V. Zukünftig kann das Modell um weitere Werkstoffe erweitert und für andere additive Fertigungsverfahren wie Elektronenstrahlschmelzen oder *Fused Filament Fabrication* angepasst werden. Darüber hinaus lässt sich das thermo-mechanische Modell in eine CFD-Simulation einbinden, um Spannungen und Dehnungen präziser zu berechnen und dabei sowohl das genaue Schmelzbad als auch die aktuelle Materialformation zu

berücksichtigen. Des Weiteren kann die PBE-Methode, die in dieser Arbeit nur die Porosität des Pulverbetts und den mittleren Durchmesser der Pulverpartikel verwendet, kontinuierlich um weitere Parameter erweitert werden, um prozessspezifische Phänomene skalenübergreifend in der Simulation abzubilden. In Bezug auf den Code wird empfohlen, ein detailliertes *Benchmarking* durchzuführen und das Simulationsframework für den Einsatz auf Multi-GPU-Systemen zu erweitern, um die Skalierbarkeit und Rechenleistung des Codes weiter zu verbessern. Ein längerfristiges Ziel könnte die Entwicklung eines digitalen Zwillings sein, der den gesamten Druckprozess simuliert und parallel zum Maschinenbetrieb läuft.



## 7 | Quellenverzeichnis

- [1] Airbus. *Pioneering Bionic 3D Printing | Airbus*. 2016. URL: <https://www.airbus.com/en/newsroom/news/2016-03-pioneering-bionic-3d-printing> (besucht am 03.01.2024).
- [2] EOS. *3D Printing for Ariane 6 Propulsion Module*. 2019. URL: [https://www.eos.info/01\\_parts-and-applications/case\\_studies\\_applications\\_parts/\\_case\\_studies\\_pdf/en\\_cases/cs\\_m\\_aerospace\\_arianegroup\\_en.pdf](https://www.eos.info/01_parts-and-applications/case_studies_applications_parts/_case_studies_pdf/en_cases/cs_m_aerospace_arianegroup_en.pdf) (besucht am 03.01.2024).
- [3] M. Siebold. „Additive Manufacturing for Serial Production of High-Performance Metal Parts“. In: *Mechanical Engineering* 141.05 (2019), S. 49–50. DOI: 10.1115/1.2019-MAY5.
- [4] M. Möhrle. *Gestaltung von Fabrikstrukturen für die additive Fertigung*. Light Engineering für die Praxis. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2018. DOI: 10.1007/978-3-662-57707-3.
- [5] A. Sola und A. Nouri. „Microstructural Porosity in Additive Manufacturing: The Formation and Detection of Pores in Metal Parts Fabricated by Powder Bed Fusion“. In: *Journal of Advanced Manufacturing and Processing* 1.3 (2019), e10021. DOI: 10.1002/amp2.10021.
- [6] I. Yadroitsev, I. Yadroitsava, A. du Plessis und E. MacDonald, Hrsg. *Fundamentals of Laser Powder Bed Fusion of Metals*. Additive Manufacturing Materials and Technologies. Amsterdam Kidlington, Oxford Cambridge, MA: Elsevier, 2021. 654 S.
- [7] R. Russell, D. Wells, J. Waller, B. Poorganji, E. Ott, T. Nakagawa, H. Sandoval, N. Shamsaei und M. Seifi. „Qualification and Certification of Metal Additive Manufactured Hardware for Aerospace Applications“. In: *Additive Manufacturing for the Aerospace Industry*. Elsevier, 2019, S. 33–66. DOI: 10.1016/B978-0-12-814062-8.00003-0.
- [8] Deutsches Institut für Normung. *Additive Fertigung – Grundlagen – Terminologie (ISO/ASTM 52900:2021); Deutsche Fassung EN ISO/ASTM 52900:2021*. DEUTSCHE NORM. DIN EN ISO/ASTM 52900. 2022.

- [9] C. Meier, R. Weissbach, J. Weinberg, W. A. Wall und A. J. Hart. „Critical Influences of Particle Size and Adhesion on the Powder Layer Uniformity in Metal Additive Manufacturing“. In: *Journal of Materials Processing Technology* 266 (2019), S. 484–501. doi: 10.1016/j.jmatprotec.2018.10.037.
- [10] L. Luberto, D. Luchini und K. M. De Payrebrune. „A Novel Mesoscale Transitional Approach for Capturing Localized Effects in Laser Powder Bed Fusion Simulations“. In: *Powder Technology* 447 (2024), S. 120194. doi: 10.1016/j.powtec.2024.120194.
- [11] A. Winkelmann, C. Flath und F. Thiesse, Hrsg. *Sharing Economy in der Industrie: Unternehmensübergreifende Auslastung von Produktionskapazitäten am Beispiel der additiven Fertigung*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2021. doi: 10.1007/978-3-658-33923-4.
- [12] K. V. Wong und A. Hernandez. „A Review of Additive Manufacturing“. In: *ISRN Mechanical Engineering* 2012 (2012), S. 1–10. doi: 10.5402/2012/208760.
- [13] A. Mussatto, R. Groarke, A. O’Neill, M. A. Obeidi, Y. Delaure und D. Brabazon. „Influences of Powder Morphology and Spreading Parameters on the Powder Bed Topography Uniformity in Powder Bed Fusion Metal Additive Manufacturing“. In: *Additive Manufacturing* 38 (2021), S. 101807. doi: 10.1016/j.addma.2020.101807.
- [14] B. Zhang, Y. Li und Q. Bai. „Defect Formation Mechanisms in Selective Laser Melting: A Review“. In: *Chinese Journal of Mechanical Engineering* 30.3 (2017), S. 515–527. doi: 10.1007/s10033-017-0121-5.
- [15] H. Masuo, Y. Tanaka, S. Morokoshi, H. Yagura, T. Uchida, Y. Yamamoto und Y. Murakami. „Influence of Defects, Surface Roughness and HIP on the Fatigue Strength of Ti-6Al-4V Manufactured by Additive Manufacturing“. In: *International Journal of Fatigue* 117 (2018), S. 163–179. doi: 10.1016/j.ijfatigue.2018.07.020.
- [16] Y. Huang, T. G. Fleming, S. J. Clark, S. Marussi, K. Fezzaa, J. Thiyaalingam, C. L. A. Leung und P. D. Lee. „Keyhole Fluctuation and Pore Formation Mechanisms during Laser Powder Bed Fusion Additive Manufacturing“. In: *Nature Communications* 13.1 (2022), S. 1170. doi: 10.1038/s41467-022-28694-x.
- [17] D. Gu, Y.-C. Hagedorn, W. Meiners, G. Meng, R. J. S. Batista, K. Wissenbach und R. Poprawe. „Densification Behavior, Microstructure Evolution, and Wear Performance of Selective Laser Melting Processed Commercially Pure Titanium“. In: *Acta Materialia* 60.9 (2012), S. 3849–3860. doi: 10.1016/j.actamat.2012.04.006.
- [18] P. Mercelis und J.-P. Kruth. „Residual Stresses in Selective Laser Sintering and Selective Laser Melting“. In: *Rapid Prototyping Journal* 12.5 (2006), S. 254–265. doi: 10.1108/13552540610707013.

