

体育器材钛合金定向能量沉积 β 晶粒生长跨尺度建模

刘 敏¹ 陈明威² 尤 佳¹

1. 武汉体育学院, 湖北 武汉 430079

2. 华中科技大学, 湖北 武汉 430074

[摘要] 钛合金定向能量沉积过程中, 复杂热源、高冷却速率及多次热循环显著影响温度场、残余应力场及微观组织演变, 导致成形构件微观组织和力学性能的不均匀性。文章聚焦 TC4-DT 钛合金定向能量沉积过程中热历史驱动的微观组织演变, 建立了有限元法与元胞自动机相结合的跨尺度建模与分析框架, 系统研究了不同热源模式及工艺参数对初生 β 晶粒生长的影响。通过将温度场在空间和时间上插值到元胞自动机网格, 模拟了凝固过程中 β 晶粒的外延生长和竞争生长全过程。结果表明, β 晶粒主要沿局部热流方向定向生长, 最终形成以柱状晶为主的形貌。随热输入增加, 晶粒逐渐粗化; 随焊接速度提高, 晶粒总体呈细化趋势。与纯电弧条件相比, 振荡激光+电弧复合热源条件下粗大柱状 β 晶粒的生长得到一定程度的抑制。本研究为钛合金增材制造组织调控提供了理论依据, 尤其对高性能体育器材, 如竞赛自行车架、高尔夫球杆头、网球拍及运动康复假肢等的轻量化、高耐久性制造具有重要指导价值。

[关键词] 定向能量沉积; 钛合金; 元胞自动机; 体育器材; 运动装备

DOI: 10.33142/nsr.v3i2.19994

中图分类号: TG146.2

文献标识码: A

Cross Scale Modeling of Directional Energy Deposition and β -Grains Growth in Titanium Alloy for Sports Equipment

LIU Min¹, CHEN Mingwei², YOU Jia¹

1. Wuhan Sports College, Wuhan, Hubei, 430079, China

2. Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei, 430074, China

Abstract: During the directional energy deposition process of titanium alloys, complex heat sources, high cooling rates, and multiple thermal cycles significantly affect the temperature field, residual stress field, and microstructure evolution, resulting in uneven microstructure and mechanical properties of the formed components. The article focuses on the microstructural evolution driven by thermal history during the directional energy deposition process of TC4-DT titanium alloy. A cross scale modeling and analysis framework combining finite element method and cellular automata is established to systematically study the effects of different heat source modes and process parameters on the growth of primary β -grains. By interpolating the temperature field into the cellular automaton grid in space and time, the entire process of epitaxial and competitive growth of β -grains during solidification was simulated. The results indicate that β -grains mainly grow directionally along the local heat flow direction, ultimately forming a morphology dominated by columnar crystals. As the heat input increases, the grain size gradually coarsens; As the welding speed increases, the overall grain size shows a trend of refinement. Compared with pure arc conditions, the growth of coarse columnar β -grains is suppressed to a certain extent under the conditions of oscillating laser + arc composite heat source. This study provides a theoretical basis for the organization control of titanium alloy additive manufacturing, especially for the lightweight and high durability manufacturing of high-performance sports equipment such as competition bike frames, golf club heads, tennis rackets, and sports rehabilitation prosthetics, which has important guiding value.

Keywords: directed energy deposition; titanium alloy; cellular automaton; sports equipment; sports equipment

引言

钛合金因具有高比强度、优异的耐腐蚀性、良好的疲劳性能及高温服役能力,广泛应用于航空航天领域大型承力构件、复杂薄壁结构及关键功能部件的制造^[1-3]。同时,钛合金也是高端体育器材的理想材料,例如竞赛自行车车架、高尔夫球杆头、网球拍以及运动康复假肢等,这些应用对材料的轻量化和高耐久性提出了严苛要求。然而,钛合金定向能量沉积(DED)过程中通常涉及快速熔化和凝固,熔池凝固易形成沿热流方向竞争生长的粗大柱状晶^[4]。这种晶粒形态常导致构件不同方向上的微观组织和性能不均匀,产生显著的各向异性^[5,6]。因此,如何有效调控熔池热过程、抑制单一方向柱状晶过度生长、改善沉积态组织均匀性,已成为钛合金 DED 工艺研究的关键问题。

