

## Verbundvorhaben SAPHIR

### Simulationsmethoden zum additiven Prozessieren von Hochtemperaturlegierungen – Mikrostruktur, In-service- Eigenschaften und Reparatur

#### Abschlussbericht Teilvorhaben: Numerische Kornstruktur- simulation beim additiven Prozessieren von Hochtemperatur- legierungen (FKZ: 03EE5049E)

**M. Markl, Z. Yang, C. Körner**

Erlangen, den 29.11.2024

Projektlaufzeit 01.12.2020 – 31.05.2024

Teilprojektleitung Prof. Dr.-Ing. habil. Carolin Körner  
Lehrstuhl Werkstoffkunde und Technologie der Metalle  
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg  
Martensstr. 5, 91058 Erlangen

Die Verantwortung für  
den Inhalt dieser  
Veröffentlichung liegt  
bei den Autoren.



Gefördert durch:



Bundesministerium  
für Wirtschaft  
und Klimaschutz

aufgrund eines Beschlusses  
des Deutschen Bundestages

## 1. Kurze Darstellung

### 1.1. Aufgabenstellung

Der Lehrstuhl Werkstoffkunde und Technologie der Metalle (WTM) der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) beschäftigt sich intensiv mit pulver- und strahlbasierten additiven Fertigungsmethoden (PBF), insbesondere mit dem selektiven Elektronenstrahlschmelzen (PBF-EB), aber auch mit der Lasertechnologie (PBF-LB). Für diese Prozesse wurde in den letzten Jahren die Software SAMPLE3D (Simulation of Additive Manufacturing on the Powder scale using a Laser or Electron beam) entwickelt, welche speziell für die dreidimensionale Vorhersage der Kornstruktur von Bauteilen konzipiert ist.

Diese Expertise wurde im Projekt SAPHIR eingesetzt werden, um ein tiefgreifendes Verständnis des Zusammenhangs zwischen den Prozesseingangsparametern während der additiven Fertigung und den resultierenden Bauteileigenschaften zu entwickeln. Das übergeordnete Ziel des Teilvorhabens war es, sowohl die beiden additiven Fertigungsprozesse (PBF-EB und PBF-LB), als auch das nachgelagerte Elektronenstrahlschweißen für modular aufgebaute Komponenten zu modellieren und damit eine Vorhersage der Kornstruktur zu ermöglichen. Die Modellierung wurde dabei von Erkenntnissen aus der Mikrostruktursimulation des Verbundpartners ACCESS unterstützt. Die Ergebnisse der Kornstruktursimulation wurden vom Verbundpartner Universität Bayreuth MW anschließend verarbeitet zur Vorhersage der Bauteileigenschaften. Die numerischen Aktivitäten fanden im engen Abgleich mit experimentellen Ergebnissen der Verbundpartner SIEMENS und MTU statt.

### 1.2. Voraussetzungen des Vorhabens

In den letzten Jahren wurde die Software SAMPLE<sup>3D</sup> speziell für die dreidimensionale Vorhersage der Erstarrungsmorphologie für den PBF-EB Prozess entwickelt. Dabei ist die Software in der Lage die erstarrende Kornstruktur auf Basis einer semi-analytischen Lösung der Wärmeleitungsgleichung vom polykristallinen über kolumnaren bis hin zum einkristallinen Gefüge abzubilden. Für die Modellierung des Kornwachstums wird der ‚Decentered Octahedron‘ Algorithmus von Gandin und Rappaz [5] in einem zellularen Automaten genutzt. Während der Erstarrung bestimmt die Unterkühlung und Ausrichtung der wachsenden Körner an der Erstarrungsfront die finale Kornstruktur. Die Wachstumsgeschwindigkeit der Körner ist dabei eine Funktion der Unterkühlung. Die natürliche Kornselektion ist durch das schnellere Wachstum von Körnern mit einer geringeren Fehlorientierung zum Temperaturgradienten implizit integriert. Neukornbildung wird durch ein empirisches Modell der kritischen Keimgröße und der Wahrscheinlichkeit von Fremdkeimen umgesetzt. Für alle kubisch erstarrenden Legierungen kann dadurch sehr exakt die Erstarrungsmorphologie im PBF-EB Prozess numerisch vorhergesagt werden. Die Software wurde bisher für die Nickel-Basis-Legierungen IN718 und CMSX-4 eingesetzt.

### *1.3. Planung und Ablauf*

Die wissenschaftlichen Inhalte des Projekts setzten sich aus zwei Teilbereichen zusammen. In der ersten Phase wurde die Software hinsichtlich Modellierung der Temperatur und der Neukornbildung erweitert. Außerdem wurden zusammen mit dem Verbundpartner SIEMENS passende äquivalente Wärmequellen entwickelt und als Randbedingung in die Software integriert. Abschließend waren Anpassungsmaßnahmen bezüglich Datenstrukturen und Simulationsablauf notwendig, um das Elektronenstrahlschweißen mit einem deutlich größeren flüssigen Schmelzbad abbilden zu können.

In der zweiten Phase wurde die Software für die drei Prozesse (PBF-LB, PBF-EB und Elektronenstrahlschweißen) eingesetzt. Hierbei wurde zunächst in Kooperation mit den Verbundpartnern eine passende Legierung ausgewählt. Anschließend wurden für die Legierung alle notwendigen Materialparameter für die Simulation bestimmt. Vom Verbundpartner SIEMENS wurden weiterhin EBSD Aufnahmen zur Kalibrierung und Validierung der Software für alle drei Prozesse zur Verfügung gestellt.

Alle wissenschaftlichen Inhalte wurden im Einklang mit den ursprünglich beantragten Arbeitspaketen durchgeführt, wobei sich nur kleinere Modifikationen ergaben. Beispielsweise wurden weitere Auswertemethoden der Kornstruktur entwickelt, um neben dem qualitativen Vergleich der EBSD-Bilder auch einen quantitativen Vergleich mit dem Experiment zu ermöglichen

Die Ergebnisse wurden auf zwei internationalen Konferenzen präsentiert und bisher in einem Journalbeitrag veröffentlicht. Zwei weitere Journalbeiträge sind aktuell im internen Reviewprozess und stehen kurz vor der Einreichung.

### *1.4. Wissenschaftlich-technischer Stand*

Die Erweiterungen der Software sind erfolgreich implementiert worden, so dass alle drei Prozesse numerisch simuliert werden konnten. Speziell die Integration der effektiven Wärmequellen ermöglichte es, die Schmelzbadformen sehr gut abbilden zu können.

Da die Software ursprünglich für den PBF-EB Prozess entwickelt wurde, zeigt sich auch für das neue Material eine hervorragende Übereinstimmung der Kornstruktur. Im Wesentlichen ist dies auf die defektfreie Verarbeitung und die grobe stängelkristalline Kornstruktur zurückzuführen. Neukornbildung ist für die gewählten Prozessparameter beim PBF-EB nicht relevant. Deswegen besitzt die Software eine hohe Vorhersagekraft auch für andere Prozessparameter.

Ein anderes Bild zeigen die Ergebnisse des PBF-LB Prozesses. Die Kornstruktur ist hier wesentlich feiner und weist Bereiche mit starker Neukornbildung auf. Da es bisher immer noch keinen wissenschaftlichen Konsens über die dominanten Mechanismen der Neukornbildung in der pulverbettbasierten additiven Fertigung gibt, ist hier eine Kalibrierung der notwendigen Nukleationsparameter unumgänglich. Für eine Sensitivitätsstudie konnten physikalisch realistische Parameter ermittelt werden und eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment

erzielt werden. Dennoch ist die erwartete Vorhersagekraft für größere Prozessparameteränderungen, die den thermischen Haushalt massiv beeinflussen, als eher gering einzuschätzen.

Die Eigenschaften der finalen Kornstruktur aus dem Elektronenstrahlschweißen sind denen aus dem PBF-EB Prozess sehr ähnlich. Es resultiert eine grobe stängelkristalline Kornstruktur, die mit der Software sehr gut vorhersagbar ist. Auch hier ist die Vorhersagekraft der Software als sehr gut einzuschätzen, solange die Prozessparameter nicht zu einer massiven Neukornbildung im Zentrum der Schweißnaht führen.

### **1.5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen**

Es fanden verschiedene Zusammenarbeiten mit anderen Stellen sowohl verbundintern als auch darüber hinaus statt.

#### **1.5.1. Verbundinterne Zusammenarbeit**

Zusammen mit den Verbundpartnern SIEMENS und MTU erfolgte die Materialauswahl für die additiven Fertigungsprozesse. Ebenfalls stellen beide Partner alle notwendigen experimentellen Ergebnisse zum Abgleich der Simulationsergebnisse zur Verfügung. Sowohl die zugrundeliegende Parameterauswahl als auch der Umfang der Probenanalyse fand in Kooperation statt. In Kooperation mit dem Verbundpartner SIEMENS wurden weiterhin effektive Wärmequellen für die drei Fertigungsprozesse PBF-EB, PBF-LB und Elektronenstrahlschweißen entwickelt.

Mit dem Verbundpartner ACCESS wurde die Entstehung der Mikro- und Kornstruktur während der Erstarrung diskutiert. Speziell Dendritenwachstumsgeschwindigkeiten aber auch Nukleationsmechanismen standen im Vordergrund. Daraus abgeleitete Größen, sowie ein Richtwert für die effektive Wärmeleitfähigkeit in der Schmelze wurden ausgetauscht.

Zum Austausch der Simulationsergebnisse zur Kornstruktur wurde mit dem Verbundpartner Universität Bayreuth gemeinsam ein entsprechendes Skript zur Datenaufbereitung entwickelt. Unter der Verwendung dieses Skripts konnten die Kornstrukturen zur Weiterverarbeitung beim Verbundpartner genutzt werden.

