Phase field 法

（結晶成長過程）

[R.Kobayashi : Physica D, 63(1993),410-423.]の式のフォロー

by T. Koyama

１．**phase field** 法の定式化

phase field 変数を $s(\mathbf{r},t)$ とし、

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

とする。系の組織自由エネルギーは、

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

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

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

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

$$\frac{\delta G_{system}}{\delta s}=\left(\frac{\partial G_c}{\partial s}\right)-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_{,x}}\right)-\frac{d}{dy}\left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_{,y}}\right) \tag{4}$$

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、

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

となる。$m(T)$ は結晶化の駆動力を表し、通常は、

$$m(T)=\gamma(T_e-T) \tag{6}$$

にて与えられるが、ここでは、

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

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、

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

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

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、

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

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。

$$\begin{gathered}\frac{\sin\theta}{\cos\theta}=\frac{s_{,y}}{s_{,x}},\quad \frac{1-\cos^2\theta}{\cos^2\theta}=\frac{(s_{,y})^2}{(s_{,x})^2},\quad \frac{(s_{,y})^2}{(s_{,x})^2}\cos^2\theta=1-\cos^2\theta \\ \therefore\ \cos^2\theta=\frac{1}{1+\frac{(s_{,y})^2}{(s_{,x})^2}}=\frac{(s_{,x})^2}{(s_{,x})^2+(s_{,y})^2}\end{gathered} \tag{11}$$

より、

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

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、

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

と計算される。なお ε' は、

$$\begin{aligned}\varepsilon'&=\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\theta}\right)=\bar\varepsilon\left(\frac{\partial\sigma}{\partial\theta}\right)=-\bar\varepsilon j\delta\sin[j(\theta-\theta_0)] \\ \varepsilon''&=\left(\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial\theta^2}\right)=\bar\varepsilon\left(\frac{\partial^2\sigma}{\partial\theta^2}\right)=-\bar\varepsilon j^2\delta\cos[j(\theta-\theta_0)]\end{aligned} \tag{14}$$

である。これより式(4)の勾配エネルギーの変分部分は、

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

となり、界面発展方程式は、式(5)と(15)から、

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

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。

2．勾配ポテンシャルの数値計算

　具体的な数値解析のために、勾配ポテンシャル部分をもう少し書き下しておこう。注意すべきは、x と y に関する常微分が現れている点である。いま、独立変数は、$(x, y, s, s_{,x}, s_{,y})$ であるので、これらの変数にて表現される任意関数 $f(x, y, s, s_{,x}, s_{,y})$ の全微分は、

$$d\,f=\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)dx+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)dy+\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)ds+\left(\frac{\partial f}{\partial s_{,x}}\right)ds_{,x}+\left(\frac{\partial f}{\partial s_{,y}}\right)ds_{,y}$$

と表現される。したがって関数 f の x と y に関する常微分は、

$$\begin{aligned}
\frac{d\,f}{dx}&=\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)\left(\frac{dy}{dx}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)\left(\frac{ds}{dx}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial s_{,x}}\right)\left(\frac{ds_{,x}}{dx}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial s_{,y}}\right)\left(\frac{ds_{,y}}{dx}\right)\\
&=\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)\left(\frac{dy}{dx}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)s_{,x}+\left(\frac{\partial f}{\partial s_{,x}}\right)s_{,xx}+\left(\frac{\partial f}{\partial s_{,y}}\right)s_{,yx}
\end{aligned}$$

$$\frac{d\,f}{dy}=\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)\left(\frac{dx}{dy}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)+\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)s_{,y}+\left(\frac{\partial f}{\partial s_{,x}}\right)s_{,xy}+\left(\frac{\partial f}{\partial s_{,y}}\right)s_{,yy}$$

