

C-Mn 鋼における $\gamma \rightarrow \alpha$ 相変態の Phase-field モデリング

[M.G.Mecozzi, J.Sietsma, S.van der Zwaag, M.Apel, P.Schaffnit, and I.Steinbach, "Analysis of the $\gamma \rightarrow \alpha$ Transformation in a C-Mn Steel by Phase-Field Modeling", Metal.Mater. Trans. A, 36A(2005), 2327-2340.]
のフォロー

1. 変数設定

- ϕ : α 相の局所的な存在確率を表す Phase-field 変数。変域は $0 \leq \phi \leq 1$ で、 $\phi = 0$ は γ 相を、 $\phi = 1$ は α 相を表す。
- c : 濃度場
- T : 温度場。本モデルでは、位置的には均一と仮定。ただし連続冷却の計算を行うために、温度の時間変化あり。
- t : 時間
- \mathbf{r} : 位置ベクトル、 (x, y, z)
- τ : Phase-field 変数変化に対する摩擦係数
- F : 全自由エネルギー汎関数
- $f(\phi, c, T)$: 化学的自由エネルギー密度
- ε : 勾配エネルギー係数
- β : 結晶変態のエネルギー障壁係数
- $m(c, T)$: 結晶変態の化学的駆動力で、 $m > 0$ の時は α 相が安定。
- μ : 界面移動のキネティック係数
- σ : α 相と γ 相の界面の界面エネルギー密度
- κ : 界面の平均曲率
- ΔG : γ 相が α 相へ変態する時の化学的機動力
- D_X^C : X相中の炭素の拡散係数
- C_X : X相中の炭素濃度
- C : 炭素濃度 (phase-field 変数で重み付けされた炭素濃度)
- C_X^{eq} : X相中の炭素濃度 (平衡状態図における平衡濃度)
- k : 平衡分配係数
- T_R : 平衡状態図における C_γ^0 での $\gamma / (\alpha + \gamma)$ 境界線の温度
- $m_{\gamma\alpha}$: 平衡状態図における $\gamma / (\alpha + \gamma)$ 境界線の傾き (定数と仮定)
- ΔS : 結晶変態のエントロピー変化
- η : 界面幅
- v : 界面の移動速度

2. Phase-field 法

Phase-field 変数 ϕ の発展方程式は、

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\tau^{-1} \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (1)$$

にて与えられる。ここで、 F は系の全自由エネルギーで、汎関数形式 (空間積分) :

$$F = \int_{\Omega} \left\{ f(\phi, c, T) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 [\nabla \phi]^2 \right\} dr \quad (2)$$

にて表現される。 $f(\phi, c, T)$ は化学的自由エネルギー密度、 ε は勾配エネルギー係数である ($(1/2)\varepsilon^2$ を勾配エネルギー係数と呼ぶ場合もあるので注意)。

本論文では、 $f(\phi, c, T)$ を

$$f(\phi, c, T) = \beta h(\phi) - m(c, T)g(\phi) \quad (3)$$

と仮定している。関数 $h(\phi)$ と $g(\phi)$ は、

$$h(\phi) = \frac{1}{4}\phi^2(1-\phi)^2, \quad g(\phi) = \frac{1}{6}\phi^2(3-2\phi) \quad (4)$$

にて定義される。 $h(\phi)$ は ϕ が 0 ~ 1 へ変化する時のエネルギー障壁（つまり物理には、結晶構造が fcc から bcc へ変態する際の変態熱項に対応）を、 $g(\phi)$ は ϕ が 0 ~ 1 へ変化する時の自由エネルギー変化を記述するための基本関数である。これら関数に係数： β や $-m(c, T)$ を乗ずることによって、実際のエネルギー変化量を表現している。

以上から $\delta F / \delta \phi$ を書き下すと、

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{\delta \phi} &= \frac{\partial}{\partial \phi} \left[f(\phi, c, T) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 [\nabla \phi]^2 \right] = \frac{\partial f(\phi, c, T)}{\partial \phi} - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi \\ &= \frac{\partial}{\partial \phi} [\beta h(\phi) - m g(\phi)] - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi \\ &= \frac{\partial}{\partial \phi} \left[\frac{1}{4} \beta \phi^2 (1-\phi)^2 - \frac{1}{6} m \phi^2 (3-2\phi) \right] - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi \\ &= \frac{1}{2} \beta \phi (1-\phi) (1-2\phi) - m \phi (1-\phi) - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi \\ &= \beta \phi (1-\phi) \left(\frac{1}{2} - \phi \right) - m \phi (1-\phi) - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi \end{aligned} \quad (5)$$

