技術論文

# Phase-field法による粒成長シミュレーション

# **Phase-field Simulation of Grain Growth**

## 諏 訪 嘉 宏\* Yoshihiro SUWA

# 抄 録

鋼板の製造過程で生じる粒成長過程は結晶構造を制御する上で最も重要な冶金学的現象の一つである。 これまで、その計算量負荷の高さからphase-field(PF)法の粒成長シミュレーションへの適用は二次元を 対象とした計算が殆どであった。しかし、近年の計算アルゴリズムの改良と並列計算手法の活用で三次元 計算への適用が実用的となりつつある。PF法による粒成長シミュレーション結果について、単相材にお ける正常粒成長と微細分散粒子を含む系のピン止め現象を対象として、特に二次元計算と三次元計算の相 違に着目して報告した。

#### Abstract

Grain growth occurring in the steel manufacturing process is one of the most important phenomena in order to control the polycrystalline microstructure. Due to its heavy computational cost, phase-field(PF) simulations were limited to 2D systems. Recently, 3D PF simulation of grain growth is becoming practical owing to the development of efficient simulation algorithms and the application of parallel computation techniques. In this manuscript, we will report simulation results for the normal grain growth and the system containing finely dispersed second-phase particles. Especially, this manuscript highlights the difference between the 2D and 3D simulation results.

# 1. 緒 言

金属を含む多結晶物質の結晶構造は、物性値を決定する 鍵となる要素である。そして、鋼板の製造過程で生じる粒 成長過程は結晶構造を制御する上で最も重要な冶金学的現 象の一つである。結晶構造の幾何学的特徴を粒成長の解析 的な理論に直接組み込むことは困難であるので<sup>1.5</sup>, コン ピュータシミュレーションによる数値解析が有望視されて おり、これまで、Monte Carlo (MC) 法をはじめとする、 様々なモデルが提案されている<sup>6.19</sup>。

近年,計算材料科学の分野で目覚しい発展を遂げている phase-field (PF)法を粒成長シミュレーションに適用する 試みが盛んに行われている<sup>14-19)</sup>。PF法によるモデル化の最 大の利点として,結晶界面が秩序変数の勾配が0で無い部 分として自然に導入されるため,界面そのものを追跡する 必要が無いという点が挙げられる。また,界面エネルギー および易動度の異方性を考慮することで,より現実に則し た解析を行うことが可能であり,さらに,秩序変数として 濃度場を追加することで,固溶元素の偏析<sup>20)</sup>や,分散第二 相の粗大化<sup>21)</sup>をモデル化する際に必要な長距離の拡散を自 然に導入することが可能である。

これらの特長にも拘らず,その計算量負荷の高さから PF法の粒成長シミュレーションへの適用は二次元の計算 が殆どであった。しかし,計算アルゴリズムの改良<sup>22-24</sup>と 並列計算手法の活用<sup>25-27)</sup>で三次元計算への適用結果が報告 されつつある。本稿では筆者がこれまで行ってきたPF法 による粒成長シミュレーション結果<sup>26,27)</sup>について,特に二 次元計算と三次元計算の相違に着目して報告する。

#### 2. モデル

#### 2.1 Phase-field 多結晶粒成長モデル

PF法は非平衡の熱力学にもとづく計算モデルで,複雑 なデンドライトの組織形成を再現できることで注目を集め た手法である。現在では,計算対象を拡散相分解(核形成, スピノーダル分解,オストワルド成長等),規則-不規則 変態,各種ドメイン成長(誘電体,磁性体),マルテンサ イト変態・形状記憶,固相結晶成長・再結晶などに拡大し, ナノ・メゾスケールにおける総合的な組織形成予測・解析

<sup>\*</sup> 鉄鋼研究所 薄板材料研究部 主任研究員 工博 千葉県富津市新富20-1 〒293-8511

シミュレーション法の1つに成長しつつある28,29)。

PF法における多結晶粒成長モデルは、局所的な平均曲 率に界面の移動速度が比例するという仮定の下で粒成長 挙動を予測するモデル<sup>30</sup>であり、結晶方位を表現する際 に、多数の秩序変数を用いる方法(multiple orientationfields model, MOFM)<sup>14-18)</sup>と1つの秩序変数(二次元を対 象とする場合)を用いる方法(single orientation-field model, SOFM)<sup>14-19)</sup>とに大別できる。計算コストを考えるとSOFM が有利であるが、三次元への拡張性、界面エネルギー・易 動度異方性の導入しやすさ、溶質の拡散など他の秩序変 数との連成を考慮すると、現時点ではMOFMが実用的で あり、本報における計算結果はすべてMOFMを用いて計 算されたものである。下記に MOFM の代表例として Steinbach らにより開発された Multi-Phase-Field(MPF)モ デル<sup>31)</sup>の概要を示す。

