

## **8 Numerische Simulation pulver- und strahlbasierter additiver Fertigungsprozesse**

*Dipl.-Ing. Andreas Bauereiß, Dr. Eric Parteli,  
Daniel Riedelbauer M.Sc., Prof. Dr. Michael Stingl*

*Lehrstuhl Werkstoffkunde und Technologie der Metalle,  
Lehrstuhl für Multiscale Simulation,  
Lehrstuhl für Technische Mechanik,  
Lehrstuhl für angewandte Mathematik II,  
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg*

### **8.1 Einleitung**

Additive Fertigungsprozesse erfahren zurzeit zunehmendes Interesse aus Wirtschaft und Forschung, so zum Beispiel durch den Sonderforschungsbereich 814 (SFB 814) an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU). Der Arbeitskreis Modellierung innerhalb des SFB 814 widmet sich hierbei dem Auf- und Ausbau von grundlegendem Prozessverständnis mit dem Schwerpunkt auf pulver- und strahlbasierten Fertigungsprozessen. Dies wird durch Anwendung komplexer Modelle erreicht, welche die unterschiedlichen physikalischen Skalen und Effekte nachbilden. Der Schlüssel zum tieferen Prozessverständnis liegt dabei neben der eigentlichen Modellierung in der Verknüpfung der Einflüsse, die aus Effekten unterschiedlicher Größen- und Zeitskalen stammen. Das Ziel ist dabei stets die Optimierung des resultierenden Bauteils, vor allem hinsichtlich der Qualität der Oberfläche, der mechanischen Eigenschaften und der Wirtschaftlichkeit des Herstellungsprozesses.

### **8.2 Multiskalenmodellierung**

Strahlbasierte Fertigungsverfahren wie das selektive Elektronenstrahlschmelzen (SEBM) oder das selektive Laserstrahlschmelzen (SLM) sind komplexe Verfahren, für deren Be-

schreibung unterschiedlichste physikalische Vorgänge berücksichtigt werden müssen. Die Spannweite reicht dabei von dem granularen Fließen einer Pulverschüttung beim Auftragen einer neuen Pulverschicht, über das lokale Aufschmelzen und Vereinigen von Pulverkörnern zu einem kompakten Bauteil bis zu den, durch die Energieeinbringung bewirkten, thermo-mechanischen Spannungen. Da der Prozess aufgrund dieser Komplexität einer analytischen und numerischen Gesamtbetrachtung nicht mit vertretbarem Aufwand zugänglich ist, wird er in einzelne Teilprozesse aufgebrochen, die voneinander entkoppelt modelliert und simuliert werden können.

Zur Simulation der Pulveraufbringung wird im Teilprojekt B1 des SFB 814 das Open-Source Programm LAMMPS angepasst. Es handelt sich dabei um eine Diskrete-Element-Methode (DEM), bei der das Verhalten einer sehr großen Anzahl von Partikeln berechnet wird. Interessant ist hier vor allem die Art und Weise, wie das Pulver während des Auftragsprozesses bewegt wird und wie es sich letztlich im Bauraum verteilt. Beispielsweise eine Abweichung der Pulvergrößenverteilung an unterschiedlichen Bauraumpositionen von der ursprünglichen Verteilung, resultierend aus eventueller Entmischung des Pulvers, kann einen starken Einfluss auf das lokale Schmelzverhalten haben.