Es besteht bei SIEMENS und MTU das Interesse die Software weiter zu verwenden. Damit die Verbundpartner eigenständig in der Lage sind Simulationen durchzuführen, wurde ein Workshop organisiert, der den Verbundpartnern den Umgang mit der Software näherbrachte.

#### **1.5.2. Weitere Zusammenarbeit**

Die Software fand Anwendung im SFB TR 103 Teilprojekt B2, das sich mit der Herstellung einkristalliner Bauteile im PBF-EB Prozess beschäftigt. Hier konnten durch die Erweiterung der Temperaturmodellierung auch zylinderförmige Proben auf die Ausprägung einer einkristallinen Kornstruktur hin untersucht werden. Weiterhin ist eine Zusammenarbeit mit der TU München geplant. Der erste Schritt war die Teilnahme eines wissenschaftlichen Mitarbeiters der TUM am internen Workshop.

## 2. Eingehende Darstellung

### 2.1. Erzielte Ergebnisse

Die aus dem Verfahren der additiven Fertigung resultierenden Werkstoff- und Bauteileigenschaften werden erheblich durch die Korn- und Mikrostruktur bestimmt, welche wiederum maßgeblich durch die beim Fertigungsprozess auftretenden räumlich und zeitlich veränderlichen Temperaturfelder beeinflusst werden. Um letztere möglichst allgemein numerisch simulieren zu können, wurde im Rahmen dieses Teilprojekts die Wärmeleitungsgleichung in einem dreidimensionalen Finite-Differenzen-Solver (3D-FD-Solver) mit Quellterm (Strahlquelle) implementiert. Des Weiteren können Neumann-, Dirichlet-, Strahlungs- und Konvektionsrandbedingungen auf das Simulationsgebiet aufgeprägt werden. Durch eine optionale Gittervergrößerung können Bereiche hoher Temperaturgradienten fein aufgelöst und dabei Rechenkapazität und Rechenzeit ökonomisch genutzt werden. Da die erforderliche Auflösung des Simulationsgebietes teilweise dennoch zu sehr großen Gleichungssystemen führt bzw. viele Zeitschritte nötig sind, wurde der Solver als parallelisierbarer Code programmiert und kann auf dem Rechencluster des Rechenzentrums RRZE der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg parallel auf vielen Rechenknoten ausgeführt werden. Die Materialparameter in den Temperaturfeldsimulationen wurden für den im Projekt untersuchten Werkstoff ABD®-900AM mittels experimentell ermittelter Kennwerte, welche Datenblättern entnommen wurden, angepasst.

### Werkstoffkennwerte

Zu Beginn des Projekts wurden im gesamten Verbund die einzusetzenden Materialien diskutiert. Für die Prozesse PBF-EB, PBF-LB und Elektronenstrahlschweißen in Kooperation mit SIEMENS wurde hier der Werkstoff ABD®-900AM identifiziert. Die wesentlichen Materialkennwerte die für die Simulation notwendig sind, wurden aus dem Materialdatenblatt entnommen [1]. Das ist zum einen die Dichte mit  $\rho = 8395 \text{ kg/m}^3$  und die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda = 27 \text{ W/(mK)}$ . Für beide Größen wird ein konstanter Wert bei Raumtemperatur unter Vernachlässigung der Temperaturabhängigkeit gewählt. Aus den Daten zur spezifischen Wärmekapazität wurde eine Relation zwischen Temperatur und Enthalpie berechnet (siehe Abbildung 1a). Weiterhin kann daraus direkt die Solidus-  $T_S = 1287 \text{ °C}$  und Liquidustemperatur  $T_L = 1362 \text{ °C}$  abgeleitet werden. Da für die Dendriten keine Information über die Wachstumsgeschwindigkeit  $v_{\text{tip}}$  vorliegt, wird hier die Relation für [2] aufgrund der ähnlichen Legierungszusammensetzung gewählt

$$v_{\text{tip}} = 10^{-6}(T - T_L)^{2,8}, \quad (1)$$

mit der Temperatur  $T$ . Die Wachstumsgeschwindigkeit, sowie die Distanz innerhalb von  $10 \text{ }\mu\text{s}$  sind in Abbildung 1b dargestellt.

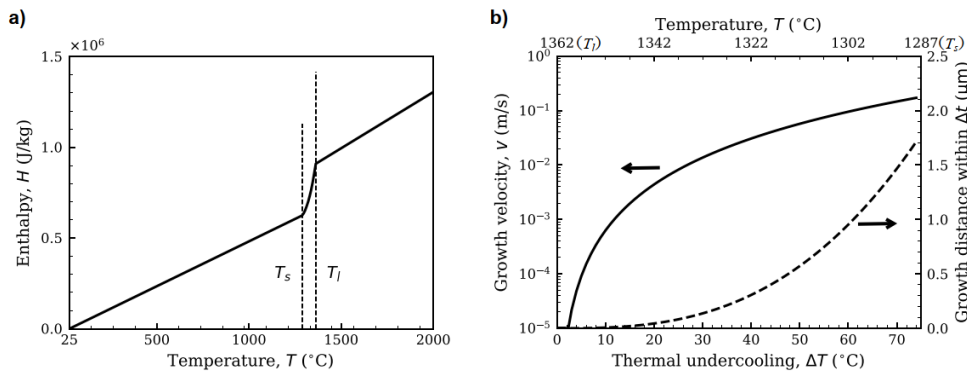


Abbildung 1: a) Enthalpie als Funktion der Temperatur (Raumtemperatur als Referenz). b) Wachstumsgeschwindigkeit der Dendriten sowie Distanz innerhalb von  $10\mu\text{s}$ .

## Temperatursimulation

Die Simulationssoftware SAMPLE3D verfügt zu Beginn des Projekts ausschließlich über eine semi-analytische Lösung der Wärmeleitungsgleichung anhand eines Rosenthal Ansatzes. Dieser Ansatz ist ungeeignet, um zum einen reale Proben- und Bauteilgeometrien und zum anderen die Einkopplung der Laserenergie außerhalb des Wärmeleitungsschweißens abzubilden. Das erste Ziel war es demnach, die Software um ein effizientes und einfaches Modul zur Temperatursimulation zu erweitern.

Das zugrundeliegende thermische Modell approximiert das Pulverbett durch isotropes dichtes Material. Die Wärmeleitungsgleichung mit einer externen Wärmequelle ist

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} \equiv \frac{\partial H(T)}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{\dot{Q}}{\rho}, \quad (2)$$

wobei  $c_p$ ,  $\lambda$  und  $\rho$  die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck, die Wärmeleitfähigkeit und die Dichte des Materials sind. Die weiteren Größen sind die Temperatur  $T$ , die Enthalpie  $H$ , die Zeit  $t$  und die Cartesischen Koordinatenrichtungen  $x$ ,  $y$ , und  $z$ .

Hier ist es wichtig hervorzuheben, dass die Wärmequelle  $\dot{Q}$  durch einen äquivalenten Wärmequellenansatz modelliert wird. Einerseits bietet die Nutzung äquivalenter Wärmequellen den Vorteil, die Herausforderungen zu umgehen, die mit der Bestimmung einiger Parameter, wie dem Strahldurchmesser und der Absorptionstiefe, verbunden sind. Dies erleichtert das schwierige Unterfangen, präzise Messungen für diese Parameter zu erhalten, und vereinfacht den Modellierungsprozess. Weiterhin werden zusätzliche physikalische Effekte, wie Wärmeübertragung und Wärmeverlust durch Verdampfung, implizit bei der Konstruktion der Wärmequelle berücksichtigt. Daher ermöglicht der äquivalente Wärmequellenansatz eine realistischere Darstellung des Temperaturfeldes. Die in dieser Studie verwendete äquivalente Wärmequelle [3] ist schematisch in Abbildung 2 dargestellt und hat die Form eines Kegelstumpfs. Diese Form wird durch den oberen und unteren Radius sowie die Höhe charakterisiert, die durch  $r_t$ ,  $r_b$  und  $d$  dargestellt werden. Eine Energiefläche

$P_z(z)$  wird entlang der vertikalen Achse vom oberen Ende des Kegelstumpfes bis zu einer Tiefe von  $d$  verteilt. Final ist die Wärmequelle des Strahls

$$\dot{Q}(x, y, z) = \begin{cases} (P_z(z)/(\pi r(z)^2)) & z < d \text{ und } r(z)^2 < (x_B - x)^2 + (y_B - y)^2, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (3)$$

wobei  $r(z)$  den Radius des Kegelstumpfs in der Tiefe  $z$  beschreibt. Je nach verwendeter Strahlquelle, wurde eine andere Volumenwärmequelle in Kooperation mit dem Verbundpartner SIEMENS kalibriert und eingesetzt.

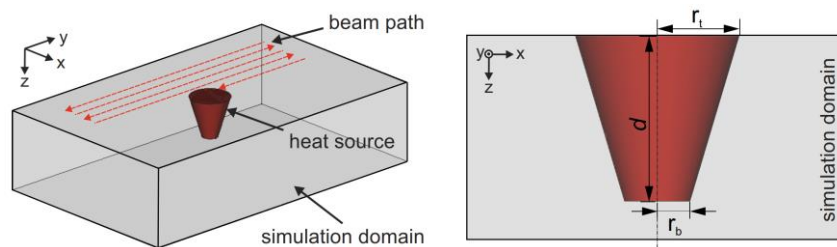


Abbildung 2: Schematische Darstellung der äquivalenten Wärmequelle in Form eines Kegelstumpfes definiert durch die geometrischen Größen (rechts dargestellt), der das Hatchpattern abfährt.

