

均質化法に基づくマルチスケールモデリングによる 多結晶金属の結晶粒形状の影響評価

Evaluation of grain effects by multi-scale modeling based on homogenization method
for polycrystalline metals

渡邊育夢*, 丸山敦志**, 寺田賢二郎***, 秋山雅義****

Ikumu WATANABE, Atsushi MARUYAMA, Kenjiro TERADA, Masayoshi AKIYAMA

*学生員 修士(工学) 東北大学大学院工学研究科土木工学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 06)

**学生員 学士(工学) 東北大学大学院工学研究科土木工学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 06)

***正会員 Ph.D. 助教授 東北大学大学院工学研究科土木工学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 06)

****Ph.D. 住友金属(株)総合技術研究所 (〒660-0891 兵庫県尼崎市扶桑町 1-8)

We investigate the relation between the macroscopic behavior and the intergranular and intragranular effects by applying the multi-scale analysis method, which is based on the mathematical homogenization theory combined with the constitutive models in crystal plasticity. Here, the macro-scale material behavior of polycrystalline metals is characterized by evaluating the mechanical behavior in the micro-scale geometrical structure. The numerical simulations are carried out by means of some micro-scale structural models of a polycrystalline aggregate, each of which has a different grain shape from others. These results suggest that we should take intergranular deformation into consideration to evaluate the effect of micro structures and that the grain shape has almost no effect on the macroscopic material behavior of polycrystalline metals.

Key Words : Multi-scale Analysis, Polycrystalline metals, Crystal Plasticity, Homogenization Method

1. はじめに

多結晶金属のミクロスケールにおける非均質性からマクロな材料応答を得ようという研究は Taylor の研究¹⁾にはじまり、観測技術の発達や計算機の発達を背景に現在でも盛んになされている。金属のミクロ組織の制御技術向上を受け、要求するマクロ材料応答を得るためのミクロ組織の設計を目的として、ミクロな幾何学的特性に起因するメカニズムを反映したマクロ応答の予測が求められている。例えば、大きな変形を伴う塑性加工プロセスにおいては各結晶粒の結晶方位分布や結晶粒形状の変化が生じるが、加工品のマクロな材料応答を予測するためには変形時に生じるミクロ組織の変化を調査し、モデル化する必要がある。

多結晶体の平均化手法として代表的な Taylor モデル¹⁾やセルフコンシステントモデル²⁾は結晶方位分布の影響を陽にモデル化したものである。このモデルによる研究の歴史は長く変形と結晶方位の関係³⁾やそこから得られるマクロ応答に関する研究⁴⁾が数多くなされている。一方で大変形問題に一般化された単結晶の構成モデル⁵⁾を用いて有限要素で構成された多結晶構造の変形解析を行う研究もなされている。このモデル化は結晶粒間の変形干渉作用や結晶粒内の非均質変形を考慮することが可能であり、上記のモデルよりもミクロ

組織の変化を忠実に反映しているといえる。同様のモデル化により塑性加工を想定した数値シミュレーションもいくつか報告されている⁶⁾が、その多くはマクロスケールの構造解析において異なる結晶方位を応力評価点や有限要素に割り当てられたもので、スケール間の整合性や結晶粒内の非均質変形がほとんど考慮されていないなどモデル化上の問題を抱えている。複数の結晶粒から構成される代表体積要素の有限要素解析により、結晶粒間および粒内の変形状態をシミュレートした研究^{7),8)}も行われているが、マクロとミクロの両スケールを連成して解く手法を用いて、そのマクロ材料応答との関係に関して言及した研究は見当たらない。

そこで著者らはミクロな非均質性からマクロな材料応答を得ることのできる均質化法に基づくマルチスケールモデリング⁹⁾に単結晶の構成モデル⁵⁾を適用し、多結晶金属のミクロな幾何学的特性から材料応答を得る研究を進めてきた¹⁰⁾。本研究では特に結晶粒間および粒内の非均質変形とマクロ応答の関係、ミクロな幾何学的特性の影響に着目した有限要素モデルの数値解析を通して、これらの定性的な影響を調査する。