- 
- [19] J. L. Bartlett und X. Li. „An Overview of Residual Stresses in Metal Powder Bed Fusion“. In: *Additive Manufacturing* 27 (2019), S. 131–149. DOI: 10.1016/j.addma.2019.02.020.
- [20] C. Meier, R. W. Penny, Y. Zou, J. S. Gibbs und A. J. Hart. „Thermophysical Phenomena in Metal Additive Manufacturing by Selective Laser Melting: Fundamentals, Modeling, Simulation, and Experimentation“. In: *Annual Review of Heat Transfer* 20.1 (2017), S. 241–316. DOI: 10.1615/AnnualRevHeatTransfer.2018019042.
- [21] F.-K. Benra, H. J. Dohmen, J. Pei, S. Schuster und B. Wan. „A Comparison of One-Way and Two-Way Coupling Methods for Numerical Analysis of Fluid-Structure Interactions“. In: *Journal of Applied Mathematics* 2011 (2011), S. 1–16. DOI: 10.1155/2011/853560.
- [22] F. Chen und W. Yan. „High-Fidelity Modelling of Thermal Stress for Additive Manufacturing by Linking Thermal-Fluid and Mechanical Models“. In: *Materials & Design* 196 (2020), S. 109185. DOI: 10.1016/j.matdes.2020.109185.
- [23] C. Panwisawas, C. Qiu, M. J. Anderson, Y. Sovani, R. P. Turner, M. M. Attallah, J. W. Brooks und H. C. Basoalto. „Mesoscale Modelling of Selective Laser Melting: Thermal Fluid Dynamics and Microstructural Evolution“. In: *Computational Materials Science* 126 (2017), S. 479–490. DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.10.011.
- [24] C. Andersson und A. Lundbäck. „Modeling the Evolution of Grain Texture during Solidification of Laser-Based Powder Bed Fusion Manufactured Alloy 625 Using a Cellular Automata Finite Element Model“. In: *Metals* 13.11 (2023), S. 1846. DOI: 10.3390/met13111846.
- [25] L.-X. Lu, N. Sridhar und Y.-W. Zhang. „Phase Field Simulation of Powder Bed-Based Additive Manufacturing“. In: *Acta Materialia* 144 (2018), S. 801–809. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.11.033.
- [26] P. Liu, Y. Ji, Z. Wang, C. Qiu, A. Antonyamy, L.-Q. Chen, X. Cui und L. Chen. „Investigation on Evolution Mechanisms of Site-Specific Grain Structures during Metal Additive Manufacturing“. In: *Journal of Materials Processing Technology* 257 (2018), S. 191–202. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2018.02.042.
- [27] Z. Zhang, Z. Tan, X. Yao, C. Hu, P. Ge, Z. Wan, J. Li und Q. Wu. „Numerical Methods for Microstructural Evolutions in Laser Additive Manufacturing“. In: *Computers & Mathematics with Applications* 78.7 (2019), S. 2296–2307. DOI: 10.1016/j.camwa.2018.07.011.
- [28] Y. Zhang und J. Zhang. „Modeling of Solidification Microstructure Evolution in Laser Powder Bed Fusion Fabricated 316L Stainless Steel Using Combined Computational Fluid Dynamics and Cellular Automata“. In: *Additive Manufacturing* 28 (2019), S. 750–765. DOI: 10.1016/j.addma.2019.06.024.

- [29] M. S. Mohebbi und V. Ploshikhin. „Implementation of Nucleation in Cellular Automaton Simulation of Microstructural Evolution during Additive Manufacturing of Al Alloys“. In: *Additive Manufacturing* 36 (2020), S. 101726. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101726.
- [30] X. Zhang, B. Mao, L. Mushongera, J. Kundin und Y. Liao. „Laser Powder Bed Fusion of Titanium Aluminides: An Investigation on Site-Specific Microstructure Evolution Mechanism“. In: *Materials & Design* 201 (2021), S. 109501. DOI: 10.1016/j.matdes.2021.109501.
- [31] S. Sunny, H. Yu, R. Mathews, A. Malik und W. Li. „Improved Grain Structure Prediction in Metal Additive Manufacturing Using a Dynamic Kinetic Monte Carlo Framework“. In: *Additive Manufacturing* 37 (2021), S. 101649. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101649.
- [32] T. M. Rodgers, D. Moser, F. Abdeljawad, O. D. U. Jackson, J. D. Carroll, B. H. Jared, D. S. Bolintineanu, J. A. Mitchell und J. D. Madison. „Simulation of Powder Bed Metal Additive Manufacturing Microstructures with Coupled Finite Difference-Monte Carlo Method“. In: *Additive Manufacturing* 41 (2021), S. 101953. DOI: 10.1016/j.addma.2021.101953.
- [33] A. AP&C. *Ti-6Al-4V Gr. 5 | Advanced Powders*. 2024. URL: <https://www.advancedpowders.com/powders/titanium/ti-6al-4v-5> (besucht am 27.03.2024).
- [34] C. D. Boley, S. A. Khairallah und A. M. Rubenchik. „Calculation of Laser Absorption by Metal Powders in Additive Manufacturing“. In: *Applied Optics* 54.9 (2015), S. 2477. DOI: 10.1364/AO.54.002477.
- [35] A. Phua, C. Doblin, P. Owen, C. H. Davies und G. W. Delaney. „The Effect of Recoater Geometry and Speed on Granular Convection and Size Segregation in Powder Bed Fusion“. In: *Powder Technology* 394 (2021), S. 632–644. DOI: 10.1016/j.powtec.2021.08.058.
- [36] W. Nan und M. Ghadiri. „Numerical Simulation of Powder Flow during Spreading in Additive Manufacturing“. In: *Powder Technology* 342 (2019), S. 801–807. DOI: 10.1016/j.powtec.2018.10.056.
- [37] C. Körner, A. Bauereiß und E. Attar. „Fundamental Consolidation Mechanisms during Selective Beam Melting of Powders“. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 21.8 (2013), S. 085011. DOI: 10.1088/0965-0393/21/8/085011.
- [38] S. A. Khairallah, A. T. Anderson, A. Rubenchik und W. E. King. „Laser Powder-Bed Fusion Additive Manufacturing: Physics of Complex Melt Flow and Formation Mechanisms of Pores, Spatter, and Denudation Zones“. In: *Acta Materialia* 108 (2016), S. 36–45. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.02.014.

- 
- [39] M. Bayat, A. Thanki, S. Mohanty, A. Witvrouw, S. Yang, J. Thorborg, N. S. Tiedje und J. H. Hattel. „Keyhole-Induced Porosities in Laser-based Powder Bed Fusion (L-PBF) of Ti6Al4V: High-fidelity Modelling and Experimental Validation“. In: *Additive Manufacturing* 30 (2019), S. 100835. doi: 10.1016/j.addma.2019.100835.
- [40] J. Liu und P. Wen. „Metal Vaporization and Its Influence during Laser Powder Bed Fusion Process“. In: *Materials & Design* 215 (2022), S. 110505. doi: 10.1016/j.matdes.2022.110505.
- [41] L. Cao. „Mesoscopic-Scale Simulation of Pore Evolution during Laser Powder Bed Fusion Process“. In: *Computational Materials Science* 179 (2020), S. 109686. doi: 10.1016/j.commatsci.2020.109686.
- [42] C. Wu, M. Q. Zafar, H. Zhao, Y. Wang, C. Schöler, C. Heinigk, M. Nießen und W. Schulz. „Multi-Physics Modeling of Side Roughness Generation Mechanisms in Powder Bed Fusion“. In: *Additive Manufacturing* 47 (2021), S. 102274. doi: 10.1016/j.addma.2021.102274.
- [43] M. Zheng, L. Wei, J. Chen, Q. Zhang, C. Zhong, X. Lin und W. Huang. „A Novel Method for the Molten Pool and Porosity Formation Modelling in Selective Laser Melting“. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 140 (2019), S. 1091–1105. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.06.038.
- [44] A. Zakirov, S. Belousov, M. Bogdanova, B. Korneev, A. Stepanov, A. Perepelkina, V. Levchenko, A. Meshkov und B. Potapkin. „Predictive Modeling of Laser and Electron Beam Powder Bed Fusion Additive Manufacturing of Metals at the Mesoscale“. In: *Additive Manufacturing* 35 (2020), S. 101236. doi: 10.1016/j.addma.2020.101236.
- [45] Y. Lin, C. Lüthi, M. Afrasiabi und M. Bambach. „Enhanced Heat Source Modeling in Particle-Based Laser Manufacturing Simulations with Ray Tracing“. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 214 (2023), S. 124378. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124378.
- [46] M. Afrasiabi, C. Lüthi, M. Bambach und K. Wegener. „Multi-Resolution SPH Simulation of a Laser Powder Bed Fusion Additive Manufacturing Process“. In: *Applied Sciences* 11.7 (2021), S. 2962. doi: 10.3390/app11072962.
- [47] Y. Yang, M. Allen, T. London und V. Oancea. „Residual Strain Predictions for a Powder Bed Fusion Inconel 625 Single Cantilever Part“. In: *Integrating Materials and Manufacturing Innovation* 8.3 (2019), S. 294–304. doi: 10.1007/s40192-019-00144-5.
- [48] M. Carraturo, J. Jomo, S. Kollmannsberger, A. Reali, F. Auricchio und E. Rank. „Modeling and Experimental Validation of an Immersed Thermo-Mechanical Part-Scale Analysis for Laser Powder Bed Fusion Processes“. In: *Additive Manufacturing* 36 (2020), S. 101498. doi: 10.1016/j.addma.2020.101498.
-