MPF法においては、連続的な秩序変数  $\phi_i(i=1,2,...,N)$  を、仮想的結晶方位を区別するものとして定義する。ここ で、Nは秩序変数の総数である。このとき  $\phi_i(\vec{r},t)$  の値は 時刻 t、位置  $\vec{r}$ における粒番号 iを持つ粒の存在確率を表 す。即ち、 $\phi_1$ と名付けられた粒の内部においては、  $\phi_1(\vec{r},t)$ の絶対値は1に漸近し、 $t \neq 1$ の $\phi_i(\vec{r},t)$ は0に 漸近する。なお、仮想方位と書いたのは、この方位が結晶 の実方位を意味するわけではなく、異なった領域を区別す るための背番号の役割を果たすに過ぎないからである。た だし、この仮想方位と実結晶方位を関連付けて、実方位を 考慮した解析を行うことも可能である<sup>32)</sup>。

このモデルにおいて,系の各位置 r における秩序変数 の合計値は保存される。

$$\sum_{i=1}^{N} \phi_i(\vec{r}, t) = 1 .$$
 (1)

紙面の節約のため支配方程式の導出方法については詳し く説明しない。詳しくは文献<sup>33)</sup>を参照されたい。粒成長の みを考えた場合,解くべき支配方程式群は以下のようにな る。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n\left(\vec{r},t\right)} \sum_{j\neq i}^N s_{ij} M_{ij} \left[\frac{\delta F}{\delta \phi_i} - \frac{\delta F}{\delta \phi_j}\right], \ (i = 1 \cdots n)$$
(2)

ここで、Fは系の自由エネルギー汎関数、 $M_{ij}$ はPF法における界面の易動度である。さらに、

$$\frac{\delta F}{\delta \phi_i} = \sum_{j \neq i}^N \left[ \frac{\varepsilon_{ij}^2}{2} \nabla^2 \phi_j + \omega_{ij} \phi_j \right] + f_i^E \tag{3}$$

と書けて、 $\epsilon_{ij}$ はエネルギー勾配係数、 $\omega_{ij}$ は二重井戸型ポ テンシャルの深さ、 $f_i^E$ は粒番号 *i* を持つ粒の過剰エネル ギー密度である。 $\epsilon_{ij} \ge \omega_{ij}$ を同時に調整することで界面エ ネルギーを制御することが可能である<sup>33)</sup>。また、

$$n(\vec{r},t) = \sum_{i=1}^{N} s_i(\vec{r},t).$$
(4)

であり,  $s_i(\vec{r}, t)$  は $\phi_i > 0$ で $s_i(\vec{r}, t) = 1$ , それ以外で

 $s_i(\vec{r},t) = 0$ を満たすステップ関数である。

(2)式の数値解を差分法などにより求めることで、粒成 長挙動を予測する事が可能である。

## 2.2 計算の効率化について

MOFMによる多結晶粒成長モデルの問題点として,同 一粒番号を持つ粒同士の合体が挙げられる。これは,MC 法とMOFMに共通する課題で,二次元シミュレーション において,総方位数Nが粒成長速度に影響を与えないた めには,Nは100以上である必要がある<sup>20</sup>)。例えばMC法 の場合,Nの増大により計算効率が低下するが,状態遷移 のアルゴリズムを改良することで克服することが可能であ る。しかし,MOFMの場合,メモリー使用量はNに比例 して増大し,計算時間は最悪の場合Nの2乗に比例して 増大する。従って,単純に大きなN値を用いる事が出来 ないため,Nを大きくせずに合体を防ぐ方法が必要であ る。