Dieses Aufschmelzen und Erstarren in der weiteren Umgebung des Strahls wird wiederum von Teilprojekt B4 des SFB 814 behandelt. Bei den betrachteten Verfahren kommt es dabei anders als bei den auch verbreiteten Sinterverfahren zu einem tatsächlichen Aufschmelzen des Pulvers, das nach dem Auskühlen wieder erstarrt. Daraus leitet sich für die Modellierung die Forderung ab, dass sowohl die Strömungsmechanik des flüssigen Materials, als auch die Entwicklung des Temperaturfeldes eine entscheidende Rolle in der Simulation spielen muss. Um auch den Einfluss der stochastischen Pulverschüttung berücksichtigen zu können, wird das Pulver nicht homogenisiert, sondern bestehend aus einzelnen Partikeln aufgelöst. Deshalb wird eine Strömungsmechaniksimulation basierend auf der Lattice-Boltzmann-Methode für freie Oberflächen mit einem Solver für

das Temperaturfeld verwendet, bei dem auch die Phasenübergänge des Materials berücksichtigt werden. Ein Nachteil der hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung dieser Methode ist, dass sich ohne Anpassung der Methode nur kurze Zeiträume und kleine Ausschnitte simulieren lassen.

Dies wird unter anderem durch Teilprojekt C3 ausgeglichen, welches sich mit der makroskopischen Simulation des Prozesses befasst. Dabei handelt es sich um ein Modell, mit dem das Temperaturfeld innerhalb des Bauteils und Pulverbetts während des Prozesses von der ersten bis zur letzten Schicht durchgängig berechnet wird. Das Pulver wird dafür nicht so hoch aufgelöst wie in Teilprojekt B4, sondern als homogenisiertes Material beschrieben, wodurch auch der gesamte Bauraum der Maschine mit vertretbarem Aufwand simuliert werden kann. Durch Kenntnis der Temperaturgradienten lässt sich unter anderem auf eventuelle thermomechanische Spannungen schließen.

Neben der Entwicklung und Anwendung der einzelnen Simulationsmethoden kommt im Arbeitskreis Modellierung des SFB 814 der Verschränkung der Ergebnisse aus den unterschiedlichen Methoden eine besondere Bedeutung zu. Dabei sind die Teilprojekte als Bestandteil einer Simulationskette zu sehen, die letztlich den gesamten Prozess abbilden soll. Jedes Projekt liefert dabei Ergebnisse an die anderen Projekte und erhält ein Feedback von ihnen.

Für die Simulation des Aufbaus eines massiven Blocks beim Elektronenstrahlschmelzen kann beispielsweise zunächst mithilfe der DEM die sich am Anfang des Prozesses einstellende Pulverschüttung berechnet werden. Diese virtuelle Pulverschüttung kann nun bei der mesoskopischen Simulation als geometrische Eingangsgröße verwendet und ihr Aufschmelzen simuliert werden. Hier kann unter anderem abgeschätzt werden, welcher Energieeintrag nötig ist, um die Schicht sicher aufzuschmelzen und keine Schichtanbindungsfehler zu generieren. Dieser Energieeintrag ist wiederum interessant für die makroskopische Simulation, die aus ihm auf thermomechanische Verspannungen

schließen kann. Die Auswirkungen der komplexen Geometrie der erstarrten Oberfläche auf das Pulverfließverhalten beim Aufbringen der nächsten Pulverschicht kann zudem wiederum mit der Vielpartikelsimulation untersucht werden. Die daraus resultierende, neue Pulverschicht in Verbindung mit der Information über die lokale Bauteiltemperatur aus der makroskopischen Simulation kann anschließend verwendet werden, um mesoskopisch das Aufschmelzen der nächsten Schicht zu betrachten.