基于此,本文以 TC4-DT 钛合金振荡激光-电弧 DED 为研究对象,开展成形过程中热行为、残余应力演化分布及晶粒生长演化的跨尺度建模研究。

1 实验方法

1.1 温度场映射方法

CA 晶粒生长模型工作在介观尺度,胞元尺寸设为微米级,而本文有限元网格尺寸为毫米级,因此需通过插值将温度场分布映射到 CA 模型中进行模拟计算。所用插值方法为双线性插值。胞元的温度由其最近邻的四个网格节点的温度计算得到。四个节点沿上下两条水平线分为两组,首先对每条水平线上的两个节点温度进行线性插值,得到与胞元坐标位于同一竖直线上的两个温度值,然后沿竖直方向对这两个插值温度进行线性插值,最终得到该坐标处胞元的温度,实现温度场的空间映射。

除空间插值映射外,由于凝固晶粒生长极为迅速,CA 模拟无法直接采用有限元计算的时间步长。为满足 CA 模型对更精细时间分辨率的需求,本文还采用插值方法对温度场进行时间映射。采用分段三次埃尔米特插值多项式(PCHIP)方法对有限元模拟输出的离散温度历史进行映射。设离散温度点为 (t_i, T_i) ,在区间 $[t_i, t_{i+1}]$ 内,插值函数表示为三次多项式:

$$H_i(t) = h_{00}(s)T_i + h_{10}(s)h_i m_i + h_{01}(s)T_{i+1} + h_{11}(s)h_i m_{i+1} \quad (1)$$

其中 $h_i = t_{i+1} - t_i$, $s = (t - t_i)/h_i$, m_i 和 m_{i+1} 为区间端点的斜率, $h_{00}(s)$, $h_{10}(s)$, $h_{01}(s)$ 和 $h_{11}(s)$ 为埃尔米特基函数, $s \in [0,1]$, 其具体表达式为:

$$\begin{aligned} h_{00}(s) &= 2s^3 - 3s^2 + 1 \\ h_{10}(s) &= s^3 - 2s^2 + s \\ h_{01}(s) &= -2s^3 + 3s^2 \\ h_{11}(s) &= s^3 - s^2 \end{aligned} \quad (2)$$

1.2 形核模型

当金属温度降至凝固温度以下时,液态金属可以形核并以晶核为中心生长成晶体。但在实际凝固过程中,形核需克服界面能、溶质分布和润湿条件等多种影响因素,凝固往往不在理论凝固点发生,而需要一定的过冷度。过冷度 ΔT 定义为:

$$\Delta T = T_L - T \quad (3)$$

其中 T_L 为理论凝固温度, T 为实际凝固温度。

针对凝固形核过程已提出多种理论和经验模型。通过概率分布描述不同过冷度下的形核可能性,其表达式为:

$$N(\Delta T) = N_{\max} \exp \left[\frac{-(\Delta T - \Delta T_{\max})^2}{2\sigma_{\Delta T}^2} \right] \quad (4)$$

其中 $N(\Delta T)$ 为胞元形核密度, $N_{\max}$ 为最大形核密度(二维 CA 中为单位面积形核位点密度), $\Delta T_{\max}$ 为形核概率最大时的过冷度, $\sigma_{\Delta T}$ 为标准偏差,代表形核过冷度的分散程度。数值实现中,形核概率表示为 $N(\Delta T) \times S$, 其中 S 为二维胞元的面积。在每个时间步,对满足凝固条件的胞元生成一个均匀分布于 $[0,1]$ 区间的随机数,若形核概率大于该随机数,则认为该胞元形核,将其固相分数设为 0.001,赋予随机取向,该胞元作为晶粒生长的核心。

