

鉄鋼製造時の固相移動を考慮したマクロ凝固組織・偏析予測モデルの開発

研究代表者 秋田大学大学院理工学研究科物質科学専攻 准教授 棗 千修

共同研究者 秋田大学大学院理工学研究科物質科学専攻 院生 小川 丈太

1. 緒言

鉄鋼材料のほぼ全てが、連続鋳造法か造塊法による鋳造プロセスを経て製造され、その過程では必ず偏析が生じる。偏析は鋳片・鋳塊の割れなどの重大欠陥に繋がるため、その低減は鉄鋼材料製造における積年の課題となっている。偏析には、デンドライト間隙で溶質の濃度不均一が起こるマイクロ偏析と液相流動などにより濃化液相が長範囲に渡り輸送されて比較的大きな領域で濃度不均一が起こるマクロ偏析がある。マイクロ偏析予測に関する研究は、1970年代頃から盛んに行われ、近年では、Phase-field(PF)法や Cellular Automaton(CA)法を用いた数値シミュレーションにより凝固組織形成を考慮したマイクロ偏析予測が可能となってきた¹⁾。一方、マクロ偏析予測に関する研究は数値流体力学の発展により1990年代頃からは行われてきた²⁻⁶⁾。しかし、未だ多くの課題があり、マクロ偏析を数値シミュレーションで定量に予測する汎用的な手法・モデルは現時点でも開発されていない。

マクロ偏析の数値シミュレーションは、温度場、濃度場、流れ場の支配方程式を連成して解析するだけであり、基本コンセプトは非常にシンプルである。しかしながら、金属の凝固で起こるミクロスケールの現象を考慮すると、問題は非常に複雑で難解なものになる。特に凝固組織は、問題を複雑にする主要因であり、固液共存領域の液相流動は、マクロ偏析の生成に大きな影響を与える。凝固が進行するとデンドライトが形成し、そのアーム間を溶質分配によって排出された濃化液相が対流や凝固収縮流により輸送されるため、個々のアーム間や周辺のデンドライトとの間隙の広さが、液相の流れ方や流れやすさを左右する。マクロ偏析シミュレーションでは、PF法のようなマイクロ組織形態(固液界面形態)を厳密に考慮してシミュレーションすることは難しい。これは、マクロ偏析とマイクロ組織の問題に対応する計算格子サイズ(例えば、マクロ偏析:1mm程度、マイクロ組織:1 μ m程度)が大きく異なるため、マイクロ組織計算のスケールでマクロ偏析を取り扱くと計算時間が膨大になるためである。そのため、固液共存領域の流れにDarcy流れ(多孔質媒体内の流れ)を考慮して、マイクロ組織の状態を仮定した透過率⁷⁻⁹⁾がパラメータとして用いられる。しかし、Darcy流れだけでは、鋳壁から形成した柱状晶組織のように固相が固定されている場合には対応できるが、自由に液相を移動できる固相については対応できない。そこで、近年、自由に移動できる固相を1つの流体と仮定した2流体モデルが提案され¹⁰⁾、さらに等軸晶、粒状晶などの固相を形態別に分けた多流体モデルも提案されている¹¹⁾。このようなモデルの高度化により、徐々にマクロ偏析の定量予測が可能になってきたが、流体の支配方程式を複数連成するため、計算時間は大幅に増加するという課題もある。また、個々

の結晶粒成長を取り扱っていないため、マクロ偏析の生成に影響するデンドライトの溶断などの組織形成に伴う振る舞いは直接取り扱えない。したがって、CA法によるマクロ組織形成モデルと流動解析を連成したシミュレーションも報告されている¹²⁻¹⁴⁾。さらに、結晶粒の成長と移動を取り扱ったモデルも報告されている¹⁵⁾が、CA法の粒成長アルゴリズムの原理上、モデルはかなり複雑になる。また、PF法によるデンドライト成長と流動解析を組み合わせて固相移動を考慮したモデル¹⁶⁾も提案されているが、PF法はマクロ偏析を取り扱うスケールでのシミュレーションに適用することは難しい。このようにマクロ偏析は、ミクروسケールの凝固組織形成とマクロスケールの流動などが密接に関連するマルチスケールの現象であるため、偏析制御のための生成機構の詳細を理解するためには、数値シミュレーションを主体とした技術の更なる高度化が望まれている。

本研究では、新たな凝固組織形成シミュレーション手法の可能性として Level set (LS) 法に着目した¹⁷⁻¹⁸⁾。LS法は、数値流体解析の分野で広く用いられ、異相界面の移動などを高精度にシミュレーションできる手法であり、界面移動に非常に簡便な移流方程式を用いることから固相移動を考慮しやすく、プログラミングの煩雑さを避けることも可能である。従って、本研究では、連続鋳造で見られる中心偏析や大型鋼塊で見られるV偏析、負偏析などのマクロ偏析予測への可能性の検討として、LS法を用いて固相移動を考慮したマクロ凝固組織・偏析シミュレーションの基本モデルを開発する。

2. LS法

凝固組織形成モデルへのLS法の適用は比較的新しい試みであり、多くは固液界面移動を取り扱うミクロ凝固組織モデルである¹⁹⁻²⁰⁾。その基本コンセプトを Fig. 1 に示す。LS法では、距離関数 (LS関数) ϕ をその勾配を1として定義し、 $\phi=0$ を界面 (Zero-LS) と仮定する。成長速度を V として式(1)の移流方程式により ϕ の時間発展を計算することで、組織形成が表現できる。 V に固相移動速度を加えることで移動を取り扱うことができるため、移流方程式のみで組織形成と固相移動を同時に取り扱うことが可能となる。ただし、移流方程式による ϕ の数値計算は、数値誤差の関係で勾配 $|\nabla\phi|=1$ が保てなくなるため、再初期化の処理が必要である。最も簡単な再初期化処理は式(2)であり、Zero-LS の位置は変更せずにゼロ以外の ϕ を $|\nabla\phi|=1$ の分布になるように処理される。