Krill ら<sup>23</sup>は,計算中に等価な結晶方位間で方位の交換 を行っても,系の自由エネルギーに影響を与えないこと を利用し,必要なNを抑えることで,計算の効率化を行っ た。Suwaらは,彼らの方法を,界面の異方性を考慮した 場合<sup>25</sup>)および分散粒子を含む場合<sup>26</sup>に拡張した。その後 Vedantam ら<sup>23</sup>, Gruber ら<sup>24</sup>,およびKim ら<sup>18</sup>により,さ らに洗練されたアルゴリズムが考案されており,彼らのア ルゴリズムを用いることで,この"合体"に関する問題は 解消された。この洗練されたアルゴリズムについて,基本 的には同等なアルゴリズムが,世界の異なる3つの研究グ ループにより,同時期に開発されている事は興味深い。

#### 3. 計算結果

#### 3.1 単相材料の正常粒成長の場合

本節では,計算対象を単相材とし,更に全ての界面に対 して単一の界面エネルギー・易動度を与えた結果<sup>27</sup>につい て示す。この条件は多結晶の粒成長挙動について考える上 で最も単純化された系であり,同時に最も重要な系である ので,新たなモデルが考案される際にはベンチマークとし て先ず初めに計算対象とされる系である。

図1に計算された組織の時間変化を示す。 $t = 500 \Delta t$ に おいて粒の数 $N_s$ は35174であり $t = 10000 \Delta t$ では $N_s =$ 1185である。PF法においては、計算に用いるパラメータ を適切に設定することで、実時間、実サイズを考慮した数 値シミュレーションが可能である。しかし、本報において は簡便さを優先し、時間は時間差分間隔 $\Delta t$ ,空間サイズ は空間差分間隔 $\Delta x$ を用いて表現する。図2に平均粒半径 <R>の2乗値の時間変化を示す。得られた曲線は直線で近 似でき、成長速度が良く知られた時間の1/2乗則を満た すことがわかる。

正常粒成長においては、ある時間経過後に、平均粒径で



図1 512<sup>3</sup>差分格子において得られた計算結果 (a) t = 650 Δt において35 174粒, (b) t = 10000 Δt において 1185粒が存在している

Simulated microstructural evolution in 512<sup>3</sup> cells (a) 35 174 grains at t = 650  $\Delta$ t and (b) 1 185 grains at t = 10 000  $\Delta$ t.





規格化したサイズ分布関数が一定となる"定常状態"<sup>3)</sup>が 得られる事が知られている。定常状態におけるサイズ分布 関数を比較するため,我々の計算結果,同等のモデルを用 いたKimらの計算の結果<sup>18)</sup>,およびHillertによる平均場解 析<sup>3)</sup>で得られた分布関数を図3に示す。この図から,我々 の結果はKimらの結果に対して,若干分布が広がり,さら に左右対称に近くなっている。このサイズ分布における若 干の相違は,Kimらの計算においてはサイズ分布が完全な 定常状態に達していなかったためと考えられる<sup>27)</sup>。

最近では三次元的な組織観察も可能となりつつあるが, 通常の実験観察で得られる組織写真は,三次元組織の二次 元断面である。三次元組織と二次元断面の比較のため,本 節で得られた計算結果の二次元断面より求めたサイズ分布 を全ての断面に平均して得られた分布を図4に示す。図3 と図4を比較することで,二次元断面においては,サイズ 分布が小さい粒の側に偏っていることが分かる。また,二 次元断面から得られる平均粒半径を  $\langle R_{2d} \rangle$ とすると  $\langle R \rangle$ ≒1.18 $\langle R_{2d} \rangle$ となった。なお,二次元組織において得られ る定常分布は,上記の三次元組織およびその二次元断面の どちらとも異なる<sup>3,18)</sup>ことを明記しておく。



図3 幾つかのPFシミュレーションで得られた,定常状態に おける粒径分布関数 実線はHillertの平均場解析によって得られた粒径分布 関数を示す

Steady-state grain size distributions from various phase-field simulations of the 3D normal grain growth

Kim et al.<sup>18</sup> (MPF model, symbols were taken from Fig.15 in Ref. 18) and our study (MPF model + APT algorithm). The thick curve depicts the 3D distribution predicted by Hillert theory<sup>3</sup>.



