

第11章 Phase-field 法1 (凝固)

近年、材料のナノからマイクロスケールにおける複雑な内部組織形成のシミュレーション手法として、Phase-field 法⁽¹⁾⁻⁽¹³⁾と呼ばれる方法が大きな進展を見せている。以下では凝固におけるPhase-field 法を例に取り、計算手法の基礎について説明し、その後、デンドライト組織形成について解説する。なおPhase-field 法全体の説明については、近年いくつかの解説⁽¹⁾⁻⁽¹³⁾が出ているのでそちらを参照されたい。

11-1 凝固におけるPhase-field 法の基礎

凝固におけるPhase-field法を例に取り計算手法の一連の流れを説明する⁽⁵⁾。凝固のPhase-field法では、液相と固相の界面を図11-1のように0から1に変化するスカラー連続関数 ϕ (Phase-field変数と呼ばれる)を用いて表現し、凝固における結晶成長過程を ϕ の時間および空間変化として表現する。したがって ϕ は時間 t と位置 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ の関数 $\phi(\mathbf{r}, t)$ である。物理的には、 $\phi(\mathbf{r}, t)$ は位置 \mathbf{r} 及び時間 t における固相の存在確率と解釈できる。この計算法の有益な点は、場の変数 $\phi(\mathbf{r}, t)$ を用いることによって、デンドライトのような複雑な固液界面形状を容易に表現することができる点にある。また界面の曲率、溶質分配および温度分布などの条件は、界面物性値から求まるパラメータを採用することによって自動的に満足されるので、この計算法は自由度に富み、かつ応用性の高い数値計算法となっている。次に系の全自由エネルギーおよび発展方程式について説明する。

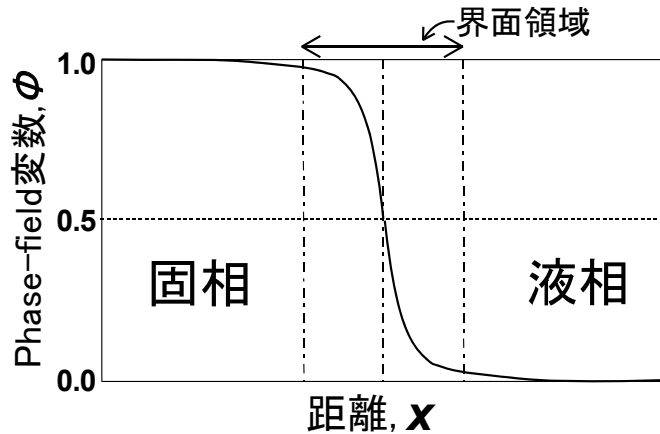


図 11-1 界面位置における Phase-field プロファイル

凝固組織全体を1つの系として、この系の全自由エネルギー F は、局所的な自由エネルギー密度を体積積分して、

$$F = \int_V \left\{ f(\phi, c, T) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 |\nabla \phi|^2 \right\} dV \quad (1)$$

にて表現される。 $f(\phi, c, T)$ は平均場近似の化学的自由エネルギーで、Phase-field 法では、通常、

$$f(\phi, c, T) \equiv h(\phi) f^S(c, T) + \{1 - h(\phi)\} f^L(c, T) + W^{SL} g(\phi) \quad (2)$$

にて定義される。 $f^S(c, T)$ および $f^L(c, T)$ はそれぞれ固相および液相の化学的自由エネルギーで、組成 c (例えばFe-C 2元系では炭素Cの濃度) および温度 T の関数として与えられる (c と T も場の変数で、位置 \mathbf{r} および時間 t の関数である点に注意)。 $h(\phi)$ は局所的な固相率に対応した単調増加関数で、 $h(0) = 0$ および $h(1) = 1$ を満たす。 $W^{SL} g(\phi)$ は固相と液相が混合しないように導入されたエネルギー障壁で、 $0 < \phi < 1$ の範囲で極大値を取る関数であり、 $\phi = 0$ および $\phi = 1$ で0と置かれる。 $h(\phi)$ と $g(\phi)$ の関数形としては、

$$h(\phi) \equiv \phi^3 (10 - 15\phi + 6\phi^2), \quad g(\phi) \equiv \phi^2 (1 - \phi)^2 \quad (3)$$

が使用される場合が多い。式(1)の積分内の第2項は勾配エネルギーと呼ばれ、単相状態に界面を導入したときの自由エネルギーの変動量で、物理的には界面エネルギーに対応する項である (界面エネルギーには界面領域 (図 11-1 参照) における平均場の化学的自由エネルギーも含まれるので、正

確には勾配エネルギーと界面エネルギーは一致するものではない点を記しておく)。 ε^2 は勾配エネルギー係数である。特に界面エネルギーに方位 θ 依存性を考慮する場合、その効果は ε の方位依存性として導入され、関数形としては主に、

$$\varepsilon(\theta) \equiv \varepsilon_0 \{1 + \nu \cos(k\theta)\} \quad (4)$$

が使用される。 ε_0 は定数、 ν は界面エネルギー異方性の大きさを表し、 k は θ 方向の界面エネルギーの周期を表す(たとえば2次元シミュレーションで、結晶が立方晶であり、 90° 毎に界面エネルギーに極小が現れるような場合には $k=4$ となる)。2次元シミュレーションでは、 θ は界面の法線ベクトルの x 軸からの角度にて定義され、phase-field変数 ϕ の空間勾配を用いて、

$$\tan \theta = \frac{\partial \phi / \partial y}{\partial \phi / \partial x}, \quad \theta = \tan^{-1} \frac{\partial \phi / \partial y}{\partial \phi / \partial x} \quad (5)$$

にて計算される(2次元の直交座標系を (x, y) とする)。 ν の値の設定については注意が必要で、 ν が $1/15$ を超える場合($\nu > 1/15$)、界面エネルギーが負となる θ の範囲($\varepsilon + \partial^2 \varepsilon / \partial \theta^2 < 0$ が成立する範囲)が出現してしまう。つまりこの範囲では安定な界面が存在し得ないことになり、したがって界面の平衡形状において、この θ 範囲の界面が現れず、界面方位が不連続に移り変わる部分が出る。このような場合、Phase-field法の数値計算に補正が必要となる。この補正計算の詳細はEgglestonらによってすでに提案されている⁽¹⁶⁾。さらに最近では界面エネルギーだけでなく、速度定数(界面の易動度に対応する項)にも、方位依存性を考慮する試みがUeharaらによって進められている⁽¹⁷⁾。

Phase-field法では、 ϕ の時間および空間発展は、系の全自由エネルギー F の ϕ による変分に比例すると仮定され、発展方程式として、

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_\phi \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (6)$$

が用いられる。 M_ϕ は界面の易動度である。この右辺の変分計算において、特に勾配エネルギー係数 ε^2 に方位依存性がある場合には注意が必要である。つまり式(5)より明らかなように、方位 θ がPhase-field変数 ϕ の空間勾配 $\nabla \phi$ の関数になっているので、変分計算において勾配エネルギー係数 $\varepsilon^2(\theta)$ も変分する必要があるからである。ちなみに2次元シミュレーションの場合において、 $\delta F / \delta \phi$ を具体的に書き下すと、

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = \frac{\partial f}{\partial \phi} + \frac{d}{dx} \left[\varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - \varepsilon^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] - \frac{d}{dy} \left[\varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right]$$

となる。ここで $\varepsilon' \equiv \partial \varepsilon / \partial \theta$ および $\varepsilon'' \equiv \partial^2 \varepsilon / \partial \theta^2$ である。

また温度場 T の時間変化の計算には、熱拡散方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T - p(\phi) \frac{L}{C_p} \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (7)$$