2. 多結晶金属のマルチスケール解析法

本節では均質化法により導出される two-scale 境界値問題の支配方程式とミクロスケール応力評価に用いる

[†] Dedicated to the memory of Prof. Michihiro KITAHARA

単結晶の弾塑性構成式を示す。

2.1 two-scale 境界値問題

two-scale 運動学により幾何学的非線形性を考慮した均質化法に基づくマルチスケールモデリング⁹⁾では2つのスケールの現配置における釣り合い式は各スケールの位置ベクトル $\mathbf{x} \in \mathcal{B}, \mathbf{y} \in \mathcal{Y}$ を変数として以下のように与えられる。

● ミクロスケール：

$$\int_{\mathcal{Y}} \boldsymbol{\tau}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \nabla_{\mathbf{y}} \boldsymbol{\eta}^1 \frac{d\mathbf{y}}{J_{\mathbf{y}}} = 0, \forall \boldsymbol{\eta}^1 \in \mathcal{V}_{\mathcal{Y}}^{\text{per}}, \quad (1)$$

$$\mathcal{V}_{\mathcal{Y}}^{\text{per}} = \left\{ \mathbf{v} : \mathcal{Y} \mapsto \mathbb{R}^{n_{\text{dim}}} \mid \mathbf{v}_i \in W^{1,p}; \mathcal{Y}\text{-periodic} \right\}$$

$$\boldsymbol{\tau}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \text{ [determined by constitutive equations]} \quad (2)$$

● マクロスケール：

$$\int_{\mathcal{B}} \bar{\boldsymbol{\tau}} : \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\eta}^0(\mathbf{x}) \frac{d\mathbf{x}}{\bar{J}} - g_{\text{ext}}(\boldsymbol{\eta}^0) = 0, \forall \boldsymbol{\eta}^0 \in \mathcal{V}_{\mathcal{B}} \quad (3)$$

$$\mathcal{V}_{\mathcal{B}} = \left\{ \mathbf{v} : \mathcal{B} \mapsto \mathbb{R}^{n_{\text{dim}}} \mid \mathbf{v}_i \in W^{1,p}, \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ on } \Gamma_u \right\}$$

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\|\mathcal{Y}\|} \int_{\mathcal{Y}} \boldsymbol{\tau}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (4)$$

ここで、 $J_{\mathbf{y}}, \bar{J}$ は $d\mathbf{y} = J_{\mathbf{y}} d\mathbf{Y}, d\mathbf{x} = \bar{J} d\mathbf{X}$ で定義される各スケールにおける体積変化を表し、 g_{ext} は外力項であり、 $W^{1,p}$ は1階の導関数が2乗可積分な空間 L_p に属す関数の空間である。ミクロスケールの Kirchhoff 応力 $\boldsymbol{\tau}^0$ は次節で与える弾塑性構成式により評価する。各変数の添え字 (0 or 1) は two-scale 収束論¹¹⁾の漸近展開法における非均質性の代表長さのオーダーに対応するものである。

2.2 単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデル

単結晶のすべりに基づく弾塑性構成モデル⁵⁾は、単結晶の塑性変形が Schmid 則に基づき、結晶格子に依存したすべりにより生じるものとして定式化される。いま、 n_{slip} 個のすべり系を想定して、あるすべり系 α において基準配置におけるすべり方向の単位ベクトルを $\mathbf{s}_0^{(\alpha)}$ 、すべり面の単位法線ベクトルを $\mathbf{m}_0^{(\alpha)}$ と定義する。塑性流れ中に結晶格子は変形せず、弾性変形のみで変形するという Lee の仮定¹²⁾から変形勾配の弾塑性乗算分解は $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$ と与えられ、弾性部分を用いて現配置におけるすべり系を規定する二つのベクトルは、変形後もそれらの直交性が成立することを考慮すると