Das Modell wurde mit einem konventionellen forward-time und central-space finite Differenzen Ansatz implementiert. Der Ansatz wurde mit der Enthalpie-Methode [4] gekoppelt, um dem nichtlinearen Verlauf der Temperatur-Enthalpie Relation am Phasenübergang zwischen flüssig und fest gerecht zu werden. Somit wird die Wärmeleitungsgleichung aus Gleichung (2) wie folgt numerisch umgesetzt

$$H_{i,j,k}^{n+1} = H_{i,j,k}^n + \Delta t \cdot \frac{\lambda}{\rho} \left( \frac{T_{i+1,j,k}^n - T_{i-1,j,k}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1,k}^n - T_{i,j-1,k}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j,k+1}^n - T_{i,j,k-1}^n}{\Delta x^2} \right) + \frac{\dot{Q}_{i,j,k}^n}{\rho}, \quad (4)$$

Wobei  $n$  den Zeitschritt,  $i, j, k$  die Position im Gitter und  $\Delta t$  sowie  $\Delta x$  die zugehörigen Zeitschrittweite und Zellgröße angeben. Damit ist die Temperatursimulation in der Lage die pulverbettbasierten Prozesse in hinreichender Genauigkeit für die Kornstruktursimulation abzubilden.

### Kornstruktursimulation

Der Software SAMPLE3D liegt ein Kornstrukturmodell auf Basis des 3D zellulären Automaten (CA) von Gandin et al. [5]. Das Modell wurde im Wesentlichen im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 814 im Teilprojekt C5 entwickelt [6,7,2] und im Verbundprojekt eingesetzt. Im Modell liegt der Fokus nicht darauf, präzise Dendritenformen und andere komplexe Details zu erfassen. Stattdessen werden einzelne Dendriten durch Superpositionen von Oktaedern dargestellt. Oktaeder, die zum gleichen Dendriten gehören, teilen sich die gleiche kristallographische Orientierung, die durch ein Set von Eulerwinkeln charakterisiert wird. Jedes Oktaeder ist mit einer eigenen Simulationszelle gekoppelt, und seine Hauptachsen fallen mit den  $\langle 100 \rangle$ -Wachstumsrichtungen zusammen. Daher ist dieses Modell auf Materialien

beschränkt, bei denen die bevorzugte Wachstumsrichtung der Dendriten die  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung ist. Bisher wurde das Modell hauptsächlich angewendet, um nickelbasierte Superlegierungen zu untersuchen, wie zum Beispiel IN 718 [6], CMSX-4 [7] und in der aktuellen Arbeit ABD-900AM. Diese Legierungen besitzen eine kubisch-flächenzentrierte (FCC) Kristallstruktur und zeigen eine bevorzugte Wachstumsrichtung entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung. Die Wachstumsgeschwindigkeit eines Oktaeders,  $v_{tip}$ , wird durch die lokale Unterkühlung  $\Delta T$  bezüglich der Liquidustemperatur (siehe Gleichung (1)) seiner zugehörigen Zelle bestimmt. Sobald eine Seitenfläche des wachsenden Oktaeders das Zentrum einer benachbarten Zelle erreicht, wird diese Zelle in den Dendriten integriert, und gleichzeitig wird ein neues Oktaeder in dieser Zelle initiiert.

Je nach Prozess und Prozessbedingungen spielt die Keimbildung eine unterschiedliche Rolle und kann entweder vernachlässigt werden oder muss aufwändig kalibriert werden. Die Grundlage des eingesetzten Keimbildungsmodells ist die Beobachtung, dass neue Körner am Boden des Schmelzbads entstehen. Um diesen Effekt nachzuahmen, müssen Keime in der unterkühlten Schmelze vor der Flüssig-Fest-Oberfläche eingeführt werden. Das Konzept wird in Abbildung 3 für den Fall einer einzelnen Schmelzlinie (links dargestellt) erläutert, die die Oberfläche eines Materials mit unterschiedlich orientierten Körnern durchquert (detailliert in einem 2D-Schnitt auf der rechten Seite gezeigt).

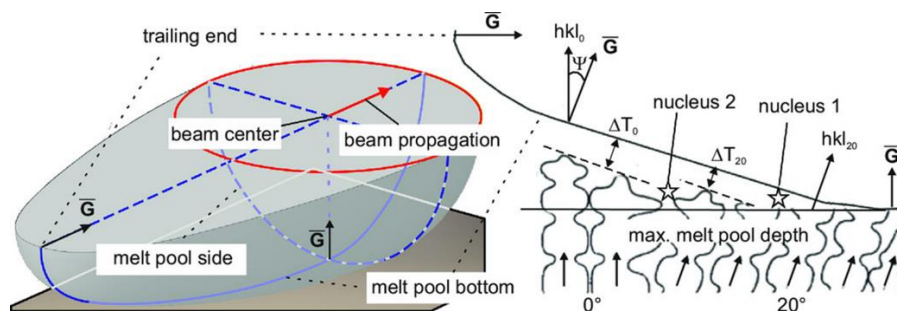


Abbildung 3: Typische Schmelzbadform mit schematischer Darstellung der Kornselektion und Neukornbildung an der Erstarrungsfront.

In diesem Beispiel wurden zwei verschiedene Kornorientierungen ausgewählt: Die Körner auf der linken Seite wachsen in Baurichtung (d.h. ein Neigungswinkel von  $0^\circ$ ), während das Korn auf der rechten Seite um  $20^\circ$  gegen die Baurichtung geneigt ist, um die Neigung des hinteren Schmelzbaderandes nachzubilden. Die Misorientierung des  $hkl_0$  Korns zum Temperaturgradienten führt zu einer leicht erhöhten Erstarrungsrate. Infolgedessen benötigen diese Dendriten eine höhere Unterkühlung  $\Delta T$ , um mit dem zentralen Korn  $hkl_{20}$  Schritt zu halten, was zu einem Zurückfallen führt. Ein Keim, der nun in der Lücke zwischen dem  $hkl_0$ - und dem  $hkl_{20}$ -Korn entsteht (exemplarisch durch "nucleus 2" in Abbildung 3 dargestellt), hat mehr Zeit, sich zu entwickeln, als ein Keim, der mit einem perfekt ausgerichteten Korn konkurrieren muss (angezeigt durch "nucleus 1"). Im eingesetzten Modell werden Keime innerhalb der unterkühlten Schmelze vor der Flüssig-Fest-Oberfläche eingeführt. Sollte mehr als ein Keim pro Zelle eingesetzt werden, so wird für jeden Keim eine zufällige Orientierung ausgewählt und abschließend nur der Keim mit der besten Orientierung zum Temperaturgradienten übernommen. Der Keim muss in der Lage sein, sich gegen die ankommende Erstarrungsfront

durchzusetzen, wenn seine Orientierung besser mit dem Temperaturgradienten ausgerichtet ist. Andererseits darf er die Kristallisationsfront nicht blockieren, falls die Fehlorientierung des Keims den vorherrschenden Vorteil der höheren Unterkühlung negiert.

Beide Effekte werden mithilfe eines Schattengitters kombiniert, das ausschließlich die Keimbildungszellen enthält. Das Schattengitter erfährt das gleiche Temperaturfeld wie das gewöhnliche Gitter, und die Keime wachsen gemäß denselben Regeln, abhängig von der Unterkühlung ihrer jeweiligen Zellen. Dieser Ansatz erzwingt ein Kriterium für die Aufnahme der wachsenden Kerne in das gewöhnliche Gitter. Eine Möglichkeit für dieses Kriterium liegt in der Definition eines kritischen Radius (CR), den der Keim erreichen muss. Nach diesem Ansatz wird ein Keim in das gewöhnliche Gitter aufgenommen, sobald sein Durchmesser den CR überschreitet. Wenn die Keimbildungszelle von einer anderen Zelle erfasst wird, wird der Keim gelöscht und die Erstarrungsfront schreitet fort.

### **Transfer simulierte Kornstrukturen**

In Kooperation mit dem Verbundpartner Universität Bayreuth MW wurde der Transfer der simulierten Kornstrukturen diskutiert. Dabei zeigte sich, dass durch eine passende Einleseroutine die Datensätze der Kornstruktursimulation direkt verwendet werden konnten. Der Projektbearbeiter stellte für MW das passende Skript zur Verfügung.

### **Selektives Elektronenstrahlschmelzen (PBF-EB)**

Die Simulationssoftware SAMPLE3D wurde ursprünglich für den PBF-EB Prozess entwickelt und für die Werkstoffe IN 718 [6] und CMSX-4 [7] erfolgreich eingesetzt. Auch der im Verbundvorhaben eingesetzte Werkstoff ABD-900AM weist eine ähnliche Legierungszusammensetzung speziell wie IN 718 und das gleiche kubisch flächenzentrierte Gitter während der Erstarrung auf.

#### **Setup**

Es wurden Würfelproben a 15 mm x 15 mm x 12 mm (L x B x H) aus ABD-900AM mit 950 W Strahlleistung, 5 m/s Strahlgeschwindigkeit, 1070°C Vorheiztemperatur, 100µm Linienabstand und einer Schichtdicke von 50 µm gebaut. Dabei wurde das Cross-Snake-Hatch Schmelzmuster je Schicht um 90° gedreht. Das verwendete Pulver hat eine Größenverteilung zwischen 46 µm und 106 µm.

Es wurden sowohl Längs- als auch Querschliffe in der Mitte der Probenkörper für die Analyse angefertigt. Diese Schliffe wurden metallografisch vorbereitet und mit Kallings No. 2 Ätzmittel geätzt. Mikroskopische Analysen wurden unter Verwendung eines Lichtmikroskops und eines Rasterelektronenmikroskops durchgeführt. Darüber hinaus wurden Elektronenrückstreuungsmessungen (EBSD) durchgeführt, um die kristallographischen Orientierungen der Körner zu bestimmen.