- [49] M. I. Al Hamahmy und I. Deiab. „Review and Analysis of Heat Source Models for Additive Manufacturing“. In: *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology* 106.3-4 (2020), S. 1223–1238. doi: 10.1007/s00170-019-04371-0.
- [50] H. Hu und S. A. Argyropoulos. „Mathematical Modelling of Solidification and Melting: A Review“. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 4.4 (1996), S. 371–396. doi: 10.1088/0965-0393/4/4/004.
- [51] A. M. Kamara, W. Wang, S. Marimuthu und L. Li. „Modelling of the Melt Pool Geometry in the Laser Deposition of Nickel Alloys Using the Anisotropic Enhanced Thermal Conductivity Approach“. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture* 225.1 (2011), S. 87–99. doi: 10.1177/09544054JEM2129.
- [52] W. Huang und Y. Zhang. „Finite Element Simulation of Thermal Behavior in Single-Track Multiple-Layers Thin Wall without-Support during Selective Laser Melting“. In: *Journal of Manufacturing Processes* 42 (2019), S. 139–148. doi: 10.1016/j.jmapro.2019.04.019.
- [53] Y. Li und D. Gu. „Thermal Behavior during Selective Laser Melting of Commercially Pure Titanium Powder: Numerical Simulation and Experimental Study“. In: *Additive Manufacturing* 1–4 (2014), S. 99–109. doi: 10.1016/j.addma.2014.09.001.
- [54] Y. Liu, J. Zhang und Z. Pang. „Numerical and Experimental Investigation into the Subsequent Thermal Cycling during Selective Laser Melting of Multi-Layer 316L Stainless Steel“. In: *Optics & Laser Technology* 98 (2018), S. 23–32. doi: 10.1016/j.optlastec.2017.07.034.
- [55] C. Chan, J. Mazumder und M. M. Chen. „An Axis-Symmetry Model for Convection in a Laser Melted Pool“. In: *Laser Processing of Materials* (1984), S. 3–16.
- [56] A. Foroozmehr, M. Badrossamay, E. Foroozmehr und S. Golabi. „Finite Element Simulation of Selective Laser Melting Process Considering Optical Penetration Depth of Laser in Powder Bed“. In: *Materials & Design* 89 (2016), S. 255–263. doi: 10.1016/j.matdes.2015.10.002.
- [57] A. V. Gusarov, I. Yadroitsev, Ph. Bertrand und I. Smurov. „Model of Radiation and Heat Transfer in Laser-Powder Interaction Zone at Selective Laser Melting“. In: *Journal of Heat Transfer* 131.7 (2009), S. 072101. doi: 10.1115/1.3109245.
- [58] F. Verhaeghe, T. Craeghs, J. Heulens und L. Pandelaers. „A Pragmatic Model for Selective Laser Melting with Evaporation“. In: *Acta Materialia* 57.20 (2009), S. 6006–6012. doi: 10.1016/j.actamat.2009.08.027.
- [59] R. Ganeriwala, M. Strantz, W. King, B. Clausen, T. Phan, L. Levine, D. Brown und N. Hodge. „Evaluation of a Thermomechanical Model for Prediction of Residual Stress during Laser Powder Bed Fusion of Ti-6Al-4V“. In: *Additive Manufacturing* 27 (2019), S. 489–502. doi: 10.1016/j.addma.2019.03.034.

- 
- [60] M. Strantz, R. Ganeriwala, B. Clausen, T. Phan, L. Levine, D. Pagan, W. King, N. Hodge und D. Brown. „Coupled Experimental and Computational Study of Residual Stresses in Additively Manufactured Ti-6Al-4V Components“. In: *Materials Letters* 231 (2018), S. 221–224. doi: 10.1016/j.matlet.2018.07.141.
- [61] N. Hodge, R. Ferencz und R. Vignes. „Experimental Comparison of Residual Stresses for a Thermomechanical Model for the Simulation of Selective Laser Melting“. In: *Additive Manufacturing* 12 (2016), S. 159–168. doi: 10.1016/j.addma.2016.05.011.
- [62] T. Q. Phan, M. Strantz, M. R. Hill, T. H. Gnaupel-Herold, J. Heigel, C. R. D’Elia, A. T. DeWald, B. Clausen, D. C. Pagan, J. Y. Peter Ko, D. W. Brown und L. E. Levine. „Elastic Residual Strain and Stress Measurements and Corresponding Part Deflections of 3D Additive Manufacturing Builds of IN625 AM-Bench Artifacts Using Neutron Diffraction, Synchrotron X-Ray Diffraction, and Contour Method“. In: *Integrating Materials and Manufacturing Innovation* 8.3 (2019), S. 318–334. doi: 10.1007/s40192-019-00149-0.
- [63] H. O. Psihoyos und G. N. Lampeas. „Efficient Thermomechanical Modelling of Laser Powder Bed Fusion Additive Manufacturing Process with Emphasis on Parts Residual Stress Fields“. In: *AIMS Materials Science* 9.3 (2022), S. 455–480. doi: 10.3934/matricsci.2022027.
- [64] J. Thorborg, P. Esser und M. Bayat. „Thermomechanical Modeling of Additively Manufactured Structural Parts - Different Approaches on the Macroscale“. In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 861.1 (2020), S. 012008. doi: 10.1088/1757-899X/861/1/012008.
- [65] M. Bayat, C. G. Klingaa, S. Mohanty, D. De Baere, J. Thorborg, N. S. Tiedje und J. H. Hattel. „Part-Scale Thermo-Mechanical Modelling of Distortions in Laser Powder Bed Fusion – Analysis of the Sequential Flash Heating Method with Experimental Validation“. In: *Additive Manufacturing* 36 (2020), S. 101508. doi: 10.1016/j.addma.2020.101508.
- [66] N. Ma, K. Nakacho, T. Ohta, N. Ogawa, A. Maekawa, H. Huang und H. Murakawa. „Inherent Strain Method for Residual Stress Measurement and Welding Distortion Prediction“. In: *Volume 9: Prof. Norman Jones Honoring Symposium on Impact Engineering; Prof. Yukio Ueda Honoring Symposium on Idealized Nonlinear Mechanics for Welding and Strength of Structures*. ASME 2016 35th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering. Busan, South Korea: American Society of Mechanical Engineers, 2016, V009T13A001. doi: 10.1115/OMAE2016-54184.
- [67] M. Mozaffar, E. Ndip-Agbor, S. Lin, G. J. Wagner, K. Ehmann und J. Cao. „Acceleration Strategies for Explicit Finite Element Analysis of Metal Powder-Based Additive Manufacturing Processes Using Graphical Processing Units“.
-