## **8.3 Simulationsmethoden**

### *8.3.1 Vielpartikelsimulation*

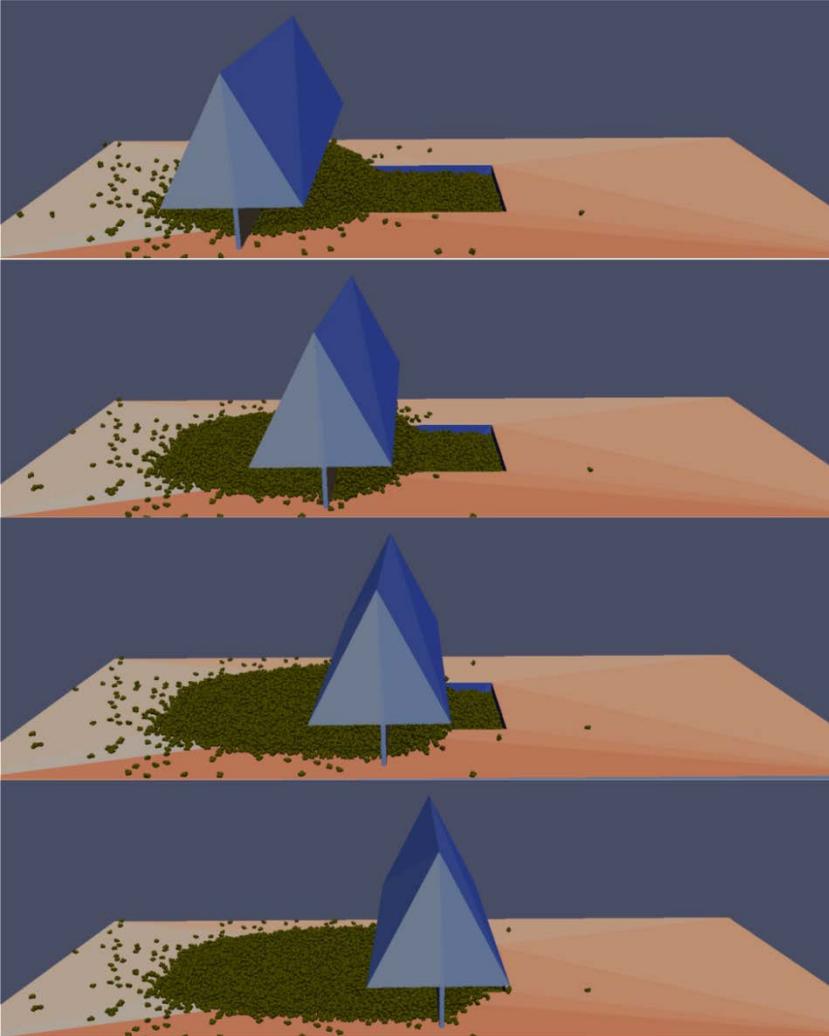
Um den Fertigungsprozess optimieren zu können, ist ein quantitatives Verständnis des mechanischen Verhaltens der Pulverpartikel im Zuge des Aufbringens und des Schmelzens erforderlich. Insbesondere spielen räumliche Änderungen der Größenverteilung der Partikel im Bauraum eine wesentliche Rolle für das lokale Schmelzverhalten und somit für die Eigenschaften des resultierenden Bauteils. Mit Hilfe von teilchenmechanischen, numerischen Methoden können bestimmte Schritte des Fertigungsprozesses simuliert werden, um den Einfluss von Materialeigenschaften, Größenverteilung und Form der Partikel auf das Fließverhalten des Granulats unter den, in der Anlage herrschenden, komplexen Randbedingungen zu untersuchen.

Im Rahmen solcher Simulationsmethoden, oft als „Discrete-Element-Methods“ (DEM) bezeichnet, oder in Anlehnung an äquivalente Verfahren zur Beschreibung der Bewegung von Flüssigkeiten oder Gasen als Molekulardynamik-Methoden (MD), werden die Gleichungen der Translations- und Rotationsbewegung jedes einzelnen Partikels des Pulvers numerisch gelöst.

Während die meisten DEM Simulationen sich mit granularen Stoffen befassen, die aus kugelförmigen Partikeln bestehen, müssen für die DEM Simulation von selektivem Laser- oder

Elektronenstrahlschmelzen Pulverteilchen geometrisch komplexer Form mit aufwendigen Raumgeometrien modelliert werden. Der Grund hierfür liegt in den teils komplexen Formen der realen Partikel in den verwendeten Pulvern. Für die Modellierung solcher komplexer Partikelgeometrien kommt die sogenannte „Multisphere Methode“ zum Einsatz. Hierbei werden kugelförmige Teilchen zusammengesetzt um „Komposit-Teilchen“ zu bilden, welche die unterschiedlichen, nichtsphärischen Formen der Pulverpartikeln annähern.

