

# 一次枝晶间距的数值统计模型\*

林 鑫 黄卫东 丁国陆 王 琦 周尧和

(西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

**摘 要** 从统计学随机性和动力学必然性的角度, 通过对定向凝固界面形态演化过程的分析, 结合现有的实验观察与已有的枝晶模型, 采用统计学随机模拟的方法提出了一个在恒速定向凝固条件下列状晶生长一次枝晶间距的数值统计模型, 模型所得数值结果与实验结果吻合得很好.

**关键词** 定向凝固, 一次枝晶间距, 随机模拟

定向凝固材料的性能在很大程度上取决于枝晶的一次间距  $d_1$ 、二次间距  $d_2$  等枝晶的特征尺度. 实验研究<sup>[1-4]</sup>表明, 一次枝晶间距存在一个较宽的容许范围, 而一次枝晶平均间距与凝固速度变化的历史显著相关. 基于此, Warren 等<sup>[5,6]</sup>通过对枝晶列稳态和非稳态扩散场的线性稳定性分析, 提出了一个确定一次枝晶间距分布范围下限的分析模型. 1992年以来, Lu<sup>[7]</sup>和 Hunt<sup>[8]</sup>通过数值计算, 分析了列状胞、枝晶的稳态及非稳态扩散场, 依据枝晶或胞晶间的扩散流方向, 提出了一次间距分布范围下限的数值模型. 以上模型着重研究了一次间距  $d_1$  分布的容许范围, 对一次间距分布的平均值  $\bar{d}_1$  的历史相关性却没有做较深入的研究. 实际上, 一次枝晶平均间距  $\bar{d}_1$  对于材料的结构和性能有着更为重要的现实意义, 并且发表的许多实验结果给出的都是一次枝晶平均间距  $\bar{d}_1$ , 但以往关于一次枝晶平均间距的理论分析都未考虑凝固形态选择的历史相关性, 与实验结果存在较大偏差. 恒速定向凝固实验研究<sup>[9,10]</sup>表明, 一次枝晶间距远大于平界面初始扰动波长, 随着扰动振幅的增大, 相邻的枝晶间将展开竞争淘汰过程, 使  $d_1$  不断增大, 直到一系列枝晶中最小的间距大于下限间距  $d_{1\min}$  时, 这一枝晶列才达到稳定态, 不再发生枝晶轴淹没的淘汰过程, 此时, 一次枝晶平均间距达到稳定, 随后枝晶只是进行缓慢的横向调整, 以使间距均匀化, 而一次枝晶平均间距基本保持不变. 本文根据这样一个一次枝晶间距  $d_1$  的演化过程, 提出了一个确定恒速定向凝固稳定枝晶列一次枝晶间距  $d_1$  的分布规律和一次枝晶平均间距的数值统计模型.

## 1 数 学 模 型

定向凝固中, 平界面失稳之后, 经过一段时间相关的非稳态演化过程, 界面最终呈现为一种稳态的平行列状晶形态. 比较枝晶与胞晶的形态演化行为可以发现, 胞晶演化的根本特点在于交替的“分叉-淘汰”过程, 而枝晶演化的根本特点在于不断地淘汰的过程. 根据枝晶演化的这个特点, 可以建立一个枝晶生长的数值模型.