- In: *Computational Mechanics* 64.3 (2019), S. 879–894. DOI: 10.1007/s00466-019-01685-4.
- [68] F. Dugast, P. Apostolou, A. Fernandez, W. Dong, Q. Chen, S. Strayer, R. Wicker und A. C. To. „Part-Scale Thermal Process Modeling for Laser Powder Bed Fusion with Matrix-Free Method and GPU Computing“. In: *Additive Manufacturing* 37 (2021), S. 101732. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101732.
  - [69] A. N. Langville und C. D. Meyer. *Google’s PageRank and beyond: The Science of Search Engine Rankings*. Princeton, N.J: Princeton University Press, 2006.
  - [70] B. C. Prabhune und K. Suresh. „A Fast Matrix-Free Elasto-Plastic Solver for Predicting Residual Stresses in Additive Manufacturing“. In: *Computer-Aided Design* 123 (2020), S. 102829. DOI: 10.1016/j.cad.2020.102829.
  - [71] S. Liao, A. Golgoon, M. Mozaffar und J. Cao. „Efficient GPU-accelerated Thermo-mechanical Solver for Residual Stress Prediction in Additive Manufacturing“. In: *Computational Mechanics* 71.5 (2023), S. 879–893. DOI: 10.1007/s00466-023-02273-3.
  - [72] J. Weirather, V. Rozov, M. Wille, P. Schuler, C. Seidel, N. A. Adams und M. F. Zaeh. „A Smoothed Particle Hydrodynamics Model for Laser Beam Melting of Ni-based Alloy 718“. In: *Computers & Mathematics with Applications* 78.7 (2019), S. 2377–2394. DOI: 10.1016/j.camwa.2018.10.020.
  - [73] J.-P. Fürstenau, H. Wessels, C. Weißenfels und P. Wriggers. „Generating Virtual Process Maps of SLM Using Powder-Scale SPH Simulations“. In: *Computational Particle Mechanics* 7.4 (2020), S. 655–677. DOI: 10.1007/s40571-019-00296-3.
  - [74] M. Afrasiabi, C. Lüthi, M. Bambach und K. Wegener. „Smoothed Particle Hydrodynamics Modeling of the Multi-layer Laser Powder Bed Fusion Process“. In: *Procedia CIRP* 107 (2022), S. 276–282. DOI: 10.1016/j.procir.2022.04.045.
  - [75] F. P. Incropera und F. P. Incropera, Hrsg. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 6th ed. Hoboken, NJ: John Wiley, 2007. 997 S.
  - [76] H. D. Baehr und S. Kabelac. *Thermodynamik*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016. DOI: 10.1007/978-3-662-49568-1.
  - [77] H. D. Baehr und K. Stephan. *Wärme- und Stoffübertragung*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2019. DOI: 10.1007/978-3-662-58441-5.
  - [78] Y. Zhao, Y. Koizumi, K. Aoyagi, K. Yamanaka und A. Chiba. „Thermal Properties of Powder Beds in Energy Absorption and Heat Transfer during Additive Manufacturing with Electron Beam“. In: *Powder Technology* 381 (2021), S. 44–54. DOI: 10.1016/j.powtec.2020.11.082.
  - [79] S. S. Sih. „The Prediction of the Thermal Conductivity of Powders“. In: (1995).

- 
- [80] N. Wakao und K. Kato. „Effective Thermal Conductivity of Packed Beds“. In: *Journal of Chemical Engineering of Japan* 2.1 (1969), S. 24–33. doi: 10.1252/jcej.2.24.
- [81] M. Liu, L. N. Chiu, H. Shen, X. Fang, Z. Tao, A. Huang, C. Davies, X. Wu und W. Yan. „Effective Thermal Conductivities of Metal Powders for Additive Manufacturing“. In: *Powder Technology* 401 (2022), S. 117323. doi: 10.1016/j.powtec.2022.117323.
- [82] Z. Zhang, Y. Huang, A. Rani Kasinathan, S. Imani Shahabad, U. Ali, Y. Mahmoodkhani und E. Toyserkani. „3-Dimensional Heat Transfer Modeling for Laser Powder-Bed Fusion Additive Manufacturing with Volumetric Heat Sources Based on Varied Thermal Conductivity and Absorptivity“. In: *Optics & Laser Technology* 109 (2019), S. 297–312. doi: 10.1016/j.optlastec.2018.08.012.
- [83] C. Burkhardt, P. Steinmann und J. Mergheim. „Thermo-Mechanical Simulations of Powder Bed Fusion Processes: Accuracy and Efficiency“. In: *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences* 9.1 (2022), S. 18. doi: 10.1186/s40323-022-00230-y.
- [84] V. Pavelic. „Experimental and Computed Temperature Histories in Gas Tungsten Arc Welding of Thin Plates“. In: *Welding Journal Research Supplement* 48 (1969), S. 296–305.
- [85] H. D. Hibbitt und P. V. Maikal. „A Numerical, Thermo-mechanical Model for the Welding and Subsequent Loading of a Fabricated Structure“. In: (1973).
- [86] J. Goldak, A. Chakravarti und M. Bibby. „A New Finite Element Model for Welding Heat Sources“. In: *Metallurgical Transactions B* 15.2 (1984), S. 299–305. doi: 10.1007/BF02667333.
- [87] A. K. Mishra, A. Aggarwal, A. Kumar und N. Sinha. „Identification of a Suitable Volumetric Heat Source for Modelling of Selective Laser Melting of Ti6Al4V Powder Using Numerical and Experimental Validation Approach“. In: *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology* 99.9-12 (2018), S. 2257–2270. doi: 10.1007/s00170-018-2631-4.
- [88] Y. Zhang, C.-A. Gandin und M. Bellet. „Finite Element Modeling of Powder Bed Fusion at Part Scale by a Super-Layer Deposition Method Based on Level Set and Mesh Adaptation“. In: *Journal of Manufacturing Science and Engineering* 144.5 (2022), S. 051001. doi: 10.1115/1.4052386.
- [89] M. Gouge, E. Denlinger, J. Irwin, C. Li und P. Michaleris. „Experimental Validation of Thermo-Mechanical Part-Scale Modeling for Laser Powder Bed Fusion Processes“. In: *Additive Manufacturing* 29 (2019), S. 100771. doi: 10.1016/j.addma.2019.06.022.
- [90] E. A. de Souza Neto, D. Perić und D. R. J. Owen. *Computational Methods for Plasticity: Theory and Applications*. 1. Aufl. Wiley, 2008. doi: 10.1002/9780470694626.
-

- [91] H. Altenbach. *Kontinuumsmechanik: Einführung in die materialunabhängigen und materialabhängigen Gleichungen*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2018. DOI: 10.1007/978-3-662-57504-8.
- [92] C. Mittelstedt. *Flächentragwerke: Scheiben, Platten, Schalen, geschichtete Strukturen*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2022. DOI: 10.1007/978-3-662-65613-6.
- [93] D. Gross, W. Hauger und P. Wriggers. *Technische Mechanik 4: Hydromechanik, Elemente der Höheren Mechanik, Numerische Methoden*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2023. DOI: 10.1007/978-3-662-66524-4.
- [94] W. Rust. *Nichtlineare Finite-Elemente-Berechnungen*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2016. DOI: 10.1007/978-3-658-13378-8.
- [95] D. Gross, W. Hauger, J. Schröder und W. A. Wall. *Technische Mechanik 2*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2017. DOI: 10.1007/978-3-662-53679-7.
- [96] R. Cattaneo, G. Natale, C. Sicignano, D. Sciuto und M. D. Santambrogio. „On How to Accelerate Iterative Stencil Loops: A Scalable Streaming-Based Approach“. In: *ACM Transactions on Architecture and Code Optimization* 12.4 (2016), S. 1–26. DOI: 10.1145/2842615.
- [97] G. D. Smith. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. 3rd ed. Oxford Applied Mathematics and Computing Science Series. Oxford [Oxfordshire] : New York: Clarendon Press ; Oxford University Press, 1985. 337 S.
- [98] S. Mazumder. *Numerical Methods for Partial Differential Equations: Finite Difference and Finite Volume Methods*. Amsterdam Boston Heidelberg London: Elsevier, AP, 2016. 461 S.
- [99] J. W. Thomas. *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Bearb. von J. E. Marsden, L. Sirovich, M. Golubitsky und W. Jäger. Bd. 22. Texts in Applied Mathematics. New York, NY: Springer New York, 1995. DOI: 10.1007/978-1-4899-7278-1.
- [100] G. Strang. *Computational Science and Engineering*. Second printing. Wellesley, Mass: Wellesley-Cambridge Press, 2012. 735 S.
- [101] F. H. Harlow und J. E. Welch. „Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface“. In: *The Physics of Fluids* 8.12 (1965), S. 2182–2189. DOI: 10.1063/1.1761178.
- [102] G. Roth, J. Mellor-Crummey, K. Kennedy und R. G. Brickner. „Compiling Stencils in High Performance Fortran“. In: *Proceedings of the 1997 ACM/IEEE Conference on Supercomputing (CDROM) - Supercomputing '97*. The 1997 ACM/IEEE Conference. San Jose, CA: ACM Press, 1997, S. 1–20. DOI: 10.1145/509593.509605.

