

Charakterisierung und Vorhersage der intrinsischen Wärmebehandlung in der pulverbettbasierten additiven Fertigung des Vergütungsstahls 42CrMo4 mittels numerischer Methoden

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)
von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)
angenommene

Dissertation

von

M.Sc. Philipp Schüßler

Tag der mündlichen Prüfung: 08.06.2026
Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. habil. Volker Schulze
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Thomas Niendorf

Kurzfassung

Der pulverbettbasierte Laserstrahlschmelzprozess (PBF-LB) ermöglicht die Herstellung komplexer metallischer Bauteile mit hoher Gestaltungsfreiheit. Für niedrig legierte Vergütungsstähle wie 42CrMo4 stellt jedoch die ausgeprägte thermische Zyklisierung während des schichtweisen Aufbaus eine besondere Herausforderung dar, da sie eine sogenannte intrinsische Wärmebehandlung bewirkt. Diese beeinflusst sowohl die Mikrostrukturentwicklung als auch die resultierenden Eigenschaften maßgeblich. Ziel dieser Arbeit war es, die thermischen und metallurgischen Mechanismen dieser intrinsischen Wärmebehandlung zu charakterisieren und durch numerische Methoden vorherzusagen. Hierzu wurden experimentelle Untersuchungen, Prozesssimulationen auf Basis der Finite-Elemente-Methode (FEM) und datengetriebene Prozessmodellierungen kombiniert.

Die experimentellen Ergebnisse zeigten, dass sich durch Variation der Prozessparameter und Belichtungsstrategien reproduzierbare lokale Härtegradienten einstellen lassen. Die Mikrostrukturanalysen belegten eine zyklische Abfolge von Austenitisierungs- und Anlassvorgängen, die charakteristisch für den PBF-LB-Prozess von Vergütungsstählen sind. Auf Grundlage dieser Befunde wurde ein physikalisch fundiertes FEM-Prozessmodell entwickelt und validiert. Es beschreibt den transienten Energieeintrag sowie die resultierende thermische und metallurgische Prozessdynamik mit hoher Genauigkeit. Durch Einbeziehung temperatur- und phasenabhängiger Materialeigenschaften konnten die experimentell beobachteten Zusammenhänge zwischen Prozessparametern, Temperaturhistorie und Härte- bzw. Mikrostrukturentwicklung konsistent reproduziert werden. Ergänzend wurde ein rekurrentes neuronales Netz zur datengetriebenen Vorhersage der zeitlich aufgelösten Temperaturhistorien entwickelt. Das Modell zeigte eine

hohe Prognosegüte bei signifikant reduziertem Rechenaufwand im Vergleich zur FEM-Simulation. Es erlaubte eine physikalisch konsistente Beschreibung der Prozessdynamik. Durch Integration und Anwendung erklärbarer Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) konnte der Einfluss einzelner Eingangsvariablen quantifiziert und die Modelltransparenz erhöht werden.

Die Verbindung von experimenteller Charakterisierung, FEM-Simulation und einem datengetriebenen Ansatz ermöglicht ein tiefgehendes Verständnis der intrinsischen Wärmebehandlungsprozesse während des PBF-LB-Verfahrens. Damit wurde eine Grundlage für eine physikalisch fundierte, KI-gestützte Prozessauslegung geschaffen, die eine gezielte Einstellung lokaler Materialeigenschaften bereits während der additiven Fertigung ermöglicht und zur industriellen Nutzung hochfester martensitischer Stähle beiträgt.

Abstract

The laser powder bed fusion process (PBF-LB) enables the production of complex metallic components with a high degree of design freedom. However, for low-alloy quenched and tempered steels such as 42CrMo4, the pronounced thermal cycling during the layer-by-layer build process poses a particular challenge, as it induces an intrinsic heat treatment. This intrinsic heat treatment significantly affects both the microstructural evolution and the resulting material properties. The objective of this work was to characterize the thermal and metallurgical mechanisms of this intrinsic heat treatment and to predict them using numerical methods. For this purpose, experimental investigations, finite element method (FEM)-based process simulations, and data-driven process modeling approaches were combined.

The experimental results demonstrated that reproducible local hardness gradients can be achieved by varying process parameters and exposure strategies. Microstructural analyses revealed a cyclic sequence of austenitization, martensitic transformation and tempering processes that are characteristic of the PBF-LB processing of quenched and tempered steels.

Based on these findings, a physically grounded FEM process model was developed and validated. The model accurately describes the transient energy input as well as the resulting thermal and metallurgical process dynamics. By incorporating temperature- and phase-dependent material properties, the experimentally observed relationships between process parameters, temperature histories, and the corresponding hardness and microstructure evolution could be consistently reproduced. In addition, a recurrent neural network was developed for the data-driven prediction of time-resolved temperature histories. The model achieved high predictive accuracy while significantly reducing the computational cost compared

to FEM simulations. It enabled a physically consistent description of the process dynamics. Through the integration and application of explainable artificial intelligence (AI) methods, the influence of individual input variables could be quantified, thereby enhancing model transparency.

The combination of experimental characterization, FEM simulation, and data-driven modeling provides an in-depth understanding of the intrinsic heat treatment processes occurring during PBF-LB. This establishes a foundation for a physically informed, AI-assisted process design that enables the targeted adjustment of local material properties during additive manufacturing and contributes to the industrial application of high-strength martensitic steels.

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Angewandte Materialien – Werkstoffkunde (IAM-WK) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) und wurde dankenswerterweise von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) finanziell gefördert.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr.-Ing. habil. Volker Schulze für die Möglichkeit, diese Arbeit an seinem Institut und unter seiner Betreuung anzufertigen. Das mir entgegengebrachte Vertrauen wusste und weiß ich sehr zu schätzen. Darüber hinaus danke ich ihm für die sorgfältige Durchsicht des Manuskripts sowie für die Übernahme des Hauptreferats. Zu jeder Zeit habe ich mich hervorragend betreut gefühlt.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Thomas Niendorf danke ich für die Übernahme des Korreferats und Frau Prof. Dr. Verena Weinhardt für die Übernahme des Vorsitzes.

Weiterhin möchte ich allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des IAM-WK danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Ein besonderer Dank gilt hierbei den Technikern, der mechanischen Werkstatt sowie der Metallographie für ihre tatkräftige Unterstützung.

Ebenso danke ich Dominik Kiefer, Fabian Mühl und James Damon herzlich für die fachlichen Diskussionen sowie die wertvollen Anregungen und hilfreichen Hinweise im Bereich der Modellierung und Simulation. Des Weiteren gilt mein Dank Steffen Czink sowie Lukas Englert für die zahlreichen und bereichernden Diskussionen zum PBF-LB-Prozess. Besonderen Dank möchte ich zudem an meine Kolleginnen und Kollegen der Abteilung Fertigung und Bauteilverhalten für die tolle Zusammenarbeit auf vielen Ebenen aussprechen.

Ein besonders herzlicher Dank gilt Herrn Dr.-Ing. Stefan Dietrich für alles, insbesondere jedoch für das mir entgegengebrachte Vertrauen sowie seine kontinuierliche Unterstützung und Hilfe bei sämtlichen fachlichen und organisatorischen Fragestellungen. Die gemeinsame Arbeit, aber auch die Radtouren, Reisen und die zahlreichen unterhaltsamen Gespräche waren für mich stets eine große Freude und werden mir in sehr guter Erinnerung bleiben. Vielen Dank für eine sehr schöne und lehrreiche Zeit.

Allen studentischen Hilfskräften sowie den Studierenden, die im Rahmen von Abschlussarbeiten an dieser oder weiteren Projekten mitgewirkt haben, danke ich herzlich für ihre engagierte Mitarbeit und die zuverlässige Unterstützung bei vielfältigen Aufgabenstellungen.

Der letzte und für mich wichtigste Dank gilt meinen Eltern und meinem Bruder, ohne deren fortwährende Unterstützung mein Bildungsweg und meine persönliche Entwicklung in dieser Form nicht möglich gewesen wären.

Karlsruhe, im Juni 2026

Philipp Schüßler

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	5
2.1	PBF-LB Prozess	5
2.1.1	Prozessablauf	5
2.1.2	Aufbau einer PBF-LB-Anlage	6
2.1.3	Prozessparameter	6
2.1.4	Scanstrategie	7
2.1.5	Prozessbedingte Defekte	7
2.1.6	Thermische Historie	7
2.1.7	Gezielte Einstellung von Bauteileigenschaften	8
2.2	Vergütungsstähle	8
2.2.1	Grundlagen	10
2.2.2	Mikrostrukturentwicklung	10
2.2.3	Vergütungsstähle im PBF-LB-Prozess	15
2.3	Numerische Modellierung des PBF-LB-Prozesses	18
2.3.1	FEM-Prozesssimulation	19
2.3.2	Deep-Learning basierte Prozessmodellierung	20
3	Material und Methoden	23
3.1	Material	23
3.2	Probengeometrien	24
3.3	Probenherstellung	25
3.4	Materialographische Untersuchungen	28
3.5	Dichtemessung	29
3.6	Dilatometrie	29

4	Modellierung des PBF-LB Prozesses	31
4.1	Materialmodelle	31
4.1.1	Modellierung des Umwandlungsverhaltens	31
4.1.2	Modellierung der Werkstoffeigenschaften	36
4.2	Modellierung der Laserquelle	40
4.2.1	Goldak-Laserquelle	40
4.2.2	Scanvektoräquivalente Laserquelle	41
4.2.3	Flächenäquivalente Laserquelle	42
4.3	FEM-Modell des PBF-LB-Prozesses	42
4.3.1	Analyse der Scanstrategie	44
4.3.2	Pre-Prozessor	45
4.3.3	Abaqus/Standard Framework	45
4.3.4	Abaqus/Standard Multiskalenmodell	46
4.3.5	Post-Prozessor	50
4.4	Deep-Learning-basierte Modellierung des PBF-LB-Prozesses	50
4.4.1	Modellarchitektur	51
4.4.2	Datensatz	51
4.4.3	Bewertung des optimierten Modells	53
5	Ergebnisse und Diskussion der experimentellen Untersuchungen	55
5.1	Ermittlung des optimalen Prozessfensters	55
5.2	Charakterisierung der intrinsischen Wärmbehandlung	
	homogener Bauteile	57
5.2.1	Einfluss der Volumenenergiedichte	57
5.2.2	Einfluss der Bauplattentemperatur	62
5.2.3	Einfluss der Scanvektorlänge und Querschnittsfläche	64
5.2.4	Einfluss der Mehrfachbelichtung	67
5.3	Einstellung gradierter Bauteilzustände	68
5.4	Diskussion	71
5.4.1	Einfluss der Volumenenergiedichte auf Mikrostruktur und Härte	71
5.4.2	Einfluss der Bauplattentemperatur auf Mikrostruktur und Härte	73

5.4.3	Einfluss der Scanvektorenlänge und Querschnittsfläche	75
5.4.4	Einfluss der Mehrfachbelichtung	76
5.4.5	Einstellung gradierter Bauteilzustände	78
6	Ergebnisse und Diskussion der FE-Prozessmodellierung	81
6.1	Modelloptimierung	81
6.1.1	Kalibrierung der Goldak-Laserquelle	81
6.1.2	Optimierung des Multiskalenansatzes	83
6.2	Vorhersage der intrinsischen Wärmebehandlung homogener Bauteile	86
6.2.1	Referenzparameter	86
6.2.2	Einfluss der VED	92
6.2.3	Einfluss der Bauplattentemperatur	96
6.2.4	Einfluss der Scanvektorenlänge und Querschnittsfläche	98
6.2.5	Einfluss der Mehrfachbelichtung	101
6.3	Vorhersage gradierter Bauteilzustände	103
6.4	Diskussion	105
6.4.1	Einordnung in den Stand der Technik	105
6.4.2	Validierung und Bewertung des Modells	105
6.4.3	Zeitlich-thermische Prozesshistorie	106
6.4.4	Einfluss der Prozessparameter	107
6.4.5	Simulation gradierter Bauteilzustände	108
7	Ergebnisse und Diskussion der Deep-Learning-basierten Prozessmodellierung	109
7.1	Optimierung des Deep-Learning Modells	109
7.1.1	Bewertungskriterien und Fehlermaße	110
7.1.2	Einfluss der Modellgröße	110
7.1.3	Temperatur- und Härteverläufe	112
7.1.4	Rechenaufwand	114
7.2	Analyse mit dem Deep-Learning Modell	115
7.2.1	Einfluss der Eingangsvariablen	116
7.2.2	Einfluss unterschiedlicher Prozesskategorien	117
7.3	Untersuchung der Generalisierung des Deep-Learning Modells .	119

7.4	Diskussion	124
7.4.1	Vergleich mit FEM-Simulation und experimentellen Ergebnissen	124
7.4.2	Bewertung der Modellarchitektur und der Relevanz der Eingangsvariablen	126
7.4.3	Fähigkeit zur Generalisierung und Übertragbarkeit	127
7.4.4	Bezug zu Grundlagen und Stand der Forschung	127
8	Zusammenfassung	131
	Literaturverzeichnis	135
	Eigene Publikationen	163
	Abkürzungs- und Symbolverzeichnis	170
A	Anhang	171

1 Einleitung

Die additive Fertigung metallischer Werkstoffe, insbesondere das pulverbettbasierte Laserstrahlschmelzen (engl. *Laser Powder Bed Fusion*, PBF-LB), hat sich in den letzten Jahren zu einer Schlüsseltechnologie der modernen Produktionstechnik entwickelt. Ihr wesentliches Potenzial liegt in der hohen geometrischen Gestaltungsfreiheit, welche die Herstellung komplexer, funktionsintegrierter Bauteile mit lokal angepassten Eigenschaften ermöglicht. Neben der Flexibilisierung des Fertigungsprozesses eröffnen sich dadurch neue Perspektiven für den Leichtbau, die Funktionsintegration und die ressourceneffiziente Herstellung von Komponenten. Trotz dieser Vorteile bleibt die industrielle Anwendung bislang auf eine begrenzte Werkstoffauswahl beschränkt, da die Prozessstabilität und die resultierenden Werkstoffeigenschaften bei hochlegierten und kohlenstoffhaltigen Stählen noch nicht hinreichend verstanden sind.

Vergütungsstähle wie 42CrMo4 besitzen aufgrund ihrer Kombination aus hoher Festigkeit, Verschleißbeständigkeit und Zähigkeit eine herausragende Bedeutung im klassischen Maschinenbau. Sie werden in hochbelasteten Strukturbauteilen, wie Wellen, Zahnrädern oder Bolzen, eingesetzt. Im Gegensatz zu austenitischen Edelmetallen weisen Vergütungsstähle jedoch eine eingeschränkte Schweißbarkeit auf, die sich aus dem hohen Kohlenstoffgehalt und der damit verbundenen martensitischen Umwandlung ergibt. Beim PBF-LB-Prozess führen die hohen lokalen Energieeinträge und Abkühlraten zu extremen thermischen Gradienten, die eine ausgeprägte Eigenspannungsbildung und Rissneigung begünstigen. Eine geeignete Prozessführung sowie eine gezielte thermische Beeinflussung während des Bauvorgangs sind daher entscheidend, um eine fehlerfreie Bauteilfertigung und reproduzierbare Werkstoffeigenschaften sicherzustellen.

Der PBF-LB-Prozess zeichnet sich durch eine charakteristische Abfolge lokaler Aufheiz- und Abkühlzyklen aus, die zu einer sogenannten intrinsischen Wärmebehandlung führen. Diese beeinflusst die Mikrostrukturentwicklung wesentlich, da innerhalb jedes Belichtungsvorgangs kurzzeitige Austenitisierungs- und Anlassvorgänge ablaufen. Im Gegensatz zur konventionellen Wärmebehandlung findet dieser Prozess *in-situ* während der Schichterzeugung statt und kann damit gezielt zur Einstellung lokaler Gefügestände genutzt werden. Während für gut schweißbare Legierungen bereits umfassende Untersuchungen zu den Prozess-Struktur-Eigenschaftsbeziehungen vorliegen, ist das Verständnis der thermischen und metallurgischen Mechanismen dieser intrinsischen Wärmebehandlung bei martensitischen Vergütungsstählen bislang unzureichend.

Das komplexe thermische und metallurgische Verhalten im PBF-LB-Prozess lässt sich aufgrund der stark gekoppelten und zeitlich hochdynamischen Vorgänge experimentell nur begrenzt erfassen. Numerische Simulationen ermöglichen es, die im Prozess auftretenden intrinsischen Umwandlungs- und Anlasseffekte systematisch zu untersuchen, ihre Ursachen zu identifizieren und deren Einfluss auf Mikrostruktur und mechanische Eigenschaften quantitativ zu bewerten. Besonders durch die Kombination thermischer Finite-Elemente-Modelle mit datengetriebenen Ansätzen des maschinellen Lernens ergibt sich ein hohes Potenzial, die komplexen Prozess-Struktur-Eigenschaftsbeziehungen beim PBF-LB von Vergütungsstählen ganzheitlich abzubilden. Die auf diese Weise erzielte Verknüpfung zwischen physikalischer Modellierung und datenbasierter Vorhersage bildet die Grundlage für ein vertieftes Prozessverständnis und eröffnet neue Möglichkeiten zur gezielten Steuerung der lokalen Werkstoffeigenschaften bereits während der additiven Fertigung.

Das übergeordnete Ziel dieser Arbeit besteht darin, die Zusammenhänge zwischen Prozessparametern, thermischen Randbedingungen und den mikrostrukturellen sowie mechanischen Eigenschaften des im PBF-LB-Verfahren hergestellten Vergütungsstahls 42CrMo4 systematisch aufzuklären. Hieraus soll eine Grundlage geschaffen werden, um den additiven Fertigungsprozess so zu gestalten, dass

die im Prozess inhärenten thermischen Zyklen gezielt zur Eigenschaftssteuerung genutzt werden können.

Im Einzelnen verfolgt die Arbeit folgende wissenschaftliche Zielstellungen:

- Analyse der thermischen und metallurgischen Mechanismen der intrinsischen Wärmebehandlung im PBF-LB-Prozess und deren Einfluss auf die Mikrostrukturentwicklung des Vergütungsstahls 42CrMo4,
- Identifikation und Quantifizierung der prozessbestimmenden Parameter, welche die Umwandlungs- und Anlasseffekte während der Fertigung maßgeblich beeinflussen,
- Entwicklung und Validierung eines physikalisch fundierten Prozessmodells auf Basis der Finite-Elemente-Methode (FEM), das die thermische und metallurgische Prozessdynamik beschreibt,
- Aufbau eines datengetriebenen Deep-Learning-Modells zur schnellen und präzisen Vorhersage der Temperaturhistorien und resultierenden Materialzustände sowie
- Integration der gewonnenen Erkenntnisse in eine prozessoptimierte Strategie, die eine gezielte Einstellung lokaler Materialeigenschaften bereits während der additiven Fertigung ermöglicht.

Die erzielten Erkenntnisse bilden die Grundlage für eine ganzheitliche Prozessauslegung, bei der die konventionelle Wärmebehandlung teilweise in den additiven Fertigungsprozess überführt werden kann. Damit wird ein wesentlicher Schritt zur Erweiterung der industriellen Anwendbarkeit des PBF-LB-Verfahrens für hochfeste, martensitische Stähle geschaffen.

2 Grundlagen

2.1 PBF-LB Prozess

Die additive Fertigung (engl. *Additive Manufacturing*, AM) gehört nach DIN 8580 zu den urformenden Fertigungsverfahren und umfasst Technologien, bei denen Bauteile schichtweise aus formlosen Ausgangsmaterialien hergestellt werden [1, 2]. Eine weit verbreitete Technologie stellt dabei der PBF-LB-Prozess dar [3]. Hierbei wird ein Metallpulver schichtweise durch lokal begrenztes Aufschmelzen mittels Laserstrahlung konsolidiert, bis die vollständige Geometrie aufgebaut ist [4]. Das Verfahren zeichnet sich durch hohe Präzision und Gestaltungsfreiheit aus und hat sich in Forschung und Industrie etabliert [5, 6].

2.1.1 Prozessablauf

Der Prozess beginnt mit der softwareseitigen Aufbereitung der Bauteildaten. Ausgehend von der CAD-Geometrie wird eine STL-Datei erzeugt, in der die Oberfläche durch Dreiecksflächen approximiert wird. Diese Datei wird in eine Slicer-Software geladen, welche die Geometrie aufteilt, Stützstrukturen generiert, die Belichtungsbahnen berechnet und Prozessparameter zuweist. Nach Erstellung des maschinenlesbaren Datensatzes wird die Bauplatte vorbereitet, das Pulver eingefüllt und die Baukammer mit Inertgas gespült, um Reaktionen mit der Atmosphäre zu verhindern. Der Bauvorgang erfolgt anschließend schichtweise durch Auftragen einer Pulverschicht, selektives Aufschmelzen mittels Laser und Absenken der Bauplatte. Dieser Zyklus wiederholt sich bis zum vollständigen Aufbau.

Nach dem Bauprozess werden Pulverreste entfernt und das Bauteil gegebenenfalls thermisch oder mechanisch nachbehandelt.

2.1.2 Aufbau einer PBF-LB-Anlage

Eine typische PBF-LB-Anlage besteht aus Pulvervorratsbehältern, Beschichtersystem, Baukammer und Laseroptik. Der Laserstrahl, meist eines Yb-Faserlasers mit einer Wellenlänge von etwa 1070 nm, wird über ein optisches Fenster in die Baukammer eingekoppelt. Die Strahlführung erfolgt über einen Galvoscaner mit beweglichen Spiegeln, während die Fokussierung über F-Theta-Linsen oder adaptive Systeme realisiert wird. Durch koordinierte Steuerung von Laser, Scanner und Beschichter wird die Bauteilgeometrie schichtweise erzeugt.

2.1.3 Prozessparameter

Der Belichtungsvorgang wird durch die Parameter Laserleistung P , Strahldurchmesser d_{Fokus} , Schraffurdistanz h , Schichthöhe t_S und Scangeschwindigkeit v bestimmt. Zur Beschreibung des Energieeintrags werden die Linienenergiedichte

$$\text{LED} = \frac{P}{v} \quad (2.1)$$

und die Volumenenergiedichte

$$\text{VED} = \frac{P}{v \cdot h \cdot t_S} \quad (2.2)$$

verwendet [7]. Diese Größen liefern eine vereinfachte Abschätzung des eingetragenen Energieflusses und bilden die Grundlage für die experimentelle und numerische Prozessanalyse.

2.1.4 Scanstrategie

Die Scanstrategie beschreibt das Muster und die Reihenfolge der Laserbahnen. Üblicherweise werden zunächst Konturbahnen zur Erzeugung glatter Oberflächen belichtet, gefolgt von einer schraffierten Innenfüllung. Zur Minimierung anisotroper Effekte wird die Schraffurrichtung zwischen aufeinanderfolgenden Schichten um einen festen Winkel, meist 67° , rotiert. Neben dem bidirektionalen Schraffurmuster existieren konturparallele, spiralförmige sowie streifenbasierte Strategien, deren Einsatz jedoch werkstoff- und geometriespezifisch erfolgt [4, 7].

2.1.5 Prozessbedingte Defekte

Die mechanischen Eigenschaften werden maßgeblich durch Defekte bestimmt, die während des Schmelzprozesses entstehen können. Der Grund hierfür ist die erhöhte Kerbwirkung bei mechanischer Belastung. Zu den häufigsten Defekten zählen *Lack-of-Fusion*-Poren infolge unzureichenden Energieeintrags sowie *Key-hole*-Poren, die bei überhöhter Energiedichte durch instabile Dampfkapillaren entstehen [8, 9]. Das *Balling*-Phänomen tritt bei zu hohen Scangeschwindigkeiten auf und führt zu einer ungleichmäßigen Tropfenbildung [10]. Zusätzlich können Heiß- und Kaltrisse sowie Verzug auftreten, die die Maßhaltigkeit und Prozessstabilität beeinflussen [11, 12].

2.1.6 Thermische Historie

Die thermische Historie beschreibt die zeitliche Temperaturentwicklung während des Schichtaufbaus [13]. Sie wird im Wesentlichen durch die eingetragene Energiemenge, die gewählte Scanstrategie und die lokale Bauteilgeometrie bestimmt. Kurze, hochenergetische Scanvektoren führen zu geringeren Abkühlraten, während lange Vektoren mit niedriger Energiedichte schnelle Abkühlungen begünstigen. Geometrische Besonderheiten wie Überhänge oder Wandstärken beeinflussen

die Wärmeleitung und führen lokal zu unterschiedlichen Temperaturzyklen. Diese wirken sich unmittelbar auf Mikrostruktur, Härte und Eigenspannungen aus [14–16].

2.1.7 Gezielte Einstellung von Bauteileigenschaften

Der PBF-LB-Prozess ermöglicht die lokale Steuerung der Mikrostruktur bereits während der Fertigung. Durch Variation der Prozessparameter oder Scanstrategie kann die thermische Historie und damit die resultierende Härte und Textur gezielt beeinflusst werden [17]. Aktuelle Forschungsansätze lassen sich in drei Richtungen einteilen: erstens das grundlegende Verständnis der Prozess-Struktur-Eigenschafts-Beziehungen, zweitens die Homogenisierung der Mikrostruktur durch angepasste Parameterführung und drittens die gezielte Erzeugung funktionaler Gradienten [18]. Letzteres wird vor allem durch lokale Variationen von Laserleistung, Schraffurwinkel oder Belichtungsstrategie realisiert [15, 19]. Solche Gradienten eröffnen neue Möglichkeiten zur lastangepassten Werkstoffgestaltung und bilden die Grundlage für die in dieser Arbeit untersuchten gradierten Eigenschaftsprofile.

2.2 Vergütungsstähle

In der additiven Fertigung mittels PBF-LB liegt der Schwerpunkt der Materialentwicklung bislang auf Aluminium-, Titan- und Nickelbasislegierungen sowie Edelmetalle. Diese Werkstoffgruppen sind vergleichsweise gut verarbeitbar, da keine kritische Phasenumwandlungen auftreten und die Schweißbarkeit in der Regel günstig ist.

Demgegenüber stehen martensitische Stähle, insbesondere hochfeste Vergütungsstähle, eine größere Herausforderung dar. Ihre Schweißbarkeit und die entstehenden Phasenanteile hängen stark von chemischer Zusammensetzung und Temperaturverlauf während des Prozesses ab. Zur Abschätzung der Gefügebildung dient

das *Schaeffler-Diagramm*, in dem Legierungselemente über Nickeläquivalent ω_{Ni} und Chromäquivalent ω_{Cr} korreliert werden [20, 21]. Die Schweißbarkeit lässt sich ergänzend durch das Kohlenstoffäquivalent (CEV) nach DIN EN 10025-1 charakterisieren [22].

Mit zunehmendem CEV steigt die Neigung zu Härte- und Kaltrissen infolge martensitischer Umwandlung beim Abkühlen. Typischerweise gilt hierbei:

- Gute Schweißbarkeit: $CEV < 0,45$
- Eingeschränkte Schweißbarkeit: $0,45 \leq CEV \leq 0,60$
- Kritische Schweißbarkeit: $CEV > 0,60$

Zur Einordnung werden exemplarisch der Edelstahl AISI 316L und der martensitische Vergütungsstahl 42CrMo4 betrachtet (Mittlere Literaturwerte). Für den austenitischen Edelstahl AISI 316L errechnet sich ein $CEV \approx 0,45$, womit er an der Grenze zur guten Schweißbarkeit liegt und im PBF-LB-Prozess zuverlässig verarbeitet werden kann [23, 24]. Der martensitische Vergütungsstahl 42CrMo4 (AISI 4140) zeigt aufgrund eines Kohlenstoffäquivalents von $CEV \approx 0,7$ eine kritische Schweißbarkeit. Dieser Wert übersteigt die Schwelle von 0,6 und weist auf eine erhöhte Anfälligkeit für Rissbildung hin [25–28].

Während austenitische Edelstähle wie AISI 316L im PBF-LB etabliert sind, bleibt die Verarbeitung von Vergütungsstählen wie 42CrMo4 anspruchsvoll. Die ausgeprägte Martensitbildung erhöht die Rissneigung und erschwert die Prozessstabilität, eröffnet aber zugleich das Potenzial, über gezielte Steuerung der Umwandlungen maßgeschneiderte mechanische Eigenschaften zu realisieren. Im Folgenden werden die relevanten metallurgischen Grundlagen für Vergütungsstähle im PBF-LB-Prozess zusammengefasst. Anschließend werden charakteristische Mikrostrukturen und Härteverläufe beschrieben. Der Stand der Verarbeitbarkeit im PBF-LB wird diskutiert und abschließend werden Ansätze zur gezielten Eigenschaftseinstellung eingeordnet.

2.2.1 Grundlagen

Vergütungsstähle sind in DIN EN ISO 683 genormt und besitzen einen Kohlenstoffgehalt von etwa 0,2 Massenprozent bis 0,7 Massenprozent [29, 30]. Es wird zwischen unlegierten Vergütungsstählen, bei denen Kohlenstoff das einzige Legierungselement darstellt und legierten Vergütungsstählen mit Zusätzen wie Cr, Mn, Mo oder Ni unterschieden [29, 30]. Die Legierungszusammensetzung steuert die Umwandlungstemperaturen und damit Aufhärbarkeit und Einhärbarkeit. Nach dem Vergüten, bestehend aus martensitischem Härten und anschließendem Anlassen, weisen Vergütungsstähle ein gutes Verhältnis aus Festigkeit und Duktilität auf (Zugfestigkeiten bis zu 2000 MPa, Bruchdehnungen bis zu 30 %) [11, 31–33]. Typische Anwendungen liegen in Fahrzeugtechnik und allgemeinem Maschinenbau (z. B. Kurbelwellen, Achsen, Pleuelstangen, Schrauben, Zahnräder) sowie in der Luft- und Raumfahrt (z. B. Fahrwerkskomponenten) [32, 34, 35].

2.2.2 Mikrostrukturentwicklung

Die Mikrostrukturentwicklung von Vergütungsstählen wird durch Wärmebehandlungen gezielt gesteuert, um definierte mechanische Eigenschaften einzustellen. Legierungselemente beeinflussen die Umwandlungskinetik und begünstigen die Bildung von Mischkarbiden und intermetallischen Phasen, wodurch sich Festigkeit und Zähigkeit einstellen lassen. Für die Vergütungsstähle sind insbesondere die Prozesse Austenitisierung, martensitische Umwandlung und Anlassen relevant, da sie die resultierende Mikrostruktur und Eigenschaften bestimmen. Der Fokus liegt auf niedrig legierten, untereutektoiden Vergütungsstählen, deren Verhalten durch das Zusammenspiel von Kohlenstoffgehalt und Karbidverteilung geprägt ist. Charakteristisch für den PBF-LB-Prozess sind hohe Aufheizraten und wiederholte thermische Zyklen, die insbesondere bei den Vergütungsstählen die Umwandlungstemperaturen verschieben, Diffusionsvorgänge begrenzen und damit die Mikrostruktur- und Härteentwicklung entscheidend beeinflussen.

Allgemeiner Ablauf metallurgischer Phasenumwandlungen

Metallurgische Phasenumwandlungen verlaufen in drei Stadien: Keimbildung, Wachstum und Vergrößerung [36]. Keime entstehen durch thermische Fluktuationen und werden erst oberhalb einer kritischen Größe stabil, die sich aus dem Gleichgewicht von Volumen-, Oberflächen- und elastischer Energie ergibt [37]. Heterogene Keimbildung an Defekten wie Korngrenzen, Versetzungen oder Phasengrenzen dominiert, da diese die Energiebarriere im Vergleich zur homogenen Keimbildung deutlich senken [36]. Das Wachstum erfolgt durch atomare Anlagerung an die Phasengrenze und ist zumeist diffusionsgesteuert. Unter Paragleichgewichtsbedingungen bleiben Substitutionsatomkonzentrationen näherungsweise konstant, während schnelle Zwischengitteratome die Kinetik bestimmen [38–41]. Nach Annäherung an das Phasengleichgewicht setzt die Vergrößerung ein, die in einphasigen Gefügen zur Kornvergrößerung infolge der Reduktion spezifischer Grenzflächenenergie führt. Bei Ausscheidungen bewirkt der Gibbs-Thomson-Effekt die Ostwald-Reifung, bei der sich stärker gekrümmte, kleinere Teilchen zugunsten größerer auflösen und so eine gröbere, homogenere Ausscheidungsverteilung entsteht [42–46].

Austenitische Umwandlung

Unter Austenitisieren wird die Umwandlung von Ferrit mit kubisch raumzentrierter (krz) Gitterstruktur zu Austenit mit kubisch flächenzentrierter (kfz) Struktur beim Überschreiten der kritischen Temperatur A_{C1} verstanden. Ort und Geschwindigkeit der Keimbildung hängen maßgeblich von der Ausgangsmikrostruktur ab [47, 48]. In Vergütungsgefügen mit Ferrit und Karbiden keimt Austenit bevorzugt an Karbid–Ferrit-Grenzflächen. Fein verteilte, kleine Karbide erhöhen die Anzahl potentieller Keimstellen, erleichtern die Karbidauflösung und verkürzen Diffusionswege für Kohlenstoff, wodurch die Umwandlung beschleunigt wird [48–51]. Abseits des Gleichgewichts verschieben steigende Aufheizraten die relevanten Temperaturen A_{C1} , A_{C3} und $A_{C, \text{hom}}$ zu höheren Werten, da für Diffusion bei gegebener Temperatur weniger Zeit zur Verfügung steht [52–57]. So konnte

Orlich et al. [58] einen Anstieg der A_{C1} - und A_{C3} -Temperaturen um 50 K bei einer Erhöhung der Aufheizrate von 1 K s^{-1} auf 2400 K s^{-1} aufzeigen. Unmittelbar nach Erreichen von A_{C3} liegt der Austenit häufig chemisch inhomogen vor, und erst bei $A_{C, \text{hom}}$ ist eine annähernd homogene Kohlenstoffverteilung erreicht. Zeit–Temperatur–Austenitisierungsdiagramme quantifizieren diese Ratenabhängigkeit für verschiedene Heizgeschwindigkeiten.

Martensitische Umwandlung

Die Martensitbildung tritt auf, wenn bei sehr hohen Abkühlgeschwindigkeiten keine Zeit für Diffusionsprozesse bleibt. Unter diesen Bedingungen wandelt sich das kubisch flächenzentrierte Gitter des Austenits durch eine koordinierte Scherbewegung der Eisenatome in eine tetragonal raumzentrierte Struktur um. Die im Austenit gelösten Kohlenstoffatome verbleiben in Oktaederlücken und verursachen eine tetragonale Verzerrung des Gitters [59]. Die martensitische Umwandlung ist diffusionslos und zeitunabhängig und hängt primär von der Unterkühlung ab. Beginn und Ende werden über die Temperaturen M_S (Martensitstart) und M_F (Martensitfinish) definiert [41]. Mit steigendem Kohlenstoffgehalt sinken M_S und M_F , sodass ab etwa 0,5 Massenprozent C bei Raumtemperatur messbarer Restaustenit verbleibt [59–62]. Die Martensitmorphologie wird in Latten- und Plattenmartensit klassifiziert und hängt von chemischer Zusammensetzung und Umwandlungstemperatur ab [63, 64]. Die durch das Aufweiten des martensitischen Gitters induzierten Spannungen erzeugen eine sehr hohe Versetzungsdichte, was die hohe Härte und Festigkeit des Martensits erklärt [41]. Im PBF-LB-Prozess führen hohe thermische Gradienten und wiederholte Zyklen zu lokalen Unterschieden in der Transformationskinetik. Untersuchungen zum Randschichthärten von 42CrMo4 zeigen einen ortsabhängigen Restaustenitgehalt mit einem Maximum in der Übergangszone, verursacht durch lokal erhöhte Kohlenstoffkonzentrationen in der Umgebung ehemaliger Karbide [54]. Diese inhomogene Verteilung verschiebt die M_S -Temperaturen und beeinflusst die resultierende Mikrostruktur [53].

Anlassvorgänge

Unter Anlassen wird das erneute Erwärmen eines zuvor martensitisch gehärteten Bauteils auf Temperaturen unterhalb der A_{C1} -Temperatur verstanden. Ziel ist der Abbau innerer Spannungen und die Einstellung eines ausgewogenen Verhältnisses zwischen Festigkeit und Duktilität. Anlassvorgänge senken die Härte der martensitischen Matrix und erhöhen die Kerbschlagzähigkeit [65–67]. Temperatur und Dauer richten sich nach chemischer Zusammensetzung und Zieleigenschaften. Mit steigender Anlasstemperatur setzen diffusionsgesteuerte Prozesse ein, darunter Kohlenstoffsegregation, Umwandlung von Restaustenit, Karbidbildung sowie Erholung und Rekristallisation der Matrix. Diese Vorgänge werden in charakteristische Anlassenstufen gegliedert [67–70]. Die Temperaturbereiche sind werkstoffabhängig [71]. Nach dem Abschrecken weist Martensit eine sehr hohe Versetzungsdichte auf. Die Spannungsfelder bieten bevorzugte Plätze für interstitiell gelösten Kohlenstoff, der dorthin diffundiert und Cluster bildet [67, 72, 73]. Dieser Prozess wird als *0. Anlassenstufe* (Raumtemperatur bis etwa 150 °C) bezeichnet und führt zu einer Teilsättigung von Gitterfehlern mit Kohlenstoff (bis ca. 0,2 Massenprozent) [74]. Bei Stählen mit niedrigem Kohlenstoffgehalt und hohen M_S -Temperaturen kann die Segregation bereits während des Abschreckens erfolgen (Selbstanlassen) [48, 75–77]. Messmethoden wie Leitfähigkeit, Dilatometrie und Atomsondentomographie belegen die Anreicherung an Versetzungen und Lattengrenzen [67, 72, 78, 79]. Um 140 °C dominiert die Diffusion zu Versetzungen, bei höheren Temperaturen die Segregation an Korngrenzen [80].

Die *1. Anlassenstufe* (100 °C bis 250 °C) ist durch die Ausscheidung von Kohlenstoff aus dem übersättigten Martensit gekennzeichnet. Es bildet sich metastabiles ϵ -Kamid mit hexagonal dichtest gepackter Struktur [79, 81]. Die Umwandlung geht mit einer Volumenabnahme einher, da angelassener Martensit mit Karbiden ein geringeres spezifisches Volumen besitzt. Bei sehr niedrigem Kohlenstoffgehalt kann die erste Stufe weitgehend ausbleiben und bei weiterer Erwärmung bildet sich direkt Zementit [82]. Nach Abschluss der ersten Stufe besteht das Gefüge aus angelassenem Martensit, Defekt-assoziierten Kohlenstoffclustern und fein verteilten ϵ -Karbiden.

In der 2. *Anlassstufe* (200 °C bis 300 °C) zerfällt vorhandener Restaustenit in Ferrit und Zementit [67, 83]. Der Prozess führt zu einem Volumenanstieg und ist bei geringen Restaustenitanteilen messtechnisch oft schwer von der dritten Stufe zu trennen [84]. In diesem Bereich kann die Anlassversprödung (engl. *tempered martensite embrittlement*, TME) auftreten [65, 85, 86]. Sie wird typischerweise auf grobe Zementitfilme zwischen Martensitlatten infolge der Auflösung von Restaustenit zurückgeführt [86–90].

Die 3. *Anlassstufe* (250 °C bis 400 °C) umfasst Ausscheidung und Wachstum von Zementit (Fe_3C). Aufgrund des geringeren spezifischen Volumens von Zementit gegenüber ϵ -Karbid tritt erneut eine Volumenabnahme auf. Versetzungen, Martensitlattengrenzen und ϵ -Karbid-Grenzflächen dienen als bevorzugte Keimstellen [75, 91]. Die Vergrößerung hängt stark von der Legierungszusammensetzung ab. Bei niedrigen Temperaturen dominiert Kohlenstoffdiffusion, oberhalb von 500 °C steuern langsamer diffundierende Substitutionsatome (z. B. Cr, Mo) die Wachstumsrate [92, 93]. Elemente wie Cr, Mo, Si und Mn hemmen die Vergrößerung und beeinflussen die Härteentwicklung [94, 95].

In der 4. *Anlassstufe* (ab etwa 450 °C) erfolgt ein Abbau der Versetzungsdichte sowie eine weitere Karbidvergrößerung [75]. Bei höheren Gehalten karbidbildender Elemente entstehen zwischen 500 °C bis 650 °C Sekundärkarbide, die zusätzlich verfestigen. Oberhalb von rund 700 °C setzt die Rekristallisation ein und die lattenartige Martensitmorphologie wird aufgelöst [67].

Die Anlassvorgänge sind überwiegend diffusionskontrolliert und damit zeit- und temperaturabhängig [66]. Für einen gegebenen Anlasszustand existieren äquivalente Kombinationen aus höherer Temperatur und kürzerer Dauer, wobei mit steigender Aufheizrate höhere Temperaturen erforderlich sind, um einen vergleichbaren Gefügestand zu erreichen [68].

In der ersten und dritten Anlassstufe verschieben sich die Umwandlungszonen mit zunehmender Aufheizrate zu höheren Temperaturen, nachgewiesen bis 100 Ks^{-1} [78, 96]. Auch der Zerfall von Restaustenit verschiebt sich zu höheren Temperaturen [68]. Hohe Aufheizraten führen zudem zu einer feineren und homogeneren

Zementitverteilung und begünstigen die Bildung von Intralattenzementit [97–99]. Dies folgt der klassischen Nukleationstheorie mit verkürzter Inkubationszeit, erhöhter Keimzahl und reduziertem mittleren Karbidurchmesser [97–100].

Die feinere Morphologie verbessert das Verhältnis von Festigkeit zu Duktilität. Auch bei längeren Haltezeiten bleibt die feine Karbidstruktur bei hohen Aufheizraten relativ stabil, da der Abbau der Versetzungsdichte geringer ausfällt und mehr Keimstellen erhalten bleiben. Neuere Ergebnisse zeigen eine erhöhte Kerbschlagzähigkeit bei schnellem Anlassen bei unveränderter Zugfestigkeit [101–103]. Ein reduzierter Zerfall von Restaustenit mindert zudem sprödigkeitsfördernde Zementitfilme an Martensitlattengrenzen [101].

2.2.3 Vergütungsstähle im PBF-LB-Prozess

Bei der additiven Fertigung von Vergütungsstählen mittels PBF-LB entsteht typischerweise eine angelassene martensitische Mikrostruktur, die aus der charakteristischen thermischen Historie des Verfahrens resultiert [104–107]. Der bahnen- und schichtweise Aufbau bewirkt eine intrinsische Wärmebehandlung mit wiederholten lokalen Aufheiz- und Abkühlzyklen, die das Gefüge beeinflussen [11, 108]. Neben der dominierenden Martensitbildung ist unter geeigneten Bedingungen auch Bainitbildung möglich, etwa bei speziellen bainitischen Stählen oder erhöhter Bauplattentemperatur (BPT) [33, 109, 110]. Insgesamt resultiert eine komplexe Mikrostruktur mit Merkmalen auf mehreren Längenskalen.

Auf der Makroskala treten nach Nital-Ätzung deutlich die Austenitisierungsgrenzen zwischen überlappenden Schmelzbädern hervor [108, 111]. Bereiche mit höheren Anlasstemperaturen und -zeiten erscheinen stärker angeätzt, während die Schmelzbadgrenzen selbst häufig nicht eindeutig zu identifizieren sind.

Auf der Mikroskala zeigt sich eine sehr feine, überwiegend martensitische Mikrostruktur ohne ausgeprägte kristallographische Textur entlang der Aufbaurichtung. Ehemalige Austenitkörner lassen sich über Orientierungsbeziehungen mittels

EBSD rekonstruieren und zeigen Großwinkelkorngrenzen sowie eine säulenförmige Anordnung in Aufbaurichtung [33, 112]. Innerhalb der ehemaligen Austenitkörner bilden sich blockweise angeordnete Martensitlatten aus. Feiner Restaustenit tritt hierbei bevorzugt an Lattengrenzen oder inhomogen an Schmelzbadrändern auf [33, 113]. Mikroseggregationen an Schmelzbadrändern werden auf Anreicherungen von Cr, Mn und Mo zurückgeführt [106]. Zudem findet sich eine hohe Dichte nano- bis mikrometergroßer Ausscheidungen (ϵ -Karnid, Zementit) als Folge der während des Prozesses ablaufenden Anlassvorgänge [11, 107, 108].

Die Mikrostrukturentwicklung folgt den prozessbedingten Temperaturverläufen. Während der Erstarrung wirken Abkühlraten von etwa $1 \cdot 10^4 \text{ K s}^{-1}$ bis $1 \cdot 10^6 \text{ K s}^{-1}$ [114, 115]. Austenit-Kornwachstum an den Schmelzbadrändern verläuft in Richtung des Schmelzbadzentrums und bevorzugt in kubischen Werkstoffen $\langle 100 \rangle$ -Richtungen [27]. Durch Schmelzbadüberlappung entsteht eine säulenförmige Geometrie der ehemaligen Austenitkörner, deren Ausrichtung stark von Prozessparametern und Scanstrategie abhängt [10, 116]. Die Morphologie der Erstarrung wird durch das Verhältnis aus Temperaturgradient G und Wachstumsrate R bestimmt, wodurch in Eisenbasislegierungen überwiegend zelluläre bis dendritische Strukturen entstehen [27, 117]. Die anschließende Abkühlung überschreitet die kritische Geschwindigkeit zur Martensitbildung meist deutlich, sodass eine nahezu vollständige martensitische Umwandlung erfolgt. Die wiederholten Umwandlungen können zu einer Reduzierung texturprägender Varianten führen und die schwache Texturausprägung erklären [64, 118, 119].

Ein kennzeichnender Aspekt des Prozesses sind unvermeidbare Anlassvorgänge im Sinne einer intrinsischen Wärmebehandlung. Durch den schichtweisen Aufbau entstehen zahlreiche kurzzeitige, hochdynamische Temperaturzyklen, in deren Folge Gefügebereiche partiell aufschmelzen, erneut austenitisieren oder angelassen werden [11]. Diese Vorgänge laufen während des PBF-LB-Prozesses über sehr kurze Zeiten bei hohen Aufheizraten ab.

Die Prozessentwicklung richtete sich zunächst auf dichte Bauteile mit minimaler Defekt- und Rissbildung, wobei Risse besonders bei höher kohlenstoffhaltigen Vergütungsstählen (AISI 4140, AISI 4340) beobachtet wurden [112, 120].

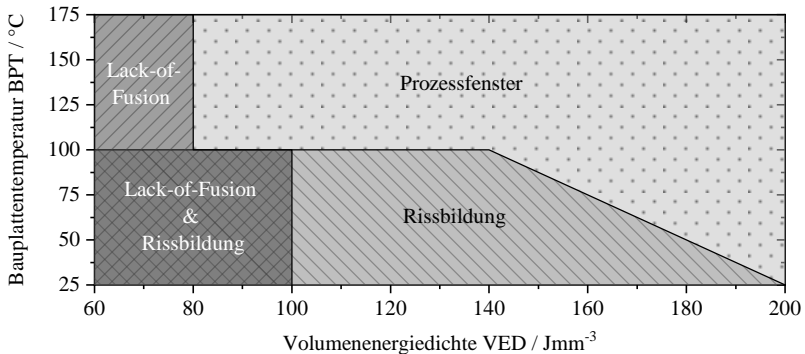


Abbildung 2.1: Experimentell bestimmtes PBF-LB-Prozessfenster für den Vergütungsstahl 42CrMo4 durch kombinierte Variation der Bauplattentemperatur BPT sowie der Volumenergiedichte VED nach Hearn et al. [112]. Neben dem Prozessfenster wurden die Bereiche mit ausgeprägter Rissbildung, Lack-of-Fusion Porosität sowie deren Kombination visualisiert.