Die Simulation wurde entsprechend dem Experiment aufgesetzt. Die Simulationsdomäne hat eine Größe von  $27(B) \times 27(L) \times 1(H) \text{ mm}^3$ , mit einer Zellgröße von  $\Delta x = 25 \text{ }\mu\text{m}$ . Der für die thermische Simulation verwendete Zeitschritt beträgt  $\Delta t = 2,5 \text{ }\mu\text{s}$ , wodurch das von-Neumann-Stabilitätskriterium erfüllt und ausreichend Schritte für die Strahleinkopplung in jeder Simulationszelle vorhanden sind. Während der Simulation bewegt sich die Wärmequelle gemäß dem vordefinierten Scanmuster. Da die Simulationsdomäne in der horizontalen Richtung erheblich größer ist als die experimentelle Probe und in der Tiefenrichtung viel größer als die Schmelzbadtiefe, wird der Wärmefluss über die Oberfläche der Simulationsdomäne vernachlässigt. Dies bedeutet, dass die Simulationsdomäne als isoliertes System behandelt wird, bei dem die einzige Energiequelle die Wärmequelle ist.

Für die CA-Simulation wird ein Zeitschritt von  $10 \text{ }\mu\text{s}$  verwendet, um sicherzustellen, dass das Oktaeder innerhalb eines Zeitschritts nicht mehr als  $1/10$  der Zellgröße wächst. Die Simulationsdomäne ist in z-Richtung erheblich kleiner als die tatsächliche Höhe der zu bauenden Probe. Diese Herangehensweise reduziert den Rechenaufwand und wird als Simulationsdomänen-Kürzungsmechanismus bezeichnet. Nach Abschluss einer Schicht werden die CA-Simulationsergebnisse am Boden der Domäne mit einer Schichtdicke exportiert. Der verbleibende Teil der Domäne wird dann um eine Schichtdicke nach unten verschoben, und der obere Bereich der Domäne wird mit Zellen mit zufälligen kristallographischen Orientierungen neu aufgefüllt. Dieser Prozess ahmt das Absenken des Pulverbetts und den Auftrag einer neuen Pulverschicht im Experiment nach. Schließlich werden die Simulationsergebnisse im Post-Processing zusammengeführt, um die gesamte Höhe der Probe zu erhalten. Neben dem Simulationsdomänen-Kürzungsmechanismus werden der Mechanismus der Wiederverwendung des thermischen Feldes [6] und die Message Passing Interface (MPI) Parallelisierung [2] verwendet, um die Simulation weiter zu beschleunigen.

Zur Rekonstruktion der Wärmequelle wurde das experimentell erhaltene Schmelzbadprofil aus einem Längsschnitt verwendet, wobei die Schmelzbadbreite in verschiedenen Tiefen, bezeichnet als  $w_{\text{exp}}(z)$ , gemessen wurde. Die Rekonstruktion der Wärmequelle zielt darauf ab, ein simuliertes Temperaturfeld zu erzeugen, das das gleiche Schmelzbadprofil,  $w_{\text{sim}}(z)$ , wie  $w_{\text{exp}}(z)$  erzeugt. Dieses Inverse-Problem wurde mit dem in [8] beschriebenen Algorithmus gelöst, wobei Prozessparameter sowie die Strahlgeschwindigkeit berücksichtigt wurden. Um den Effekt der Wärmeübertragung im Schmelzbad zu berücksichtigen, wurde die Wärmeleitfähigkeit im Schmelzbad verdreifacht. Die Parameter im Wärmequellenmodell wurden durch einen iterativen Prozess bestimmt. Die resultierende Wärmequelle weist geometrische Parameter von  $r_t = 450 \text{ }\mu\text{m}$ ,  $r_b = 400 \text{ }\mu\text{m}$  und  $d = 50 \text{ }\mu\text{m}$  auf. Abbildung 4a zeigt die Verteilung der Wärmequelle, wobei eine lineare Interpolation angewendet wurde, um Werte zwischen den gestreuten Datenpunkten zu schätzen.

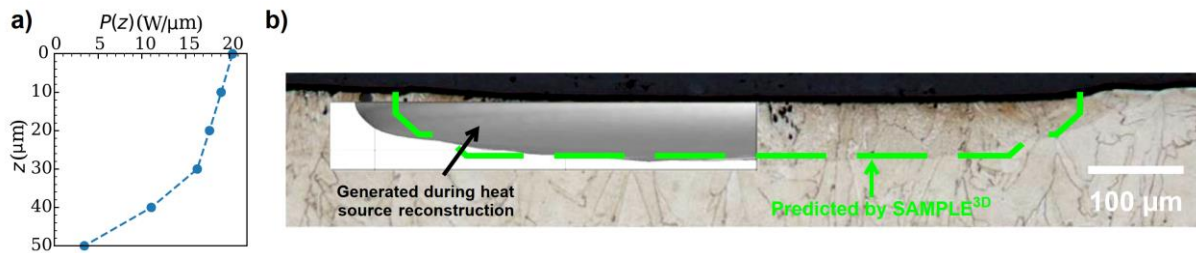


Abbildung 4: a) Energieverteilung  $P_z$  der äquivalenten Wärmequelle. b) Vergleich zwischen der numerisch vorhergesagten und experimentell gemessenen Schmelzbadgeometrie.

Abbildung 4b zeigt einen Vergleich zwischen dem Schmelzbadprofil, das von SAMPLE3D vorhergesagt wurde, und der experimentell erhaltenen Schmelzbadgeometrie. Die experimentellen Messungen ergeben eine Schmelzbadtiefe von  $78,7 \mu m$  und eine Halbbreite von  $399,2 \mu m$ . Im Gegensatz dazu sagt die SAMPLE3D-Simulation eine Schmelzbadtiefe von  $75,0 \mu m$  und eine halbe Breite von  $362,5 \mu m$  voraus. Die enge Übereinstimmung zwischen den vorhergesagten und gemessenen Werten zeigt die Verwendbarkeit des in SAMPLE3D verwendeten äquivalenten Wärmequellenansatzes.

## Ergebnisse

Der Vergleich von Experiment und Simulation wurde anhand von EBSD-Aufnahmen, Polfiguren und Korngrößenmessungen durchgeführt. Abbildung 5 zeigt den Vergleich der Ergebnisse im Längsschnitt. In den Auswertungen zeigt die z-Achse in Bauichtung (BD). Die simulierte Kornstruktur weist ähnliche Merkmale und Eigenschaften wie das experimentelle Mikroskopbild aufweist. Beide zeigen ausgeprägte Bereiche, nämlich den Randbereich und den Kernbereich. Im Randbereich wachsen die Körner schräg von außen nach innen, während im Kernbereich die Körner vertikal von unten nach oben wachsen. Die Breite des numerisch vorhergesagten Randbereichs, stimmt gut mit der Messung aus dem optischen Mikroskopbild überein ( $\sim 2 \text{ mm}$ ). In Bezug auf die kristallographische Orientierung zeigt das simulierte Mikroskopbild eine nahezu zufällige Verteilung der Kornorientierungen im Randbereich, während der Kernbereich eine starke  $\{100\}$ -Textur aufweist. Die Ergebnisse wurden weiterhin durch die durchschnittlichen Kornbreiten bei verschiedenen Bauhöhen für den Kern- und Randbereich verglichen. Die Messpositionen sind durch die horizontalen schwarz-weißen Linien in Abbildung 5a angegeben, und die Messergebnisse werden in Abbildung 5b-c für die Kern- und Randbereiche gezeigt. Der Vergleich zeigt eine gute Übereinstimmung, wobei eine geringe Diskrepanz der Kornbreite im unteren Abschnitt des Randbereichs festgestellt wurde. Sowohl in der Simulation, als auch im Experiment, werden die Körner im Kernbereich durch Kornselektion mit zunehmender Bauhöhe immer größer. Die Körner beginnen mit einer Breite von etwa  $25 \mu m$ , durchlaufen anschließend eine Übergangszone und zeigen schließlich im oberen Bereich eine durchschnittliche Kornbreite von etwa  $300 \mu m$ .

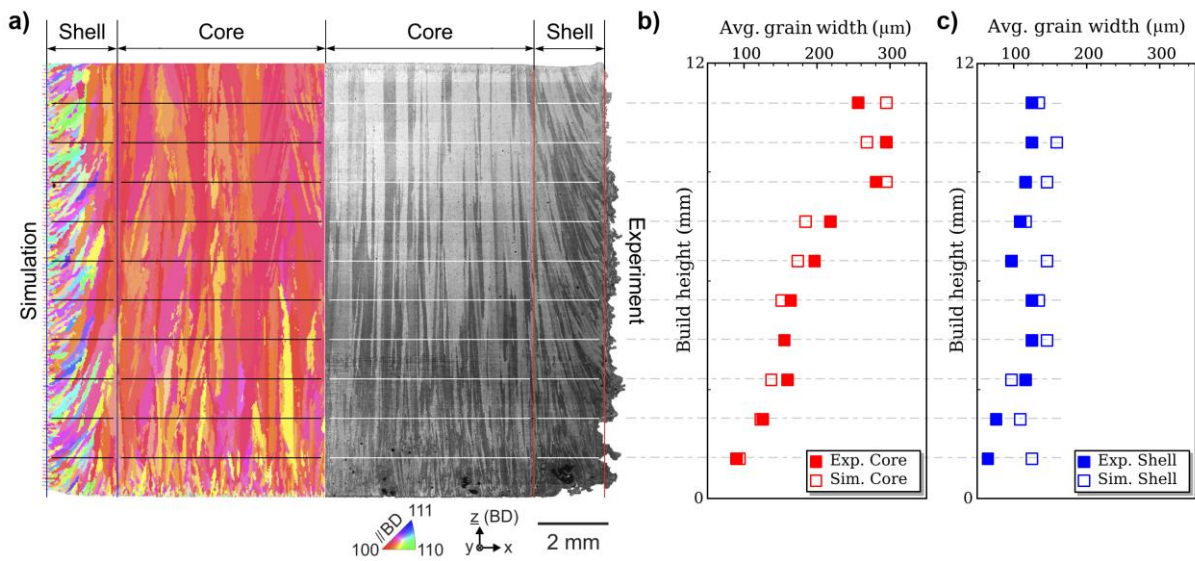


Abbildung 5: a) Vergleich zwischen der von numerisch vorhergesagten Kornstruktur und dem experimentellen Mikroskopbild im Längsschnitt. b-c) Vergleich der numerisch vorhergesagten und experimentell gemessenen durchschnittlichen Kornbreiten in verschiedenen Bauhöhen im Kern- und im Randbereich. Die Messpositionen für die durchschnittlichen Kornbreiten sind durch horizontale schwarze/weiße Linien in a) angegeben.