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + V \cdot \nabla\phi = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + S(\phi)(\|\nabla\phi\| - 1) = 0 \quad (2)$$

τ は再初期化処理の時間であり、 ϕ の時間発展を取り扱う時間 t とは異なる。 $S(\phi)$ は ϕ における液相で-1、固相で1となる符号関数である。この再初期化処理には計算時間がかかるため、この処理を高速に行う手法として Fast Marching (FM)法²¹⁾、Fast Sweeping (FS)法²²⁾などが提案されている。LS法では式(1)第1項の時間微分に3次精度の TVD ルンゲ

クッタ法, 第 2 項の移流項に WENO 法を用いて陽解法で計算する。

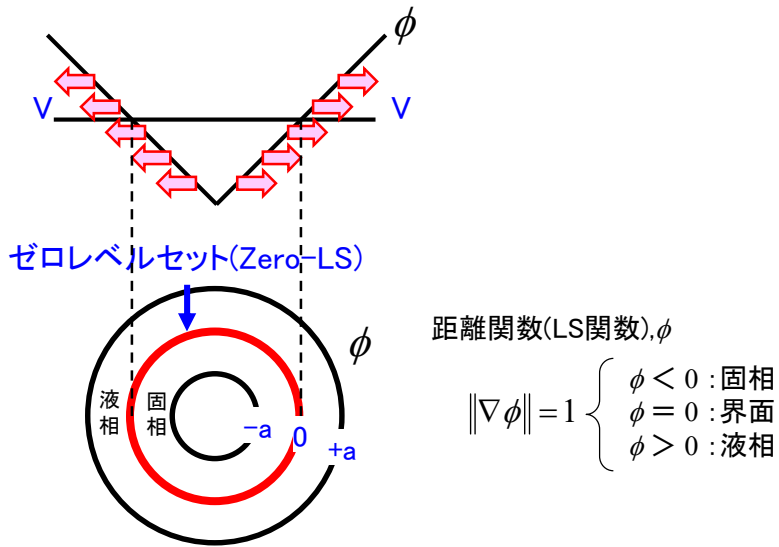


Fig. 1 LS 法の基本コンセプトの説明図

3. LS 法によるマクロ凝固組織モデル

3.1 粒成長

マクロ凝固組織形成において最も主流のモデルは, CA 法である。CA 法では, PF 法のようにミクロ凝固組織である dendrite 形態を厳密にシミュレーションするのではなく, Fig. 2 のように dendrite 先端を覆った Dendrite Envelope (DE) を dendrite 成長する結晶粒と仮定して, マクロ凝固組織を取り扱う¹⁾。本研究の LS 法によるマクロ凝固組織においても同様の仮定を用いる。したがって, 距離関数は $\phi < 0$ で固液共存領域あるいは固相, $\phi = 0$ で DE になる。

DE の成長速度 v は, LGK モデルによる dendrite 先端成長速度 v_{tip} , 優先成長方向と DE の法線ベクトル方向との角度 θ によって式(3)で計算する。

$$v = \max(\cos \theta) \cdot v_{tip} \quad (3)$$

ϕ の時間発展を計算するためには, DE (Zero-LS) の周囲の ϕ にも DE の成長速度を拡張して与える。このような拡張速度場および ϕ の再初期化処理に, 本研究では FS 法を用いた。

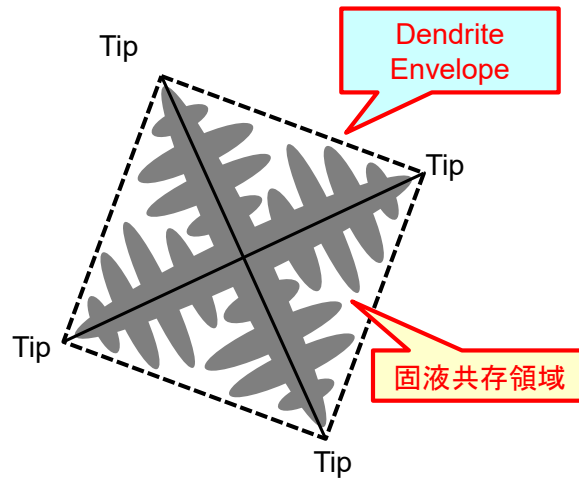


Fig. 2 マクロ凝固組織モデルの結晶粒の取り扱い

多結晶組織の適切な DE 成長のためには、DE セル、固液共存セルと液相セルの区別が必要であり、異なる結晶を区別するためには、DE セルおよび固液共存セルの優先成長方向の区別が必要である。本研究では、CA 法に類似したアルゴリズムでセル状態の遷移を取り扱った。Fig. 3 に示すように液相セル、DE セル、固液共存セルの状態番号 k をそれ