1.3 晶粒生长计算

形核后,晶粒以固-液界面为前沿向周围液态胞元扩展。因此需要建立界面推进的生长计算模型。与形核过程类似,晶粒生长速率通常被认为是过冷度的函数:过冷度越大,晶粒生长越快。过冷度受多种因素影响,本文考虑热过冷、溶质过冷和曲率过冷三项,构建基于这些因素的生长速率模型。总过冷度为各分量之和,如下所示:

$$\Delta T_{\text{total}} = \Delta T_t + \Delta T_c + \Delta T_k$$

其中右侧依次为热过冷、溶质过冷和曲率过冷。

2 结果与讨论

2.1 β 晶粒形貌与取向的空间分布特征

为更直观地揭示单层沉积过程中熔池作用下晶粒的动态演化,本节分析单层沉积过程典型时间段内 xz 截面的组织演化模拟结果,如图 1 所示。

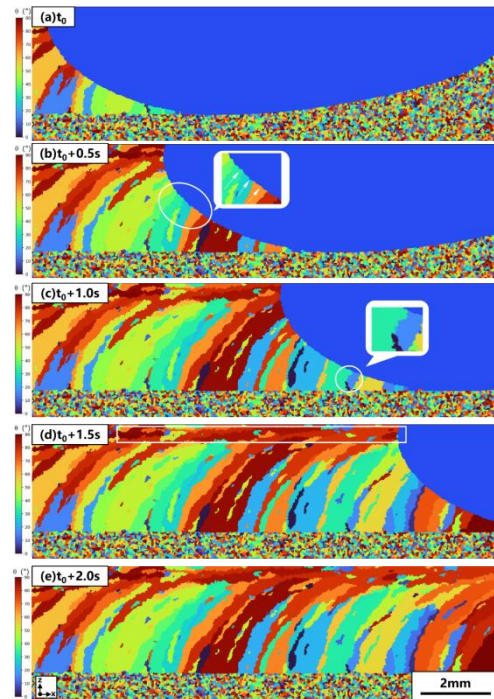


图1 xz 平面 β 晶粒生长演化示意图: (a) t_0 时刻; (b) $t_0+0.5s$; (c) $t_0+1.0s$; (d) $t_0+1.5s$; (e) $t_0+2.0s$ 。

在固-液界面附近,晶粒主要沿局部温度梯度方向向熔池内部延伸,呈现明显的定向外延生长特征。这表明界面前沿的热条件在初始凝固阶段对晶粒生长方向起主导作用。通常,温度梯度方向对应于垂直于界面的主传热方向,因此与这一方向更吻合的晶粒取向在界面前沿获得更稳定的过冷驱动力,使其优先生长并持续向液相区推进。

随着固-液界面持续推进,不同取向晶粒间的竞争生长效应逐渐加剧。生长方向与热流方向夹角较小的晶粒,其前沿推进阻力相对较低,更容易持续占据前方液相区域并保持生长优势。反之,偏离热流方向的晶粒难以维持稳定推进,其前沿液相空间被邻近优势晶粒持续挤压,宽度逐渐减小,最终被抑制或淘汰。在这种择优生长和竞争淘汰机制的共同作用下,截面微观组织从初始多取向共存状态逐渐演化为以少数优势柱状晶为主的形貌。

这一现象可结合经典柱状-等轴转变(CET)理论分析。根据CET理论,柱状晶向等轴晶转变的本质在于凝固前沿的变化,特别是温度梯度 G 、凝固速率 R 及其比值的综合作用。

当 G/R 较高时,柱状晶更易稳定生长;当其减小时,等轴晶形成占优。在熔池边界(凝固前沿),温度梯度近似相等。由图可见,凝固速率 R 与焊接扫描速度 v 和局部界面角 φ 有关,关系为 $R=v\cos\varphi$ 。其中 v 为常数。随着位置接近熔池顶部,局部界面法线与扫描方向的夹角减小,导致 R 增大,从而 G/R 减小。因此,熔池顶部区域更易

出现柱状-等轴转变趋势,呈现更明显的CET倾向。

2.2 工艺参数对晶粒形貌的影响

热输入变化改变熔池尺寸、高温停留时间和冷却条件,从而影响形核密度和后续竞争生长过程。焊接速度变化进一步调节热沿扫描路径的分布特征,改变局部凝固界面的推进条件和柱状晶的生长方向。基于不同参数条件下的组织模拟结果,本文从晶粒形貌特征、平均晶粒尺寸和尺寸分布等方面进行对比分析,揭示热输入和焊接速度影响凝固组织形成的机制。