が用いられる。右辺第2項は凝固潜熱による熱の湧き出し項で、 α は熱拡散係数、 L は潜熱、 C_p は単位体積当たりの比熱である。 $p(\phi)$ は $p(0) = p(1) = 0$ で、 $\int_0^1 p(\phi) d\phi = 1$ を満たす関数であり、関数

$h(\phi)$ を用いて $p(\phi) \equiv \partial h / \partial \phi$ と定義される場合が多い。濃度場の時間発展の計算に対しては、拡散方程式

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{D_c(\phi)}{f_{cc}} \nabla \frac{\delta F}{\delta c} \right) \quad (8)$$

が使用される。 $D_c(\phi)$ は液相と固相の溶質元素の相互拡散係数を ϕ で重み付き平均した量であり、 f_{cc} は式(2)の組成 c による2階微分である。凝固における Phase-field 法は、式(6)~(8)を同時に数値計算して、凝固組織にける phase-field 変数 $\phi(\mathbf{r}, t)$ 、濃度場 $c(\mathbf{r}, t)$ 、および温度場 $T(\mathbf{r}, t)$ の時間変化を解析する手法である。

なお式(1)に濃度勾配エネルギー項が考慮されていない理由は、凝固の Phase-field 法では通常、界面エネルギーは全て phase-field 変数 ϕ の勾配エネルギーに繰り入れる近似がなされるからである。また以下に説明する KKS モデル⁽¹⁸⁾のように濃度場を常に局所平衡と仮定した場合には、計算モデル上結果的に、空間的に急峻な濃度勾配がほとんど存在しないことになるので、濃度勾配エネルギーを考慮する必要がなくなる。実際に Phase-field 法の計算モデルを作成して定量的な解析を行う際には、このあたりの仮定や設定条件を正確に理解しておくことが大切である。

さて通常、金属の凝固において、組織全体のサイズはマイクロメートルスケール程度であるが、固液界面幅は原子スケールの長さを持つ。差分法を用いて発展方程式を解く場合、この界面での Phase-field プロファイルが十分に表現できるだけの差分の解像度が要求されるので、凝固組織全体の差分分割数は極めて大きくなってしまう。このような場合には数値計算のテクニックとして、差分分割数を組織内の場所によって変化させる方法（重なり格子法もしくは解適合格子法）⁽¹⁹⁾の使用が考えられる。これに対し、Phase-field 法では、粗い差分分割をそのまま用いて、かつ界面部分の正確な温度場やポテンシャル場（もしくは化学的自由エネルギー）を正しく計算する手法も考案されている。合金の凝固におけるこの計算法の代表例が KKS モデル（Thin interface model と呼ばれる）である⁽¹⁸⁾。この計算法では、粗い差分分割から計算されるなだらかな $\phi(\mathbf{r}, t)$ と $c(\mathbf{r}, t)$ の関係式、および局所平衡の条件式、すなわち、

$$c(\mathbf{r}, t) = h\{\phi(\mathbf{r}, t)\}c_S(\mathbf{r}, t) + [1 - h\{\phi(\mathbf{r}, t)\}]c_L(\mathbf{r}, t) \quad (9)$$

$$\mu^S\{c_S(\mathbf{r}, t)\} = \mu^L\{c_L(\mathbf{r}, t)\} \quad (10)$$

を用いて、まず c_S と c_L を決定する（ $c(\mathbf{r}, t)$ と $\phi(\mathbf{r}, t)$ が与えられた時に $c_S(\mathbf{r}, t)$ と $c_L(\mathbf{r}, t)$ が求まる）。 c_S と c_L はそれぞれ固相と液相の局所平衡濃度（ここでは式(10)の平行接線の法則を満足する濃度を意味しているので注意）である。 μ^S と μ^L はそれぞれ固相と液相の化学ポテンシャルである。この c_S と c_L を用いて、式(2)の化学的自由エネルギーを

$$f(\phi, c, T) \equiv h(\phi)f^S\{c_S(c, \phi), T\} + \{1 - h(\phi)\}f^L\{c_L(c, \phi), T\} + W^{SL}g(\phi) \quad (11)$$

と変更することによって、濃度場は常に局所平衡の自由エネルギーを基礎に計算されることになる。つまり $c(\mathbf{r}, t)$ が界面において緩やかなプロファイルであっても、 $c_S(\mathbf{r}, t)$ と $c_L(\mathbf{r}, t)$ は界面においてシャープな界面を構成するので、界面における差分分割の粗さに起因する誤差が修正されるわけである。定式化の詳細については Kim らの論文⁽¹⁸⁾を参照されたい。重要な点は、このような補正まで考慮した場合、Phase-field 法は1原子面で構成されるシャープな界面にも定量的に適用できる方法になる点である。さらに最近 Karma⁽²⁰⁾によって、KKS モデルでは考慮されていなかった界面拡散や界面伸縮補正まで取り入れた解析も進められている。

以上が、合金の凝固における Phase-field 法の基本的な内容である。以下では、Fe-C系における凝固組織形成の Phase-field 法の代表例として、Ode と Suzuki の研究⁽¹⁴⁾を紹介したい。もちろんここでは

KKSモデルが使用されている。

11-2 Fe-C 系における凝固組織形成⁽¹⁴⁾

Ode と Suzuki は Fe-C 系を例に、融液が鑄型で核形成・成長する初期凝固過程の組織形成の Phase-field シミュレーションを行った⁽¹⁴⁾。図 11-2 は Fe-0.5mol%C 合金における凝固初期のデンドライト成長過程の計算で、固相の優先成長方位が熱流の方向（横方向）と一致するように設定した場合の結果である。

図(a)に示されるように、凝固初期に内部方向（図で左向き）と表面方向（図で下向き）に1次アームが成長する。融液表面（図の右端）が冷却され続けるために、後者の成長速度は前者に比べ大きい。2次アームについては、表面に沿った1次アームからの2次アームは著しく成長する(図(b))。さらにこの2次アームは競合成長するとともに、急速凝固試料でしばしば観察されるセル形態を取る(図(c))。その後、先行したセルが選択されて、側枝を生じデンドライト形態へと遷移する(図(d)-(f))。以上のように、Phase-field 法に基づき、熱流下における凝固組織形成が精度良くシミュレーションされている。さらに論文では、この合金に P を添加した場合の凝固組織の変化や、熱流場とアームの優先成長方位との関係についても議論されている。

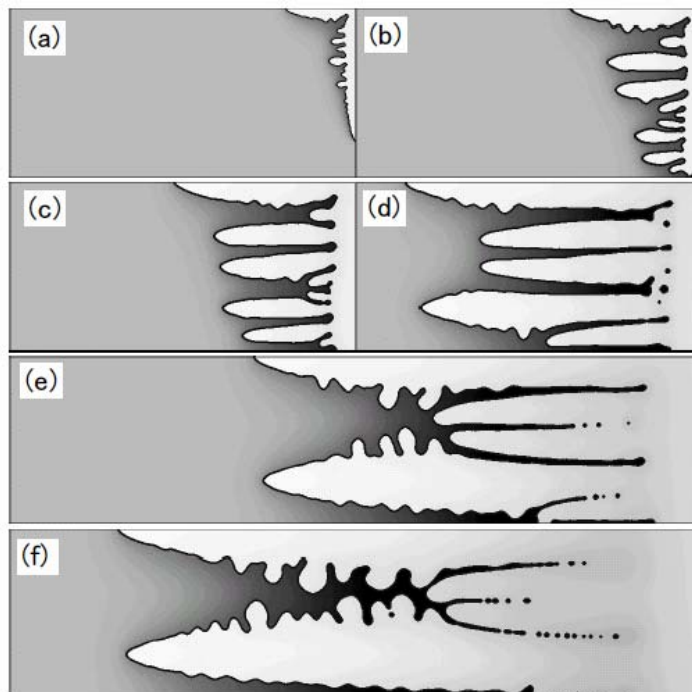


図 11-2 Fe-0.5mol%C 合金の初期凝固デンドライト成長⁽¹⁴⁾
(a) 1.0 ms, (b) 3.0ms, (c) 5.0ms, (d) 10ms, (e) 17ms, (f) 24ms