であるから、これを発展方程式(1)に代入して、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\tau^{-1} \frac{\delta F}{\delta \phi} = -\tau^{-1} \left\{ \beta \phi (1-\phi) \left(\frac{1}{2} - \phi \right) - m \phi (1-\phi) - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi \right\} \\ \therefore \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \tau^{-1} \left\{ \varepsilon^2 \nabla^2 \phi - \beta (1-\phi) \phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m (1-\phi) \phi \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

を得る。一方、界面の移動速度 v を記述する界面発展方程式（平均曲率流方程式）は、

$$v = -\mu [\sigma \kappa - \Delta G] \quad (7)$$

にて与えられる。 μ は界面移動のキネティック係数、 σ は α 相と γ 相の界面の界面エネルギー密度、 κ は界面の平均曲率、および ΔG は γ 相が α 相へ変態する時の化学的機動力である。特にこの中のパラメーター μ, σ , および ΔG を用いて、Phase-field の発展方程式は、最終的に

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \mu \left(\sigma \left[\nabla^2 \phi - \frac{18}{\eta^2} (1-\phi) \phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) \right] + \frac{6\Delta G(c, T)}{\eta} (1-\phi) \phi \right) \quad (8)$$

と表現される（定式化に関しては後述）。

次に濃度場の発展方程式、すなわち拡散方程式について説明する。拡散方程式は、

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left[(1-\phi) D_\gamma^c \nabla C_\gamma + \phi D_\alpha^c \nabla C_\alpha \right] \quad (9)$$

にて与えられる。 D_X^C はX相中の炭素の拡散係数、 C_X はX相中の炭素濃度である。 C は phase-field 変数で重み付けされた炭素濃度で、

$$C = (1-\phi)C_\gamma + \phi C_\alpha \quad (10)$$

にて定義される。ここで、平衡分配係数

$$k = \frac{C_\alpha}{C_\gamma} \quad (11)$$

を定義する（なお簡単のため、 $k = C_\alpha^{eq} / C_\gamma^{eq}$ にて定義されており、したがって本論文では、 k は温度のみの関数と仮定されている）。これら2つの式(10)と(11)を用いて、 C_γ と C_α を消去し、濃度場を表現する独立変数を C にする。すなわち、

$$\begin{aligned} C &= (1-\phi)C_\gamma + \phi C_\alpha, & C_\alpha &= kC_\gamma \\ C &= (1-\phi)C_\gamma + \phi C_\alpha = (1-\phi)C_\gamma + \phi kC_\gamma = \{(1-\phi) + \phi k\}C_\gamma = \{1 + (k-1)\phi\}C_\gamma \\ \therefore C_\gamma &= \frac{C}{1 + (k-1)\phi}, & C_\alpha &= kC_\gamma = \frac{kC}{1 + (k-1)\phi} \\ \nabla C_\gamma &= \frac{\{1 + (k-1)\phi\}\nabla C - C\nabla\{1 + (k-1)\phi\}}{\{1 + (k-1)\phi\}^2} = \frac{\{1 + (k-1)\phi\}\nabla C - C(k-1)\nabla\phi}{\{1 + (k-1)\phi\}^2} \\ &= \frac{1}{1 + (k-1)\phi}\nabla C - \frac{C(k-1)}{\{1 + (k-1)\phi\}^2}\nabla\phi \\ \nabla C_\alpha &= \frac{k}{1 + (k-1)\phi}\nabla C - \frac{Ck(k-1)}{\{1 + (k-1)\phi\}^2}\nabla\phi \end{aligned} \quad (12)$$