Untersucht wurden insbesondere Laserleistung, Scangeschwindigkeit, Schraffurdistanz, Schichthöhe und BPT, oft in Kombination als Variation der VED [31, 105, 121, 122]. Abb. 2.1 visualisiert das von Hearn et al. [112] experimentell bestimmte Prozessfenster für den Vergütungsstahl 42CrMo4 durch die kombinierte Variation der VED und der BPT. Neben einem Bereich hoher Dichte ($> 99,8\%$) wurden zudem die drei Bereiche mit ausgeprägten Lack-of-Fusion Poren, Rissbildung und deren Kombination hinterlegt. Zusätzlich zur direkten Prozessoptimierung wurden geeignete Parameterbereiche zunächst durch Einzelbahnexperimente eingegrenzt [104, 111, 123]. Erste Studien zur Mehrfachbelichtung (MFB) zeigen Einflüsse auf die Härte, verhindern Rissbildung jedoch nicht [124]. Zudem wurden Pulverherstellung und -qualität hinsichtlich innerer Porosität und Partikelgrößenverteilung untersucht [106, 125–127]. Für Vergütungsstähle ist der Kohlenstoffgehalt besonders maßgeblich, da er zusammen mit Prozessparametern und Scanstrategie die Mikrostruktur bestimmt [128].

Gezielte Arbeiten zur lokalen Eigenschaftseinstellung während des PBF-LB-Prozesses liegen für Vergütungsstähle bislang nicht vor. Die starke Abhängigkeit

von Mikrostruktur und Härte von Prozessparametern, Scanstrategie und Geometrie weist jedoch auf das Potenzial hin, Eigenschaften orts aufgelöst anzupassen.

2.3 Numerische Modellierung des PBF-LB-Prozesses

Die numerische Modellierung des PBF-LB-Prozesses hat in den letzten Jahren stark an Bedeutung gewonnen, da sie eine wesentliche Grundlage für ein tieferes Prozessverständnis sowie für die Optimierung von Prozessparametern darstellt [129]. Grundsätzlich lassen sich drei methodische Ansätze unterscheiden: multiphysikalische Modelle auf Basis der Strömungssimulation, FEM-Simulationen und datengetriebene Verfahren der Künstlichen Intelligenz (KI) bzw. des maschinellen Lernens (engl. *machine learning*, ML).

Multiphysikalische Modelle beruhen auf der Abbildung der Fluidodynamik im Schmelzbad (engl. *computational fluid dynamics*, CFD) und erlauben eine detaillierte Beschreibung von Schmelzfluss, Konvektion und Oberflächenspannungseffekten. Sie liefern damit tiefgehende Einblicke in die Schmelzbadstabilität, Porenbildung und Oberflächenqualität [130].

Demgegenüber werden FEM-Modelle überwiegend zur Prozessvorhersage eingesetzt. Auf der Mesoskala wird das Pulverbett dabei häufig als homogenes Kontinuum mit effektiven thermophysikalischen Materialeigenschaften modelliert [130]. Auf der Makroskala erfolgt eine weitere Vereinfachung des Laserenergieeintrags, beispielsweise durch zeitlich gemittelte Energiequellen [131]. Je nach Abstraktionsgrad können einzelne Scanvektoren, mehrere Vektoren oder sogar komplette Schichten zusammengefasst werden. Auf diese Weise lassen sich größere Bauteile simulieren, wenngleich mit reduzierter Genauigkeit im Vergleich zu mesoskaligen oder CFD-Modellen [131, 132].

Einen dritten Ansatz bilden Methoden des maschinellen Lernens. Hierbei kommen unterschiedliche neuronale Netzwerkarchitekturen zum Einsatz. Diese Modelle

können sowohl zur in-situ Prozesskontrolle als auch zur ex-situ Prozessvorhersage eingesetzt werden [133–135]. Ihr Hauptvorteil liegt im geringen Rechenaufwand für die Vorhersage, wohingegen der initiale Trainingsprozess große Datenmengen und erhebliche Rechenressourcen erfordert [136].

2.3.1 FEM-Prozesssimulation

Die FEM stellt eines der zentralen Werkzeuge zur numerischen Abbildung der globalen Temperaturentwicklung sowie der resultierenden Mikrostruktur, mechanischen Eigenschaften und Eigenspannungen des PBF-LB-Prozesses dar. Grundlage ist die Lösung der Fourier'schen Wärmeleitungsgleichung. An der Oberfläche werden Wärmeverluste durch Strahlung und Konvektion berücksichtigt. Für den Energieeintrag durch den Laser wird häufig ein modifizierter Goldak-Ansatz verwendet, der ursprünglich aus der Schweißsimulation stammt [137] und an die Besonderheiten des PBF-LB-Prozesses angepasst wurde [138–140]. Hierbei wird die Laserquelle entsprechend der vorgegebenen Prozessstrategie über die Oberfläche bewegt. Der Ansatz zeigt sowohl im Nahfeld als auch im Fernfeld eine gute Übereinstimmung mit in-situ Temperaturmessungen [138]. Vereinfachungen durch linien- oder flächenäquivalente Energieeinträge, bei denen der Laserinput über längere Zeiträume gemittelt wird, sind ebenfalls gebräuchlich, gehen jedoch mit einem Genauigkeitsverlust im Nahfeld einher. Als Randbedingungen werden typischerweise die BPT, die thermophysikalischen Eigenschaften des Pulvers sowie Wärmeverluste an die Umgebung berücksichtigt. Für die Abbildung der Härteentwicklung durch zyklische Anlassprozesse von Vergütungsstählen wird in vielen Fällen auf den Hollomon-Jaffe-Ansatz zurückgegriffen, der ursprünglich für isotherme Anlassprozesse entwickelt [141] und durch Gomes et al. [142] für kontinuierliche Temperaturverläufe erweitert wurde.

Für den PBF-LB-Prozess existiert eine Vielzahl von FEM-Studien, die sich jedoch überwiegend auf Werkstoffe ohne Festkörperphasenumwandlungen wie 316L oder Aluminiumlegierungen konzentrieren. Hierbei wurden Makro- und Mesoskalenmodelle zur Beschreibung des Fernfeld-Temperaturverlaufs entwickelt

[138, 143–149]. Für martensitische Stähle mit komplexem Umwandlungs- und Anlassverhalten sind diese stark vereinfachenden Ansätze jedoch nicht geeignet. Die vereinfachten Modelle können hierbei den komplexen Temperaturverlauf im Nahfeld mit extremen Aufheiz- bzw. Abkühlraten, der zur Berechnung der Festkörperphasenumwandlungen benötigt wird, nicht detailliert genug wiedergeben.

Für Vergütungsstähle existieren bisher keine FEM-Simulationen, die den PBF-LB-Prozess direkt abbilden. Eine Grundlage bieten jedoch Modelle klassischer Wärmebehandlungen, wie etwa zum Abschrecken [150–152], Induktionshärten [99, 153–155], induktivem Bainitisieren [156, 157] oder Laserhärten [158, 159]. Diese Modelle können prinzipiell auf die additive Fertigung übertragen werden, müssen jedoch für die hohen Aufheiz- und Abkühlraten sowie die komplexe thermische Historie des PBF-LB-Prozesses erweitert bzw. validiert werden.

2.3.2 Deep-Learning basierte Prozessmodellierung

Neben physikbasierten Modellen kommen zunehmend datengetriebene Ansätze zum Einsatz. Grundlage bilden neuronale Netzwerke, deren Architektur an die jeweilige Problemstellung angepasst wird. Die *feedforward neural network* Architektur (FNN) findet vor allem Anwendung in der Regressionsanalyse, während die *convolutional neural networks* Architektur (CNN) insbesondere zur Auswertung bildgebender Daten geeignet sind. Für zeitabhängige Prozesse wie die Temperaturhistorie im PBF-LB-Prozess sind *recurrent neural network*-Modelle (RNN) sowie deren Weiterentwicklungen wie die *long short-term memory* (LSTM) oder die *gated recurrent unit* (GRU) Architekturen besonders geeignet [160–164]. Die *graph neural networks* Architektur (GNN) wiederum bieten Vorteile bei der Abbildung räumlicher Zusammenhänge [165].

In zahlreichen Übersichtsarbeiten wird der aktuelle Stand des Einsatzes des ML in der additiven Fertigung zusammengefasst [133, 135, 166–172]. Ein Großteil der bisherigen Arbeiten befasst sich mit Prozessüberwachung, Bauteildesign und der Optimierung von Prozessparametern. Einige Studien zeigen jedoch auch die Möglichkeit der Vorhersage resultierender Bauteileigenschaften. Die Integration von

Domänenwissen in die Modellentwicklung, auch als *theory-guided data science* bezeichnet, stellt dabei einen vielversprechenden Ansatz dar. Hierbei werden physikalische Gesetzmäßigkeiten entweder über die Wahl der Eingabedaten oder über die Modellarchitektur in den Lernprozess integriert. Dies ermöglicht nicht nur eine verbesserte Vorhersagegenauigkeit, sondern auch eine bessere Interpretierbarkeit der Modelle.

Beispiele für den Einsatz von ML und Deep-Learning im Bereich der Prozessparameteroptimierung sind die Vorhersage der Gleichgewichtstemperaturen zwischen der Bearbeitung mehrerer Schichten (engl. *interlayer temperature*) anhand thermografischer Aufnahmen während des Prozesses [173] oder die Identifizierung lokaler Temperaturüberhöhungen mittels Infrarotkameras [174]. Es existieren darüber hinaus Modelle zur Vorhersage der Schmelzbadgeometrie und der Bauteildichte, beispielsweise für Ti-6Al-4V [175]. Bei diesen Modellen wurden verschiedene ML-Algorithmen wie *linear regression* (LR), *decision tree regression* (DTR), *random forest regression* (RFR) und *multilayer perceptron* (MLP) verglichen.

Besonders herausfordernd ist die Vorhersage des zeitlichen Temperaturverlaufs. *Physics-informed neural networks* (PINN) stellen hierfür einen innovativen Ansatz dar, da sie partielle Differentialgleichungen in den Trainingsprozess integrieren und damit eine bessere physikalische Konsistenz erreichen [176]. Ihr Einsatz ist bislang jedoch auf vereinfachte Problemstellungen mit klar definierten Randbedingungen beschränkt, da komplexe Materialmodelle oder Phasenumwandlungen nur mit sehr hohem Rechenaufwand berücksichtigt werden können [177–179].

In der Praxis wird daher häufig auf klassische ML-Modelle zurückgegriffen, die anhand von Datensätzen aus Simulationen trainiert werden. Hierbei werden oftmals *physics-informed features*, also aus physikalischen Gesetzmäßigkeiten abgeleitete Eingabegrößen, verwendet [180–182]. Besonders hervorzuheben sind die Arbeiten von Mozaffar et al. und Choi et al., die die RNN- und GNN-Architektur miteinander kombinierten und damit sowohl zeitliche als auch räumliche Abhängigkeiten des DED-Prozess erfassen konnten [183–185]. Die Modelle von Choi et al. [184] stimmen qualitativ gut mit den FEM-Simulationen des Testdatensatzes

überein und zeigen einen Temperaturfehler von bis zu 300 K ($\approx 21\%$). Gleichzeitig verringern sie die Rechenzeit im Vergleich zu den FEM-Simulationen um das bis zu 400-Fache. Dem steht jedoch ein erheblicher Trainingsaufwand gegenüber, der mehrere Tage bis Wochen auf Hochleistungsrechnern erfordert. Zudem ist ihre Anwendbarkeit auf den PBF-LB-Prozess mit seinen extrem hohen zeitlichen und räumlichen Auflösungsanforderungen noch offen.

Insgesamt verdeutlicht die aktuelle Literatur, dass datengetriebene Modelle ein großes Potenzial für die Prozessmodellierung im PBF-LB besitzen. Sie ermöglichen schnelle Vorhersagen und können wertvolle Beiträge zur Prozessoptimierung leisten. Für den Einsatz bei komplexen Werkstoffsystemen wie martensitischen Vergütungsstählen ist jedoch eine enge Kombination mit physikbasierten Ansätzen erforderlich, um die komplexen Phasenumwandlungen und Anlassvorgänge adäquat abzubilden.

3 Material und Methoden

3.1 Material

Die Proben wurden aus gasverdüstem Pulver des Vergütungsstahls 42CrMo4 (engl. AISI 4140) hergestellt. Die chemische Zusammensetzung des Pulvers sowie der für diese Arbeit hergestellten Bauteile ist in Tabelle 3.1 dargestellt.

Die quantitative chemische Zusammensetzung des verwendeten Ausgangspulvers der Serien S1 bis S7 wurde von der MICA Analysen GmbH mittels Atomabsorptionsspektrometrie, optischer Emissionsspektrometrie sowie Heißgasextraktion bestimmt. Das Pulver wies eine Pulvergrößenverteilung mit einem D10 von 21 µm, D50 von 34 µm und ein D90 von 56 µm auf. Die Pulvergrößenverteilung dieses Pulver wurde von der Rosswag Engineering GmbH mittels der dynamischen Bildanalyse (Camsizer X2, Microtrac Retsch GmbH) bestimmt [186]. Die quantitative chemische Analyse des verwendeten Ausgangspulvers der Serie S8 wurde

Tabelle 3.1: Chemische Zusammensetzung des verwendeten Ausgangspulvers sowie der hergestellten Proben des Vergütungsstahls 42CrMo4 in Massenprozent. Rest Fe. Aufgeteilt anhand der Materialchargen der Serien S1-S7 sowie der Serie S8.

	C	Si	Mn	Cr	Mo
Norm	0,38–0,45	< 0,40	0,60–0,90	0,90–1,20	0,15–0,30
Pulver S1-S7	0,39	0,25	0,67	1,1	0,24
Proben S1-S7	0,39	0,29	0,69	1,06	0,24
Pulver S8	0,39	0,34	0,76	1,09	0,25
Proben S8	0,38	0,40	0,75	1,17	0,29

von der Abteilung Chemische Analytik am Institut für Angewandte Materialien - Angewandte Werkstoffphysik (IAM-AWP) mittels optischer Emissionsspektrometrie und Heißgasextraktion durchgeführt. Eine Pulvergrößenverteilung für das Ausgangspulver der Serie S8 liegt nicht vor. Die Analyse der chemischen Zusammensetzung aller hergestellten Probekörper wurde mittels Funkenspektrometrie durchgeführt.

3.2 Probengeometrien

Zur Charakterisierung verschiedener Einflussfaktoren auf die intrinsische Wärmebehandlung bei der additiven Fertigung des Vergütungsstahls 42CrMo4 wurden in dieser Arbeit unterschiedliche quaderförmige Probengeometrien eingesetzt. Zur Charakterisierung des Prozessfensters sowie der Einflussfaktoren der VED und der BPT mittels der Serien S1-S3 wurden rechteckigen Proben mit einer Kantenlänge der Querschnittsfläche von 5 mm ausgewählt. Für die Serien S4 bis S6 wurde die Geometrie der rechteckigen Proben, und damit die Querschnittsfläche, gezielt variiert. Dafür wurden Proben mit einer quadratischen Querschnittsfläche von 9 mm^2 bis 144 mm^2 (Kantenlänge von 3 mm bis 12 mm) und einer konstanten Höhe von 12 mm ausgewählt (Abb. 3.1).

Zur Einstellung gradierten Bauteilzustände wurde eine Probengeometrie mit einem rechteckigen Querschnitt (36 mm Länge und 12 mm Breite) erstellt. Die

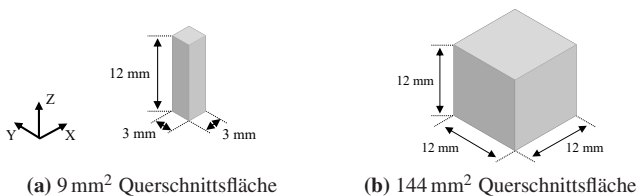


Abbildung 3.1: Übersicht der im Rahmen der additiven Fertigung verwendeten quaderförmigen Probengeometrien der Serien S1–S6. (a) Probengeometrie minimaler Querschnittsfläche sowie (b) die Probengeometrie maximaler Querschnittsfläche.

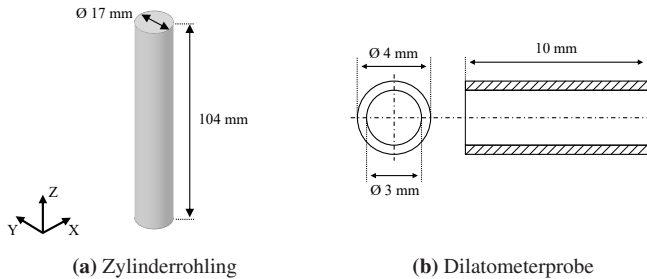


Abbildung 3.2: Darstellung des (a) mittels PBF-LB gefertigten Zylinderrohling (S8) für die Herstellung der Dilatometerproben sowie (b) finale Hohlprobengeometrie nach der subtraktiven Bearbeitung.

Querschnittsfläche von 432 mm^2 wurde dabei in drei gleichgroße quadratische Bereiche mit einer Querschnittsfläche von je 144 mm^2 unterteilt. Für jede dieser Zonen wurde die jeweilige Kombination der Prozessparameter gezielt variiert. Für die Dilatometerversuche wurde eine Hohlprobengeometrie mit einer Länge von 10 mm, einem Innendurchmesser von 3 mm sowie einem Außendurchmesser von 4 mm verwendet (Abb. 3.2b). Diese Hohlproben wurden aus additiv gefertigten Zylindern mit einer Höhe von 104 mm sowie einem Durchmesser von 17 mm subtraktiv gefertigt (Abb. 3.2a).

3.3 Probenherstellung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei verschiedene PBF-LB Anlagen zur Fertigung der Proben genutzt. Im folgenden werden diese im Detail beschrieben.

Nikon SLM Solution SLM280 2.0 Twin

Die Proben zur Charakterisierung des Einflusses unterschiedlicher Prozessparameter, -strategien und Geometrien (Serien S1-S7) wurden auf einer SLM280 2.0 Twin PBF-LB-Anlage (Nikon SLM Solution, Deutschland) der Firma Rosswag

Tabelle 3.2: Ausschnitt der für diese Arbeit wichtigsten Prozessparameterkombinationen P006, P030 und P076. Variiert wurden die Laserleistung P , die Scangeschwindigkeit v sowie der Schraffurabstand h . Die vollständige Liste aller verwendeten Prozessparameterkombinationen ist in Tabelle A.1 dargestellt.

	P / W	$v / \text{mm s}^{-1}$	h / mm	t_S / mm	$d_{\text{Fokus}} / \text{mm}$
P006	250	600	0,12	0,03	0,08
P030	150	400	0,14	0,03	0,08
P076	200	1000	0,1	0,03	0,08

Engineering GmbH hergestellt. Die Anlage verfügt über eine Baukammer mit einer nutzbaren Bauplattengröße von $280 \text{ mm} \times 280 \text{ mm}$ und einer maximalen Aufbauhöhe von 350 mm . Die Anlage verwendet ein Dual-Laser-System mit zwei 400 W Faser Lasern (YLR-400-WC) der Firma IPG Laser GmbH mit einer Wellenlänge von 1070 nm . Das optische System wird durch je einen digital gesteuerten varioSCAN Laser-Scanner der Firma SCANLAB GmbH vervollständigt. Die Laser-Scanner arbeiten mit einer dynamischen Flachfeldkorrektur zur Korrektur der Fokusslage auf der Aufbauebene. Die Bauplattform kann auf bis zu $200 \text{ }^\circ\text{C}$ aufgeheizt werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Laserleistung von 50 W bis 300 W , eine Scangeschwindigkeit von 400 mm s^{-1} bis 1100 mm s^{-1} , eine Schichthöhe von $0,03 \text{ mm}$ sowie ein Laserstrahldurchmesser von $0,08 \text{ mm}$ verwendet. Der Aufbauvorgang erfolgte unter einer Argonatmosphäre mit einem Restsauerstoffgehalt von $< 0,01 \%$. Die BPT wurde für die durchgeführten Druckjobs der Serien S1 sowie S4-S7 auf $200 \text{ }^\circ\text{C}$ bzw. auf $100 \text{ }^\circ\text{C}$ für die Serie S2 geregelt (Tabelle 3.3). Für die Serie S3 wurde die Bauplattenheizung ausgeschaltet. Als Slicer wurde Netfabb Premium 2021 und 2024 (Autodesk, USA) verwendet. Nach der Fertigstellung der Druckjobs wurden die einzelnen Proben mittels Drahterosion (Mitsubishi BA24, Mitsubishi Electric Corporation, Japan) von der Bauplatte entfernt. Die verwendeten Prozessparameterkombinationen sind in Tabelle 3.2 sowie in Tabelle A.1 aufgelistet.

Tabelle 3.3: Überblick über die Serien S1-S8, die in dieser Arbeit durchgeführt wurden, einschließlich deren BPT, sowie die Abschnitte, in denen ihre Auswertung und Analyse stattfand.

Serie	PBF-LB Anlage	BPT	Auswertung
S1	SLM280	200 °C	5.1, 5.2.1, 5.2.2, 5.2.3
S2	SLM280	100 °C	5.2.2
S3	SLM280	Ungeregelt	5.2.2
S4	SLM280	200 °C	5.2.3, 5.2.4
S5	SLM280	200 °C	5.2.3
S6	SLM280	200 °C	5.2.4
S7	SLM280	200 °C	5.3
S8	GE CL M2	150 °C	4.1.2

GE Additive Concept Laser M2

Die Proben für die Dilatometeruntersuchungen (Serie S8) wurden auf einer Concept Laser M2 PBF-LB-Anlage (GE Additive, USA) der Firma Jell GmbH & Co. KG hergestellt. Die Anlage verfügt über eine Baukammer mit einer nutzbaren Bauplattengröße von 245 mm × 245 mm und einer maximalen Aufbauhöhe von 350 mm. Die Anlage verwendet ein Laser-System mit einem 400 W Faser Laser mit einer Wellenlänge von 1070 nm. Die Bauplattform kann auf bis zu 650 °C aufgeheizt werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine konstante Laserleistung von 350 W, eine Scangeschwindigkeit von 800 mm s⁻¹, eine Schichthöhe von 0,05 mm sowie ein Laserstrahldurchmesser von 0,175 mm verwendet. Für die Scanstrategie wurde eine konstante Schraffurdistanz von 0,11 mm in Kombination mit einem Streifenmuster mit einer Breite von 5 mm sowie einer schichtweisen Rotation des Scanmusters von 72° pro Schicht gewählt. Der Aufbauvorgang erfolgte unter einer Argonatmosphäre mit einem Restsauerstoffgehalt von < 0,01 %. Die BPT wurde für den durchgeführten Druckjob der Serien S8 auf 150 °C geregelt (Tabelle 3.3). Nach der Fertigstellung des Druckjobs wurden die Proben mittels

Drahterosion (Mitsubishi BA24, Mitsubishi Electric Corporation, Japan) von der Bauplatte entfernt.

3.4 Materialographische Untersuchungen

Im Rahmen dieser Arbeit wurden metallografische Untersuchungen an den aufgebauten Probekörpern durchgeführt. Zur Untersuchung aufgebauter Probekörper wurden xy - und xz -Schliffe (in Aufbaurichtung und senkrecht zur Aufbaurichtung) angefertigt. Die Probekörper wurden hierzu zunächst mechanisch getrennt und eingebettet. Anschließend wurden die Probenkörper mit SiC-Schleifpapier bis zu einer Körnung von P4000 geschliffen und mit Diamantsuspension in drei Schritten poliert. Zur Freilegung der Mikrostruktur inklusive der Karbide wurden die Proben für 2 s bis 4 s in einer 1 % Nitallösung angeätzt. Die Schliffe der Proben wurden zusätzlich mit einer dünnen Au-Schicht besputtert, um die Leitfähigkeit über die Karbide hinweg sicherzustellen. Zur Bildgebung wurden sowohl ein Lichtmikroskop als auch ein Rasterelektronenmikroskop (REM) verwendet. REM-Untersuchungen umfassten die Bildgebung mit Sekundärelektronen- (SE) und Rückstreuerelektronenkontrast (BSE). Lichtmikroskopische Aufnahmen wurden an einem Lichtmikroskop der Carl Zeiss AG erstellt. Elektronenmikroskopische Untersuchungen erfolgten an einem REM vom Typ LEO 50 der Carl Zeiss AG. Für die REM-Aufnahmen wurde eine Beschleunigungsspannung von 10 kV ausgewählt.

Die Härte nach Vickers wurde mit einem Härteprüfer Qness Q10A (ATM Qness GmbH, Österreich) mit einer Belastung von 10 N und einer Verweilzeit von 10 s (HV1) nach DIN EN ISO 6507 geprüft [187]. Zur Bestimmung der mittleren Härte verschiedener Prozessparameter-, Prozessstrategie- und Geometriekombination wurden 5 bis 20 Härteprüfungen pro Probe und Querschliffrichtung durchgeführt und gemittelt (in Abhängigkeit der vorhandenen Querschlifffläche).

3.5 Dichtemessung

Zur Ermittlung der Gesamtporosität wurde die Dichte der im Rahmen dieser Arbeit hergestellten Proben nach dem Prinzip von Archimedes bestimmt (DIN 66137-3 [188]). Die Messung wurde mit einem speziellen Aufbau der Firma Mettler Toledo auf einer Mettler Toledo ME204T/00 Analysenwaage mit einer Ablesbarkeit von 0,1 mg durchgeführt. Zur Messung wurde das Gewicht der Proben an Luft und unter Ethanol gemessen. Als zweite Methode wurde die relative Dichte mittels einer Grauwertanalyse metallographischer Querschliffe ermittelt. Hierfür wurde die Software Fiji ImageJ eingesetzt [189].

3.6 Dilatometrie

Die dilatometrischen Untersuchungen erfolgten an einem Abschreckdilatometer des Typs DIL 805A/D der Firma TA Instruments (ehemals Bähr Thermoanalyse). Das Dilatometer erlaubt eine gleichzeitige induktive Erwärmung und Helium-Abschreckung der Proben, wodurch sowohl präzise isotherme als auch kontinuierliche Wärmebehandlungsverläufe eingestellt werden können. Die Längenänderung der Probe wird hierbei über die relative Verschiebung zweier SiO₂-Schubstangen über einen induktiven, linearen Dehnungsaufnehmer aufgenommen. Die Temperatur wurde bei allen Versuchen über Thermoelemente (Typ-S) mit einem Durchmesser von 0,1 mm in der Mitte der Probe gemessen.

Zur Modellierung der Abhängigkeit der resultierenden Härte vom Temperatur-Zeit-Verlauf wurden alle Hohlproben (Abb. 3.2) zuerst austenitisiert (60 s bei 950 °C), innerhalb von 2 s mittels Helium auf Raumtemperatur unregelmäßig abgeschreckt und anschließend kontinuierlich mit Aufheizraten von 1 K s⁻¹ bis 1000 K s⁻¹ auf Anlasstemperaturen von 200 °C bis 600 °C aufgeheizt. Zur Validierung der Härtemodellierung wurden zudem Anlassversuche mit der resultierenden Mikrostruktur nach der additiven Fertigung durchgeführt. Diese Proben wurden ohne vorheriges Austenitisieren direkt kontinuierlich mit Aufheizraten von 1 K s⁻¹ bis 1000 K s⁻¹ auf Anlasstemperaturen von 400 °C bis 600 °C aufgeheizt.

Zur Modellierung der martensitischen Umwandlung in Abhängigkeit des Temperaturverlaufs wurden zusätzliche Versuche durchgeführt. Hierfür wurden die Proben bei 950 °C für 60 s austenitisiert und anschließend geregelt mit Abkühlraten von 70 K s⁻¹ bis 500 K s⁻¹ oder unregelt innerhalb von 2 s auf Raumtemperatur abgekühlt. Hierbei wurde neben dem Temperaturverlauf auch die Längenänderung der Probe aufgezeichnet und ausgewertet.

4 Modellierung des PBF-LB Prozesses

4.1 Materialmodelle

4.1.1 Modellierung des Umwandlungsverhaltens

Die thermischen Umwandlungsvorgänge des eingesetzten Vergütungsstahls 42Cr-Mo4 lassen sich in Phasenübergänge mit Zustandsänderung (Schmelzen, Erstarren, Verdampfen) sowie in Festkörperphasenumwandlungen (diffusionsgesteuert und diffusionslos) unterteilen. Beide Umwandlungstypen sind integraler Bestandteil der FEM-basierten Prozesssimulation des PBF-LB Verfahrens.

Die Modellierung erlaubt die Berechnung der aktuellen Phasenanteile $w_{\text{Phase}}(t_i)$ sowie deren zeitlicher Inkremente $\Delta w_{\text{Phase}}(t_i)$ für jedes Zeitschrittintervall der Simulation. Die Änderungsrate des Phasenanteils wird durch eine eindimensionale Differenzenbildung approximiert:

$$\Delta w_{\text{Phase}}(t_i) = w_{\text{Phase}}(t_i) - w_{\text{Phase}}(t_{i-1}) \quad (4.1)$$

Im Falle einer Umwandlung mehrerer Ausgangsphasen in eine Zielphase erfolgt die Aufteilung der Inkremente proportional zu den jeweiligen Phasenanteilen gemäß dem Prinzip der Massenbilanz.

Bei der Verwendung isothermer Umwandlungsmodelle ist zur Abbildung transienter Temperaturverläufe im PBF-LB-Prozess eine Approximation durch infinitesimale, isotherme Bereiche erforderlich. Voraussetzung hierfür ist die Annahme der

Additivität der Umwandlungsanteile. Die Berechnung des Phasenanteils $w_{\text{Phase}}(t_i)$ zum aktuellen Zeitpunkt t_i bei der Temperatur T_i erfolgt in mehreren Schritten. Zuerst erfolgt die Bestimmung derjenigen fiktiven Zeit τ_i , die bei isothermer Betrachtung auf dem aktuellen Temperaturniveau T_i erforderlich wäre, um den zuvor berechneten Phasenanteil $w_{\text{Phase}}(t_{i-1})$ zu reproduzieren. Die fiktive Zeit τ_i wird hierbei mittels der Umformulierung der isothermen Umwandlungsgleichung nach der Zeit berechnet. Anschließend erfolgt die Berechnung des aktualisierten Phasenanteils $w_{\text{Phase}}(t_i)$ unter Verwendung einer modifizierten Zeitbasis $t_i^* = \tau_i + \Delta t$. Durch diese Vorgehensweise lässt sich das Umwandlungsverhalten unter realistischen, nicht isothermen Bedingungen mit hinreichender Genauigkeit abbilden.

Modellierung des Schmelzens, Erstarrens und Verdampfens

Die Phasenumwandlungen zwischen den Zuständen Festkörper, Pulver und Schmelze wurden durch eine vereinfachte Beschreibung des Übergangsbereichs zwischen der Solidustemperatur T_S und der Liquidustemperatur T_L modelliert.

Es wurde zwischen den Prozessen des Schmelzens ($\Delta T > 0$) und des Erstarrens ($\Delta T < 0$) unterschieden. Beim Schmelzen erfolgt der Übergang von Festkörper und/oder Pulver in die Schmelze. Im Gegensatz dazu kann beim Erstarren ausschließlich Festkörper entstehen. Eine Rückumwandlung zu Pulver ist definitionsgemäß ausgeschlossen. Somit ist Pulver lediglich durch Aufschmelzen in die Schmelzphase überführbar, nicht jedoch über eine Umkehrung des Erstarrungsvorgangs wiederherstellbar.

Die Änderung der jeweiligen Phasenanteile w wurde auf Basis der aktuellen Temperatur T_i und der Phasenzusammensetzung des vorhergehenden Zeitschritts t_{i-1} berechnet. Die Inkremente der flüssigen Phase w_L , des Pulvers w_P sowie des Festkörpers w_{FK} wurden gemäß den folgenden Gleichungen bestimmt:

$$\Delta w_L(T_i, t_i) = A_{\min} + \frac{A_{\max} - A_{\min}}{1 + \left(\frac{x_0}{T_i}\right)^p} - w_L(T_{i-1}, t_{i-1}) \quad (4.2)$$

$$\Delta w_P(T_i, t_i) = \begin{cases} -\Delta w_L(T_i, t_i) \cdot \frac{w_P(T_{i-1}, t_{i-1})}{w_L(T_{i-1}, t_{i-1}) - w_P(T_{i-1}, t_{i-1})}, & \text{für } \Delta T > 0 \\ 0, & \text{für } \Delta T < 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

$$\Delta w_{FK}(T_i, t_i) = \begin{cases} -\Delta w_L(T_i, t_i) \cdot \frac{w_{FK}(T_{i-1}, t_{i-1})}{w_L(T_{i-1}, t_{i-1}) - w_{FK}(T_{i-1}, t_{i-1})}, & \text{für } \Delta T > 0 \\ -\Delta w_L(T_i, t_i), & \text{für } \Delta T < 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

Die zur Modellierung verwendete Solidustemperatur $T_S = 1698$ K und Liquidustemperatur $T_L = 1768$ K wurden der Literatur entnommen [190]. Die Randbedingungen für die Phasenanteile wurden wie folgt definiert: Unterhalb der Solidustemperatur liegt der Festkörper und/oder Pulver vor ($w_{FK} + w_P = 1$ und $w_L = 0$), oberhalb der Liquidustemperatur liegt ausschließlich Schmelze vor ($w_{FK} = w_P = 0$ und $w_L = 1$). Daraus wurden für die Wachstumsfunktion die Koeffizienten $A_{\min} = 0$, $A_{\max} = 1$, $x_0 = 1726$ K und $p = 186,4$ bestimmt. Die Zustandsänderung durch Verdampfung wurde aufgrund der durch den verwendeten FEM-Solver bedingten Einschränkungen nicht implementiert.

Modellierung der Austenitumwandlung

Die Austenitisierung beschreibt die temperaturinduzierte Umwandlung der krz-Phasen Martensit (inkl. aller Anlassenstufen), Bainit oder Ferrit/Perlit in die kfz-Phase Austenit. Zur Modellierung dieser Phasenumwandlung wurde ein Ansatz aus der Literatur verwendet, der für den Vergütungsstahl 42CrMo4 entwickelt wurde [52]. Die Beschreibung basiert auf der JMAK-Gleichung für isotherme Bedingungen:

$$w_A(T, t) = 1 - \exp(-b_A(T) \cdot t^{n_A}) \quad (4.5)$$

$$b_A(T) = c_A \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_A}{k \cdot T}\right) \quad (4.6)$$

Der Wachstumsexponent beträgt $n_A = 1,525$, die Geschwindigkeitskonstante $c_A = 2,84 \cdot 10^{20} \text{ s}^{-1}$, die Aktivierungsenergie $\Delta H_A = 6,7 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ und die Boltzmann-Konstante $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$. Die Modellierung der Phasenanteile in transienten Temperaturfeldern erfolgte anschließend mittels des zuvor beschriebenen

inkrementellen Treppenstufenansatzes, der zur Approximation des zeitlich variablen Temperaturverlaufs eingesetzt wurde. Das verwendete Modell berücksichtigt explizit die Abhängigkeit der Umwandlungsgeschwindigkeit von der Aufheizrate. Ursprünglich wurde es für Prozesse mit moderaten Aufheizraten (bis zu 10000 K s^{-1}) entwickelt, wie sie z. B. bei Laserrandschichtwärmebehandlungen auftreten [52, 158, 159]. Im Vergleich hierzu liegen die maximalen Aufheizraten im PBF-LB-Prozess deutlich höher, dies führt in der Modellanwendung jedoch zu einer unrealistischen Verschiebung des Austenitbildungsbeginns zu hohen Temperaturen. Aus diesem Grund wurde in der vorliegenden Arbeit die maximal zulässige Aufheizrate innerhalb der Modellimplementierung begrenzt, um eine physikalisch plausible Abbildung der Austenitumwandlung sicherzustellen.

Modellierung der Martensitumwandlung

Die Martensitumwandlung wird mithilfe des Koistinen-Marburger-Modells beschrieben, das die diffusionslose Umwandlung unterhalb einer charakteristischen Temperatur T_{KM} erfasst:

$$w_{\text{M}}(T) = 1 - \exp(-\alpha_{\text{M}}(T_{\text{KM}} - T)) \quad (4.7)$$

Für den in dieser Arbeit eingesetzten Vergütungsstahl 42CrMo4 wurden die relevanten Materialparameter gemäß der eigenen Veröffentlichung auf Basis der chemischen Zusammensetzung des Werkstoffs sowie Dilatometerversuchen bestimmt [191]. Die Parametrisierung basiert auf den Ansätzen von van Bohemen und Sietsma [192]. Für die in dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen wurden ein Temperaturkoeffizient der Umwandlung von $\alpha_{\text{M}} = 1,76 \cdot 10^{-2} \text{ K}^{-1}$ sowie eine Koistinen–Marburger-Temperatur von $T_{\text{KM}} = 363 \text{ }^\circ\text{C}$ (636 K) verwendet.

Modellierung der Ausscheidungskinetik für ε -Karbid während des Anlassens von Martensit

Die Ausscheidungskinetik von ε -Karbid während des Anlassens von Martensit im niedrigen Temperaturbereich der ersten Anlassstufe wurde durch ein kinetisches Modell auf Basis der JMAK-Gleichung beschrieben [193–195]:

$$w_{\varepsilon}(T, t) = 1 - \exp(-b_{\varepsilon}(T) \cdot t^{n_{\varepsilon}}) \quad (4.8)$$

$$b_{\varepsilon}(T) = c_{\varepsilon} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_{\varepsilon}}{k \cdot T}\right) \quad (4.9)$$

Dieses Modell erfasst die zeitabhängige Bildung von ε -Karbid aus übersättigtem Martensit und wurde in der vorliegenden Arbeit unter Verwendung der von Kaiser et al. [99] für den Vergütungsstahl 42CrMo4 bestimmten Parameter implementiert. Für die in dieser Arbeit verwendeten Berechnungen wurden ein Wachstumsexponent von $n_{\varepsilon} = 0,42$, eine Geschwindigkeitskonstante von $c_{\varepsilon} = 8,79 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$ sowie eine Aktivierungsenergie von $\Delta H_{\varepsilon} = 1,75 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ zugrunde gelegt. Die Boltzmann-Konstante wurde mit $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ berücksichtigt.

Modellierung der Ausscheidungskinetik für Zementit während des Anlassens von Martensit

Die Bildung von Zementit während der dritten Anlassstufe, die im höheren Temperaturbereich des Anlassvorgangs auftritt, wird durch ein modifiziertes JMAK-Modell beschrieben [99]. Dieses Modell berücksichtigt die Wachstumshemmung mit dem Parameter $r_Z = 1,5$ (JMAK: $r_Z = 1$, Austin-Rickett: $r_Z = 2$ [196]):

$$w_Z(T, t) = 1 - \left(1 + (r_Z - 1) \cdot b_Z(T) \cdot t^{n_Z(T)}\right)^{-\frac{1}{r_Z}} \quad (4.10)$$

$$b_Z(T) = c_Z(T) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_Z(T)}{k \cdot T}\right) \quad (4.11)$$

Tabelle 4.1: Implementierte Koeffizienten a_0 , a_1 sowie a_2 der temperaturabhängigen Funktionen $n_Z(T)$, $c_Z(T)$ und $\Delta H_Z(T)$, zur Beschreibung der Zementit-Ausscheidungskinetik nach Kaiser et al. [99]. Die funktionale Temperaturabhängigkeit der genannten Parameter ergibt sich aus der in Gleichung (4.12) angegebenen polynomialen Darstellung $f(T)$.

	a_0	a_1	a_2
$n_Z(T)$	1,53	$-1,9 \cdot 10^{-3}$	$1,50 \cdot 10^{-6}$
$c_Z(T)$	$5,4 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$	$-6,78 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1}$	$3,56 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-2}$
$\Delta H_Z(T)$	$2,74 \cdot 10^{-19} \text{ J}$	$-1,47 \cdot 10^{-24} \text{ JK}^{-1}$	$2,05 \cdot 10^{-26} \text{ JK}^{-2}$

Dabei werden die temperaturabhängigen Kinetikparameter (der Wachstumsexponent $n_Z(T)$, die Geschwindigkeitskonstante $c_Z(T)$ sowie die Aktivierungsenergie $\Delta H_Z(T)$) jeweils durch ein Polynom zweiten Grades $f(T)$ beschrieben:

$$f(T) = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 \quad (4.12)$$

Die Boltzmann-Konstante wurde mit $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ berücksichtigt. Das Modell erlaubt die Zuordnung eines Teils des ursprünglich martensitisch umgewandelten Gefüges zur dritten Anlassstufe. In Kombination mit dem Modell zur ε -Karbiddbildung ergibt sich eine Aufteilung des Martensits in: unangelernten, erste Anlassstufe (AS1), und dritte Anlassstufe (AS3). Die temperaturabhängigen Koeffizienten zur Berechnung der jeweiligen Kinetikparameter sind in Tabelle 4.1 aufgeführt.

4.1.2 Modellierung der Werkstoffeigenschaften

Wärmeleitfähigkeit

Die temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit $\lambda(T)$ wurde für die festen Phasen des Werkstoffs 42CrMo4 differenziert modelliert. Dabei erfolgte eine separate Anpassung für die kfz Austenitphase $\lambda_{\text{FK},\text{kfz}}(T)$ sowie für die krz-Anteile $\lambda_{\text{FK},\text{krz}}(T)$, zu denen Ferrit, Perlit, Bainit, Martensit und alle angelassenen Zustände gezählt wurden. Die zugrunde liegenden experimentellen Daten wurden der Arbeit von

Tabelle 4.2: Implementierte Koeffizienten A_{\min} , A_{\max} , x_0 und p zur Modellierung der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit $\lambda(T)$ der einzelnen Gefügebestandteile $\lambda_{\text{FK,krz}}(T)$, $\lambda_{\text{FK,kfz}}(T)$, $\lambda_{\text{p}}(T)$ und $\lambda_{\text{L}}(T)$. Die Beschreibung der Temperaturabhängigkeit erfolgt über eine beidseitig beschränkte Wachstumsfunktion gemäß Gleichung (4.13).

	$A_{\min} / \text{W mm}^{-1} \text{K}^{-1}$	$A_{\max} / \text{W mm}^{-1} \text{K}^{-1}$	x_0 / K	$p / -$
$\lambda_{\text{FK,krz}}(T)$	$1,77 \cdot 10^{-2}$	$4,16 \cdot 10^{-2}$	964	-4,80
$\lambda_{\text{FK,kfz}}(T)$	$1,28 \cdot 10^{-2}$	$3,33 \cdot 10^{-2}$	1123	-3,36
$\lambda_{\text{p}}(T)$	$4,52 \cdot 10^{-4}$	$4,64 \cdot 10^{-2}$	1510	5,90
$\lambda_{\text{L}}(T)$	$2,43 \cdot 10^{-2}$	$5,50 \cdot 10^{-2}$	2401	4,07

Schwenk et al. [197] entnommen. Aufgrund des entgegengesetzten Trends der Wärmeleitfähigkeit in den jeweiligen Phasen erfolgte eine getrennte Parameteranpassung mithilfe einer beidseitig beschränkten Wachstumsfunktion:

$$\lambda(T) = A_{\min} + \frac{A_{\max} - A_{\min}}{1 + (x_0/T)^p} \quad (4.13)$$

Die verwendeten Fit-Parameter A_{\min} , A_{\max} und x_0 sind in Tabelle 4.2 dokumentiert. Für die Modellierung der Wärmeleitfähigkeit des Pulvers $\lambda_{\text{p}}(T)$ wurde eine reduzierte Leitfähigkeit angenommen, die im Bereich von einem Hundertstel der Wärmeleitfähigkeit des Feststoffs bei Raumtemperatur liegt [198, 199]. Für die Wärmeleitfähigkeit der Schmelze $\lambda_{\text{L}}(T)$ wurden die experimentellen Daten von Wilthan et al. [200] implementiert.

Wärmekapazität

Die spezifische Wärmekapazität wurde auf Grundlage experimenteller Daten aus der Literatur modelliert. Für die festen Phasen (sowohl kfz-Austenit als auch krz-Phasen einschließlich Ferrit, Perlit, Bainit, Martensit und aller angelassenen Zustände) wurde ein kontinuierlicher, temperaturabhängiger Verlauf als einheitliche Funktion dargestellt. Die zugrunde liegenden Messdaten stammen aus der Arbeit von Schwenk et al. [197] und wurden mit einer beidseitig beschränkten Wachstumsfunktion gemäß Gleichung (4.13) angepasst. Die verwendeten Fit-Parameter

Tabelle 4.3: Implementierte Koeffizienten A_{\min} , A_{\max} , x_0 und p zur Modellierung der temperaturabhängigen spezifischen Wärmekapazität $c_p(T)$ der einzelnen Gefügebestandteile $c_{p,FK}(T)$, $c_{p,P}(T)$ und $c_{p,L}(T)$. Die funktionale Beschreibung der Temperaturabhängigkeit erfolgt über eine beidseitig beschränkte Wachstumsfunktion gemäß Gleichung (4.13).

	$A_{\min} / \text{Jkg}^{-1} \text{K}^{-1}$	$A_{\max} / \text{Jkg}^{-1} \text{K}^{-1}$	x_0 / K	$p / -$
$c_{p,FK}(T)$	379	787	589	3,75
$c_{p,P}(T)$	227	787	589	3,75
$c_{p,L}(T)$	787	787	1893	0,0

sind in Tabelle 4.3 dokumentiert. Für das Pulver wurde die Wärmekapazität auf 60 % des Festkörperwertes reduziert, entsprechend einer typischen Schüttdichte von Metallpulvern im Pulverbettverfahren [201, 202]. Für die Schmelze wurde, basierend auf den Messwerten von Wilthan et al. [200], eine konstante spezifische Wärmekapazität von $787 \text{ Jkg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ angenommen.

Latente Wärme

Wie im vorangehenden Abschnitt zu den Phasenumwandlungen beschrieben, ist der Schmelzprozess im Festkörperzustand reversibel, während er im Pulverzustand irreversibel verläuft. Dabei erfolgt während des PBF-LB-Prozesses der Übergang vom Pulver in die Schmelze und anschließend in den Festkörper. Die Schmelzenthalpie wurde in dieser Arbeit nicht explizit berücksichtigt. Der Grund dafür ist, dass die stark nichtlinearen Effekte im Bereich der Phasengrenzen zu numerischen Instabilitäten führen. Diese Instabilitäten zeigen einen signifikanten Einfluss auf das Konvergenzverhalten der FEM-Simulationen.

Um die irreversiblen Energieverluste im System dennoch näherungsweise zu erfassen, wurde eine vereinfachte Modellfunktion implementiert, die die maximale Prozesstemperatur auf etwa 3300 K begrenzt. Die Modellierung erfolgt mit Hilfe der Konstanten $c_V = 3 \cdot 10^8 \text{ kJkg}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Bei dem Überschreiten der

Temperatur von 3200 K wird ein zusätzlicher Energieterm berücksichtigt, der in Abhängigkeit des Zeitinkrements sowie der Temperaturdifferenz wirkt:

$$\Delta H_V(t, T) = c_V \cdot \Delta t \cdot (T - 3200 \text{ K}) \quad \text{für } T > 3200 \text{ K}, \Delta t \text{ in s} \quad (4.14)$$

Dieser Ansatz ermöglicht eine qualitative Abschätzung der Energieverluste durch Spritzerbildung (engl. *splatter*) und Verdampfung während des PBF-LB-Prozesses. Eine direkte physikalische Modellierung dieser Effekte erfolgt nicht, da deren komplexe Mehrphasen- und Strömungsvorgänge in einer FEM-basierten Prozesssimulation nicht hinreichend abgebildet werden können. Das in dieser Arbeit verwendete Modell für den irreversiblen Energieverlust wurde erstmals in der eigenen Veröffentlichung [191] vorgestellt und implementiert. Die Validierung erfolgte indirekt durch den Abgleich der vorhergesagten Mikrostrukturen und Härtewerte mit den entsprechenden experimentellen Ergebnissen. Hierbei konnte die physikalische Plausibilität des Modells bestätigt werden.

Härtemodellierung

Die Korrelation zwischen der Härte und dem Anlasszustand wurde über den Hollomon-Jaffe-Parameter P_{HJ} beschrieben [141]. Dieser Ersatzparameter wurde für das Abschätzen der notwendigen Temperaturen und Zeiten für das isotherme Anlassen von Stählen entwickelt und von Gomes et al. [142] für nicht-isotherme Aufheizbedingungen modifiziert. Kaiser et al. [99] zeigte, dass der P_{HJ} -Parameter selbst bei hohen Aufheizraten linear mit der gemessenen Härte korreliert.