当热输入为3kW时,组织中柱状晶带较细,晶界较多,小尺寸晶粒占比较高。随激光功率增至3.5kW和4kW,柱状晶逐渐加宽,连续生长特征增强,晶粒尺寸分布整体向大尺寸偏移,呈现明显的粗化趋势。这是因为较高激光功率增强了熔池热积累效应,延长了高温停留时间,削弱了冷却过程中的形核优势,导致少数优势取向晶粒在竞争生长中持续吞并周围晶粒,最终形成更粗大的柱状晶组织。

不同热输入条件下晶粒长宽比分布研究发现,随热输入从3kW增至4kW,晶粒长宽比总体呈增加趋势,表明晶粒形貌从相对短粗向细长柱状转变。3kW条件下长宽比主要集中在1~2范围,小长宽比晶粒占比较高,组织具有较明显的等轴倾向。当热输入增至3.5kW时,分布向较大长宽比移动且分布范围最宽,表明该条件下柱状晶竞争生长最充分。4kW条件下长宽比仍主要分布在2~3范围,晶粒仍具较强柱状特征,但分布比3.5kW时更为

集中。可见，热输入增加增强了熔池热积累效应，延长了晶粒生长时间，从而促进优势取向晶粒持续生长，提高晶粒长宽比，使组织各向异性更为显著。

随热输入从 3kW 增至 4kW，熔池截面内柱状 β 晶粒总体呈现明显粗化趋势。3kW 条件下晶粒数量较多，尺寸相对较小，柱状晶带较细。热输入增至 3.5kW 和 4kW 时，柱状晶逐渐粗化，连续生长特征更明显，大尺寸晶粒占比增加。

2.3 引入振荡激光对 β 晶粒的影响

两种热源模式下 β 晶粒均呈现沿沉积方向外延竞争生长的典型特征，整体组织仍以柱状晶为主。但与纯电弧

模式相比，复合热源条件下晶粒形貌整体更为均匀，贯穿粗大柱状晶的连续生长趋势减弱，表明振荡激光的引入在一定程度上抑制了单一方向的择优生长。

图 2 为晶粒短轴长度和长轴长度的散点图，区分柱状晶和等轴晶/其他晶粒。纯电弧模式下柱状晶的散点分布向高值区延伸更明显，更多优势柱状晶具有较大长轴长度。复合热源模式下虽然柱状晶仍占多数，但其分布相对更集中，极端粗大柱状晶数量减少。这进一步表明振荡激光改变了熔池内热分布和凝固前沿热条件，使晶粒在生长过程中受到更强的扰动和调控，从而削弱了柱状晶沿单一热流方向的持续扩展能力。

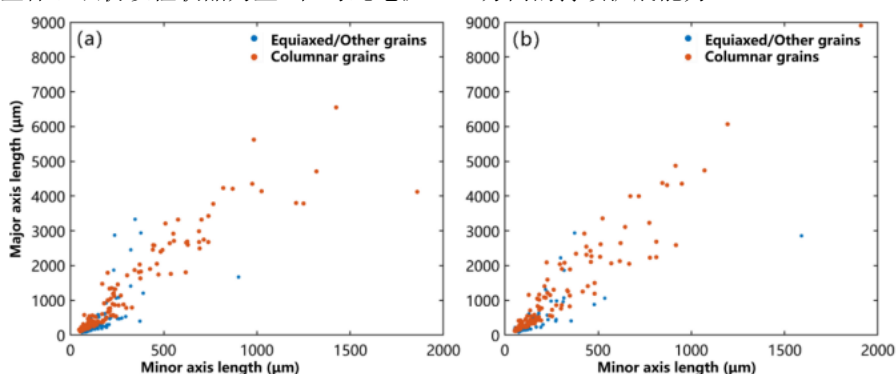


图 2 晶粒短轴长度和长轴长度的散点图

综上所述，引入振荡激光后， β 晶粒的演化并未发生从柱状晶向等轴晶的根本转变，但柱状晶的尺寸、长宽比和空间分布特征得到一定程度的优化，表现为晶粒总体更细、分布更集中，极端粗大柱状晶受到抑制。这表明振荡激光+电弧复合热源可通过调控熔池热过程对 β 晶粒的演化行为产生积极影响，从而为后续改善沉积组织均匀性、降低组织各向异性提供微观组织基础。