参考文献

- (1) R.Kobayashi : Physica D, **63**(1993),410.
- (2) 小林 亮 : 金属学会セミナー「パソコンで学ぶ材料工学」,(2001), 67.
- (3) A.A.Wheeler,W.J.Boettinger and G.B.McFadden:Phys.Rev.A, **45**(1992), 7424.
- (4) J.A.Warren and W.J.Boettinger : Acta Metall.Mater., **43**(1995), 689.
- (5) 鈴木俊夫: 金属学会セミナー「凝固および結晶成長」,(2002), 49.
- (6) M.Ode, S.G.Kim and T.Suzuki: ISIJ Int., **41**(2001),1076.
- (7) 大出真知子,鈴木俊夫:鑄造工学,73(2001),335.
- (8) L-Q.Chen: Annu.Rev.Mater.Res., **32**(2002),113.
- (9) 小山敏幸:ふえらむ, **9**(2004), 240,301,376,497.
- (10) 小山敏幸:第 180・181 回西山記念技術講座「鉄鋼材料の組織と材質予測技術」,(2004), 47.
- (11) 小山敏幸:日本金属学会会報"まてりあ", **42**(2003), 397, 470.
- (12) 宮崎 亨:日本金属学会会報"まてりあ", **41**(2002),334.
- (13) 小山敏幸,小坂井孝生,宮崎亨:日本金属学会会報"まてりあ",**38**(1999), 624.
- (14) M.Ode and T.Suzuki: ISIJ International, **42**(2002), 368.

***** 参考 *****

勾配エネルギー係数に方位依存性が存在する場合のポテンシャル式の算出について、具体的に説明する。

1. 変分法

まず始めに、変分法の解説から始める。

1-1. 1次元で、変数に $c, x, c' = \partial c / \partial x$ を持つ場合

汎関数を以下のように設定する。

$$J = \int \left[F \left\{ c(x), x, \frac{\partial c}{\partial x} \right\} \right] dx \quad (1)$$

第一変分は、

$$\delta J = \left\{ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J(c + \varepsilon v) - J(c)}{\varepsilon} \right\} \varepsilon \quad (2)$$

さらに、微分が定義できる場合には、

$$\delta J = \left(\frac{\partial J(c + \varepsilon v)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=0} \varepsilon \quad (3)$$

にて計算されるので、

$$\begin{aligned} \delta J &= \left(\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int F \left\{ c + \varepsilon v, x, \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right) + \varepsilon \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) \right\} dx \right)_{\varepsilon=0} \varepsilon = \left(\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int F \{ c + \varepsilon v, x, c' + \varepsilon v' \} dx \right)_{\varepsilon=0} \varepsilon \\ &= \left(\int \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) v dx + \int \left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) v' dx \right) \varepsilon = \int \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) \delta c dx + \int \left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) \delta c' dx \end{aligned} \quad (4)$$

この第2項を部分積分する。

$$\int \left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) \delta c' dx = \left[\left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) \delta c \right] - \int \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) \delta c dx \quad (5)$$

したがって、

$$\begin{aligned} \delta J &= \int \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) \delta c dx + \int \left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) \delta c' dx = \int \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) \delta c dx + \left[\left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) \delta c \right] - \int \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) \delta c dx \\ &= \left[\left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) \delta c \right] + \int \left\{ \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) \right\} \delta c dx \end{aligned} \quad (6)$$

これよりオイラー方程式は、

$$\left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c'} \right) = 0 \quad (7)$$

なおこの第2項内の $(\partial F / \partial c')$ は、 $c, x, \partial c / \partial x$ の関数であるので、 x で微分する場合には合成関数として扱わなくてはならない。たとえば、

$$dF = \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)(dx) + \left(\frac{\partial F}{\partial c}\right)(dc) + \left(\frac{\partial F}{\partial c'}\right)(dc') = \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)(dx) + \left(\frac{\partial F}{\partial c}\right)(dc) + \left(\frac{\partial F}{\partial c'}\right)\{d(c')\} \quad (8)$$

$$\frac{dF}{dx} = \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial F}{\partial c}\right)\left(\frac{dc}{dx}\right) + \left(\frac{\partial F}{\partial c'}\right)\left\{\frac{d}{dx}\left(\frac{dc}{dx}\right)\right\} = \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial F}{\partial c}\right)c' + \left(\frac{\partial F}{\partial c'}\right)c''$$

であるから、同様にして、

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial c'}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial F}{\partial c'}\right) + \left(\frac{\partial}{\partial c}\right)\left(\frac{\partial F}{\partial c'}\right)c' + \left(\frac{\partial}{\partial c'}\right)\left(\frac{\partial F}{\partial c'}\right)c'' \quad (9)$$

が得られる。

1-2. 2次元で、変数に $c(x, y), x, y, c_{,x} = \partial c / \partial x, c_{,y} = \partial c / \partial y$ を持つ場合

まず汎関数を以下のように設定する。

$$J = \iint \left[F \left\{ c(x, y), x, y, \frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial c}{\partial y} \right\} \right] dx dy \quad (10)$$

第一変分は、

$$\delta J = \left\{ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J\{c(x, y) + \varepsilon v(x, y)\} - J\{c(x, y)\}}{\varepsilon} \right\} \varepsilon \quad (11)$$

にて計算されるので、

$$\begin{aligned} \delta J &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\varepsilon} \left\{ \iint F(c + \varepsilon v, x, y, c_{,x} + \varepsilon v_{,x}, c_{,y} + \varepsilon v_{,y}) dx dy - \iint F(c, x, y, c_{,x}, c_{,y}) dx dy \right\} \right] \varepsilon \\ &= \left(\iint \left(\frac{\partial F}{\partial c}\right) v dx dy + \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c_x}\right) v_{,x} dx dy + \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c_y}\right) v_{,y} dx dy \right) \varepsilon \\ &= \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c}\right) \delta c dx dy + \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c_x}\right) \delta c_{,x} dx dy + \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c_y}\right) \delta c_{,y} dx dy \end{aligned} \quad (12)$$

この第2および3項を部分積分する。

$$\begin{aligned} \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c_x}\right) \delta c_{,x} dx dy &= \int \left\{ \int \left(\frac{\partial F}{\partial c_x}\right) \delta c_{,x} dx \right\} dy \\ &= \int \left\{ \left[\left(\frac{\partial F}{\partial c_x}\right) \delta c \right] - \int \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c_x}\right) \delta c dx \right\} dy = - \iint \left\{ \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c_x}\right) \delta c \right\} dx dy \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned}
\iint \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \delta c_{,y} dx dy &= \int \left\{ \int \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \delta c_{,y} dy \right\} dx \\
&= \int \left\{ \left[\left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \delta c \right] - \int \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \delta c dy \right\} dx = - \iint \left\{ \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \delta c \right\} dx dy
\end{aligned} \tag{14}$$

したがって、

$$\begin{aligned}
\delta J &= \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) \delta c dx dy + \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) \delta c_{,x} dx dy + \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \delta c_{,y} dx dy \\
&= \iint \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) \delta c dx dy - \iint \left\{ \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) \delta c \right\} dx dy - \iint \left\{ \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \delta c \right\} dx dy \\
&= \iint \left\{ \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \right\} \delta c dx dy
\end{aligned} \tag{15}$$