Des Weiteren müssen Veränderungen der Eigenschaften der Pulverpartikeln über den Produktionsvorgang in Betracht gezogen werden, insbesondere das aus dem selektiven Strahlschmelzprozess resultierende Aufschmelzen des pulverförmigen Werkstoffs und sein Erstarren zu einem geschlossenen Bauteil mit teils komplexer Oberfläche. Diese, aus dem Schmelzprozess resultierenden Raumgeometrien, müssen in den Simulationen abgebildet werden. Zudem müssen für die Modellierung des Pulveraufbringungsmechanismus (siehe Bild 8.1) zeitlich dynamische Randbedingungen realisiert werden.



*Bild 8.1: DEM-Simulation der Aufbringung einer neuen Pulverschicht mithilfe eines Rakes, der von links nach rechts fährt*

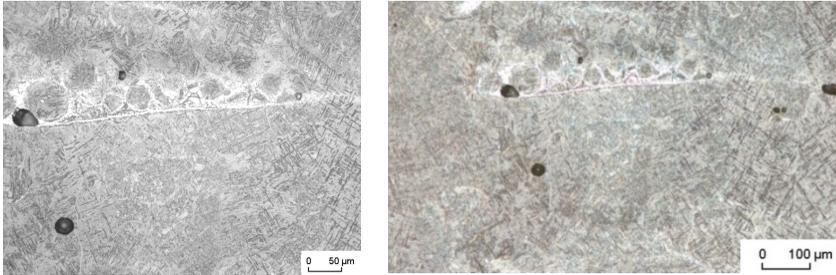
Für die numerischen Simulationen wird keine kommerzielle Software verwendet, sondern ein Open Source Code. Ein Grund hierfür ist, dass kommerzielle Programme dem Nutzer nur wenige

Informationen über die implementierten mathematischen Modelle geben. Darüber hinaus wäre es mit Hilfe von kommerziellen Programmen nicht möglich, die Modellparameter der Wechselwirkung zwischen den Partikeln zu implementieren (z. B. die Gleichungen für die Bestimmung der Dämpfungs-konstante in dem viskoelastischen Modell von Heinrich Hertz).

Die frei verfügbare Software LIGGGHTS (**L**AMMPS improved for **g**eneral **g**ranular and **g**ranular **h**eat **t**ransfer **s**imulations), wird für die Durchführung der Simulationen eingesetzt. Diese Software ist eine Erweiterung des von dem *Sandia National Laboratories* entwickelten Programms LAMMPS (**L**arge **A**tomic and **M**olecular **M**assively **P**arallel **S**imulator), das für die Simulation granularer Medien weit verbreitet ist. LIGGGHTS bietet viele Funktionalitäten, die in LAMMPS nicht vorhanden sind. Insbesondere für die Modellierung der Pulverpartikel in der additiven Fertigung spielt eine neue Funktionalität von LIGGGHTS eine entscheidende Rolle: LIGGGHTS bietet eine Schnittstelle zu CAD-Programmen, was eine effiziente Modellierung der Anlagegeometrie und deren Interpretierung als Randbedingung für die Pulverpartikel ermöglicht. Im Vergleich zu anderen Open Source Softwares (z. B. ESys, YADE), welche die meisten Funktionalitäten von LIGGGHTS bereits implementiert haben, ist LIGGGHTS wesentlich besser dokumentiert und einfacher zu modifizieren bzw. zu erweitern.