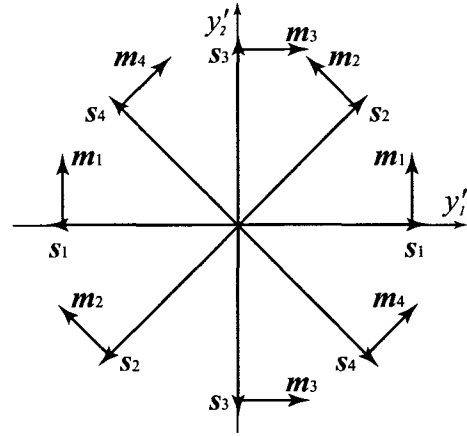
$$\mathbf{s}_i^{(\alpha)} = \mathbf{F}^e \mathbf{s}_0^{(\alpha)}, \quad \mathbf{m}_i^{(\alpha)} = \mathbf{F}^{e-T} \mathbf{m}_0^{(\alpha)} \quad (5)$$

と表される。

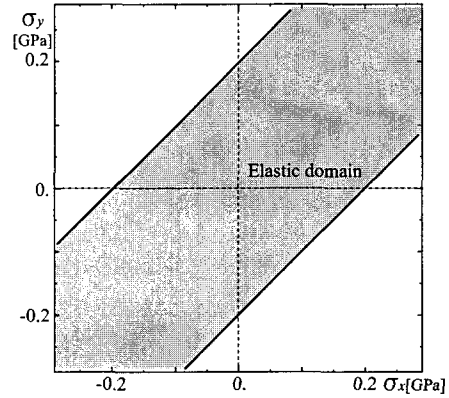
速度非依存の構成モデルではすべり系 α の降伏関数は Kirchhoff 応力 $\boldsymbol{\tau}$ 、すべり方向ベクトル $\mathbf{s}_i^{(\alpha)}$ 、すべり面の法線ベクトル $\mathbf{m}_i^{(\alpha)}$ を用いて次のように定義できる。

$$\phi^{(\alpha)} = \|\mathbf{s}_i^{(\alpha)} \cdot (\boldsymbol{\tau} \mathbf{m}_i^{(\alpha)})\| - \tau_Y^{(\alpha)} + q^{(\alpha)} \quad (6)$$

$$= \|\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}\| - \tau_Y^{(\alpha)} + q^{(\alpha)} \leq 0 \quad (7)$$



(a) すべり系



(b) 降伏面

図-1 2次元すべり系モデル

ここに、 $\tau^{(\alpha)}$ はすべり方向への分解せん断応力であり、 $\tau_Y^{(\alpha)}$ は降伏応力である。また、 $q^{(\alpha)}$ は以下のような硬化則で与えられる。

$$q^{(\alpha)} = - \sum_{\beta=1}^{n_{\text{slip}}} h_{\alpha\beta} \xi^{(\beta)} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, n_{\text{slip}}) \quad (8)$$

ここで、 $\xi^{(\alpha)}$ は塑性履歴パラメータ (すべり系 α のすべり量) であり、 $h_{\alpha\beta}$ は硬化定数で自己硬化 ($\alpha = \beta$)、潜在硬化 ($\alpha \neq \beta$) の2種類を考える。この硬化則により、すべり系は互いに従属関係にある。

3. 異方性の評価方法と単結晶の2次元モデル

3.1 材料のマクロ応答評価法

(1) 2次元すべり系モデル

本論文では、計算の簡略化のため2次元解析を行うが、この場合、現実の結晶構造のすべり系では平面の仮定を満足しない。そこで、一般にすべり方向ベクトル、すべり面の法線ベクトルの両者が同一平面内に存在する図-1(a)のような2次元すべり系が用いられる。図-1(b)に示すように、2次元すべり系を用いた場合、面外への塑性変形が生じないため、面内等方応力では塑性状態とならず、降伏面は常に直線状となる。これ

表-1 ミクロスケールの材料定数

弾性定数	E [GPa]	200
ポアソン比	ν	0.3
降伏応力	$\tau_Y^{(\alpha)}$ [GPa]	0.1
自己硬化定数	$h_{\alpha\beta} (\alpha = \beta)$ [GPa]	1.0
潜在硬化定数	$h_{\alpha\beta} (\alpha \neq \beta)$ [GPa]	1.5