図4 三次元計算結果の二次元断面より得られた,定常状態 における粒径分布関数

Steady-state grain size distributions reconstructed from a set of 2D slice of 3D microstructure

次に個々の粒の成長挙動について考察する。Hillertの平 均場解析では、個々の粒の成長速度を下記の式で表現して いる<sup>3)</sup>。

$$\frac{dR}{dt} = \alpha M_p \,\sigma \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R}\right) \colon R \frac{dR}{dt} = \alpha M_p \,\sigma \left(\frac{1}{R_c} - 1\right).$$
(5)

ここで、Rは着目している粒の半径であり、R<sub>c</sub>は臨界粒半 径で、(5)式からR<sub>c</sub>以上の粒は成長し、以下の粒は収縮 する。また、M<sub>p</sub>は物理的な界面易動度、 $\sigma$ は界面エネル ギーであり、 $\alpha$ は平均場近似に含まれない詳細な幾何学的 影響を考慮するための1程度の補正値である。Kimらは、 (5)式を評価するために、RdR/dtとR/<R>の関係を用い た解析を行っている<sup>18</sup>。

これに習い,図5に $t = 10000 \Delta t$ において,個々の粒 に対する $RdR/dt \geq R/\langle R \rangle$ の関係を示す。この図から,近 似直線がx軸と交わるx軸の値,即ち臨界粒半径は,1.15 となっており,これはKimらの結果を良く再現し,さら に,Hillertの平均場解析の結果 $R_c = 9/8 \langle R \rangle = 1.125 \langle R \rangle$ と



図5 t = 10000 Δt において存在する1185粒に対するRdR/dt とR/<R>の関係

実線は分布に対する最小2乗近似直線を示す

Simulation test of mean-field approximation [Eq.(5)] in the 3D normal grain growth

The results obtained from a simulation run at t =  $10\,000\,\Delta t$  is shown in this figure, where 1 185 grains are shown as dots in a RdR/dt vs R/<R> plane. The dR/dt values were measured from the volume changes during a single time step. The thick straight line is the linear least-square fitting.

非常に良く一致する結果である。従って,三次元の結晶粒 成長において個々の粒の成長,収縮の判定にその粒の半径 *R*を用いる事が可能である。一方,文献<sup>19</sup>にあるように, 二次元における粒成長挙動を考えた場合,個々の粒が成長 するか否かは,その粒を構成する辺の数によって決定さ れ,上記のような半径*R*を用いた議論は出来ない事が知 られている。

次に面数に関連する事柄について示す。平均面数は t= 500 ∆t において 14.0 であったが時間とともに減少し, t= 5000 △t 程度で 13.7 に漸近する。この値は多くの数値シ ミュレーションで得られた値と非常に良い一致を示してお り、更には、最近行われた実験観察結果34)とも一致する。 続けて, 面数分布関数を図6に示す。この面数分布関数の ような幾何学情報は平均場解析では取り扱うことが非常に 難しく,直接的に幾何学的情報を扱えることが, PF 法な どの組織シミュレーション手法の特長の一つである。比較 として、Kimらの結果も合わせてプロットしておく。 面数 分布においても、我々の計算結果はKimらの結果と良い一 致を示している。最後に、t=6000 ∆t において、文献25)と 同一の手法で三次元のAboav-Weaire則<sup>35,36)</sup>を近似すると,  $m(Nf) \times Nf = 13.7Nf + 24.7$ と求められた。これは、文献<sup>25)</sup> の値,  $m(Nf) \times Nf = 13.6Nf + 27.2$ と非常に近い値である。 ここで、m(Nf)は面数Nfを持つ粒に接する粒の平均面数 である。

#### 3.2 分散粒子によるピン止めがある場合

本節では, 析出物や非金属介在物などの微細な分散粒子 が存在する場合の結果について示す。分散粒子が存在する





Kim et al.<sup>18)</sup> (MPF model, symbols were taken from Fig.16 in Ref. 18) and our study (MPF model + APT algorithm).

系における結晶成長の"ピン止め"は、結晶粒径をコント ロールする重要な手段であり、工業的にも重要な現象であ る。半世紀以上前、Zenerは多結晶組織中に非整合で不動 な半径rを持つ第二相粒子を分散させた場合に、完全に粒 成長が停止した、最終的なピン止め組織における母相の平 均粒径Rは、

$$R\rangle = a \,\frac{r}{s^b} \tag{6}$$

(

で与えられると提案した<sup>37)</sup>。ここで,fは第二相粒子の体 積率であり,a,bは定数である。Zenerの仮定の下では,a= 4/3,b=1と求められる<sup>38)</sup>。以来,Hillertをはじめ多くの 研究者によって(6)式の修正が提案されてきた<sup>39,47)</sup>。