### 8.3.2 *Mesoskopische Simulation*

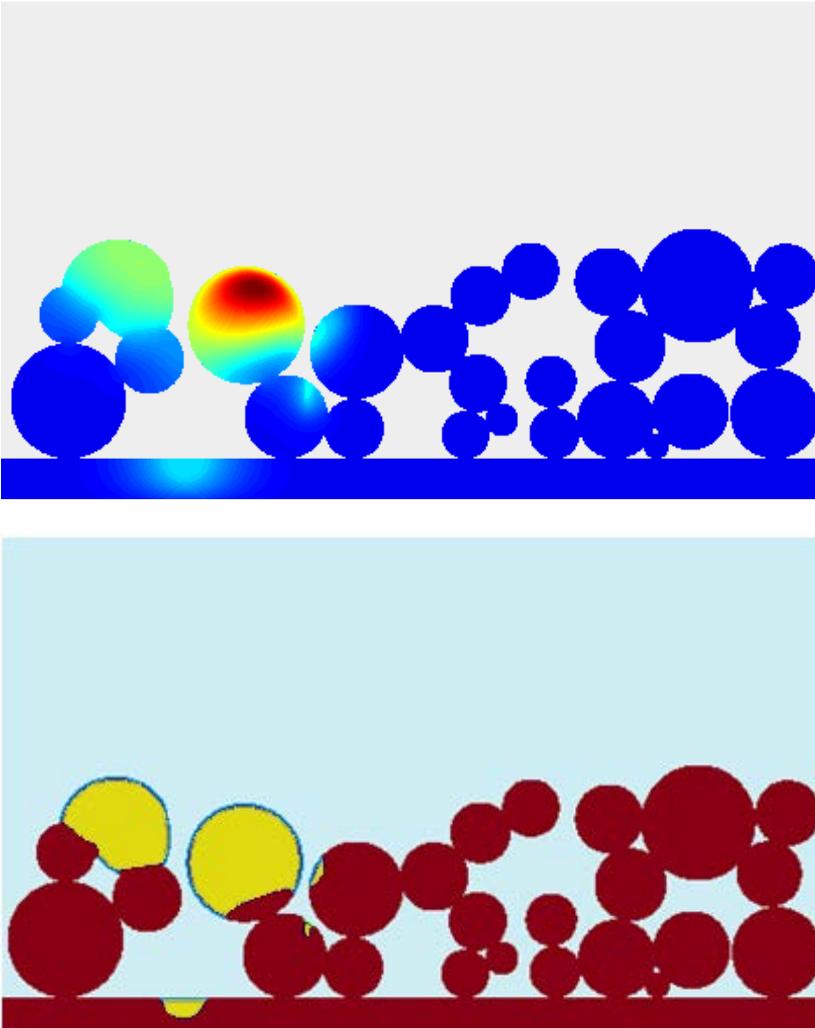
Für die Ausbildung von Anbindungsfehlern und Porosität, wie in Bild 8.2 dargestellt, ist vor allem der lokale Schmelzprozess entscheidend. Um diesen in der Simulation nachzubilden, wird auf einem Gitter mit sehr hoher Auflösung die Strömungsmechanik und Thermodynamik in der direkten Umgebung des Strahls betrachtet.



*Bild 8.2: Porosität und Schichtanbindungsfehler in zwei TiAl6V4 Proben hergestellt durch selektives Elektronenstrahlschmelzen*

Dies ist beispielhaft in Bild 8.3 gezeigt, in der eine zwei-dimensionale Pulverschüttung von einem Elektronenstrahl bestrahlt und aufgeschmolzen wird. Im oberen Teilbild ist die Temperatur innerhalb der Pulverschüttung zu sehen, wobei blau einer niedrigeren und rot einer höheren Temperatur entspricht. Der Strahl wird als interne Energiequelle modelliert und heizt in jedem Zeitschritt die Zellen, die unter ihm liegen auf.