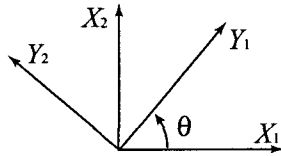


図-2 スケール間の方向を定義する変数

が2次元解析を行うにあたり、Misesの降伏条件のような一般的な金属塑性構成モデルと単結晶の構成モデルで大きく異なる点であり、数値解析上の注意が必要である。

本論文で採用する図-1(a)のすべり系は45°ごとに4組のすべり方向ベクトルを想定したものである。

(2) スケール間の座標変換変数

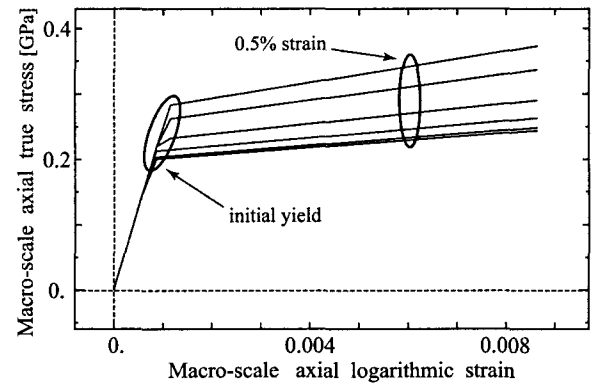
均質化法に基づくマルチスケールモデリングの性質から図-2に示すようにマクロ座標系 X_1, X_2 とミクロ座標系 Y_1, Y_2 を変数 θ で関連付ける。変数 θ と想定された多結晶金属のミクロ構造から得られるマクロ応答との関係はミクロスケールに想定された材料の変形方向による応答の違い、すなわち材料の異方性を意味する。

3.2 2次元すべり系モデルの異方性

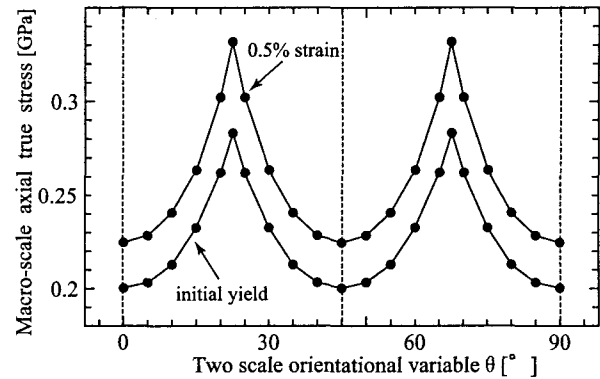
図-1のすべり系で塑性特性が表現できる単結晶をミクロスケールに想定し、マクロスケールに一軸引張変形を与える。ここで材料定数は表-1を用いた。本研究では単結晶の異方性は塑性特性にのみ現れ、弾性状態では等方な挙動を示すと仮定した。この数値解析により得られたマクロ応答は図-3(a)のように θ に応じて値が大きく変化し、大きな異方性を有する。マクロ応答の代表値を

- 初期降伏応力：ミクロスケール内のいずれかの応力評価点が塑性状態になるときのマクロ応力値
- 0.5%ひずみ応力：軸ひずみ0.5%時のマクロ応力値と定義し、変数 θ の関係を示すと図-3(b)のようになる。この図から、ここで採用したすべり系の応答には45°周期性が存在することがわかる。このとき、塑性状態となるすべり系を確認すると最も応力が高い $\theta = 22.5^\circ, 67.5^\circ$ 付近では想定した4つの全てのすべり系が同時に塑性状態となっており、他の区域では直交する2つのすべり系が塑性状態となっている。

次節の数値解析では、ここで定義したマクロ応答の代表値を用いて変数 θ に関する感度を調べるが、多結



(a) 応力-ひずみ関係



(b) 異方性

図-3 2次元単結晶モデル

晶体では単結晶よりも大きな異方性が生じることはないと考えられることから図-3(b)は次節の数値解析において材料の異方性を評価する基準とする。

4. 数値解析

本研究では多結晶金属の非均質性を結晶粒の塑性特性の違いのみで定義する。これにより、ミクロスケールでは均質な等方弾性体から非均質な弾塑性体へという過程を経て変形が生じる。塑性変形は粒界面部を中心に局所的に進展し、塑性変形は結晶粒内でも分布する¹⁰⁾。このことから結晶粒の形状により、ミクロスケールでの変形状態が変化すると考えられ、マクロ応答も影響を受けると考えられる。