\* 国家自然科学基金资助项目 59431012, 59371047

收到初稿日期: 1996-05-07, 收到修改稿日期: 1996-07-25

本文通讯联系人: 林 鑫, 西安(710072)西北工业大学凝固技术国家重点实验室

假定平界面失稳初始扰动波长的分布范围为  $\lambda_a - \lambda_b$ ,  $d_{1\min}$  为稳态条件下一次枝晶间距选择范围的下限.  $\lambda_a$  和  $\lambda_b$  皆可根据实验规律给定,  $d_{1\min}$  由 Warren-Langer(WL)模型和 Hunt-Lu(HL)模型确定. 在定长  $L$  上采用 Monte Carlo 方法随机地确定  $n+1$  个点, 把  $L$  分成  $n$  个间隔, 使每个点之间的距离  $d_i$  满足  $\lambda_a < d_i < \lambda_b$  (图 1), 这相当于在宽度为  $L$  的平界面上产生的  $n$  个扰动. 由于枝晶生长的淘汰过程一般都是从最小间距开始的, 因此从  $d_i$  中选出其中的最小值  $d_{im}$ , 若  $d_{im} < d_{1\min}$ , 再考察  $d_i$  相邻两边的间距  $d_{im+1}$  和  $d_{im-1}$  的大小, 如果  $d_{im+1} < d_{im-1}$ , 则去掉  $d_{im}$  和  $d_{im+1}$  之间的点  $a_{im}$ , 反之, 则去掉  $d_{im}$  和  $d_{im-1}$  之间的点  $a_{im-1}$ . 反复进行这个操作, 直到  $d_i$  中的最小值大于  $d_{1\min}$ , 此时就给出了一个稳定的间距分布, 计算这时  $d_i$  的平均值即为平均一次枝晶间距  $\bar{d}_1$ .

$$\bar{d}_1 = \frac{1}{n'} \sum_{i=1}^{n'} d_i \quad (1)$$

式中,  $n'$  为枝晶淘汰生长结束后的稳定枝晶数. 通常情况下  $d_{1\min} \gg \lambda_b > \lambda_a$ , 每一次去掉一个点的操作相当于一个枝晶被淹没, 当  $d_i$  中的最小值大于  $d_{1\min}$  时, 所有点之间的间距都进入了一次间距的容许范围, 相当于给出了一个稳定的枝晶列.

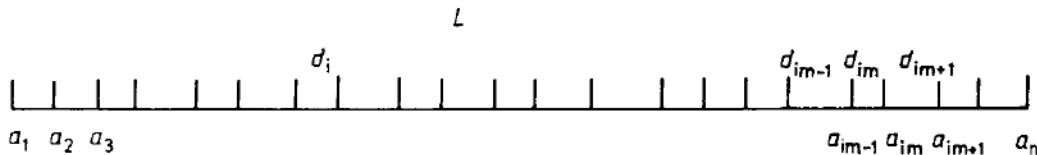


图 1 一次枝晶平均间距的计算模型

Fig.1 Schematic diagram for computing average primary dendritic spacing

## 2 计算结果及讨论

### 2.1 初始扰动波长对一次枝晶平均间距的影响

从众多研究者的实验<sup>[9,10]</sup>中可以看出, 初始扰动波长通常在 10—100  $\mu\text{m}$  范围之内, 并且最大扰动波长一般在最小扰动波长的两倍之内, 因此取了三个扰动波长范围进行计算, 即 20—40  $\mu\text{m}$ , 30—60  $\mu\text{m}$  和 40—80  $\mu\text{m}$ , 计算中试样宽  $L$  为 10 mm, 一次枝晶间距选择范围的下限  $d_{1\min}$  为 100  $\mu\text{m}$ . 通过分析发现, 初始扰动波长对一次枝晶平均间距影响不大(表 1). 表 1 相当于作了 150 次实验的一次枝晶平均间距的统计分布. 从表 2 可见, 初始扰动波长的影响很小, 对一次枝晶平均间距所造成的偏差小于 5%, 这与以往实验结果<sup>[3—10]</sup>是一致的. 但仔细分析可注意到, 对于不同的扰动波长一次枝晶平均间距似乎应该存在一极大值, 可能由于这些值之间相差较小, 在实验中不易观察而被忽视, 至今还未见这方面的报道, 因此需要做更为细致的工作加以检验.

### 2.2 试样宽度对一次枝晶平均间距的影响

为了检验试样宽度对一次枝晶平均间距的影响, 选择了三个宽度值进行计算, 即 2.5, 10 和 80 mm. 计算结果见表 3 和 4. 计算中, 初始扰动波长范围取 20—40  $\mu\text{m}$ , 一次间距选择范围的下限  $d_{1\min}$  为 100  $\mu\text{m}$ . 从表 4 可见, 平均一次枝晶间距的选择与试样宽度基本无关, 采用不同试样宽度所引起的一次枝晶平均间距的偏差小于 5%, 这与实验结果<sup>[3,11]</sup>是一致的.