3 结论

本文基于元胞自动机方法建立了 TC4-DT 钛合金 DED 过程中初生 β 晶粒演化的介观尺度模拟模型，系统研究了热历史映射、晶粒形核与生长机制、工艺参数变化及不同热源模式对 β 晶粒组织演化行为的影响。

(1) 构建了钛合金 DED 过程 FE-CA 耦合的 β 晶粒生长模拟方法。该模型以有限元温度场为输入，通过空间和时间插值将热历史传递到元胞自动机模型，结合高斯概率随机形核、界面生长和邻域捕获规则，实现了初生 β 晶粒形核、生长和竞争生长的全过程模拟，为组织演化分析提供了可靠的数值基础。

(2) 单层沉积条件下， β 晶粒演化呈现明显的外延生长和竞争生长特征，最终形成以柱状晶为主的组织，模

拟结果与实验观察吻合良好。进一步分析表明，工艺参数变化显著影响 β 晶粒形貌：随热输入增加，柱状晶逐渐粗化，平均尺寸和长宽比增大；随焊接速度提高，晶粒连续生长条件被抑制，组织总体呈细化趋势。

(3) 引入振荡激光后， β 晶粒演化仍以柱状生长为主，但组织尺寸和分布特征得到一定优化。与纯电弧模式相比，复合热源条件下贯穿粗大柱状晶的连续生长趋势减弱，平均等效直径和平均长宽比减小，柱状晶尺寸分布更为集中。这表明振荡激光在不改变柱状生长主导机制的前提下，能够在一定程度上抑制组织粗化和伸长，有利于改善沉积态组织的均匀性，从而为高性能体育器材用钛合金部件的增材制造提供组织调控依据，有助于实现轻量化与高耐久性的协同提升。

[参考文献]

- [1]H. Lin,W. Z. Zhai,Z. Z. Li,M. T. Wang,Q. Y. Chen,R. H. Zhou,Y. H. Fu,J. W. Huang,M. X. Liu,G. Zhao,G. L. Wang,R. S. Li,A. M. M. Ibrahim,H. O. Zhang.Enhanced fabrication and microstructure-property optimization of IN718 superalloy via laser rolling-assisted wire-arc directed energy deposition[J].Materials Science and Engineering:A,2025

(944):148890.

[2]H. Lin,C. L. Dai,W. Z. Zhai,G. Zhao,Y. H. Fu,R. S. Li,J. W. Huang,M. B. Zhang,L. Zeng,M. X. Liu,M. T. Wang,G. L. Wang,H. O. Zhang.Additively manufactured Inconel 718 plus superalloy with heterostructures and high mechanical properties[J].Materials Science and Engineering:A,2025 (924):147683.

[3]X. H. Yang,R. Li,K. L. Hu,A. D. Sun,X. Y. Ma,M.X. Liu,M. T. Wang,R. S. Li,G. Zhao,W. Z. Zhai,H. Song,Z. L. Li,H. O. Zhang.Intelligent control of additively manufactured beads on the basis of target morphologies and thermal field[J].Frontiers of Mechanical Engineering,2024 (19):42.

[4]A. Saboori, D. Gallo,S. Biamino S,P. Fino,M. Lombardi.An overview of additive manufacturing of titanium components by directed energy deposition:

microstructure and mechanical properties[J].Applied Sciences,2017,7(9):883.

[5]Z. Liu,B. He,T. Lyu,Y. Zou.A review on additive manufacturing of titanium alloys for aerospace applications: directed energy deposition and beyond Ti-6Al-4V. JOM: The Journal of The Minerals[J].Metals&Materials Society,2021, 73(6):1804-1818.

[6]M. A. Zarei,M. G. Shabestari,S. G. Shabestari,H. Abedi.Microstructural heterogeneity and anisotropic mechanical response in metal wire arc additive manufacturing:a review[J].Journal of Materials Research and Technology,2025(36):8381-8409.

作者简介：刘敏（1999—），女，汉族，江西赣州人，在读研究生，就读于武汉体育学院体育教育专业，研究方向为运动器材先进制造。