ここではミクロスケールの幾何形状の影響を調べるためにいくつかのミクロ構造モデルを用いて数値解析を行う。

4.1 多結晶モデルの応答評価

(1) 解析モデル

多結晶金属のミクロスケールの非均質性を36個の結晶粒で代表体積要素とみなせるものとして図-4の4つのモデルを用いる。ここでは、代表体積内のすべての結晶粒がほぼ同じ大きさとなるようにアイソパラメトリック四辺形一次要素を用いて有限要素モデルを作成

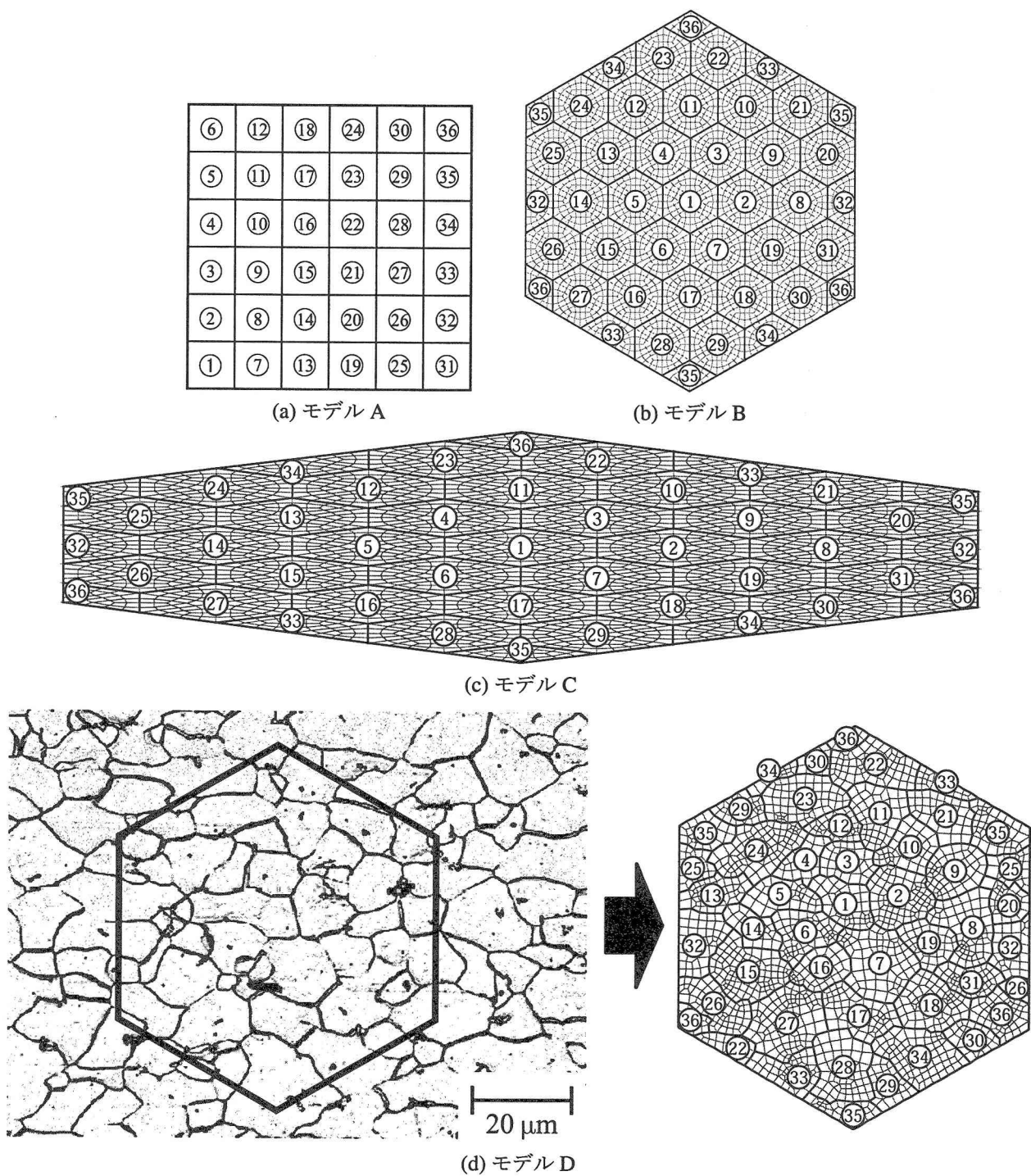


図-4 2次元多結晶モデル

する。また、結晶粒界は特別にモデル化しない。すなわち、結晶粒内で塑性変形が卓越する一般的な結晶粒径の多結晶金属が解析対象である。

- モデル A: 結晶粒を有限要素ひとつで表したモデルで結晶粒内部の非均質変形がほとんど考慮されない。
- モデル B: 各結晶粒を同形状同サイズの正六角形でモデル化したもので、結晶粒内部は72個の四角形要素で要素分割され、非均質変形を許容する。
- モデル C: モデル B を扁平な形状にしたモデルで

ある。圧延加工など特定の方向に大きな変形を受けた場合、マイクロ組織も扁平な形状となることが考えられ、このモデルはそういった結晶粒形状の影響を調べることを目的とする。

- モデル D: SEM 画像から作成したモデルである。このモデルは図-5 のような面積分布を有し、結晶粒の面積分布にあまり偏りが無いようにモデルを作成した。ここで、面積分布の横軸には結晶粒の面積 a とマイクロモデル全領域を 36 分割した面積 a_0 から算出した代表長さ $r = \sqrt{a/a_0}$ を用いた。同形

Grain number	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Orientation [°]	91.0	68.1	112.7	12.3	57.5	163.3	91.4	124.6	5.8	157.9	109.1	71.1