これよりオイラー方程式は、

$$\left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) = 0 \tag{16}$$

ここで、 F は $c, x, y, c_{,x}, c_{,y}$ の関数であるので、 x で微分する場合には合成関数として扱わなくてはならない。たとえば、

$$\begin{aligned}
dF &= \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right) (dx) + \left(\frac{\partial F}{\partial y} \right) (dy) + \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) (dc) + \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) \{d(c_{,x})\} + \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \{d(c_{,y})\} \\
\frac{dF}{dx} &= \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) \left(\frac{dc}{dx} \right) + \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx^2} \right) + \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx dy} \right)
\end{aligned} \tag{17}$$

同様に

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) &= \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial c} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) \left(\frac{dc}{dx} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial c_{,x}} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx^2} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial c_{,y}} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx dy} \right) \\
&= \left(\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial c_{,x}} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c \partial c_{,x}} \right) \left(\frac{dc}{dx} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_{,x}^2} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx^2} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_{,y} \partial c_{,x}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx dy} \right) \\
\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) &= \left(\frac{\partial}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial c} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \left(\frac{dc}{dy} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial c_{,x}} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx dy} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial c_{,y}} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dy^2} \right) \\
&= \left(\frac{\partial^2 F}{\partial y \partial c_{,y}} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c \partial c_{,y}} \right) \left(\frac{dc}{dy} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_{,x} \partial c_{,y}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx dy} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_{,y}^2} \right) \left(\frac{d^2 c}{dy^2} \right)
\end{aligned} \tag{18}$$

である。したがって、最終的にオイラー方程式は次式にて与えられる。

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) \\
& = \left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) - \left\{ \left(\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial c_{,x}} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c \partial c_{,x}} \right) \left(\frac{dc}{dx} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_{,x}^2} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx^2} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_{,y} \partial c_{,x}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx dy} \right) \right\} \\
& - \left\{ \left(\frac{\partial^2 F}{\partial y \partial c_{,y}} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c \partial c_{,y}} \right) \left(\frac{dc}{dy} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_{,y}^2} \right) \left(\frac{d^2 c}{dy^2} \right) + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial c_{,x} \partial c_{,y}} \right) \left(\frac{d^2 c}{dx dy} \right) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{19}$$

2. 勾配エネルギー係数の方位依存性

勾配エネルギー係数が方位に依存する場合を考える。まず勾配エネルギー係数を次式のように定義する。

$$\kappa(\theta) = \kappa_0 \gamma(\theta) = \kappa_0 \{1 + \gamma \cos(k_\lambda \theta)\}^2 \tag{1}$$

$$\gamma(\theta) = \{1 + \gamma \cos(k_\lambda \theta)\}^2 \tag{2}$$

ここで、界面に垂直方向の方位と界面における order parameter の方位には次の関係が存在する。(変数 c は、任意の order parameter であるが、イメージし易くするために濃度場と考えてもよい。)

$$\tan \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)}{\left(\frac{\partial c}{\partial y} \right)} = \frac{c_{,x}}{c_{,y}} \tag{3}$$

これより、次のような関係式が導かれる。

$$\begin{aligned}
& \frac{(\cos \theta)^2 + (\sin \theta)^2}{(\cos \theta)^2} d\theta = \frac{1}{\cos^2 \theta} d\theta = \frac{1}{c_{,y}} dc_{,x} \\
& \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,x}} \right) = \frac{\cos^2 \theta}{c_{,y}} = \frac{c_{,y}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2}
\end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\cos^2 \theta} d\theta = -\frac{c_{,x}}{(c_{,y})^2} dc_{,y} \\
& \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,y}} \right) = -\frac{c_{,x}}{(c_{,y})^2} \cos^2 \theta = -\frac{c_{,x}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2}
\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{c_{,x}}{c_{,y}}, \quad \frac{1 - \cos^2 \theta}{\cos^2 \theta} = \frac{(c_{,x})^2}{(c_{,y})^2}, \quad \frac{(c_{,x})^2}{(c_{,y})^2} \cos^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta \\
& \cos^2 \theta = \frac{1}{1 + \frac{(c_{,x})^2}{(c_{,y})^2}} = \frac{(c_{,y})^2}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2}
\end{aligned} \tag{6}$$

さて、系の自由エネルギーは次式にて与えられる。

$$F = \int_{\mathbf{r}} [f\{c(\mathbf{r})\} + \kappa\{\theta(\mathbf{r})\}(\nabla c)^2] d\mathbf{r} \quad (7)$$

式(3)より、 θ は c_x, c_y の関数であるので、

$$F = \int_{\mathbf{r}} [f\{c(\mathbf{r})\} + \kappa\{\nabla c\}(\nabla c)^2] d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{r}} \left[f\{c(\mathbf{r})\} + \kappa\{\theta(c_x, c_y)\} \left\{ \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial c}{\partial y} \right)^2 \right\} \right] d\mathbf{r} \quad (8)$$

と書くことが出来る。式(7)内の化学的自由エネルギーの c に関する変分、すなわち化学ポテンシャルは、式(9)にて与えられる。

$$\mu(\mathbf{r}) = \left(\frac{\partial f}{\partial c} \right) \quad (9)$$

式(8)の右辺積分内第2項の変分は、以下のように計算される。まず、この項を改めて次式のように置く。

$$E_g = \kappa\{\theta(c_x, c_y)\} \{(c_x)^2 + (c_y)^2\} \quad (10)$$

式(10)を c_x および c_y にて偏微分する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_g}{\partial c_x} &= \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_x} \right) \{(c_x)^2 + (c_y)^2\} + 2\kappa\{\theta(c_x, c_y)\}(c_x) \\ &= \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) \left(\frac{c_y}{(c_x)^2 + (c_y)^2} \right) \{(c_x)^2 + (c_y)^2\} + 2\kappa\{\theta(c_x, c_y)\}(c_x) \\ &= \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_y + 2\kappa\{\theta(c_x, c_y)\}(c_x) \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_g}{\partial c_y} &= \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_y} \right) \{(c_x)^2 + (c_y)^2\} + 2\kappa\{\theta(c_x, c_y)\}(c_y) \\ &= \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) \left(-\frac{c_x}{(c_x)^2 + (c_y)^2} \right) \{(c_x)^2 + (c_y)^2\} + 2\kappa\{\theta(c_x, c_y)\}(c_y) \\ &= -\left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_x + 2\kappa\{\theta(c_x, c_y)\}(c_y) \end{aligned} \quad (12)$$

ここで、式(1)より、

$$\kappa(\theta) = \kappa_0 \{1 + \gamma \cos(k_\lambda \theta)\}^2 \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \kappa(\theta)}{\partial \theta} &= 2\kappa_0 \{1 + \gamma \cos(k_\lambda \theta)\} \{-\gamma \sin(k_\lambda \theta)\} k_\lambda \\ &= -2\gamma k_\lambda \kappa_0 \{\sin(k_\lambda \theta) + \gamma \sin(k_\lambda \theta) \cos(k_\lambda \theta)\} = -\gamma k_\lambda \kappa_0 \{2 \sin(k_\lambda \theta) + \gamma \sin(2k_\lambda \theta)\} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\frac{\partial^2 \kappa(\theta)}{\partial \theta^2} = -\gamma k_\lambda \kappa_0 \{2k_\lambda \cos(k_\lambda \theta) + 2\gamma k_\lambda \cos(2k_\lambda \theta)\} = -2\gamma k_\lambda^2 \kappa_0 \{\cos(k_\lambda \theta) + \gamma \cos(2k_\lambda \theta)\} \quad (15)$$