- 
- [103] J. R. H. Otter, A. C. Cassell, R. E. Hobbs und Poisson. „Dynamic Relaxation“. In: *Proceedings of the Institution of Civil Engineers* 35.4 (1966), S. 633–656. doi: 10.1680/iicep.1966.8604.
- [104] J. Otter. „Computations for Prestressed Concrete Reactor Pressure Vessels Using Dynamic Relaxation“. In: *Nuclear Structural Engineering* 1.1 (1965), S. 61–75. doi: 10.1016/0369-5816(65)90097-9.
- [105] L. Räss, I. Utkin, T. Duretz, S. Omlin und Y. Y. Podladchikov. „Assessing the Robustness and Scalability of the Accelerated Pseudo-Transient Method“. In: *Geoscientific Model Development* 15.14 (2022), S. 5757–5786. doi: 10.5194/gmd-15-5757-2022.
- [106] J. C. Strikwerda. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. 2. ed. Philadelphia, Pa: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2004. 435 S.
- [107] R. Courant, K. Friedrichs und H. Lewy. „Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik“. In: *Mathematische Annalen* 100.1 (1928), S. 32–74. doi: 10.1007/BF01448839.
- [108] M. Peters und C. Leyens, Hrsg. *Titan Und Titanlegierungen*. 1. Aufl. Wiley, 2002. doi: 10.1002/9783527611089.
- [109] I. Inagaki, Y. Shirai, T. Takechi und N. Ariyasu. „Application and Features of Titanium for the Aerospace Industry“. In: 106 (2014).
- [110] M. Isaka, A. Kawakami, H. Takebe und K. Takahashi. „Applications of Titanium for the Automotive Sector“. In: 128 (2022).
- [111] M. Geetha, A. Singh, R. Asokamani und A. Gogia. „Ti Based Biomaterials, the Ultimate Choice for Orthopaedic Implants – A Review“. In: *Progress in Materials Science* 54.3 (2009), S. 397–425. doi: 10.1016/j.pmatsci.2008.06.004.
- [112] M. A. De La Garza-Ramos, F. H. Estupiñan-Lopez, C. Gaona-Tiburcio, L. G. Beltrán-Novelo, P. Zambrano-Robledo, J. Cabral-Miramontes und F. Almeraya-Calderón. „Electrochemical Behavior of Ti6Al4V Alloy Used in Dental Implants Immersed in Streptococcus Gordonii and Fusobacterium Nucleatum Solutions“. In: *Materials* 13.18 (2020), S. 4185. doi: 10.3390/ma13184185.
- [113] K. Bartsch, D. Herzog, B. Bossen und C. Emmelmann. „Material Modeling of Ti–6Al–4V Alloy Processed by Laser Powder Bed Fusion for Application in Macro-Scale Process Simulation“. In: *Materials Science and Engineering: A* 814 (2021), S. 141237. doi: 10.1016/j.msea.2021.141237.
- [114] P. Tan, F. Shen, B. Li und K. Zhou. „A Thermo-Metallurgical-Mechanical Model for Selective Laser Melting of Ti6Al4V“. In: *Materials & Design* 168 (2019), S. 107642. doi: 10.1016/j.matdes.2019.107642.
-

- [115] M. Y. Kayacan, N. Yilmaz und A. Özsoy. „Experimental Determination of Thermal Emissivities for Ti6Al4V in SLM Method“. In: *Journal of Additive Manufacturing Technologies* (2021), 494 Pages. DOI: 10.18416/JAMTECH.2111494.
- [116] T. R. Kramer, F. M. Proctor und E. Messina. „The NIST RS274NGC Interpreter - Version 3“. In: (2000).
- [117] Autodesk. *Netfabb-Funktionen | Funktionen von 2024, 2023, 2022 | Autodesk*. 2024. URL: <https://www.autodesk.de/products/netfabb/features> (besucht am 24.03.2024).
- [118] Autodesk. *Help | LSR File Format Reference | Autodesk*. 2024. URL: <https://help.autodesk.com/view/NETF/2024/ENU/?guid=GUID-E8963B6F-EE19-4CDA-B6DD-F4A91A2F00A6> (besucht am 24.03.2024).
- [119] J. E. Bresenham. „Algorithm for Computer Control of a Digital Plotter“. In: *IBM Systems Journal* 4.1 (1965), S. 25–30. DOI: 10.1147/sj.41.0025.
- [120] Thingiverse.com. *Centrifugal Impeller / Turbine / Compressor by Bijibijmak*. Thingiverse. 2014. URL: <https://www.thingiverse.com/thing:590416> (besucht am 18.08.2024).
- [121] S. Omlin und L. Räss. *High-Performance xPU Stencil Computations in Julia*. 2022. arXiv: 2211.15634 [physics]. URL: <http://arxiv.org/abs/2211.15634> (besucht am 05.02.2024). Vorveröffentlichung.
- [122] NVIDIA. *NVIDIA Quadro RTX 6000 24GB PCIe 3.0*. <https://www.nvidia.com/>. 2024. URL: <https://www.grafikkarten.com/de/grafikkarten/nvidia/rtx-series/nvidia-quadro-rtx-6000-24gb-pcie-3.0> (besucht am 05.07.2024).
- [123] M. A. Buhairi, F. M. Foudzi, F. I. Jamhari, A. B. Sulong, N. A. M. Radzuan, N. Muhamad, I. F. Mohamed, A. H. Azman, W. S. W. Harun und M. S. H. Al-Furjan. „Review on Volumetric Energy Density: Influence on Morphology and Mechanical Properties of Ti6Al4V Manufactured via Laser Powder Bed Fusion“. In: *Progress in Additive Manufacturing* 8.2 (2023), S. 265–283. DOI: 10.1007/s40964-022-00328-0.
- [124] C. Kloss, C. Goniva, A. Hager, S. Amberger und S. Pirker. „Models, Algorithms and Validation for Opensource DEM and CFD-DEM“. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal* 12.2/3 (2012), S. 140. DOI: 10.1504/PCFD.2012.047457.
- [125] S. Haeri, Y. Wang, O. Ghita und J. Sun. „Discrete Element Simulation and Experimental Study of Powder Spreading Process in Additive Manufacturing“. In: *Powder Technology* 306 (2017), S. 45–54. DOI: 10.1016/j.powtec.2016.11.002.
- [126] D. S. Balint und J. W. Hutchinson. „Mode II Edge Delamination of Compressed Thin Films“. In: *Journal of Applied Mechanics* 68.5 (2001), S. 725–730. DOI: 10.1115/1.1388012.