Zur Kalibrierung des Modells auf die chemische Zusammensetzung des in dieser Arbeit eingesetzten Vergütungsstahls 42CrMo4 wurden additiv hergestellte Proben in einem Dilatometer abgeschreckt. Anschließend wurden sie bei konstanten Heizraten zwischen $1 \text{ }^\circ\text{C s}^{-1}$ und $1000 \text{ }^\circ\text{C s}^{-1}$ auf Anlasstemperaturen zwischen $200 \text{ }^\circ\text{C}$

und 600 °C angelassen. Die hierbei erfassten Temperatur-Zeit-Verläufe dienen als Grundlage zur Berechnung des P_{HJ} -Parameters gemäß Gleichung (4.15).

$$P_{\text{HJ}}(t_i) = P_{\text{HJ}}(t_{i-1}) + \frac{T(t_i)}{2.303 \cdot 10^{\left(\frac{P_{\text{HJ}}(t_{i-1})}{T(t_i)} - C\right)}} \cdot \Delta t_i \quad (4.15)$$

Die für die Dilatometerproben experimentell gemessenen resultierenden Härte-
werte nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur wurden anschließend über eine
lineare Beziehung mit dem P_{HJ} -Parameter verknüpft:

$$\text{HV}_{\text{res.}} = 976 \text{HV1} - 3,24 \cdot 10^{-2} \cdot P_{\text{HJ}} \quad (4.16)$$

4.2 Modellierung der Laserquelle

Für die Abbildung des Energieeintrags in der FEM-Prozesssimulation des PBF-LB-Prozesses wurden drei unterschiedliche Modellansätze für die Laserquelle implementiert. Diese unterscheiden sich hinsichtlich der zeitlichen und räumlichen Auflösung des simulierten Wärmeeintrags sowie der damit verbundenen Rechenzeit. Die Ansätze reichen von einer physikalisch detaillierten Goldak-Laserquelle, über eine auf den einzelnen Scanvektor gemittelte Darstellung, bis hin zu einer flächenäquivalenten Modellierung des Energieeintrags. Durch diese gestufte Modellhierarchie ist es möglich, abhängig von der Fragestellung und den relevanten Prozessgrößen, einen optimalen Kompromiss zwischen Modellgenauigkeit und Rechenzeit zu erzielen.

4.2.1 Goldak-Laserquelle

Die Goldak-Laserquelle basiert auf einer modifizierten Form der in der Literatur etablierten Goldak-Gleichung für den PBF-LB-Prozess [137–139]. Grundlage ist die Berechnung der externen volumetrischen Wärmestromdichte $\dot{q} = \frac{\dot{Q}}{V}$, die den

Wärmestrom \dot{Q} pro Volumen V beschreibt und in W mm^{-3} angegeben wird. Die zeitlich und räumlich verteilte Energiequelle wird wie folgt beschrieben:

$$\dot{q}_{\text{Goldak}}(x, y, z, t) = \frac{2\eta P}{abc\pi\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{(x - v_x t)^2}{a^2} - \frac{(y - v_y t)^2}{b^2} - \frac{z^2}{c^2}\right) \quad (4.17)$$

Hierbei bezeichnen P die Laserleistung sowie v_x und v_y die Scangeschwindigkeiten in x - und y -Richtung. Die Parameter a und b entsprechen dem nominellen Laserstrahlradius r_{Fokus} in den jeweiligen Richtungen, während der Parameter c die Tiefenwirkung beschreibt. Letztere wird durch Mehrfachreflexionen im Pulverbett oder der Dampfkapillare, Strömungsvorgänge im Schmelzbad sowie die Wärmeleitung beeinflusst und ist stark abhängig von den Prozessparametern. Auch der Absorptionskoeffizient η wurde in Abhängigkeit von den Prozessparametern modelliert.

Die Bewegung der Wärmequelle entlang eines Scanvektors wird in der FEM-Simulation durch schrittweise Approximation unter Verwendung kurzer Zeitschritte Δt abgebildet. Beschleunigungs- und Verzögerungsvorgänge des Laserstrahls werden dabei vernachlässigt. Die Parameter c und η wurden durch den Abgleich von Simulationsergebnissen mit experimentellen Einzelbahnversuchen bestimmt (Abschnitt 6.1.1).

4.2.2 Scanvektoräquivalente Laserquelle

Die scanvektoräquivalente Laserquelle basiert auf der Goldak-Laserquelle, verwendet jedoch eine über den jeweiligen Scanvektor gemittelte Darstellung des Energieeintrags [191]. Die Implementierung erfolgt über ein Python-Skript, welches die Bewegung der Goldak-Quelle entlang der tatsächlichen Scanvektoren simuliert und die volumetrische Wärmestromdichte \dot{q} über die Bearbeitungszeit des Scanvektors integriert. Aus der Integration wird die volumetrische Energiedichte ermittelt und anschließend durch Division mit der Scanzeit in die mittlere volumetrische Wärmestromdichte des Scanvektors \dot{q}_{SV} überführt.

Die so erhaltene räumliche Verteilung wird durch eine „3D rectangular Gaussian“-Funktion approximiert:

$$\dot{q}_{SV}(x, y, z) = a_{SV} \cdot \exp \left(- \left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} \right)^{P_x} - \left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right)^{P_y} - \left(\frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right)^{P_z} \right) \quad (4.18)$$

Die Parameter a_{SV} , σ_x , P_x , σ_y , P_y , σ_z und P_z werden für jeden Scanvektor separat bestimmt. Die Bestimmung erfolgt automatisiert mittels der nichtlinearen Methode der kleinsten Quadrate.

4.2.3 Flächenäquivalente Laserquelle

Die flächenäquivalente Laserquelle erweitert den scanvektoräquivalenten Ansatz auf eine größere geometrische Skala. Anstatt den Energieeintrag über einen einzelnen Scanvektor zu mitteln, wird hier der mittlere Wärmestrom über eine definierte Fläche ermittelt, die mehrere Scanvektoren umfasst. Die mittlere volumetrische Wärmestromdichte \dot{q}_A wird dabei aus der Summe der Bearbeitungszeiten aller Scanvektoren in der betrachteten Fläche berechnet.

Die räumliche Formulierung erfolgt analog zur scanvektoräquivalenten Laserquelle mittels Gleichung (4.18). Dieser Ansatz reduziert die zeitliche und räumliche Auflösung des Modells erheblich und ermöglicht so eine deutliche Verringerung der Rechenzeit, was insbesondere für großskalige Bauteil- oder Prozesskettenanalysen von Vorteil ist.

4.3 FEM-Modell des PBF-LB-Prozesses

Das entwickelte FEM-Prozessmodell basiert auf einem in Python implementierten Framework, das den vollständigen PBF-LB-Fertigungsprozess digital abbildet. Der Aufbau dieses Frameworks ist modular strukturiert und umfasst vier zentrale Komponenten (Abb. 4.1): die Analyse der Scanstrategie, den Pre-Prozessor, die

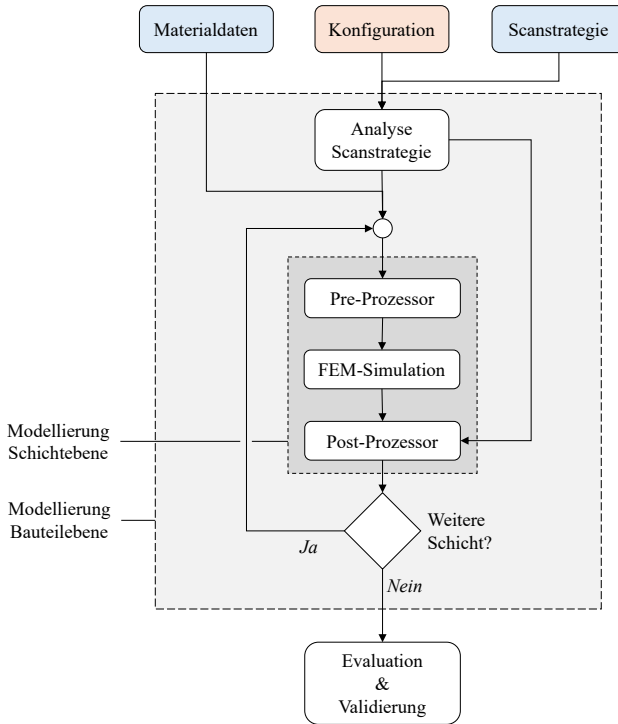


Abbildung 4.1: Schematischer Aufbau des Python-basierten Frameworks zur FEM-Simulation des PBF-LB-Prozesses

Abaqus/Standard-basierte implizite FEM-Simulation mit benutzerdefinierten Fortran-Subroutinen sowie den abschließenden Post-Prozessor. Während Analyse, Pre- und Post-Prozessor vollständig in Python realisiert sind, erfolgt die numerische Simulation in Abaqus/Standard unter Einbindung der entsprechenden Fortran-Module.

Das schematische Ablaufdiagramm für das FEM-Simulations-Framework ist in Abb. 4.1 detailliert dargestellt. Hierbei steuert das Hauptprogramm auf Bauteilebene den gesamten Simulationsablauf. Dabei werden experimentelle Daten

(Werkstoff- und Prozessparameter) sowie Konfigurationsdateien (Geometrie, Vernetzung, Randbedingungen) eingelesen. Die Analyse der Scanstrategie erfolgt einmalig für den gesamten Druckprozess, während die weiteren drei Module pro Schicht ausgeführt werden.

Die Modellierung auf Schichtebene umfasst den Pre-Prozessor (Abschnitt 4.3.2), die eigentliche FEM-Simulation der Schicht (Abschnitt 4.3.3) sowie den Post-Prozessor (Abschnitt 4.3.5). Der Übertrag zwischen den Schichten erfolgt über den `Abaqus/Standard`-Befehl `*MAP SOLUTION`, der die Ergebnisse der vorherigen Schicht auf das Modell der neuen Schicht interpoliert. Die neu aufgebrauchte Pulverschicht wird dabei mit den thermophysikalischen Eigenschaften des Pulvers initialisiert.

4.3.1 Analyse der Scanstrategie

Die Analyse der Scanstrategie erfolgt mittels eines Python-basierten Moduls, das die Laser-Scanvektoren in ein für die FEM-Simulation interpretierbares Format überträgt. Hierfür wird das `.lsv`-Format des Autodesk-Slicers verwendet (Abschnitt 3.3). Die Eingangsdaten beinhalten Start- und Endkoordinaten jedes Scanvektors (x, y, z) , Laserleistung P , Laserstrahlradius r_{Fokus} , Scangeschwindigkeit v in Vektorrichtung sowie die Schichthöhe t_s .

Für die FEM-Simulation wird jeder Scanvektor als separater Zeitschritt modelliert. Hierzu werden alle relevanten Informationen aus der Belichtungsstrategie automatisiert aufbereitet. Zunächst werden Vektoren ohne Laserbetrieb, also reine Verfahrbewegungen zwischen zwei Scanvektoren, erkannt und ergänzt. Anschließend erfolgt die Klassifikation der Scanvektoren als Konturbahn oder Schraffurmuster sowie ihre Zuordnung zu den jeweiligen Laserquellenmodellen der verschiedenen Skalen. Falls ein Scanvektor mehrere Skalen durchläuft, wird er entsprechend aufgeteilt. Darüber hinaus werden fehlende Prozessparameter wie Schraffurwinkel oder Schraffurdistanz bestimmt und schließlich die jeweiligen Start- und Endzeiten der Scanvektoren berechnet. Auf diese Weise entsteht eine vollständig parametrisierte, zeitlich aufgelöste Eingabe für die thermische Simulation.

4.3.2 Pre-Prozessor

„Der Pre-Prozessor verknüpft die aus der Analyse der Scanstrategie gewonnenen Prozessinformationen mit den Werkstoffdaten und weiteren Konfigurationsparametern. Die resultierenden Angaben werden anschließend in Fortran-Module überführt, sodass sie in der Abaqus/Standard-Simulationsumgebung genutzt werden können. In diesem Schritt werden für jeden Zeitschritt die geeigneten Laserquellenmodelle berechnet und automatisch ausgewählt. Darauf aufbauend werden die entsprechenden Laserquellen- und Prozessparameter bestimmt und in ein Fortran-Modul übertragen. Parallel dazu wird die Abaqus/Standard-Eingabedatei auf Basis der Geometrie, der Randbedingungen, der Vernetzung und der definierten Skalenbereiche generiert. Zudem werden die parametrisierten Werkstoffmodelle als Fortran-User-Subroutinen implementiert. Alle für die jeweilige Schicht erforderlichen Fortran-Module werden in der zentralen Datei MAIN.f zusammengeführt, die vor der Simulation jeder Schicht aktualisiert wird.

4.3.3 Abaqus/Standard Framework

Das verwendete Abaqus/Standard Framework basiert auf mehreren veröffentlichten Wärmebehandlungssimulationen und wurde für den PBF-LB-Prozess erweitert [99, 155, 158, 159]. Eingesetzt werden folgende User-Subroutinen:

- DFLUX: Aufbringen der zeit- und ortsabhängigen volumetrischen Wärmestromdichte \dot{q} unter Berücksichtigung aller drei Laserquellen-Modelle,
- UMATHT: Implementierung temperatur- und phasenabhängiger Werkstoffmodelle,
- Eigene Fortran-Routinen zur Berechnung von Phasenanteilen und Härte (P_{HJ} -Ansatz), die zu Beginn jedes Zeitschritts über UMATHT aufgerufen werden.

Der Datentransfer zwischen den Modulen erfolgt über SDV-Variablen (solution-dependent state variables), die für jeden Integrationspunkt und Zeitschritt in der .odb-Ergebnisdatei gespeichert werden.

4.3.4 Abaqus/Standard Multiskalenmodell

Der in dieser Arbeit verwendete Multiskalenansatz wurde von Schüßler et al. [191] detailliert beschrieben und wurde hier um die Modellierung mittels der flächenäquivalenten Laserquelle ergänzt. Ziel dieses Ansatzes ist es, die hohe Genauigkeit der Goldak-Laserquellenmodellierung mit einer signifikanten Reduktion der numerischen Rechenzeit zu kombinieren.

Die Goldak-Laserquelle bildet den physikalischen Energieeintrag des Lasers in das Pulverbett mit hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung ab und liefert somit die präziseste Reproduktion des realen Prozesses. Diese Genauigkeit geht jedoch mit einem sehr hohen numerischen Aufwand einher, da die steilen Temperaturgradienten in Raum und Zeit eine feine Vernetzung und kurze Zeitschritte erfordern. Eine vollständige Simulation ganzer Bauteile in dieser Auflösung ist für den in dieser Arbeit untersuchten Werkstoff 42CrMo4 sowie die Bauteilgeometrien nicht praktikabel.

Zur Reduzierung des Rechenaufwands wird im Nahfeld des betrachteten Punktes die Goldak-Laserquelle eingesetzt, während im Fernfeld vereinfachte Modelle verwendet werden. Hierbei handelt es sich um die scanvektoräquivalente und die flächenäquivalente Laserquelle, die durch zeitliche und räumliche Mittelung der eingetragenen volumetrischen Wärmestromdichte \dot{q} deutlich geringere Temperaturgradienten aufweisen. Mit zunehmendem Abstand zum Messpunkt sinkt der Fehler dieser vereinfachten Modelle, sodass im Fernfeld eine nahezu identische Temperaturhistorie wie mit der Goldak-Laserquelle erreicht wird, jedoch bei deutlich geringeren Rechenzeiten.

Geometrische Unterteilung

Abb. 4.2 visualisiert schematisch die verwendeten Geometrien (Abb. 4.2a) sowie den Aufbau der Multiskalenbereiche (Abb. 4.2b). Die Modellgeometrie wurde hierzu in mehrere Sub-Geometrien unterteilt, nämlich die Bauplatte, das Bauteil mit seiner weiteren Differenzierung in verschiedene Skalenbereiche sowie das umgebende Pulverbett. Innerhalb des Bauteils umfasst die Mesoskala den Bereich, in dem die Goldak-Laserquelle eingesetzt wird, während die Makroskala diejenigen Bereiche umfasst, die über scanvektor- oder flächenäquivalente Laserquellenmodelle beschrieben werden.

Die Sub-Geometrien sind über die Abaqus/Standard *Tie-Randbedingung miteinander verbunden, wodurch ein kontinuierlicher Wärmestrom zwischen den Bereichen gewährleistet wird. Der Ausschnitt der Bauplatte wird über das Verhältnis des Energieeintrags des betrachteten Bauteils zum gesamten Energieeintrag des Druckjobs skaliert. Diese Anpassung basiert auf der Annahme einer gleichmäßigen Verteilung der Bauteile auf der Bauplatte. Das umgebende Pulverbett wurde nicht modelliert. Dies gilt insbesondere, da die Bauteile ohne Stützstrukturen direkt auf die Bauplatte gefertigt wurden und keine komplexen Geometrien vorlagen. Die Subgeometrien des Bauteils werden über den Schraffurwinkel α_{SV} für jede Schicht in Scanvektorrichtung ausgerichtet.

Optimierung der Bereichsgrößen

Die Größen der einzelnen Skalenbereiche wurden durch Simulationsstudien so optimiert, dass der Rechenfehler minimiert und gleichzeitig die Simulationszeit reduziert wird. Dabei wurde ein Kompromiss zwischen der Genauigkeit der Temperaturverläufe und dem numerischen Aufwand gefunden.

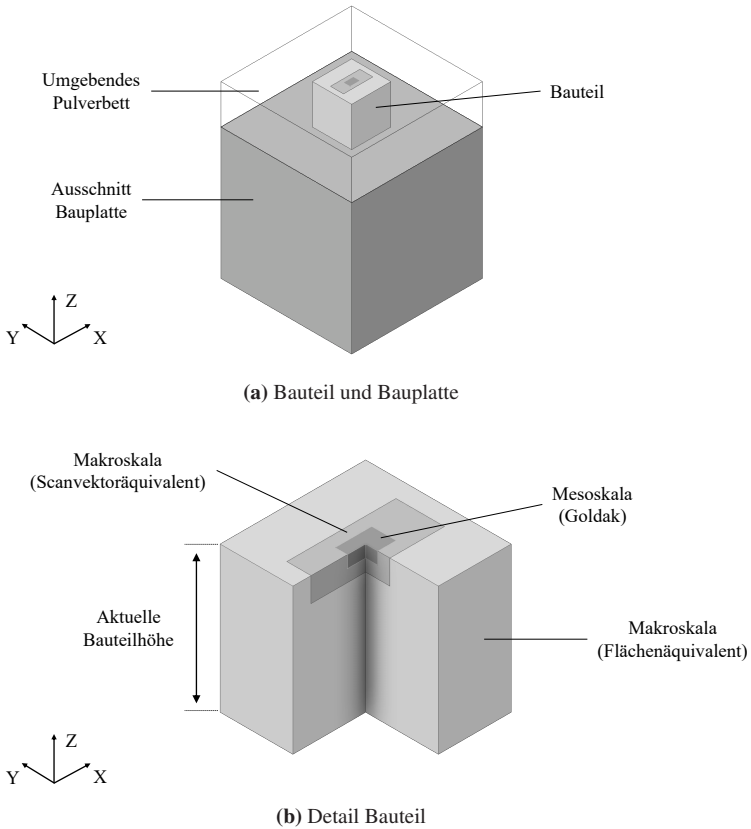


Abbildung 4.2: Abbildung der geometrischen Unterteilung für die FEM-Simulation für (a) Bauteil und Bauplatte und (b) das Bauteil in der Detailsicht.

Vernetzung

Die Vernetzungsgrößen wurden in Abhängigkeit der Schraffurdistanz h in x - und y -Richtung sowie der Schichthöhe t_S in z -Richtung parametrisiert. Die resultierenden Netzgrößen sind in Tabelle 4.4 aufgeführt.

Tabelle 4.4: Parametrisierung der Vernetzungsgrößen in Abhängigkeit der Schraffurdistanz h in x - und y -Richtung sowie der Schichthöhe t_S in z -Richtung für die unterschiedlichen Sub-Geometrien des FEM-Modells.

Sub-Geometrie	x - und y -Richtung	z -Richtung
Mesoskala (Goldak)	$0,25 \cdot h$	$0,25 \cdot t_S$
Makroskala (Scanvektoräq.)	$0,75 \cdot h$	$0,50 \cdot t_S$
Makroskala (Flächenäq.)	$1,50 \cdot h$	$1,00 \cdot t_S$
Bauplatte	$3,00 \cdot h$	$6,00 \cdot t_S$

Randbedingungen

Die gewählten thermischen Randbedingungen sind in Abb. 4.3 schematisch dargestellt. An der Oberfläche werden neben der eingetragenen volumetrischen Wärmestromdichte des Lasers die Wärmeverluste durch Konvektion und Wärmestrahlung berücksichtigt. Hierfür wird ein konstanter Wärmeübergangskoeffizient $h = 20 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ [203], eine Emissivität $\varepsilon = 0.5$ [203] sowie die gemessene Argon-Gasttemperatur der PBF-LB-Anlage angesetzt. Die Implementierung erfolgt in Abaqus/Standard über die Befehle *SFILM (Konvektion) und *SRADIATE

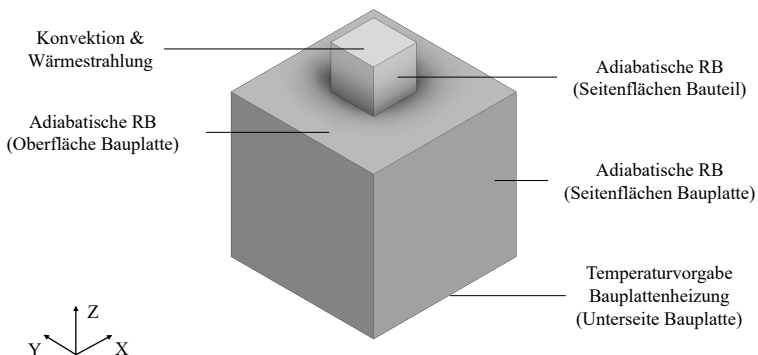


Abbildung 4.3: Darstellung der in der FEM-Simulation implementierten thermischen Randbedingungen (RB).

(Wärmestrahlung). Die Seitenflächen werden als adiabatisch angenommen, da der Wärmeübergang durch das umgebende Pulver aufgrund seiner deutlich geringeren Wärmeleitfähigkeit (um zwei Größenordnungen geringer als im Festkörperzustand) vernachlässigt wurde. Die Unterseite der Bauplatte ist mit der geregelten BPT der Maschine belegt, die in der Simulation als feste Temperaturrandbedingung umgesetzt wird. Hierfür wurde die gemessene BPT der PBF-LB-Anlage implementiert.

4.3.5 Post-Prozessor

Der Post-Prozessor liest die relevanten Simulationsergebnisse aus, darunter lokale Temperaturhistorien, Mikrostrukturverteilungen und Härtetiefenverläufe. Darüber hinaus werden großflächig Temperaturdaten extrahiert, um Trainingsdatensätze für die Deep-Learning-basierte Prozessmodellierung zu erzeugen (Abschnitt 4.4).

4.4 Deep-Learning-basierte Modellierung des PBF-LB-Prozesses

Ziel dieses Kapitels ist die Entwicklung und Optimierung eines Deep-Learning-basierten Modells zur effizienten Vorhersage der lokalen Temperaturhistorie sowie der daraus resultierenden Bauteileigenschaften und Mikrostrukturen. Hierzu wird die aus der FEM-Simulation gewonnene Temperaturhistorie mit den in der Analyse der Scanstrategie ermittelten Prozessparametern kombiniert, um einen umfassenden Datensatz aufzubauen (Abschnitt 4.4.2). Dieser Datensatz bildet die Grundlage für das Training und die Optimierung eines neuronalen Netzes (Abschnitt 4.4.1). Die Bewertung des trainierten Modells erfolgt sowohl über klassische Fehlerkennwerte (engl. *loss functions*) als auch über prozessspezifische Metriken sowie Methoden der erklärbaren Künstlichen Intelligenz (engl. *explainable artificial intelligence*) (Abschnitt 4.4.3).

4.4.1 Modellarchitektur

Zur Vorhersage der vollständigen Temperaturhistorie wurde eine RNN-Netzwerkarchitektur gewählt, da sie eine effiziente Verarbeitung sequenzieller Daten ermöglicht. Im Rahmen dieser Arbeit kam die erweiterte Architektur eines Sequenz-zu-Sequenz-LSTM-Netzwerks (engl. *sequence-to-sequence*) zum Einsatz [160, 161]. Diese Architektur berücksichtigt den sequentiellen Aufbau der Eingangsdaten, indem aus den Eingaben des Zeitschritts t und dem internen Zustand die Ausgabe des gleichen Zeitschritts berechnet wird. Dieser Vorgang wurde für sämtliche Zeitschritte wiederholt. Das Zeitinkrement betrug in allen Untersuchungen $2 \cdot 10^{-4}$ s. Während des Trainings wurde die Maximum-Likelihood-Methode (engl. *teacher forcing*) verwendet [204], bei der mit Abweichungen versehene Zielgrößen des vorhergehenden Zeitschritts zur Stabilisierung des autoregressiven Modells einfließen. Während der Validierung, des Testens sowie des späteren Einsatzes des LSTM-Modells (engl. *inference*) werden die Vorhersagen des aktuellen Zeitschritts zur Vorhersage des nächsten Zeitschrittes mitbenutzt. Die Entscheidung für die Vorhersage des gesamten Temperaturverlaufs anstelle einzelner abgeleiteter Größen (z. B. Härte) basiert auf der besseren Interpretierbarkeit der Ergebnisse. Dies erhöht das Vertrauen in das Modell, da offensichtliche Abweichungen oder physikalisch nicht plausible Verläufe unmittelbar erkennbar sind. Das Training erfolgte in mehreren Stufen mit steigender Komplexität der Trainingsdaten (engl. *curriculum learning*). Hierbei wurden mit jeder der 6 Stufen neue komplexere Trainingsdaten mit größeren Querschnittsflächen (mehr Scanvektoren pro Schicht) oder eine größere Anzahl an Zeitinkrementen eingeführt.

4.4.2 Datensatz

Ziel des Datensatzes ist die Erstellung einer Grundlage, mit der die lokale Temperaturhistorie des PBF-LB-Prozesses für unterschiedliche Prozessparameterkombinationen, Scanstrategien und Geometrien vorhergesagt werden kann. Der Datensatz soll es dem Modell ermöglichen, die zugrunde liegenden physikalischen Zusammenhänge zu erlernen und auf neue Szenarien zu übertragen.

Die Datengrundlage wurde mit dem in Abschnitt 4.3 beschriebenen Multiskala-(3+2) FEM-Prozessmodell generiert. Dabei wurden der Prozess in der FEM-Simulation vollständig modelliert aber Auswertungspunkte ausschließlich aus dem Mesoskalenbereich mit der implementierten Goldak-Laserquelle entnommen. Der Fokus lag auf Bereichen um das Bauteilzentrum, da diese repräsentative Temperaturhistorien für die jeweilige Prozessparameterkombination aufweisen. Die verwendeten Geometrien und Prozessparameterkombinationen entsprechen den im experimentellen Teil dieser Arbeit eingesetzten Konfigurationen, bei denen die Bauteile direkt auf der Bauplatte ohne Stützstrukturen gefertigt wurden. Durch die simultane Fertigung vieler Proben auf einer Bauplatte erfolgte während der Bearbeitung jeder Schicht eine vollständige Abkühlung auf die eingestellte BPT. Für die beschriebene Betrachtung einzelner Proben der Bauplatte wurde diese Wartezeit mit berücksichtigt. Der Export der zeitabhängigen Simulationsdaten erfolgt über den in Abschnitt 4.3.5 beschriebenen Post-Prozessor im `.npy`-Format. Zur effizienten Speicherung und Verarbeitung wurden die Daten anschließend in das komprimierte `.h5`-Format (HDF5) konvertiert. Die gespeicherten Datensätze umfassen die Prozessparameter (P , v , d_{Fokus} , h , α_{SV} , BPT), die Geometrieinformationen der Scanvektoren (Start- und Endkoordinaten x , y , z), die Koordinaten des Auswertungspunkts sowie die zeitabhängigen Ergebnisgrößen (Temperatur T , Phasenanteile w , Hollomon-Jaffe-Parameter P_{HJ} und Härte HV1). Grundlegende Untersuchungen zur Abbildung des PBF-LB Prozesses mittels der Prozessparameter wurden in Schüßler et al. [205] beschrieben.

Für den Trainingsdatensatz wurden Simulationen für drei Prozessparameterkombinationen (P006, P030, P076), drei BPT (ungeregelt, 100 °C, 200 °C) sowie vier Geometrien mit unterschiedlichen Scanvektorlängen (3 mm, 6 mm, 9 mm, 12 mm) durchgeführt. Der vollständige Datensatz umfasst rund 650 000 Auswertungspunkte und weist eine komprimierte Größe von ca. 250 GB auf. Für das Training wurde der Datensatz in Trainings-, Validierungs- und Testanteile aufgeteilt, wobei eine strikte Trennung der Datensätze sichergestellt wurde, um Datenleckagen zu vermeiden. Zum Training wurden insgesamt 32 306 der 650 000 Auswertungspunkte zufällig ausgewählt und verwendet.

Für den zusätzlichen Datensatz zur Untersuchung der Generalisierungsfähigkeit der Modelle wurden die Simulationen mit um $\pm 10\%$ variierten Eingabegrößen der Prozessparameterkombinationen (P006, P030, P076) sowie BPT (ungeregelt, $100\text{ }^{\circ}\text{C}$, $200\text{ }^{\circ}\text{C}$) durchgeführt. Zudem wurden Simulationen mit zufällig ausgewähltem Schraffurwinkel sowie drei neuer Geometrien (Quader mit $5\text{ mm} \times 5\text{ mm}$ Querschnittsfläche, Quader mit $5\text{ mm} \times 10\text{ mm}$ Querschnittsfläche, Zylinder mit 5 mm Durchmesser) durchgeführt. Diese Daten wurden ausschließlich zur Untersuchung der Generalisierungsfähigkeit verwendet. Der vollständige Datensatz umfasst rund 180000 Auswertungspunkte und weist eine komprimierte Größe von ca. 100 GB auf.

Die Auswahl der Eingangsvariablen (engl. *features*) sowie der Zielgrößen (engl. *labels*) erfolgte gemäß einer Korrelationsanalyse zwischen den Features. Auf diese Weise konnten redundante Features identifiziert und entfernt werden. Folgende Eingangsvariablen wurden zum Training der Modelle verwendet: Laserleistung P , Laserbearbeitung (An oder Aus), Scangeschwindigkeit v , zyklisch transformierte Schraffurwinkel $\sin(\alpha_{SV})$ und $\cos(\alpha_{SV})$, Abstand zwischen Laser und Messpunkt in x -, y - und z -Richtung in relativem Scanvektor-Koordinatensystem, Abstand zwischen Bauplatte und Messpunkt in z -Richtung in dem Absolut-Koordinatensystem, Zeit seit dem Ende der Laserbearbeitung, BPT sowie die Temperatur des vorhergehenden Zeitschritts (Autoregressiv). Die Normalisierung der Eingangsvariablen erfolgte auf Basis der Minimum-Maximum-Normalisierung.

4.4.3 Bewertung des optimierten Modells

Die Modellbewertung erfolgte unter Verwendung etablierter Fehlerkennwerte wie der Wurzel des quadratischen Fehlers (RMSE), des mittleren quadratischen Fehlers (MSE) und des mittleren absoluten Fehlers (MAE). Zusätzlich wurden prozessspezifische Fehlergrößen eingeführt, darunter die Abweichung der Temperatur zum Zeitpunkt des Schichtendes sowie die Differenz zwischen berechneter und vorhergesagter resultierender Härte. Insgesamt wurden 13 Fehlergrößen zur

Bewertung der Modelle berechnet. Zur verbesserten Übersicht wurde die in Kapitel 7 durchgeführte Analyse mit den vier aussagekräftigsten Fehlergrößen (RMSE, Abweichung der Maximaltemperatur, Abweichung der Endtemperatur sowie Abweichung der resultierenden Härte) beschrieben.

Ergänzend wurden Methoden der erklärbaren Künstlichen Intelligenz eingesetzt, um die Vorhersagen des Modells interpretierbar zu machen. Hierzu zählt insbesondere die Analyse der *Permutation Feature Importance* (PFI), um den relativen Einfluss einzelner Eingabegrößen auf die Modellvorhersagen zu quantifizieren (Abschnitt 7.2).

5 Ergebnisse und Diskussion der experimentellen Untersuchungen

5.1 Ermittlung des optimalen Prozessfensters

Zur Identifikation eines geeigneten Prozessfensters mit hoher Bauteildichte und minimaler Defektbildung wurde eine systematische Parameterstudie durchgeführt. Hierfür wurden würfelförmige Probekörper mit einer Kantenlänge von 5 mm hergestellt (Serien S1-S3). Die Belichtung erfolgte mittels einer konventionellen Scanstrategie mit dreifachem Konturscan und bidirektionalem Schraffurscan. Der Rotationswinkel der Scanvektoren zwischen zwei aufeinanderfolgenden Schichten wurde auf 67° festgelegt. Es wurde eine nominelle Schichthöhe von 0,03 mm sowie ein Laserstrahldurchmesser von 0,080 mm auf Höhe der Bauplattenebene verwendet. Die untersuchten Prozessparameter umfassten eine Variation der Laserleistung im Bereich von 100 W bis 300 W, Scangeschwindigkeiten zwischen 400 mm s^{-1} bis 1100 mm s^{-1} sowie Schraffur- und Konturabständen von 0,1 mm bis 0,14 mm zwischen benachbarten Scanvektoren. Darüber hinaus wurde die BPT variiert: Neben einer unregelmäßigen BPT (Serie S3) kamen Temperaturen von 100°C (Serie S2) und 200°C (Serie S1) zum Einsatz. Die relative Dichte wurde gemäß der in Abschnitt 3.5 beschriebenen Methode durch Bildauswertung der polierten Probenquerschliffe bestimmt.

Abbildung 5.1 zeigt die relative Dichte der 486 untersuchten Prozessparameterkombinationen in Abhängigkeit von der berechneten VED. Der Bereich hoher relativer Dichte konzentrierte sich auf VED-Werte zwischen 65 J mm^{-3} bis 115 J mm^{-3} . Innerhalb dieses Bereichs wurden die höchsten Dichtewerte erreicht.

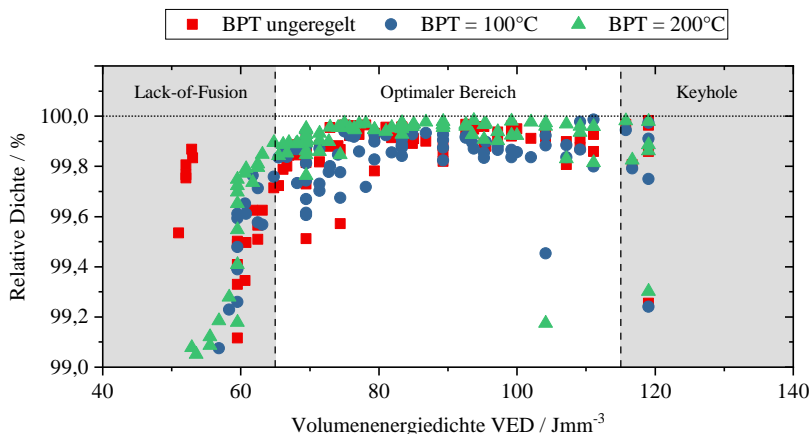


Abbildung 5.1: Mittels Grauwertanalyse ermittelte relative Dichte in Abhängigkeit der berechneten VED und BPT der einzelnen Prozessparameterkombinationen der Serien S1-S3. Unterteilung der drei Bereiche anhand der charakteristischen Defektmorphologien.

Die höchste Dichte konnte hierbei für Proben der BPT von 200 °C festgestellt werden. Außerhalb des optimalen Bereichs traten deutlich ausgeprägte Defekte auf. Unterhalb einer VED von 65 Jmm⁻³ zeigten die Schliffbilder typische Lack-of-Fusion-Poren mit unregelmäßiger Geometrie und klaren Bindungsdefekten zwischen den Schmelzbädern. Oberhalb einer VED von 115 Jmm⁻³ dominierten hingegen Keyhole-Poren.

Auf Basis der identifizierten Grenzen des Prozessfensters wurden drei repräsentative Prozessparameterkombinationen für die weiterführenden Untersuchungen zur Charakterisierung der intrinsischen Wärmebehandlung ausgewählt. Diese repräsentierten das untere, mittlere und obere Ende des optimalen VED-Bereichs. Die Parameterkombination P076 mit einer VED von 65 Jmm⁻³ lag am unteren Rand des definierten Prozessfensters, die Kombination P030 mit 90 Jmm⁻³ lag im mittleren Bereich des Prozessfensters und die Parameterkombination P006 mit 115 Jmm⁻³ befand sich am oberen Rand des Prozessfensters. Diese drei Parameterkombinationen bildeten die Grundlage für die experimentellen Untersuchungen

in den folgenden Kapiteln, in denen die Beziehungen zwischen Mikrohärtete, Mikrostruktur und den Prozessparametern analysiert wurden.

5.2 Charakterisierung der intrinsischen Wärmbehandlung homogener Bauteile

Aufbauend auf den in Abschnitt 5.1 definierten Prozessparameterkombinationen wurden in diesem Abschnitt die thermisch induzierten Veränderungen innerhalb homogener belichteter Bauteile untersucht. Ziel war es, die während des PBF-LB-Prozesses auftretenden Effekte der intrinsischen Wärmebehandlung zu charakterisieren und deren Einfluss auf Mikrostruktur und Härte zu quantifizieren. Durch die sukzessive Überlagerung von Schmelzbahnen und -schichten entsteht ein komplexer Temperaturverlauf, der maßgeblich die resultierende Härte sowie die Mikrostrukturentwicklung bestimmt. Die folgenden Unterkapitel analysieren systematisch den Einfluss der VED, der BPT, der Scanvektorklänge und der MFB auf die resultierenden Gefüge- und Eigenschaftszustände.

5.2.1 Einfluss der Volumenenergiedichte

Einfluss auf die Mikrohärtete

Abbildung 5.2 zeigt die für die Serie S1 (BPT = 200 °C) ermittelten Mikrohärtewerte HV1 in Abhängigkeit von der aus den Prozessparametern berechneten VED. Proben, die mit einer höheren VED gefertigt wurden, wiesen eine geringere Mikrohärtete auf als jene, die mit einer niedrigeren VED hergestellt wurden. Die maximale gemessene Mikrohärtete betrug 463 HV1 bei einer VED von 65 J mm^{-3} , während die minimale Mikrohärtete 369 HV1 bei einer VED von 120 J mm^{-3} erreichte. Innerhalb des in Abschnitt 5.1 definierten Prozessfensters konnte der Zusammenhang zwischen Mikrohärtete und VED näherungsweise als linear beschrieben werden.

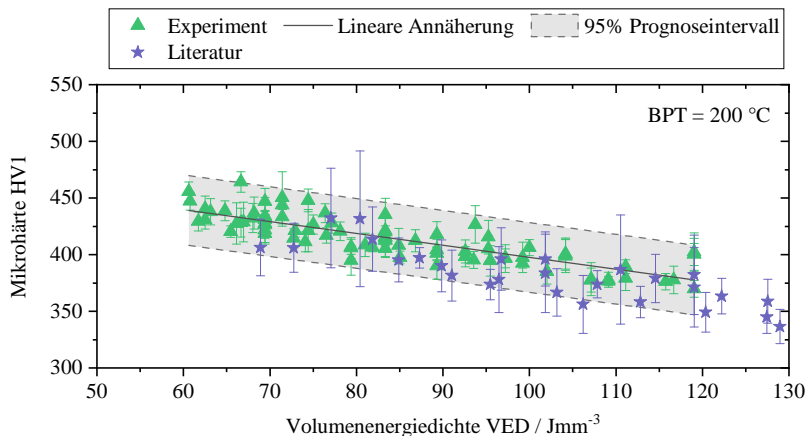


Abbildung 5.2: Mikrohärte HV1 in Abhängigkeit der VED für Proben der Serie S1. Literaturdaten aus [11].

Die vergleichsweise große Breite des 95 %-Prognoseintervalls der linearen Annäherung verdeutlichte sowohl die Streuung der Härtewerte innerhalb einer Prozessparameterkombination als auch zwischen verschiedenen Kombinationen mit identischer VED. Zur besseren Vergleichbarkeit sind in Abb. 5.2 zusätzliche Literaturdaten dargestellt [11]. Diese zeigten eine gute Übereinstimmung mit den hier ermittelten Mikrohärtewerten und bestätigten sowohl den beobachteten Trend als auch die Streubreite der Messwerte.

Einfluss auf die Mikrostruktur

Zur weiteren Analyse der intrinsischen Wärmebehandlung im PBF-LB-Prozess wurde neben der Mikrohärte auch die Mikrostruktur detailliert charakterisiert. Die Untersuchung konzentrierte sich dabei auf drei ausgewählte Prozessparameterkombinationen mit unterschiedlich hoher VED innerhalb des zuvor bestimmten Prozessfensters. Als repräsentatives Beispiel für die Mikrostruktur bei geringer VED wurde die Prozessparameterkombination P076 der Serie S1 mit einer VED

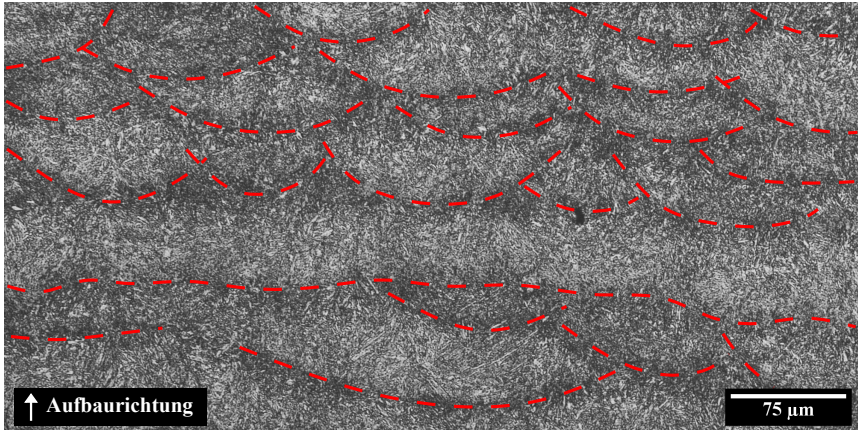


Abbildung 5.3: Lichtmikroskopische Aufnahme der Mikrostruktur für die Prozessparameterkombination P076 der Serie S1 nach Nitalätzung des Querschliffs. Die roten strichlierten Linien markieren die erkennbaren ehemaligen Austenitisierungsgrenzen.

von 65 Jmm^{-3} ausgewählt. Die lichtmikroskopische Aufnahme in Abb. 5.3 zeigte eine gradierte Mikrostruktur mit unterschiedlich stark angeätzten Bereichen. Diese linsen- bis linienförmigen Strukturen standen in direktem Zusammenhang mit der beim Aufbau verwendeten Belichtungsstrategie. Durch den schichtweisen Aufbau und die Rotation der Scanvektoren um 67° zwischen den einzelnen Schichten entstanden ehemalige Schmelzbadgrenzen, die nach der Ätzung als Austenitisierungsgrenzen in unterschiedlichen Orientierungen sichtbar wurden.

Unabhängig von der Form der ehemaligen Austenitisierungsgrenzen konnten zwei charakteristische Zonen identifiziert werden: eine weniger stark angeätzte Region unmittelbar oberhalb der Austenitisierungsgrenze sowie eine stärker angeätzte Region unterhalb dieser Grenze. Die unterschiedliche Ätzwirkung war auf lokale Unterschiede im Anlasszustand und damit auf variierende Mikrostrukturen zurückzuführen. Dies wurde in den REM-Aufnahmen der Mikrostruktur knapp oberhalb (Abb. 5.4a) und unterhalb einer Austenitisierungsgrenze (Abb. 5.4b) deutlich.

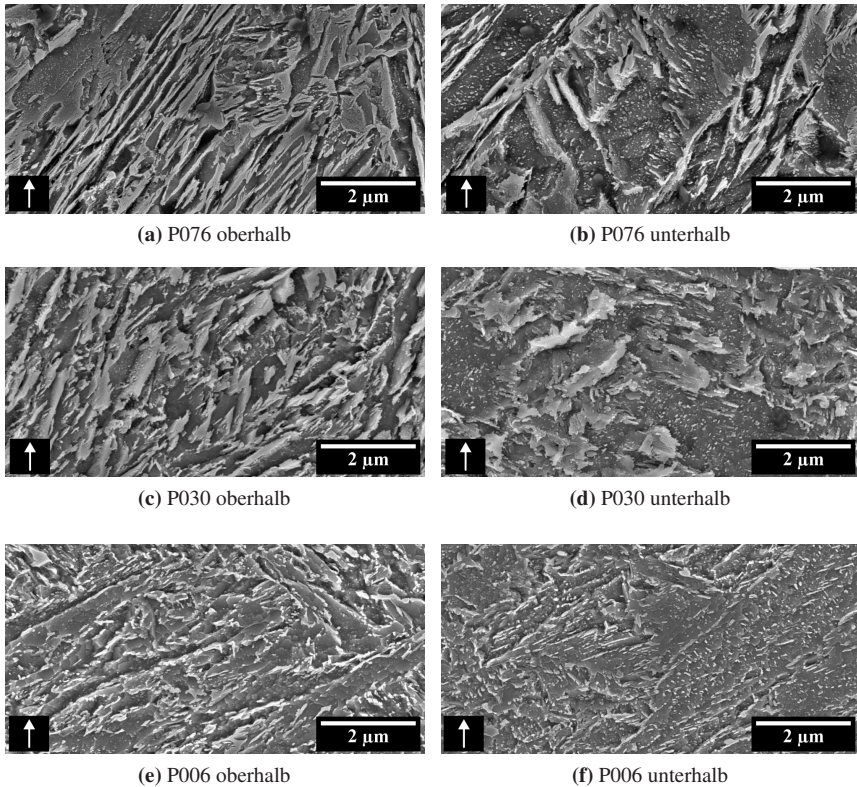


Abbildung 5.4: REM-Aufnahmen der Mikrostrukturen für verschiedene Prozessparameterkombinationen mit variierender VED. Dargestellt sind die Bereiche oberhalb und unterhalb der jeweiligen Austenitisierungsgrenze für die Parameterkombinationen P076 (65 J mm^{-3}), P030 (90 J mm^{-3}) und P006 (115 J mm^{-3}).

Oberhalb der Austenitisierungsgrenze zeigte sich eine Mikrostruktur aus schwach angelassenem Martensit mit sehr feinen Karbidausscheidungen. Unterhalb der Grenze wurde die A_{C1} -Temperatur nicht erreicht, wodurch die zuvor gebildete martensitische Struktur einem kurzzeitigen Anlassvorgang knapp unterhalb der A_{C1} -Temperatur unterzogen wurde. Infolgedessen stellte sich dort eine stärker angelassene martensitische Mikrostruktur mit größeren Karbidausscheidungen

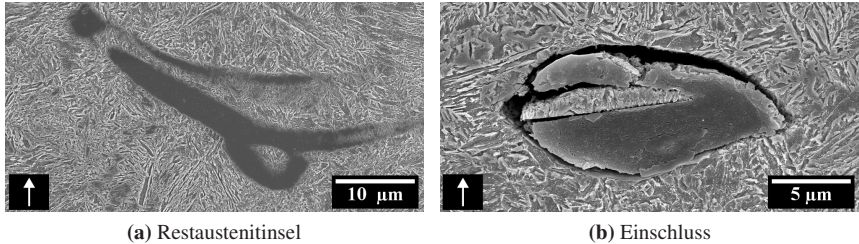


Abbildung 5.5: REM-Aufnahmen typischer Inhomogenitäten in Proben mit geringer VED (65 Jmm^{-3} , P076). Dargestellt sind (a) eine Restaustenitinsel entlang einer ehemaligen Schmelzbadgrenze sowie (b) ein unaufgeschmolzener Einschluss.

ein. Entlang der Baurichtung nahm die Karbidgröße mit wachsendem Abstand zur Austenitisierungsgrenze ab, was auf die hohen lokalen Temperaturgradienten während des Prozesses zurückzuführen war.