である。さらに、式(11)(12)を x および y にて常微分する。

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dx} \left[\left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,y} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} (c_{,x}) \right] \\ &= \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) \left\{ \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,x}} \right) c_{,xx} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,y}} \right) c_{,yx} \right\} c_{,y} + \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,yx} + 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) \left\{ \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,x}} \right) c_{,xx} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,y}} \right) c_{,yx} \right\} c_{,x} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} c_{,xx} \\ &= \left\{ \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,x}} \right) c_{,xx} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,y}} \right) c_{,yx} \right\} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,y} + 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,x} \right\} + \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,yx} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} c_{,xx} \\ &= \left\{ \frac{c_{,y} c_{,xx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} - \frac{c_{,x} c_{,yx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,y} + 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,x} \right\} + \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,yx} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} c_{,xx} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dy} \left[- \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,x} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} (c_{,y}) \right] \\ &= - \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) \left\{ \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,x}} \right) c_{,xy} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,y}} \right) c_{,yy} \right\} c_{,x} - \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,xy} + 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) \left\{ \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,x}} \right) c_{,xy} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,y}} \right) c_{,yy} \right\} c_{,y} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} c_{,yy} \\ &= - \left\{ \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,x}} \right) c_{,xy} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial c_{,y}} \right) c_{,yy} \right\} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,x} - 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,y} \right\} - \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,xy} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} c_{,yy} \\ &= - \left\{ \frac{c_{,y} c_{,xy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} - \frac{c_{,x} c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,x} - 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,y} \right\} - \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,xy} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} c_{,yy} \\ &= \left\{ \frac{c_{,x} c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} - \frac{c_{,y} c_{,xy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,x} - 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,y} \right\} - \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,xy} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} c_{,yy} \end{aligned} \quad (17)$$

オイラー方程式は、 $\left(\frac{\partial F}{\partial c} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,x}} \right) - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial F}{\partial c_{,y}} \right) = 0$ にて与えられるので、最終的に、全ポテンシャルは式(18)にて計算される。

$$\begin{aligned} \chi &= \mu - \frac{d}{dx} \left[\left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,y} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} (c_{,x}) \right] - \frac{d}{dy} \left[- \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,x} + 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} (c_{,y}) \right] \\ &= \mu - \left\{ \frac{c_{,y} c_{,xx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} - \frac{c_{,x} c_{,yx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,y} + 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,x} \right\} - \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,yx} - 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} c_{,xx} \\ &\quad - \left\{ \frac{c_{,x} c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} - \frac{c_{,y} c_{,xy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,x} - 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,y} \right\} + \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,xy} - 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} c_{,yy} \\ &= \mu - 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} (c_{,xx} + c_{,yy}) - \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) (c_{,yx} - c_{,xy}) - \frac{1}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \left[\begin{aligned} & (c_{,y} c_{,xx} - c_{,x} c_{,yx}) \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,y} + 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,x} \right\} \\ & + (c_{,x} c_{,yy} - c_{,y} c_{,xy}) \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,x} - 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,y} \right\} \end{aligned} \right] \\ &= \mu - 2\kappa \{ \theta(c_{,x}, c_{,y}) \} (c_{,xx} + c_{,yy}) - \frac{1}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \left[\begin{aligned} & (c_{,y} c_{,xx} - c_{,x} c_{,yx}) \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,y} + 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,x} \right\} \\ & + (c_{,x} c_{,yy} - c_{,y} c_{,xy}) \left\{ \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} \right) c_{,x} - 2 \left(\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} \right) c_{,y} \right\} \end{aligned} \right] \end{aligned} \quad (18)$$

また上式右辺の最後の項は、 $\kappa = \frac{1}{2}\varepsilon^2$ と置いて、

$$\frac{\partial \kappa}{\partial \theta} = \varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial \theta} = \varepsilon \varepsilon'$$

$$\frac{\partial^2 \kappa}{\partial \theta^2} = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \theta} \right)^2 + \varepsilon \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \theta^2} = \varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon''$$

として、

$$\begin{aligned} & -\{(\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'')c_{,y} - 2\varepsilon \varepsilon' c_{,x}\} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xx} - c_{,x}c_{,yx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} + \{(\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'')c_{,x} + 2\varepsilon \varepsilon' c_{,y}\} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xy} - c_{,x}c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} \\ &= (\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'')c_{,x} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xy} - c_{,x}c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} - (\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'')c_{,y} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xx} - c_{,x}c_{,yx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} + 2\varepsilon \varepsilon' c_{,x} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xx} - c_{,x}c_{,yx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} + 2\varepsilon \varepsilon' c_{,y} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xy} - c_{,x}c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} \\ &= 2\varepsilon \varepsilon' c_{,x} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xx} - c_{,x}c_{,yx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} + 2\varepsilon \varepsilon' c_{,y} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xy} - c_{,x}c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} + (\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'')c_{,x} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xy} - c_{,x}c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} - (\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'')c_{,y} \left\{ \frac{c_{,y}c_{,xx} - c_{,x}c_{,yx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \right\} \\ &= 2\varepsilon \varepsilon' \frac{c_{,x}c_{,y}c_{,xx} - c_{,x}c_{,x}c_{,yx} + c_{,y}c_{,y}c_{,xy} - c_{,x}c_{,y}c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} + (\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'') \frac{c_{,x}c_{,y}c_{,xy} - c_{,x}c_{,x}c_{,yy} - c_{,y}c_{,y}c_{,xx} + c_{,x}c_{,y}c_{,yx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} \\ &= 2\varepsilon \varepsilon' \left\{ \frac{c_{,x}c_{,y}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} (c_{,xx} - c_{,yy}) + \frac{c_{,y}c_{,y} - c_{,x}c_{,x}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} c_{,xy} \right\} + (\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'') \left\{ -\frac{c_{,x}c_{,x}c_{,yy} + c_{,y}c_{,y}c_{,xx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} + \frac{2c_{,x}c_{,y}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} c_{,xy} \right\} \\ &= \varepsilon \varepsilon' \left\{ -\frac{2c_{,x}c_{,y}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} (c_{,yy} - c_{,xx}) - 2\frac{c_{,x}c_{,x} - c_{,y}c_{,y}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} c_{,xy} \right\} + \frac{1}{2}(\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'') \left\{ \frac{c_{,y}c_{,y} - c_{,x}c_{,x}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} (c_{,yy} - c_{,xx}) - (c_{,xx} + c_{,yy}) + \frac{4c_{,x}c_{,y}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} c_{,xy} \right\} \\ &= -\varepsilon \varepsilon' \{ (c_{,yy} - c_{,xx}) \sin 2\theta + 2c_{,xy} \cos 2\theta \} + \frac{1}{2}(\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'') \{ -(c_{,yy} - c_{,xx}) \cos 2\theta - (c_{,xx} + c_{,yy}) + 2 \sin 2\theta c_{,xy} \} \\ &= -\varepsilon \varepsilon' \{ (c_{,yy} - c_{,xx}) \sin 2\theta + 2c_{,xy} \cos 2\theta \} + \frac{1}{2}(\varepsilon'^2 + \varepsilon \varepsilon'') \{ 2 \sin 2\theta c_{,xy} - (c_{,xx} + c_{,yy}) - (c_{,yy} - c_{,xx}) \cos 2\theta \} \end{aligned}$$

と変形することも出来る。なおここで、

$$\begin{aligned} -\frac{2c_{,x}c_{,x}c_{,yy} + 2c_{,y}c_{,y}c_{,xx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} &= -\frac{2c_{,x}c_{,x}c_{,yy} + 2c_{,y}c_{,y}c_{,xx}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} + (c_{,xx} + c_{,yy}) - (c_{,xx} + c_{,yy}) \\ &= \frac{-2c_{,x}c_{,x}c_{,yy} - 2c_{,y}c_{,y}c_{,xx} + c_{,x}c_{,x}c_{,xx} + c_{,x}c_{,x}c_{,yy} + c_{,y}c_{,y}c_{,xx} + c_{,y}c_{,y}c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} - (c_{,xx} + c_{,yy}) \\ &= \frac{-c_{,x}c_{,x}c_{,yy} - c_{,y}c_{,y}c_{,xx} + c_{,x}c_{,x}c_{,xx} + c_{,y}c_{,y}c_{,yy}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} - (c_{,xx} + c_{,yy}) \\ &= \frac{c_{,y}c_{,y} - c_{,x}c_{,x}}{(c_{,x})^2 + (c_{,y})^2} (c_{,yy} - c_{,xx}) - (c_{,xx} + c_{,yy}) \end{aligned}$$