さらに実験による検討も試みられたが、組織中の微細か つ少量の分散粒子の半径と体積率を三次元的に測定するこ とが困難なので、1980年代から MC 法<sup>48-54)</sup>や front tracking 法<sup>55,50)</sup>を用いて、数値シミュレーションによる解析が盛ん に行われ始めた。しかし、最終的なピン止め組織について 議論する場合には、系の大きさが十分で無いと正しい結果 が得られないため、膨大な計算機資源と計算時間を必要と する。さらに、最終的なピン止め組織におけるb値につい て、二次元における計算結果と三次元における計算結果が 大きく異なり、特に三次元に関しては未だに完全には決着 がついていない<sup>38)</sup>。

本節では計算の並列化手法を適用したPF法をこの三次 元におけるZenerのピン止め問題に適用した結果<sup>26)</sup>につい て述べる。計算には代表的な MOFM の一つである Fan ら のモデルを Moelans らが改良したもの<sup>55,56)</sup>を用いている。 分散粒子の半径は計算効率と正確さの妥協点を探し, *r* = 2.68(*V* = 81 差分格子)とした<sup>56)</sup>。同様に計算機資源の制 限から分散粒子の体積率*f*は 0.04 から 0.12 までとしてい る。計算条件の詳細は,文献<sup>26)</sup>を参照されたい。本報では, 分散粒子が移動も成長もしない場合について述べるが, PF 法を用いた場合,分散粒子の粗大化を考慮した場合についても計算可能<sup>21)</sup>である。

分散粒子の体積率f=0.04とした際の,組織の時間発展 を図7に示す。図中で黒い点が分散粒子である。図8にそ れぞれの分散粒子体積fにおける母相粒子の平均粒径の時 間変化を示す。初期段階では,結晶粒の大きさが小さく, 1結晶粒あたりに接する粒の数が少ないため,さらに界面 の曲率が大きいため,成長速度にそれほど変化は無い。粒 の成長に伴い,成長速度は減少し最終的に成長は停止す る。図9にそれぞれの分散粒子体積fにおける最終的なピ ン止め組織を示す。

母相の粒界に存在する分散粒子の合計が占める確率を  $\Phi$ とし、その中で、2つの粒の界面に存在する確率  $\Phi_2$ 、3 つの粒が接する線上に存在する確率  $\Phi_3$ 、4つ粒が接する 頂点に存在する確率  $\Phi_4$ を、図10に示す。これら全ての値 は、fの増加とともに増加している。また、 $\Phi$ の値は、同 じモデルパラメータを用いているにもかかわらず、二次元 におけるシミュレーションの値に比べ非常に小さい<sup>50</sup>。こ





Simulated microstructural evolution in  $400^3$  cells for f = 0.04



図8 様々な分散粒子体積に対する,平均粒半径<R>と計算 時間の関係

Average grain radius  ${\leq}R{>},$  versus simulation time for different particle concentrations

れは、文献50でも指摘されているように、二次元と三次元 では最大ピン止め応力を与える分散粒子と界面の幾何学的 配置が異なり、三次元の方が簡単に分散粒子から界面が逃 れられることに起因している。

また、このΦの値は、分散粒子を1格子点として扱い、 格子温度(lattice temperature)を0としたAndersonらによ る三次元のMCシミュレーション結果<sup>49</sup>)と比較しても低い 値である。彼らが用いた計算条件下では、分散粒子の存在 により導入された人工的なファセットが粒成長を抑制して いた可能性がある。MC法の場合、この問題を回避するた めには、分散粒子の大きさを十分に大きくするとともに、 格子温度を上昇させ熱揺らぎを導入する必要がある<sup>54</sup>。し かし、PF法によるシミュレーションでは、界面の曲率を 高精度に表現出来るため熱揺らぎを導入すること無く、文 献<sup>54</sup>)と同等のΦ値が得られている。

図11に定常状態における母相の平均半径<R>を分散粒 子の半径rで除した値と分散粒子体積fの関係を両対数グ ラフで示す。シミュレーション結果に対し最小二乗法を用



図9 様々な分散粒子体積fに対する,最終的なピン止め組織 Pinned microstructures for different particle concentrations f