Abbildung 6 zeigt den Vergleich im Querschnitt im Kernbereich. Abbildung 6a zeigt dabei die inversen Polfiguren (IPF), wobei beide die Dominanz der  $\{100\}$ -Orientierung zeigen. Um die Verteilung der kristallographischen Orientierung quantitativ zu beschreiben, wurden Orientierungs-Verteilungs-Funktion (ODF) Polfiguren unter Verwendung der MTEX-Toolbox [9] erstellt (siehe Abbildung 6b). Beide Polfiguren zeigen eine starke Übereinstimmung und weisen auf eine signifikante  $\{100\}$ -Textur hin.

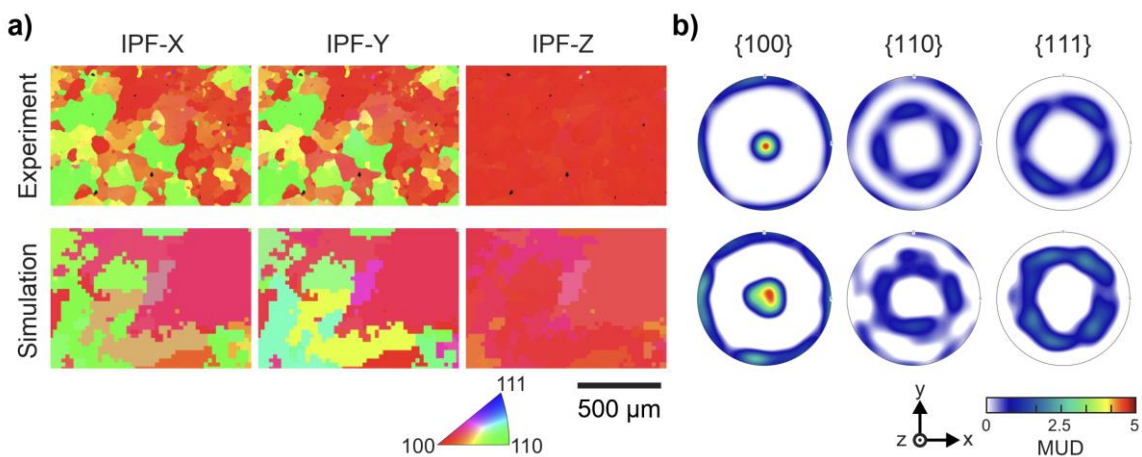


Abbildung 6: Vergleich der Kornstrukturen im Querschliff und anhand von Polfiguren.

Der Vergleich sowohl im Längs- als auch im Querschnitt zeigt eine hervorragende Übereinstimmung. Dies untermauert die Fähigkeit von SAMPLE3D, die Entwicklung der Kornstruktur während des PBF-EB-Prozesses genau zu erfassen. Sowohl der Randbereich mit hereinwachsenden Körnern teilgeschmolzener Partikel, sowie der Kernbereich geprägt durch eine klassische Kornselektion hin zum stängelkristallinen Gefüge konnten vorhergesagt

werden. Sowohl die Polfiguren als auch die Korngrößen stimmen sehr gut überein. Aufgrund der groben Kornstruktur kann SAMPLE3D für den PBF-EB Prozess sehr gut eingesetzt werden und zeigt auch für andere Prozessparameter und Materialien eine gute Vorhersagegenauigkeit.

### **Selektives Laserstrahlschmelzen (PBF-LB)**

Der zweite additive Fertigungsprozess stellt SAMPLE3D vor neue Herausforderungen. Die Textur wird insgesamt feiner und die Neukornbildung gewinnt an Bedeutung. Deswegen ist hier neben der Kalibrierung der äquivalenten Wärmequelle auch die Kalibrierung des Neukornbildungsmodells notwendig.

#### **Setup**

Grundlage für die Forschungsarbeiten am PBF-LB Prozess ist eine Würfelprobe mit den Prozessbedingungen zum Parametersatz A1 (siehe Abschlussbericht Verbundpartner SIEMENS), die im unteren Bereich mit einer Rotation von  $67^\circ$  und im oberen Bereich ohne Rotation des Belichtungsmusters hergestellt wurde. Zusätzlich wurde die letzte Schicht nochmals um  $90^\circ$  gedreht aufgeschmolzen, um die Schmelzbadgeometrien exakt ermitteln zu können. Eine entsprechende Skizze ist in Abbildung 7a dargestellt. Weiterhin stellte der Verbundpartner SIEMENS eine passende, äquivalente Wärmequelle, die zu übereinstimmenden Schmelzbadgeometrien führte, zur Verfügung (siehe Abbildung 7b).

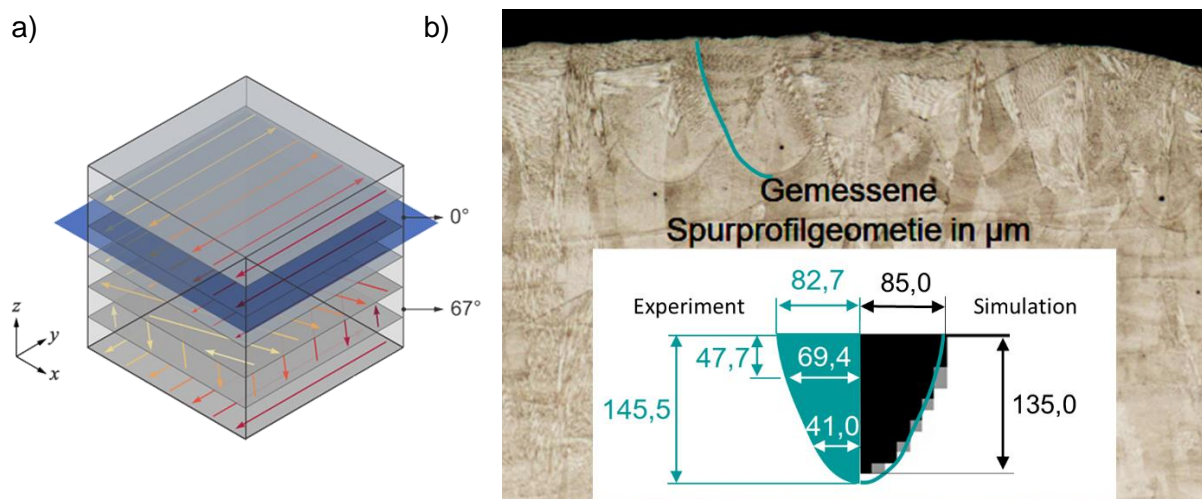


Abbildung 7: a) Skizze der hergestellten Würfelprobe mit Drehung des Belichtungsmusters um  $67^\circ$  in der unteren Hälfte und keiner Rotation in der oberen Hälfte. b) Messung (grün) und numerische Vorhersage (schwarz) des Schmelzbadprofils.

Das experimentelle Setup wird numerisch durch eine Domäne von  $4\text{ mm} \times 4\text{ mm} \times 0,5\text{ mm}$  bei einer Zellgröße von  $5\text{ }\mu\text{m}$  abgebildet. Die Zeitschrittweite beträgt  $0,5\text{ }\mu\text{s}$ , um das von Neumann-Stabilitätskriterium zu erfüllen und ausreichend Schritte für die Wärmeabgabe bereitzustellen. Eine Anfangstemperatur von  $200\text{ }^\circ\text{C}$  und eine Strahlgeschwindigkeit von  $1\text{ m/s}$  wurde gewählt. Die CA-Simulation verwendete einen Zeitschritt von  $1\text{ }\mu\text{s}$ , um sicherzustellen, dass das

maximale Wachstum der Oktaeder ein Zehntel der Simulationszellgröße nicht überschritt. Die Schichtdicke wurde auf 40  $\mu\text{m}$  festgelegt, was acht Zellschichten in der CA-Simulation entspricht. Nach jeder simulierten Schicht wurde die unterste Schicht des CA-Gebiets exportiert, die gesamte Domäne um eine Schichtdicke nach unten verschoben und neue Simulationszellen mit zufällig zugewiesenen kristallographischen Orientierungen in der obersten Schicht hinzugefügt. Innerhalb der ersten 20 Schichten wird das Belichtungsmuster entsprechend um  $67^\circ$  gedreht und in den darauffolgenden 20 Schichten nicht mehr.

### Neukornbildung

Zur Kalibrierung der Neukornbildung wurde jeweils der obere Teil der Probe herangezogen. Dieser weist durch die direkt aufeinander liegenden Schmelzlinien eine besondere, im PBF-EB Prozess bisher nicht aufgetretene, Struktur auf, die in Abbildung 8a dargestellt ist.