である。

付録 (純金属におけるデンドライト成長の Phase-field シミュレーションプログラム)

まず[R.Kobayashi : Physica D, 63(1993),410-423.]に従い関係式の定式化を行う。phase field 変数を $s(\mathbf{r}, t)$ とし、

$$s(\mathbf{r}, t) = 0 : \text{液体} \quad s(\mathbf{r}, t) = 1 : \text{固体}$$

とする。系の全自由エネルギーは、

$$G_{system} = \int_{\mathbf{r}} (G_c + E_{surf}) d\mathbf{r} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} G_c \{s(\mathbf{r}, t)\} &= \frac{1}{4} s^2 (1-s)^2 - \frac{1}{6} m(T) s^2 (3-2s) = \frac{1}{4} (s^2 - 2s^3 + s^4) - \frac{1}{2} m(T) s^2 + \frac{1}{3} m(T) s^3 \\ &= \frac{1}{4} s^4 - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} m(T) \right) s^3 + \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2} m(T) \right) s^2 \end{aligned} \quad (2)$$

$$E_{surf}(\nabla s(\mathbf{r}, t)) = \frac{1}{2} \varepsilon(\theta)^2 |\nabla s(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (3)$$

にて与えられ、全自由エネルギーの phase field 変数による変分は、

$$\frac{\delta G_{system}}{\delta s} = \left(\frac{\partial G_c}{\partial s} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_x} \right) - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_y} \right) \quad (4)$$

にて計算される。化学的自由エネルギーの phase field 変数による微分は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_c \{s(\mathbf{r}, t)\}}{\partial s} &= \frac{1}{2} s(1-s)(1-2s) - m(T)s(1-s) = s(1-s) \left(-s + \frac{1}{2} - m(T) \right) \\ \therefore -\frac{\partial G_c \{s(\mathbf{r}, t)\}}{\partial s} &= s(1-s) \left(s - \frac{1}{2} + m(T) \right) \end{aligned} \quad (5)$$

となる。 $m(T)$ は結晶化の駆動力を表し、通常は、

$$m(T) = \gamma(T_e - T) \quad (6)$$

にて与えられるが、ここでは、

$$m(T) = \frac{\alpha}{\pi} \tan^{-1} \{ \gamma(T_e - T) \} \quad (7)$$

を用いる。勾配エネルギー係数については方向依存性を考慮し、

$$\varepsilon = \bar{\varepsilon} \sigma(\theta) \quad (8)$$

$$\sigma(\theta) = 1 + \delta \cos[j(\theta - \theta_0)] \quad (9)$$

と仮定する。特に2次元計算では、Phase field 変数勾配と方位の間に、

$$\tan \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{\left(\frac{\partial s}{\partial y} \right)}{\left(\frac{\partial s}{\partial x} \right)} = \frac{s_{,y}}{s_{,x}} \quad (10)$$

の関係が成立する。なお $s_{,x} = 0$, $s_{,y} < 0$ の場合には $\theta = \pi/2$ 、および $s_{,x} = 0$, $s_{,y} > 0$ の時には $\theta = -\pi/2$ である。

さて、ここで関係式を導いて置こう。

$$\frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{s_{,y}}{s_{,x}}, \quad \frac{1 - \cos^2 \theta}{\cos^2 \theta} = \frac{(s_{,y})^2}{(s_{,x})^2}, \quad \frac{(s_{,y})^2}{(s_{,x})^2} \cos^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta$$

$$\therefore \cos^2 \theta = \frac{1}{1 + \frac{(s_{,y})^2}{(s_{,x})^2}} = \frac{(s_{,x})^2}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \quad (11)$$

より、

$$\frac{1}{\cos^2 \theta} d\theta = -\frac{s_{,y}}{(s_{,x})^2} ds_{,x}, \quad \therefore \left(\frac{\partial \theta}{\partial s_{,x}} \right) = -\frac{s_{,y}}{(s_{,x})^2} \cos^2 \theta = -\frac{s_{,y}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2}$$

$$\frac{(\cos \theta)^2 + (\sin \theta)^2}{(\cos \theta)^2} d\theta = \frac{1}{\cos^2 \theta} d\theta = \frac{1}{s_{,x}} ds_{,y}, \quad \therefore \left(\frac{\partial \theta}{\partial s_{,y}} \right) = \frac{\cos^2 \theta}{s_{,x}} = \frac{s_{,x}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \quad (12)$$

である。

さて勾配エネルギーを $s_{,x}$ と $s_{,y}$ でそれぞれ偏微分しよう。式(12)を用いて、

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{surf}}{\partial s_{,x}} &= \varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial \theta}{\partial s_{,x}} \right) \left\{ (s_{,x})^2 + (s_{,y})^2 \right\} + \varepsilon^2 s_{,x} = \varepsilon \varepsilon' \left(-\frac{s_{,y}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \right) \left\{ (s_{,x})^2 + (s_{,y})^2 \right\} + \varepsilon^2 s_{,x} \\ &= -\varepsilon \varepsilon' s_{,y} + \varepsilon^2 s_{,x} \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{surf}}{\partial s_{,y}} &= \varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial \theta}{\partial s_{,y}} \right) \left\{ (s_{,x})^2 + (s_{,y})^2 \right\} + \varepsilon^2 s_{,y} = \varepsilon \varepsilon' \left(\frac{s_{,x}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \right) \left\{ (s_{,x})^2 + (s_{,y})^2 \right\} + \varepsilon^2 s_{,y} \\ &= \varepsilon \varepsilon' s_{,x} + \varepsilon^2 s_{,y} \end{aligned}$$

と計算される。なお ε' は、

$$\varepsilon' = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \theta} \right) = \bar{\varepsilon} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \theta} \right) = -\bar{\varepsilon} j \delta \sin[j(\theta - \theta_0)]$$

$$\varepsilon'' = \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \theta^2} \right) = \bar{\varepsilon} \left(\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \theta^2} \right) = -\bar{\varepsilon} j^2 \delta \cos[j(\theta - \theta_0)] \quad (14)$$

である。これより式(4)の勾配エネルギーの変分部分は、

$$-\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_{,x}} \right) - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_{,y}} \right) = \frac{d}{dx} \left[\varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial s}{\partial y} \right) - \varepsilon^2 \left(\frac{\partial s}{\partial x} \right) \right] - \frac{d}{dy} \left[\varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial s}{\partial x} \right) + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial s}{\partial y} \right) \right] \quad (15)$$

となり、界面発展方程式は、式(5)と(15)から、

$$\begin{aligned}
\tau \frac{\partial s}{\partial t} &= -\frac{\delta G_{system}}{\delta s} \\
&= -\left[\left(\frac{\partial G_c}{\partial s} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_x} \right) - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_y} \right) \right] \\
&= s(1-s) \left(s - \frac{1}{2} + m(T) \right) + \frac{d}{dx} \left[-\varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial s}{\partial y} \right) + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial s}{\partial x} \right) \right] + \frac{d}{dy} \left[\varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial s}{\partial x} \right) + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial s}{\partial y} \right) \right] \\
&= s(1-s) \left(s - \frac{1}{2} + m(T) \right) \\
&\quad - \frac{d}{dx} \left[\varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial s}{\partial y} \right) \right] + \frac{d}{dy} \left[\varepsilon \varepsilon' \left(\frac{\partial s}{\partial x} \right) \right] + \frac{d}{dx} \left[\varepsilon^2 \left(\frac{\partial s}{\partial x} \right) \right] + \frac{d}{dy} \left[\varepsilon^2 \left(\frac{\partial s}{\partial y} \right) \right]
\end{aligned} \tag{16}$$