Grain number	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
Orientation [°]	167.2	107.4	144.9	154.2	98.1	144.0	33.4	42.0	114.3	37.8	154.3	51.5
Grain number	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
Orientation [°]	154.5	10.1	18.4	119.8	126.2	155.4	49.4	102.7	11.0	96.6	5.0	173.5

表-2 結晶方位

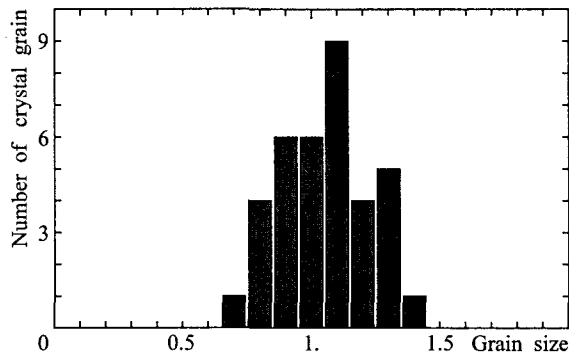


図-5 モデル D の面積分布

状同サイズの結晶粒から構成されているモデル B、モデル C に対して、このモデルでは現実の複雑な粒界の幾何形状の構造の影響を調査することを目的とする。

全てのモデルに関して、向き合う辺同士が周期性を持ち、各結晶粒の特性は表-1 の材料定数と乱数により発生させた結晶方位表-2 で与えられるものとする。

(2) マクロ応答

各モデルの応力を図-6 に示す。図中の点線は単結晶の応答である。

図-6(a) の応力-ひずみ関係からモデル A とその他の応答に違いが見られる。モデル A 以外の応答はほぼ同じ応答となる。

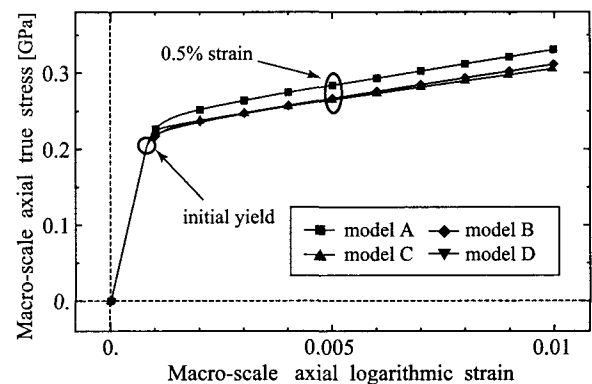
θ とマクロ応答の代表値をまとめた図-6(b) から初期降伏応力は全てのモデルにおいて単結晶の応答の最小値付近になる。これは初期降伏応力に関して方向依存性がないことを意味し、表-2 で与えた結晶方位がランダムに分布していることを示している。