Mit zunehmender VED auf 90 Jmm^{-3} (Serie S1, Parameter P030) verringerte sich der Kontrast zwischen den stärker und schwächer angelassenen Bereichen deutlich. Aufgrund der reduzierten Temperaturgradienten bei konstanter effektiver Schichthöhe wurde die Region oberhalb der Austenitisierungsgrenze stärker angelassen (Abb. 5.4c). Dies führte zu einer Vergrößerung der Karbidausscheidungen und somit zu einem geringeren Kontrast in den REM-Aufnahmen. Bei weiterer Erhöhung der VED auf 115 Jmm^{-3} (Serie S1, Parameter P006) verstärkte sich dieser Effekt. In den REM-Aufnahmen konnten keine klaren Austenitisierungsgrenzen mehr identifiziert werden, wenngleich Unterschiede in der Karbidmorphologie weiterhin auf verschiedene Anlasszustände hinwiesen. Die Mikrostruktur zeigte insgesamt eine stärker angelassene martensitische Struktur mit deutlich größeren Karbidausscheidungen (Abb. 5.4e und 5.4f).

Proben, die mit geringer VED (65 Jmm^{-3}) gefertigt wurden, wiesen eine erhöhte Neigung zur Ausbildung von Inhomogenitäten auf. Diese traten in Form lokaler Fehlstellen auf, beispielsweise als Restaustenitinseln entlang der Schmelzbadgrenzen (Abb. 5.5a) oder als unaufgeschmolzene Einschlüsse (Abb. 5.5b). Bei letzteren handelt es sich vermutlich um MnS, wobei ein eindeutiger Nachweis im Rahmen der vorliegenden Untersuchungsmethoden nicht erbracht werden konnte.

Bei höheren VED wurden derartige Defekte hingegen nicht beobachtet, was auf den stabileren Energieeintrag und eine vollständigere Konsolidierung des Pulvers hinwies.

5.2.2 Einfluss der Bauplattentemperatur

Im Vergleich zur im vorherigen Kapitel beschriebenen Serie S1, die mit einer BPT von 200 °C gefertigt wurde, wurden die Serien S2 mit einer BPT von 100 °C sowie S3 ohne aktive Bauplattenheizung (BPT ungeregelt) hergestellt. Diese Variation ermöglichte den direkten Vergleich der Mikrostruktur und der Mikrohärtigkeit bei unterschiedlichen BPT. Zudem konnte auf diese Weise der Einfluss der kontinuierlichen Bauplattenheizung von dem Effekt der intrinsischen Wärmebehandlung, die während des PBF-LB-Prozesses auftritt, getrennt werden.

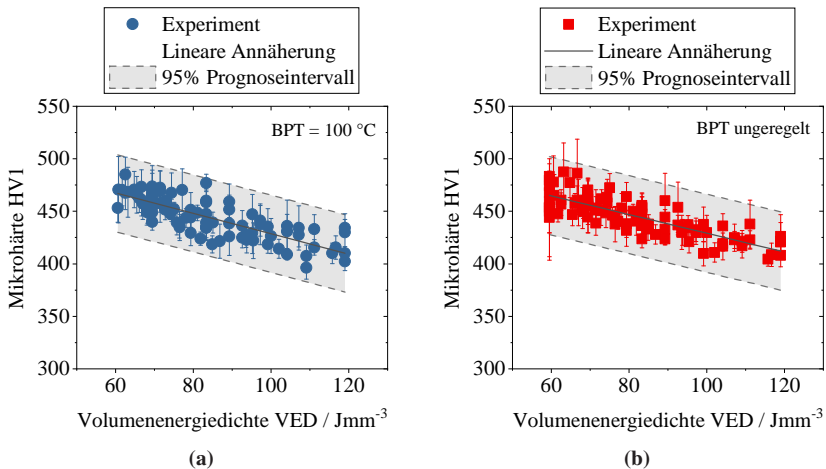


Abbildung 5.6: Einfluss der BPT auf die Mikrohärtigkeit in Abhängigkeit der VED. Dargestellt sind (a) die Ergebnisse der Serien S2 (BPT = 100 °C) und (b) S3 (BPT ungeregelt).

Zwischen den Serien S2 (BPT = 100 °C, Abb. 5.6a) und S3 (BPT unregelt, Abb. 5.6b) wurden keine signifikanten Unterschiede in den gemessenen Mikrohärtewerten, den Standardabweichungen oder in der Steigung der linearen Näherungsgeraden festgestellt. Im direkten Vergleich mit der Serie S1 (BPT = 200 °C, Abb. 5.2) zeigte sich jedoch eine Erhöhung der mittleren Mikrohärté, eine Vergrößerung der Standardabweichung sowie eine Ausweitung des 95 %-Prognoseintervalls für die Serien S2 und S3. Innerhalb des betrachteten Prozessfensters wurde eine Erhöhung der mittleren Mikrohärté um etwa 25 HV1 gemessen. Diese Zunahme war unabhängig von der jeweiligen VED, sodass die Steigung der Näherungsgeraden durch die Variation der BPT unverändert blieb. Gleichzeitig nahm die Standardabweichung der einzelnen Prozessparameterkombinationen bei S2 und S3 zu, was auf eine stärkere Gradierung des Gefüges und damit auf eine größere Variation der lokalen Anlasszustände hinwies. Dieser

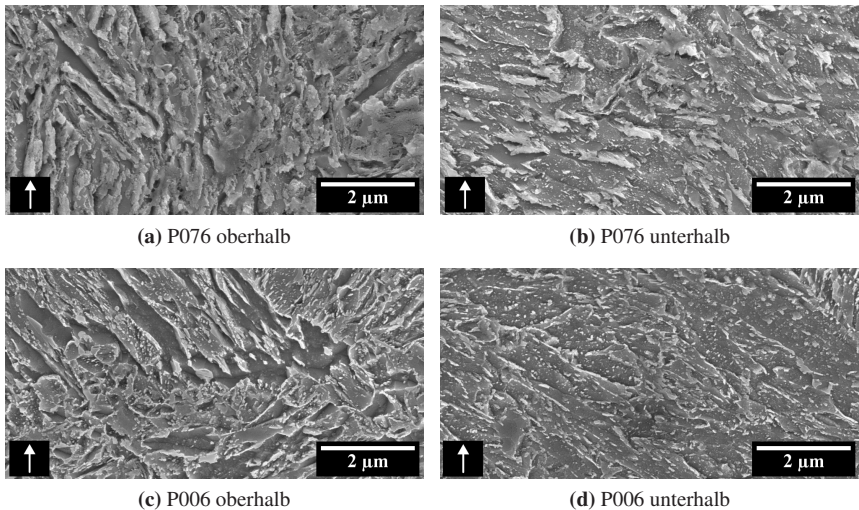


Abbildung 5.7: REM-Aufnahmen der Mikrostruktur der Serie S3 (BPT unregelt). Dargestellt sind die Bereiche oberhalb und unterhalb der jeweiligen Austenitisierungsgrenze für die Prozessparameterkombinationen P076 (65 J mm^{-3}) und P006 (115 J mm^{-3}).

Effekt äußerte sich auch in der Verbreiterung des 95 %-Prognoseintervalls von 60 HV1 bei Serie S1 auf 75 HV1 bei den Serien S2 und S3.

Die Variation der BPT führte zu einer Veränderung der Mikrostruktur der Serien S2 und S3. Aufgrund der geringen Unterschiede in der Mikrohärtة fielen die mikrostrukturellen Abweichungen im Vergleich zur Serie S1 jedoch gering aus. Abbildungen 5.7a und 5.7b zeigen die Mikrostruktur der Prozessparameterkombination P076 der Serie S3 mit einer VED von 65 Jmm^{-3} oberhalb und unterhalb einer Austenitisierungsgrenze. Die entsprechenden Aufnahmen der Prozessparameterkombination P006 der Serie S3 mit einer VED von 115 Jmm^{-3} sind in Abb. 5.7c und 5.7d dargestellt.

In den Aufnahmen der Bereiche an den Austenitisierungsgrenzen (Abb. 5.7a und 5.7c) zeigte sich im Vergleich zur Serie S1 eine Mikrostruktur mit feineren Karbidausscheidungen. In den stärker angelassenen Bereichen unterhalb der Austenitisierungsgrenzen konnte dagegen kein signifikanter Unterschied festgestellt werden. Die beobachteten mikrostrukturellen Unterschiede spiegelten die gemessenen Härteänderungen wider, insbesondere die vergrößerte Standardabweichung und die Ausweitung des 95 %-Prognoseintervalls.

5.2.3 Einfluss der Scanvektorlänge und Querschnittsfläche

In diesem Abschnitt wurden die Serien S1, S4 und S5, die jeweils bei einer BPT von $200 \text{ }^\circ\text{C}$ gefertigt wurden, miteinander verglichen. Der Fokus lag auf dem Einfluss unterschiedlicher Scanvektorlängen und Querschnittsflächen auf die resultierende Mikrohärtة und Mikrostruktur der Proben.

Im ersten Teil der Untersuchung wurden die Serien S1 und S4 analysiert, bei denen eine quadratische Beziehung zwischen der Scanvektorlänge und der Querschnittsfläche bestand ($A \sim l_{\text{SV}}^2$). Hierdurch wurde der kombinierte Einfluss dieser beiden Größen bei konstanter Belichtungsstrategie untersucht. Im zweiten Teil wurde die ursprüngliche Schraffurstrategie durch eine Streifenstrategie ersetzt, wodurch

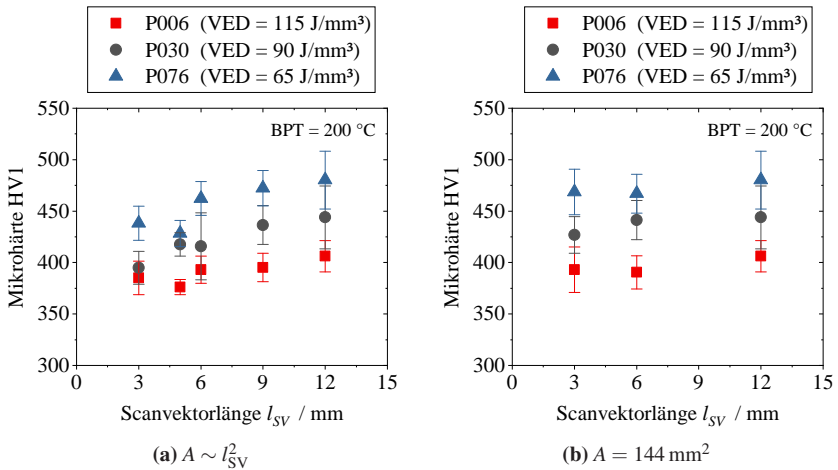


Abbildung 5.8: Einfluss der Scanvektorlänge l_{SV} auf die Mikrohärtigkeit in Abhängigkeit der VED. (a) Serien S1 und S4 mit proportionaler Beziehung zwischen Scanvektorlänge und Querschnittsfläche ($A \sim l_{SV}^2$) und (b) Serie S5 mit konstanter Querschnittsfläche und Variation der Scanvektorlänge durch Streifenstrategie.

die Scanvektorlänge gezielt von der Querschnittsfläche entkoppelt werden konnte. Die Kombination beider Ansätze ermöglichte eine getrennte Analyse der Einflüsse von Scanvektorlänge und Querschnittsfläche.

Zur Untersuchung des kombinierten Einflusses wurden neben den Proben der Serie S1 mit einer quadratischen Querschnittsfläche von 25 mm² (Kantenlänge 5 mm) auch Proben der Serie S4 mit Querschnittsflächen zwischen 9 mm² bis 144 mm² (Kantenlänge 3 mm bis 12 mm) gefertigt und untersucht. Abbildung 5.8 zeigt die gemessenen Mikrohärtewerte in Abhängigkeit von der mittleren Scanvektorlänge. Bei gleichzeitiger Variation von Scanvektorlänge und Querschnittsfläche wurde ein Anstieg der Mikrohärtigkeit mit zunehmender Scanvektorlänge (bzw. Querschnittsfläche) beobachtet (Abb. 5.8a). Die Ausprägung dieses Effekts hing von der jeweiligen Kombination der Prozessparameter ab. Bei Verwendung einer hohen VED von 115 J mm⁻³ (P006) ergab sich lediglich eine moderate Zunahme der Mikrohärtigkeit von 385 HV1 auf 406 HV1. Bei mittleren und niedrigen VED-Werten

(P030 und P076) wurden hingegen Änderungen der Mikrohärtigkeit im Bereich von 40 HV1 bis 50 HV1 festgestellt.

Abbildung 5.8b zeigt die Ergebnisse der Serie S5, bei der die Querschnittsfläche konstant 144 mm^2 betrug. Durch die Verwendung der Streifenstrategie mit Streifenbreiten von 3 mm bzw. 6 mm konnte die Scanvektorenlänge gezielt variiert und von der Querschnittsfläche entkoppelt werden. Unabhängig von der eingesetzten VED führte eine Verdreifachung der Scanvektorenlänge zu einem Anstieg der Mikrohärtigkeit um etwa 10 HV1 bis 15 HV1. Die kombinierte Analyse der Serien S1 und S4 ($A \sim l_{SV}^2$) sowie S5 ($A = 144 \text{ mm}^2$) verdeutlichte eine komplexe Abhängigkeit der Mikrohärtigkeit von der VED, der Scanvektorenlänge und der Querschnittsfläche. Bei hohen VED-Werten (z. B. P006 mit 115 J mm^{-3}) zeigte sich der Einfluss der Scanvektorenlänge auf die Mikrohärtigkeit am stärksten, während bei niedrigeren VED-Werten die Querschnittsfläche einen größeren Einfluss hatte.

In Bezug auf die Mikrostruktur zeigten die Serien S4 und S5 vergleichbare Abhängigkeiten von der VED wie in Abschnitt 5.2.1 beschrieben. Mit zunehmender VED wurde eine homogenere Mikrostruktur beobachtet, während bei niedrigen VED-Werten stärkere Unterschiede im Gefüge erkennbar waren. Für die Serie S4, bei der eine quadratische Beziehung zwischen Querschnittsfläche und Scanvektorenlänge bestand, wiesen Proben mit kurzen Scanvektorenlängen tendenziell eine etwas homogenere Mikrostruktur auf (Abb. 5.9a). In diesen Fällen wirkten die

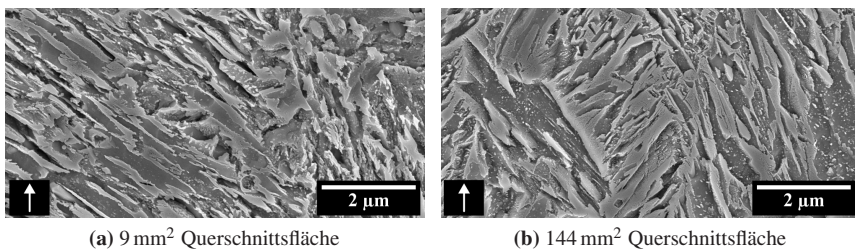


Abbildung 5.9: REM-Aufnahmen der Mikrostruktur der Serie S4 bei einer VED von 65 J mm^{-3} (P076). Dargestellt sind Proben mit unterschiedlichen Querschnittsflächen und mittleren Scanvektorenlängen: (a) 9 mm^2 (kurzer Scanvektor) und (b) 144 mm^2 (langer Scanvektor).

ehemaligen Austenitisierungsgrenzen im Vergleich zu Proben mit längeren Scanvektoren etwas stärker angelassen, was auf einen gleichmäßigeren thermischen Verlauf während des Schichtaufbaus hinwies (Abb. 5.9b). Für die Serie S5, bei der die Querschnittsfläche konstant gehalten und nur die Scanvektorenlänge variiert wurde, konnten in den REM-Aufnahmen keine signifikanten mikrostrukturellen Unterschiede zwischen den untersuchten Bedingungen festgestellt werden. Da die Unterschiede in der Mikrohärtigkeit gering waren, ließen sich diese mikrostrukturell weder mittels Lichtmikroskop noch mittels REM eindeutig nachweisen.

Wie bereits in Abschnitt 5.2.1 beschrieben, traten auch hier Inhomogenitäten in Form von Restaustenitinseln entlang der ehemaligen Schmelzbadgrenzen sowie unaufgeschmolzener Einschlüsse auf. Diese wurden ausschließlich bei Proben mit einer geringen VED von 65 J mm^{-3} beobachtet.

5.2.4 Einfluss der Mehrfachbelichtung

Zur Untersuchung des Einflusses der MFB auf die intrinsische Wärmebehandlung wurden die Serien S4 und S6 miteinander verglichen. Beide Serien wurden bei einer konstanten BPT von 200°C gefertigt und umfassten Proben mit quadratischer Geometrie und Kantenlängen zwischen 3 mm und 12 mm. Während die Serie S4 mit der Standard-Schraffurstrategie gefertigt wurde, kam bei der Serie S6 eine MFB zum Einsatz.

Die Ergebnisse zeigten, dass die Mikrohärtigkeit in beiden Serien denselben Abhängigkeiten von der VED, der Scanvektorenlänge und der Querschnittsfläche folgte. Eine geringe VED und lange Scanvektoren führten tendenziell zu einer höheren Mikrohärtigkeit (Abb. 5.10a). Die Ausprägung des Effekts der MFB variierte in Abhängigkeit von der verwendeten VED (Abb. 5.10b). Bei niedrigen VED-Werten, beispielsweise für die Prozessparameterkombination P076 mit einer VED von 65 J mm^{-3} , konnte nur ein geringer Einfluss der MFB auf die Mikrohärtigkeit festgestellt werden. In diesen Fällen entsprach das resultierende Härteniveau dem der konventionell belichteten Proben der Serie S4. Bei hoher VED zeigte sich hingegen ein deutlicher Einfluss der MFB. Für die Prozessparameterkombination P006 mit einer

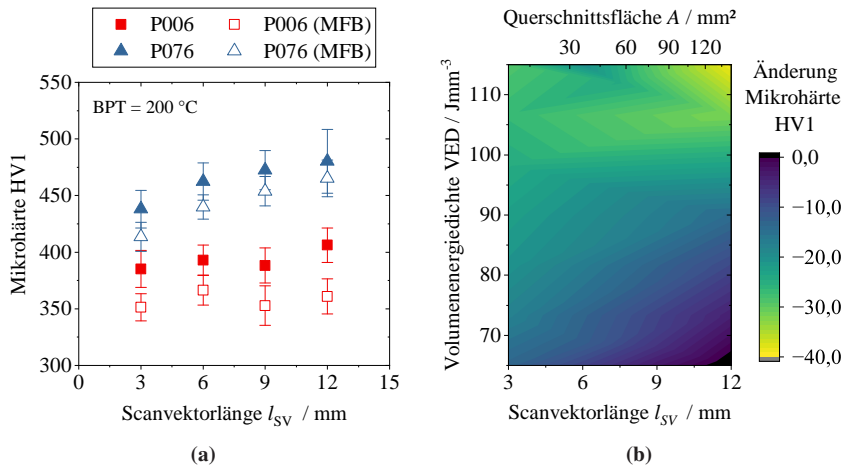


Abbildung 5.10: Einfluss der MFB auf die Mikrohärtigkeit. (a) Darstellung der Mikrohärtigkeit in Abhängigkeit der Scanvektorlänge l_{SV} für Serien S4 (Standard) und S6 (MFB). (b) Änderung der Mikrohärtigkeit HV1 in Abhängigkeit der VED und l_{SV} für den direkten Vergleich zwischen der Bearbeitung mit und ohne MFB.

VED von 115 J mm^{-3} führte die MFB zu einer signifikanten Reduktion der Mikrohärtigkeit um etwa 30 HV1 bis 40 HV1. Der Einfluss der Scanvektorlänge blieb dabei vergleichsweise gering.

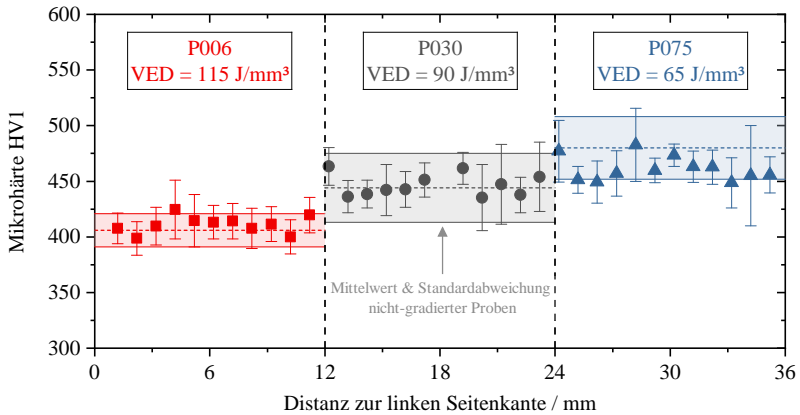
Insgesamt wurde deutlich, dass der Effekt der MFB stark von der VED abhing. Während bei niedrigen VED-Werten der zusätzliche thermische Energieeintrag keinen merklichen Einfluss auf die Mikrohärtigkeit ausübte, führte er bei hoher VED zu einer ausgeprägten Reduktion der Härte infolge der verstärkten thermischen Belastung und des damit einhergehenden Anlassens der Mikrostruktur.

5.3 Einstellung gradierter Bauteilzustände

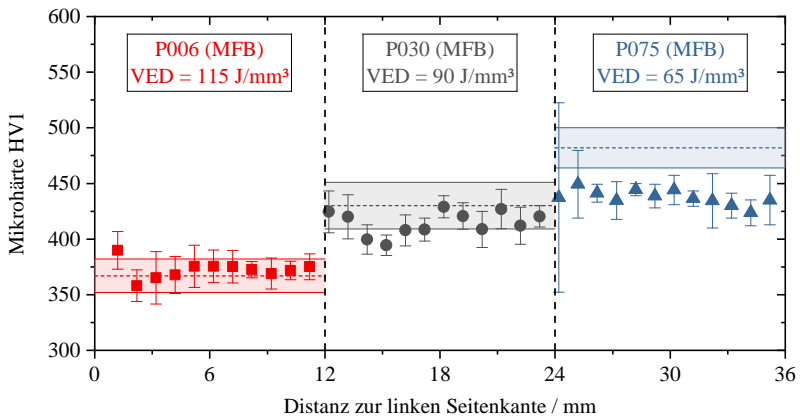
Zur gezielten Erzeugung von Bauteilbereichen mit unterschiedlichen mechanischen Eigenschaften wurde die Serie S7 gefertigt. Die Proben dieser Serie besaßen

eine rechteckige Querschnittsfläche von $36 \text{ mm} \times 12 \text{ mm}$ und wurden bei einer konstanten BPT von $200 \text{ }^\circ\text{C}$ hergestellt. Entlang der Längsrichtung wurden drei Zonen mit unterschiedlichen Prozessparameterkombinationen angeordnet, um eine gezielte Gradierung des Bauteilzustands zu realisieren. Jede Zone wies eine Querschnittsfläche von $12 \text{ mm} \times 12 \text{ mm}$ auf. Die Gradierung erfolgte in Längsrichtung, während Aufbaurichtung und Querrichtung unverändert blieben. Das dargestellte Konzept erlaubt prinzipiell auch eine Übertragung auf andere Raumrichtungen.

Die gemessene Mikrohärtigkeit der gradierten Bereiche zeigte eine vergleichbare Abhängigkeit von der VED wie die zuvor untersuchten Einzelproben der Serien S4 (ohne MFB) und S6 (mit MFB). Geringe VED-Werte führten tendenziell zu höheren Härtewerten, während mit zunehmender VED eine Reduktion der Mikrohärtigkeit beobachtet wurde. In Abb. 5.11 sind die Mittelwerte und Standardabweichungen der Einzelproben der Serien S4 und S6 als Referenz dargestellt, um den Vergleich mit den entsprechenden Bereichen der gradierten Proben zu ermöglichen. Für die Probenbereiche ohne MFB (Vergleich zur Serie S4) ergab sich bei hoher VED ($P006, 115 \text{ J mm}^{-3}$) eine sehr gute Übereinstimmung der gemessenen Mikrohärtigkeit mit den entsprechenden Einzelproben (Abb. 5.11a). Die Härtewerte lagen vollständig innerhalb der jeweiligen Streubreite. Bei niedriger VED ($P075, 65 \text{ J mm}^{-3}$) war die mittlere Mikrohärtigkeit leicht reduziert, verblieb jedoch ebenfalls im Bereich der Streuung. Die Differenz der gemittelten Mikrohärtigkeit zur Referenzprobe betrug etwa 20 HV1 . Für die Probenbereiche mit MFB (Vergleich zur Serie S6) zeigte sich ein ähnliches Verhalten (Abb. 5.11b). Bei hoher VED ($P006, 115 \text{ J mm}^{-3}$) stimmten die gemessenen Härtewerte gut mit den Referenzwerten überein. Für mittlere VED ($P030, 90 \text{ J mm}^{-3}$) wurde eine geringfügige Reduktion der mittleren Mikrohärtigkeit beobachtet, die jedoch innerhalb der Streubreite der jeweiligen Einzelproben lag. Bei niedriger VED ($P075, 65 \text{ J mm}^{-3}$) fiel die Mikrohärtigkeit hingegen deutlich geringer aus, die Differenz zur Referenz betrug rund 40 HV1 . Zwischen den beiden Extremfällen der hohen Mikrohärtigkeit bei geringem VED ohne MFB ($P075$) und der niedrigen Mikrohärtigkeit bei hohem VED mit MFB ($P006$) entstand eine Härte­differenz von ungefähr 70 HV1 bis 80 HV1 (Abb. 5.11).



(a) Ohne MFB (Vergleich zu Serie S4)



(b) Mit MFB (Vergleich zu Serie S6)

Abbildung 5.11: Mikrohärteverteilungen der gradierten Proben der Serie S7 im Vergleich zu den Referenzserien S4 (Einzelproben ohne MFB) und S6 (Einzelproben mit MFB).

Insgesamt verdeutlichen die Ergebnisse der Serie S7, dass eine gezielte Einstellung gradierter Mikrohärteverteilungen im Bauteil über die Variation der Prozessparameter und den gezielten Einsatz von MFB möglich ist. Gleichzeitig zeigten die Messungen, dass insbesondere bei niedrigen VED-Werten in Kombination mit MFB mit signifikanten Reduktionen der Mikrohärte zu rechnen ist.

5.4 Diskussion

5.4.1 Einfluss der Volumenenergiedichte auf Mikrostruktur und Härte

Einordnung der Volumenenergiedichte als Prozesskenngröße

Die VED stellt eine etablierte Kenngröße zur Beschreibung des Energieeintrags im PBF-LB-Prozess dar [8, 10]. Sie fasst Laserleistung, Scangeschwindigkeit, Schichthöhe und Schraffurabstand zu einer dimensionslosen Größe zusammen und ermöglicht den Vergleich unterschiedlicher Prozessparameterkombinationen. Obwohl sie lokale thermische Effekte und den zeitlichen Energieverlauf nur näherungsweise erfasst, hat sich die VED in der Literatur als nützliches Maß für die qualitative Beschreibung der Energieeinbringung etabliert [104, 108, 120].

Die in Abb. 5.2 dargestellten Ergebnisse zeigen innerhalb des ermittelten Prozessfensters eine nahezu lineare Abnahme der Mikrohärte mit zunehmender VED. Dieser Zusammenhang deutet darauf hin, dass höhere Energieeinträge eine verstärkte Anlasswirkung hervorrufen und somit zu einer weicheren, stärker angelassenen martensitischen Mikrostruktur führen. Die ermittelten Härtewerte stimmen sowohl im Trend als auch im Absolutniveau gut mit den Literaturwerten für 42CrMo4- und AISI 4140-Stähle überein [11, 104]. Damit bestätigt sich, dass die VED, trotz ihrer vereinfachten Definition, die dominanten thermischen Effekte des Prozesses mit hoher Genauigkeit abbildet.

Zu berücksichtigen ist jedoch, dass identische VED-Werte durch unterschiedliche Kombinationen von Laserleistung und Scangeschwindigkeit erzielt werden können, die wiederum verschiedene Schmelzbadgrößen, Temperaturgradienten und Abkühlraten erzeugen [115]. Die VED beschreibt somit nicht den physikalischen Energiefluss, sondern eine effektive Prozessgröße, die die Gesamtintensität der Wärmebelastung widerspiegelt. Innerhalb des stabilen Bereichs von 65 J mm^{-3} bis 115 J mm^{-3} erwies sie sich dennoch als geeigneter Parameter, um den Einfluss der intrinsischen Wärmebehandlung auf Mikrostruktur und Härte konsistent zu beschreiben.

Interpretation des Härteverlaufs und mikrostruktureller Mechanismen

Der lineare Rückgang der Mikrohärtigkeit mit zunehmender VED lässt sich durch den zunehmenden thermischen Einfluss während des Schichtaufbaus erklären. Bei niedriger VED (65 J mm^{-3}) dominieren hohe Abkühlraten und große Temperaturgradienten, wodurch eine feine, überwiegend martensitische Mikrostruktur mit vergleichsweise geringem Anlasszustand entsteht. Mit steigender VED nimmt der Energieeintrag pro Volumen zu. Die Schmelzbäder überlappen deutlicher und die Bearbeitung nachfolgender Schichten führt zu einer ausgeprägteren Erwärmung der darunterliegenden Bereiche. Die hierdurch erhöhte intrinsische Wärmebehandlung bewirkt eine lokale Ausscheidung von Karbiden und einen zunehmenden Anlasszustand des Martensits, was eine Verringerung der Mikrohärtigkeit zur Folge hat. Dieses Verhalten korrespondiert mit den in [11, 107, 108] dokumentierten Anlasseffekten additiv gefertigter Vergütungsstähle.

Die Mikrostrukturanalysen in Abb. 5.4 belegen diese Interpretation. Proben mit geringer VED wiesen ausgeprägte Austenitisierungsgrenzen auf, an denen sich zwei klar unterscheidbare Bereiche aus schwach und stärker angelassenem Martensit bildeten. Bei höheren VED-Werten verschwanden diese Grenzlinien weitgehend, was auf eine homogenere Temperaturverteilung und eine verstärkte thermische

Durchwärmung hinweist. Damit konnte der direkte Zusammenhang zwischen Energieeintrag, Anlasszustand und Härteverhalten experimentell bestätigt werden.

Neben der Anlass temperatur ist auch die Zeitkomponente relevant. Die kurzen, wiederholten Aufheizzyklen im PBF-LB-Prozess entsprechen einer Vielzahl mikroskopischer Anlassprozesse, deren kumulativer Effekt mit steigender VED zunimmt. Über die Hollomon–Jaffe-Korrelation lässt sich zeigen, dass Temperaturänderungen einen größeren Einfluss auf den Anlasseffekt haben als moderate Änderungen der Zeitdauer [11]. Dies erklärt, warum die BPT einen geringeren Einfluss auf die Härte aufweist als die VED, obwohl sie über längere Zeiträume wirkt (Abschnitt 5.2.2).

Grenzen und Bewertung der VED-basierten Beschreibung

Trotz der guten Korrelation zwischen VED und Härte ist die Aussagekraft der VED begrenzt. Sie beschreibt den mittleren Energieeintrag, berücksichtigt jedoch weder die lokalen Temperaturgradienten noch die zeitliche Dynamik der Wärmeflüsse. Insbesondere bei extremen Kombinationen von Laserleistung und Scangeschwindigkeit kann die gleiche VED zu unterschiedlichen Temperaturprofilen führen. Dies erklärt die beobachtete Streuung innerhalb des 95 %-Prognoseintervalls in Abb. 5.2.

5.4.2 Einfluss der Bauplattentemperatur auf Mikrostruktur und Härte

Die Variation der BPT zeigte im Vergleich zur VED einen geringeren, jedoch klar quantifizierbaren Einfluss auf die resultierende Mikrohärtigkeit und Mikrostruktur. Zwischen den Serien S2 (100 °C) und S3 (ungeregelt) wurden keine signifikanten Unterschiede festgestellt, während die bei 200 °C gefertigte Serie S1 geringere mittlere Härte werte aufwies. Die Differenz der mittleren Härte betrug etwa 25 HV1, unabhängig von der jeweiligen VED (Abb. 5.6). Gleichzeitig nahm die

Streuung der Härtewerte bei niedrigeren BPT zu, was auf eine stärkere lokale Variation der Anlasszustände hinweist.

Dieser Trend steht im Einklang mit den in der Literatur beschriebenen Effekten der Vorwärmung bei der additiven Fertigung von Vergütungsstählen [11, 33, 112]. Eine erhöhte BPT reduziert die Temperaturgradienten, wodurch die darunterliegenden Schichten während des Aufbaus einer gleichmäßigeren thermischen Historie unterliegen. Dadurch kommt es zu einer stärkeren Anlasswirkung des martensitischen Gefüges, was die beobachtete Reduktion der Härte erklärt. Bei niedrigeren BPT bleiben die thermischen Gradienten steiler, wodurch ausgeprägtere lokale Temperaturunterschiede und eine inhomogenere Mikrostruktur entstehen. Dies führt zu einer erhöhten Streuung der Härtewerte.

Die mikroskopischen Befunde bestätigen diese Interpretation. In den REM-Aufnahmen der Serie S3 mit unregelter BPT (Abb. 5.7) wurden oberhalb der Austenitisierungsgrenzen feinere Karbidausscheidungen beobachtet, während die stärker angelassenen Bereiche unterhalb der Grenzen vergleichbare Strukturen zu jenen der Serie S1 aufwiesen. Über den Ansatz von Damon et al. [11] auf Basis der Hollomon-Jaffe-Beziehung lässt sich erklären, dass eine moderate Temperaturerhöhung von 100 °C auf 200 °C bei den kurzen thermischen Zeitskalen des PBF-LB-Prozesses nur eine begrenzte zusätzliche Anlasswirkung hervorruft. Daher bleibt der beobachtete Einfluss der BPT im Vergleich zur Variation der VED untergeordnet.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die BPT im untersuchten Bereich keinen signifikanten Einfluss auf die mittlere Härteentwicklung ausübte, wohl aber auf die Homogenität der Mikrostruktur. Eine höhere BPT führte zu einer gleichmäßigeren Anlasswirkung und geringeren Härtestreuung, während niedrigere Temperaturen stärkere Gefügegradienten und ausgeprägtere lokale Härteunterschiede verursachten.

5.4.3 Einfluss der Scanvektorlänge und Querschnittsfläche

Die Variation der Scanvektorlänge und der Probenquerschnittsfläche zeigte einen deutlichen Einfluss auf die gemessene Mikrohärtigkeit und, in abgeschwächter Form, auf die Mikrostruktur. Bei gleichzeitiger Erhöhung beider Größen ($A \sim l_{SV}^2$) stieg die Mikrohärtigkeit mit zunehmender Scanvektorlänge an (Abb. 5.8a). Dieser Anstieg war abhängig von der verwendeten VED: Bei hoher VED (115 J mm^{-3} , P006) betrug die Härtezunahme lediglich 21 HV1, während sie bei mittleren und niedrigen VED-Werten (P030, P076) bis zu 50 HV1 erreichte. Damit erwies sich die Wechselwirkung zwischen Scanvektorlänge, Querschnittsfläche und VED als nichtlinear und stark prozessabhängig. Diese Beobachtung lässt sich auf Unterschiede im thermischen Verlauf während des Schichtaufbaus zurückführen. Längere Scanvektoren führen zu einer räumlich ungleichmäßigeren Wärmeverteilung innerhalb der Schicht, wodurch sich lokal höhere Temperaturgradienten ergeben können. Die isolierte Variation der Scanvektorlänge bei konstanter Querschnittsfläche in der Serie S5 (Abb. 5.8b) bestätigte diesen Effekt. Eine Verdreifachung der Scanvektorlänge führte zu einer moderaten Erhöhung der Mikrohärtigkeit um 15 HV1, unabhängig von der eingesetzten VED. Die Ergebnisse verdeutlichen, dass sich die Mikrohärtigkeit nicht ausschließlich durch die VED, sondern auch durch geometrisch bedingte Unterschiede in der Wärmeleitung und Wärmespeicherung beeinflussen lässt. Dies könnte beispielsweise in einer Topologieoptimierung genutzt werden, die neben den mechanischen Lasten auch die thermische Historie des Prozesses mit betrachtet.

In den zugehörigen mikrostrukturellen Analysen zeigte sich ein konsistentes Bild. Die Serien S4 und S5 wiesen in Abhängigkeit von der VED vergleichbare Tendenzen auf wie die zuvor untersuchte Serie S1 (Abschnitt 5.2.1). Mit steigender VED wurde eine homogenere Mikrostruktur beobachtet, während bei niedriger VED (65 J mm^{-3}) ausgeprägtere Unterschiede zwischen den Bereichen ober- und unterhalb der Austenitisierungsgrenzen auftraten. Bei kurzen Scanvektoren (kleine Querschnitte) zeigten die REM-Aufnahmen tendenziell eine gleichmäßigere Verteilung feiner Karbide (Abb. 5.9a), wohingegen längere Scanvektoren (große

Querschnitte) eine stärkere Inhomogenität aufweisen (Abb. 5.9b). Der Unterschied ist auf die verlängerte Abkühlzeit zwischen der Bearbeitung von zwei angrenzenden Scanvektoren oder darüberliegenden Schichten bei größeren Probenflächen zurückzuführen.

Die Mikrostrukturuntersuchungen bestätigten zugleich, dass der Einfluss der Scanvektorlänge bei konstantem Querschnitt (Serie S5) gering blieb. Trotz messbarer Härteunterschiede konnten in den REM-Aufnahmen keine signifikanten Änderungen in der Karbidmorphologie oder der Ausprägung der Austenitisierungsgrenzen identifiziert werden. Dies deutet darauf hin, dass die beobachteten Härteänderungen vorwiegend durch subtile Unterschiede in der Anlasstemperatur und -dauer verursacht wurden, die mikrostrukturell unterhalb der Auflösungsgröße des REM liegen.

Wie bereits in Abschnitt 5.2.1 beschrieben, traten Inhomogenitäten in Form von Restaustenitinseln und unaufgeschmolzenen Einschlüssen auch in diesem Versuchsabschnitt ausschließlich bei niedriger VED auf. Beide Effekte können auf unzureichende Homogenisierung der Legierungselemente des Schmelzbades zurückgeführt werden. Diese Befunde unterstreichen, dass der Energieeintrag der dominierende Parameter für die Stabilität und Homogenisierung der Schmelzbäder bleibt, während geometrische Effekte primär die Festkörperumwandlungen innerhalb des festen Materials beeinflussen.

5.4.4 Einfluss der Mehrfachbelichtung

Die Einführung einer MFB führte zu signifikanten Änderungen der gemessenen Mikrohärtigkeit, deren Ausprägung stark von der eingesetzten VED abhing. Wie in Abb. 5.10a dargestellt, zeigten die Serien S4 (Standardbelichtung) und S6 (MFB) ein konsistentes Härteverhalten in Abhängigkeit von Scanvektorlänge und Querschnittsfläche. Gleichzeitig wurde bei hohen VED-Werten eine deutliche Reduktion der Mikrohärtigkeit infolge der MFB beobachtet. Für die Prozessparameterkombination P006 mit einer VED von 115 Jmm^{-3} verringerte sich die Mikrohärtigkeit im Mittel um 30 HV1 bis 40 HV1, während bei niedrigen VED-Werten

(65 Jmm⁻³, P076) keine signifikanten Unterschiede festgestellt wurden. Die Konturplots in Abb. 5.10b verdeutlichen, dass der Einfluss der MFB mit zunehmender Energiedichte zunahm und sich insbesondere im oberen Bereich des Prozessfensters manifestierte. Die Ursache dieses Verhaltens liegt in der veränderten thermischen Historie infolge des wiederholten Energieeintrags. Die zweite Belichtung einer Schicht führt zu einer partiellen Wiedererwärmung des Materials. Dadurch treten in Bereichen, die bereits vollständig erstarrt und martensitisch umgewandelt sind, zusätzliche Anlasseffekte auf. Bei niedriger VED ist der initiale Energieeintrag zu gering, um eine merkliche zusätzliche Erwärmung über den kritischen Anlassbereich hinaus zu bewirken, sodass die MFB dort keinen messbaren Einfluss zeigt. Bei hoher VED hingegen steigt die lokale Temperatur nach der zweiten Belichtung auf Werte oberhalb der Anlasstemperatur, was zu einer verstärkten Karbidausscheidung und einer damit einhergehenden Reduktion der Härte führt. Ein analoger Effekt wurde von Shi et al. [124] berichtet, die bei der MFB eines 42CrMo4-Stahls ebenfalls eine Reduktion der Härte bei hohen Energiedichten beobachteten und diesen auf lokale Überhitzung und Selbstanlassen zurückführten.

Die Mikrostrukturuntersuchungen dieser Arbeit bestätigten diese Interpretation. Während bei niedriger VED keine Unterschiede zur Standardbelichtung erkennbar waren, zeigten Proben mit hoher VED eine vergrößerte Karbidmorphologie und eine geringere Ätzkontrastierung der Austenitisierungsgrenzen, was auf eine homogenere, stärker angelassene Struktur hinwies.

Zusammenfassend zeigte sich, dass die MFB eine wirksame Möglichkeit darstellt, die lokale thermische Nachbehandlung während des PBF-LB-Prozesses zu beeinflussen. Sie führt insbesondere bei hohen Energiedichten zu einer signifikanten Reduktion der Härte infolge verstärkter Anlasseffekte, während sie bei niedrigen Energiedichten weitgehend wirkungslos bleibt. Damit eröffnet die MFB prinzipiell die Möglichkeit, den lokalen Anlasszustand gezielt einzustellen, erfordert jedoch eine sorgfältige Anpassung der Prozessparameter, um ungewollte Härteverluste zu vermeiden.

5.4.5 Einstellung gradiert Bauteilzustände

Die in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen Ergebnisse verdeutlichen, dass die Mikrohärtigkeit und Mikrostruktur stark von der jeweiligen Prozessparameterkombination sowie der eingesetzten Belichtungsstrategie abhängen. Auf dieser Grundlage wurde mit der Serie S7 untersucht, inwieweit sich diese Zusammenhänge gezielt zur Einstellung von Gradienten im Bauteil ausnutzen lassen. Hierzu wurden entlang der Längsrichtung Probenbereiche mit unterschiedlichen Prozessparameterkombinationen angeordnet, um einen kontrollierten Übergang zwischen verschiedenen thermischen und mikrostrukturellen Zuständen zu realisieren (Abb. 5.11). Das gewählte Konzept erlaubt prinzipiell die additive Fertigung funktional gradiert Strukturen mit definierten lokalen Eigenschaftsverteilungen.

Für die Zonen ohne MFB (Vergleich zu Serie S4) lag die gemessene Mikrohärtigkeit bei hoher VED (115 J mm^{-3}) im Bereich der Referenzproben, während bei niedriger VED (65 J mm^{-3}) eine leichte Reduktion von etwa 20 HV1 festgestellt wurde. Diese Abweichung kann auf eine geringfügig veränderte lokale Wärmeleitung durch die angrenzenden, unterschiedlich erwärmten Zonen zurückgeführt werden, wodurch sich der lokale Temperaturverlauf während der Erstarrung und des Anlassens leicht änderte. Für die Zonen mit MFB (Vergleich zu Serie S6) zeigte sich ein analoges Verhalten. Während die Härtewerte bei hoher VED gut mit den Referenzen übereinstimmten, trat bei niedriger VED eine deutliche Reduktion um rund 40 HV1 auf. Diese Beobachtung steht im Einklang mit der in Abschnitt 5.2.4 beschriebenen Wechselwirkung zwischen VED und MFB, wonach die zusätzliche thermische Belastung bei niedrigen VED-Werten stärker ins Gewicht fällt. Ursache hierfür ist der geringere Anlassgrad in diesen Bereichen, sodass der Werkstoff deutlich empfindlicher auf sekundäre Anlassvorgänge reagiert. Dadurch werden Regionen mit niedriger VED verstärkt durch den Energieeintrag benachbarter Schmelzbahnen angelassen.

Die erzielten Gradienten in der Mikrohärtigkeit resultierten somit aus der gezielten Kombination der beiden dominierenden Einflussgrößen VED und MFB. In mikroskopischer Hinsicht ist anzunehmen, dass sich entlang der Längsrichtung eine

stufenweise Veränderung des Karbidausscheidungs Zustands und der lokalen Anlasszustände einstellt, während die grundlegende martensitische Matrixstruktur erhalten bleibt. Eine solche Mikrostrukturkonfiguration bietet die Möglichkeit, das lokale Verhältnis von Festigkeit zu Duktilität innerhalb eines Bauteils gezielt einzustellen. In Analogie zu klassischen Wärmebehandlungen entspricht dies einer lokal differenzierten Kombination aus Härte und Anlasszustand, jedoch ohne nachträgliche thermische Prozessschritte.

Im Vergleich zu konventionellen Verfahren der Gradierung, beispielsweise durch partielle Induktions- oder Laseranlassverfahren, bietet das hier demonstrierte Verfahren den Vorteil, dass die Gradienten bereits während des additiven Aufbaus eingestellt werden können. Zusätzlich ist die Gradierung im PBF-LB Prozess auf das gesamte Volumen anwendbar, während die konventionellen Verfahren auf zugängliche Oberflächen oder Randbereiche limitiert sind. Die vorliegenden Ergebnisse zeigen, dass die Kombination von Prozessparametervariation und MFB eine effektive Methode zur gezielten Eigenschaftsmodulation für Vergütungsstähle darstellt. Damit stellt diese Methode einen vielversprechenden Ansatz zur integrierten Eigenschaftsanpassung während des Bauprozesses dar und erweitert das Prozessverständnis hinsichtlich der Steuerung der intrinsischen Wärmebehandlung in Vergütungsstählen.

6 Ergebnisse und Diskussion der FE-Prozessmodellierung

6.1 Modelloptimierung

6.1.1 Kalibrierung der Goldak-Laserquelle

Die Kalibrierung der Goldak-Laserquelle (Abschnitt 4.2.1) diente der präzisen Abbildung des Energieeintrags im Rahmen der FEM-Prozesssimulation. Grundlage bildete die in Schüßler et al. [191] beschriebene Methodik, bei der die modellierten Schmelzbaddimensionen beziehungsweise die resultierende Härtezone (HZ) mit experimentell ermittelten Referenzdaten verglichen wurden. Die Bestimmung der Schmelzbaddimensionen des Werkstoffs 42CrMo4 anhand metallographischer Querschliffe gestaltete sich aufgrund der martensitischen Umwandlung während des Abkühlvorgangs als schwierig. Das Schmelzbad erstarrte zunächst austenitisch und wandelte sich unterhalb der M_S -Temperatur vollständig in Martensit um. Auch die angrenzende Randzone wurde während des Umschmelzvorgangs austenitisiert und bildete beim Abkühlen ebenfalls Martensit, wodurch eine eindeutige optische Abgrenzung zwischen beiden Bereichen nicht möglich war. Zur Gewährleistung einer reproduzierbaren Kalibrierung wurde daher die gesamte durch den Laserprozess erzeugte HZ, bestehend aus dem ehemaligen Schmelzbad und der austenitisierten Randzone, als Vergleichsgröße herangezogen. Diese Zone wies im Gegensatz zur ursprünglichen Schmelzbadgrenze eine klar erkennbare Abgrenzung zum angrenzenden, hoch angelassenen Martensit vorangegangener Schichten auf, sodass ihre Breite und Tiefe zuverlässig vermessen werden konnten.

Tabelle 6.1: Implementierte Koeffizienten A_{\min} , A_{\max} , x_0 und α_p der logistischen Wachstumsfunktion zur Beschreibung der Parameter der Tiefenwirkung $c(P, v)$ und des Absorptionskoeffizienten $\eta(P, v)$ des Goldak-Doppel­ellipsoidmodells. Die gewählte Funktion (Gleichung (4.13)) ermöglicht eine realitätsnahe Abbildung des Übergangsverhaltens zwischen minimaler und maximaler Ausprägung der jeweiligen Parameter in Abhängigkeit der LED.