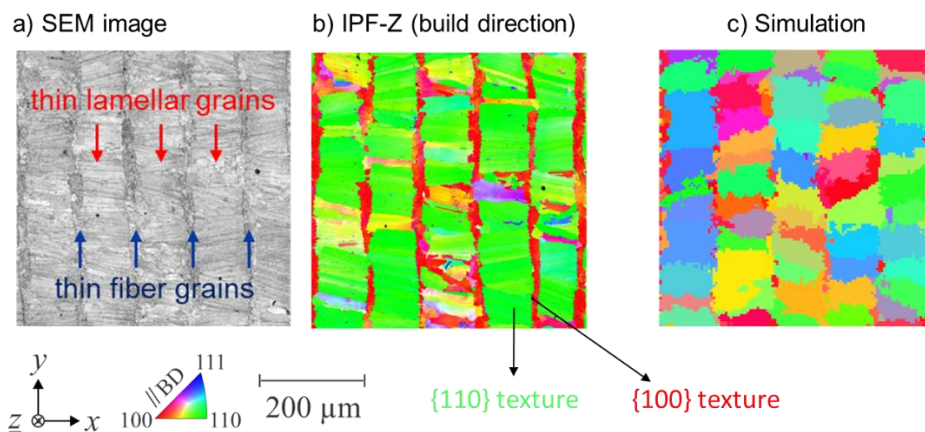


Abbildung 8: a, b) experimentelle Kornstruktur anhand von SEM und EBSD Bildern. c) Numerische Vorhersage ohne Neukornbildung.

Die Querschnitte zeigen die Kornstruktur entlang (y) und quer (x) zur Schmelzrichtung. Dort, wo die Zentren der Schmelzbäder aufeinandertreffen, ist die Erstarrungsrichtung parallel zur z-Achse und ein schmaler Streifen einer kolumnaren Kornstruktur mit  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung bildet sich aus. Die großen Temperaturgradienten und die von der Baurichtung abweichende Erstarrungsorientierung im restlichen Bereich, führt zu einer Neukornbildung und lamellaren Körnern mit einer  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung. Diese Körner müssen durch eine kontinuierliche Neukornbildung entstehen, da diese Orientierung nicht durch epitaktisches Wachstum von angeschmolzenen Körnern am Schmelzbadboden möglich ist. Eine erste Simulation ohne Berücksichtigung der Neukornbildung bestätigt dies (siehe Abbildung 8c). Weder der dünne stängelkristalline Bereich der  $\langle 100 \rangle$ -orientierung, noch die  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung im restlichen Bereich konnte abgebildet werden.

Im ersten Schritt der Kalibrierung wurde der kritische Keimradius CR betrachtet. Dieser legt fest, ab welchem Durchmesser ein Keim vom Schattengitter ins normale Gitter des zellularen Automaten übertragen wird. Für die Nukleationsrate wurde jeweils 1 Keim pro Nachbarzelle zur Erstarrungsfront angesetzt. Die Ergebnisse mit gleichem Simulationssetup sind in Abbildung 9 dargestellt.

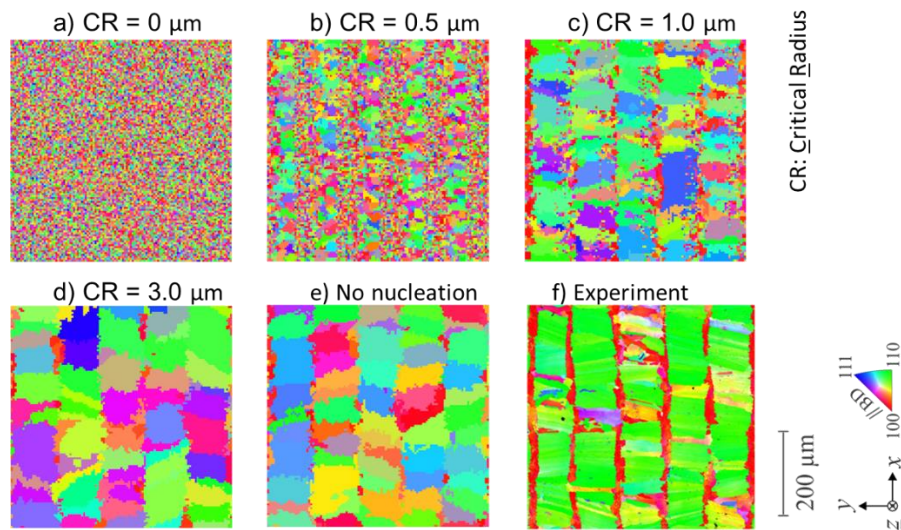


Abbildung 9: a-e) Numerische Ergebnisse zur Kalibrierung der Neukornbildung für unterschiedliche kritische Keimradien (CR). f) Experimentelles Ergebnis zum Vergleich.

Es ist offensichtlich, dass ein kritischer Keimradius von 0  $\mu\text{m}$  zu einem zufälligen Gefüge mit einer Korngröße entsprechend der Zellgröße führt. Jeder Keim im Schattengitter wird sofort akzeptiert und somit kann die Erstarrungsfront nie wachsen. Dieser Fall validiert somit zunächst nur den Mechanismus des Übertrags der Keime vom Schattengitter ins normale Gitter. Mit steigendem kritischem Radius, werden weniger Kerime übernommen, wobei dennoch nicht die Kornstruktur des Experiments nachgebildet werden kann. Speziell im stängelkristallinen Bereich sind zu viele und zu schlecht orientierte Körner vorhanden. Das zunächst beste Ergebnis liefert ein kritischer Keimradius von 1  $\mu\text{m}$ .

Im zweiten Schritt der Kalibrierung muss nun auch die Keimdichte angepasst werden. Die bisherigen Simulationen haben gezeigt, dass die Keime die überleben oft nicht die richtige Orientierung besitzen. Demnach ist es notwendig, die Keimdichte zu erhöhen, um eine Auswahl an Keimen für eine entsprechende Erstarrungsrichtung vorliegen zu haben. Die Anzahl an Keimen pro Zelle wird im nächsten Schritt über den Wert von 1 gehoben. Die numerischen Ergebnisse dazu sind in Abbildung 10 dargestellt.

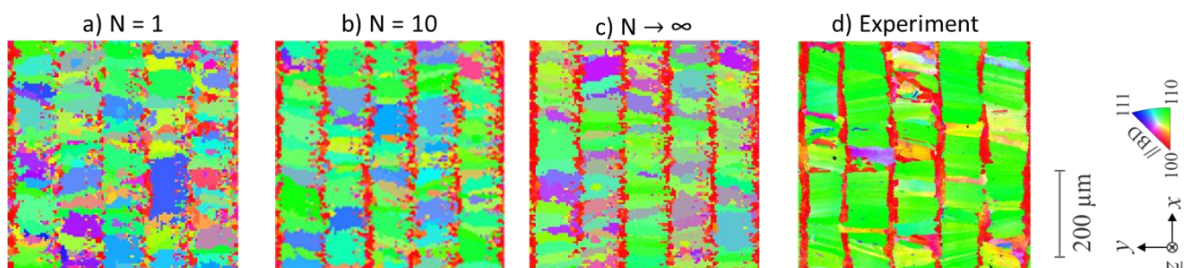


Abbildung 10: a-c) Numerische Ergebnisse zur Kalibrierung der Neukornbildung für unterschiedliche Neukornanzahlen pro Zelle für einen kritischen Radius von 1  $\mu\text{m}$ . d) Experimentelles Ergebnis zum Vergleich.

Die Vergrößerung der Keime pro Zelle zeigt eine deutliche Verbesserung: i) die kleinen, schlecht orientierten und quasi nicht wachstumsfähigen Streukörner verschwinden; ii) der

stängelkristalline Bereich mit einer  $\langle 100 \rangle$ -Orientierung prägt sich wie experimentell gemessen aus; iii) der restliche Bereich nähert sich mehr einer  $\langle 110 \rangle$ -Orientierung an und die Korngrößen nähern sich den experimentellen an. Die beste Übereinstimmung konnte für  $N \rightarrow \infty$  ermittelt werden. Hier wurde die Kornorientierung des Keims nicht zufällig ermittelt, sondern direkt die Orientierung des Temperaturgradienten verwendet. Physikalisch gibt es hier unterschiedliche Theorien, um dieses Vorgehen zu erklären. Eine Möglichkeit bindet die Schmelzbadbewegung mit ein. Diese ist hier so ausgerichtet, dass die Möglichkeit besteht, abgebrochene oder abgeschmolzene Dendritenarme entsprechend zum Temperaturgradienten hin drehen zu können. Simulationen mit unserer zweidimensionalen Schmelzbadsoftware SAMPLE2D gibt hier entsprechende Hinweise. Weiterhin wurden diese Mechanismen mit dem Verbundpartner ACCESS diskutiert und eine Modelle zum Ende des von ACCESS an WTM übergeben. Die Modelle (nähere Informationen siehe Abschlussbericht ACCESS) wurden entsprechend implementiert und sind insofern plausibel, da nahezu ähnliche Ergebnisse vorliegen. Dennoch konnte aufgrund der späten Phase im Projekt hier keine detailliertere Analyse mehr erfolgen. Ohne dies abschließend klären zu können, wird dennoch der Mechanismus der zufälligen Auswahl der Neukornorientierung ersetzt durch die Auswahl der Orientierung des Temperaturgradienten.