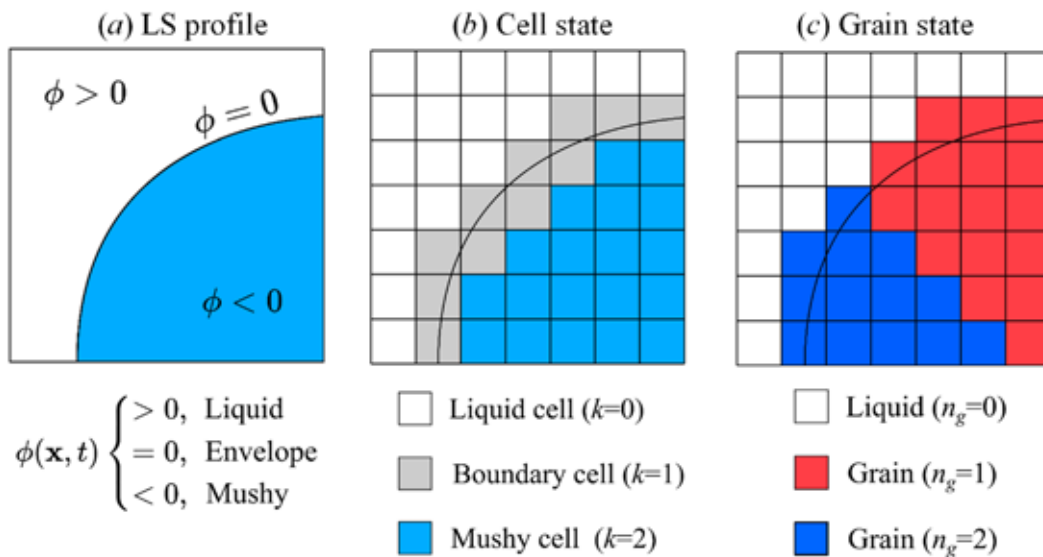


Fig. 3 マクロ組織モデルのセルの取り扱い

ぞれ 0, 1, 2 とし、DE および固液共存セルで優先成長方向が同じものと同じ結晶粒番号 n_g を与える (液相: $n_g=0$)。DE 成長により、Zero-LS が液相セルのセル中心を捕捉したとき、そのセルの状態を液相セルから DE セルへ変換し、DE セルであったセルを固液共存セルに変換する。続けて液相セルから DE セルに変換されたセルの結晶粒番号を隣接する結晶

粒の番号に更新する。

3.2 核生成

核生成は CA 法で用いられている以下の Gauss 分布に基づく確率密度関数²³⁾で与える。

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\sigma}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \Delta T_m}{\Delta T_{\sigma}}\right)^2\right] \quad (4)$$

ここで、 ΔT は過冷度、 n_{\max} は最大核密度、 ΔT_{σ} は標準偏差、 ΔT_m は平均過冷度である。

3.3 凝固伝熱

温度場は、次章で説明するマクロ偏析モデルと連成させるため、Volume averaging (VA) 法を用いた混合相モデルに基づく式(5)のエネルギーの式によって計算する²⁴⁾。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_S g_S \langle H_S \rangle + \rho_L g_L \langle H_L \rangle) = (g_S \kappa_S + g_L \kappa_L) \nabla^2 T \quad (5)$$

$$H_m = g_S \langle H_S \rangle + g_L \langle H_L \rangle = c_p T + L(1 - g_S) \quad (6)$$

ここで、 T は温度、 g_S, g_L はそれぞれ固相率、液相率、 H_S, H_L はそれぞれ固相、液相のエンタルピー、 ρ_S, ρ_L はそれぞれ固相、液相の密度、 κ_S, κ_L はそれぞれ固相、液相の熱伝導率である。

3.4 マクロ凝固組織シミュレーション

Fig. 4 は、計算領域 30 mm×30 mm、4つの境界から一定の熱流束で抜熱させた条件での Sn-5mass%Pb 合金の 2次元マクロ凝固組織シミュレーションの結果である。本研究ではモデル評価のベンチマークとして Sn-Pb 合金を選択した。Sn-Pb 合金の物性値および計算パラメータは Table 1 に示す。なお、密度と熱伝導率は、固相及び液相で同一とし ($\rho_S = \rho_L, \kappa_S = \kappa_L$)、核生成は鋳壁のみとし、バルク液相での核生成は考慮していない。

鋳型への抜熱に伴い鋳壁近傍で多数の微細結晶が形成し、粒選択により熱流方向に近い優先成長方向を持つ結晶粒が選択され、柱状晶として中心部に向かって成長する典型的な柱状晶組織がシミュレーションできた。2次元シミュレーションのため、奥行き方向への柱状晶成長がないことから柱状晶は粗大に成長する。このような粗大柱状晶の形成は、CA 法によるマクロ凝固組織シミュレーションでも確認されており、3次元化により、このような粗大柱状晶は大幅に減少する。したがって、LS 法によるマクロ凝固組織モデルにおいても妥当なマクロ凝固組織形成のシミュレーションが可能であることがわかる。