となる。
　式(15)より、勾配エネルギーは勾配項$s_{,x}$および$s_{,y}$のみの関数であることを考慮して、

$$-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_{,x}}\right)-\frac{d}{dy}\left(\frac{\partial E_{surf}}{\partial s_{,y}}\right)$$

$$=\frac{d}{dx}\left\{\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial s}{\partial y}\right)-\varepsilon^{2}\left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)\right\}-\frac{d}{dy}\left\{\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)+\varepsilon^{2}\left(\frac{\partial s}{\partial y}\right)\right\}$$

$$=\frac{d}{dx}\left[\varepsilon\varepsilon' s_{,y}-\varepsilon^{2}s_{,x}\right]-\frac{d}{dy}\left[\varepsilon\varepsilon' s_{,x}+\varepsilon^{2}s_{,y}\right]$$

$$=\left\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,y}-2\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,x}-\varepsilon^{2}\right\}s_{,xx}+\left\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,y}+\varepsilon\varepsilon'-2\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,x}\right\}s_{,yx}$$

$$-\left\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,x}+\varepsilon\varepsilon'-2\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,y}\right\}s_{,xy}-\left\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,x}+2\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,y}+\varepsilon^{2}\right\}s_{,yy}$$

$$=\left\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,y}-2\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,x}-\varepsilon^{2}\right\}s_{,xx}+\left\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,y}-2\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,x}\right\}s_{,yx}$$

$$-\left\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,x}-2\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,y}\right\}s_{,xy}-\left\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,x}+2\varepsilon\varepsilon'\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,y}+\varepsilon^{2}\right\}s_{,yy}$$

$$=(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')s_{,y}\left\{\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,xx}+\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,yx}\right\}-2\varepsilon\varepsilon' s_{,x}\left\{\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,xx}+\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,yx}\right\}$$

$$-(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')s_{,x}\left\{\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,xy}+\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,yy}\right\}-2\varepsilon\varepsilon' s_{,y}\left\{\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,xy}+\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,yy}\right\}$$

$$-\varepsilon^{2}(s_{,xx}+s_{,yy})$$

$$=-\varepsilon^{2}(s_{,xx}+s_{,yy})$$

$$+\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')s_{,y}-2\varepsilon\varepsilon' s_{,x}\}\left\{\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,xx}+\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,yx}\right\}$$

$$-\{(\varepsilon'^{2}+\varepsilon\varepsilon'')s_{,x}+2\varepsilon\varepsilon' s_{,y}\}\left\{\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,x}}\right)s_{,xy}+\left(\frac{\partial\theta}{\partial s_{,y}}\right)s_{,yy}\right\}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\varepsilon^2 (s_{,xx} + s_{,yy}) \\
&\quad + \{(\varepsilon'^2 + \varepsilon\varepsilon'') s_{,y} - 2\varepsilon\varepsilon' s_{,x}\} \left[\left(-\frac{s_{,y}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \right) s_{,xx} + \left(\frac{s_{,x}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \right) s_{,yx} \right] \\
&\quad - \{(\varepsilon'^2 + \varepsilon\varepsilon'') s_{,x} + 2\varepsilon\varepsilon' s_{,y}\} \left[\left(-\frac{s_{,y}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \right) s_{,xy} + \left(\frac{s_{,x}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \right) s_{,yy} \right] \qquad (18) \\
&= -\varepsilon^2 (s_{,xx} + s_{,yy}) \\
&\quad - \{(\varepsilon'^2 + \varepsilon\varepsilon'') s_{,y} - 2\varepsilon\varepsilon' s_{,x}\} \left[\frac{s_{,y} s_{,xx} - s_{,x} s_{,yx}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \right] + \{(\varepsilon'^2 + \varepsilon\varepsilon'') s_{,x} + 2\varepsilon\varepsilon' s_{,y}\} \left[\frac{s_{,y} s_{,xy} - s_{,x} s_{,yy}}{(s_{,x})^2 + (s_{,y})^2} \right]
\end{aligned}
$$

と計算することができる。

３．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。

$$
\tau \frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{\delta G_{system}}{\delta s} + a s(1-s) f_{rnd} \qquad (19)
$$

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、[$as(1-s) f_{rnd} \to a f_{rnd}$]に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。