- 
- [127] S. Tarasovs und J. Andersons. „Competition between the Buckling-Driven Delamination and Wrinkling in Compressed Thin Coatings“. In: *Microelectronics Reliability* 52.1 (2012), S. 296–299. DOI: 10.1016/j.microrel.2011.08.007.
- [128] M. Strantza, B. Vrancken, M. Prime, C. Truman, M. Rombouts, D. Brown, P. Guillaume und D. Van Hemelrijck. „Directional and Oscillating Residual Stress on the Mesoscale in Additively Manufactured Ti-6Al-4V“. In: *Acta Materialia* 168 (2019), S. 299–308. DOI: 10.1016/j.actamat.2019.01.050.
- [129] M. Carraturo, A. Viguerie, A. Reali und F. Auricchio. „Two-Level Method Part-Scale Thermal Analysis of Laser Powder Bed Fusion Additive Manufacturing“. In: *Engineering with Computers* 38.6 (2022), S. 4815–4828. DOI: 10.1007/s00366-022-01669-8.
- [130] S. Siemens. *NX-Software | Siemens Software*. Siemens Digital Industries Software. 2024. URL: <https://plm.sw.siemens.com/de-DE/nx/> (besucht am 25.03.2024).
- [131] J. Schöberl. „NETGEN An Advancing Front 2D/3D-mesh Generator Based on Abstract Rules“. In: *Computing and Visualization in Science* 1.1 (1997), S. 41–52. DOI: 10.1007/s007910050004.



# A | Anhang

## A.1 Verifikation des thermo-mechanischen Modells

Die Verifikation des entwickelten thermo-mechanischen Modells spielt eine zentrale Rolle, um die Korrektheit des zugrundeliegenden Verfahrens sowie die korrekte Implementierung, insbesondere der elasto-plastischen Berechnung mittels dynamischer Relaxation, zu überprüfen. Da keine analytische Lösung verfügbar ist, erfolgt die Verifizierung des thermo-mechanischen Modells anhand einer Netzkonvergenzstudie und einer FEM-Vergleichsberechnung. Dazu wird im Inneren eines Würfels eine ortsabhängige Temperaturüberhöhung aufgebracht. Die resultierenden Dehnungen und Spannungen werden anschließend mit den Ergebnissen einer identischen Simulation verglichen, die mit dem kommerziellen FEM-Programm ABAQUS (Version 2022) durchgeführt wurde.

Das folgende Modell eines Würfels, wie in Abbildung A.1 illustriert, soll die Funktionsweise des Verfahrens sowie die korrekte Implementierung der Gleichungen veranschaulichen. Der Würfel ist an seiner Unterseite fest fixiert ( $\mathbf{u}(x, y, z = 0) = \mathbf{0}$ ), alle übrigen Flächen des Würfels repräsentieren einen freien Spannungsrand ( $\sigma \mathbf{n} = \mathbf{0}$ ). Die in diesem Modell verwendeten Materialparameter sind in Tabelle A.1 aufgeführt und wurden von der Legierung Ti6Al4V abgeleitet. Für das Modell wurde angenommen, dass sie temperaturunabhängig sind. Das Temperaturfeld

$$\Delta T = 2750 \exp - \frac{\left(x - \frac{L}{2}\right)^2 + \left(y - \frac{L}{2}\right)^2 + \left(z - \frac{L}{2}\right)^2}{(0.25L)^2} \text{ K} \quad (\text{A.1})$$

wurde über 20 Teilschritte aufgebracht, und die Parameter  $\|\dot{u}\|_{R, \max} = 1 \times 10^{-9} \text{ m s}^{-1}$  und eine Maximal-Anzahl von 10000 Iterationen definiert. Um möglichst genaue Ergebnisse zu erzielen wurde dann ein letzter Schritt mit  $\|\dot{u}\|_{R, \max} = 1 \times 10^{-17} \text{ m s}^{-1}$  und eine Maximal-Anzahl von 50000 Iterationen festgelegt und die Berechnung durchgeführt.

Tabelle A.1: Verwendete Materialparameter des thermo-mechanischen Modells [113].

| $E$       | $\nu$ | $\rho$                   | $\sigma_0$ | $\alpha_{\text{therm}}$                  |
|-----------|-------|--------------------------|------------|------------------------------------------|
| 114.0 GPa | 0.3   | 4420.0 kg/m <sup>3</sup> | 1.1 GPa    | 12.0 $\mu\text{m m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ |

Die folgenden Plots in Abbildung A.2 zeigen die Spannungskomponenten  $\sigma_{xx}, \sigma_{zz}$  sowie die von MISES-Vergleichsspannung  $\sigma_{\text{VM}}$  im Punkt  $x, y = 0$  über der Würfelhöhe

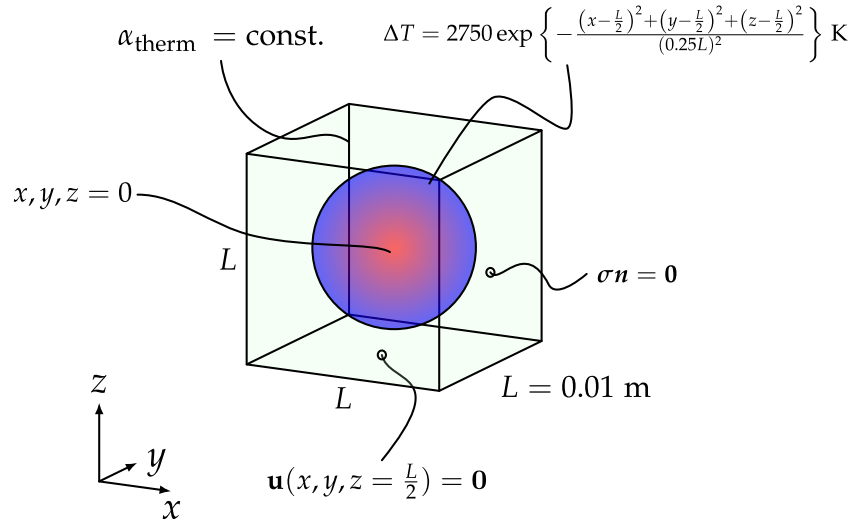


Abbildung A.1: Modell zur Verifizierung des thermo-mechanischen Modells.

entlang der  $z$ -Achse für die verschiedenen Gitter mit  $N = \{25, 50, 100\}$  Knoten pro Würfelkante; beginnend mit der kleinsten Auflösung in der ersten Reihe. Offene Kreise in Abbildung A.2 repräsentieren die Lösungen des entwickelten thermo-mechanischen Modells, durchgezogene Linien die Lösungen der FEM-Berechnung mit ABAQUS.

Für alle betrachteten Größen ist eine hohe Übereinstimmung zwischen dem entwickelten thermo-mechanischen Modell und der FEM-Berechnung von ABAQUS zu beobachten. Jedoch lässt sich ein minimaler Abstand zwischen den offenen Kreisen und den durchgezogenen Linien feststellen, welcher jedoch mit steigender Gitterauflösungen abnimmt. Für eine bessere Analyse wird in Abbildung A.3 die  $L^2$ -Norm zwischen den betrachteten Größen mit dem Zusammenhang

$$L^2 = \sqrt{\sum \left( \frac{\sigma_{\text{FEM}}}{1\text{GPa}} - \frac{\sigma}{1\text{GPa}} \right)^2} \quad (\text{A.2})$$

auf der  $y$ -Achse dargestellt. Die  $L^2$ -Norm zwischen den beiden Lösungen bestätigt die Annäherung der beiden numerischen Methoden zueinander mit höherer Auflösung und deutet darauf hin, dass das implementierte Verfahren die zugrunde liegenden physikalischen Gleichungen korrekt approximiert und sich mit zunehmender Auflösung der FEM-Lösung annähert.