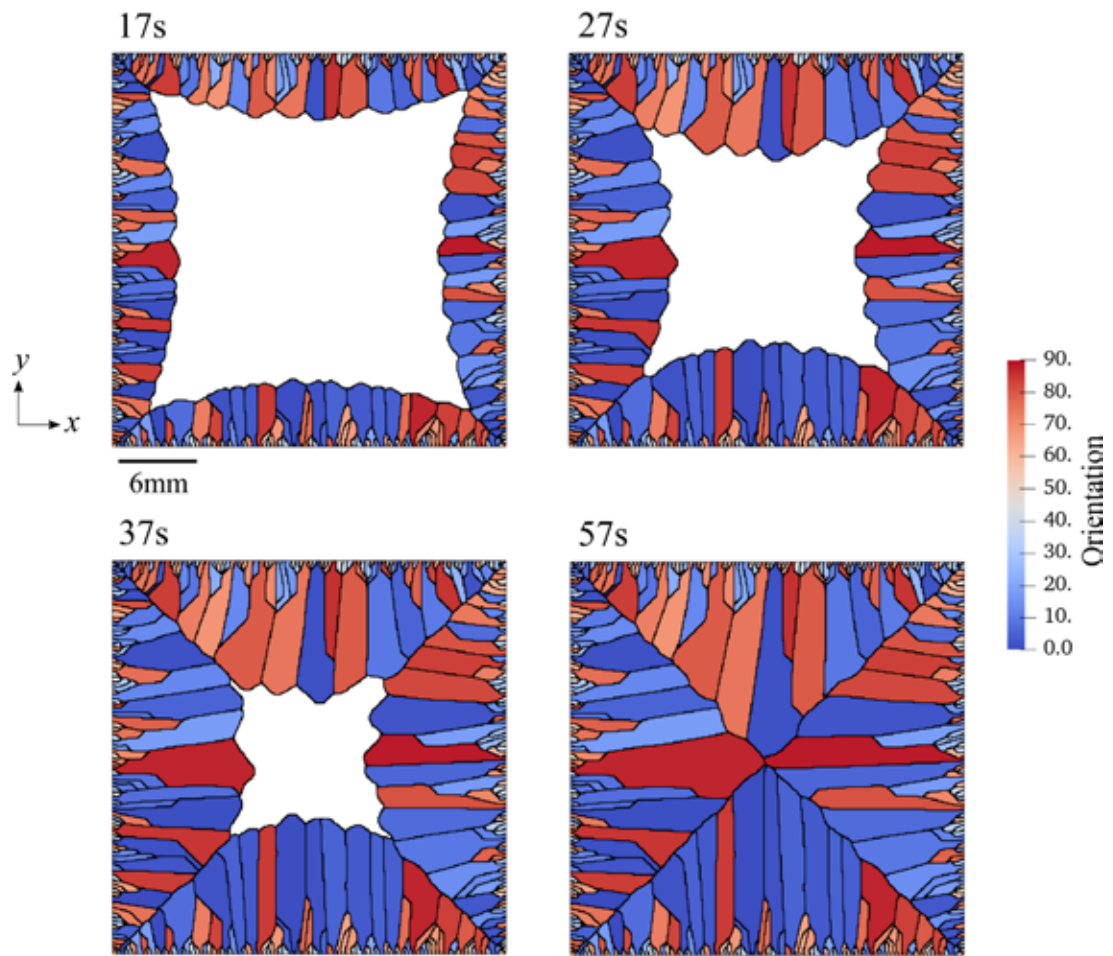


Fig. 4 LS 法による柱状マクロ凝固組織シミュレーション

Table 1 Sn-Pb 合金の物性値²⁵⁾と計算パラメータ

	Symbol	Value	Unit
Melting temperature	T_m	505	K
Liquidus slope	m_L	-1.286	K mass% ⁻¹
Equilibrium partition coefficient	k_0	0.0656	—
Eutectic temperature	T_E	456	K
Eutectic composition	C_E	38.1	mass%
Specific heat	c_p	260.0	J kg ⁻¹ K ⁻¹
Thermal conductivity	κ_S, κ_L	55.0	W m ⁻¹ K ⁻¹
Latent heat of fusion	L	6.1×10 ⁴	J kg ⁻¹
Density	ρ_S, ρ_L	7.0	g cm ⁻³
Reference temperature	T_{ref}	499	K
Thermal expansion coefficient	β_T	6×10 ⁻⁵	K ⁻¹
Solutal expansion coefficient	β_C	-5.3×10 ⁻⁴	mass% ⁻¹
Dynamic viscosity	ν	1.4×10 ⁻⁷	m ² s ⁻¹
Dendrite arm spacing	d	65×10 ⁻⁶	m
Cell size	Δx	1.0×10 ⁻⁴	m
Initial temperature	T_{ini}	499	K
Time step	Δt	1×10 ⁻³	s
Heat transfer coefficient	h	300	W m ⁻² K ⁻¹
Maximum nucleation density	n_{max}	2×10 ⁶	m ⁻²
Mean undercooling	ΔT_m	0.25	K
Standard deviation	ΔT_σ	0.1	K

4. LS 法によるマクロ凝固組織モデルとマクロ偏析モデルの強連成

LS 法を用いたマクロ凝固組織モデルに数値流動解析と溶質濃度解析を組み合わせたマクロ偏析モデルを連成する。本研究では、マクロ偏析モデルに Beckermann らによって開発された VA 法に基づくモデルを用いる²⁴⁾。VA 法では固液混合の各相の変数を以下のように定義する。

$$\begin{aligned} \langle \Psi_S \rangle &= \frac{1}{V_S} \int_{V_S} \Psi_S dV \\ \langle \Psi_L \rangle &= \frac{1}{V_L} \int_{V_L} \Psi_L dV \end{aligned} \quad (7)$$

Ψ_S, Ψ_L は固相及び液相の各種変数（速度，濃度など）， V_S, V_L はセル内の固相及び液相の体積である。添え字の S, L はそれぞれ固相，液相を意味する。