であるから、拡散方程式は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &= \nabla \left[(1-\phi)D_\gamma^C \nabla C_\gamma + \phi D_\alpha^C \nabla C_\alpha \right] \\ &= \nabla \left[(1-\phi)D_\gamma^C \left\{ \frac{1}{1 + (k-1)\phi}\nabla C - \frac{C(k-1)}{\{1 + (k-1)\phi\}^2}\nabla\phi \right\} \right. \\ &\quad \left. + \phi D_\alpha^C \left\{ \frac{k}{1 + (k-1)\phi}\nabla C - \frac{Ck(k-1)}{\{1 + (k-1)\phi\}^2}\nabla\phi \right\} \right] \\ &= \nabla \left[\left\{ \frac{(1-\phi)D_\gamma^C}{1 + (k-1)\phi} + \frac{\phi D_\alpha^C k}{1 + (k-1)\phi} \right\} \nabla C - \left\{ \frac{(1-\phi)D_\gamma^C C(k-1)}{\{1 + (k-1)\phi\}^2} + \frac{\phi D_\alpha^C Ck(k-1)}{\{1 + (k-1)\phi\}^2} \right\} \nabla\phi \right] \\ &= \nabla \left[\left\{ \frac{(1-\phi)D_\gamma^C + \phi k D_\alpha^C}{1 + (k-1)\phi} \right\} \nabla C - \left\{ \frac{C(k-1)[(1-\phi)D_\gamma^C + \phi k D_\alpha^C]}{\{1 + (k-1)\phi\}^2} \right\} \nabla\phi \right] \\ &= \nabla \left[\frac{(1-\phi)D_\gamma^C + \phi k D_\alpha^C}{1 + (k-1)\phi} \left\{ \nabla C - \frac{C(k-1)}{1 + (k-1)\phi} \nabla\phi \right\} \right] \end{aligned} \quad (13)$$

と変形される。改めて書き直して、

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \left\{ D^*(\phi) \left[\nabla C - \frac{C(k-1)}{1+\phi(k-1)} \nabla \phi \right] \right\} \quad (14)$$

となる。ここで、

$$D^*(\phi) = \frac{D_\gamma^C + \phi(kD_\alpha^C - D_\gamma^C)}{1 + \phi(k-1)} \quad (15)$$

にて定義される。

本計算における独立変数は、Phase-field ϕ と炭素濃度 C である。この両者が得られると、 C_α と C_γ が得られる。例えば、 C_γ の値が得られると、

$$T_{\gamma\alpha}^{eq} = T_R + m_{\gamma\alpha} (C_\gamma - C_\gamma^0) \quad (16)$$

を用いて、局所的な平衡温度 $T_{\gamma\alpha}^{eq}$ が計算される。 T_R は平衡状態図における C_γ^0 での $\gamma/(\alpha+\gamma)$ 境界線の温度である。 $m_{\gamma\alpha}$ はこの境界線の傾き（定数と仮定）である。 $T_{\gamma\alpha}^{eq}$ と現在の温度 T との差： $\Delta T = T_{\gamma\alpha}^{eq} - T$ より、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の化学的駆動力は、

$$\Delta G(C, T) = \Delta S \Delta T \quad (17)$$

と計算される（ ΔT が小さい場合にのみ成り立つ）。 ΔS は結晶変態のエントロピー変化である（本論文では入力パラメータの1つ）。

3. パラメータ間の関係式の導出

計算に用いるパラメータと、実験的に得られるパラメータとの関係式を導出し、実際の数値計算に用いる発展方程式の明示的な形式（式(8)）を導出する。

まず以上の定式化から、phase-field に関する発展方程式は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \tau^{-1} \left\{ \varepsilon^2 \nabla^2 \phi - \beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi \right\} \\ \tau \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi &= -\beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi \end{aligned} \quad (18)$$

である。特に γ 相中に球状の α 相が形成される場合、動径方向を距離を r として、動径方向の発展方程式は、

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{p}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] \phi = -\beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi \quad (19)$$