と表現される。

また、伝熱方程式は、

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla^2 T + K \frac{\partial s}{\partial t} \tag{17}$$

にて与えられる。

・揺動項について

実際の計算では、次のように式(16)右辺に結晶度場に関する揺動項が追加される。

$$\tau \frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{\delta G_{system}}{\delta s} + as(1-s)f_{rnd} \tag{18}$$

a は揺らぎの強さであり、 f_{rnd} は-0.5~0.5の乱数である。揺動項に $s(1-s)$ が含まれていることが重要で、この関数は、 $s=0.5$ にピークを持ち $s=0, s=1$ で $s(1-s)=0$ となる上に凸の関数であるので、揺動は $s=0.5$ 付近、すなわち凝固界面部分に集中することになる。もし、この揺動項における $s(1-s)$ を省略し、 $[as(1-s)f_{rnd} \rightarrow af_{rnd}]$ のように単なる乱数ノイズにすると、本来、結晶度勾配が存在しない領域 $[s \cong 0, s \cong 1]$ においても、このノイズに起因する勾配ポテンシャル項が0ではなくなり、 $\partial s / \partial t$ が値を持ち、さらにこれが式(17)の潜熱項を経由して温度場に派生し、温度場を大きく揺らがせてしまう。これは計算のエラーを引き起こす。揺動項における $s(1-s)$ は、結晶度勾配が存在しない領域 $[s \cong 0, s \cong 1]$ におけるノイズを軽減し、かつノイズを界面に集中させ、温度場の陽動を界面近傍に限定する働きを有するのである。

・各種パラメータ設定

シミュレーションに必要な各種変数は、以下のようなになる。

$$\bar{\varepsilon} = 0.01, \delta = 0.0 \leftrightarrow 0.05, j = 4, \theta_0 = 0$$

$$\tau = 0.0003, \Delta t = 0.0004, a = 0.01, f_{rnd} = [-0.5, 0.5]$$

$$\alpha = 0.9, \gamma = 10.0, T_e = 1, T = 0$$

$$K = 0.8 \leftrightarrow 2.0$$

$$L = 18 \times 18, N = 300 \times 300$$

特に、融点 $T_c = 1$ とし、過冷却液体の温度 $T = 0$ としているので、凝固潜熱の大きさ K によって、最終的な凝固量が変化する。例えば、 $K = 1$ の場合、初期温度 0 の液相全体が固相になれば、全体で温度が 1 だけ増加する。つまり全てが凝固した段階で融点 1 になり、この場合、かろうじて全体が凝固できることになる。(なお、温度が保存する孤立系を仮定している。) しかし $K = 2$ の場合、液相全体が凝固すると、全体温度が 2 となり、融点を越えてしまう。つまり、 $K = 2$ では液相の半分が凝固するのみである。また $K < 1$ の場合には、液相全体が凝固しても、全体温度は 1 だけ上昇しないので、当然全体が凝固できる。以上から、結局、凝固可能部分の全体に対する体積分率は、 $1/K$ にて与えられることがわかる。

具体的なプログラムは以下のように与えられる。

• **Java アプリケーションプログラム(dend_4fold_2D.java)**

```

/*****
import java.awt.*;
import java.awt.event.*;
import java.io.*;

public class dend_4fold_2D extends Frame{

    static int ND=300;          //組織 1 辺の分割数
    static int nd=ND, ndm=ND-1, nd2=ND/2;
    static int width, height, insetx, insety, xwidth, yheight;
    static double RR=8.3145;   //ガス定数
    static double PI=3.14159;
    static double [][] s1h=new double[ND][ND]; //組織内の phase field(固相場)データ配列
    static double [][] Th=new double[ND][ND]; //組織内の温度場データ配列

    //グローバル変数化
    static double temp, m_temp, time1;
    Image buff;
    static Graphics bg, g;

    /***** コンストラクタ *****/
    public dend_4fold_2D(){
        xwidth=400; yheight=400; insetx=4; insety=30;
        width=xwidth+insetx*2; height=yheight+insetx+insety;
        setSize(width, height);
        setBackground(Color.lightGray);
        setVisible(true);
        buff=this.createImage(width, height);
        bg=buff.getGraphics();
        addWindowListener(new WindowAdapter(){
            public void windowClosing(WindowEvent e){ System.exit(0); }
        });
    }

    /***** main *****/
    public static void main(String[] args){

        dend_4fold_2D prog=new dend_4fold_2D();

        double s1kai;
        double [][] s1kais=new double[ND][ND];

```

```

double [][] Th2=new double[ND][ND];
int    i, j, k, l;
int    ip, im, jp, jm;
double time1max;
double delt;                                //時間刻み

double amob_s, b1;
double s1;
double s1ip, s1im, s1jp, s1jm;
double s1ipjp, s1ipjm, s1imjp, s1imjm;
double s1ddtt;
double ep, ep1p, ep2p;
double dx_s1, dy_s1, l_dxdy;
double dxx_s1, dyy_s1, dxy_s1;

double mT, dtemp, th, th0, ep_b0, ep_b, tau, rnd_a;
double j_fold, K_lat, alpha, gamma, delta, fact1;
double TT, amob_T, Tip, Tim, Tjp, Tjm, Tddtt, dTa, sumT;

String s_K_lat, s_dtemp, s_delt;

//-----
BufferedReader input=new BufferedReader(new InputStreamReader(System.in));

s_K_lat="1.7";
try{ System.out.print("K(1.7) = "); s_K_lat=input.readLine(); }
catch(IOException e){ System.out.println("Exception : "+e); }
K_lat=new Double(s_K_lat).doubleValue();

s_dtemp="1.0";
try{ System.out.print("dtemp(1.0) = "); s_dtemp=input.readLine(); }
catch(IOException e){ System.out.println("Exception : "+e); }
dtemp=new Double(s_dtemp).doubleValue();

s_delt="0.0004";
try{ System.out.print("del_time1(0.0004) = "); s_delt=input.readLine(); }
catch(IOException e){ System.out.println("Exception : "+e); }
delt=new Double(s_delt).doubleValue();

//**** 各種定数の設定 ****
time1=0.0; time1max=1.0+1.0e+08;

m_temp=1.0;
temp=m_temp-dtemp;

ep_b0=0.01;
tau=0.0003;
rnd_a=0.01;

b1=18.0/nd;
//b1=9.0/nd;
th0=0.0;
j_fold=4.0;