### Ergebnisse

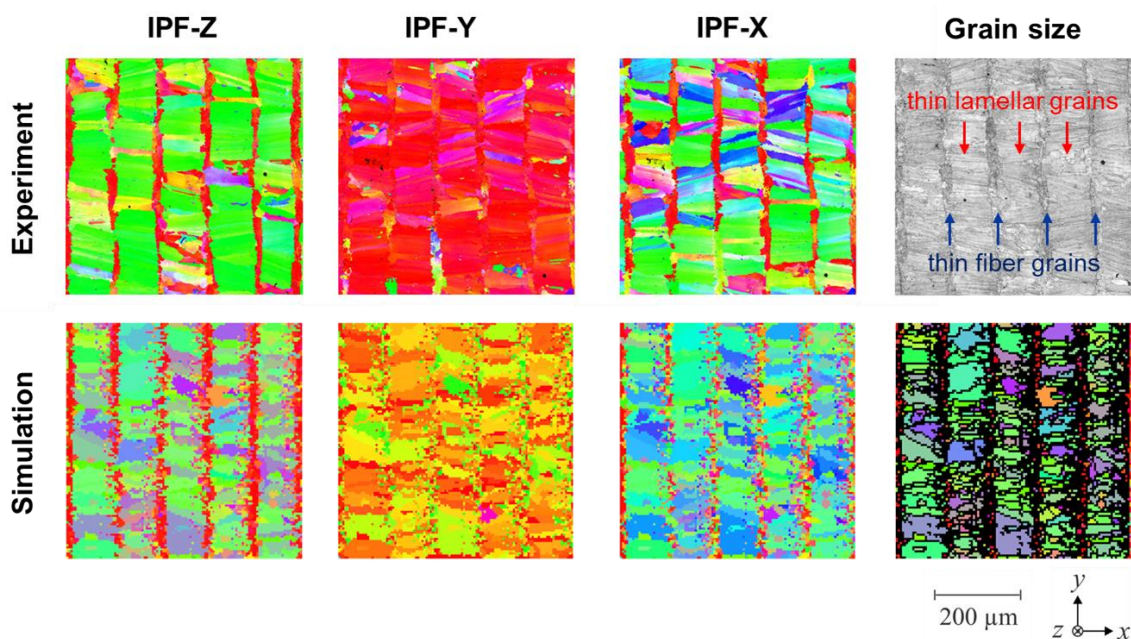


Abbildung 11: Vergleich der experimentellen und numerischen Ergebnisse für den PBF-LB Prozess mit dem Parametersatz A1 für ein kalibriertes Neukornbildungsmodell mit einem kritischen Radius von  $1 \mu\text{m}$  und der bestmöglichen Neukornorientierung.

Mit diesen Maßnahmen konnte abschließend im oberen Bereich der Probe ebenfalls die Vorhersagekraft von SAMPLE3D bestätigt werden, da sich das alternierende stängelkristalline Gefüge mit (Zwischenlinienbereich) bzw. ohne (Schmelzlinienbereich) Neukörner wie im Experiment einstellt (siehe Abbildung 11).

## Elektronenstrahlschweißen

### Setup

Für das Elektronenstrahlschweißen wurde ein vereinfachter experimenteller Aufbau gewählt. Es wurde Plattenmaterial mit einer Stärke von 3 mm aus PBF-EB bzw. PBF-LB Probenmaterial hergestellt. Die 3mm dicken Platten wurden anschließend in einem Einzelspurversuch mit einer Strahlgeschwindigkeit von 0,05 m/s umgeschmolzen. Die entsprechende äquivalente Wärmequelle, bereitgestellt vom Verbundpartner SIEMENS ist in Abbildung 12 dargestellt. Das Experiment wurde bei Raumtemperatur durchgeführt.

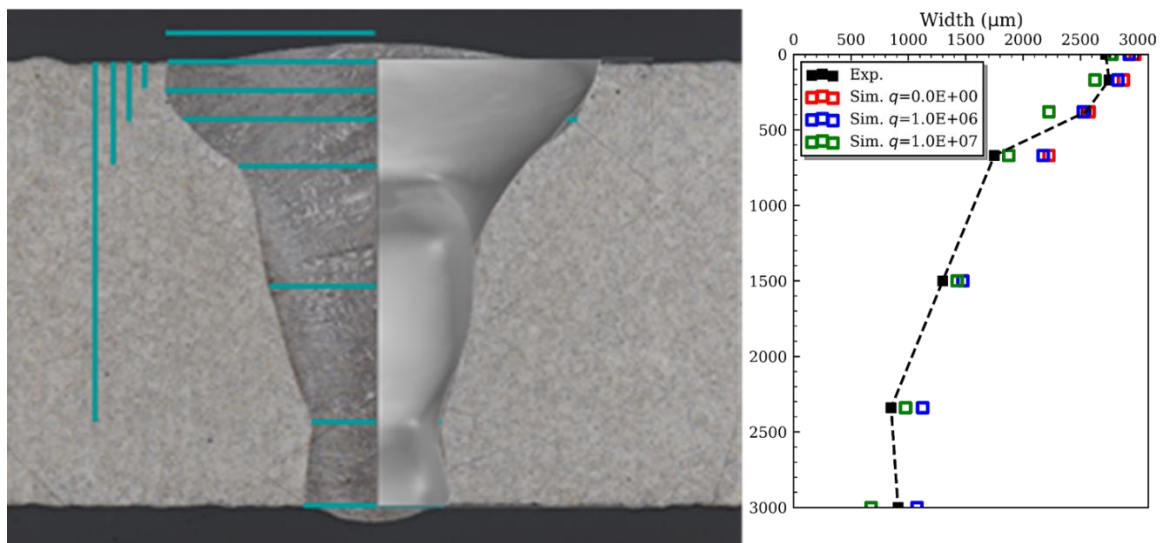


Abbildung 12: links) Mikroskopbild der 3mm Startplatte für den Einzelspurversuch mit dunkelgrauen Bereich der Schweißnaht und Form der äquivalenten Wärmequelle in hellgrau. Rechts) Abgleich der Außenkontur der äquivalenten Wärmequelle mit dem tatsächlichen Schmelzbad in der Temperatursimulation.

Die Umsetzung des Elektronenstrahlschweißens in die numerische Simulation war aufgrund der Dimensionen der Platte und des Schmelzbades eine Herausforderung. Für PBF-LB Material konnte dies nicht umgesetzt werden, da die Kornstruktur eine entsprechend feine Zellengröße und Zeitschrittweite erfordert hätte, die nicht mit realistischem Aufwand in einer annehmbaren Zeit berechenbar gewesen wäre. Deswegen wurde hier ausschließlich PBF-EB hergestelltes Material mit einer groben Kornstruktur umgesetzt. Die gesamte Simulationsdomäne umfasste 21 mm x 21 mm x 3 mm mit einer Zellgröße von 25 µm. Die zugehörigen Zeitschrittweiten sind 5 µs für die thermische Simulation und 10 µs für die Kornstruktursimulation. Die Kornstruktursimulation wurde mit numerisch erzeugten Kornstrukturen aus der Simulation des PBF-EB Prozesses heraus initialisiert.

### Ergebnisse

Die experimentellen Ergebnisse weisen im Wesentlichen auf epitaktisches Wachstum der Kornstruktur hin und zeigen keine ausgeprägte Neukornbildung. Deswegen wurde in der Kornstruktursimulation, wie auch für den PF-EB Prozess, die Neukornbildung nicht betrachtet. Der Vergleich beider Kornstrukturen ist in Abbildung 13 dargestellt.

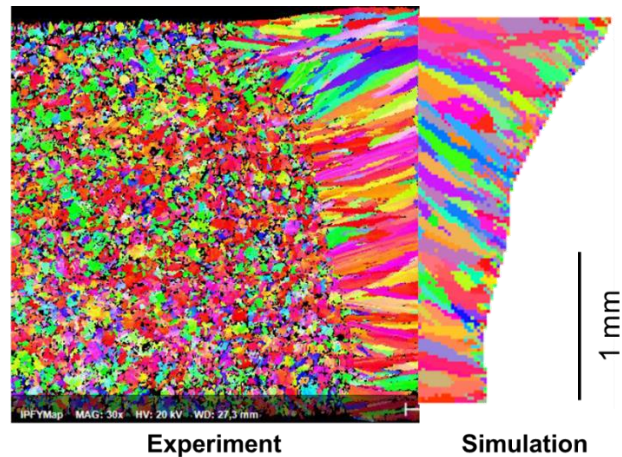


Abbildung 13: Vergleich der experimentellen und numerischen Kornstrukturen nach dem Elektronenstrahlschweißen von additiv gefertigten Probenmaterial im PBF-EB Prozess.

Zunächst ist eine gute geometrische Übereinstimmung der Schweißnaht zu erkennen. Sowohl der trichterförmige, obere Bereich, als auch der gleichmäßigere, untere Bereich sind klar erkennbar und stimmen in den Breiten sehr gut überein. Auch die Kornstruktur weist qualitativ ähnliche Merkmale auf. Die Orientierungsverteilung ist nahezu gleich, wobei die Ausrichtung der Korngrenzen Unterschiede aufweist. Die Simulation weist hier größere Richtungsänderungen zur Horizontalen auf als das Experiment. Dies ist im Wesentlichen auf unterschiedliche Temperaturgradienten zurückzuführen. Zwar ist die äquivalente Wärmequelle in der Lage nahezu die korrekte Form, jedoch nicht den korrekten zeitlichen Temperaturverlauf nachzuahmen. Dadurch wird die Kornselektion und somit die Ausprägung der Korngrenzen verändert. Eine bessere Übereinstimmung ist hier nur mit einer modifizierten äquivalenten Wärmequelle zu erwarten.