図10 様々な分散粒子体積における分散粒子の配置 最終的なピン止め組織において,分散粒子が母相の,界面,三 車線,頂点に存在する割合を示す

Fraction of particles on grain faces, edges and corners in the pinned microstructure versus particle concentration f



図11 定常状態における母相の平均半径<R>を分散粒子の半 径rで除した値と分散粒子の体積の関係

比較として,Zenerの関係式およびMC法で得られた計算結果 を示す

Average grain radius of the pinned microstructures versus particle concentration f

For comparison, Zener relation<sup>37)</sup> and the relations obtained from Monte Calro simulations<sup>49, 54)</sup> are plotted.

$$\langle R \rangle = 1.42 \, \frac{r}{f^{0.87}} \tag{7}$$

これは,Smith-Zener 理論や,分散粒子のサイズを十分大 きく取り,かつ熱揺らぎを導入した MC 法によるシミュ レーション結果<sup>54</sup>と近い結果である。

次に, 粒径分布関数の時間変化を評価するため, 組織エ ントロピー<sup>57)</sup>を以下の式で定義する。

$$ME = \frac{\sum_{i} g_{i} \ln (g_{i})}{\sum_{i} g_{i}}$$
(8)

ここで、 $g_i$ は、 $g = R/\langle R \rangle$ として結晶粒を平均粒径で規格 化した際に、i番目のグループに属する粒の割合である。 図12に各fにおける組織エントロピーの時間変化を示す。 f = 0の場合は、遷移領域を経て一定値に漸近するが、分 散粒子が含まれる系では、時間経過に従い組織エントロ



図12 様々な分散粒子体積に対する,組織エントロピーMEの 時間変化

Temporal evolution of the microstructural entropy ME, for different particle concentrations

ピーは小さくなっており,実際にサイズ分布関数の幅も狭 まっている。これは,粒成長の進展に伴い平均的な駆動力 が減少するため,周囲の粒と比較して十分小さいにも関わ らず縮小出来なくなる粒が出現することに起因する。

我々の計算結果においては、f=0.04とした場合、最終 的なピン止め組織において0.3 〈R〉以下の粒半径を持つ粒 が存在していなかった。この分散粒子を考慮した粒成長に おいて分布関数が狭まる一現象は、平均場近似を用いた数 値シミュレーションにおいても報告されている<sup>58,59)</sup>。一 方、二次元シミュレーションの場合、文献<sup>56)</sup>でも報告され ているように、分散粒子の初期配置やf値に応じて、分布 関数は狭まりも広がりもする。

# 4. 結 言

本稿ではPF法による粒成長シミュレーション結果について、単相材における正常粒成長と微細分散粒子を含む系のピン止め現象を対象として、特に二次元計算と三次元計算の相違に着目して報告した。近年、三次元組織解析技術の発展により、多結晶組織の三次元的な幾何学的特徴を実験的に求める試みが行われている<sup>34)</sup>。これら、数学的手法、数値シミュレーション、実験解析を融合することで、多結晶材料の組織形成メカニズム解明が進み、例えば所望のサイズ分布、結晶方位分布を持つ多結晶組織の製造法開発に貢献できると考えている。また、多結晶組織の特性評価には、多くの場合、入力値としての多結晶組織が必要となるが、PF法による計算組織はその入力値としても有用である。

#### 参照文献

- 1) Atkinson, H. V.: Acta Metall. 36, 469 (1988)
- 2) Weaire, D. et al.: Materials Science Forum. 94-96, 27 (1992)
- 3) Hillert, M.: Acta Metall. 13, 227 (1965)
- 4) Burke, J. E. et al.: Prog. Metal phys. 3, 220 (1952)
- 5) Louat, N. P.: Acta Metall. 22, 721 (1974)
- 6) Weaire, D. et al.: Phys. Rev. Lett. 65, 3449 (1990)
- 7) Weaire, D. et al.: Phil. Mag. B48, 245 (1983)
- 8) Weaire, D. et al.: Phil. Mag. Lett. 62, 427 (1990)
- 9) Kawasaki, K. et al.: Phil. Mag. B60, 399 (1989)
- 10) Thompson, C. V. et al.: Acta Metall. 35, 887 (1987)
- 11) Wakai, F. et al.: Acta Mater. 48, 1297 (2000)
- 12) Anderson, M. P. et al.: Acta Metall. 32, 783 (1984)
- 13) Srolovitz, D. J. et al.: Acta Metall. 32, 793 (1984)
- 14) Fan, D. et al.: Acta Mater. 45, 611 (1997)
- 15) Fan, D. et al.: Acta Mater. 45, 1115 (1997)
- 16) Kazaryan, A. et al.: Acta Mater. 50, 2491 (2002)
- 17) Ma, N. et al.: Acta Mater. 50, 3869 (2002)
- 18) Kim, S. G. et al.: Phys. Rev. E74, 061605 (2006)
- 19) Warren, J. A. et al.: Acta Mater. 51, 6035 (2003)