```



```

alpha=0.9;
gamma=10.0;
//delta=0.0;
delta=0.02;
fact1=1.0;

amob_s=1.0/tau;
amob_T=1.0;

/*****
prog_ini_field(); //乱数によって初期場を設定
//prog_datin(); //ファイルから初期場を読み込み

/**** 凝固時間発展過程の計算 ****
while(time1<=time1max){

    if((((int)(time1) % 50)==0)){
        System.out.println(time1); prog.repaint(); //所定カウント数おきに phase field 描画
    }

    //if((((int)(time1) % 200)==0){ prog.datsave(); }
    // 所定カウント数おきに phase field および温度場保存
    // 現在この行の前に//があり文全体をコメント文にしている。//を外せばデータの保存
    // が行われるが、数値データは非常に大きくなる場合があるので、//を外す場合には、
    // ハードディスクの空き容量やデータ保存量等を良く確認した後、//を外されたい。

    //if(time1==1000.0){ prog.datsave(); } //所定カウント時に phase field および温度場保存

/***** 勾配エネルギー関連項の計算 ****
for(i=0;i<=ndm;i++){
    for(j=0;j<=ndm;j++){
        ip=i+1; im=i-1; jp=j+1; jm=j-1;
        if(i==ndm){ip=0;} if(i==0){im=ndm;}
        if(j==ndm){jp=0;} if(j==0){jm=ndm;}

        s1=s1h[i][j];
        s1ip=s1h[ip][j]; s1im=s1h[im][j]; s1jp=s1h[i][jp]; s1jm=s1h[i][jm];
        s1ipjp=s1h[ip][jp]; s1ipjm=s1h[ip][jm]; s1imjp=s1h[im][jp]; s1imjm=s1h[im][jm];

        dx_s1=(s1ip-s1im)/2.0/b1; dy_s1=(s1jp-s1jm)/2.0/b1;
        dxx_s1=(s1ip+s1im-2.0*s1)/b1/b1; dyy_s1=(s1jp+s1jm-2.0*s1)/b1/b1;
        dxy_s1=(s1ipjp+s1imjm-s1imjp-s1ipjm)/4.0/b1/b1;
        l_dxdy=dx_s1*dx_s1+dy_s1*dy_s1;

        if(l_dxdy==0.0){fact1=0.0;l_dxdy=1.0;} else{fact1=1.0;}

        if((dx_s1==0.0)&&(dy_s1>=0.0)){th=-PI/2.0;}
        else if((dx_s1==0.0)&&(dy_s1<=0.0)){th=PI/2.0;}
        else {th=Math.atan(dy_s1/dx_s1);}

        ep_b=ep_b0*fact1;
        ep=ep_b*(1.+delta*Math.cos(j_fold*th));
        ep1p=-ep_b*delta*j_fold*Math.sin(j_fold*th);

```

```

ep2p=-ep_b*delta*j_fold*j_fold*Math.cos(j_fold*th);

s1kais[i][j]=-ep*ep*(dxx_s1+dyy_s1)
              -(ep1p*ep1p+ep*ep2p)*dy_s1-2.*ep*ep1p*dx_s1)
              *(dy_s1*dxx_s1-dx_s1*dxy_s1)/l_dxdy
              +(ep1p*ep1p+ep*ep2p)*dx_s1+2.*ep*ep1p*dy_s1)
              *(dy_s1*dxy_s1-dx_s1*dyy_s1)/l_dxdy;
    }
}

//***** 発展方程式の数値計算 ***** s1=0:liquid, s1=1:solid *****
for(i=0;i<=ndm;i++){
  for(j=0;j<=ndm;j++){
    ip=i+1; im=i-1; jp=j+1; jm=j-1;
    if(i==ndm){ip=0;} if(i==0){im=ndm;}
    if(j==ndm){jp=0;} if(j==0){jm=ndm;}

    s1=s1h[i][j];
    TT=Th[i][j];
    Tip=Th[ip][j]; Tim=Th[im][j]; Tjp=Th[i][jp]; Tjm=Th[i][jm];

    mT=alpha/PI*Math.atan(gamma*(m_temp-TT));
    s1kai=-s1*(1.0-s1)*(s1-0.5+mT);

    s1ddtt=-amob_s*(s1kai+s1kais[i][j]);

    s1h[i][j]=s1h[i][j]+s1ddtt*delt
              +rnd_a*(Math.random()-0.5)*s1h[i][j]*(1.0-s1h[i][j]);

    if(s1h[i][j]>=1.0){s1h[i][j]=1.0;} if(s1h[i][j]<=0.0){s1h[i][j]=0.0;}

    Tddtt=amob_T*(Tip+Tim+Tjp+Tjm-4.0*TT)/b1/b1+K_lat*s1ddtt;
    Th2[i][j]=Th[i][j]+Tddtt*delt;
  }
}

for(i=0;i<=ndm;i++){
  for(j=0;j<=ndm;j++){ Th[i][j]=Th2[i][j]; }
}

//*****[時間増加]*****
time1=time1+1.0;
  //try{ thread1.sleep(100); } // 0.01 seconds
  //catch( InterruptedException e){ }
} //while
} //main

// **** phase field および温度場の初期設定 *****
public void ini_field(){
  int i, j;

  for(i=0;i<=ndm;i++){
    for(j=0;j<=ndm;j++){

```

```

        s1h[i][j]=0.0; Th[i][j]=temp;
        if(((i-nd2)*(i-nd2)+(j-nd2)*(j-nd2))<10.){s1h[i][j]=0.8;}
    }
}
}

```

```

// ***** update 関数のオーバーライド（再描画時における画面のチラツキ防止） *****
public void update(Graphics g){paint(g);}

```

```

// **** phase field の描画 *****

```

```

public void paint(Graphics g){
    bg.clearRect(0, 0, width, height);
    bg.setColor(Color.lightGray);

    int i, j, ii, jj;
    int icol;
    int ixmin=0, iymin=0, igx, igy, irad0;
    int ixmax, iymax;
    double c, x, xmax, xmin, y, ymax, ymin, rad0;

    xmin=0.0; xmax=1.0; ymin=0.0; ymax=1.0;
    ixmax=xwidth; iymax=yheight;

    //System.out.println(time1);
    rad0=1.0/(double)nd/2.0;
    irad0=1+(int)((double)ixmax-(double)ixmin)/(xmax-xmin)*rad0 );

    for(i=0;i<=nd;i++){
        for(j=0;j<=nd;j++){
            x=1.0/(double)nd*(double)i+rad0;
            igx=(int)((double)ixmax-(double)ixmin)*(x-xmin)/(xmax-xmin)+(double)ixmin );
            y=1.0/(double)nd*(double)j+rad0;
            igy=(int)((double)iymax-(double)iymin)*(y-ymin)/(ymax-ymin)+(double)iymin );
            ii=i, jj=j;
            if(i==nd){ii=0;} if(j==nd){jj=0;}

            icol=(int)( 255.0*(1.0-Math.abs(s1h[ii][jj])) );
            //icol=(int)(255.0*(Th[ii][jj]));

            if(icol>=255){icol=255;} if(icol<=0){icol=0;}
            bg.setColor(new Color(icol,icol,icol));
            bg.fillRect(insetx+igx-irad0,insety+igy-irad0, irad0*2, irad0*2);
            //bg.setColor(Color.blue);
            //bg.setColor(new Color(0,0,icol));
        }
    }
    g.drawImage(buff, 0, 0, this);
}

```

```

//*****[phase field および温度場データの保存]*****

```

```

private void datsave(){
    int i,j;

    try{

```

```

PrintWriter outfile= new PrintWriter(
    new BufferedWriter(new FileWriter("test.dat", true)) );

outfile.println(time1);
//outfile.println(time1+'%n');
for(i=0;i<=ndm;i++){
    for(j=0;j<=ndm;j++){
        outfile.println(s1h[i][j]);    //phase field の書き込み
        outfile.println(Th[i][j]);    //温度場の書き込み
    }
}
outfile.close();
}
catch(Exception e){System.out.println(e);System.exit(1);}
}

```

*****[phase field および温度場データの読み込み]*****

```

private void datin(){
    int i,j;
    double sumc;
    String s_data, s_time1;

    try{
        BufferedReader infile=new BufferedReader(new FileReader("ini000.dat"));
        try{
            s_time1=infile.readLine();    time1=new Double(s_time1).doubleValue();
            for(i=0;i<=ndm;i++){
                for(j=0;j<=ndm;j++){
                    s_data=infile.readLine();    s1h[i][j]=new Double(s_data).doubleValue();
                    s_data=infile.readLine();    Th[i][j]=new Double(s_data).doubleValue();
                }
            }
        }
        catch(Exception e){System.out.println(e); System.exit(1);}
        finally{infile.close();}
    }
    catch(Exception e){System.out.println(e); System.exit(1);}
}

```

}//class dend_4fold_2D

以上、プログラム終わり。