4.1 液相流動

VA 法による非圧縮性流体の運動量保存方程式 (Navier-Stokes の式) および質量保存方程式 (連続の式) はそれぞれ式(8), 式(9)となる。

$$\frac{\partial(\rho_L g_L \langle \mathbf{u}_L \rangle)}{\partial t} + \langle \mathbf{u}_L \rangle \nabla \cdot (\rho_L g_L \langle \mathbf{u}_L \rangle) = -g_L \nabla p + \nu \nabla^2 (\rho_L g_L \langle \mathbf{u}_L \rangle) - \frac{\nu \rho_L g_L}{K} \langle \mathbf{u}_L \rangle + g_L \left[\beta_T (T - T_{ref}) + \beta_C (\langle C_L \rangle - C_{ref}) \right] \mathbf{g} \quad (8)$$

$$\nabla \cdot (\rho_L g_L \langle \mathbf{u}_L \rangle) = 0 \quad (9)$$

ここで, \mathbf{u}_L は液相の流速ベクトル, p は圧力, ν は動粘性係数, K は透過率, C_L は液相濃度, \mathbf{g} は重力加速度ベクトル, T_{ref} , C_{ref} はそれぞれ参照温度, 参照液相濃度である。また, 自然対流を考慮するためにブシネスク近似を用いた。透過率は等方多孔質媒体の Kozeny-Carman の式を用いた。

$$K = \frac{d^2}{180} \frac{g_L^3}{(1 - g_L)^2} \quad (10)$$

ここで, d はデンドライトアーム間隔である。

4.2 移流を伴う凝固伝熱

マクロ偏析モデルでは, 液相流動による熱の移流を考慮するため式(5)は式(11)のように移流項が加えられる。

$$\frac{\partial H_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s g_s \langle \mathbf{u}_s \rangle \langle H_s \rangle + \rho_L g_L \langle \mathbf{u}_L \rangle \langle H_L \rangle) = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) \quad (11)$$

ここで, \mathbf{u}_s は固相の流速ベクトルである。

4.3 移流を伴う溶質濃度場

式(12)は溶質濃度場の移流方程式である。なお, 溶質拡散は移流に伴う溶質移動に比べ小さいため, 本モデルでは溶質拡散は考慮しない。また, 固液界面では局所平衡を仮定し, 固相濃度は式(14), 液相線温度 T_L は式(15)により計算する。

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s g_s \langle \mathbf{u}_s \rangle \langle C_s \rangle + \rho_L g_L \langle \mathbf{u}_L \rangle \langle C_L \rangle) = 0 \quad (12)$$

$$C_m = g_s \langle C_s \rangle + g_L \langle C_L \rangle \quad (13)$$

$$\langle C_s \rangle = k_0 \langle C_L \rangle \quad (14)$$

$$T_L = T_m + m_L \langle C_L \rangle \quad (15)$$

ここで, C_s は固相の濃度, k_0 は平衡分配係数, T_m は溶媒金属の融点, m_L は液相線勾配である。

4.4 計算法

本研究では、前章で説明した LS 法によるマクロ凝固組織モデルと本章で説明したマクロ偏析モデルの強連成によりマクロ凝固組織と偏析の同時解析を行う。マクロ凝固組織および温度場，溶質濃度場は有限差分法を用い陽解法で計算し，流動場は PIMPLE 法による陰解法で計算した。なお，計算時間と計算安定性の関係から温度場および濃度場の計算には小さな時間ステップ Δt_f を用い，マクロ凝固組織および流動場の計算には大きな時間ステップ Δt を用いた。これらの関係は $\Delta t = 30\Delta t_f$ とした。Fig. 5 は連成モデルの計算フローチャートである。