	A_{\min}	A_{\max}	x_0	α_p
$c(P, v)$	0,03 mm	0,09 mm	$0,282 \text{ Jmm}^{-1}$	9
$\eta(P, v)$	0,3	0,9	$0,214 \text{ Jmm}^{-1}$	6,9

Die Parameter der Goldak-Wärmequelle, namentlich die effektive Tiefenwirkung c und der Absorptionskoeffizient η , wurden gezielt variiert, um den Einfluss der Laserleistung P und der Scangeschwindigkeit v zu berücksichtigen (Abschnitt 4.2.1). Ihre funktionale Abhängigkeit wurde über eine beidseitig beschränkte Wachstumsfunktion modelliert (Gleichung (4.13)). Diese Funktionsform ermöglicht die Definition realistischer Parametergrenzen und eine physikalisch konsistente Beschreibung des nichtlinearen Verhaltens. Die jeweiligen Koeffizienten der Wachstumsfunktion wurden durch Abgleich der simulierten HZ-Geometrien mit den experimentell ermittelten Daten bestimmt (Tabelle 6.1). Dabei wurden für die Tiefenwirkung c Werte im Bereich von $30 \mu\text{m}$ bis $90 \mu\text{m}$ und für den Absorptionskoeffizienten η im Bereich von 0,3 bis 0,9 festgelegt, entsprechend der in der Literatur angegebenen Wertebereiche [206–208]. Die resultierenden Parameter der logistischen Wachstumsfunktion sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst.

Die Validierung der parametrisierten Wärmequelle erfolgte durch den Vergleich der simulierten Breite und Tiefe der HZ mit unabhängigen, nicht zur Kalibrierung herangezogenen Messwerten. Wie in Abb. 6.1a dargestellt, zeigte sich über den untersuchten Bereich der LED eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Dies belegt die Eignung der kalibrierten Goldak-Laserquelle zur realitätsnahen Vorhersage der lokalen thermischen Beeinflussung im Werkstoff 42CrMo4, wie exemplarisch in Abb. 6.1b verdeutlicht.

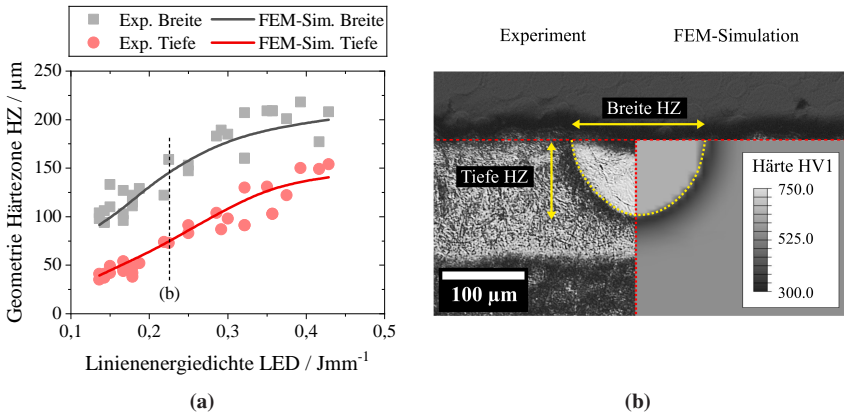


Abbildung 6.1: Vergleich von Simulation und Experiment zur Validierung der parametrisierten Goldak-Laserquelle. (a) zeigt den Zusammenhang zwischen simulierten und gemessenen HZ-Dimensionen in Abhängigkeit der LED. (b) zeigt exemplarisch den Vergleich eines simulierten und experimentell bestimmten Querschliffs bei einer LED von $0,225 \text{ Jmm}^{-1}$.

6.1.2 Optimierung des Multiskalenansatzes

Die nachfolgend beschriebene Optimierung des Multiskalenansatzes basiert auf dem in Abschnitt 4.3.4 erläuterten Modellierungsansatz und wurde in Schüßler et al. [191] vorgestellt. Ziel der Optimierung war die Bestimmung einer geeigneten räumlichen Aufteilung der unterschiedlichen Modellierungsansätze für die Laserenergieeinbringung innerhalb der Simulationsdomäne. Der Schwerpunkt der Untersuchung lag auf der Abwägung zwischen der Berechnungsgenauigkeit im Nah- und Fernfeld mit dem Rechenaufwand. Hierzu wurden vier verschiedene Kombinationen der in Abschnitt 4.2 beschriebenen Laserquellenmodelle untersucht. Dabei kamen die flächenäquivalente Laserquelle (FEQ), die linienäquivalente Laserquelle (LEQ) und die Goldak-Laserquelle in unterschiedlicher Kombination und räumlicher Verteilung zum Einsatz. Die Größe der Simulationsdomänen wurde in Abhängigkeit von der verwendeten Scanstrategie und der Anzahl der Scanvektoren definiert.

- **FEQ-Makroskala:** Vollständige Modellierung mittels der FEQ (Abschnitt 4.2.3). Dabei wurden die Konturbahnen zu einem gemeinsamen FEQ-Bereich zusammengefasst, alle Schraffurscanvektoren bildeten einen weiteren FEQ-Bereich.
- **LEQ-Makroskala:** Kombination einer zentralen LEQ über neun Scanvektoren (Abschnitt 4.2.2) mit FEQ-Modellierung in den übrigen Bereichen.
- **Multiskala-(3+2):** Kombination aus FEQ im Fernfeld (Kontur und entfernte Schraffur), LEQ über zwei angrenzende Scanvektoren sowie Goldak-Modellierung (Abschnitt 4.2.1) für drei zentrale Scanvektoren im Bereich des Auswertepunktes.
- **Multiskala-(7+2):** Wie die Multiskala-(3+2)-Konfiguration, jedoch mit einer erweiterten Goldak-Modellierung über sieben zentrale Scanvektoren.

Abb. 6.2 zeigt die berechneten Temperaturverläufe am zentralen Auswertepunkt für alle untersuchten Modellierungskonfigurationen. Die zugehörigen Rechenzeiten pro Schicht sind in Tabelle 6.2 zusammengefasst. Erwartungsgemäß liefert die Konfiguration mit der größten Anzahl explizit modellierter Scanvektoren

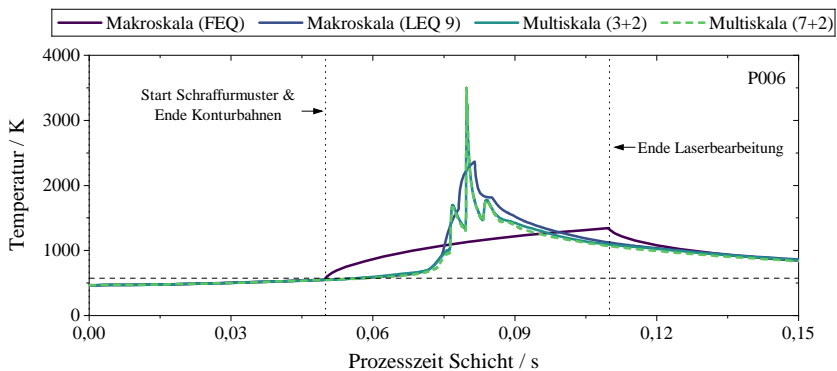


Abbildung 6.2: Vergleich der berechneten Temperaturverläufe am zentralen Auswertepunkt für die verschiedenen Konfigurationen der Skalenansätze.

Tabelle 6.2: Vergleich der Rechenzeiten pro Schicht für die verschiedenen Skalenansätze. Ausgewertete Simulationen wurde auf der gleichen Hardware durchgeführt. Ein signifikanter Einfluss der Hardware ist zu erwarten.

	Makroskala (FEQ)	Makroskala (LEQ 9)	Multiskala (3+2)	Multiskala (7+2)
Rechenzeit	154 s	988 s	4341 s	14343 s

(Multiskala-(7+2)) die Temperaturhistorie mit der höchsten Genauigkeit. Die maximale Abweichung der Multiskala-(3+2)-Variante liegt im Bereich des Abkühlverlaufs bei etwa 100 K, bei gleichzeitig deutlich reduzierter Simulationszeit von 14343 s auf 4341 s pro Schicht. Die LEQ-Makroskala zeigt im Nahfeld geringere Maximaltemperaturen. Der Rechenaufwand ist mit 988 s pro Schicht vergleichsweise gering. Die FEQ-Makroskala führt im Nahfeld zu einem gleichmäßigen Temperaturanstieg während der Laserbearbeitung, gefolgt von einer langsamen Abkühlung. Lokale Maxima und die charakteristische Form der Temperaturhistorie fehlen vollständig. Die Rechenzeit beträgt lediglich 154 s pro Schicht.

Für die weiteren Simulationen wurde die Multiskala-(3+2)-Konfiguration verwendet. Die Kombination aus flächen- und linienequivalentem Laserenergieeintrag im Fernfeld sowie der Goldak-Laserquelle im Nahfeld gewährleistet eine hohe Vorhersagegüte bei gleichzeitig moderatem Rechenaufwand. Diese Bewertung stützt sich auf eine systematische Modellverfeinerung, in deren Rahmen sukzessiv zusätzliche Scanvektoren im Nahfeld berücksichtigt wurden. Die gewählte Konfiguration stellt daher einen methodisch begründeten Kompromiss zwischen Modellgenauigkeit und numerischer Effizienz dar.

6.2 Vorhersage der intrinsischen Wärmebehandlung homogener Bauteile

6.2.1 Referenzparameter

Zur Analyse des grundlegenden thermischen und metallurgischen Verhaltens während des additiven Fertigungsprozesses wurde die Prozessparameterkombination P030 bei einer BPT von 200 °C detailliert untersucht. Die Auswertung umfasste den zeitlichen Verlauf der Temperatur, der Phasenzusammensetzung und des P_{HJ} über 12 aufeinanderfolgende Schichten sowie den resultierenden Härtetiefenverlauf unterhalb der final gefertigten Schicht.

Der simulierte Temperaturverlauf zeigte den für den PBF-LB-Prozess charakteristischen zyklischen Verlauf (Abb. 6.3a). In jeder Schicht wurde ein lokales Temperaturmaximum durch den Laserenergieeintrag erreicht, dem ein Selbstabschreckvorgang unterhalb der M_S -Temperatur folgte. Dieser Selbstabschreckvorgang resultierte aus der Wärmeleitung in das darunterliegende Bauteilvolumen, die Bauplatte sowie in die Maschinenumgebung. Die Entwicklung des Anlassparameters P_{HJ} ist in Abb. 6.3b dargestellt. Während der Aufheizphase steigt der P_{HJ} -Wert durch die Anlassvorgänge an, wird im Austenit- und Schmelzbereich konstant gehalten und anschließend durch die einsetzende Martensitbildung neu initialisiert. Mit zunehmender Entfernung des betrachteten Punkts von der Oberfläche verringerte sich die maximale Temperatur infolge des fortschreitenden Schichtaufbaus. Die thermische Beanspruchung des betrachteten Voxels lässt sich in vier charakteristische Bereiche gliedern (I - IV). Zu Beginn traten wiederholte Aufschmelzvorgänge auf, bei denen die maximale Eindringtiefe des Schmelzbads etwa 0,16 mm betrug. Nach jedem Aufschmelzvorgang erfolgte eine rasche Abkühlung, die eine vollständige martensitische Umwandlung bewirkte (Bereich I). Mit zunehmender Schichtzahl unterschritten die Maximaltemperaturen schließlich die Solidustemperatur, lagen jedoch noch oberhalb der oberen Umwandlungstemperatur A_{C3} , sodass keine erneute Schmelze, aber eine vollständige Austenitisierung stattfand (Bereich II). In tieferliegenden Bereichen wurden

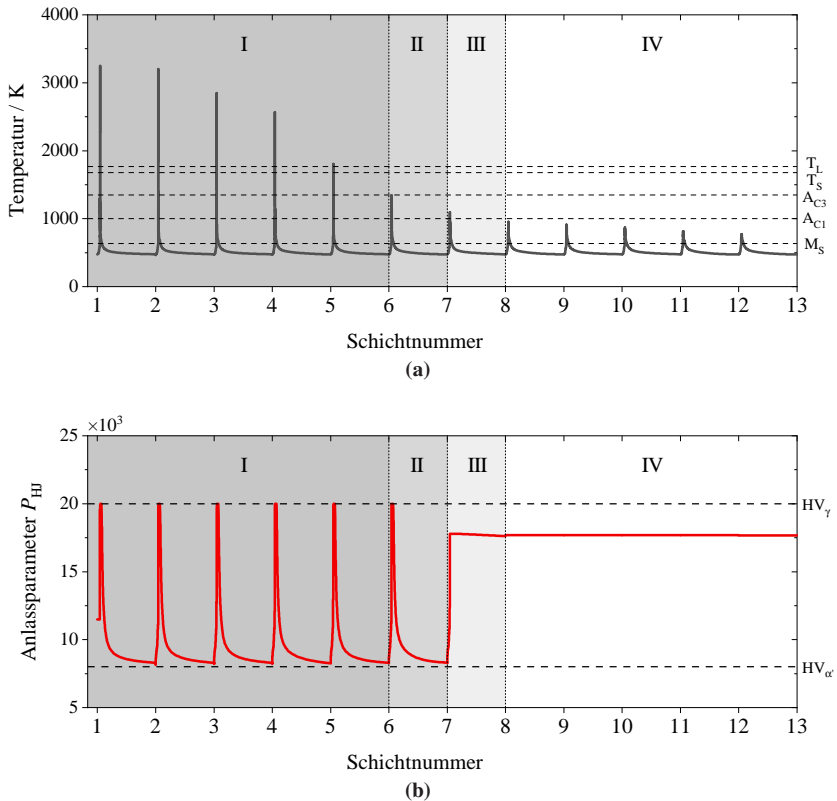
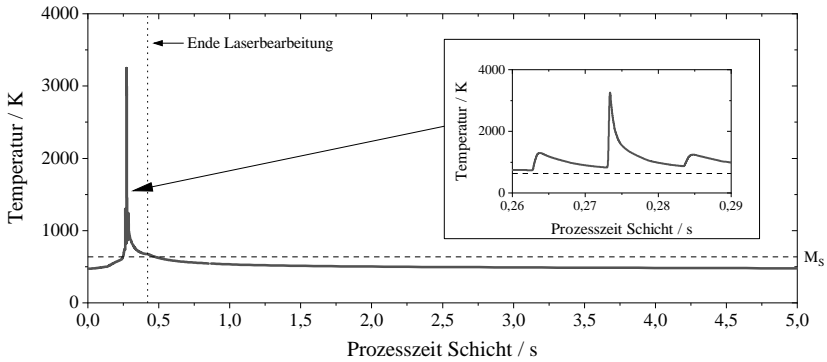


Abbildung 6.3: Zeitliche Entwicklung der Temperatur (a) und des Anlassparameters P_{HJ} (b) an einem zentralen Messpunkt über 12 simulierte Schichten für die Prozessparameterkombination P030 bei 200 °C BPT.

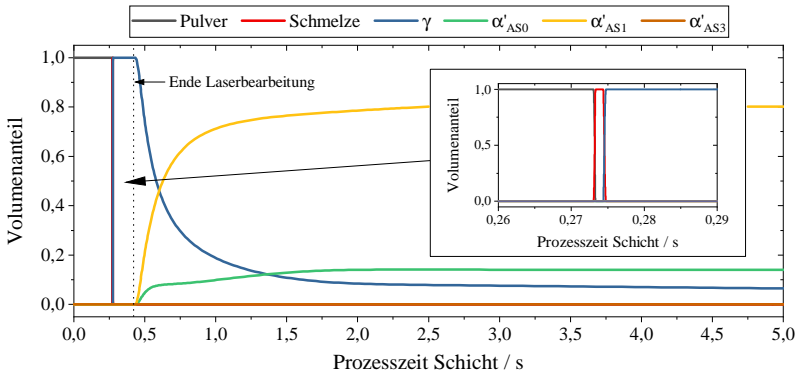
Maximaltemperaturen zwischen der unteren und oberen Umwandlungstemperatur ($A_{C1} \leq T_{\max} \leq A_{C3}$) erreicht, was zu einer partiellen Austenitisierung und gleichzeitigen Anlassvorgängen im verbliebenen Martensit führte (Bereich III). Bei weiterer Abkühlung blieben die Maximaltemperaturen schließlich unterhalb der Austenitstarttemperatur A_{C1} , sodass ausschließlich Anlassvorgänge in den zuvor martensitisch umgewandelten Zonen auftraten (Bereich IV).

Zeitlicher Verlauf des Bereichs I

Im Bereich I wurde der betrachtete Punkt zunächst vom thermischen Einfluss weiter entfernter Scanvektoren erfasst, was zu einem moderaten, zeitlich verzögerten Temperaturanstieg ohne ausgeprägte Maxima führte. Im Bereich I wurde der betrachtete Punkt zunächst vom thermischen Einfluss weiter entfernter Scanvektoren erfasst, was zu einem moderaten, zeitlich verzögerten Temperaturanstieg ohne ausgeprägte Maxima führte.



(a)



(b)

Abbildung 6.4: Zeitlicher Verlauf der (a) Temperatur und (b) Phasenanteile im Bereich I (Prozessparameterkombination P030, BPT = 200 °C).

Wie in Abb. 6.4 dargestellt, wurde erst beim Überfahren des Punkts durch den zentralen Scanvektor 0 die Solidustemperatur überschritten, wodurch ein vollständiges Aufschmelzen der Pulverschicht ($T_{\max} > T_L$) erfolgte. Nach dem Passieren des Lasers erstarrte das Schmelzbad zu Austenit, der bei fortschreitender Abkühlung unterhalb der M_S -Temperatur in Martensit umgewandelt wurde. Die benachbarten Scanvektoren -1 und $+1$ erzeugten hingegen nur moderate Temperaturerhöhungen unterhalb der Schmelztemperatur, sodass kein erneuter Aufschmelzvorgang stattfand. Der Wärmeeintrag aus den benachbarten Bahnen verzögerte den Abkühlverlauf, ohne zusätzliche lokale Temperaturmaxima zu verursachen. Nach Beendigung der Laserverarbeitung (nach etwa 0,42 s) nahm die Abkühlgeschwindigkeit deutlich zu, und etwa 0,5 s nach Prozessbeginn fiel die Temperatur unter M_S , womit die martensitische Transformation einsetzte. Nach rund 6 s betrug der Martensitanteil im betrachteten Voxel 94 %, wovon 14 % der Anlassstufe AS0 und 80 % der Anlassstufe AS1 (Bildung von ϵ -Karbiden) zugeordnet wurden. Diese Anteile entstanden infolge des Selbstanlassvorgangs während der raschen Abkühlung.

Zeitlicher Verlauf des Bereichs III

Abb. 6.5 zeigt den zeitlichen Verlauf der wichtigsten Kenngrößen (Temperatur, P_{HJ} und Phasenzusammensetzung) während der Laserbearbeitung des Bereichs III. Das Ausgangsgefüge des Auswertepunkts bestand zu Beginn der Laserbearbeitung aus Martensit der Anlassstufen AS0 und AS1 sowie einem geringen Restaustenitanteil, resultierend aus den vorangegangenen Schmelz- und Austenitierungszyklen (Bereiche I und II).

Zu Beginn der Laserbelichtung entfernter Scanvektoren wurde ein moderater Temperaturanstieg registriert, der Anlassprozesse im unangelernten Martensit (AS0) initiierte und die Bildung von ϵ -Karbiden bewirkte. Im Nahfeld erzeugten die unmittelbar benachbarten Scanvektoren -1 , 0 und $+1$ hohe Aufheizraten mit Maximaltemperaturen oberhalb von 800 K. Diese Werte überschritten lokal die statische Austenitstarttemperatur A_{C1} , jedoch blieb aufgrund der kurzen Haltezeit

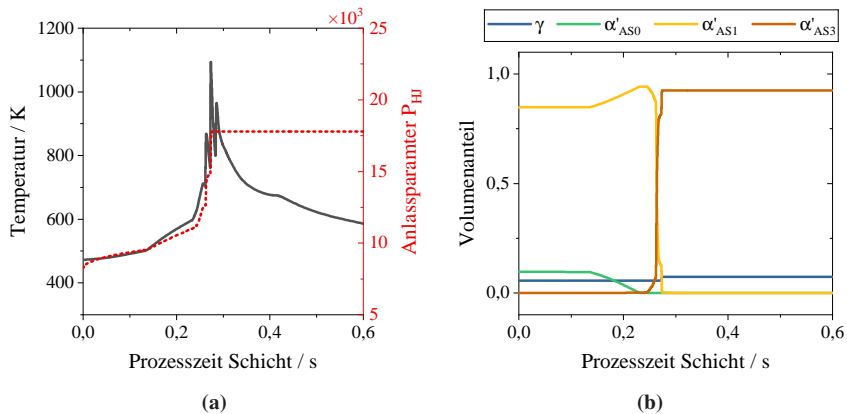


Abbildung 6.5: Zeitlicher Verlauf der Temperatur und des Anlassparameters P_{HJ} (a) sowie der Phasenzusammensetzung (b) im Bereich III für die Prozessparameterkombination P030 bei 200 °C BPT.

und der aufheizratenabhängigen Umwandlungskinetik die Austenitbildung auf maximal 1,5 % begrenzt. Die erreichten Temperaturen führten zum Fortschreiten des Anlassvorgangs bis zur Stufe AS3, die durch die Ausscheidung von Zementit charakterisiert ist. Diese mikrostrukturellen Veränderungen spiegelten sich in einem deutlichen Anstieg des P_{HJ} wider, der als Grundlage für die Berechnung der resultierenden Härte dient.

Härtetiefenverlauf

Der berechnete Härteverlauf entlang der Bauteiltiefe zeigte ein für den PBF-LB-Prozess von Vergütungsstählen typisches Profil, das sich durch die zuvor beschriebenen thermischen Bereiche erklären lässt (Abb. 6.6). Die oberflächennahe Zone (Bereiche I und II) wies ein vollständig martensitisches Gefüge auf und erreichte eine maximale Mikrohärtigkeit von 710 HV1. Die resultierende Randschichthärtetiefe betrug 0,16 mm, bestimmt über den in der DIN EN ISO 18265 [209] definierten Grenzwert der maximalen Randschichthärtigkeit (575 HV1). Darunter schloss sich ein

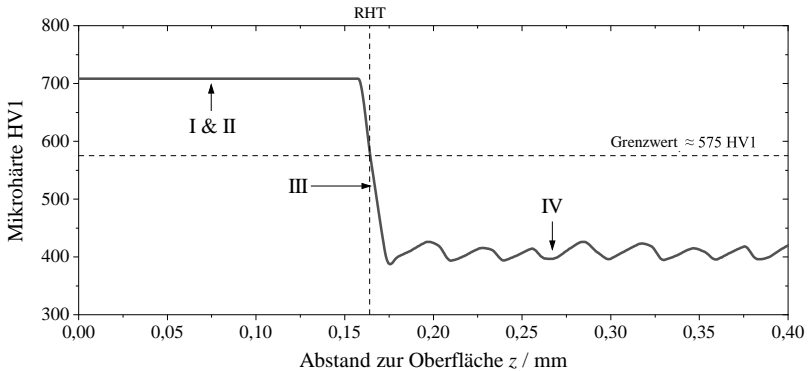


Abbildung 6.6: Berechneter Härteverlauf entlang der Bauteiltiefe für die Prozessparameterkombination P030 bei 200°C BPT.

Übergangsbereich (Bereich III) an, der durch partielle Austenitisierung und abnehmende Maximaltemperaturen gekennzeichnet war und einen kontinuierlichen Härteabfall zeigte. In der anschließenden Anlasszone (IV) trat ein periodischer Verlauf der Härte auf, verursacht durch die thermisch induzierten Anlassvorgänge im zuvor martensitisch gehärteten Gefüge. Die Härte korrelierte dabei mit dem lokal erreichten P_{HJ} . Dieser periodische Verlauf resultierte aus den Temperaturgradienten im Bauteilquerschnitt und korreliert mit der Schichthöhe. In unmittelbarer Nähe zur Austenitisierungsgrenze führten höhere Temperaturen zu stärkeren Anlasseffekten, während in tieferliegenden, kühleren Bereichen die Härte wieder anstiegen. Mit zunehmendem Abstand zur Oberfläche fielen die Temperaturen schließlich zu niedrig aus, um weitere signifikante Anlassprozesse auszulösen, wodurch die Härte im Bauteilinneren konstant blieb.

Mikrostruktur

Abb. 6.7 zeigt die simulierte Verteilung der Mikrohärte HV1 im zentralen Querschnitt des Bauteils. Die Aufbaurichtung ist dabei in Bildrichtung nach oben orientiert. Der in Abb. 6.6 dargestellte Härteverlauf wurde entlang des gelb markierten Pfades ausgehend von der Bauteiloberfläche entnommen.

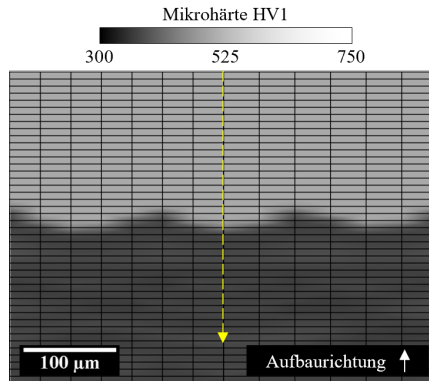


Abbildung 6.7: Simulierte Verteilung der Mikrohärtigkeit HV1 im zentralen Bauteilquerschnitt (Prozessparameterkombination P030, BPT = 200°C).

Die Visualisierung der Härteverteilung ermöglicht eine indirekte Beurteilung des thermischen Einflusses und des lokalen Anlasszustands. Eine direkte Abbildung mikrostruktureller Unterschiede ist dagegen aufgrund der in Abschnitt 4.3.3 beschriebenen Modellgleichungen zur Anlassstufenbildung nur eingeschränkt möglich. Diese Modelle basieren auf Längenänderungssignalen aus Dilatometerversuchen und erfassen primär die Bildung von ϵ -Karbiden sowie Zementitausscheidungen infolge der Kohlenstoffdiffusion aus der martensitischen Matrix; Prozesse wie Karbidvergrößerung wurden nicht berücksichtigt.

Die martensitisch gehärtete Randzone (Bereiche I und II) war im Querschnitt deutlich erkennbar. Feine Grauwertunterschiede wiesen auf lokale Härtegradienten in der Anlasszone (IV) hin. Die Geometrie der Härte- und Anlasszonen wurde durch den Schnittwinkel des Querschnitts zu den Scanvektoren sowie durch die 67°-Rotation des Schraffurmusters zwischen den Schichten bestimmt.

6.2.2 Einfluss der VED

Zur Analyse des Einflusses der VED wurden die drei charakteristischen Prozessparameterkombinationen aus dem experimentellen Abschnitt herangezogen

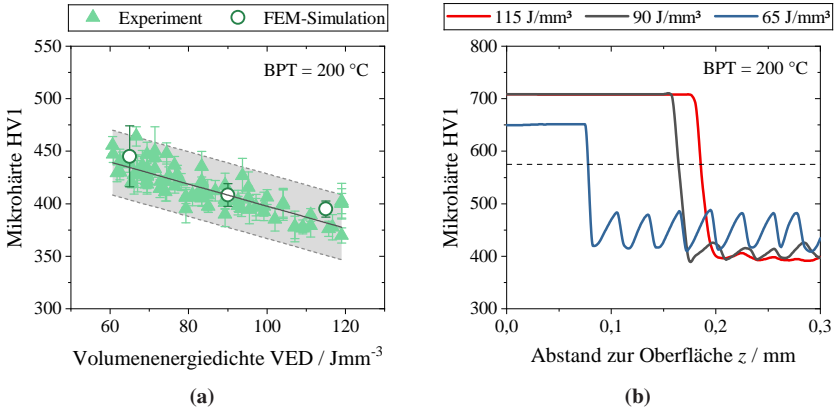


Abbildung 6.8: Vergleich der simulierten (a) mittleren Mikrohärtigkeit HV1 und (b) Härtetiefenverläufe für unterschiedliche VED (P076: 65 Jmm^{-3} , P030: 90 Jmm^{-3} , P006: 115 Jmm^{-3}) und einer BPT = $200\text{ }^{\circ}\text{C}$.

(Abschnitt 5.2.1). Untersucht wurden eine niedrige VED (P076, 65 Jmm^{-3}), eine mittlere VED (P030, 90 Jmm^{-3}) sowie eine hohe VED (P006, 115 Jmm^{-3}). Die geometrischen Randbedingungen ($l_{SV} = 5\text{ mm}$, Querschnittsfläche $A = 25\text{ mm}^2$), die BPT ($200\text{ }^{\circ}\text{C}$) sowie die Scanstrategie (drei Konturbahnen, bidirektionales Schraffurmuster mit 67° Rotation pro Schicht) wurden den experimentellen Untersuchungen angepasst, um eine direkte Vergleichbarkeit zu gewährleisten.

Die berechneten mittleren Härtewerte zeigten eine qualitativ konsistente Abhängigkeit von der VED im Vergleich zu den experimentell ermittelten Daten sowie zu den Literaturwerten (Abb. 6.8a). Mit zunehmender VED nahm die mittlere Mikrohärtigkeit HV1 nahezu linear ab. Quantitativ lagen die simulierten Härtewerte vollständig innerhalb des 95 %-Prognoseintervalls der experimentellen Messungen.

Wie in Abb. 6.8b dargestellt, zeigte sich der Härtetiefenverlauf deutlich abhängig von der VED. Für mittlere und hohe VED-Werte (90 Jmm^{-3} bis 115 Jmm^{-3}) wurde eine homogene martensitische Randschicht mit Mikrohärtewerten $> 700\text{ HV1}$ berechnet. Bei niedriger VED (65 Jmm^{-3} , P076) konnte eine geringere Randhärte

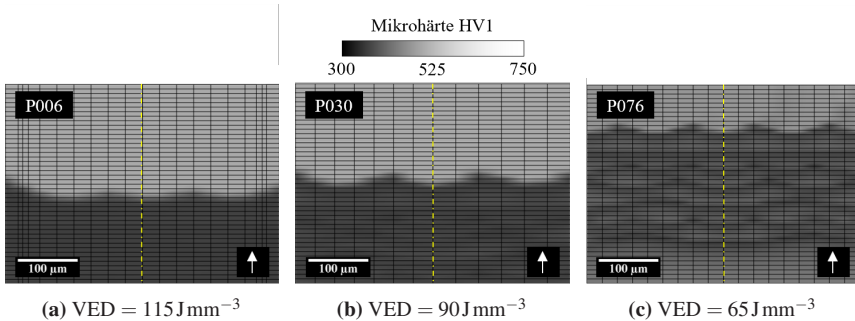


Abbildung 6.9: Simulierte Querschnitte der Mikrohärteverteilung HV1 im zentralen Bauteilbereich für unterschiedliche VED (Aufbauichtung in Bildrichtung oben).

von 650 HV1 bestimmt werden. Gegenüber der in Abschnitt 6.2.1 beschriebenen Prozessparameterkombination P030 (90 J mm^{-3}) wurde für die hohe VED (115 J mm^{-3}) eine erhöhte Randschichthärtetiefe von 0,19 mm vorhergesagt, während die Reduktion der VED auf 65 J mm^{-3} zu einer signifikanten Verringerung der Randschichthärtetiefe auf 0,08 mm führte.

Auch in der Anlasszone zeigte sich eine deutliche Abhängigkeit der Härteverteilung von der VED. Alle Tiefenprofile wiesen periodische Härteschwankungen mit einer Periodizität auf, die in etwa der Schichthöhe entsprach. Mit steigender VED nahm jedoch die Amplitude dieser Schwankungen ab, während die Homogenität der Härteverteilung zunahm. Gleichzeitig sank die mittlere Härte in der Anlasszone infolge höherer lokaler Temperaturen und längerer thermischer Einwirkzeiten.

Abb. 6.9 zeigt die simulierten Querschnitte der Mikrohärteverteilung HV1 für die drei Prozessparameterkombinationen im zentralen Bauteilbereich. Die Aufbauichtung ist dabei in Bildrichtung nach oben orientiert. Die Härtetiefenverläufe in Abb. 6.8b wurden entlang des markierten gelben Pfades ausgehend von der Bauteiloberfläche bestimmt. Die Abbildungen sind direkt mit den experimentellen Querschnitten aus Abschnitt 5.2.1 vergleichbar.

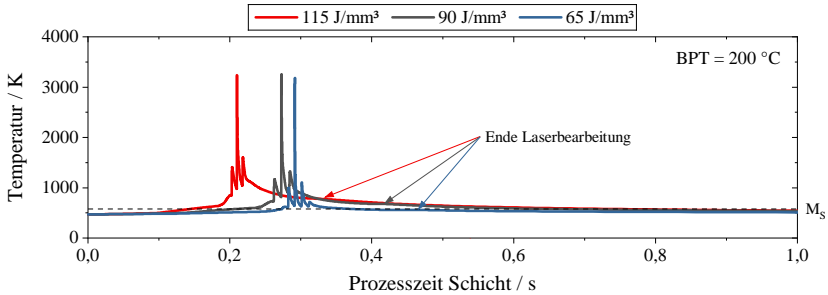


Abbildung 6.10: Zeitliche Entwicklung der Temperatur im Nahfeld der Laserbahn für unterschiedliche VED (P076: 65 J mm^{-3} , P030: 90 J mm^{-3} , P006: 115 J mm^{-3}) und einer konstanten BPT = 200°C .

Zwischen den untersuchten Prozessparametern zeigten sich deutliche Unterschiede hinsichtlich Randhärte, Randschichthärtetiefe und der Homogenität der Mikrohärtverteilung in der Anlasszone. Für die Prozessparameterkombinationen P006 und P030 mit mittlerer bis hoher VED ergaben sich ähnliche Härteprofile mit ausgeprägter martensitischer Randzone (Bereiche I und II) und weitgehend homogener Anlasszone (Bereich IV). Im Gegensatz dazu wies die Parameterkombination P076 mit niedriger VED eine signifikant reduzierte Randschichthärtetiefe sowie deutlich sichtbare Inhomogenitäten in der Anlasszone auf. Diese in der Simulation linsen- bis linienförmig ausgeprägten Strukturen standen in direktem Zusammenhang mit der gewählten Prozessstrategie. Durch den schichtweisen Aufbau mit einer 67° -Rotation der Schraffurbahnen pro Schicht wurden die ehemaligen Schmelzbadgrenzen in unterschiedlichen Winkeln geschnitten. Eine vergleichbare Abhängigkeit von der VED konnte auch in den experimentellen Querschnitten beobachtet werden (Abb. 5.3).

Wie in Abb. 6.10 dargestellt, variierte die Dauer der Laserbearbeitung in Abhängigkeit von der Prozessparameterkombination, insbesondere von der Scangeschwindigkeit und dem Schraffurabstand. Während die Maximaltemperaturen im Nahfeld der Laserbahn bei allen drei VED vergleichbar waren, zeigten sich deutliche Unterschiede in den minimalen Temperaturen zwischen benachbarten Scanvektoren. Bei niedriger VED (P076) sank die Minimaltemperatur auf Werte

knapp oberhalb der M_S -Temperatur, während sie bei hoher VED (P006) oberhalb von 1000 K verblieb. Mit abnehmender VED erhöhte sich zudem die Abkühlrate, was eine stärkere Anlasswirkung zur Folge hatte.

6.2.3 Einfluss der Bauplattentemperatur

Zur Untersuchung des Einflusses der BPT wurden drei Temperaturbedingungen berücksichtigt: unregelt, 100 °C sowie 200 °C (Abschnitt 5.2.2). Geometrie ($l_{SV} = 5 \text{ mm}$, $A = 25 \text{ mm}^2$) und Scanstrategie entsprachen den experimentellen Randbedingungen. Als Prozessparameter wurde die Referenzparameterkombination P030 mit einer VED von 90 J mm^{-3} verwendet.

Die berechneten mittleren Mikrohärtewerte zeigten für alle untersuchten BPT eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Daten (Abb. 6.11). Die Simulation reproduzierte die experimentell beobachtete Abnahme der Mikrohärtigkeit HV1 mit steigender BPT. Zwischen der unregulierten BPT und der geregelten BPT von 100 °C ergab sich nur eine geringe Differenz, die auch experimentell festgestellt wurde. Darüber hinaus konnte die bei niedriger BPT

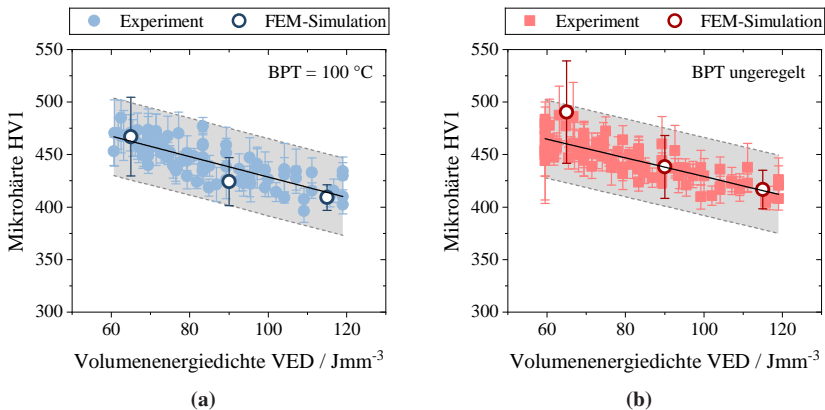


Abbildung 6.11: Vergleich der simulierten und experimentellen mittleren Mikrohärtigkeit HV1 für unterschiedliche BPT (Referenzparameter P030, 90 J mm^{-3}).

experimentell beobachtete erhöhte Streuung der Mikrohärtewerte in der Simulation nachvollzogen werden. Quantitativ lag die maximale Abweichung der simulierten Mikrohärtete von experimentellen Mittelwert bei allen untersuchten Bedingungen unter 20 HV1. Alle berechneten Werte befanden sich innerhalb des 95 %-Prognoseintervalls der experimentellen Ergebnisse.

Wie in Abb. 6.12a dargestellt, zeigte sich der Härtetiefenverlauf empfindlich gegenüber der Variation der BPT. Im direkten Vergleich der drei Temperaturbedingungen traten deutliche Unterschiede in der maximalen Randhärtete und der Randschichthärtetiefe auf. Mit abnehmender BPT stieg die maximale Randhärtete von etwa 710 HV1 bei 200 °C auf 730 HV1 bei unbeheizter Bauplatte. Gleichzeitig verringerte sich die Randschichthärtetiefe von 0,16 mm (BPT = 200 °C) auf 0,15 mm bei unregelter BPT.

In der Anlasszone (Bereich IV) wurden ebenfalls Unterschiede in der Härteverteilung festgestellt. Die Periodizität der Anlasseffekte blieb von der Variation der BPT unbeeinflusst, jedoch änderte sich die Differenz zwischen minimaler und

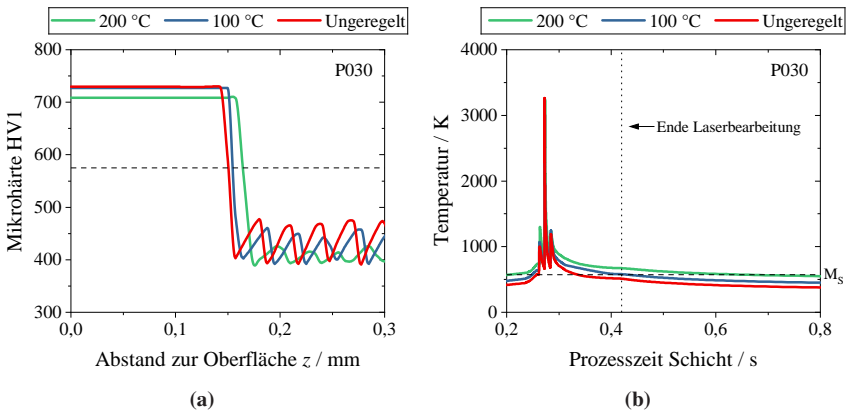


Abbildung 6.12: (a) Berechnete Härtetiefenverläufe und (b) Temperatur-Zeit-Verläufe für verschiedene BPT (P030, 90 J mm^{-3}).

maximaler Härte. Für die Referenzbedingung mit 200 °C wurde eine Härte­diffe­renz von etwa 30 HV1 berechnet, während sie bei 100 °C auf etwa 60 HV1 und bei unbeheizter Bauplatte auf etwa 70 HV1 anstieg.

Abb. 6.12b zeigt den zeitlichen Verlauf der Temperatur im zentralen Auswertepunkt während der Belichtung der ersten Schicht. Im Nahfeld der Laserbahn traten nur geringe Unterschiede im Temperaturverlauf zwischen den untersuchten BPT auf. Im Fernfeld zeigten sich dagegen deutliche Abweichungen infolge der unterschiedlichen thermischen Randbedingungen. Für die Referenzbedingung mit einer BPT von 200 °C wurde die M_S -Temperatur nach etwa 0,7 s unterschritten. Bei einer BPT von 100 °C erfolgte diese Unterschreitung bereits nach 0,45 s, was einer Abkühlrate von 1680 K s^{-1} entsprach. Für die unbeheizte Bauplatte wurde eine deutlich höhere Abkühlrate von 3190 K s^{-1} berechnet, wodurch die M_S -Temperatur bereits während der Laserbelichtung unterschritten wurde. Diese höheren Abkühlraten führten zu einer ausgeprägteren martensitischen Umwandlung und einer erhöhten Randhärte, gingen jedoch mit einer geringeren Homogenität der Anlasszone einher.

6.2.4 Einfluss der Scanvektorenlänge und Querschnittsfläche

Der Einfluss der Scanvektorenlänge und der Querschnittsfläche wurde in zwei Studien untersucht. In der ersten Studie wurde die Querschnittsfläche proportional zur Scanvektorenlänge variiert ($A \sim l_{SV}^2$), während in der zweiten Studie die Querschnittsfläche konstant gehalten und die Scanvektorenlänge durch eine Anpassung der Scanstrategie verändert wurde ($A = 144 \text{ mm}^2$). Als Prozessparameter diente die Referenzparameterkombination P030 mit einer VED von 90 J mm^{-3} , die BPT wurde auf 200 °C festgelegt.

Für die proportionale Variation ($A \sim l_{SV}^2$) zeigte die Simulation eine identische Abhängigkeit der mittleren Mikro­härte HV1 von der Querschnittsfläche wie im

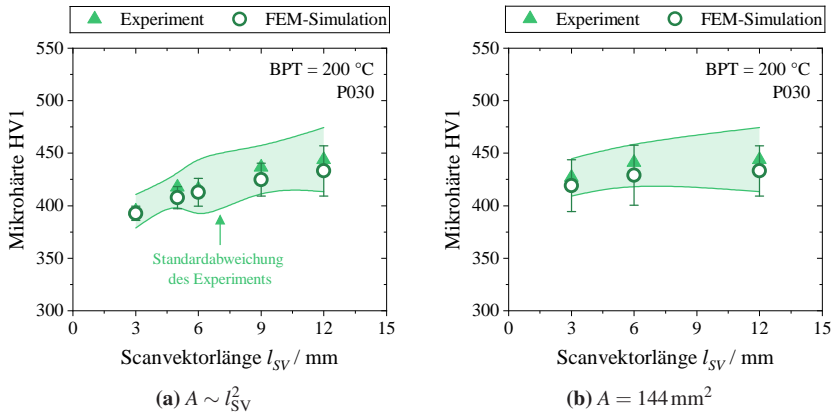


Abbildung 6.13: Vergleich der simulierten und experimentellen mittleren Mikrohärte HV1 bei (a) proportionaler Variation von Querschnittsfläche und Scanvektorlänge ($A \sim l_{SV}^2$) sowie (b) konstanter Querschnittsfläche ($A = 144 \text{ mm}^2$).

Experiment (Abb. 6.13a). Mit zunehmender Querschnittsfläche beziehungsweise Scanvektorlänge nahm die gemittelte Mikrohärte zu. Die maximale Abweichung zwischen simulierten und experimentellen Härtewerten betrug weniger als 10 HV1, womit alle Werte innerhalb der experimentellen Standardabweichung lagen. Bei konstanter Querschnittsfläche wurde der Einfluss der entkoppelten Scanvektorlänge ebenfalls konsistent mit den experimentellen Ergebnissen abgebildet (Abb. 6.13b). Die Unterschiede in der mittleren Härte blieben auch hier unter 10 HV1 und somit innerhalb der experimentellen Streuung.

Abb. 6.14 zeigt die berechneten Härtetiefenverläufe für beide Untersuchungsreihen. Bei der proportionalen Variation ($A \sim l_{SV}^2$) wurde ein deutlicher Einfluss auf alle vier Bereiche des Härtetiefenprofils festgestellt (Abb. 6.14a). In den Bereichen I und II nahm die maximale Randhärte mit steigender Scanvektorlänge und größerer Querschnittsfläche von 710 HV1 auf 575 HV1 ab (Visualisierung der Bereiche in Abb. 6.6). Zudem verringerte sich die Randschichthärtetiefe (Bereich III) von 0,20 mm auf 0,15 mm. In der Anlasszone (Bereich IV) traten geringere Härtegradienten bei kürzeren Scanvektoren auf, wobei der Effekt primär in einer

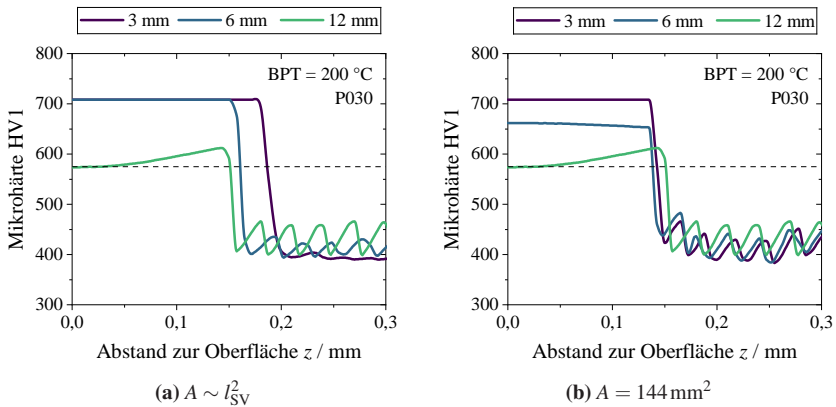


Abbildung 6.14: Berechnete Härteprofilverläufe bei (a) proportionaler Variation von Querschnittsfläche und Scanvektorlänge ($A \sim l_{SV}^2$) sowie (b) konstanter Querschnittsfläche ($A = 144 \text{ mm}^2$).

Reduktion der lokalen Maximalhärte bestand. Ein Einfluss auf die Periodizität der Anlassstruktur wurde nicht beobachtet.

Auch für die zweite Studie mit konstanter Querschnittsfläche ($A = 144 \text{ mm}^2$) zeigte sich ein Einfluss der Scanvektorlänge auf die Härteverteilung (Abb. 6.14b). Mit zunehmender Scanvektorlänge von 3 mm auf 12 mm wurde in den Bereichen II und III eine Abnahme der Randhärte von 710 HV1 auf 575 HV1 berechnet. Gleichzeitig zeigte sich eine leichte Zunahme der Randschichthärte. In der Anlasszone verringerte sich der Härtegradient für kürzere Scanvektoren. Der Einfluss blieb jedoch insgesamt schwächer ausgeprägt als im Fall der proportionalen Variation von Scanvektorlänge und Querschnittsfläche.