にて与えられる。1,2,および3次元計算に対応して、 p は $p=0,1,2$ の値を取る。 α 相の成長時に、界面垂直方向における Phase-field のプロファイル形状が変化しない定常状態を考える（定常プロファイル形状）。界面の中心位置を時間の関数 $s(t)$ とし、この $s(t)$ を中心として、位置座標を、 $r \rightarrow X = r - s(t)$ と変換する。これより、Phase-field は、

$$\phi(r,t) = \phi\{X(r,t)\} = \phi\{r - s(t)\}$$

と表現される。ここで、式(19)左辺第2項内の p/r を

$$\frac{p}{r} = \frac{p}{X+s} = \frac{p}{s} \left(\frac{1}{1+X/s} \right) = \frac{p}{s} \left[1 - \frac{X}{s} + \dots \right]$$

と展開する。特に界面幅 η が $\eta \ll s$ の場合（定常 Phase-field のプロファイル形状を仮定しているので、この仮定はなりたつと思われる）、 $X/s \cong 0$ と近似できるので、

$$\frac{p}{r} = \frac{p}{s}$$

を得る。さらに界面に垂直方向のみの定常プロファイルを考えて、距離および時間に関する偏微分を

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial r} &= \frac{d\phi}{dX}, \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} = \frac{d^2 \phi}{dX^2} \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \frac{d\phi}{dX} \frac{dX}{dt} = -\frac{d\phi}{dX} \frac{ds}{dt} = -\frac{d\phi}{dX} v \end{aligned}$$

のように、常微分に置き変える。したがって、 $-\frac{\eta}{2} < X < \frac{\eta}{2}$ および $\eta \ll s$ が成立する範囲において、発展方程式(19)は、

$$\begin{aligned} \tau \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{p}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] \phi &= -\beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi \\ \tau \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{p}{s} \frac{\partial}{\partial r} \right] \phi &= -\beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi \\ -\tau \frac{d\phi}{dX} v - \varepsilon^2 \left[\frac{d^2 \phi}{dX^2} + \frac{p}{s} \frac{d\phi}{dX} \right] &= -\beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi \\ -\tau \left[v + \frac{p\varepsilon^2}{\tau s} \right] \frac{\partial \phi}{\partial X} - \varepsilon^2 \frac{d^2 \phi}{dX^2} &= -\beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi \\ \therefore -\tau \left[\frac{ds}{dt} + \frac{p\varepsilon^2}{\tau s} \right] \frac{\partial \phi}{\partial X} - \varepsilon^2 \frac{d^2 \phi}{dX^2} &= -\beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi \end{aligned}$$

となる。さらに、

$$w = \frac{ds}{dt} + \frac{\varepsilon^2 p}{\tau s}$$

と定義して、

$$-\tau w \frac{\partial \phi}{\partial X} - \varepsilon^2 \frac{d^2 \phi}{dX^2} = -\beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi$$

と書き直し、

$$\phi \rightarrow 1 \text{ for } X \rightarrow \infty$$

$$\phi \rightarrow 0 \text{ for } X \rightarrow -\infty$$

の境界条件にて、この微分方程式を解くと、

$$\phi = \frac{1}{2} \tanh\left(-\frac{3X}{\eta}\right) + \frac{1}{2}$$

を得る ($v = ds/dt$ は、一定と仮定する)。これより、

$$\frac{d\phi}{dX} = -\frac{6}{\eta}(1-\phi)\phi, \quad \frac{d^2\phi}{dX^2} = \frac{18}{\eta^2}(1-\phi)\phi\left(\frac{1}{2}-\phi\right)$$

であるので、元の微分方程式に代入して、

$$\begin{aligned} -\tau w \frac{\partial \phi}{\partial X} - \varepsilon^2 \frac{d^2 \phi}{dX^2} &= -\beta(1-\phi)\phi\left(\frac{1}{2}-\phi\right) + m(1-\phi)\phi \\ \tau w \frac{6}{\eta}(1-\phi)\phi - \varepsilon^2 \frac{18}{\eta^2}(1-\phi)\phi\left(\frac{1}{2}-\phi\right) &= -\beta(1-\phi)\phi\left(\frac{1}{2}-\phi\right) + m(1-\phi)\phi \\ \tau w \frac{6}{\eta} - \varepsilon^2 \frac{18}{\eta^2}\left(\frac{1}{2}-\phi\right) &= -\beta\left(\frac{1}{2}-\phi\right) + m \\ \therefore \tau w \frac{6}{\eta} = \varepsilon^2 \frac{18}{\eta^2}\left(\frac{1}{2}-\phi\right) - \beta\left(\frac{1}{2}-\phi\right) + m &= \left(\frac{18\varepsilon^2}{\eta^2} - \beta\right)\left(\frac{1}{2}-\phi\right) + m \end{aligned}$$