- 20) Kim, S. G. et al.: Acta Mater. 56, 3739 (2008)
- 21) Fan, D. et al.: Acta Mater. 45, 3297 (1997)
- 22) Krill, C. E. et al.: Acta Mater. 50, 3057 (2002)
- 23) Vedantam, S. et al.: Phys. Rev. E73, 016703 (2006)
- 24) Gruber, J. et al.: Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 14, 1189 (2006)
- 25) Suwa, Y. et al.: Comput. Mater. Sci. 40, 40 (2007)
- 26) Suwa, Y. et al.: Scripta Mater. 55, 407 (2006)
- 27) Suwa, Y. et al.: Mat. Trans. 49, 704 (2008)
- 28) Koyama, T.: <br/>  $\sharp$   $\sub{b}$  <br/>  $\it{b}$ . 42, 379 (2003)
- 29) Koyama, T.: ふえらむ. 9, (240, 301, 376, 497, 905), (2004)
- 30) Allen, S. M. et al.: Acta Metall. 27, 1085 (1979)
- 31) Steinbach, I. et al.: Physica. D134, 385 (1999)
- 32) Suwa, Y. et al.: CAMP-ISIJ. 23, 348 (2010)
- 33) Kim, S. G. et al.: J. Crystal Growth. 261, 135 (2004)
- 34) Rowenhorst, D. J. et al.: Acta Mater. 58, 5511 (2010)
- 35) Aboav, D. A.: Metallography. 5, 251 (1970)
- 36) Weaire, D. et al.: Contemporary Physics. 25, 59 (1984)
- 37) Smith, C. S.: Trans. AIME. 175, 15 (1948)
- 38) Manohar, P. A. et al.: ISIJ Int. 38, 913 (1998)
- 39) Ryum, N. et al.: Scrita Metall. 17, 1281 (1983)
- 40) Nes, E. et al.: Acta Metall. 33, 11 (1985)

- 41) Ringer, S. P. et al.: Acta Metall. 37, 831 (1989)
- 42) Gladman, T.: Proc. R. Soc. Lond. Ser. A294, 298 (1966)
- 43) Haroun, N. A. et al.: J. Mater. Sci. 3, 326 (1968)
- 44) Hellman, P. et al.: Scand. J. Metall. 4, 211 (1975)
- 45) Louat, N.: Phil. Mag. A47, 903 (1983)
- 46) Hillert, M.: Acta Metall. 36, 3177 (1988)
- 47) Hunderi, O. et al.: Acta Metall. Mater. 40, 542 (1992)
- 48) Srolovitz, D. J. et al.: Acta Metall. 32, 1429 (1984)
- 49) Anderson, M. P. et al.: Scripta Metall. 23, 753 (1989)
- 50) Hassold, G. N. et al.: Scripta Metall. 24,101 (1990)
- 51) Kad, B. K. et al.: Mater. Sci. Eng. A238, 70 (1997)
- 52) Gao, J. et al.: Acta Mater. 45, 3653 (1997)
- 53) Soucail, M. et al.: Mater. Sci. Eng. A271, 1 (1999)
- 54) Miodownik, M. et al.: Scripta Mater. 42, 1173 (2000)
- 55) Moelans, N. et al.: Acta Mater. 53, 1771 (2005)
- 56) Moelans, N. et al.: Acta Mater. 54, 1175 (2006)
- 57) Sugden, A. A. B. et al.: Recent Trends in Welding Science and Technology. Ohio, 1989, ASM International
- 58) Hunderi, O. et al.: Acta Metall. 30, 739 (1982)
- 59) Abbruzzese, G.: Acta Metall. 33, 1329 (1985)



諏訪嘉宏 Yoshihiro SUWA
 鉄鋼研究所 薄板材料研究部 主任研究員
 工博
 千葉県富津市新富 20-1 〒 293-8511