４．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、以下のようになる。

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

$\tau = 0.0003, \quad \Delta t = 0.0002, \quad a = 0.01, \quad f_{rnd} = [-0.5, 0.5]$

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

$K = 0.8 \leftrightarrow 2.0$

$L = 9 \times 9, (12 \times 3), \quad N = 300 \times 300,\ 400 \times 100$

$a = 0.01$

特に、融点 $T_e = 1$ 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 とになり、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。

５．Mullins-Sekerka 不安定性を越えて（非線形組織制御法）

凝固界面におけるデンドライト組織は、Mullins-Sekerka 不安定性にて説明される。界面を成長させようとする力は、界面近傍における温度場による化学的な駆動力（結晶化の駆動力）である。一方、界面をフラットにしようとする力は界面エネルギーによる曲率の効果である。結局、この両者の力の攻めぎあいによって、実際の界面形態が決定される。界面エネルギーが支配的な場合には、当然ながら形態は平衡形状に近づく。完全に界面エネルギー支配ならば、結晶の形態は、界面エネルギーの法項依存性まで考慮し、かつ全界面エネルギー最小の条件の下に、ウルフの作図法によって決定される。一方、結晶化の駆動力が増大し、結晶形態が界面エネルギー支配から外れると、界面形状は平衡形からずれ、"ある条件"において Mullins-Sekerka 不安定性が出現し、デンドライト組織へと変化する。問題は、この"ある条件"を原理的に特定出来ない点にある。なぜならば、この"条件"は、両駆動力の力関係が動力学的につりあう環境下にあり、通常、カオスが生じる条件に一致してしまうからである。これは、複数の力がつりあう条件では、無限小のゆらぎがプラスのフィードバックによって無限大に拡大されることに起因するものである。事実、本 Phase field シミュレーションにおいて、結晶度場の揺動項の大きさを変化させると、デンドライトの形態は大きく変化する。したがって、Mullins-Sekerka 不安定性が生じている場合の組織形態安定性を議論する場合、形態安定性について、静的な条件を探索することは無意味である。（原理的に不可能であることをカオス理論が証明している。）

具体的な組織制御の観点からは、従来の材料組織制御法は、熱処理等の外部パラメータを規定し、静的な組織制御を行う方法論であるが、これは Mullins-Sekerka 不安定性が生じているような組織形態変化の制御には、以上の理由からほとんど効力を期待できない。このような場合には、静的な組織形態の安定条件を探索するのではなく、各種パラメータによる組織形態感受性を定量化し、動的な組織形態安定性を理解することが重要である。さらに組織制御においては、組織形態情報を掌握しつつ、すでに組織形態感受性が定量化されている各種パラメータによる非線形フィードバックをかけることにより、目的とする組織形態に落ち着かせる方法論（非線形組織制御法）が必要である。この各種パラメータは外的パラメータ（温度、圧力、応力、磁場、電場等）および内的組織形態パラメータ（濃度、規則度、結晶構造、結晶方位、転位密度等）に分類することができる。これらの各種パラメータを用いて系の全自由エネルギーを定義し、内的組織形態パラメータ変化による自由エネルギー変化率であるポテンシャル場を導出し、保存および非保存の非線形発展方程式を計算機シミュレーションする手法が、広義の Phase field 法である。また変分原理に基づき、これらの非線形発展方程式自身がオイラー方程式に一致するような汎関数が、散逸関数である。以上から、非線形組織制御法をエネルギーの面からサポートする武器が散逸関数であり、散逸関数のパラメータ空間構造は分岐図によって表される。さらに分岐位置において動力学的に組織形態感受性を定量化する道具が Phase field 法である。もちろんこれらの下地となるべき、「静的な平衡・非平衡相および組織」の解析法はあらかじめ確立されていなくてはならない。

以上の体系を構築するためには、平衡から非平衡にいたる一連の組織形態に関する大量の実験データ、平衡状態の相および組織に関する解析法とデータベース、さらに Phase field 法と、散逸関数に対する分岐図解析を同時に行うことが肝要である。