を得る。左辺が時間に対して不変であるので、右辺の第1項は恒等的に0でなくてはならない。つまり、

$$\beta = \frac{18\varepsilon^2}{\eta^2}$$

が得られる。したがって、 w は、

$$\tau w \frac{6}{\eta} = \left(\frac{18\varepsilon^2}{\eta^2} - \beta\right)\left(\frac{1}{2}-\phi\right) + m = m, \quad \therefore w = \frac{\eta m}{\tau 6}$$

となる。この w を、 $w = \frac{ds}{dt} + \frac{\varepsilon^2}{\tau} \frac{p}{s}$ に代入すると、

$$w = \frac{ds}{dt} + \frac{\varepsilon^2 p}{\tau s}$$

$$\frac{\eta m}{\tau 6} = \frac{ds}{dt} + \frac{\varepsilon^2 p}{\tau s}$$

$$\therefore \frac{ds}{dt} = -\frac{\varepsilon^2 p}{\tau s} + \frac{\eta m}{\tau 6} = -\frac{\varepsilon^2}{\tau} \kappa + \frac{\eta m}{\tau 6} = -\frac{\eta}{\tau} \left[\frac{\varepsilon^2}{\eta} \kappa - \frac{m}{6} \right]$$

であり、これと、平均曲率流方程式：

$$\frac{ds}{dt} = -\mu[\sigma\kappa - \Delta G]$$

とを比較すると、 $\beta = \frac{18\varepsilon^2}{\eta^2}$ も考慮して、

$$\frac{\eta}{\tau} = \mu, \quad \frac{\varepsilon^2}{\eta} = \sigma, \quad \frac{\beta\eta}{18} = \sigma, \quad \frac{m}{6} = \Delta G$$

であることがわかる。したがって、以上を総合して、発展方程式(18)は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial t} &= \frac{1}{\tau} \left\{ \varepsilon^2 \nabla^2 \phi - \beta(1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + m(1-\phi)\phi \right\} \\ &= \frac{\mu}{\eta} \left\{ \varepsilon^2 \nabla^2 \phi - \frac{18\varepsilon^2}{\eta^2} (1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + 6\Delta G(1-\phi)\phi \right\} \\ &= \mu \left\{ \frac{\varepsilon^2}{\eta} \nabla^2 \phi - \frac{18\varepsilon^2}{\eta^3} (1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + \frac{6\Delta G}{\eta} (1-\phi)\phi \right\} \\ &= \mu \left\{ \sigma \nabla^2 \phi - \frac{18\sigma}{\eta^2} (1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) + \frac{6\Delta G}{\eta} (1-\phi)\phi \right\} \\ &= \mu \left\{ \sigma \left[\nabla^2 \phi - \frac{18}{\eta^2} (1-\phi)\phi \left(\frac{1}{2} - \phi \right) \right] + \frac{6\Delta G}{\eta} (1-\phi)\phi \right\} \end{aligned}$$

となり、式(8)が導かれる。

4. 各種実験定数

ここでは、論文中における各種の定数をまとめる。

対象合金組成：Fe-0.1mas%C-0.49mass%Mn

(Mn濃度は、空間的に変化しないと仮定し、計算が行われている。)

T_R は、 $T_R = 1120(\text{K})$ と設定され、この T_R における各濃度および状態図における相境界線の傾きは、Thermo-Calc より、

$$\begin{aligned}
C_\gamma &= 0.113(\text{mass}\%), & C_\alpha &= 0.005(\text{mass}\%) \\
Mn_\gamma &= 0.513(\text{mass}\%), & Mn_\alpha &= 0.261(\text{mass}\%) \\
m_{\gamma\alpha}^{Fe-C} &= -323.73(\text{K/mass}\%), & m_{\alpha\gamma}^{Fe-C} &= -307.27(\text{K/mass}\%) \\
m_{\gamma\alpha}^{Fe-Mn} &= -34.19(\text{K/mass}\%), & m_{\alpha\gamma}^{Fe-Mn} &= -89.93(\text{K/mass}\%)
\end{aligned}$$