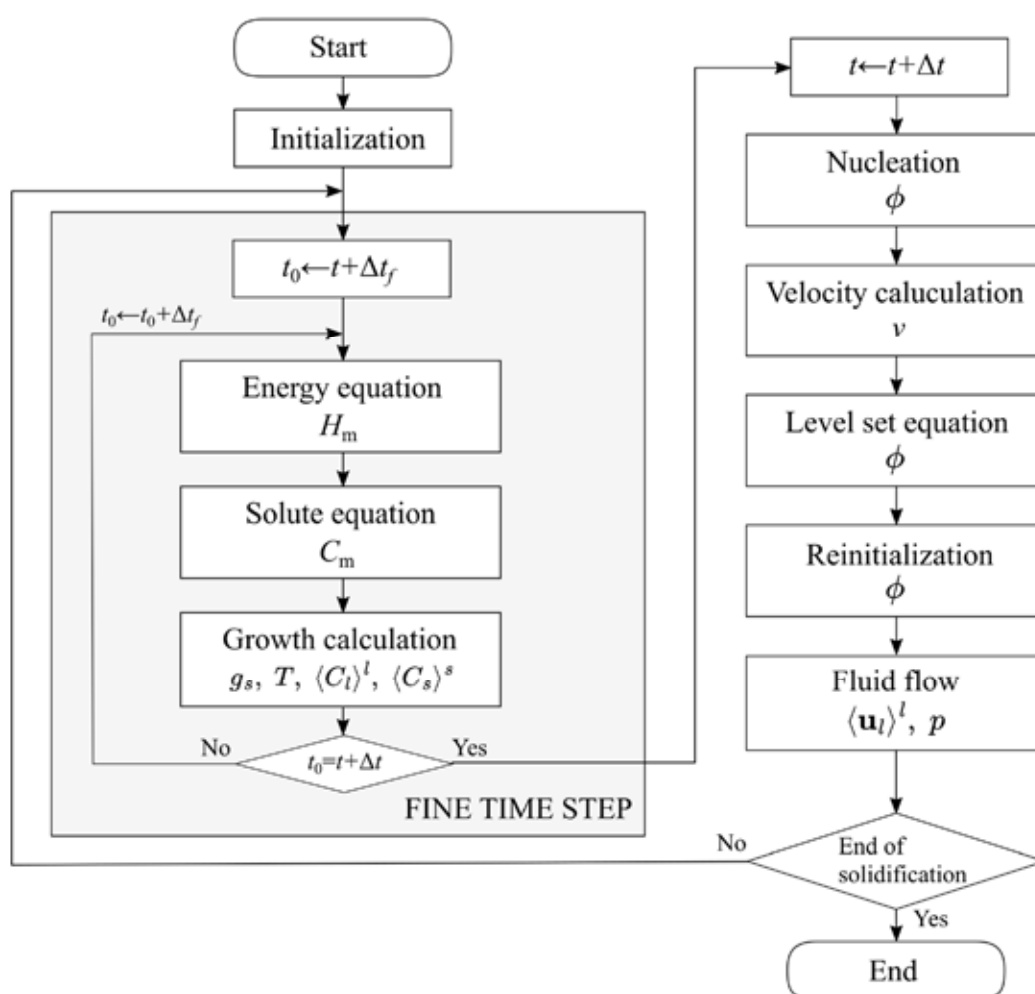


Fig. 5 マクロ凝固組織とマクロ偏析の連成モデルの計算フローチャート

4.5 横一方向凝固シミュレーション

Fig. 6は、計算領域 $10\text{ mm} \times 10\text{ mm}$ 、左境界から一定の熱流束で抜熱させ、上・下・右境界を断熱とした条件での Sn-5mass%Pb 合金の2次元マクロ凝固組織・偏析シミュレーションの結果である。物性値および計算パラメータは前述の Table 1 に示す。核生成は左境界の鋳壁（ここではチルと呼ぶ）のみとし、バルク液相での核生成は考慮していない。Fig. 6(a)からわかるように柱状晶組織の形成は、マクロ偏析モデルと連成していないシミュレーション結果 (Fig. 4) と同様にチル近傍で微細結晶粒の粒選択が起こり、優先成長方向が熱流方向に近い結晶粒が柱状晶として成長している。Fig. 6(b), (c)をみると、底部に固相率が低くチャンネル状の正偏析が形成している。このチャンネル状偏析は結晶粒界に沿って生成しており、本モデルは、従来のマクロ偏析のみのモデルとは異なり濃化液相の流動とマクロ組織の形成が関連づけられたシミュレーションが可能であることがわかる。

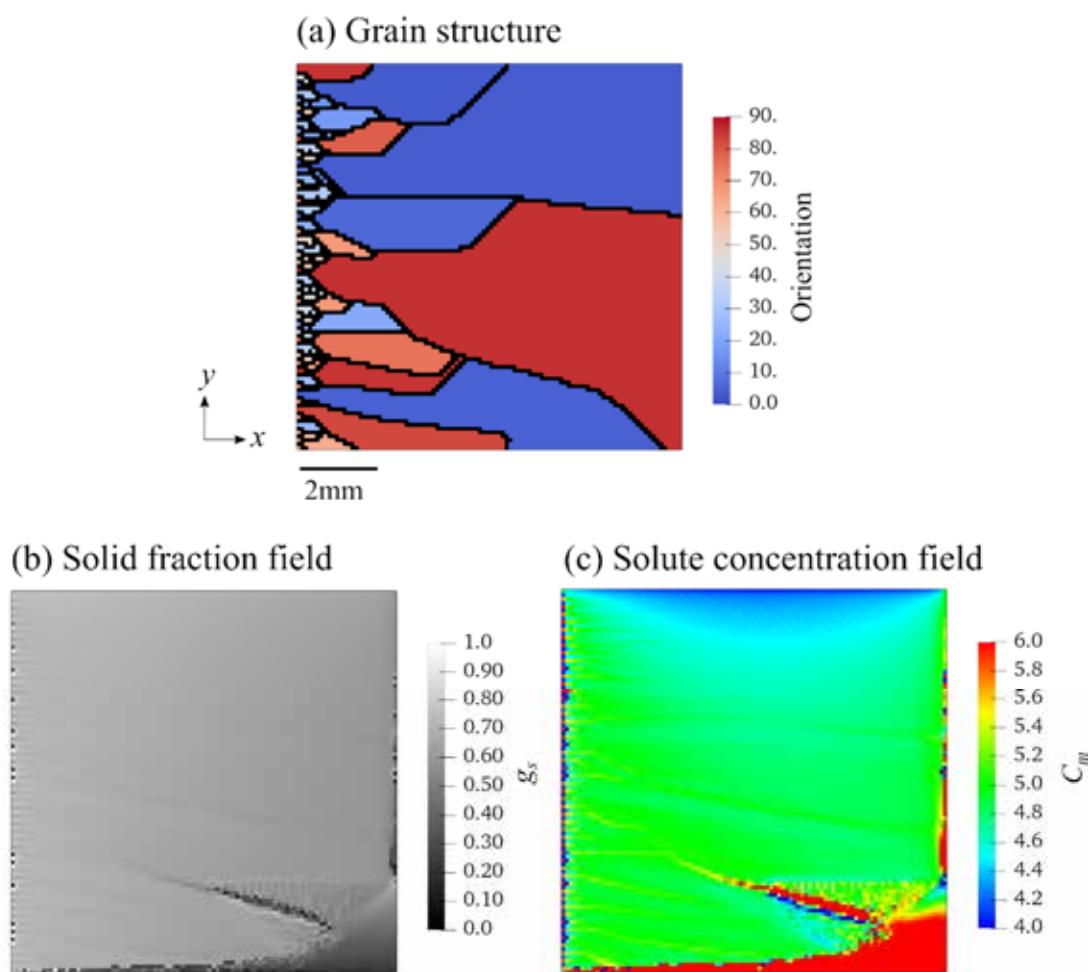


Fig.6 マクロ凝固組織とマクロ偏析の連成モデルによる横一方向凝固シミュレーション

4.6 凝固結晶粒の沈降シミュレーション

Fig. 7は、計算領域 $55\text{ mm} \times 150\text{ mm}$ において全境界を断熱とし、全領域を 3 K 過冷させた過冷却液相中で凝固する単一結晶粒（初期半径 $300\text{ }\mu\text{m}$ の円形）を 3 mm/s の一定速度で強制的に沈降させた Sn-5mass%Pb 合金の2次元マクロ凝固組織・偏析シミュレーションの結果である。図中の実線は DE (Zero-LS) である。結晶粒の沈降に伴い、結晶粒の