Gut zu erkennen ist, dass sich das heißeste Gebiet unterhalb der Oberfläche des Pulverpartikels befindet. Dies ist auf ein Zusammenspiel aus der Absorption des Elektronenstrahls und der Wärmestrahlung an der Oberfläche zurückzuführen. Der Elektronenstrahl hat in dem dargestellten Fall eine Eindringtiefe von ca. einem Viertel des durchschnittlichen Pulverkorn-durchmessers. Die durch den Strahl eingebrachte Energie wird von der Oberfläche bis zu dieser Eindringtiefe anhand eines halbempirischen Absorptionsmodelles bestimmt. Gleichzeitig bildet sich an der Oberfläche aufgrund der Wärmestrahlung eine Wärmesenke aus, wodurch sich diese Form des Temperaturfeldes ergibt.

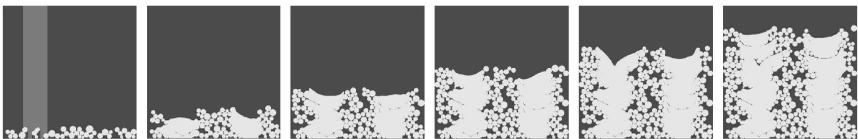


*Bild 8.3: Illustration des Elektronenstrahlschmelzens einer Pulverschüttung  
Oben: Temperaturfeld – Das Zentrum des Elektronenstrahls befindet sich beim Maximum  
Unten: Phase des Materials – Erläuterung siehe Text*

Im unteren Teil von Bild 8.3 ist die Phase des Materials gezeigt. Hellgrau steht hier für die das Pulver umgebende Atmosphäre, schwarz steht für festes und grau steht für flüssiges Material. Das Pulver wird als fest initialisiert und durchläuft abhängig von seiner Temperatur Phasenübergänge. Überschreitet die Temperatur an einem bestimmten Punkt eines Pulverkorns die Schmelztemperatur, so wird die Phase von fest auf flüssig geändert. Analoges geschieht beim Unterschreiten der Erstarrungstemperatur.

Die instationäre Strömungsmechanik des flüssigen Materials wird mithilfe der Lattice-Boltzmann-Methode gelöst, wobei der Grenzfläche zwischen Gas und Flüssigkeit, im Bild 8.3 als hellblaue Linie zu sehen, eine entscheidende Rolle zukommt. An ihr wird die Oberflächenspannung, die in diesem Regime für die Bewegung der Schmelze dominant ist durch eine komplexe Randbedingung, die unter Anderem die Krümmung der Oberfläche berücksichtigt eingebracht. Dadurch lassen sich auch wichtige Effekte, wie die Benetzung von noch nicht aufgeschmolzenen Pulverkörnern durch die Schmelze darstellen.

Mithilfe dieser Methode lässt sich der Aufbau von Bauteilen simulieren. Ein Beispiel ist in Bild 8.4 zu sehen. Dort koppelt der Elektronenstrahl nacheinander an zwei Punkten Energie ein, wodurch zwei Wände entstehen. Nach dem Aufschmelzen einer Schicht wird eine neue Pulverschicht aufgelegt, die anschließend wieder aufgeschmolzen wird. Gut zu erkennen ist die durch Effekte der Oberflächenspannung und die Stochastik entstehende raue Wandoberfläche.



*Bild 8.4: Schichtweiser Aufbau von zwei Wänden;  
Nach dem Aufschmelzen einer Schicht wird eine neue  
Pulverschicht aufgelegt und wiederum aufgeschmolzen*