表 1 对应不同初始扰动波长范围的一次枝晶平均间距统计分布

Table 1 Statistical distribution of average primary spacing for different distribution ranges of initial perturbation wavelength

$\gamma_a = 20 \mu\text{m}, \gamma_b = 40 \mu\text{m}$		$\gamma_a = 30 \mu\text{m}, \gamma_b = 60 \mu\text{m}$		$\gamma_a = 40 \mu\text{m}, \gamma_b = 80 \mu\text{m}$	
$\bar{d}_1$	Frequency	$\bar{d}_1$	Frequency	$\bar{d}_1$	Frequency
$\mu\text{m}$	%	$\mu\text{m}$	%	$\mu\text{m}$	%
143.78—146.07	0.67	148.40—150.09	2.67	144.02—145.83	4.00
146.07—148.36	0	150.09—151.78	0.67	145.83—147.64	0.67
148.36—150.65	2.00	151.78—153.47	7.33	147.64—149.45	12.67
150.65—152.94	6.67	153.47—155.16	8.67	149.45—151.26	15.33
152.94—155.23	8.67	155.16—156.85	0	151.26—153.07	18.00
155.23—157.52	21.30	156.85—158.54	16.67	153.07—154.88	16.67
157.52—159.87	0	158.54—160.23	19.33	154.88—156.69	0
159.87—162.10	27.33	160.23—161.92	0	156.69—158.50	12.67
162.10—164.39	12.67	161.92—163.61	17.33	158.50—160.31	11.33
164.39—166.68	11.33	163.61—165.30	15.33	160.31—162.12	0
166.68—168.97	4.00	165.30—166.99	0	162.12—163.93	6.67
168.97—171.26	4.00	166.99—168.68	10.00	163.93—165.74	1.33
171.26—173.55	1.33	168.68—170.37	2.00	165.74—167.55	0.67

表 2 不同初始扰动波长下的一次枝晶平均间距

Table 2 Average primary spacing for different distribution ranges of initial perturbation wavelength

Initial perturbation wavelength $\mu\text{m}$	$\bar{d}_1, \mu\text{m}$		
	Average	Median	Mode
20—40	158.86	158.73	156.25
30—60	159.30	158.73	158.73
40—80	153.02	151.51	149.25

### 2.3 稳定枝晶列的分布规律

统计分析显示, 当  $L \gg d_{1\min}$  时,  $\bar{d}_1 / d'_{1\min} = 1.5—1.6$  ( $d'_{1\min}$  为枝晶列中一次枝晶的最小间距), 所得结果比通常实验观测值(1.1—1.3)略大<sup>[1,3]</sup>, 这主要是由于在模型中没有考虑枝晶间距的横向调节. 在枝晶的演化过程中, 一次枝晶间距的横向调节机制始终在起作用, 它使得枝晶列中较大的间距减小, 较小的间距增大, 平均间距保持不变, 使间距逐步趋于均匀化, 因此通常的  $\bar{d}_1 / d'_{1\min}$  实验观察值都较小.

分析结果同时显示, 随着  $n'$  的减少, 即稳定枝晶列中枝晶数量减少, 模拟实验所得的统计分布范围增大(表 1,3), 即  $\bar{d}_1$  的偏差增大, 这与实际合金定向凝固实验的结果<sup>[3]</sup> 是一致的. 通过对每次模拟实验所得稳定枝晶列中的一次枝晶的最大间距与最小间距之间的比值

表 3 对应不同试样宽度一次枝晶平均间距的统计分布

Table 3 Statistical distribution of average primary spacing for different sample widths

$L = 2.5 \text{ mm}$		$L = 80 \text{ mm}$	
$\bar{d}_1, \mu\text{m}$	Frequency, %	$\bar{d}_1, \mu\text{m}$	Frequency, %
136.66—141.11	2.00	154.12—154.75	0.67
141.11—145.56	0	154.75—155.38	6.00
145.56—150.01	20.67	155.38—156.01	13.33
150.01—154.46	0	156.01—156.64	14.00
154.64—158.91	41.33	156.64—157.27	16.67
158.91—163.36	0	157.27—157.90	12.00
163.36—167.81	0	157.90—158.53	10.67
167.81—172.26	28.67	158.53—159.16	9.33
172.26—176.71	0	159.16—159.79	6.67
176.71—181.16	6.00	159.79—160.42	4.66
181.16—185.61	0	160.42—161.05	2.00
185.61—190.06	0	161.05—161.68	2.00
190.06—194.51	1.33	161.68—162.31	2.00