Die berechneten Temperatur-Zeit-Verläufe in Abb. 6.15 verdeutlichten die thermischen Unterschiede zwischen beiden Ansätzen. Eine gleichzeitige Vergrößerung der Scanvektorlänge und der Querschnittsfläche ($A \sim l_{SV}^2$) führte zu einem signifikanten Abfall der lokalen Minimaltemperatur zwischen zwei aufeinanderfolgenden Scanvektoren im Nahfeldbereich. Während bei einer Scanvektorlänge von

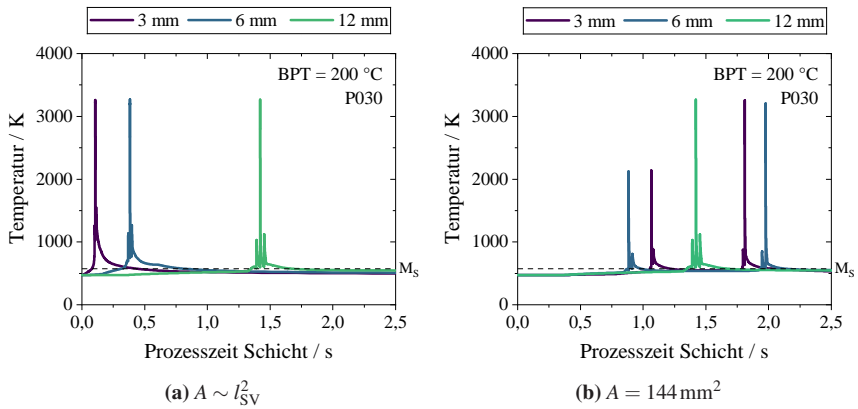


Abbildung 6.15: Zeitliche Temperaturverläufe für (a) proportionale Variation von Querschnittsfläche und Scanvektorlänge ($A \sim l_{SV}^2$) sowie (b) konstante Querschnittsfläche ($A = 144 \text{ mm}^2$).

3 mm und einer Querschnittsfläche von 9 mm^2 noch Minimaltemperaturen oberhalb von 1000 K auftraten, sanken diese bei 12 mm und 144 mm^2 auf Werte knapp unterhalb der M_S -Temperatur. Bei konstanter Querschnittsfläche ($A = 144 \text{ mm}^2$) zeigte die Variation der Scanvektorlänge hingegen keinen signifikanten Einfluss auf die Minimaltemperatur.

6.2.5 Einfluss der Mehrfachbelichtung

Zur Untersuchung des Effekts der MFB wurde die Referenzparameterkombination P030 bei einer BPT von $200 \text{ }^\circ\text{C}$ verwendet. Jede Schicht wurde dabei zweifach belichtet. Die Geometrievariation erfolgte proportional zur Scanvektorlänge gemäß $A \sim l_{SV}^2$.

Abb. 6.16a zeigt den Vergleich zwischen den experimentell ermittelten und den mittels FEM-Simulation berechneten mittleren Mikrohärtewerten für verschiedene Scanvektorlängen beziehungsweise Querschnittsflächen. Die Simulation reproduzierte die experimentell beobachteten Tendenzen zuverlässig. Mit abnehmender

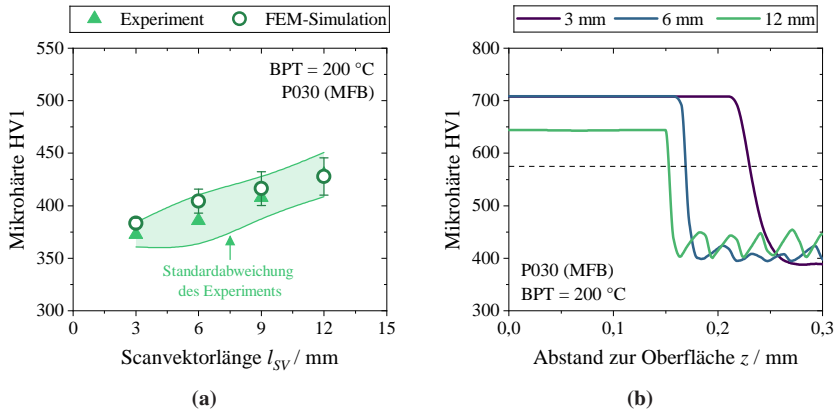


Abbildung 6.16: Vergleich der simulierten und experimentellen Mikrohärtigkeit (a) sowie berechnete Härtetiefenverläufe (b) für den Referenzparameter P030 bei zweifacher Belichtung jeder Schicht und BPT = 200 °C.

Scanvektorlänge oder Querschnittsfläche verringerte sich die mittlere Härte in der Bauteilmitte. Zudem wurde eine ausgeprägtere Anlasswirkung beobachtet, die sich in niedrigeren Mikrohärtewerten im Vergleich zur Einfachbelichtung äußerte. Die Abweichung zwischen simulierten und experimentellen Härtewerten betrug maximal 20 HV1, womit alle Werte innerhalb der experimentellen Standardabweichung lagen.

Der in Abb. 6.16b dargestellte Härtetiefenverlauf zeigt, dass die Variation der Scanvektorlänge beziehungsweise der Querschnittsfläche alle vier charakteristischen Bereiche des Tiefenprofils beeinflusste. In den Bereichen I und II führte eine größere Scanvektorlänge oder Querschnittsfläche zu einer erhöhten Randhärte. Die Tiefe der martensitisch gehärteten Randzone (Bereich III) nahm dagegen mit abnehmender Scanvektorlänge oder Querschnittsfläche zu. Für eine Geometrie mit einer Scanvektorlänge von 3 mm und einer Querschnittsfläche von 9 mm² erhöhte sich die Randhärte von 0,20 mm auf 0,24 mm. In der Anlasszone (Bereich IV) führte die MFB zu einer Reduktion der lokalen Maximalhärte, während die Minimalhärte weitgehend unverändert blieb. Diese Ergebnisse deuten auf eine erhöhte

thermische Belastung der Randschicht hin, die durch die zusätzliche Belichtung eine intensivere, lokal wiederholte Erwärmung erfährt.

6.3 Vorhersage gradierter Bauteilzustände

Analog zur experimentellen Untersuchung in Abschnitt 5.3 wurde ein rechteckiger Querschnitt mit einer Länge von 36 mm und einer Breite von 12 mm simuliert. Die Geometrie wurde in drei gleich große Bereiche unterteilt, in denen jeweils unterschiedliche Prozessparameterkombinationen angewendet wurden: P006 im linken, P030 im mittleren und P075 im rechten Bereich. Die BPT betrug 200 °C.

Die experimentellen Untersuchungen zeigten, dass insbesondere bei niedriger VED ein Einfluss benachbarter Bereiche mit höherer VED auf die resultierende Härte auftrat. Dieser Effekt wurde im Rahmen der FEM-Simulation überprüft. Abb. 6.17 zeigt den Vergleich der experimentell gemessenen Mikrohärtigkeit HV1 über die Bauteillänge mit den simulierten Härtewerten im Zentrum der jeweiligen Parameterbereiche. Die simulierten Mikrohärtewerte lagen für alle untersuchten Parameterkombinationen innerhalb der experimentell bestimmten Standardabweichung. Sowohl der geringe Einfluss der MFB auf die Härte der Parameterkombinationen P006 und P030 als auch der deutliche Härteanstieg im Bereich mit niedriger VED (P075) in unmittelbarer Nachbarschaft zu höherenergetisch belichteten Zonen wurden durch die Simulation zuverlässig reproduziert. Damit konnte gezeigt werden, dass das verwendete Simulationsmodell auch für komplexe, gradiente Belichtungsstrategien eine konsistente Vorhersage der lokalen Härteverteilung ermöglicht.

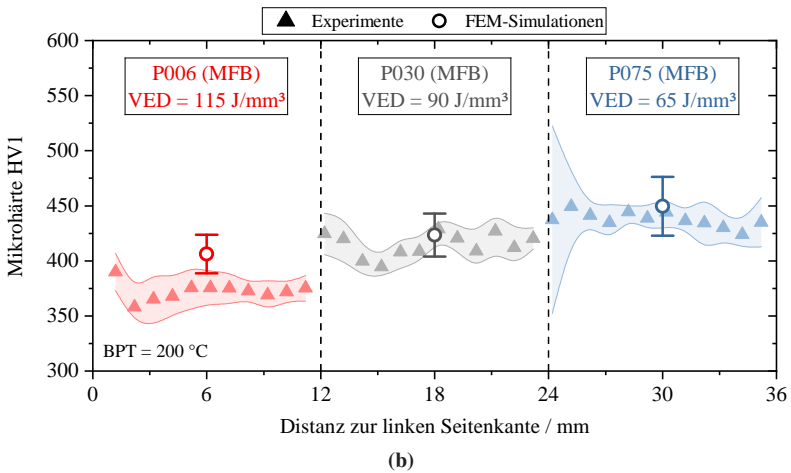
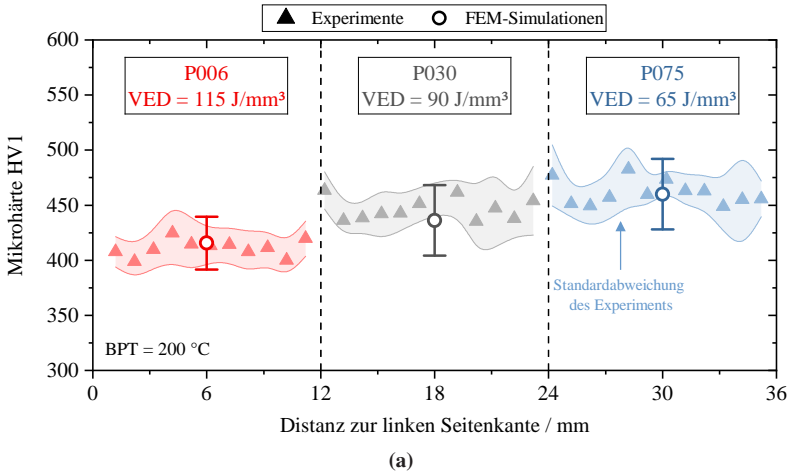


Abbildung 6.17: Vergleich der experimentell gemessenen und simulierten Mikrohärtigkeit HV1 über die Bauteillänge für gradierte Bauteilzustände bei (a) einfacher Belichtung und (b) MFB.

6.4 Diskussion

6.4.1 Einordnung in den Stand der Technik

Die numerische Simulation des PBF-LB-Prozesses hat sich in den letzten Jahren als zentrales Werkzeug zur Prozessanalyse und -optimierung etabliert. Während strömungsbasierte CFD-Modelle eine detaillierte Beschreibung des Schmelzbadverhaltens ermöglichen [202, 210, 211], sind sie aufgrund des hohen Rechenaufwands auf sehr kleine Domänen beschränkt. Makroskalige FEM-Modelle bieten dagegen die Möglichkeit, den gesamten Schichtaufbau abzubilden und Temperaturhistorien über viele Schichten hinweg zu berechnen [138, 143, 146, 147]. Sie erfassen die dominanten thermischen Effekte hinreichend genau, erfordern aber geeignete Vereinfachungen des Laserenergieeintrags, um den Rechenaufwand zu begrenzen.

Für Stähle mit komplexem Umwandlungs- und Anlassverhalten ist die FEM-basierte Prozessmodellierung bislang nur begrenzt untersucht. Die meisten Studien konzentrieren sich auf austenitische Stähle oder Aluminiumlegierungen. FEM-Modelle für Vergütungsstähle beruhen bisher überwiegend auf Anwendungen der klassischen Wärmebehandlung [153, 155, 159], wurden jedoch selten auf den PBF-LB-Prozess übertragen. Das hier entwickelte Multiskalenmodell schließt diese Lücke, indem es temperatur- und phasenabhängige Materialeigenschaften mit einer lokal kalibrierten Goldak-Laserquelle koppelt. Damit wird ein durchgängiger, physikalisch fundierter Ansatz zur Vorhersage der intrinsischen Wärmebehandlung in martensitischen Stählen im additiven Prozess bereitgestellt.

6.4.2 Validierung und Bewertung des Modells

Die Parametrisierung der Goldak-Laserquelle ermöglichte eine realitätsnahe Abbildung des Energieeintrags. Die Kalibrierung anhand der experimentell bestimmten HZ zeigte eine sehr gute Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Schmelzbadabmessungen über den gesamten Bereich der untersuchten LED

(Abb. 6.1). Die Verwendung einer logistischen Wachstumsfunktion zur Beschreibung von Tiefenwirkung c und Absorptionskoeffizient η erlaubte eine konsistente Modellierung des nichtlinearen Zusammenhangs zwischen Energieeintrag und thermischem Einflussbereich. Die resultierenden Parameterbereiche stimmen mit Literaturwerten für vergleichbare Stahllegierungen überein [206–208].

Die Analyse der unterschiedlichen Multiskalenkonfigurationen bestätigte, dass die Kombination aus FEQ- und LEQ-basierter Modellierung im Fernfeld sowie einer Goldak-Modellierung im Nahfeld (Multiskala-(3+2)) den besten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenzeit bietet. Die Temperaturverläufe wichen um weniger als 100 K von der hochaufgelösten Multiskala-(7+2)-Variante ab, während der Rechenaufwand um etwa 70 % reduziert werden konnte (Tabelle 6.2). Die wesentlichen Charakteristika des PBF-LB-Prozesses, wie periodischen Maxima, Selbstabschreckung und lokale Überhitzung, wurden korrekt wiedergegeben. Damit steht ein konsistenter, validierter Modellrahmen zur Verfügung, der großvolumige Simulationen bei vertretbarem Rechenaufwand erlaubt.

6.4.3 Zeitlich-thermische Prozesshistorie

Die Simulation der zeitlich und räumlich aufgelösten Temperaturentwicklung über mehrere Schichten zeigte den charakteristischen zyklischen Verlauf des PBF-LB-Prozesses (Abb. 6.3). Vier thermische Zonen konnten eindeutig identifiziert werden: (i) vollständiges Aufschmelzen, (ii) vollständige Austenitisierung, (iii) partielle Austenitisierung mit Anlassstemperierung und (iv) reine Anlassvorgänge. Diese Abfolge deckt sich mit den in der Literatur beschriebenen Mechanismen [11, 108] und mit den experimentell beobachteten Mikrostrukturbereichen.

Die durch den Laser induzierten Temperaturzyklen führten zu einer wiederholten Martensitbildung und Anlassvorgängen. Der zeitliche Verlauf des P_{HJ} zeigte nach der finalen Martensitbildung eine kontinuierliche Zunahme, die den kumulativen Effekt der mehrfachen Wiedererwärmungen widerspiegelt. Der simulierte Zusammenhang zwischen P_{HJ} und Mikrohärtete erlaubt eine quantitative Beschreibung

der Härteentwicklung infolge der intrinsischen Wärmebehandlung. Die Simulation verdeutlicht, dass selbst geringe Temperaturunterschiede von 50 K bis 100 K über mehrere Zyklen hinweg messbare Härteänderungen bewirken, was die hohe Empfindlichkeit des Anlassverhaltens erklärt.

Der berechnete Härteverlauf entlang der Bauteiltiefe (Abb. 6.6) stimmte quantitativ mit den experimentellen Profilen überein. Sowohl die absolute Randhärte ($\approx 710 \text{ HV1}$) als auch die Randschichthärtetiefe der obersten Schicht (0,15 mm bis 0,20 mm) wurden korrekt vorhergesagt. Die charakteristische periodische Härteschwankung der Anlasszone wurde ebenfalls reproduziert und bestätigt die Fähigkeit des Modells, die thermische Historie präzise abzubilden.

6.4.4 Einfluss der Prozessparameter

Die Simulationsergebnisse ermöglichen eine detailliertere Diskussion der im experimentellen Teil identifizierten dominanten Einflussgrößen auf Härte und Mikrostruktur:

- **VED:** Mit steigender VED nahm die Mikrohärte linear ab, was auf eine verstärkte Anlasswirkung infolge der erhöhten thermischen Belastung zurückzuführen ist (Abb. 6.8). Die in den Simulationen berechneten Härtewerte zeigten eine gute Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Daten und lagen deutlich innerhalb des 95-Prozent-Prognoseintervalls. Zudem verdeutlichte die Modellierung die mit höheren VED-Werten einhergehende stärkere Tiefenwirkung. Die daraus resultierenden geringeren Temperaturgradienten führen zu einem räumlich homogeneren Anlasszustand.
- **BPT:** Die Simulation reproduzierte den experimentellen Trend einer abnehmenden Härte mit zunehmender BPT (Abb. 6.11). Höhere BPT-Werte führten zu geringeren Temperaturgradienten und homogeneren Anlasszonen, was die reduzierte Härtestreuung erklärt. Der Einfluss blieb jedoch sekundär gegenüber der Variation der VED.

- **Geometrieeffekte (Scanvektorlänge, Querschnitt):** Die Härte nahm mit zunehmender Scanvektorlänge moderat zu (Abb. 6.13). Ursache war die verlängerte thermische Einwirkzeit und die ungleichmäßigere Wärmeverteilung innerhalb größerer Querschnitte. Der Effekt war nichtlinear und bei niedrigen Energiedichten stärker ausgeprägt.
- **MFB:** Bei zweifacher Belichtung jeder Schicht verringerte sich die Mikrohärtigkeit bei hohen VED-Werten um bis zu 40 HV1, während bei niedrigen VED kaum Unterschiede auftraten (Abb. 6.16). Der zusätzliche Energieeintrag führte zu einer stärkeren Karbidausscheidung und einer lokal erhöhten Anlasswirkung. Die Simulation erfasste diese Überlagerungseffekte quantitativ korrekt.

Für alle untersuchten Einflussgrößen lagen die Abweichungen zwischen Simulation und Experiment unter 20 HV1 und somit innerhalb der Messunsicherheit. Dies belegt die Robustheit und Übertragbarkeit des Modells über verschiedene Prozessbedingungen hinweg.

6.4.5 Simulation gradierter Bauteilzustände

Die Simulation gradierter Bauteile mit lokal variierenden Prozessparametern bestätigte die Fähigkeit des Modells, komplexe thermische Wechselwirkungen korrekt abzubilden (Abb. 6.17). Die berechneten Härteverläufe entlang der Bauteillänge entsprachen den experimentellen Gradienten sowohl im Absolutwert als auch in der relativen Differenz zwischen den Zonen. Die stärkste Härtereduktion wurde, konsistent mit den Experimenten, in Bereichen niedriger VED und zusätzlicher MFB beobachtet. Damit wird deutlich, dass der gewählte Multiskalenansatz in der Lage ist, reale Prozessübergänge abzubilden und als Werkzeug zur virtuellen Prozessoptimierung eingesetzt werden kann.

7 Ergebnisse und Diskussion der Deep-Learning-basierten Prozessmodellierung

7.1 Optimierung des Deep-Learning Modells

Zur Untersuchung des Einflusses der Modellgröße auf die Vorhersagegüte wurden drei LSTM-Architekturen unterschiedlicher Komplexität entwickelt. Modell A umfasst 1937 trainierbare Parameter und besteht aus einem einzelnen LSTM-Layer mit 16 parallelen Zellen. Modell B besitzt 14 369 Parameter, die auf zwei Layer mit jeweils 32 Zellen verteilt sind, während Modell C mit 119 873 Parametern aus vier Layern mit jeweils 64 Zellen aufgebaut ist. Alle drei Modelle wurden mit demselben in Abschnitt 4.4.2 beschriebenen Trainings- und Validierungsdatensatz trainiert und validiert. Zur gezielten Überprüfung der Generalisierungsfähigkeit wurden zusätzlich ausgewählte Prozessparameterkombinationen, BPT, Schraffurwinkel sowie Geometrien vollständig aus dem Trainings- und Validierungsdatensatz ausgeschlossen und ausschließlich für die Modellbewertung herangezogen. Das Ziel der Optimierung war es mit einer möglichst einfachen Architektur und kleinem Datensatz Deep Learning Modelle mit hoher Modellgüte und Generalisierbarkeit zu trainieren und validieren.

7.1.1 Bewertungskriterien und Fehlermaße

Für jede Architektur wurde ein Ensemble aus fünf unabhängig trainierten Netzen gebildet. Aus den Ensemblewerten wurden Mittelwerte und Konfidenzintervalle bestimmt, um die Vorhersageunsicherheit statistisch abzusichern. Die Bewertung der Modellgüte erfolgte auf Basis des RMSE-Werts sowie spezifischer Fehlermaße, die prozessrelevante Merkmale der simulierten Temperatur-Zeit-Verläufe erfassen: die Abweichung der maximalen Temperatur einer Schicht ΔT_{Max} , die Temperaturdifferenz zum letzten Zeitschritt ΔT_{End} sowie die Abweichung der resultierenden Härte ΔHV . Alle Fehlermaße werden für den jeweiligen Messpunkt berechnet und anschließend für den gesamten Datensatz ausgewertet. Hierbei wurden die Fehlermaße für die Trainings-, Validierungs- und Testdatensätze getrennt berechnet.

7.1.2 Einfluss der Modellgröße

Die Ergebnisse in Tabelle 7.1 zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der LSTM-Vorhersagen mit den FEM-Simulationen. Die Datensätze für das Training, die Validierung und den Test weisen keine signifikanten Unterschiede auf. Dies deutet auf eine gute Generalisierung und geringe Überanpassung hin. Auch der direkte Vergleich der Vorhersage der Maximaltemperatur T_{Max} sowie der Mikrohärtigkeit HV1 der Deep Learning Modelle mit den Werten der FEM-Simulation zeigt nur geringe Abweichungen von der Gleichheitslinie (Abb. 7.1).

Modell A erreicht im Testdatensatz einen mittleren RMSE von $(4,3 \pm 1,9)$ K. Die Abweichung der Maximaltemperatur beträgt (55 ± 108) K, die Endtemperatur weicht um $(4,2 \pm 3,2)$ K ab, und die resultierende Mikrohärtigkeit um 10 ± 28 . Diese Werte belegen bereits eine hohe Konsistenz zwischen LSTM-Vorhersage und physikalischer Simulation. Mit Modell B verbessert sich die Vorhersagequalität deutlich: Der RMSE reduziert sich um rund 40 % auf $(2,6 \pm 1,2)$ K, die Abweichung der Maximaltemperatur halbiert sich nahezu auf (25 ± 48) K und die

Tabelle 7.1: Fehlermaße der drei LSTM-Modelle für Trainings-, Validierungs- und Testdatensatz.

Modell	Datensatz	RMSE / K	ΔT_{Max} / K	ΔT_{End} / K	ΔHV / HV1
A	Train	$4,4 \pm 2,0$	55 ± 105	$4,2 \pm 3,2$	10 ± 28
	Val	$4,4 \pm 2,0$	54 ± 102	$4,1 \pm 3,2$	11 ± 28
	Test	$4,3 \pm 1,9$	55 ± 108	$4,2 \pm 3,2$	10 ± 28
B	Train	$2,6 \pm 1,2$	25 ± 46	$2,3 \pm 2,1$	5 ± 20
	Val	$2,6 \pm 1,2$	25 ± 46	$2,2 \pm 2,1$	5 ± 19
	Test	$2,6 \pm 1,2$	25 ± 48	$2,3 \pm 2,1$	5 ± 16
C	Train	$4,8 \pm 2,4$	25 ± 45	$6,8 \pm 4,3$	6 ± 19
	Val	$4,7 \pm 2,4$	25 ± 44	$6,6 \pm 4,3$	6 ± 19
	Test	$4,8 \pm 2,4$	24 ± 44	$6,8 \pm 4,3$	6 ± 19

Endtemperaturdifferenz sinkt um etwa 45 %. Die Härteabweichung ΔHV verringert sich auf 5 ± 16 . Dies entspricht einer Verbesserung um etwa 50 % gegenüber Modell A. Auch im direkten Vergleich der Absolutwerte für T_{Max} und Mikrohärte ist ein deutlicher Rückgang der Streuung abseits der Gleichheitslinie zu erkennen. Eine weitere Vergrößerung des Netzwerks (Modell C) führt hingegen nicht zu einer zusätzlichen Leistungssteigerung. Der RMSE steigt auf $(4,8 \pm 2,4)$ K an und liegt damit um etwa 85 % über dem Wert von Modell B. Auch die Abweichung der Endtemperatur verschlechtert sich auf $(6,8 \pm 4,3)$ K, während ΔT_{Max} und ΔHV auf dem Niveau des mittleren Modells verbleiben. Diese Ergebnisse deuten auf eine Überparametrisierung und instabilere Trainingskonvergenz bei Modell C hin.

Insgesamt zeigte sich, dass das zweilagige Modell B die beste Balance zwischen Modellkomplexität, Fähigkeit zur Generalisierung und numerischer Stabilität aufweist. Es erreicht die geringsten Fehlermaße bei gleichzeitig moderatem Rechenaufwand und wird daher als Referenzarchitektur für die weiteren Untersuchungen verwendet.

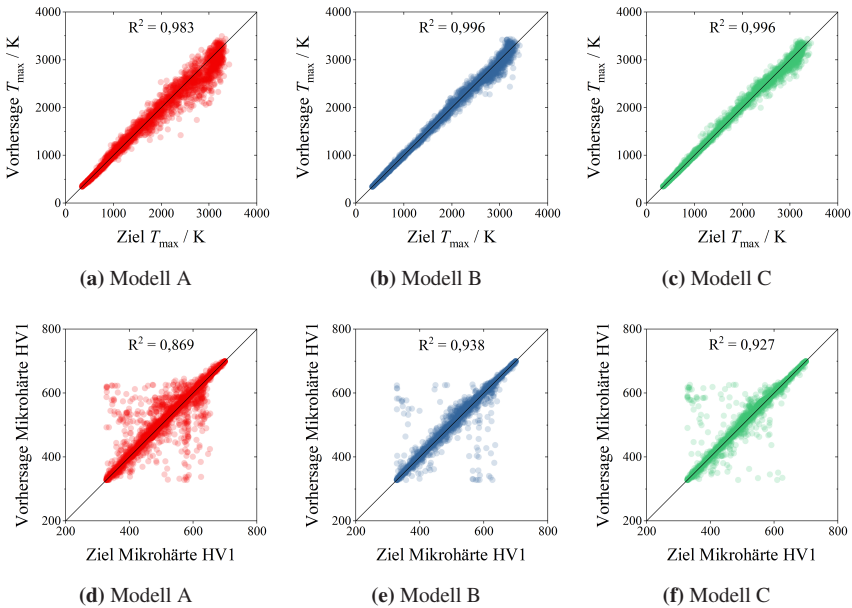
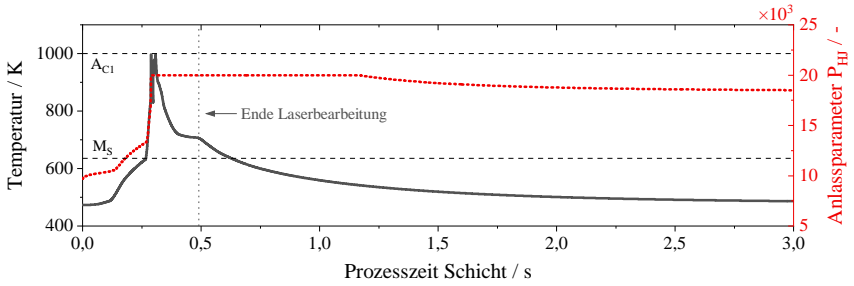


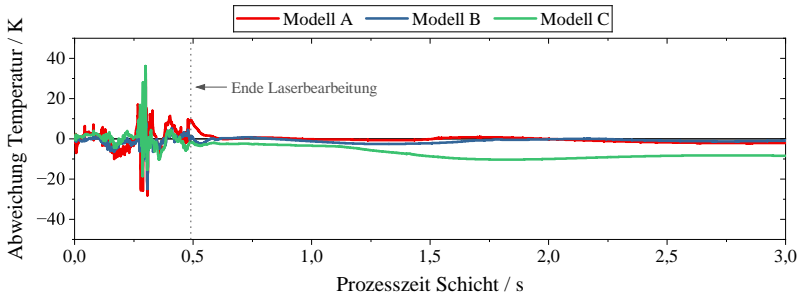
Abbildung 7.1: Vergleich der durch die drei Deep Learning Modelle (A-C) vorhergesagten maximale Temperatur T_{\max} (a-c) sowie Mikrohärté HV1 (d-f) in direkter Gegenüberstellung mit den Zielwerten der FEM-Simulation. Dargestellt wurden lediglich die Datenpunkte des Testdatensatzes.

7.1.3 Temperatur- und Härteverläufe

Abb. 7.2 zeigt den Vergleich der durch die Deep-Learning-Modelle vorhergesagten Temperaturverläufe mit den Referenzdaten aus der FEM-Simulation. Dargestellt ist ein Messpunkt mit hohem RMSE-Fehler der Temperatur sowie der resultierenden Härte ΔHV für alle drei Modelle. Der Messpunkt ist Teil des zentralen Querschnitt einer Probe mit $6\text{ mm} \times 6\text{ mm}$ Querschnittsfläche (Prozessparameterkombination P006, $BPT = 200^\circ\text{C}$). Die betrachtete Schicht 69 gehört zum Testdatensatz und wurde nicht für das Training der Modelle verwendet. Abb. 7.2b zeigt die absolute Abweichung der berechneten Temperaturen zwischen FEM-Simulation und den drei LSTM-Modellen. Abb. 7.2c visualisiert die Differenz



(a) Referenz der FEM-Simulation



(b) Temperaturabweichung der Deep-Learning-Modelle

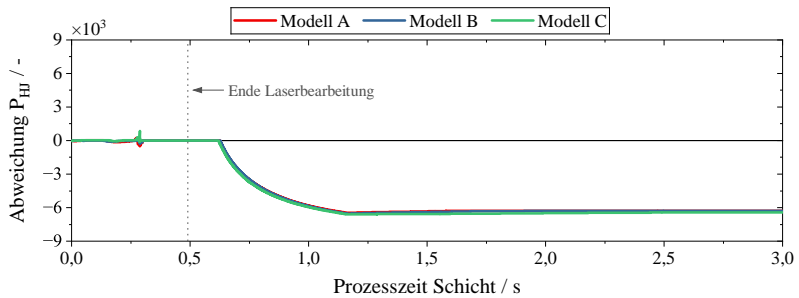
(c) P_{HJ} -Abweichung der Deep-Learning-Modelle

Abbildung 7.2: Vergleich der durch die Deep-Learning-Modelle vorhergesagten Temperaturverläufe und Anlassparameter P_{HJ} mit den Referenzdaten der FEM-Simulation (Querschnitt $6 \text{ mm} \times 6 \text{ mm}$, P006, $BPT = 200^\circ\text{C}$) für einen Messpunkt mit hohem berechnetem Fehler für alle drei Modelle.

des aus dem Temperaturverlauf berechneten P_{HJ} , welcher unmittelbar mit der vorhergesagten Härte HV1 korreliert. Eine Abweichung nahe null entspricht in beiden Fällen der bestmöglichen Übereinstimmung.

Die Modelle zeigen insgesamt eine hohe Vorhersagegüte mit geringen absoluten und prozentualen Abweichungen der Temperaturverläufe. Im Nahfeld lagen die maximalen Abweichungen bei etwa 40 K bzw. 4 % gegenüber den FEM-Referenzwerten. Im Fernfeldbereich der aktiven Laserbearbeitung betrug die Differenzen maximal 10 K oder 2 %. Das Modell B wies hierbei die geringsten absoluten und prozentualen Fehler auf. Nach dem Ausschalten des Lasers zeigten sich signifikante Unterschiede zwischen den Modellen im Abkühlabschnitt. Die größte Abweichung wurde mit -8 K (-2 %) bei Modell C beobachtet. Für den aus den Temperaturprofilen berechneten Anlassparameter P_{HJ} traten deutliche Unterschiede zwischen den Modellen auf. Während die FEM-Simulation für den betrachteten Punkt eine Härte von 377 HV1 berechnete, ergaben die Deep-Learning-Modelle eine im Mittel deutlich höhere Härte von 580 HV1.

7.1.4 Rechenaufwand

Die zum Training benötigte Rechenzeit der drei LSTM-Modelle ist in Tabelle 7.2 dargestellt. Dabei wird sowohl die Trainingsdauer eines einzelnen Modells als auch die Gesamtzeit für ein Ensemble aus fünf unabhängig trainierten Modellen angegeben. Die Unterschiede zwischen den Modellen ergeben sich ausschließlich aus der Komplexität der verwendeten Architektur, also der Anzahl der Layer und Zellen. Datenmenge, Lernrate und weitere Parameter (engl. *hyperparameter*) wurden konstant gehalten, um eine direkte Vergleichbarkeit sicherzustellen.

Mit zunehmender Modellgröße stieg der Trainingsaufwand an. Für das größte Modell C betrug die Trainingszeit pro Einzellauf etwa (11916 ± 655) s. Dies entspricht einem Anstieg von rund 35 % gegenüber Modell A. Durch die sequentielle Ausführung der Trainingsläufe skaliert der Zeitbedarf für das Ensemble annähernd linear. Eine deutliche Reduktion dieser Zeit wäre bei paralleler Ausführung der Modelltrainings auf einer geeigneten Recheninfrastruktur möglich.

Tabelle 7.2: Trainings- und Inferenzzeiten der drei LSTM-Modelle. Die mit * und ** gekennzeichneten Werte beziehen sich auf die durchschnittliche Batch-Inferenzzeit pro Ensemble und pro Ensemble und Messpunkt (Batchgröße von 256).

Modell	Rechenzeit Training / s		Rechenzeit Inference / s	
	Einzelmodell	Ensemble	Ensemble*	Ensemble**
A	8844 ± 1767	44 220	$11,4 \pm 1,9$	$0,045 \pm 0,007$
B	9564 ± 376	47 820	$11,5 \pm 1,4$	$0,045 \pm 0,006$
C	$11 916 \pm 655$	59 580	$13,5 \pm 1,3$	$0,053 \pm 0,005$

Auch für die Inferenz (engl. *inference*), also die eigentliche Anwendung der Modelle zur Vorhersage der Temperaturhistorien, zeigten sich Unterschiede in der Rechenzeit. Zwischen Modell A und Modell B bestanden dabei nur geringe Abweichungen von etwa 0,045 s pro Messpunkt, während das größere Modell C mit 0,053 s pro Messpunkt eine um rund 18 % längere Rechenzeit aufwies. Diese Berechnungen erfolgten mit einer Batchgröße von 256. Da sich die Vorhersagen verschiedener Messpunkte unabhängig voneinander berechnen lassen, kann die Effizienz durch parallele Verarbeitung weiter gesteigert werden.

Unter Berücksichtigung der Ergebnisse zu den allgemeinen und prozessspezifischen Fehlermaßen, der Temperaturverläufe sowie des Rechenaufwands wurde für die weiteren Untersuchungen das Ensemble bestehend aus Modell A verwendet. Dieses Modell bietet den besten Kompromiss zwischen Vorhersagegüte, Stabilität und Rechenzeit und ist daher für den folgenden Praxiseinsatz am effizientesten geeignet.

7.2 Analyse mit dem Deep-Learning Modell

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Analyse des Modell-Ensembles aus Modell B dargestellt. Alle Auswertungen beziehen sich ausschließlich auf den Testdatensatz, der während des Trainingsprozesses nicht verwendet wurde und somit eine unabhängige Beurteilung der Modellleistung ermöglicht.

7.2.1 Einfluss der Eingangsvariablen

Der Einfluss der einzelnen Eingangsvariablen auf die Vorhersagequalität wurde mithilfe der PFI-Methode untersucht. Dabei wird der relative Beitrag jeder Variablen bestimmt, indem ihre Werte zufällig permutiert werden, während alle übrigen Eingaben unverändert bleiben. Die resultierende Veränderung des RMSE-Werts beschreibt den Einfluss der jeweiligen Variable auf die Modellgüte.

Abb. 7.3 zeigt die Ergebnisse der PFI-Analyse für das Modell-Ensemble B. Von insgesamt elf Eingangsvariablen führten neun zu einer deutlichen Erhöhung des RMSE, wenn ihre Werte permutiert wurden. Dies weist auf ihre hohe Relevanz für die Modellvorhersage hin. Keine signifikante Beeinträchtigung des RMSE ergab sich hingegen für die zyklisch transformierten Variablen des Schraffurwinkels, $\sin(\alpha_{SV})$ und $\cos(\alpha_{SV})$. Damit tragen diese beiden Eingangsgrößen nur einen vernachlässigbaren Anteil zur Vorhersagegüte bei. Die größten Einflüsse zeigten die Eingangsvariablen der Laserleistung P , der BPT sowie des Abstands zwischen Laser und Messpunkt in y -Richtung Δy_0 . Für die autoregressive Eingangsvariable

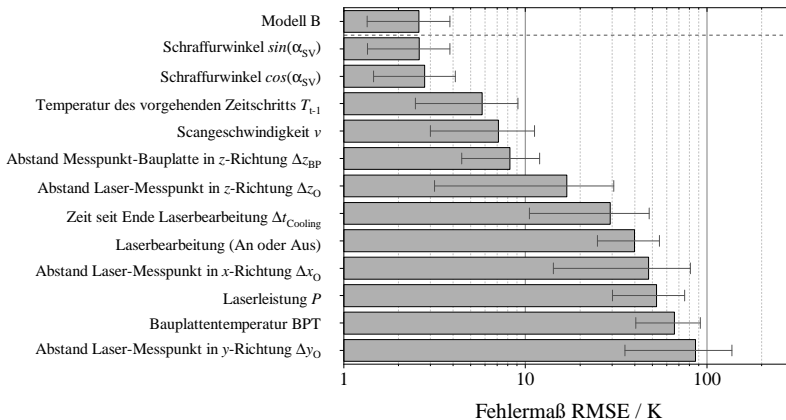


Abbildung 7.3: Ergebnisse der PFI-Analyse für das Modell-Ensemble B. Dargestellt ist die Veränderung des RMSE-Fehlermaßes durch Permutation der einzelnen Eingangsvariablen.

der Temperatur des vorhergehenden Zeitschritts T_{t-1} konnte die klassische PFI-Analyse nicht angewendet werden, da sie eine deterministische Kopplung zur Zielgröße besitzt. Stattdessen wurde T_{t-1} auf einen konstanten Wert fixiert und die Modellvorhersage mit der ursprünglichen Variante verglichen. In diesem Fall verdoppelte sich der RMSE-Wert. Dies bestätigt die zentrale Rolle dieser Variablen für die zeitliche Konsistenz der Temperaturvorhersage.

Insgesamt zeigt die Analyse, dass nahezu alle Eingangsvariablen zur Modellgüte beitragen. Lediglich die beiden Komponenten des Schraffurwinkels können ohne signifikante Einbußen der Vorhersagequalität aus dem Eingabedatensatz entfernt werden.

7.2.2 Einfluss unterschiedlicher Prozesskategorien

Der gesamte Testdatensatz umfasst sämtliche Geometrie-, Strategie- und Prozessvariationen und weist ein mittleres RMSE-Fehlermaß von $(2,6 \pm 1,2)$ K auf. Hierfür wurden alle in der PFI berücksichtigten Eingangsvariablen verwendet. Zur Untersuchung möglicher Abhängigkeiten der Vorhersagegenauigkeit von spezifischen Prozessbedingungen wurde dieser globale Fehlerwert in einzelne Prozesskategorien unterteilt. Die Auswertung erfolgte getrennt nach Prozessparameterkombinationen, BPT, Scanvektorklängen beziehungsweise Querschnittsflächen sowie nach dem Abstand der Messpunkte zur entsprechenden Bauteiloberfläche (Abb. 7.4).

Für die drei untersuchten Prozessparameterkombinationen mit jeweils 20000 Datenpunkten wurden deutliche Unterschiede festgestellt (Abb. 7.4a). Die Prozessparameterkombination P006 mit der höchsten VED zeigte ein RMSE-Fehlermaß von $(3,2 \pm 1,3)$ K. Für die Kombinationen P030 und P076 ergaben sich Werte von $(2,5 \pm 1,1)$ K beziehungsweise $(1,8 \pm 0,7)$ K.

Für die drei BPT mit jeweils 12000 Datenpunkten ergaben sich geringere Unterschiede (Abb. 7.4b). Bei der unregelmäßigen BPT sowie bei einer geregelten BPT

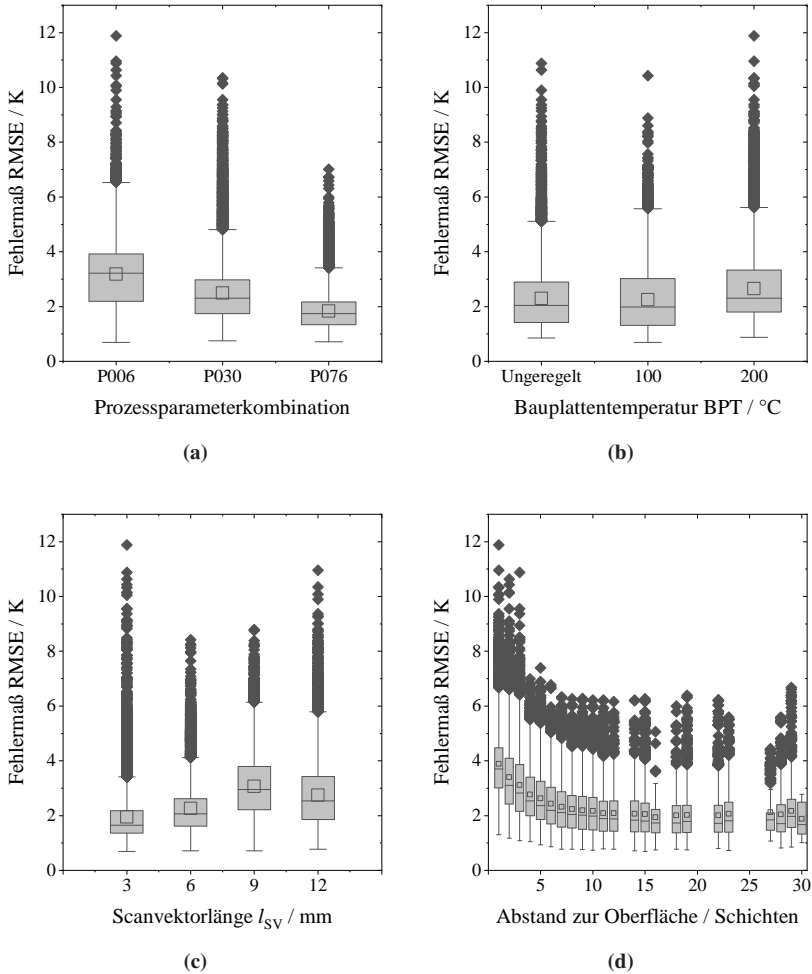


Abbildung 7.4: RMSE-Fehlermaße des Modell-Ensembles B in Abhängigkeit der Prozesskategorien (a) Prozessparameterkombination, (b) Bauplattentemperatur BPT, (c) Scanvektorlänge l_{SV} sowie (d) des Abstands zur Oberfläche. Ein Datenpunkt entspricht dem RMSE der Temperaturhistorie eines Messpunktes.

von 100 °C lag das RMSE-Fehlermaß bei $(2,3 \pm 1,1)$ K. Für die geregelte BPT von 200 °C betrug das RMSE-Fehlermaß $(2,7 \pm 1,2)$ K.

Ein Einfluss wurde auch in Abhängigkeit der Scanvektorstärke beziehungsweise der Querschnittsfläche festgestellt (jeweils 15 000 Datenpunkte, Abb. 7.4c). Für kurze Scanvektoren von 3 mm und 6 mm ergaben sich RMSE-Fehlermaße von $(1,9 \pm 1,0)$ K und $(2,3 \pm 0,9)$ K. Für längere Scanvektoren von 9 mm und 12 mm wurden RMSE-Fehlermaße von $(3,1 \pm 1,2)$ K und $(2,7 \pm 1,2)$ K berechnet.

Auch der Abstand der Messpunkte zur aktuellen Bauteiloberfläche zeigte einen deutlichen Einfluss (Abb. 7.4d). Pro Schicht wurden zwischen 50 und 5000 Datenpunkte ausgewertet. In oberflächennahen Bereichen, in denen Temperaturen oberhalb der Liquidustemperatur T_L auftreten, lagen die RMSE-Fehlermaße bis zu 25 % über dem globalen Mittelwert. Mit zunehmendem Abstand zur Oberfläche nahm das RMSE-Fehlermaß kontinuierlich ab und erreichte für größere Tiefen Werte unterhalb von 2,0 K.

7.3 Untersuchung der Generalisierung des Deep-Learning Modells

Zur Überprüfung der Fähigkeit zur Generalisierung des trainierten Deep-Learning Modells wurden gezielt Eingangsvariablen außerhalb der im Training verwendeten Wertebereiche variiert (Abschnitt 4.4.2). Die Analyse umfasst sowohl Prozessparameter als auch die Geometrie der Querschnittsflächen.

Variation der Prozessparameter

Während des Trainings wurden für den zyklisch transformierten Schraffurwinkel $\sin(\alpha_{SV})$ und $\cos(\alpha_{SV})$ fünf diskrete Winkelwerte (0° , 18° , 36° , 54° und 72°) verwendet. Darüber hinaus gingen drei diskrete BPT sowie drei Prozessparameterkombinationen aus Laserleistung, Scangeschwindigkeit und Schraffurdistanz

Tabelle 7.3: Fehlermaße für die Variation der Prozessparameter im Vergleich zum Referenzdatensatz.

Datensatz	Fehlermaße			
	RMSE / K	$\Delta T_{\text{Max}} / \text{K}$	$\Delta T_{\text{End}} / \text{K}$	$\Delta \text{HV} / \text{HV1}$
Referenz	$2,2 \pm 0,8$	25 ± 40	$0,9 \pm 0,5$	3 ± 21
Variation α_{SV}	$2,2 \pm 1,0$	25 ± 41	$1,8 \pm 0,8$	3 ± 12
Variation BPT	$2,3 \pm 0,9$	23 ± 38	$1,7 \pm 1,0$	3 ± 19
Variation P	$8,6 \pm 5,4$	119 ± 221	$1,6 \pm 0,8$	20 ± 42
Variation v	$11,9 \pm 6,4$	140 ± 201	$2,3 \pm 1,3$	23 ± 45
Variation $\alpha_{\text{SV}}, \text{BPT}$	$2,0 \pm 0,8$	20 ± 33	$1,8 \pm 0,7$	3 ± 20
Variation α_{SV}, P	$8,5 \pm 4,8$	120 ± 226	$1,6 \pm 0,8$	20 ± 38
Variation α_{SV}, v	$12,1 \pm 6,5$	140 ± 201	$2,3 \pm 1,3$	25 ± 48

in die Trainingsdaten ein. Zur Untersuchung der Generalisierung wurden die Eingangsvariablen im Testdatensatz zufällig gewählt, sodass sowohl Interpolation innerhalb als auch Extrapolation außerhalb der Trainingsbereiche geprüft werden konnte.

Die berechneten Fehlermaße sind in Tabelle 7.3 dargestellt. Für zufällig ausgewählte Schraffurwinkel (17° , 41° , 46° , 56° , 75° und 89°), die nicht Teil des Trainingsdatensatzes waren, ergeben sich nahezu identische Werte im Vergleich zur Referenz. Das RMSE-Fehlermaß beträgt ($2,2 \pm 1,0$) K und entspricht damit dem Niveau des Referenzdatensatzes mit ($2,2 \pm 0,8$) K. Die Abweichung der Maximaltemperatur ΔT_{Max} liegt bei (25 ± 41) K, die Abweichung der Endtemperatur ΔT_{End} bei ($1,8 \pm 0,8$) K und die Differenz der Mikrohärtigkeit ΔHV bei (3 ± 12) HV1.

Für die Variation der BPT beträgt das RMSE-Fehlermaß ($2,3 \pm 0,9$) K. Auch die kombinierte Variation von Schraffurwinkel und BPT zeigt mit einem RMSE-Fehlermaß von ($2,0 \pm 0,8$) K vergleichbare Werte. Bei der Variation der Laserleistung und der Scangeschwindigkeit ergeben sich höhere Fehlermaße. Das RMSE steigt im Mittel auf Werte zwischen 8,5 K bis 12,1 K. Die Abweichung der Maximaltemperatur ΔT_{Max} erhöht sich von 25 K auf Werte zwischen 119 K bis 140 K.