と導かれる(相境界線の傾きが2種類ある。論文中には記されていないが、冷却速度に依存して使い分けられている可能性がある。もしくは α 相側の相境界線の傾きの可能性もあるが、その場合には $m_{\alpha\gamma}^{Fe-C}$ の値が小さすぎる)。冷却速度は以下の3種類：

$$\text{冷却速度： } 0.05(\text{K/s}), \quad 0.4(\text{K/s}), \quad 10(\text{K/s})$$

が想定されている。計算領域は、冷却速度に合わせて、

$$\text{計算領域： } 60 \times 60(\mu\text{m}^2), \quad 37.5 \times 37.5(\mu\text{m}^2)$$

が使い分けられている。また γ 相の結晶粒サイズが、およそ $20(\mu\text{m})$ になるように、初期 γ 多結晶組織が設定されている。

$\mu_{\alpha\gamma}$ は、

$$\mu_{\alpha\gamma}(T) = \mu_{\alpha\gamma}^0 \exp\left(-\frac{Q_\mu}{RT}\right)$$

にて定義され、 $Q_\mu = 140(\text{kJ/mol})$ が使用されている。 $\mu_{\alpha\gamma}^0$ は実験データにフィッティングして、冷却速度に合わせて、

$$\begin{aligned}
\mu_{\alpha\gamma}^0 &= 2 \times 10^{-7}(\text{m}^4\text{s}^{-1}\text{J}^{-1}) \quad (0.05, 0.4) \\
\mu_{\alpha\gamma}^0 &= 6 \times 10^{-7}(\text{m}^4\text{s}^{-1}\text{J}^{-1}) \quad (10)
\end{aligned}
\quad (\text{冷却速度に依存})$$

が用いられている。また α 相の核密度についても、実験データにフィッティングして、

$$\begin{aligned}
&9.1 \times 10^7(\text{m}^{-2}) \quad (0.05) \\
\alpha \text{ 相の核密度： } &2.8 \times 10^9(\text{m}^{-2}) \quad (0.4) \quad (\text{冷却速度に依存}) \\
&1.8 \times 10^{10}(\text{m}^{-2}) \quad (10)
\end{aligned}$$

が設定されている。

界面幅はメッシュサイズの7.5倍が設定されている。

拡散係数に関しては、本文中に掲載されていないが、「金属データブック,丸善,(1993)」より、

$$\begin{aligned}
\alpha \text{ 相中の炭素の拡散係数： } &D_0 = 1.24 \times 10^{-5}(\text{m}^2/\text{s}), \quad Q=99.5(1-30.9/T) \text{ (kJ/mol)} \\
\gamma \text{ 相中の炭素の拡散係数： } &D_0 = 4.7 \times 10^{-5}(\text{m}^2/\text{s}), \quad Q=155 \text{ (kJ/mol)},
\end{aligned}$$

である(Fe-C 2元系のデータ)。

α/γ 界面エネルギー σ も本文中に記載されていないが、[D.-H.Yeon, P.R.Cha, J.K.Yoon, Scripta Mater., 45(2001), 661-668.]より、 $\sigma = 0.5(\text{J/m}^2)$ 程度が妥当と思われる。

結晶変態のエントロピー変化 ΔS の値も、論文中に示されていない。リチャーズ則より、液相/固相変態におけるエントロピー変化が $\Delta S \cong R$ 程度であるので、固相/固相変態の場合、この値よりも小さな値を設定する必要があると思われる。

「参考」：論文中のその他の方程式

$$C_\gamma = (C^{\gamma\alpha} - C_\infty) \exp\left\{-\frac{v}{D_\gamma^c} \left(X - \frac{\eta}{2}\right)\right\} + C_\infty$$

$$f^\alpha = \frac{V - V^\gamma}{V^\alpha - V^\gamma}, \quad V = \lambda V_0 \left(\frac{3\Delta L}{L_0} + 1\right), \quad C_{IC}^\gamma = \frac{C_0 - f^\alpha C_{eq}^\alpha}{1 - f^\alpha}$$