0.5% ひずみ時の応力は単結晶の最大値と最小値の間付近になる。この指標において、結晶粒内の変形を許容するモデルではほぼ同じ応答となっているが、これを許容しないモデル A では他のモデルに比べて応力値が高く現れる。

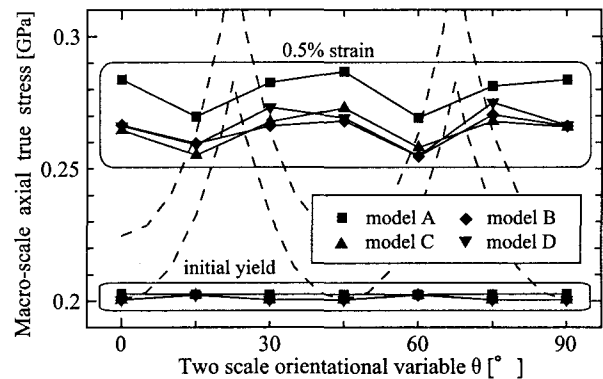
また、それぞれのモデルにおいて単結晶ほど明確ではないが 45° の周期が見られ、単結晶の異方性が残っていることを確認できる。

(3) ミクロスケールの変形状態

各モデルに関して $\theta = 0^\circ, 60^\circ$ のひずみ 1.0% の時の相当塑性ひずみ分布を図-7 に示す。相当塑性ひずみは



(a) $\theta = 0^\circ$ の応力-ひずみ関係



(d) 変数 θ とマクロ応答の関係

図-6 多結晶モデルのマクロ応答

応力評価点に想定される全すべり系の塑性量の合計として $\varepsilon^p = \sum_{\alpha=1}^{n_{slip}} \xi^{(\alpha)}$ と定義する。ここで、 $\theta = 0^\circ$ は 0.5% ひずみ時にマクロ応力が高く現れたケースであり、逆に $\theta = 60^\circ$ は低く現れたケースである。

結晶粒内の変形を許容しないモデル A では塑性状態となった粒の変形が周囲の粒に直接影響を与えるため、塑性変形が全体に伝播しやすい。これに対して、結晶粒内変形を考慮した他のモデルでは変形特性の違う結晶粒が重なり合う粒界付近において変位の連続性を満足するように変形が生じるため、塑性ひずみが集中している。また、モデル A とモデル D では弾性状態のままの要素が残っているのに対して、モデル C では全要素が塑性状態となっていることを確認した。これは扁平な結晶粒形状であることにより、図の縦方向に拘束効果が高く、モデル A と同様に結晶粒間作用が大きく現れた結果である。