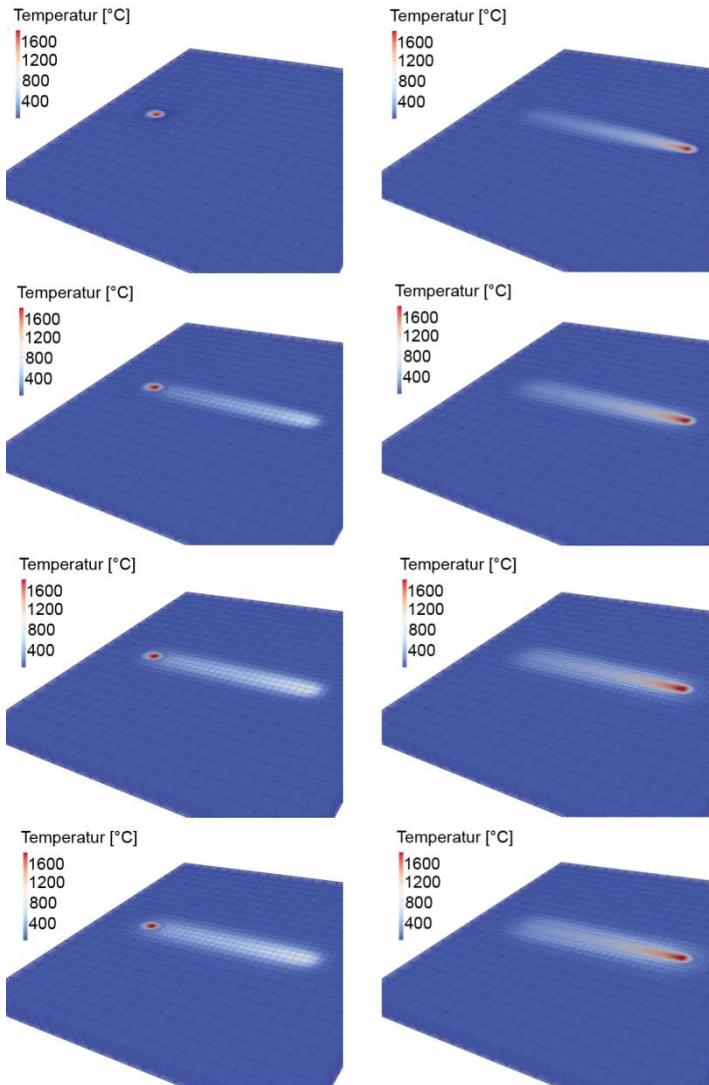
### 8.3.3 *Makroskopische Simulation*

Im selektiven Strahlschmelzprozess treten aufgrund des hohen Energieeintrags des Strahles sehr hohe Temperaturen und Temperaturgradienten in der näheren Umgebung des Strahles auf. Dies führt dazu, dass der pulverförmige Werkstoff aufschmilzt und nach Abkühlung zu einem Festkörper erstarrt. Da das Bauteil mit diesem Verfahren schichtweise gefertigt wird und der Strahl seine Energie nur in die jeweils oberste Schicht einbringt, herrschen in den einzelnen bisher aufgetragenen Schichten, unterschiedliche Temperaturverteilungen (siehe Bild 8.5).

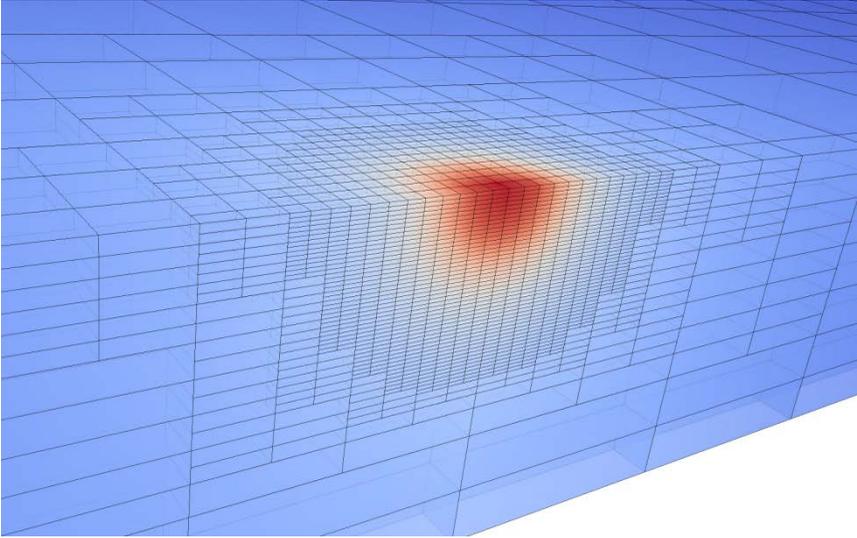
Das Resultat davon sind ungleiche Temperaturgradienten, die sich zwischen den Schichten ausbilden. In dem bis zu diesem Zeitpunkt aufgebauten Bauteil bilden sich diese Temperaturgradienten dann ebenfalls aus und führen zu Eigenspannungen im Bauteil, die auch nach dem vollständigen Abkühlen des Bauteils teilweise noch vorhanden sind. Diese Eigenspannungen beeinflussen neben der Festigkeit auch die Maßhaltigkeit des gefertigten Produkts, da sie einen Verzug des Bauteils verursachen.