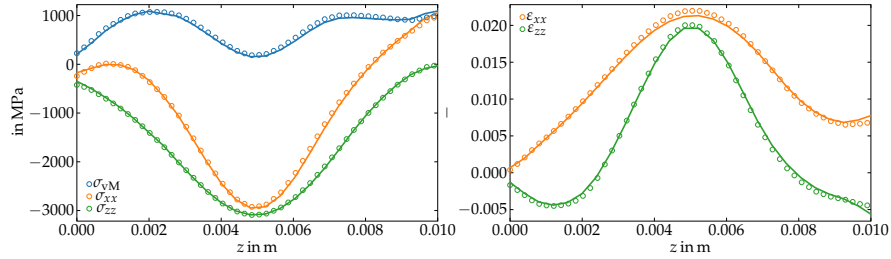
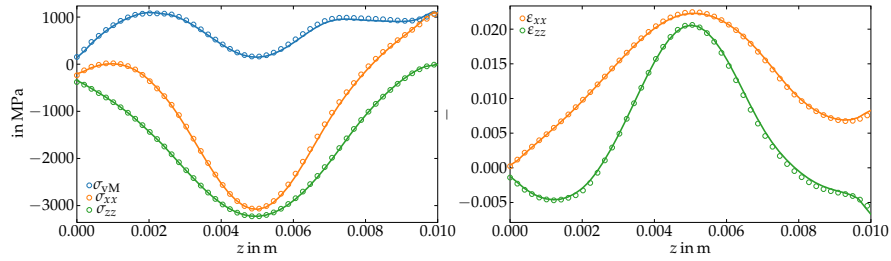
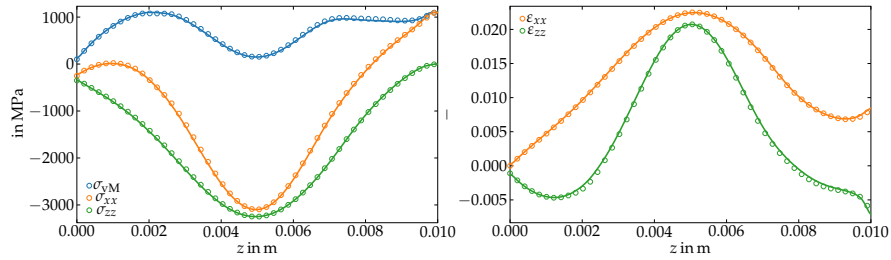

(a)  $N = 25$  Knoten pro Würfelkante

(b)  $N = 50$  Knoten pro Würfelkante

(c)  $N = 100$  Knoten pro Würfelkante

Abbildung A.2: Netzkonvergenzstudie des Würfels mit einer Gitterauflösung zur Verifizierung des thermo-mechanischen Modells; offene Kreise zeigen die Lösungen des entwickelten thermo-mechanischen Modells, durchgezogene Linien die Lösungen der FEM-Berechnung mit ABAQUS für die Größen  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{zz}$  und  $\sigma_{vM}$  (links) sowie  $\epsilon_{xx}$  und  $\epsilon_{zz}$  (rechts).

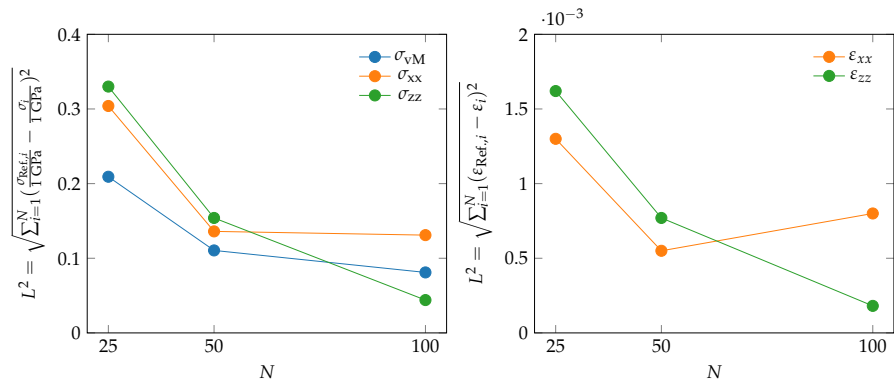


Abbildung A.3:  $L^2$ -Norm der in Abbildung A.2 betrachteten Größen für verschiedene Gitterauflösungen  $N = \{25, 50, 100\}$ .

## A.2 DEM-Simulation des Recoating

Für die Simulation des Recoatings-Prozesses wurde das DEM *Open-Source*-Programm Liggghts [124] verwendet. Die Hauptzielsetzung bestand darin, realistische mehrschichtige Pulverbette für das LPBF-Verfahren zu erzeugen. In diesem Zusammenhang wurde das Kontaktmodell des Hertz-Mindlin-Modells unter Berücksichtigung der Rollreibung sowie der Rolldämpfung angewendet. Die benötigten Geometrien für die Simulation wurden mithilfe von Siemens NX [130] erstellt, und die entsprechenden Oberflächennetze wurden mit dem Programm Netgen [131] generiert. Eine 7 mm-Walze wurde als *Spreader* verwendet, wobei ihre Abmessungen sowie ihre translatorische und Rotationsgeschwindigkeit nach Haeri et al. [125] verwendet wurden. Zur Modellierung des Bodens wurden drei identische statische Böden mit quadratischer Oberseite und einer Kantenlänge von 5 mm erzeugt. Die Höhe dieser Böden wurde so gering wie möglich gewählt, um das Rechengebiet aus Gründen der Simulationseffizienz zu minimieren. Zwischen den statischen Betten wurden zwei flächengleiche zweidimensionale bewegliche Betten eingefügt. Die Grundposition der Geometrie zu Beginn der Simulation ist in Abbildung A.4 dargestellt. Die Laufrichtung der Walze entspricht der y-Achse, und für die x-Achse wurde eine periodische Randbedingung definiert. Die für die Legierung Ti6Al4V verwendeten DEM Simulationsparameter sind in Tabelle 4.3 aufgeführt und die Partikelverteilung wurde wie in Abbildung 4.14 definiert.

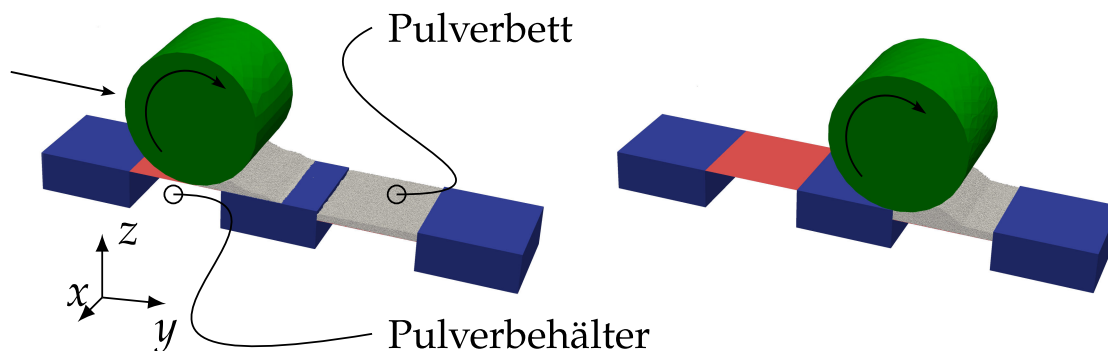
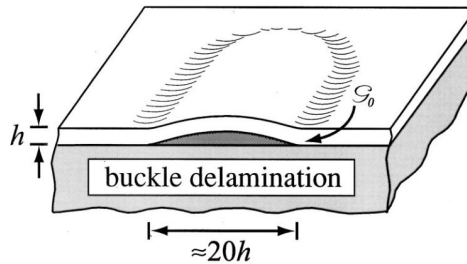


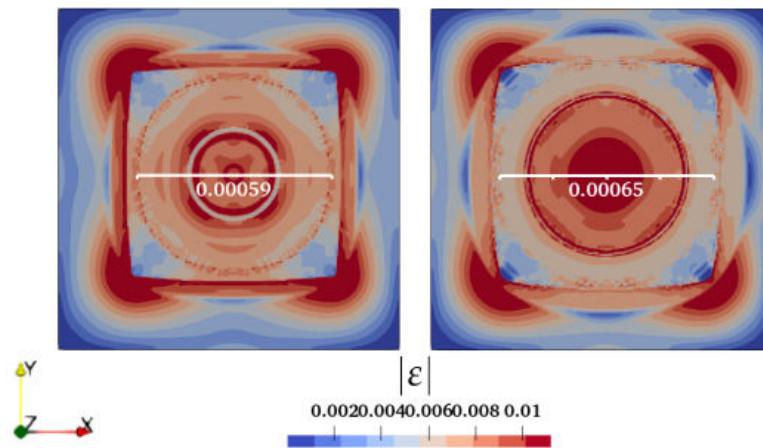
Abbildung A.4: Ausschnitt aus der DEM Simulation: Die Walze (grün) bewegt sich von links nach rechts über statische (blau) und bewegliche (rot) Böden und trägt dabei loses Pulver auf ein bereits bestehendes Pulverbett auf; übersetzt von [10], CC BY 4.0.