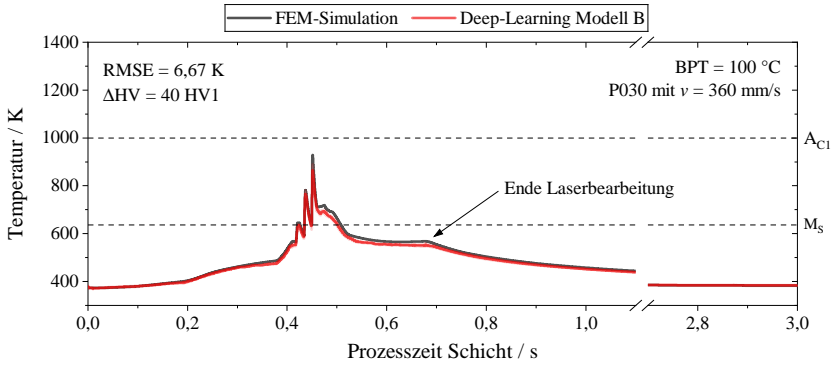
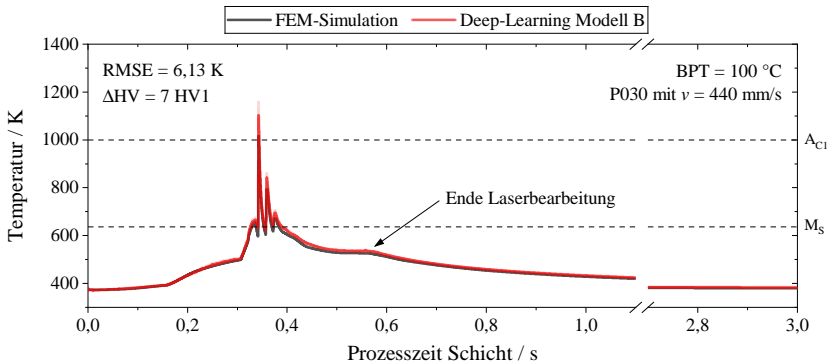
(a) Reduktion der Scangeschwindigkeit auf 360 mm s^{-1} (b) Erhöhung der Scangeschwindigkeit auf 440 mm s^{-1}

Abbildung 7.5: Zeit-Temperaturverläufe repräsentativer Messpunkte für die Variation der Scangeschwindigkeit zur Überprüfung der Generalisierung. Direkter Vergleich zwischen den Berechnungen des Deep-Learning Modells sowie der FEM-Simulation. Modifizierte Prozessparameterkombinationen waren nicht Teil des Trainings-, Validierungs- oder Testdatensatzes.

Die Differenz der Mikrohärt ΔHV steigt von durchschnittlich 3 HV1 auf Werte zwischen 20 HV1 und 25 HV1 . Die Abweichung der Endtemperatur ΔT_{End} verändert sich nur geringfügig von $0,9 \text{ K}$ auf Werte zwischen $1,6 \text{ K}$ bis $2,3 \text{ K}$.

Abb. 7.5 zeigt exemplarische Zeit-Temperaturverläufe eines repräsentativen Messpunkts für die Variation der Scangeschwindigkeit. Hierfür wurden modifizierte Prozessparameterkombinationen, die nicht in den Trainingsdaten enthalten waren, mittels des Deep-Learning Modells berechnet (Inference). Zur anschließenden Validierung der berechneten Temperaturverläufe sowie der resultierenden Härte wurden zusätzlich FEM-Simulation durchgeführt. Bei einer reduzierten Scangeschwindigkeit von 360 mm s^{-1} (Abb. 7.5a) sowie einer erhöhten Scangeschwindigkeit von 440 mm s^{-1} (Abb. 7.5b) zeigen sich qualitativ und quantitativ gute Übereinstimmung zwischen den Berechnungen des Deep-Learning Modells sowie der FEM-Simulationen. Der Temperaturverlauf, speziell der Beginn und das Ende der Laserbearbeitung sowie die anschließende Abkühlphase, werden mit einer geringen Abweichung wiedergegeben (RMSE von 7 K). Die Abweichungen treten vorwiegend im Bereich der lokalen Maximaltemperaturen auf.

Variation der Geometrie der Querschnittsflächen

Neben den Prozessparametern wurde die Fähigkeit zur Generalisierung auch durch gezielte Variation der Geometrie der Querschnittsfläche untersucht. Alle Trainingsdaten basierten auf einer Quadergeometrie mit quadratischen Querschnittsflächen A , sodass eine lineare Abhängigkeit zwischen Querschnittsfläche und Quadrat der Scanvektorlänge ($A = l_{SV}^2$) angenommen werden kann. Für die Generalisierung wurden drei neue Testdatensätze definiert:

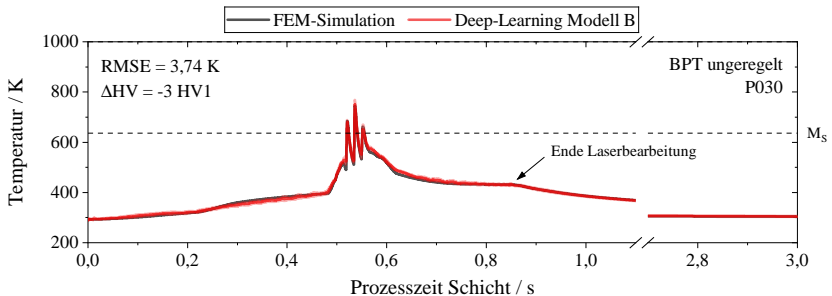
- Testdatensatz I: Quadergeometrie mit quadratischer Querschnittsfläche $A = 5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ (Interpolation).
- Testdatensatz II: Quadergeometrie mit rechteckiger Querschnittsfläche $A = 5 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ (Extrapolation).
- Testdatensatz III: Zylindergeometrie mit kreisförmiger Querschnittsfläche, Durchmesser 5 mm (Extrapolation).

Tabelle 7.4: Fehlermaße für die Variation der Geometrie der Querschnittsfläche A.

Datensatz	Fehlermaße			
	RMSE / K	ΔT_{Max} / K	ΔT_{End} / K	ΔHV / HV1
Referenz	$2,2 \pm 0,8$	25 ± 40	$0,9 \pm 0,5$	3 ± 21
Variation Geometrie I	$3,3 \pm 0,9$	27 ± 45	$3,4 \pm 1,2$	5 ± 21
Variation Geometrie II	$5,9 \pm 2,5$	50 ± 87	$1,8 \pm 1,4$	9 ± 26
Variation Geometrie III	$4,0 \pm 1,1$	34 ± 56	$3,8 \pm 1,4$	6 ± 27

Die Ergebnisse in Tabelle 7.4 zeigen, dass die Variation der Geometrie zu moderaten Änderungen der Fehlermaße führt. Für Testdatensatz I steigt das RMSE-Fehlermaß von $(2,2 \pm 0,8)$ K (Referenz) auf $(3,3 \pm 0,9)$ K. Die Abweichungen der Maximaltemperatur ΔT_{Max} und der resultierenden Härte ΔHV liegen innerhalb der Standardabweichung des Referenzdatensatzes. Das Fehlermaß der Endtemperatur ΔT_{End} zeigt mit $(3,4 \pm 1,2)$ K eine Erhöhung gegenüber dem Referenzwert von $(0,9 \pm 0,5)$ K. Für Testdatensatz II (rechteckige Geometrie) beträgt das RMSE-Fehlermaß $(5,9 \pm 2,5)$ K.

Die Abweichung der Maximaltemperatur steigt auf (50 ± 87) K und die mittlere Härteabweichung ΔHV beträgt 9 HV1. Testdatensatz III (Zylinder) liegt mit einem RMSE-Fehlermaß von $(4,0 \pm 1,1)$ K sowie Abweichungen von $(34 \pm$

**Abbildung 7.6:** Zeit-Temperaturverläufe eines repräsentativen Messpunkts für einen Quader mit rechteckiger Querschnittsfläche $5 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ im Vergleich zwischen Deep-Learning Modell und FEM-Simulation.

56) K für ΔT_{Max} und 6 HV1 für ΔHV zwischen den beiden anderen Varianten. Das Fehlermaß der Endtemperatur ΔT_{End} erreicht hier $(3,8 \pm 1,4)$ K. Der Zeit-Temperaturverlauf in Abb. 7.6 zeigt den Vergleich zwischen Deep-Learning Modell und FEM-Simulation. Für die alle getesteten Geometrien stimmen die Temperaturverläufe beider numerischen Methoden qualitativ und quantitativ gut überein. Geringfügige Abweichungen treten im Nahfeld und während der Abkühlung auf, ohne dass physikalisch inkonsistente Verläufe beobachtet werden.

7.4 Diskussion

Die Ergebnisse der Deep-Learning-basierten Prozessmodellierung zeigen, dass rekurrente neuronale Netze, insbesondere LSTM-Architekturen, den zeitlich aufgelösten Temperaturverlauf des PBF-LB-Prozesses mit hoher Genauigkeit und physikalischer Konsistenz vorhersagen können. Im Folgenden werden die wesentlichen Erkenntnisse im Kontext der experimentellen und numerischen Untersuchungen sowie der theoretischen Grundlagen eingeordnet und bewertet.

7.4.1 Vergleich mit FEM-Simulation und experimentellen Ergebnissen

Die Vorhersagen des trainierten LSTM-Modells zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den FEM-Simulationen hinsichtlich Form, Amplitude und zeitlicher Dynamik der Temperaturverläufe. Sowohl die Aufheizphase während der Laserbelichtung als auch die anschließende Abkühlung werden physikalisch korrekt reproduziert. Die mittleren Abweichungen der Temperaturverläufe liegen mit RMSE-Werten um $(2,6 \pm 1,2)$ K im Bereich der numerischen Unsicherheit der FEM-Daten. Auch die aus den Temperaturdaten abgeleiteten Härtewerte zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen der FEM-Simulation und der experimentell bestimmten Härteverteilungen (siehe Tabelle 7.1 und Abb. 7.1).

Die Standardabweichungen lagen mit unter 20 HV1 innerhalb der experimentellen Streuung. Deutliche Differenzen treten ausschließlich im Nahfeld der Laser-Material-Interaktion auf. Bereits geringfügige zeitliche Verschiebungen oder kleine absolute Abweichungen der Maximaltemperatur können hierbei überproportionale Abweichungen der Phasenanteile und der resultierenden Härte nach der Herstellung dieser Schicht verursachen (vgl. Abb. 7.1 und Abb. 7.2). Wie in Abb. 6.3 dargestellt, ist der Temperaturbereich um die Austenitisierungstemperatur, der den Übergang zwischen Zone I und Zone II kennzeichnet, für die globale Härteentwicklung über den gesamten Prozess von untergeordneter Bedeutung. Entscheidend ist vielmehr der anschließende Temperaturverlauf im Übergangsbereich zwischen Zone II und Zone III (siehe Abschnitt 6.2.1).

Die Modelle reproduzieren die in den experimentellen Untersuchungen identifizierten Zusammenhänge zwischen VED, BPT und der resultierenden Härteentwicklung. Mit zunehmender Energiedichte nimmt sowohl die absolute Härte als auch die Streuung der lokalen Härtewerte ab, was auf intensivere Anlassvorgänge infolge der erhöhten thermischen Belastung zurückzuführen ist. Ein analoger Effekt zeigt sich bei einer Erhöhung der BPT, die ebenfalls zu einem homogeneren Anlasszustand und damit zu geringeren Härtevariationen führt. Die konsistente Abbildung dieser spezifischen Abhängigkeiten bestätigt die Eignung des Ansatzes als datengetriebenes Ersatzmodell für komplexe thermische FEM-Simulationen.

Ein wesentlicher Vorteil des Deep-Learning-Ansatzes liegt in der drastischen Reduktion des Rechenaufwands. Während eine vollständige FEM-Simulation mehrere Stunden bis Tage pro Geometrie benötigt, können die LSTM-Modelle Temperaturverläufe im Bereich von Sekunden vorhersagen. Dadurch werden Anwendungen in der Prozesssteuerung und in Echtzeit-Optimierungsszenarien denkbar. Die Ergebnisse zeigen somit, dass ein datengetriebenes Modell bei vergleichbarer Genauigkeit eine deutlich effizientere Alternative zu aufwendigen Simulationen darstellen kann, sofern ausreichend repräsentative Trainingsdaten vorliegen.

7.4.2 Bewertung der Modellarchitektur und der Relevanz der Eingangsvariablen

Die Untersuchung unterschiedlicher Modellgrößen zeigte, dass die Architektur des Modell B den besten Kompromiss zwischen Genauigkeit, Stabilität und Rechenzeit bietet. Eine weitere Vergrößerung der Netzwerkstruktur führte nicht zu einer Verbesserung der Modelleistung, sondern zu einer Überparametrisierung und instabiler Konvergenz. Dies verdeutlicht, dass eine sorgfältige Abstimmung der Modellkomplexität auf die zugrunde liegende Problemstellung und Datenmenge entscheidend für die Fähigkeit zur Generalisierung ist.

Unterschiede der Vorhersagegüte zu unterschiedlichen Prozesskategorien kann dabei auf die Trainingsdatenauswahl zurückgeführt werden. Durch einen Bias in den Trainingsdaten können einige Prozesskategorien besser durch das Modell repräsentiert werden als andere.

Die Analyse der Eingangsvariablen mittels der PFI-Methode zeigte, dass nahezu alle Eingangsgrößen wesentlich zur Modellgüte beitragen. Besonders stark wirken die Laserleistung, die BPT und der Abstand zwischen Laser und Messpunkt, also jene Parameter, die direkt den lokalen Energieeintrag und die Wärmeleitung bestimmen. Die zyklisch transformierten Schraffurwinkelvariablen $\sin(\alpha_{SV})$ und $\cos(\alpha_{SV})$ hatten dagegen keine signifikante Bedeutung. Eine mögliche Ursache könnte darin liegen, dass die Schraffurwinkelinformationen in den Scanvektoren integriert sind. Damit bestätigt sich, dass die gewählte Feature-Zusammenstellung die dominanten physikalischen Einflussgrößen des Prozesses erfasst. Die bewusste Integration physikalischer Aspekte in die Eingabedaten (Abstände, Energieflussrichtungen und autoregressive Temperaturwerte) stellt ein zentrales Element dieses Modells dar und entspricht dem Konzept der *theory-guided data science*.

Die hohe Relevanz der autoregressiven Temperatur T_{t-1} unterstreicht zudem die Bedeutung zeitlicher Korrelationen im Lernprozess. Ohne diese Kopplung verdoppelte sich der Modellfehler. Dies bestätigt die Eignung der LSTM-Architektur für die Beschreibung sequentieller, stark zeitabhängiger Prozesse.

7.4.3 Fähigkeit zur Generalisierung und Übertragbarkeit

Das trainierte Modell zeigte eine insgesamt gute Fähigkeit zur Generalisierung gegenüber neuen Prozessparametern und Geometrien. Für interpolierte Eingabekombinationen innerhalb des Trainingsbereichs blieben die Fehlermaße nahezu unverändert. Dies weist auf eine robuste Lernfähigkeit des Modells innerhalb der bekannten Datenräume hin. Auch bei extrapolierten Bedingungen (abweichende Schraffurwinkel, BPT oder neuartige Geometrieformen) traten nur moderate Erhöhungen der Fehlermaße auf. Selbst bei einer vollständigen Änderung der Querschnittsform von quadratisch zu zylindrisch blieb das RMSE-Fehlermaß unter 4 K.

Deutlich höhere Fehler traten hingegen bei der Variation der Laserleistung und der Scangeschwindigkeit auf. In diesen Fällen stieg das RMSE auf Werte oberhalb von 8 K. Dies zeigt den dominanten Einfluss des lokalen Energieeintrags auf die Dynamik des thermischen Prozesses auf. Ein wesentlicher Grund hierfür liegt in der begrenzten Vielfalt der während des Trainings verwendeten Prozessparameterkombinationen. Mit lediglich drei Kombinationen aus Laserleistung, Scangeschwindigkeit und Schraffurdistanz stand dem Modell ein zu kleiner Parameterraum zur Verfügung, um die komplexen, nichtlinearen Wechselwirkungen dieser Variablen vollständig in sehr hoher Genauigkeit abzubilden. Für eine zuverlässigere Interpolation und Extrapolation zukünftiger Prozessparameterkombinationen wäre daher eine Erweiterung des Trainingsdatensatzes um zusätzliche, physikalisch repräsentative Prozessparameterkombinationen erforderlich.

7.4.4 Bezug zu Grundlagen und Stand der Forschung

Im Vergleich zu komplexeren Architekturen wie GNN oder PINN stellt das hier entwickelte LSTM-Modell einen deutlich einfacheren und effizienteren Ansatz

dar. Während GNNs prinzipiell die räumlichen Zusammenhänge zwischen benachbarten Volumenelementen abbilden und PINNs die zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen direkt in den Trainingsprozess integrieren können [165, 176], ist ihr praktischer Einsatz in komplexen additiven Prozessen bislang stark limitiert. Sie erfordern sehr große Rechenressourcen und stark vereinfachte Materialmodelle, wodurch die Anwendung auf realistische PBF-LB-Prozesse bislang kaum realisiert werden konnte [177, 179, 184].

Das LSTM-Modell bietet demgegenüber eine robuste und effiziente Alternative. Trotz des Fehlens einer expliziten physikalischen Gleichungseinbindung kann es den zeitlich aufgelösten Temperaturverlauf mit hoher Genauigkeit wiedergeben, sofern die Eingabedaten geeignete physikalische Repräsentationen enthalten. Durch die Integration physikbasierter Eingabegrößen (z. B. Energieeintrag, relative Position zum Laser, Abstand zur Bauteiloberfläche und autoregressive Temperaturinformation) wird eine implizite Kodierung der zugrunde liegenden physikalischen Gesetzmäßigkeiten erreicht. Dieser Ansatz entspricht dem Konzept eines *physics-informed feature design* und vereint datengetriebene Effizienz mit physikalischer Plausibilität.

Ein wesentlicher Vorteil des gewählten Ansatzes besteht darin, dass das Modell nicht nur finale Zustandsgrößen wie die resultierende Härte, sondern den vollständigen zeitabhängigen Temperaturverlauf vorhersagt. Dadurch wird eine direkte physikalische Interpretation der Modellvorhersagen möglich und die Vertrauenswürdigkeit der Ergebnisse erhöht sich erheblich. Die zeitlich aufgelösten Temperaturprofile erlauben eine detaillierte Analyse der thermischen Zyklen, der lokalen Aufheiz- und Abkühlraten sowie der Bedingungen für Phasenumwandlungen oder Anlassvorgänge. Damit wird das LSTM-Modell nicht als reine Black-Box verwendet, sondern als nachvollziehbares Werkzeug, dessen Vorhersagen in bestehende physikalische Prozessmodelle eingebettet werden können. Im Gegensatz zu Modellen, die ausschließlich Endgrößen wie Härte, Dichte oder Gefügestand prognostizieren, trägt der hier gewählte Ansatz somit zu einer verbesserten Transparenz und Interpretierbarkeit datengetriebener Methoden bei. Im

Vergleich zu anderen in der Literatur beschriebenen Arbeiten [180, 182–185] erreicht das hier entwickelte Modell eine vergleichbare Vorhersagegüte bei deutlich geringerem Trainingsaufwand.

8 Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war die systematische Untersuchung der thermischen und metallurgischen Mechanismen der *intrinsischen Wärmebehandlung* im pulverbettbasierten Laserstrahlschmelzprozess (PBF-LB) des Vergütungsstahls 42CrMo4. Durch die Kombination experimenteller Untersuchungen mit numerischer und datengetriebener Modellierung wurde ein physikalisch fundiertes Verständnis der Prozess-Struktur-Eigenschaftsbeziehungen geschaffen und eine Grundlage für die gezielte Steuerung lokaler Werkstoffeigenschaften während der Fertigung erarbeitet werden.

Die experimentellen Ergebnisse zeigten, dass der PBF-LB-Prozess eine ausgeprägte intrinsische Wärmebehandlung bewirkt, die infolge der periodischen Aufheiz- und Abkühlzyklen zu kurzzeitigen Austenitisierungs- und Anlassvorgängen führt. Durch gezielte Variation der Volumenenergiedichte (VED), der Bauplattentemperatur (BPT), der Scanvektorlänge und der Mehrfachbelichtung (MFB) konnte die thermische Prozesshistorie und damit die Gefüge- und Härteentwicklung kontrolliert beeinflusst werden. Mit zunehmender VED nahm die mittlere Mikrohärtigkeit aufgrund verstärkter Anlassvorgänge ab, während niedrige VED-Werte feine martensitische Mikrostrukturen mit Härtewerten bis etwa 460 HV1 ergaben. Eine Erhöhung der BPT führte zu homogeneren Anlasszuständen und verringerter Härtestreuung, während niedrigere Temperaturen eine stärkere Gefügegradientenbildung begünstigten. Die Variation der Scanvektorlänge und Querschnittsfläche zeigte, dass neben dem Energieeintrag auch geometrisch bedingte Wärmeleitpfade die lokale Temperaturhistorie und Anlasszustände beeinflussen. Der Einsatz einer MFB verstärkte den Effekt der intrinsischen Wärmebehandlung insbesondere bei

hohen Energiedichten, was zu einer Reduktion der Härte um bis zu 40 HV1 führte. Durch Kombination geeigneter Prozessparameter und Belichtungsstrategien konnten Gradienten in der Mikrohärtigkeit von bis zu 80 HV1 innerhalb eines Bauteils eingestellt werden, womit die Möglichkeit einer gezielten Eigenschaftsmodulation während des Fertigungsprozesses nachgewiesen wurde.

Das entwickelte Finite-Elemente-Prozessmodell ermöglichte eine physikalisch konsistente Abbildung der thermischen und metallurgischen Vorgänge während des PBF-LB-Prozesses. Die Parametrisierung der modifizierten Goldak-Laserquelle und die Implementierung temperatur- sowie phasenabhängiger Materialeigenschaften gestatteten eine realitätsnahe Beschreibung der transienten Temperaturfelder und der daraus resultierenden Phasenumwandlungen. Der entwickelte Multiskalenansatz kombinierte eine detaillierte mesoskalige Modellierung des Energieeintrags mit makroskaligen Näherungen und ermöglichte dadurch die effiziente Simulation ganzer Schichten bei hoher numerischer Effizienz. Die Simulationsergebnisse zeigten eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell bestimmten Temperaturverläufen, Mikrostrukturen und Härteverteilungen. Insbesondere konnten die charakteristischen gradierten Anlassbereiche, die Abhängigkeit der Härte von der VED sowie der Einfluss geometrischer Randbedingungen quantitativ reproduziert werden. Damit wurde das physikalische Verständnis der intrinsischen Wärmebehandlung validiert und die Grundlage für eine simulationsgestützte Prozessauslegung geschaffen.

Zur effizienten Vorhersage der Prozessdynamik wurde ergänzend ein rekurrentes neuronales Netz (LSTM-Architektur) entwickelt, das auf den aus der FEM-Simulation abgeleiteten Datensätzen trainiert wurde. Dieses Modell sagte zeit aufgelöste Temperaturverläufe und Härteverteilungen mit hoher Genauigkeit und signifikant reduziertem Rechenaufwand voraus. Der mittlere relative Fehler lag unter 3 %, die Rechenzeit reduzierte sich um den Faktor 400 gegenüber der FEM-Simulation. Methoden der erklärbaren Künstlichen Intelligenz ermöglichten die Bewertung des Einflusses der Eingangsvariablen und bestätigten die dominante Bedeutung von Laserleistung, Scangeschwindigkeit, BPT und geometrischer Lage des Auswertungspunkts für die thermische Prozessdynamik. Damit konnte

ein datengetriebenes Modell geschaffen werden, das die physikalischen Zusammenhänge der intrinsischen Wärmebehandlung abbildet und zugleich für eine effiziente Prozessoptimierung genutzt werden kann.

Insgesamt wurde mit der Verknüpfung experimenteller, numerischer und datengetriebener Methoden ein umfassendes, physikalisch fundiertes Verständnis der intrinsischen Wärmebehandlung im PBF-LB-Prozess martensitischer Vergütungsstähle erreicht. Die Arbeit zeigt, dass die im Prozess inhärenten thermischen Zyklen gezielt zur Eigenschaftssteuerung genutzt werden können und eine teilweise Substitution der konventionellen Wärmebehandlung bereits während der additiven Fertigung möglich ist. Das entwickelte numerische Framework leistet damit einen Beitrag zur integrativen Modellierung von Prozess-Struktur-Eigenschaftsbeziehungen und eröffnet neue Perspektiven für die additive Fertigung hochfester Stähle mit lokal maßgeschneiderten Eigenschaftsprofilen.

Literaturverzeichnis

- [1] DIN 8580:2022-12: *Fertigungsverfahren - Begriffe, Einteilung*. Beuth Verlag GmbH, Berlin, Deutschland, 2022.
- [2] A. Gebhardt, J. Kessler, A. Schwarz und L. Thurn. *Additive Fertigungsverfahren*. Carl Hanser Verlag, München, Auflage 6, 2025. ISBN 978-3-446-46617-3.
- [3] DIN EN ISO / ASTM 52900:2022-03: *Additive Fertigung - Grundlagen - Terminologie*. Beuth Verlag GmbH, Berlin, Deutschland, 2022.
- [4] I. Gibson, D. Rosen und B. Stucker. *Additive Manufacturing Technologies: 3D Printing, Rapid Prototyping, and Direct Digital Manufacturing*. Springer New York, New York, 2015. ISBN 978-1-4939-2112-6
978-1-4939-2113-3.
- [5] M. Schneck, M. Gollnau, M. Lutter-Günther, B. Haller, G. Schlick, M. Lakomic und G. Reinhart. Evaluating the Use of Additive Manufacturing in Industry Applications. *Procedia CIRP*, 81:19–23, 2019. DOI: 10.1016/j.procir.2019.03.004.
- [6] J. Bobke, T. Russack und J. Weinhold, editors. *Potenziale und Herausforderungen der Additiven Fertigung: Gesellschaft – Wirtschaft – Wissenschaft und Transfer*. FOM-Edition. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2025. ISBN 978-3-658-45140-0
978-3-658-45141-7.
- [7] S. Joshi, R. P. Martukanitz, A. R. Nassar und P. Michaleris. *Additive Manufacturing with Metals: Design, Processes, Materials, Quality*

Assurance, and Applications. Springer Nature Switzerland, Cham, 2023. ISBN 978-3-031-37068-7 978-3-031-37069-4.

- [8] W. E. King, H. D. Barth, V. M. Castillo, G. F. Gallegos, J. W. Gibbs, D. E. Hahn, C. Kamath und A. M. Rubenchik. Observation of keyhole-mode laser melting in laser powder-bed fusion additive manufacturing. *Journal of Materials Processing Technology*, 214(12):2915–2925, 2014. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2014.06.005.
- [9] 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. *Acta Materialia*, 108:36–45, 2016. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.02.014.
- [10] T. DebRoy, H. L. Wei, J. S. Zuback, T. Mukherjee, J. W. Elmer, J. O. Milewski, A. M. Beese, A. Wilson-Heid, A. De und W. Zhang. Additive manufacturing of metallic components – Process, structure and properties. *Progress in Materials Science*, 92:112–224, 2018. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2017.10.001.
- [11] J. Damon, R. Koch, D. Kaiser, G. Graf, S. Dietrich und V. Schulze. Process development and impact of intrinsic heat treatment on the mechanical performance of selective laser melted AISI 4140. *Additive Manufacturing*, 28:275–284, 2019. DOI: 10.1016/j.addma.2019.05.012.
- [12] C. Behrens, N. Ostermann, T. Grimm, J. T. Seht und V. Ploshikhin. Impact of hatching strategies on overhang displacement in PBF-LB/M. *Progress in Additive Manufacturing*, 10(6):3977–3988, 2025. DOI: 10.1007/s40964-025-01156-8.
- [13] P. Promopattum, S.-C. Yao, P. C. Pistorius, A. D. Rollett, P. J. Coutts, F. Lia und R. Martukanitz. Numerical modeling and experimental validation of thermal history and microstructure for additive manufacturing of an Inconel 718 product. *Progress in Additive Manufacturing*, 3(1): 15–32, 2018. DOI: 10.1007/s40964-018-0039-1.

- [14] A. L. Vyatskikh, T. B. Slagle, S. Jiang, S. A. El-Azab, U. S. Bertoli, L. Valdevit, E. J. Lavernia und J. M. Schoenung. Thickness-Dependent Microstructure in Additively Manufactured Stainless Steel. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 30(9):6606–6617, 2021. DOI: 10.1007/s11665-021-05931-w.
- [15] N. Nouri, G. Graf, S. Sen, V. Schulze und S. Dietrich. Tailored Hardness Profiles Through a Combination of Specialized PBF-LB Processing Strategies with Subsequent Heat Treatment for Graded High-Strength Components Made of Maraging Steel. *Netsushori (Extra-edition)*, 64: ex17–ex22, 2024. DOI: 10.14940/netsushori.64.ex17.
- [16] L. Parry, I. A. Ashcroft und R. D. Wildman. Understanding the effect of laser scan strategy on residual stress in selective laser melting through thermo-mechanical simulation. *Additive Manufacturing*, 12:1–15, 2016. DOI: 10.1016/j.addma.2016.05.014.
- [17] F. Nahr, T. Novotny, D. Kunz, U. Kleinhans, L. Chechik, D. Bartels und M. Schmidt. Advanced process control in laser-based powder bed fusion—Smart Fusion feedback-loop control as a path to uniform properties for complex structures? *Journal of Materials Research and Technology*, 34: 604–618, 2025. DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.12.014.
- [18] M. Patel. A comprehensive review of functionally graded materials and their ballistic impact performance: Current status and future challenges. *Next Materials*, 8:100704, 2025. DOI: 10.1016/j.nxmate.2025.100704.
- [19] P. Kürsteiner, M. B. Wilms, A. Weisheit, B. Gault, E. A. Jäggle und D. Raabe. High-strength Damascus steel by additive manufacturing. *Nature*, 582(7813):515–519, 2020. DOI: 10.1038/s41586-020-2409-3.
- [20] A. Schaeffler. Constitution Diagram for Stainless Steel Weld Metal. *Metal Progress*, 56:680–680B, 1949. ISSN 0026-0665.

- [21] P. Guiraldenq und O. Hardouin Duparc. The genesis of the Schaeffler diagram in the history of stainless steel. *Metallurgical Research & Technology*, 114(6):613, 2017. DOI: 10.1051/metal/2017059.
- [22] DIN EN 10025-1:2005-02: *Warmgewalzte Erzeugnisse aus Baustählen – Teil 1: Allgemeine technische Lieferbedingungen*. Beuth Verlag GmbH, Berlin, Deutschland, 2005.
- [23] J. Brooks und J. Lippold. Selection of Wrought Austenitic Stainless Steels. In *Welding, brazing, and soldering*, Band 6. ASM International, 1993. ISBN 978-1-62708-173-3.
- [24] P. S. Korinko und S. H. Malene. Considerations for the weldability of types 304L and 316L stainless steel. *Practical Failure Analysis*, 1(4): 61–68, 2001. DOI: 10.1007/BF02715336.
- [25] Y. B. Sun und J. E. Indacochea. Hydrogen induced cracking in cold worked AISI 4140 steel welds. *Journal of Materials Science*, 23(7): 2339–2347, 1988. DOI: 10.1007/BF01111885.
- [26] S. Liu und J. Indacochea. Weldability of steels. In *Properties and selection: Irons, steels, and high-performance alloys*. ASM International, 1990. ISBN 978-1-62708-161-0.
- [27] S. Kou. *Welding metallurgy*. John Wiley & Sons, Hoboken, Auflage 2, 2003. ISBN 978-0-471-43491-7.
- [28] C. C. Silva, V. H. de Albuquerque, C. R. Moura, W. M. Aguiar und J. P. Farias. Evaluation of AISI 4140 Steel Repair Without Post-Weld Heat Treatment. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 18(3): 324–331, 2009. DOI: 10.1007/s11665-008-9294-5.
- [29] DIN EN ISO 683-1:2018-09: *Für eine Wärmebehandlung bestimmte Stähle, legierte Stähle und Automatenstähle - Teil 1: Unlegierte Vergütungsstähle*. Beuth Verlag GmbH, Berlin, Deutschland, 2018.

- [30] DIN EN ISO 683-2:2018-09: *Für eine Wärmebehandlung bestimmte Stähle, legierte Stähle und Automatenstähle - Teil 2: Legierte Vergütungsstähle*. Beuth Verlag GmbH, Berlin, Deutschland, 2018.
- [31] W. Wang und S. Kelly. A Metallurgical Evaluation of the Powder-Bed Laser Additive Manufactured 4140 Steel Material. *JOM*, 68(3):869–875, 2016. DOI: 10.1007/s11837-015-1804-y.
- [32] J. Schlegel. *The World of Steel: On the History, Production and Use of a Basic Material*. Springer Fachmedien, Wiesbaden, 2023. ISBN 978-3-658-39732-6 978-3-658-39733-3.
- [33] P. Schübler, B. Dollhofer, C. Krämer, L. Englert, F. Hinrichs, V. Schulze und S. Dietrich. Influence of base plate preheating temperature on fatigue strength of AISI 4140 manufactured by laser powder bed fusion. *Journal of Materials Research and Technology*, 35:1358–1368, 2025. DOI: 10.1016/j.jmrt.2025.01.073.
- [34] ASM Handbook Committee. *Properties and selection: Irons, steels, and high-performance alloys*. ASM International, 1990. ISBN 978-1-62708-161-0.
- [35] J. L. Dossett und G. E. Totten. *Heat Treating of Irons and Steels*, Band 4D. ASM International, 2014. ISBN 978-1-62708-168-9.
- [36] D. A. Porter, K. E. Easterling und M. Y. Sherif. *Phase transformations in metals and alloys*. CRC Press, Boca Raton, Auflage 3, 2009. ISBN 978-1-4200-6210-6.
- [37] H. I. Aaronson, M. Enomoto und J. K. Lee. *Mechanisms of Diffusional Phase Transformations in Metals and Alloys*. CRC Press, Boca Raton, 2016. ISBN 978-0-429-11132-7.
- [38] G. Kostorz. *Phase Transformations in Materials*. Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 2001. ISBN 978-3-527-30256-7.

- [39] M. Hillert und J. Ågren. On the definitions of paraequilibrium and orthoequilibrium. *Scripta Materialia*, 50(5):697–699, 2004. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2003.11.020.
- [40] G. Ghosh und G. B. Olson. Precipitation of paraequilibrium cementite: Experiments, and thermodynamic and kinetic modeling. *Acta Materialia*, 50(8):2099–2119, 2002. DOI: 10.1016/S1359-6454(02)00054-X.
- [41] H. K. D. H. Bhadeshia. *Theory of Transformations in Steels*. CRC Press, Boca Raton, 2021. ISBN 978-1-003-05678-2.
- [42] J. W. Christian. *The Theory of Transformation in Metals and Alloys*. Pergamon Press, Auflage 2, 2002. ISBN 978-0-08-044019-4.
- [43] M. Perez und A. Deschamps. Microscopic modelling of simultaneous two-phase precipitation: application to carbide precipitation in low-carbon steels. *Materials Science and Engineering: A*, 360(1):214–219, 2003. DOI: 10.1016/S0921-5093(03)00431-3.
- [44] M. Perez. Gibbs–Thomson effects in phase transformations. *Scripta Materialia*, 52(8):709–712, 2005. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2004.12.026.
- [45] U. G. Gang, J. C. Lee und W. J. Nam. Effect of prior microstructures on the behavior of cementite particles during subcritical annealing of medium carbon steels. *Metals and Materials International*, 15(5):719–725, 2009. DOI: 10.1007/s12540-009-0719-3.
- [46] C. Ji, J.-l. Yao und M.-y. Zhu. Effect of Ostwald ripening of carbide particles on mechanical properties of SCM435 steel during subcritical annealing. *Journal of Iron and Steel Research International*, 25(7): 724–731, 2018. DOI: 10.1007/s42243-018-0105-4.
- [47] A. E. Nehrenberg. The growth of austenite as related to prior structure. *JOM*, 2(1):162–174, 1950. DOI: 10.1007/BF03398992.
- [48] G. Speich, A. Szirmai und M. Richards. Formation of austenite from ferrite and ferrite-carbide aggregates. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 245, 1969. ISSN 0543-5722.

- [49] H. D. Alvarenga, N. Van Steenberge, J. Sietsma und H. Terryn. The Kinetics of Formation and Decomposition of Austenite in Relation to Carbide Morphology. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 48(2): 828–840, 2017. DOI: 10.1007/s11661-016-3874-z.
- [50] G. A. Roberts und R. F. Mehl. The mechanism and the rate of formation of austenite from ferrite-cementite aggregates. *Transactions of the American Society for Metals (Trans. A.S.M.)*, 31:613–650, 1943.
- [51] S. Papaefthymiou, M. Bouzouni und R. H. Petrov. Study of Carbide Dissolution and Austenite Formation during Ultra-Fast Heating in Medium Carbon Chromium Molybdenum Steel. *Metals*, 8(8):646, 2018. DOI: 10.3390/met8080646.
- [52] T. Mioković, J. Schwarzer, V. Schulze, O. Vöhringer und D. Löhe. Description of short time phase transformations during the heating of steels based on high-rate experimental data. *Journal de Physique IV*, 120: 591–598, 2004. DOI: 10.1051/jp4:2004120068.
- [53] T. Mioković, V. Schulze, O. Vöhringer und D. Löhe. Prediction of phase transformations during laser surface hardening of AISI 4140 including the effects of inhomogeneous austenite formation. *Materials Science and Engineering: A*, 435–436:547–555, 2006. DOI: 10.1016/j.msea.2006.07.037.
- [54] T. Mioković, V. Schulze, O. Vöhringer und D. Löhe. Influence of cyclic temperature changes on the microstructure of AISI 4140 after laser surface hardening. *Acta Materialia*, 55(2):589–599, 2007. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.08.052.
- [55] F. C. Cerda, C. Goulas, I. Sabirov, S. Papaefthymiou, A. Monsalve und R. H. Petrov. Microstructure, texture and mechanical properties in a low carbon steel after ultrafast heating. *Materials Science and Engineering: A*, 672:108–120, 2016. DOI: 10.1016/j.msea.2016.06.056.

- [56] F. M. Castro Cerda, I. Sabirov, C. Goulas, J. Sietsma, A. Monsalve und R. H. Petrov. Austenite formation in 0.2% C and 0.45% C steels under conventional and ultrafast heating. *Materials & Design*, 116:448–460, 2017. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.12.009.
- [57] S. Papaefthymiou, C. Goulas, F. M. Castro Cerda, N. Geerlofs und R. Petrov. The Effect of Heating Rate on the Microstructure of a Soft-Annealed Medium Carbon Steel. *steel research international*, 88(10): 1700158, 2017. DOI: 10.1002/srin.201700158.
- [58] J. Orlich, A. Rose und P. Wiest. *Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle: Zeit - Temperatur - Austenitisierung - Schaubilder*, Band 3. Stahleisen, Düsseldorf, 1973. ISBN 978-3-514-00119-0.
- [59] G. Kurdumoff und E. Kaminsky. X-Ray Studies of the Structure of Quenched Carbon Steel. *Nature*, 122(3074):475–476, 1928. DOI: 10.1038/122475a0.
- [60] C. S. Roberts. Effect of Carbon on the Volume Fractions and Lattice Parameters Of Retained Austenite and Martensite. *JOM*, 5(2):203–204, 1953. DOI: 10.1007/BF03397477.
- [61] A. R. Marder und G. Krauss. Morphology of martensite in iron-carbon alloys. *ASM Transactions Quarterly*, 60(4), 1967. ISSN 0097-3912.
- [62] A. R. Marder. Formation of low-carbon martensite in iron-carbon alloys. *ASM Transactions Quarterly*, 62(4), 1969. ISSN 0097-3912.
- [63] G. Krauss und A. R. Marder. The morphology of martensite in iron alloys. *Metallurgical Transactions*, 2(9):2343–2357, 1971. DOI: 10.1007/BF02814873.
- [64] S. Morito, H. Tanaka, R. Konishi, T. Furuhashi und T. Maki. The morphology and crystallography of lath martensite in Fe-C alloys. *Acta Materialia*, 51(6):1789–1799, 2003. DOI: 10.1016/S1359-6454(02)00577-3.

- [65] L. Ambrosini und S. Bahadur. Erosion of AISI 4140 steel. *Wear*, 117(1): 37–48, 1987. DOI: 10.1016/0043-1648(87)90243-2.
- [66] R. N. Caron und G. Krauss. The tempering of Fe-C lath martensite. *Metallurgical Transactions*, 3(9):2381–2389, 1972. DOI: 10.1007/BF02647041.
- [67] G. R. Speich und W. C. Leslie. Tempering of steel. *Metallurgical Transactions*, 3(5):1043–1054, 1972. DOI: 10.1007/BF02642436.
- [68] D. Dengel. Kurzzeitanlassen von Stahl. *HTM Journal of Heat Treatment and Materials*, 39(5):182–193, 1984. DOI: 10.1515/htm-1984-390502.
- [69] M. Gruber, G. Ressel, S. Ploberger, S. Marsoner und R. Ebner. Characterization of the effect of cryogenic treatment on the tempering behavior of a secondary hardening high Co-Ni steel. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 119(1):012018, 2016. DOI: 10.1088/1757-899X/119/1/012018.
- [70] N. Seljakow. The Nature of Martensite. *Nature*, 123(3093):204–205, 1929. DOI: 10.1038/123204a0.
- [71] V. Läßle. *Wärmebehandlung des Stahls: Grundlagen, Verfahren und Werkstoffe*. Bibliothek des technischen Wissens. Verlag Europa-Lehrmittel, Haan-Gruiten, Auflage 9, 2006. ISBN 978-3-8085-1309-5.
- [72] M. K. Miller, P. A. Beaven und G. D. W. Smith. A study of the early stages of tempering of iron-carbon martensites by atom probe field ion microscopy. *Metallurgical Transactions A*, 12(7):1197–1204, 1981. DOI: 10.1007/BF02642333.
- [73] G. V. Kurdjumov und A. G. Khachaturyan. Phenomena of carbon atom redistribution in martensite. *Metallurgical Transactions*, 3(5):1069–1076, 1972. DOI: 10.1007/BF02642438.
- [74] J. Wilde, A. Cerezo und G. D. W. Smith. Three-dimensional atomic-scale mapping of a cottrell atmosphere around a dislocation in iron. *Scripta Materialia*, 43(1):39–48, 2000. DOI: 10.1016/S1359-6462(00)00361-4.

- [75] H. Bhadeshia und R. W. K. Honeycombe. *Steels: microstructure and properties*. Elsevier Butterworth-Heinemann, Amsterdam, Auflage 4, 2017. ISBN 978-0-08-100272-8.
- [76] B. Hutchinson, J. Hagström, O. Karlsson, D. Lindell, M. Tornberg, F. Lindberg und M. Thuvander. Microstructures and hardness of as-quenched martensites (0.1–0.5%C). *Acta Materialia*, 59(14): 5845–5858, 2011. DOI: 10.1016/j.actamat.2011.05.061.
- [77] B. Hutchinson, D. Lindell und M. Barnett. Yielding Behaviour of Martensite in Steel. *ISIJ International*, 55(5):1114–1122, 2015. DOI: 10.2355/isijinternational.55.1114.
- [78] M. Jung, S.-J. Lee und Y.-K. Lee. Microstructural and Dilatational Changes during Tempering and Tempering Kinetics in Martensitic Medium-Carbon Steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 40(3): 551–559, 2009. DOI: 10.1007/s11661-008-9756-2.
- [79] A. Vieweg, E. Povoden-Karadeniz, G. Ressel, P. Prevedel, T. Wojcik, F. Mendez-Martin, A. Stark, J. Keckes und E. Kozeschnik. Phase evolution and carbon redistribution during continuous tempering of martensite studied with high resolution techniques. *Materials & Design*, 136: 214–222, 2017. DOI: 10.1016/j.matdes.2017.09.065.
- [80] Y. Xiao, W. Li, H. S. Zhao, X. W. Lu und X. J. Jin. Investigation of carbon segregation during low temperature tempering in a medium carbon steel. *Materials Characterization*, 117:84–90, 2016. DOI: 10.1016/j.matchar.2016.04.021.
- [81] F. G. Caballero, M. K. Miller, C. Garcia-Mateo, C. Capdevila und S. S. Babu. Redistribution of alloying elements during tempering of a nanocrystalline steel. *Acta Materialia*, 56(2):188–199, 2008. DOI: 10.1016/j.actamat.2007.09.018.
- [82] W. Mayer, S. Sackl, Y. V. Shan, S. Primig und E. Kozeschnik. Evolution of Precipitates and Martensite Substructure During Continuous Heat

- Treatment. *Materials Today: Proceedings*, 2:S619–S622, 2015. DOI: 10.1016/j.matpr.2015.07.360.
- [83] L. Cheng, C. M. Brakman, B. M. Korevaar und E. J. Mittemeijer. The tempering of iron- carbon martensite; dilatometric and calorimetric analysis. *Metallurgical Transactions A*, 19(10):2415–2426, 1988. DOI: 10.1007/BF02645469.
- [84] S. Primig und H. Leitner. Separation of overlapping retained austenite decomposition and cementite precipitation reactions during tempering of martensitic steel by means of thermal analysis. *Thermochimica Acta*, 526(1):111–117, 2011. DOI: 10.1016/j.tca.2011.09.001.
- [85] A. J. Clarke, J. Klemm-Toole, K. D. Clarke, D. R. Coughlin, D. T. Pierce, V. K. Euser, J. D. Poplawsky, B. Clausen, D. Brown, J. Almer, P. J. Gibbs, D. J. Alexander, R. D. Field, D. L. Williamson, J. G. Speer und G. Krauss. Perspectives on Quenching and Tempering 4340 Steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 51(10):4984–5005, 2020. DOI: 10.1007/s11661-020-05972-1.
- [86] G. Krauss. Tempering of Lath Martensite in Low and Medium Carbon Steels: Assessment and Challenges. *steel research international*, 88(10): 1700038, 2017. DOI: 10.1002/srin.201700038.
- [87] L. Morsdorf, A. Kashiwar, C. Kübel und C. Tasan. Carbon segregation and cementite precipitation at grain boundaries in quenched and tempered lath martensite. *Materials Science and Engineering: A*, 862:144369, 2023. DOI: 10.1016/j.msea.2022.144369.
- [88] F. A. Darwish, L. C. Pereira, C. Gatts und M. L. Graça. On the tempered martensite embrittlement in AISI 4140 low alloy steel. *Materials Science and Engineering: A*, 132:L5–L9, 1991. DOI: 10.1016/0921-5093(91)90388-4.

- [89] R. M. Horn und R. O. Ritchie. Mechanisms of tempered martensite embrittlement in low alloy steels. *Metallurgical Transactions A*, 9(8): 1039–1053, 1978. DOI: 10.1007/BF02652208.
- [90] J. A. Peters, J. V. Bee, B. Kolk und G. G. Garrett. On the mechanisms of tempered martensite embrittlement. *Acta Metallurgica*, 37(2):675–686, 1989. DOI: 10.1016/0001-6160(89)90251-4.
- [91] G. Ghosh, G. B. Olson und C. E. Campbell. An analytical electron microscopy study of paraequilibrium cementite precipitation in ultra-high-strength steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 30(3):501–512, 1999. DOI: 10.1007/s11661-999-0042-8.
- [92] T. Sakuma, N. Watanabe und T. Nishizawa. The Effect of Alloying Element on the Coarsening Behavior of Cementite Particles in Ferrite. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, 21(3):159–168, 1980. DOI: 10.2320/matertrans1960.21.159.
- [93] R. C. Thomson und M. K. Miller. Carbide precipitation in martensite during the early stages of tempering Cr- and Mo-containing low alloy steels. *Acta Materialia*, 46(6):2203–2213, 1998. DOI: 10.1016/S1359-6454(97)00420-5.
- [94] W. J. Nam, D. S. Kim und S. T. Ahn. Effects of alloying elements on microstructural evolution and mechanical properties of induction quenched-and-tempered steels. *Journal of Materials Science*, 38(17): 3611–3617, 2003. DOI: 10.1023/A:1025625330442.
- [95] S. Ghosh. Rate-controlling parameters in the coarsening kinetics of cementite in Fe–0.6C steels during tempering. *Scripta Materialia*, 63(3): 273–276, 2010. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2010.04.002.
- [96] J. Winczek und A. Kulawik. Dilatometric and hardness analysis of C45 steel tempering with different heating-up rates. *Metallurgija*, 51(1):9–12, 2012. DOI: 10.64486/m.