### Parameterstudien

Aus mehreren Projekttreffen heraus entstand der Wunsch der Verbundpartner, eigene Materialien und Prozessparameter speziell im PBF-LB Prozess mit der Software SAMPLE3D zu testen, die nicht an andere Verbundpartner herausgegeben werden sollten. Deswegen wurde im Gegensatz zu eigenen Parameterstudien ein Workshop für die Industriepartner erarbeitet, der es erlaubt selbst SAMPLE3D auf den Rechenclustern der FAU zu nutzen. Hierfür wurde eine Dokumentation der Software erstellt, die Inputdateien entsprechend aufbereitet und kommentiert. Weiterhin wurde ein zweitägiges Programm mit Einführungen in das Simulationssetup, die Ausführung und die Auswertung der Simulationsergebnisse entwickelt. Diese Vorbereitungen führten zu einem Workshop im ersten Quartal 2024 an dem u.a. die Verbundpartner SIEMENS und MTU teilnahmen.

Resultierend daraus wurden in Kooperation mit dem Verbundpartner SIEMENS erste Studien zur Kornstruktur des Materials MAR-M247 durchgeführt (Details siehe Abschlussbericht SIEMENS).

## 2.2. Wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

	<b>Position</b>	<b>Abgerechnete Ausgaben insgesamt bis einschl. 2024</b>	<b>Gesamt-Finanzierungsplan</b>
0812	Beschäftigte E12-E15	286.179,56€	246.324,00€
0822	Beschäftigungsentgelte	12.795,63€	29.240,00€
0843	Sonstige allgemeine Verwaltungsausgaben	333,26€	8.400,00€
0846	Dienstreisen	2.922,06€	10.428,00€

Zu 812: Aufgrund der Vielseitigkeit der eingesetzten Prozesse und Methoden, wurden hier mehrere wissenschaftliche Mitarbeiter nach E13 bezahlt, die teilweise bereits in hohe Erfahrungsstufen eingruppiert waren. Dadurch übersteigen die Kosten die Bewilligungssumme um ca. 17%. Die Mehrkosten wurden zum Großteil durch Einsparungen in den anderen Kategorien realisiert.

Zu 822: Während der Projektlaufzeit wurden 4 Hiwis finanziert, die im Wesentlichen numerische Studien zum PBF-LB Prozess aber auch Auswertungen aller anderen Simulationen durchgeführt haben.

Zu 843: Diese Kosten beziehen sich auf den internen Workshop.

Zu 846: Reisekosten zu Meetings und zwei internationalen Konferenzen (SimAM 2023, München) und (ICAM-BM 2024, Peking, China).

## 2.3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Die Überziehung der Personalmittel in Kategorie 812 zeigt, dass das breite Spektrum an Prozessen (PBF-EB, PBF-LB und Elektronenstrahlschweißen) mit unterschiedlichen Anforderungen in der Simulation (Auflösung, Domäne, Modellierung) das Teilprojekt vor eine große Herausforderung stellte. Nur durch diesen Personaleinsatz konnten die im Antrag aufgeführten Ziele zum Großteil erreicht werden. Beide Meilensteine sind in der eingehenden Darstellung nachgewiesen.

## 2.4. Voraussichtlicher Nutzen

Die in diesem Projekt erzielten Ergebnisse können sowohl wirtschaftlich als auch wissenschaftlich genutzt werden.

Generell ist auf Seiten der industriellen Verbundpartner das Interesse vorhanden, die entwickelte Software SAMPLE3D in bestehende Software-Werkzeugketten zu integrieren. Am Beispiel SIEMENS würde die hier entwickelten Berechnungsverfahren in idealer Weise das bereits bestehende Berechnungstool „Simcenter3D“ um eine Mikrostruktur- und abgeleitete mechanische Eigenschaftsvorhersage ergänzen. WTM ist deshalb bestrebt, eine Kommerzialisierung von SAMPLE3D auf zwei Wegen zu realisieren: Zum einen kann eine

kommerzielle Software entwickelt werden und über ein entsprechendes Lizenzmodell zur Verfügung gestellt werden oder die Erbringung von Simulationsdienstleistungen in kundenspezifischen Projekten. Mit den entsprechenden Projektpartnern ist abgestimmt, sowohl die Lizenzierung dann bestehender Schutzrechte gesondert abzustimmen und zusätzliche potenzielle Unterstützung bei der Portierung über gesonderte Zusammenarbeitsvereinbarungen zu regeln.

Der wissenschaftliche Nutzen ist durch die Fortsetzung des Forschungsschwerpunkts in weiteren Projekten sowie durch die Einarbeitung in die Lehre vorhanden. Das Modell des zellularen Automaten soll in der DFG-geförderten Forschergruppe 5134 in der zweiten Phase maßgeblich dazu genutzt werden um Heißrisse im Laserstrahlschweißen vorherzusagen. Die Erkenntnisse bezüglich der Kornausbildung im PBF-LB Prozess sind hierfür sehr hilfreich. In der Lehre sind die Inhalte der Kornstruktursimulation Teil der Vorlesung „Additive Fertigung“ und der zugehörigen Übung.

### *2.5. Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen*

Der zelluläre Automat erfreut sich einer großen Beliebtheit in der Vorhersage der Kornstruktur für additive Fertigungsprozesse und wird mit unterschiedlichen Methoden wie der finiten Elemente, smoothed particle hydrodynamics, finite Differenzen, o.ä. gekoppelt. Für alle Ansätze ist die Neukornbildung die große Herausforderung. Hier einige Beispiele für weitere Literatur mit ähnlichen Ansätzen des zellulären Automaten, die parallel zum aktuellen Verbundvorhaben entstanden sind.

Kang, K., Yuan, L., Phillion, A.B.: A 3D simulation of grain structure evolution during powder bed fusion additive manufacturing and subsequent laser rescanning process (2024) J Mater Proces Technol, 333, art. no. 118603. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2024.118603

Zinovieva, O., Zinoviev, A., Patel, M.N., Molotnikov, A., Easton, M.A.: Modelling grain refinement under additive manufacturing solidification conditions using high performance cellular automata (2024) Mater Des, 245, art. no. 113248. DOI: 10.1016/j.matdes.2024.113248

Ma, J., Niu, X., Zhou, Y., Li, W., Liu, Y., Shen, M., Wang, H., Cheng, W., You, Z.: Simulation of solidification microstructure evolution of 316L stainless steel fabricated by selective laser melting using a coupled model of smooth particle hydrodynamics and cellular automata (2023) J Mater Res Technol, 27, pp. 600-616. DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.09.296

Xiong, F., Lian, Y., Li, M.-J., Ouyang, J., Liu, Y.: An extended cellular automaton finite volume method for grain nucleation–growth–coarsening during the wire-based additive manufacturing process (2023) Addit Manuf, 76, art. no. 103782. DOI: 10.1016/j.addma.2023.103782

### *2.6. Veröffentlichung der Ergebnisse*

Im Rahmen des Projekts wurde bisher eine Publikation veröffentlicht und zwei weitere Manuskripte werden zeitnah eingereicht.

Z. Yang, Y. Kuesters, R. Logvinov, M. Markl and C. Körner, SAMPLE3D: A Versatile Numerical Tool for Investigating Texture and Grain Structure of Materials Processed by PBF Processes, in: SIM-AM2023. URL [https://www.scipedia.com/public/Yang\\_et\\_al\\_2023b](https://www.scipedia.com/public/Yang_et_al_2023b).

Yang, Z., Logvinov R., Kuesters Y., Markl M., Körner C. "Crystallographic orientation regularity of newly formed grains in additive manufacturing." *Science and Technology of Welding and Joining (to be submitted)*.

Yang, Z., Logvinov R., Kuesters Y., Markl M., Körner C. "Grain structure evolution in electron beam welding of an additively manufactured Ni-base superalloy: Experimental and numerical Insights." *Science and Technology of Welding and Joining (to be submitted)*.

### **Literaturverzeichnis**

- [1] Aubert & Duval, ABD®-900AM data sheet, 2023. URL: [https://www.aubertduval.com/wp-media/uploads/sites/2/2019/09/ABD-900AM\\_PearlMicro\\_AM\\_V2ter\\_GB.pdf](https://www.aubertduval.com/wp-media/uploads/sites/2/2019/09/ABD-900AM_PearlMicro_AM_V2ter_GB.pdf).
- [2] J. A. Koepf, M. R. Gotterbarm, C. Kumara, M. Markl, C. Körner, Alternative approach to modeling of nucleation and re-melting in powder bed fusion additive manufacturing, *Advanced Engineering Materials* 25 (2023) 2201682.
- [3] F. Farrokhi, B. Endelt, M. Kristiansen, A numerical model for full and partial penetration hybrid laser welding of thick-section steels, *Optics and Laser Technology* 111 (2019) 671-686.
- [4] L. W. Hunter, J. R. Kuttler, The enthalpy method for heat conduction problems with moving boundaries, *Journal of Heat Transfer* 111 (1989) 239-242.
- [5] C.-A. Gandin, M. Rappaz, A 3D cellular automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth, *Acta Materialia* 45 (1997) 2187-2195.
- [6] J. A. Koepf, M. R. Gotterbarm, M. Markl, C. Körner, 3D multi-layer grain structure simulation of powder bed fusion additive manufacturing, *Acta Materialia* 152 (2018) 119-126.
- [7] J. A. Koepf, D. Soldner, M. Ramsperger, J. Mergheim, M. Markl, C. Körner, Numerical microstructure prediction by a coupled finite element cellular automaton model for selective electron beam melting, *Computational Materials Science* 162 (2019) 148-155.
- [8] V. Yerofeyev, R. Logvinov, V. Nesterenkov, A. Mazo, Formation of the equivalent heat source for calculating strains in structures in electron beam welding, *Welding International* 28 (2013) 557-561.
- [9] F. Bachmann, R. Hielscher, H. Schaeben, Texture analysis with MTEX - free and open source software toolbox, *Solid State Phenomena* 160 (2010) 63-68.