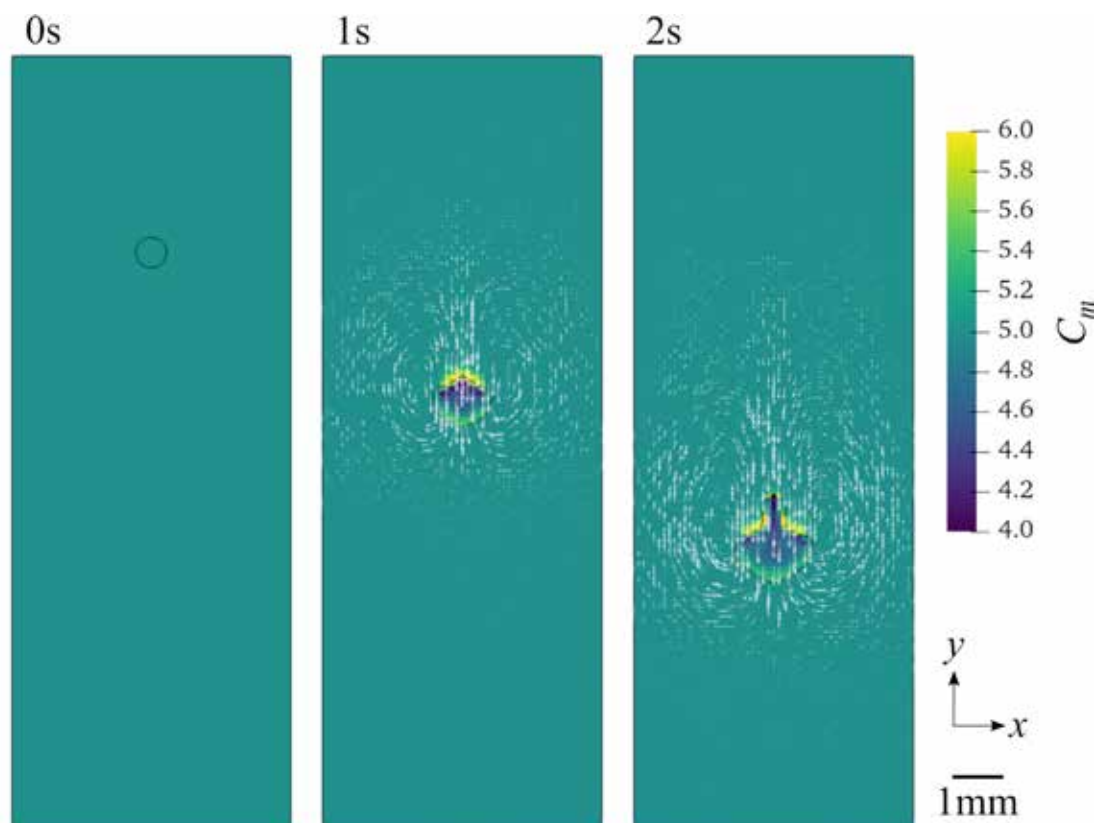


Fig.7 マクロ凝固組織とマクロ偏析の連成モデルによる
結晶粒の成長と沈降のシミュレーション

左側では時計回り、右側では反時計回りの流れが発生し、結晶粒は流れの上流部でより発達し、下流部（結晶粒の上部）ではくびれが発生し細くなっている。これは沈降に伴い上流部では DE に沿って溶質が洗浄され、溶質濃度が低下することで凝固が促進し、一方、下流部では溶質が濃化し成長を抑制したためである。Fig. 8は $\text{NH}_4\text{Cl}\text{-H}_2\text{O}$ 合金による沈降実験と PF 法による対流下のデンドライト成長シミュレーションの一例である²⁶⁾。これらの結果においても本シミュレーション結果と同様に下流部より上流部のデンドライト主軸が発達している。したがって、本モデルにおける沈降する結晶粒の成長挙動は妥当なものであると考えられる。