Um die prozessbedingten Eigenspannungen und den Verzug zu reduzieren und die Festigkeit des Bauteils zu bestimmen, wird der schichtweise Aufbau aus makroskopischer Sicht mit der Methode der Finiten Elemente simuliert. Hierbei kommt ein nichtlineares, thermomechanisches Modell aus der Kontinuumsmechanik zum Einsatz, mit welchem die Temperaturverteilung während des Prozesses und dessen Auswirkung auf die Festigkeit und den Verzug des gefertigten Bauteils simuliert werden. Weiterhin wird ein komplexes Materialmodell entwickelt, das insbesondere die starke Temperaturabhängigkeit des Werkstoffs und dessen Phasenübergang über die Schmelze hin zum Festkörper beschreibt.

Die Implementierung der Modelle erfolgt mit der frei verfügbaren C++-Bibliothek deal.ii und nicht mit einer kommerziellen Software. Ein Grund hierfür ist, dass aufgrund der hohen Temperaturgradienten in der Strahlumgebung ein sehr feines Berechnungsgitter in diesem Gebiet benötigt wird, um ein möglichst präzises Ergebnis zu erhalten. Da aber für eine geringe Gesamtrechenzeit nur in diesem Gebiet ein sehr feines Gitter verwendet werden soll, ist eine adaptive Gitterverfeinerung notwendig, welche in den meisten kommerziellen Programmen nicht verfügbar ist oder für den selektiven Strahlschmelzprozess nur bedingt geeignet ist. In Bild 8.6 ist zu sehen, wie in der Umgebung des Strahls wegen des Auftretens hoher Gradienten das Gitter verfeinert wird.



*Bild 8.5: FEM-Simulation des Schichtweisen Aufbau einer Wand:  
 Links: Beginn des Verfahrens des Strahls  
 Rechts: Erreichen des Endes des Verfahrensweges des Strahls  
 innerhalb einer Schicht  
 Von Oben nach Unten: Aufbringung je einer neuer Schicht*



*Bild 8.6: Halbkugelförmige Wärmequelle als Strahl im Pulverbett*

Des Weiteren stellt das Aufbringen der einzelnen Schichten des pulverförmigen Werkstoffes in kommerzieller Software eine große Herausforderung dar, welches sich in deal.ii sehr einfach lösen lässt. Zudem bietet die Nutzung der Bibliothek deal.ii die Möglichkeit, das für den pulverförmigen Werkstoff neu zu entwickelnde Materialmodell völlig ohne Einschränkungen und damit dem Prozess optimal angepasst zu entwickeln sowie u. a. die Schrumpfung des pulverförmigen Werkstoffes beim Aufschmelzen zu berücksichtigen. Darüber hinaus geben kommerzielle Programme nur wenige Informationen über die von ihnen zur Berechnung verwendeten mathematischen Modelle, sodass die Verifikation einer Simulation des Strahlschmelzprozesses mit einer kommerziellen Software nicht oder nur eingeschränkt möglich wäre.

## **9 Danksagung**

Die Autoren danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für (DFG) für die Finanzierung des Sonderforschungsbereichs 814 – Additive Fertigung.