- [97] T. Furuhashi, K. Kobayashi und T. Maki. Control of Cementite Precipitation in Lath Martensite by Rapid Heating and Tempering. *ISIJ International*, 44(11):1937–1944, 2004. DOI: 10.2355/isijinternational.44.1937.
- [98] C. Revilla, B. López und J. M. Rodríguez-Ibabe. Carbide size refinement by controlling the heating rate during induction tempering in a low alloy steel. *Materials & Design (1980-2015)*, 62:296–304, 2014. DOI: 10.1016/j.matdes.2014.05.053.
- [99] D. Kaiser, B. Graaff, S. Dietrich und V. Schulze. Investigation of the precipitation kinetics and microstructure evolution of martensitic AISI 4140 steel during tempering with high heating rates. *Metallurgical Research & Technology*, 115(4):404, 2018. DOI: 10.1051/metal/2018026.
- [100] A. Nagao, K. Hayashi, K. Oi, S. Mitao und N. Shikanai. Refinement of Cementite in High Strength Steel Plates by Rapid Heating and Tempering. *Materials Science Forum*, 539–543:4720–4725, 2007. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.539-543.4720.
- [101] V. K. Judge, J. G. Speer, K. D. Clarke, K. O. Findley und A. J. Clarke. Rapid Thermal Processing to Enhance Steel Toughness. *Scientific Reports*, 8(1):445, 2018. DOI: 10.1038/s41598-017-18917-3.
- [102] A. E. Vieweg, G. Ressel, P. Raninger, P. Prevedel, S. Marsoner und R. Ebner. Comparing fast inductive tempering and conventional tempering: Effects on microstructure and mechanical properties. *Metallurgical Research & Technology*, 115(4):407, 2018. DOI: 10.1051/metal/2018015.
- [103] K. Kawasaki, T. Chiba und T. Yamazaki. Effect of Induction Heating Tempering for Strengthening and Toughening of Spring Steel. *Tetsu-to-Hagane*, 74(2):334–341, 1988. DOI: 10.2355/tetsutohagane1955.74.2_334.
- [104] X. Li, Y. H. Tan, H. J. Willy, P. Wang, W. Lu, M. Cagirici, C. Y. A. Ong, T. S. Heng, J. Wei und J. Ding. Heterogeneously tempered martensitic high strength steel by selective laser melting and its micro-lattice:

- Processing, microstructure, superior performance and mechanisms. *Materials & Design*, 178:107881, 2019. DOI: 10.1016/j.matdes.2019.107881.
- [105] H. M. Joo, W. C. Kim, Y. J. Kim, Y. C. Jo, M. G. Kang, J. Y. Lee, M. S. Kim, G. B. Kim, S. J. Kim und D. H. Kim. Effect of Laser Power on the Microstructure Evolution and Mechanical Properties of 20MnCr5 Low Alloy Steel Produced by Laser-Based Powder Bed Fusion. *Metals and Materials International*, 29(4):983–993, 2023. DOI: 10.1007/s12540-022-01294-6.
- [106] M. Abdelwahed, S. Bengtsson, R. Casati, A. Larsson, S. Petrella und M. Vedani. Effect of water atomization on properties of type 4130 steel processed by L-PBF. *Materials & Design*, 210:110085, 2021. DOI: 10.1016/j.matdes.2021.110085.
- [107] Y. R. Han, C. H. Zhang, X. Cui, S. Zhang, J. B. Zhang und Y. Liu. The formability and microstructure evolution of 24CrNiMo alloy steel fabricated by selective laser melting. *Vacuum*, 175:109297, 2020. DOI: 10.1016/j.vacuum.2020.109297.
- [108] W. Hearn, K. Lindgren, J. Persson und E. Hryha. In situ tempering of martensite during laser powder bed fusion of Fe-0.45C steel. *Materialia*, 23:101459, 2022. DOI: 10.1016/j.mtla.2022.101459.
- [109] D. Bartels, T. Novotny, A. Mohr, F. van Soest, O. Hentschel, C. Merklein und M. Schmidt. PBF-LB/M of Low-Alloyed Steels: Bainite-like Microstructures despite High Cooling Rates. *Materials*, 15(17):6171, 2022. DOI: 10.3390/ma15176171.
- [110] L. Xi, S. Chen, M. Wei, J. Liang, C. Liu und M. Wang. Microstructural Evolution and Properties of 24CrNiMoY Alloy Steel Fabricated by Selective Laser Melting. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 28(9):5521–5532, 2019. DOI: 10.1007/s11665-019-04280-z.

- [111] R. Seede, B. Zhang, A. Whitt, S. Picak, S. Gibbons, P. Flater, A. Elwany, R. Arroyave und I. Karaman. Effect of heat treatments on the microstructure and mechanical properties of an ultra-high strength martensitic steel fabricated via laser powder bed fusion additive manufacturing. *Additive Manufacturing*, 47:102255, 2021. DOI: 10.1016/j.addma.2021.102255.
- [112] W. Hearn, P. Harlin und E. Hryha. Development of powder bed fusion – laser beam process for AISI 4140, 4340 and 8620 low-alloy steel. *Powder Metallurgy*, 1–13, 2022. DOI: 10.1080/00325899.2022.2134083.
- [113] N. Haghdadadi, M. Laleh, M. Moyle und S. Primig. Additive manufacturing of steels: a review of achievements and challenges. *Journal of Materials Science*, 56(1):64–107, 2021. DOI: 10.1007/s10853-020-05109-0.
- [114] Y. Li und D. Gu. Parametric analysis of thermal behavior during selective laser melting additive manufacturing of aluminum alloy powder. *Materials & Design*, 63:856–867, 2014. DOI: 10.1016/j.matdes.2014.07.006.
- [115] U. Scipioni Bertoli, G. Guss, S. Wu, M. J. Matthews und J. M. Schoenung. In-situ characterization of laser-powder interaction and cooling rates through high-speed imaging of powder bed fusion additive manufacturing. *Materials & Design*, 135:385–396, 2017. DOI: 10.1016/j.matdes.2017.09.044.
- [116] T. Niendorf, S. Leuders, A. Riemer, H. A. Richard, T. Tröster und D. Schwarze. Highly Anisotropic Steel Processed by Selective Laser Melting. *Metallurgical Transactions B*, 44(4):794–796, 2013. DOI: 10.1007/s11663-013-9875-z.
- [117] M. A. Ryder, C. J. Montgomery, M. J. Brand, J. S. Carpenter, P. E. Jones, A. G. Spangenberg und D. A. Lados. Melt Pool and Heat Treatment Optimization for the Fabrication of High-Strength and High-Toughness Additively Manufactured 4340 Steel. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 30(7):5426–5440, 2021. DOI: 10.1007/s11665-021-05836-8.

- [118] H. J. Kim, Y. H. Kim und J. W. Morris, Jr. Thermal Mechanisms of Grain and Packet Refinement in a Lath Martensitic Steel. *ISIJ International*, 38 (11):1277–1285, 1998. DOI: 10.2355/isijinternational.38.1277.
- [119] J. Hidalgo und M. J. Santofimia. Effect of Prior Austenite Grain Size Refinement by Thermal Cycling on the Microstructural Features of As-Quenched Lath Martensite. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 47(11):5288–5301, 2016. DOI: 10.1007/s11661-016-3525-4.
- [120] C. Shi, S. Dietrich und V. Schulze. Parameter optimization and mechanical properties of 42CrMo4 manufactured by laser powder bed fusion. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 121(3-4): 1899–1913, 2022. DOI: 10.1007/s00170-022-09474-9.
- [121] L. Zumofen, A. Kirchheim und H.-J. Dellig. Laser powder bed fusion of 30CrNiMo8 steel for quenching and tempering: examination of the processability and mechanical properties. *Progress in Additive Manufacturing*, 5(1):75–81, 2020. DOI: 10.1007/s40964-020-00121-x.
- [122] E. Jelis, M. Hespos, S. L. Groeschler und R. Carpenter. L-PBF of 4340 Low Alloy Steel: Influence of Feedstock Powder, Layer Thickness, and Machine Maintenance. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 28(2):693–700, 2019. DOI: 10.1007/s11665-018-3739-2.
- [123] E. M. Hager, R. P. O’Hara, G. R. Cobb, P. J. Flater, E. J. Payton, V. Sinha, B. M. Doane und R. A. Kemnitz. Development of high density parts in the low-alloy, high-performance steel AF9628 using laser powder bed fusion. *Materials Science and Engineering: A*, 838:142656, 2022. DOI: 10.1016/j.msea.2022.142656.
- [124] C. Shi, V. Schulze und S. Dietrich. Influences of laser remelting on mechanical performances of AISI4140 steel. *Materials Science and Technology*, 2024. DOI: 10.1177/02670836231212614.
- [125] T. Fedina, J. Sundqvist, J. Powell und A. F. H. Kaplan. A comparative study of water and gas atomized low alloy steel powders for additive

- manufacturing. *Additive Manufacturing*, 36:101675, 2020. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101675.
- [126] A. Bobel, L. G. Hector, I. Chelladurai, A. K. Sachdev, T. Brown, W. A. Poling, R. Kubic, B. Gould, C. Zhao, N. Parab, A. Greco und T. Sun. In situ synchrotron X-ray imaging of 4140 steel laser powder bed fusion. *Materialia*, 6:100306, 2019. DOI: 10.1016/j.mtla.2019.100306.
- [127] W. Hearn, L. Cordova, A. Raza, A. Dahl-Jendelin und E. Hryha. Impact of powder properties on deoxidation and densification of carbon steels during powder bed fusion – Laser beam. *Powder Technology*, 431:119046, 2024. DOI: 10.1016/j.powtec.2023.119046.
- [128] W. Hearn und E. Hryha. Effect of Carbon Content on the Processability of Fe-C Alloys Produced by Laser Based Powder Bed Fusion. *Frontiers in Materials*, 8:547, 2022. DOI: 10.3389/fmats.2021.800021.
- [129] S. F. Nabavi, H. Dalir und A. Farshidianfar. A comprehensive review of recent advances in laser powder bed fusion characteristics modeling: metallurgical and defects. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 132(5):2233–2269, 2024. DOI: 10.1007/s00170-024-13491-1.
- [130] M. Markl und C. Körner. Multiscale Modeling of Powder Bed–Based Additive Manufacturing. *Annual Review of Materials Research*, 46(Volume 46, 2016):93–123, 2016. DOI: 10.1146/annurev-matsci-070115-032158.
- [131] Z. Luo und Y. Zhao. A survey of finite element analysis of temperature and thermal stress fields in powder bed fusion Additive Manufacturing. *Additive Manufacturing*, 21:318–332, 2018. DOI: 10.1016/j.addma.2018.03.022.
- [132] D. Sarkar, A. Kapil und A. Sharma. Advances in computational modeling for laser powder bed fusion additive manufacturing: A comprehensive review of finite element techniques and strategies. *Additive Manufacturing*, 85:104157, 2024. DOI: 10.1016/j.addma.2024.104157.

- [133] J. Liu, J. Ye, D. Silva Izquierdo, A. Vinel, N. Shamsaei und S. Shao. A review of machine learning techniques for process and performance optimization in laser beam powder bed fusion additive manufacturing. *Journal of Intelligent Manufacturing*, 34(8):3249–3275, 2023. DOI: 10.1007/s10845-022-02012-0.
- [134] S. L. Sing, C. N. Kuo, C. T. Shih, C. C. Ho und C. K. Chua. Perspectives of using machine learning in laser powder bed fusion for metal additive manufacturing. *Virtual and Physical Prototyping*, 16(3):372–386, 2021. DOI: 10.1080/17452759.2021.1944229.
- [135] M. D. Xames, F. K. Torsha und F. Sarwar. A systematic literature review on recent trends of machine learning applications in additive manufacturing. *Journal of Intelligent Manufacturing*, 34(6):2529–2555, 2023. DOI: 10.1007/s10845-022-01957-6.
- [136] G. K. Sarkon, B. Safaei, M. S. Kenevisi, S. Arman und Q. Zeeshan. State-of-the-Art Review of Machine Learning Applications in Additive Manufacturing; from Design to Manufacturing and Property Control. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 29(7):5663–5721, 2022. DOI: 10.1007/s11831-022-09786-9.
- [137] J. Goldak, A. Chakravarti und M. Bibby. A new finite element model for welding heat sources. *Metallurgical Transactions B*, 15(2):299–305, 1984. DOI: 10.1007/BF02667333.
- [138] S. Hocine, H. van Swygenhoven und S. van Petegem. Verification of selective laser melting heat source models with operando X-ray diffraction data. *Additive Manufacturing*, 37:101747, 2021. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101747.
- [139] Q. Zhang, J. Xie, Z. Gao, T. London, D. Griffiths und V. Oancea. A metallurgical phase transformation framework applied to SLM additive manufacturing processes. *Materials & Design*, 166:107618, 2019. DOI: 10.1016/j.matdes.2019.107618.

- [140] 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. *Optics & Laser Technology*, 109:297–312, 2019. DOI: 10.1016/j.optlastec.2018.08.012.
- [141] J. H. Hollomon und L. D. Jaffe. Time-Temperature Relations In Tempering Steel. *Trans. AIME*, 162:223–249, 1945.
- [142] C. Gomes, A.-L. Kaiser, J.-P. Bas, A. Aissaoui und M. Piette. Predicting the mechanical properties of a quenched and tempered steel thanks to a “tempering parameter”. *Revue de Métallurgie*, 107(7-8):293–302, 2010. DOI: 10.1051/metal/2010061.
- [143] M. F. Zaeh und G. Branner. Investigations on residual stresses and deformations in selective laser melting. *Production Engineering*, 4(1): 35–45, 2010. DOI: 10.1007/s11740-009-0192-y.
- [144] P. Prabhakar, W. J. Sames, R. Dehoff und S. S. Babu. Computational modeling of residual stress formation during the electron beam melting process for Inconel 718. *Additive Manufacturing*, 7:83–91, 2015. DOI: 10.1016/j.addma.2015.03.003.
- [145] R. J. Williams, C. M. Davies und P. A. Hooper. A pragmatic part scale model for residual stress and distortion prediction in powder bed fusion. *Additive Manufacturing*, 22:416–425, 2018. DOI: 10.1016/j.addma.2018.05.038.
- [146] E. R. Denlinger, J. Irwin und P. Michaleris. Thermomechanical Modeling of Additive Manufacturing Large Parts. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 136(6), 2014. DOI: 10.1115/1.4028669.
- [147] Y. Du, X. You, F. Qiao, L. Guo und Z. Liu. A model for predicting the temperature field during selective laser melting. *Results in Physics*, 12: 52–60, 2019. DOI: 10.1016/j.rinp.2018.11.031.

- [148] B. M. Marques, C. M. Andrade, D. M. Neto, M. C. Oliveira, J. L. Alves und L. F. Menezes. Numerical Analysis of Residual Stresses in Parts Produced by Selective Laser Melting Process. *Procedia Manufacturing*, 47:1170–1177, 2020. DOI: 10.1016/j.promfg.2020.04.167.
- [149] I. Noll, T. Bartel und A. Menzel. A computational phase transformation model for selective laser melting processes. *Computational Mechanics*, 66(6):1321–1342, 2020. DOI: 10.1007/s00466-020-01903-4.
- [150] M. Ehlers, H. Müller und D. Löhe. Simulation of stresses, residual stresses, and distortion in stepped cylinders of AISI 4140 due to martensitical hardening by immersion cooling. *Le Journal de Physique IV*, 09(PR9):Pr9–340, 1999. DOI: 10.1051/jp4:1999934.
- [151] C. Şimşir und C. H. Gür. A Review on Modeling and Simulation of Quenching. *Journal of ASTM International*, 6(2):1–29, 2009. DOI: 10.1520/JAI101766.
- [152] B. Smoljan, D. Iljkić und G. E. Totten. Mathematical Modeling and Simulation of Hardness of Quenched and Tempered Steel. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 46(6):2666–2673, 2015. DOI: 10.1007/s11663-015-0451-6.
- [153] M. Fisk, L. E. Lindgren, W. Datchary und V. Deshmukh. Modelling of induction hardening in low alloy steels. *Finite Elements in Analysis and Design*, 144:61–75, 2018. DOI: 10.1016/j.finel.2018.03.002.
- [154] D. Kaiser. *Experimentelle Untersuchung und Simulation des Kurzzeitanlassens unter Berücksichtigung thermisch randschichtgehärteter Zustände am Beispiel von 42CrMo4*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, 2019.
- [155] D. Kaiser, J. Damon, F. Mühl, B. Graaff, D. Kiefer, S. Dietrich und V. Schulze. Experimental investigation and finite-element modeling of the short-time induction quench-and-temper process of AISI 4140. *Journal of*

- Materials Processing Technology*, 279:116485, 2020. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2019.116485.
- [156] F. Mühl, J. Jarms, D. Kaiser, S. Dietrich und V. Schulze. Tailored bainitic-martensitic microstructures by means of inductive surface hardening for AISI 4140. *Materials & Design*, 195:108964, 2020. DOI: 10.1016/j.matdes.2020.108964.
- [157] B. Dollhofer, S. Dietrich und V. Schulze. Improvement of an Electromagnetic-Thermal-Mechanical Coupled Simulation for the Optimization of Complex Processes in Induction Hardening. *Netsushori (Extra-edition)*, 64:ex66–ex71, 2024. DOI: 10.14940/netsushori.64.ex66.
- [158] D. Kiefer, P. Schübler, F. Mühl und J. Gibmeier. Experimental and Simulative Studies on Residual Stress Formation for Laser-Beam Surface Hardening. *HTM Journal of Heat Treatment and Materials*, 74(1):23–35, 2019. DOI: 10.3139/105.110374.
- [159] P. Schübler, J. Damon, F. Mühl, S. Dietrich und V. Schulze. Laser surface hardening: A simulative study of tempering mechanisms on hardness and residual stress. *Computational Materials Science*, 221:112079, 2023. DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112079.
- [160] S. Hochreiter und J. Schmidhuber. Long Short-Term Memory. *Neural Computation*, 9(8):1735–1780, 1997. DOI: 10.1162/neco.1997.9.8.1735.
- [161] F. A. Gers, J. Schmidhuber und F. Cummins. Learning to Forget: Continual Prediction with LSTM. *Neural Computation*, 12(10): 2451–2471, 2000. DOI: 10.1162/089976600300015015.
- [162] K. Cho, B. van Merriënboer, D. Bahdanau und Y. Bengio. On the Properties of Neural Machine Translation: Encoder–Decoder Approaches. In D. Wu, M. Carpuat, X. Carreras und E. M. Vecchi, editors, *Proceedings of SSST-8, Eighth Workshop on Syntax, Semantics and Structure in Statistical Translation*, 103–111, Doha, Qatar, 2014. Association for Computational Linguistics.

- [163] J. Chung, C. Gulcehre, K. Cho und Y. Bengio. Empirical Evaluation of Gated Recurrent Neural Networks on Sequence Modeling. *arXiv*, arXiv:1412.3555, 2014. DOI: 10.48550/arXiv.1412.3555.
- [164] F. M. Salem. *Recurrent Neural Networks: From Simple to Gated Architectures*. Springer Nature Switzerland, Cham, 2022. ISBN 978-3-030-89928-8 978-3-030-89929-5.
- [165] T. Pfaff, M. Fortunato, A. Sanchez-Gonzalez und P. W. Battaglia. Learning Mesh-Based Simulation with Graph Networks. *arXiv*, arXiv:2010.03409, 2021. DOI: 10.48550/arXiv.2010.03409.
- [166] K. Chen, P. Zhang, H. Yan, G. Chen, T. Sun, Q. Lu, Y. Chen und H. Shi. A review of machine learning in additive manufacturing: design and process. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 135(3): 1051–1087, 2024. DOI: 10.1007/s00170-024-14543-2.
- [167] M. H. Nikooharf, M. Shirinbayan, M. Arabkoohi, N. Bahlouli, J. Fitoussi und K. Benfriha. Machine learning in polymer additive manufacturing: a review. *International Journal of Material Forming*, 17(6):52, 2024. DOI: 10.1007/s12289-024-01854-8.
- [168] G. Vashishtha, S. Chauhan, R. Zimroz, N. Yadav, R. Kumar und M. K. Gupta. Current Applications of Machine Learning in Additive Manufacturing: A Review on Challenges and Future Trends. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 32(4):2635–2668, 2025. DOI: 10.1007/s11831-024-10215-2.
- [169] C. B. Toprak und C. U. Dogruer. A Critical Review of Machine Learning Methods Used in Metal Powder Bed Fusion Process to Predict Part Properties. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, 25(2):429–452, 2024. DOI: 10.1007/s12541-023-00905-5.
- [170] K. Li, R. Ma, Y. Qin, N. Gong, J. Wu, P. Wen, S. Tan, D. Z. Zhang, L. E. Murr und J. Luo. A review of the multi-dimensional application of machine learning to improve the integrated intelligence of laser powder

- bed fusion. *Journal of Materials Processing Technology*, 318:118032, 2023. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2023.118032.
- [171] X. Qi, G. Chen, Y. Li, X. Cheng und C. Li. Applying Neural-Network-Based Machine Learning to Additive Manufacturing: Current Applications, Challenges, and Future Perspectives. *Engineering*, 5 (4):721–729, 2019. DOI: 10.1016/j.eng.2019.04.012.
- [172] N. Samadiani, A. S. Barnard, D. Gunasegaram und N. Fayyazifar. Best practices for machine learning strategies aimed at process parameter development in powder bed fusion additive manufacturing. *Journal of Intelligent Manufacturing*, 2024. DOI: 10.1007/s10845-024-02490-4.
- [173] Q. Lou. *Identification of Process-Structure-Property Relationships in Additively Manufactured Materials Using Machine Learning*. Dissertation, Pennsylvania State University, University Park, 2025.
- [174] D. Guirguis, C. Tucker und J. Beuth. Machine learning for real-time detection of local heat accumulation in metal additive manufacturing. *Materials & Design*, 241:112933, 2024. DOI: 10.1016/j.matdes.2024.112933.
- [175] M. Kuehne, K. Bartsch, B. Bossen und C. Emmelmann. Predicting melt track geometry and part density in laser powder bed fusion of metals using machine learning. *Progress in Additive Manufacturing*, 8(1):47–54, 2023. DOI: 10.1007/s40964-022-00387-3.
- [176] M. Raissi, P. Perdikaris und G. E. Karniadakis. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378:686–707, 2019. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
- [177] B. Peng und A. Panesar. Predicting Temperature Field for Metal Additive Manufacturing using PINN. *Solid Freeform Fabrication 2023*:

Proceedings of the 34th Annual International Solid Freeform Fabrication Symposium, 34:881–896, 2023.

- [178] S. Liao, T. Xue, J. Jeong, S. Webster, K. Ehmann und J. Cao. Hybrid thermal modeling of additive manufacturing processes using physics-informed neural networks for temperature prediction and parameter identification. *Computational Mechanics*, 72(3):499–512, 2023. DOI: 10.1007/s00466-022-02257-9.
- [179] Q. Zhu, Z. Liu und J. Yan. Machine learning for metal additive manufacturing: predicting temperature and melt pool fluid dynamics using physics-informed neural networks. *Computational Mechanics*, 67(2): 619–635, 2021. DOI: 10.1007/s00466-020-01952-9.
- [180] L. Yi, P. M. Simon, S. Ghansiyal, M. Glatt und J. C. Aurich. Simulation of the temperature gradient in laser-based powder bed fusion using machine learning. *Procedia CIRP*, 115:36–41, 2022. DOI: 10.1016/j.procir.2022.10.046.
- [181] K. L. Ness, A. Paul, L. Sun und Z. Zhang. Towards a generic physics-based machine learning model for geometry invariant thermal history prediction in additive manufacturing. *Journal of Materials Processing Technology*, 302:117472, 2022. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2021.117472.
- [182] S.-H. Wu, U. Tariq, R. Joy, M. A. Mahmood, A. W. Malik und F. Liou. A Robust Recurrent Neural Networks-Based Surrogate Model for Thermal History and Melt Pool Characteristics in Directed Energy Deposition. *Materials*, 17(17):4363, 2024. DOI: 10.3390/ma17174363.
- [183] M. Mozaffar, A. Paul, R. Al-Bahrani, S. Wolff, A. Choudhary, A. Agrawal, K. Ehmann und J. Cao. Data-driven prediction of the high-dimensional thermal history in directed energy deposition processes via recurrent neural networks. *Manufacturing Letters*, 18:35–39, 2018. DOI: 10.1016/j.mfglet.2018.10.002.

-
- [184] J. Y. Choi, S. M. Estalaki, D. Quispe, R. Zha, R. Rolark, M. Mozaffar und J. Cao. Transfer learning enabled geometry, process, and material agnostic RGNN for temperature prediction in directed energy deposition. *Additive Manufacturing*, 109:104876, 2025. DOI: 10.1016/j.addma.2025.104876.
- [185] M. Mozaffar, S. Liao, H. Lin, K. Ehmann und J. Cao. Geometry-agnostic data-driven thermal modeling of additive manufacturing processes using graph neural networks. *Additive Manufacturing*, 48:102449, 2021. DOI: 10.1016/j.addma.2021.102449.
- [186] ISO 13322-2:2021: *Particle size analysis - Image analysis methods - Part 2: Dynamic image analysis methods*. Internationale Organisation für Normung, 2021.
- [187] DIN EN ISO 6507-1:2023: *Metallische Werkstoffe - Härteprüfung nach Vickers - Teil 1: Prüfverfahren*. Beuth Verlag GmbH, Berlin, Deutschland, 2024.
- [188] DIN 66137-3:2019-09: *Bestimmung der Dichte fester Stoffe - Teil 3: Gasauftriebsverfahren*. Beuth Verlag GmbH, Berlin, Deutschland, 2019.
- [189] J. Schindelin, I. Arganda-Carreras, E. Frise, V. Kaynig, M. Longair, T. Pietzsch, S. Preibisch, C. Rueden, S. Saalfeld, B. Schmid, J.-Y. Tinevez, D. J. White, V. Hartenstein, K. Eliceiri, P. Tomancak und A. Cardona. Fiji: an open-source platform for biological-image analysis. *Nature Methods*, 9(7):676–682, 2012. DOI: 10.1038/nmeth.2019.
- [190] A. A. B. Sugden und H. K. D. H. Bhadeshia. Thermodynamic estimation of liquidus, solidus Ae 3 temperatures, and phase compositions for low alloy multicomponent steels. *Materials Science and Technology*, 5(10): 977–984, 1989. DOI: 10.1179/mst.1989.5.10.977.
- [191] P. Schübler, N. Nouri, V. Schulze und S. Dietrich. A novel multiscale process simulation to predict the impact of intrinsic heat treatment on local microstructure gradients and bulk hardness of AISI 4140 manufactured by

- laser powder bed fusion. *Virtual and Physical Prototyping*, 18(1): e2271455, 2023. DOI: 10.1080/17452759.2023.2271455.
- [192] S. van Bohemen und J. Sietsma. Martensite Formation in Partially and Fully Austenitic Plain Carbon Steels. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 40(5):1059–1068, 2009. DOI: 10.1007/s11661-009-9796-2.
- [193] M. Avrami. Kinetics of Phase Change. I General Theory. *The Journal of Chemical Physics*, 7(12):1103–1112, 1939. DOI: 10.1063/1.1750380.
- [194] M. Avrami. Kinetics of Phase Change. II Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei. *The Journal of Chemical Physics*, 8(2): 212–224, 1940. DOI: 10.1063/1.1750631.
- [195] M. Avrami. Granulation, Phase Change, and Microstructure Kinetics of Phase Change. III. *The Journal of Chemical Physics*, 9(2):177–184, 1941. DOI: 10.1063/1.1750872.
- [196] J. B. Austin und R. L. Rickett. Kinetics of the Decomposition of Austenite at Constant Temperature. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, 135:396, 1939.
- [197] M. Schwenk, J. Hoffmeister und V. Schulze. Experimental Determination of Process Parameters and Material Data for Numerical Modeling of Induction Hardening. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 22(7):1861–1870, 2013. DOI: 10.1007/s11665-013-0566-3.
- [198] P. Zehner und E. U. Schlünder. Wärmeleitfähigkeit von Schüttungen bei mäßigen Temperaturen. *Chemie Ingenieur Technik*, 42(14):933–941, 1970. DOI: 10.1002/cite.330421408.
- [199] S. Czink. *Untersuchung gradiertener Materialeigenschaften bei der additiven Fertigung von Bauteilen aus AlSi10Mg*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, 2024.

- [200] B. Wilthan, H. Reschab, R. Tanzer, W. Schützenhöfer und G. Pottlacher. Thermophysical Properties of a Chromium–Nickel–Molybdenum Steel in the Solid and Liquid Phases. *International Journal of Thermophysics*, 29 (1):434–444, 2008. DOI: 10.1007/s10765-007-0300-1.
- [201] T. M. Wischeropp, C. Emmelmann, M. Brandt und A. Pateras. Measurement of actual powder layer height and packing density in a single layer in selective laser melting. *Additive Manufacturing*, 28:176–183, 2019. DOI: 10.1016/j.addma.2019.04.019.
- [202] M. Rangapuram, S. Babalola, J. W. Newkirk, L. N. Bartlett, F. W. Liou, K. Chandrashekhara und S. R. Cluff. Multiphysics modeling and experimental validation of high-strength steel in laser powder bed fusion process. *Progress in Additive Manufacturing*, 9(6):1697–1713, 2024. DOI: 10.1007/s40964-023-00532-6.
- [203] P. Peyre, P. Aubry, R. Fabbro, R. Neveu und A. Longuet. Analytical and numerical modelling of the direct metal deposition laser process. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 41(2):025403, 2008. DOI: 10.1088/0022-3727/41/2/025403.
- [204] R. J. Williams und D. Zipser. A Learning Algorithm for Continually Running Fully Recurrent Neural Networks. *Neural Computation*, 1(2): 270–280, 1989. DOI: 10.1162/neco.1989.1.2.270.
- [205] P. Schübler, V. Schulze und S. Dietrich. Deep Learning Based Prediction of Thermal History During The Laser-Based Powder Bed Fusion (PBF-LB) Additive Manufacturing Process. In *Solid Freeform Fabrication 2024*, Austin, TX, 2024. University of Texas at Austin.
- [206] C. D. Boley, S. C. Mitchell, A. M. Rubenchik und S. S. Q. Wu. Metal powder absorptivity: modeling and experiment. *Applied optics*, 55(23): 6496–500, 2016. DOI: 10.1364/AO.55.006496.
- [207] A. Rubenchik, S. Wu, S. Mitchell, I. Golosker, M. LeBlanc und N. Peterson. Direct measurements of temperature-dependent laser

- absorptivity of metal powders. *Applied optics*, 54(24):7230–3, 2015. DOI: 10.1364/AO.54.007230.
- [208] J. Trapp, A. M. Rubenchik, G. Guss und M. J. Matthews. In situ absorptivity measurements of metallic powders during laser powder-bed fusion additive manufacturing. *Applied Materials Today*, 9:341–349, 2017. DOI: 10.1016/j.apmt.2017.08.006.
- [209] DIN EN ISO 18265:2014-02: *Metallische Werkstoffe – Umwertung von Härtewerten*. Beuth Verlag GmbH, Berlin, Deutschland, 2014.
- [210] P. S. Cook und A. B. Murphy. Simulation of melt pool behaviour during additive manufacturing: Underlying physics and progress. *Additive Manufacturing*, 31:100909, 2020. DOI: 10.1016/j.addma.2019.100909.
- [211] C. Bierwisch, A. Butz, B. Dietemann, A. Wessel, T. Najuch und S. Mohseni-Mofidi. PBF-LB/M multiphysics process simulation from powder to mechanical properties. *Procedia CIRP*, 111:37–40, 2022. DOI: 10.1016/j.procir.2022.08.111.

Eigene Publikationen

D. Kiefer, **P. Schübler**, F. Mühl und J. Gibmeier. Experimental and Simulative Studies on Residual Stress Formation for Laser-Beam Surface Hardening*. *HTM Journal of Heat Treatment and Materials*, 74(1):23–35, 2019. doi: 10.3139/105.110374.

J. Damon, S. Czink, **P. Schübler**, S. Antusch, K. Alexander, S. Send, D. Dapprich, D. Dietrich und V. Schulze. Mechanical surface treatment of EBM Ti6Al4V components: Effects of the resulting surface layer state on fatigue mechanisms and service life. *Materials Science and Engineering: A*, 849:143422, 2022. doi: 10.1016/j.msea.2022.143422

P. Schübler, J. Franke, S. Czink, S. Antusch, D. Mayer, S. Laube, T. Hanemann, V. Schulze und S. Dietrich. Characterization of the Metal Fused Filament Fabrication Process for Manufacturing of Pure Copper Inductors. *Materials*, 16(20):6678, 2023. doi: 10.3390/ma16206678.

P. Schübler, J. Damon, F. Mühl, S. Dietrich und V. Schulze. Laser surface hardening: A simulative study of tempering mechanisms on hardness and residual stress. *Computational Materials Science*, 221:112079, 2023. doi: 10.1016/j.commatsci.2023.112079.

J. Damon, **P. Schübler**, F. Mühl, S. Dietrich und V. Schulze. Short-time induction heat treatment of high speed steel AISI M2: Laboratory proof of concept and application-related component tests. *Materials & Design*, 230:111991, 2023. doi: 10.1016/j.matdes.2023.111991

P. Schübler, N. Nouri, V. Schulze und S. Dietrich. A novel multiscale process simulation to predict the impact of intrinsic heat treatment on local microstructure gradients and bulk hardness of AISI 4140 manufactured by laser powder bed fusion. *Virtual and Physical Prototyping*, 18(1):e2271455, 2023. doi: 10.1080/17452759.2023.2271455.

N. Nouri, Q. Li, R. Schneider, J. Damon, **P. Schübler**, S. Laube, E. Müller, G. Graf, V. Schulze und S. Dietrich. Characterization of phase transformation and strengthening mechanisms in a novel maraging steel produced using laser-based powder bed fusion. *Materials Characterization*, 207:113522, 2024. doi: 10.1016/j.matchar.2023.113522

P. Schübler, N. Nouri, P. Lapouge, S. Dietrich und V. Schulze. Comparison of Hardness and Residual Stresses in Multiline Laser Surface Hardening and Induction Hardening. *28th IFTHSE Congress (Netsushori Extra-edition)*, 64:ex72-ex77, 2024. doi: 10.14940/netsushori.64.ex72.

P. Schübler, V. Schulze und S. Dietrich. Deep Learning Based Prediction of Thermal History During The Laser-Based Powder Bed Fusion (PBF-LB) Additive Manufacturing Process. *35th Solid Freeform Fabrication Symposium (SFF)*, 2024. doi: 10.26153/tsw/58117.

S. Meyer, L. Englert, **P. Schübler**, V. Schulze und S. Dietrich. Controlling the mechanical properties of laser powder bed fusion manufactured AlSi10Mg using optimized oscillating scan paths. *Progress in Additive Manufacturing*, 10:5235-5249, 2024. doi: 10.1007/s40964-024-00899-0.

P. Schübler, B. Dollhofer, C. Krämer, L. Englert, F. Hinrichs, V. Schulze und S. Dietrich. Influence of base plate preheating temperature on fatigue strength of AISI 4140 manufactured by laser powder bed fusion. *Journal of Materials Research and Technology*, 35:1358–1368, 2025. doi: 10.1016/j.jmrt.2025.01.073.

P. Schübler, V. Schulze und S. Dietrich. Influence of As-Built Microstructure and Thermal Post-Processing on the Fatigue Strength of AISI 4140 Manufactured by Laser Powder Bed Fusion. *Quenching and Distortion Engineering Conference (QDE)*, 2025. doi: 10.31399/asm.cp.qde2025p0068.

Abkürzungs- und Symbolverzeichnis

ΔHV	Abweichung der resultierenden Härte
ΔT_{End}	Temperaturdifferenz des letzten Zeitschritt
ΔT_{Max}	Abweichung der Maximaltemperatur
.lsr	Dateiformat: Autodesk Netfabb Export
.odb	Dateiformat: Abaqus Ergebnisdatei
.slm	Dateiformat: Nikon SLM Solutions
.step	Dateiformat: Standardisiertes Format zum Austausch von 3D-CAD-Produktdateien
.stl	Dateiformat: Standard Tessellation Language
AM	Additive Fertigung
AS0	0. Anlassstufe
AS1	1. Anlassstufe
AS3	3. Anlassstufe
BPT	Bauplattentemperatur
BSE	Rückstreuelektronen
CAD	Computer Aided Design
CFD	Numerische Strömungsmechanik
CNN	Convolutional Neural Network
DED	Direct Energy Deposition
DTR	Decision Tree Regression

EBSD	Elektronenrückstreubeugung
Fe ₃ C	Zementit
FEM	Finite-Elemente-Methode
FGM	Functional Graded Materials
FNN	Feedforward Neural Network
G-Code	Geometric Code
GNN	Graph Neural Network
GRU	Gated Recurrent Unit
hdp	Hexagonal dichteste Packung
HZ	Härtezone
JMAK	Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov Gleichung
kfz	Kubisch flächenzentriert
KI	Künstliche Intelligenz
krz	Kubisch raumzentriert
LEQ	Flächenäquivalente Laserquelle
LEQ	Linienäquivalente Laserquelle
LR	Linear Regression
LSTM	Long Short-Term Memory
MAE	Mittlerer absoluter Fehler
MFB	Mehrfachbelichtung
ML	Maschinelles Lernen
MLP	Multilayer Perceptron
MSE	Mittlerer quadratischer Fehler
PBF-LB	Pulverbettbasiertes Laserstrahlschmelzen
PFI	Permutation Feature Importance
PINN	Physics-Informed Neural Network
REM	Rasterelektronenmikroskop

RFR	Random Forrest Regression	
RMSE	Wurzel des quadratischen Fehlers	
RNN	Recurrent Neural Network	
SE	Sekundärelektronen	
TME	Anlassversprödung	
α_{SV}	Schraffurwinkel	°
ω_{Cr}	Chromäquivalent	-
ω_{Ni}	Nickeläquivalent	-
$A_{C, hom}$	Temperatur mit homogener Kohlenstoffverteilung	K
A_{C1}	Temperatur des Beginns der Austenitbildung	K
A_{C3}	Temperatur des Endes der Austenitbildung	K
d_{Fokus}	Laserstrahldurchmesser	mm
h	Schraffurdistanz	mm
l_{SV}	Scanvektorstärke	mm
M_F	Martensitfinishtemperatur	K
M_S	Martensitstarttemperatur	K
P	Laserleistung	W
P_{HJ}	Anlassparameter nach Hollomon-Jaffe	-
r_{Fokus}	Laserstrahlradius	mm
T_L	Liquidustemperatur	K
T_S	Solidustemperatur	K
t_S	Nominelle Schichthöhe	mm
v	Scangeschwindigkeit	$mm s^{-1}$
w_x	Volumenanteil der Phase x	-
CEV	Kohlenstoffäquivalent	-
LED	Linienenergiedichte	$J mm^{-1}$
VED	Volumenenergiedichte	$J mm^{-3}$

A Anhang

Tabelle A.1: Vollständige Liste aller verwendeten Prozessparameterkombinationen.

	P / W	$v / \text{mm s}^{-1}$	h / mm	t_S / mm	$d_{\text{Fokus}} / \text{mm}$
P001	200	400	0,14	0,03	0,08
P002	250	500	0,14	0,03	0,08
P003	250	700	0,1	0,03	0,08
P004	300	600	0,14	0,03	0,08
P005	175	500	0,1	0,03	0,08
P006	250	600	0,12	0,03	0,08
P007	200	500	0,12	0,03	0,08
P008	200	600	0,1	0,03	0,08
P009	275	700	0,12	0,03	0,08
P010	275	600	0,14	0,03	0,08
P011	225	500	0,14	0,03	0,08
P012	225	700	0,1	0,03	0,08
P013	175	400	0,14	0,03	0,08
P014	225	600	0,12	0,03	0,08
P015	250	800	0,1	0,03	0,08
P016	300	700	0,14	0,03	0,08
P017	150	500	0,1	0,03	0,08
P018	250	700	0,12	0,03	0,08

Weiterführung der Tabelle A.1.					
	P / W	$v / \text{mm s}^{-1}$	h / mm	t_S / mm	$d_{\text{Fokus}} / \text{mm}$
P019	250	600	0,14	0,03	0,08
P020	175	500	0,12	0,03	0,08
P021	175	600	0,1	0,03	0,08
P022	275	800	0,12	0,03	0,08
P023	200	500	0,14	0,03	0,08
P024	200	700	0,1	0,03	0,08
P025	225	800	0,1	0,03	0,08
P026	275	700	0,14	0,03	0,08
P027	200	600	0,12	0,03	0,08
P028	250	900	0,1	0,03	0,08
P029	225	700	0,12	0,03	0,08
P030	150	400	0,14	0,03	0,08
P031	300	800	0,14	0,03	0,08
P032	225	600	0,14	0,03	0,08
P033	250	800	0,12	0,03	0,08
P034	250	700	0,14	0,03	0,08
P035	275	900	0,12	0,03	0,08
P036	150	500	0,12	0,03	0,08
P037	175	500	0,14	0,03	0,08
P038	125	500	0,1	0,03	0,08
P039	150	600	0,1	0,03	0,08
P040	175	700	0,1	0,03	0,08
P041	225	900	0,1	0,03	0,08
P042	250	1000	0,1	0,03	0,08
P043	200	800	0,1	0,03	0,08

Weiterführung der Tabelle A.1.

	P / W	$v / \text{mm s}^{-1}$	h / mm	t_S / mm	$d_{\text{Fokus}} / \text{mm}$
P044	275	800	0,14	0,03	0,08
P045	175	600	0,12	0,03	0,08
P046	200	700	0,12	0,03	0,08
P047	200	600	0,14	0,03	0,08
P048	300	900	0,14	0,03	0,08
P049	225	800	0,12	0,03	0,08
P050	250	900	0,12	0,03	0,08
P051	225	700	0,14	0,03	0,08
P052	275	1000	0,12	0,03	0,08
P053	250	1100	0,1	0,03	0,08
P054	225	1000	0,1	0,03	0,08
P055	125	400	0,14	0,03	0,08
P056	250	800	0,14	0,03	0,08
P057	200	900	0,1	0,03	0,08
P058	175	800	0,1	0,03	0,08
P059	275	900	0,14	0,03	0,08
P060	150	500	0,14	0,03	0,08
P061	300	1000	0,14	0,03	0,08
P062	150	700	0,1	0,03	0,08
P063	125	500	0,12	0,03	0,08
P064	250	1000	0,12	0,03	0,08
P065	150	600	0,12	0,03	0,08
P066	175	700	0,12	0,03	0,08
P067	200	800	0,12	0,03	0,08
P068	225	900	0,12	0,03	0,08

Weiterführung der Tabelle A.1.					
	P / W	$v / \text{mm s}^{-1}$	h / mm	t_S / mm	$d_{\text{Fokus}} / \text{mm}$
P069	275	1100	0,12	0,03	0,08
P070	125	600	0,1	0,03	0,08
P071	175	600	0,14	0,03	0,08
P072	225	1100	0,1	0,03	0,08
P073	200	700	0,14	0,03	0,08
P074	225	800	0,14	0,03	0,08
P075	100	500	0,1	0,03	0,08
P076	200	1000	0,1	0,03	0,08
P077	250	900	0,14	0,03	0,08
P078	275	1000	0,14	0,03	0,08
P079	175	900	0,1	0,03	0,08
P080	250	1100	0,12	0,03	0,08
P081	225	1000	0,12	0,03	0,08
P082	150	800	0,1	0,03	0,08
P083	200	900	0,12	0,03	0,08
P084	175	800	0,12	0,03	0,08
P085	200	1100	0,1	0,03	0,08
P086	150	700	0,12	0,03	0,08
P087	100	400	0,14	0,03	0,08
P088	125	500	0,14	0,03	0,08
P089	175	700	0,14	0,03	0,08
P090	200	800	0,14	0,03	0,08
P091	225	900	0,14	0,03	0,08
P092	250	1000	0,14	0,03	0,08
P093	125	700	0,1	0,03	0,08

Weiterführung der Tabelle A.1.

	P / W	$v / \text{mm s}^{-1}$	h / mm	t_S / mm	$d_{\text{Fokus}} / \text{mm}$
P094	150	600	0,14	0,03	0,08
P095	175	1000	0,1	0,03	0,08
P096	125	600	0,12	0,03	0,08
P097	225	1100	0,12	0,03	0,08
P098	100	500	0,12	0,03	0,08
P099	200	1000	0,12	0,03	0,08
P100	100	600	0,1	0,03	0,08
P101	150	900	0,1	0,03	0,08
P102	175	900	0,12	0,03	0,08
P103	225	1000	0,14	0,03	0,08
P104	175	1100	0,1	0,03	0,08
P105	200	900	0,14	0,03	0,08
P106	150	800	0,12	0,03	0,08
P107	175	800	0,14	0,03	0,08
P108	125	800	0,1	0,03	0,08
P109	150	700	0,14	0,03	0,08
P110	200	1100	0,12	0,03	0,08
P111	75	500	0,1	0,03	0,08
P112	150	1000	0,1	0,03	0,08
P113	125	700	0,12	0,03	0,08
P114	125	600	0,14	0,03	0,08
P115	175	1000	0,12	0,03	0,08
P116	100	500	0,14	0,03	0,08
P117	200	1000	0,14	0,03	0,08
P118	100	700	0,1	0,03	0,08

Weiterführung der Tabelle A.1.					
	P / W	$v / \text{mm s}^{-1}$	h / mm	t_S / mm	$d_{\text{Fokus}} / \text{mm}$
P119	150	900	0,12	0,03	0,08
P120	175	900	0,14	0,03	0,08
P121	100	600	0,12	0,03	0,08
P122	125	900	0,1	0,03	0,08
P123	150	1100	0,1	0,03	0,08
P124	150	800	0,14	0,03	0,08
P125	175	1100	0,12	0,03	0,08
P126	125	800	0,12	0,03	0,08
P127	125	700	0,14	0,03	0,08
P128	75	500	0,12	0,03	0,08
P129	150	1000	0,12	0,03	0,08
P130	175	1000	0,14	0,03	0,08
P131	75	600	0,1	0,03	0,08
P132	125	1000	0,1	0,03	0,08
P133	100	800	0,1	0,03	0,08
P134	100	700	0,12	0,03	0,08
P135	100	600	0,14	0,03	0,08
P136	150	900	0,14	0,03	0,08
P137	125	900	0,12	0,03	0,08
P138	150	1100	0,12	0,03	0,08
P139	125	1100	0,1	0,03	0,08
P140	125	800	0,14	0,03	0,08
P141	100	900	0,1	0,03	0,08
P142	150	1000	0,14	0,03	0,08
P143	75	700	0,1	0,03	0,08

Weiterführung der Tabelle A.1.

	P / W	$v / \text{mm s}^{-1}$	h / mm	t_S / mm	$d_{\text{Fokus}} / \text{mm}$
P144	125	1000	0,12	0,03	0,08
P145	75	600	0,12	0,03	0,08
P146	100	800	0,12	0,03	0,08
P147	100	700	0,14	0,03	0,08
P148	50	500	0,1	0,03	0,08
P149	100	1000	0,1	0,03	0,08
P150	125	900	0,14	0,03	0,08
P151	125	1100	0,12	0,03	0,08
P152	75	800	0,1	0,03	0,08
P153	100	900	0,12	0,03	0,08
P154	100	1100	0,1	0,03	0,08
P155	75	700	0,12	0,03	0,08
P156	100	800	0,14	0,03	0,08
P157	125	1000	0,14	0,03	0,08
P158	100	1000	0,12	0,03	0,08
P159	50	600	0,1	0,03	0,08
P160	100	900	0,14	0,03	0,08
P161	75	800	0,12	0,03	0,08
P162	100	1100	0,12	0,03	0,08