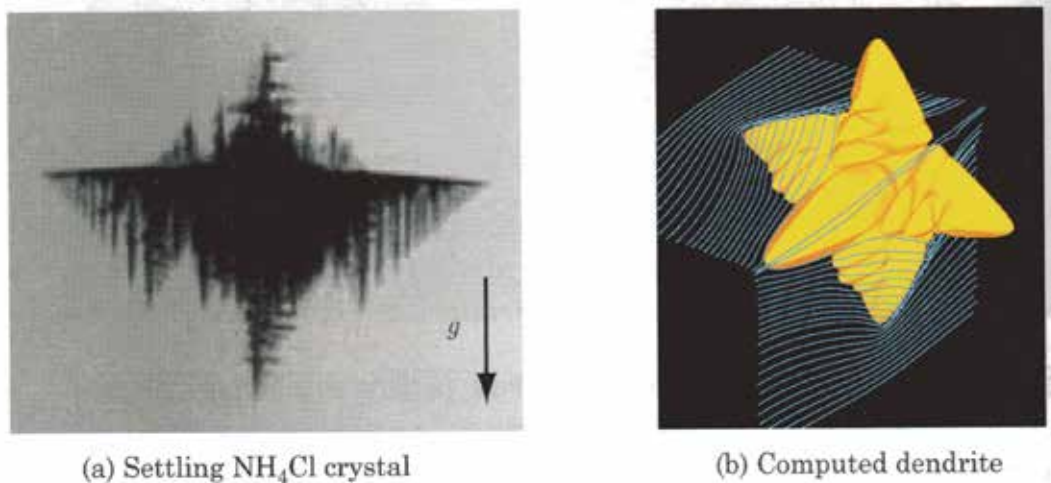


Fig. 8 デンドライト沈降実験による結晶形態と PF 法による対流下の
デンドライト成長シミュレーションの例²⁶⁾

5. まとめ

本研究では、LS 法に基づくマクロ凝固組織形成モデルとマクロ偏析モデルを連成した新たなモデルを開発し、Sn-Pb 合金によるマクロ組織形成、横一方向凝固による組織・偏析生成、結晶粒沈降時の組織・偏析生成のシミュレーションからモデルの妥当性を評価した。チル晶における粒選択とその後の柱状晶成長、粒界を起点とするチャンネル状偏析の生成、結晶粒沈降時の結晶粒成長挙動など多くの点で、本モデルのシミュレーションは妥当な結果が得られることがわかった。しかしながら、実験との比較など定量的な予測に向けた評価は今後の課題であり、そのためには3次元モデルへの拡張や柱状晶・等軸晶が混在した大規模な計算による検証などを実施する必要がある。また、本研究で着目した LS 法によるマクロ凝固組織形成モデルは、従来の CA 法や PF 法に比べ、マクロスケールにおける個々の結晶粒移動を取り扱いやすい特徴がある。これは、連続鋳造法や造塊法で生成する各種マクロ偏析の生成機構をより深く理解するためのモデル構築には重要である。特に、凝固中の等軸晶のせん断変形によって生成すると考えられている V 偏析や柱状デンドライトの溶断と結晶粒の沈降で生成すると考えられている大型鋼塊の負偏析などは、個々の結晶粒移動を考慮するモデルが必要であるため、このようなモデルの研究は、今後さらにも進むものと思われる。

謝辞

本研究は「公益財団法人 JFE21 世紀財団」からの 2019 年度技術研究助成の支援を受けて実施されました。心より感謝申し上げます。

参考文献

- 1) 棗千修 : ふえらむ, **19** (2014) 251
- 2) J. P. Gu and C. Beckermann: *Metall. Mater. Trans. A*, **30A** (1999) 1357
- 3) C. Beckermann: *Int. Mater. Rev.*, **47** (2002) 243
- 4) V. D. Fachinotti, S. L. Corre, N. Triolet, M. Bobadilla and M. Bellet: *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **67** (2006) 1341
- 5) 澤田朋樹, 及川勝成, 安齋浩一, 高橋史生, 梶川耕司, 山田人久 : *鑄造工学*, **81** (2009) 283
- 6) M. Ohno and H. Sato: *Int. J. Heat Mass Transf.*, **127** (2018) 561
- 7) 棗千修, 高橋大喜, 河嶋佳純, 谷川英司, 大笹憲一 : *鉄と鋼*, **99** (2013) 117
- 8) Y. Natsume, D. Takahashi, K. Kawashima, E. Tanigawa and K. Ohsasa : *ISIJ Int.*, **53** (2013) 838
- 9) T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta and T. Aoki: *Acta mater.*, **164** (2019) 237
- 10) J. Ni and C. Beckermann: *Metall. Trans. B*, **22** (1991) 349
- 11) A. Ludwig, A. Kharicha and M. Wu: *Metall. Mater. Trans B*, **45B** (2014) 36
- 12) T. Carozzani, Ch. A. Gandin, H. Dignonnet, M. Bellet, K. Zaidat and Y. Fautrelle: *Metall. Mater. Trans. A*, **44A** (2013) 873
- 13) 棗千修 : *鉄と鋼*, **103** (2017) 730
- 14) 棗千修 : *鉄と鋼*, **103** (2017) 738
- 15) G. Gullemot, Ch. A. Gandin and H. Combeau: *ISIJ Int.*, **46** (2006) 880
- 16) T. Takaki, R. Sato, R. Rojas, M. Ohno and Y. Shibuta: *Comp. Mater. Sci.*, **147** (2018) 124
- 17) J. A. Sethian: *Level Set Methods and Fast Marching Methods*, Cambridge University Press, (1999)
- 18) S. Osher and R. Fedkiw: *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*, Springer-Verlag New York, Ink (2002)
- 19) L. Tan and N. Zabaras: *J. Compu. Phys.*, **211** (2006) 36
- 20) L. Tan and N. Zabaras: *J. Compu. Phys.*, **226** (2007) 131
- 21) J. A. Sethian: *Proc. Nat. Acad. Sci.*, **93** (1996) 1591
- 22) H. Zhao: *Math. Comput.*, **74** (2004) 603
- 23) M. Rappaz and Ch. –A. Gandin: *Acta Metall. Mater.*, **41** (1993) 345
- 24) C. Beckermann and R. Viskanta: *Physico Chem. Hydrodyn.*, **10** (1988) 195
- 25) M. Bellet, H. Combeau, Y. Fautrelle, D. Gobin, M. Rady, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, C.A. Gandin, B. Goyeau, S. Mosbah, M. Založnik: *Int. J. Therm. Sci.*, **48** (2009) 2013
- 26) J. A. Dantzig and M. Rappaz: *Solidification* 2nd edition, EPFL Press (2017)