表 4 不同宽度试样中的一次枝晶平均间距

Table 4 Average primary spacing for different sample widths

$L$ mm	$\bar{d}_1, \mu\text{m}$		
	Average	Median	Mode
2.5	158.81	156.25	156.25
10	158.86	158.73	156.25
80	158.56	158.41	159.04

$(d'_{1\max} / d'_{1\min})$ 进行概率统计分析, 得出通常实验所采用的试样宽度(10—30 mm)下的分布:

$$P\{1.8 \leq d'_{1\max} / d'_{1\min} < 3\} > 95\%$$

$$P\{3 \leq d'_{1\max} / d'_{1\min} < 4\} < 5\%$$

$$P\{d'_{1\max} / d'_{1\min} > 4\} = 0$$

其中  $P$  表示概率. 由于在实际实验中还存在间距的横向调节, 因此  $d'_{1\max} / d'_{1\min} > 3$  的概率还会更低, 这就是在通常实验条件下较少观察到  $d'_{1\max} / d'_{1\min} > 3$  而多见  $d'_{1\max} / d'_{1\min} < 3$  的原因. 由前面的概率统计分析, 完全可以认定  $d'_{1\max} < 4d'_{1\min}$ .

## 2.4 计算结果与实验结果的比较

以 WL 模型和 HL 模型给出的一次枝晶间距选择范围的下限为计算中的  $d_{1\min}$ , 试样宽  $L$  为 10 mm, 初始扰动波长范围取 20—40  $\mu\text{m}$ , 与丁二腈-1.0%丙酮(质量分数)<sup>[4]</sup>、丁二腈-1.1%乙醇(质量分数)<sup>[12]</sup> 及 PVA-0.46%乙醇(摩尔分数)<sup>[13]</sup> 透明系合金恒速定向凝固的实验结果进行了比较, 计算中采用的物性参数见表 5, 比较结果见图 2. 从图 2 可见, 预测的一次枝晶平均间距与实验值吻合得很好. 对于 HL 模型, 偏差不超过 10%, 对于 WL 模型, 在低速下有一定偏差, 这主要由于 WL 模型只在高速端有效.

表 5 合金热物性参数

Table 5 Thermophysical parameters used in present modelling for several alloy systems

Alloy	$T_m$ K	$\Delta S$ $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	$\gamma_{S/L}$ $10^{-3} \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$	$D_L$ $10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	$m_L$ $10^2 \text{ K}$	$k$
SCN-Ace. <sup>[5]</sup>	331.24	11.21	8.95	1.27	-3.02	0.10
PVA-Eth. <sup>[13]</sup>	308.9	7.53	2.84	0.6	-3.0	0.16
SCN-Eth. <sup>[12]</sup>	331.24	11.21	8.95	1.27	-3.6	0.044

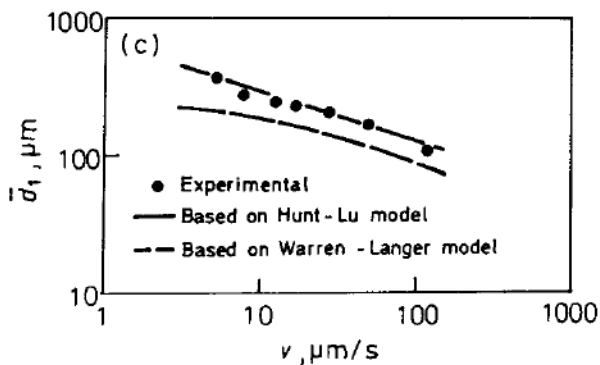
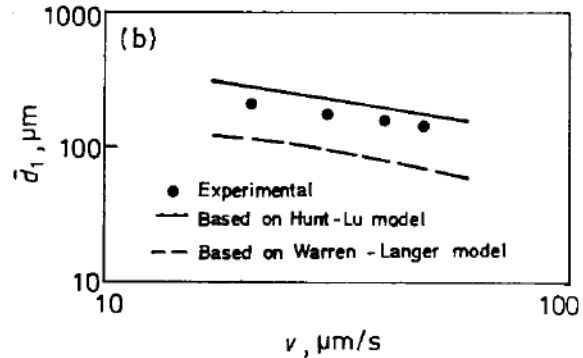
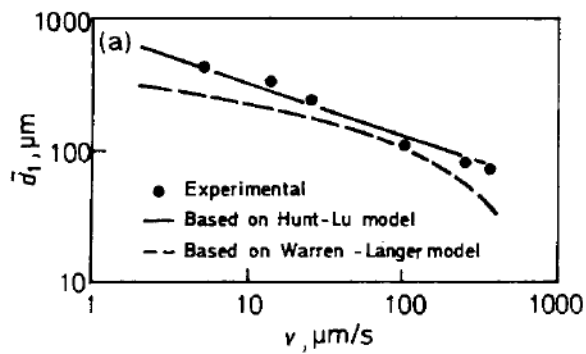