### A.3 Beulen-Phänomene: Vergleich mit [126]

Eine besondere Beobachtung bei den Modellen mit der *Layerheating*-Methode bei der *Multitrack* Untersuchung in Abschnitt 5.1 ist die Bildung von kreisförmigen Mustern, die auf das Phänomen des Beulens hinweisen. Dieses Phänomen tritt vor allem bei Dünnschicht-Substrat-Systemen auf und wird durch die ungleiche thermische Ausdehnung sowie erhebliche Steifigkeitsunterschiede zwischen der Schicht und dem Substrat verursacht [126, 127]. Der betroffene Bereich kann mit  $R_B \approx 20 t_{PB}$  abgeschätzt werden [126], was der Größe des äußersten Rings in Abbildung 5.3 entspricht. Abbildung A.5 zeigt die Abschätzung für die *Multitrack* Untersuchung aus Abschnitt 5.1.



(a) Illustration des Beulen-Phänomens aus [126]; nachgedruckt aus Balint und Hutchinson, „Mode II Edge Delamination of Compressed Thin Films“, *Journal of Applied Mechanics*, Band 68, Nr. 5, S. 725–730, © 2001, mit Genehmigung der American Society of Mechanical Engineers (ASME). Nicht Teil der übergeordneten CC-Lizenz.



$$(b) R_B = 20 \times t_{PB} = 20 \times 30 \mu\text{m} = 0.0006 \text{ m}$$

Abbildung A.5: Abschätzung des Beulen-Phänomens für die *Multitrack* Untersuchung aus Abschnitt 5.1.

## A.4 Flussdiagramm des BRESENHAM-Algorithmus

Der BRESENHAM-Algorithmus [119] wird im Folgenden mithilfe eines Flussdiagramms veranschaulicht. Abbildung A.6 zeigt den wesentlichen Ablauf des Algorithmus. Dabei werden verschiedene Variablen verwendet:

- $x_s$  und  $x_e$  repräsentieren den Start- und Endpunkt in x-Richtung
- $y_s$  und  $y_e$  repräsentieren den Start- und Endpunkt in y-Richtung
- $dx$  und  $dy$  repräsentieren die Auflösung in x- bzw. y-Richtung an
- $sx$  und  $sy$  repräsentieren Schrittweite im Gitter
- $E$  repräsentieren den Fehlerterm

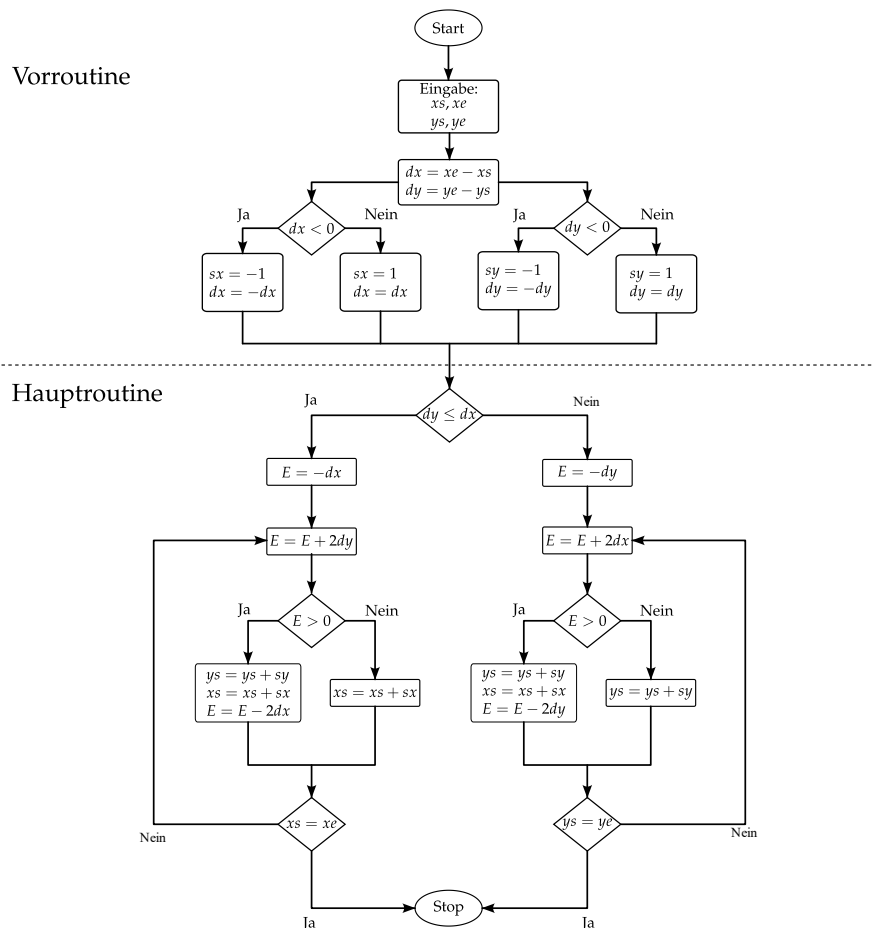


Abbildung A.6: Flussdiagramm zum BRESENHAM-Algorithmus.



# Lebenslauf

Luca Luberto

## Ausbildung

|             |                                                                                                                                  |
|-------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2019 – 2024 | Rheinland-Pfälzische Technische Universität Kaiserslautern-Landau<br>Promotion im Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik |
| 2017 – 2019 | Technische Universität Kaiserslautern<br>Masterstudium Computational Engineering                                                 |
| 2013 – 2017 | Hochschule Kaiserslautern<br>Bachelorstudium Maschinenbau mit Schwerpunkt Simulationstechnik                                     |
| 2010 – 2013 | FESTO AG & Co. KG<br>Ausbildung zum Zerspanungsmechaniker                                                                        |
| 2007 – 2010 | Dr.-Walter-Bruch-Schule für Ingenieurwesen St. Wendel<br>Fachhochschulreife                                                      |

## Berufserfahrung

|             |                                                                                      |
|-------------|--------------------------------------------------------------------------------------|
| 2019 – 2024 | Lehrstuhl für Computational Physics in Engineering<br>Wissenschaftlicher Mitarbeiter |
| 2016 – 2017 | AIRBUS Defence and Space<br>Bachelorarbeit und Pflichtpraktikum                      |
| 2015 – 2017 | Hochschule Kaiserslautern<br>Studentische Hilfskraft im Bereich Strömungstechnik     |

# Computational Physics in Engineering - Berichte CPE

---

## bereits veröffentlicht wurden

- 01/23 Lamping, F.: Vorteile durch die Berücksichtigung der Wechselwirkung von Modellierung und Design bei mehrkammerigen pneumatischen Soft Robots.  
2023, ISBN 978-3-95974-204-7
- 02/24 Sridhar, P.: Physical Modeling of Material Removal in Grinding: Grit-Workpiece Approach and Wheel-Workpiece Approach.  
2024, ISBN 978-3-95974-213-9
- 03/25 Bilz, R.: Analyse und Modellierung tribologischer Drei-Körper-Systeme mit losen, harten Partikeln.  
2025
- 04/25 Luberto, L.: Entwicklung einer thermo-mechanischen Simulation des Laser Powder Bed Fusion Prozesses.  
2025