图 2 恒速定向凝固一次枝晶平均间距随速度的变化规律

Fig.2 variation of average primary spacing with growth rate in constant velocity directional solidification

(a) SCN-1.0% Ace.,  $G_L = 4.0 \text{ }^\circ\text{C} / \text{mm}$

(b) PVA-0.46% Eth.,  $G_L = 3.5 \text{ }^\circ\text{C} / \text{mm}$

(c) SCN-1.1% Eth.,  $G_L = 5.5 \text{ }^\circ\text{C} / \text{mm}$

## 3 结 论

(1) 采用统计学随机模拟方法提出了一个恒速定向凝固列状枝晶二维生长的一次枝晶间距模型, 与 WL 模型和 HL 模型相结合, 所得数值与实验结果吻合得很好.

(2) 在本文模拟的实验条件下, 一次枝晶平均间距与初始扰动波长及试样的二维宽度基本无关.

(3) 在稳定枝晶列中, 一次枝晶的最大间距  $d'_{1\max}$  和最小间距  $d'_{1\min}$  满足  $d'_{1\max} < 4d'_{1\min}$ .

### 参 考 文 献

- 1 Han S H, Trivedi R. *Acta Metall Mater*, 1994; 42: 25
- 2 黄卫东, 商宝禄, 周尧和. 航空学报, 1992; 13: A377
- 3 Huang Weidong, Geng Xinguo, Zhou Yaohe. *J Cryst Growth*, 1993; 134: 105
- 4 丁国陆, 林 鑫, 黄卫东, 周尧和. 金属学报, 1995; 31: A469
- 5 Warren J A, Langer J S. *Phys Rev*, 1990; A42: 3518
- 6 Warren J A, Langer J S. *Phys Rev*, 1993; E47: 2702
- 7 Lu Shuzu, Hunt J D. *J Cryst Growth*, 1992; 123: 17
- 8 Hunt J D, Lu Shuzu. *Metall Mater Trans*, 1996; A27: 611
- 9 黄卫东, 商宝禄, 周尧和. 物理学报, 1991; 40: 38
- 10 Trivedi R, Somboonsuk K. *Acta Metall*, 1985; 33: 1061
- 11 Somboonsuk K, Mason J T, Trivedi R. *Metall Trans*, 1984; A15: 967
- 12 黄卫东. 西北工业大学博士学位论文, 1989
- 13 Liu L X, Kirkaldy J S. *Acta Metall Mater*, 1995; 43: 2891

## NUMERICAL STATISTICAL MODEL OF PRIMARY DENDRITIC SPACING

LIN Xin, HUANG Weidong, DING Guolu, WANG Qi, ZHOU Yaohe (State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072)

(Manuscript received 1996-05-07, in revised form 1996-07-25)

**ABSTRACT** In view of the statistical randomness and the dynamic necessity, analysis has been conducted on morphology development of solid-liquid interface in directional solidification. Based on the present experimental observations and the known dendritic models, a numerical statistical model of primary dendritic spacing is first presented to the dendritic array in directional solidification at constant velocity. The numerical model is in good agreement with the experimental results.

**KEY WORDS** directional solidification, primary dendritic spacing, stochastic simulation

---

Correspondent: LIN Xin, State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072