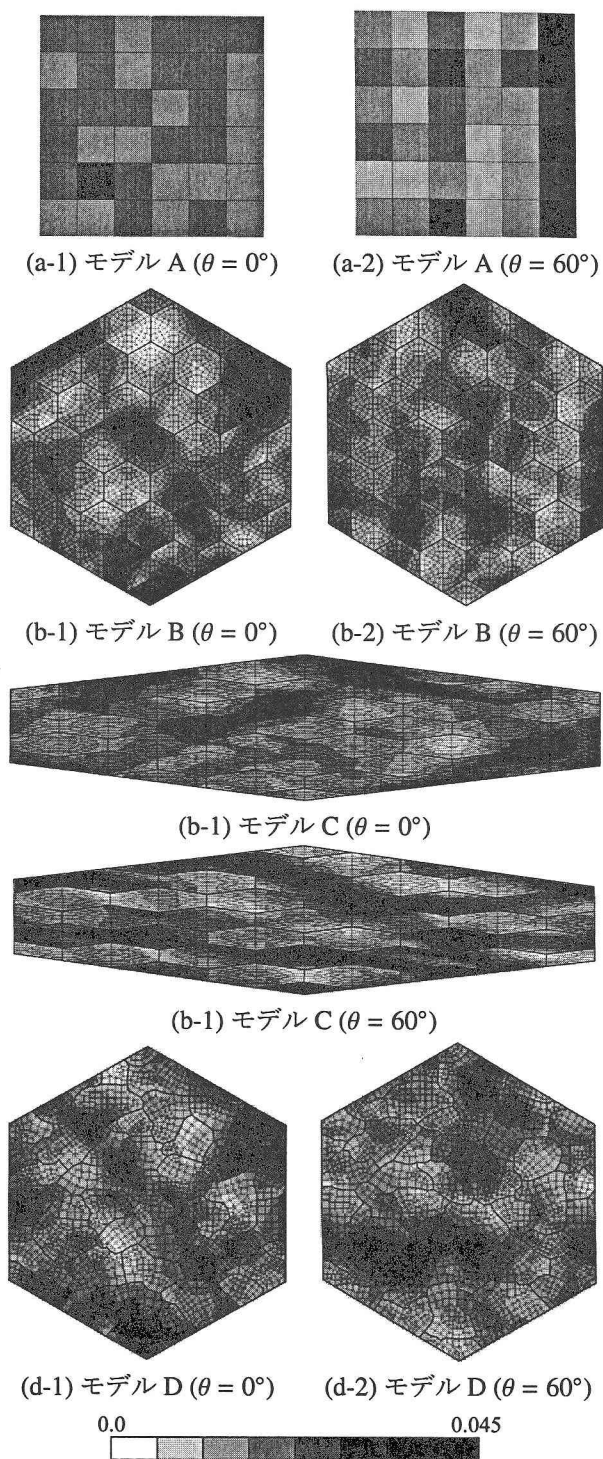


図-7 ひずみ 1.0% 時の相当塑性ひずみ

(4) まとめ

以上をまとめると結晶粒内の変形を考慮しない場合、結晶粒間の作用は隣接の粒を越えて広い範囲に強く働いてしまう。結晶粒径に大差のない多結晶金属のミクロな幾何構造を想定し、結晶粒内の変形を考慮した場合、その幾何構造の違いにより、ミクロスケールに見られる非均質変形状態はそれぞれ異なるが、領域全体を平均化して得られるマクロ応答としてはほとんど同じものが得られる。

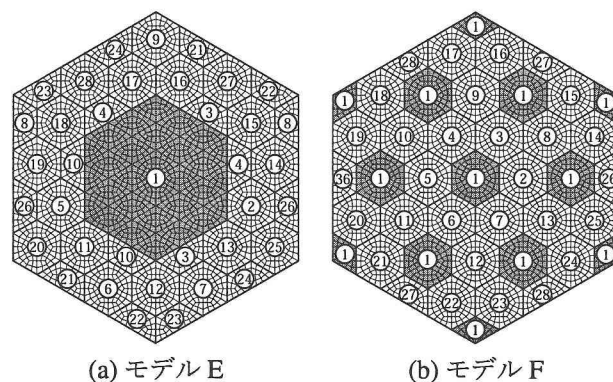


図-8 面積不均一モデル

したがって、結晶粒間の干渉作用は、ミクロスケールにおける塑性変形状態に何らかの影響を及ぼすが、結晶粒内の非均質変形が十分に生じ得ると仮定すれば、マクロ応答を支配する要因ではないと言える。

4.2 不均一な多結晶体の応答評価

モデル A-D はそれぞれほぼ同じ面積を有する結晶粒から構成されていたが、次に面積が不均一な場合を考える。

(1) 解析モデル

代表長さ、すなわち結晶粒径が不均一な多結晶金属のミクロスケールモデルとして図-8 を想定する。

- モデル E: 同サイズの 27 個の結晶粒とその代表長さ 3 倍 (面積 9 倍) のひとつの結晶粒から構成される。
- モデル F: 同サイズの結晶粒からなるが、モデル E の大きな結晶粒がモデル全体に接しないように分布する。

各結晶粒の材料定数は表-1 で与え、結晶方位は表-2 に対応する。

(2) マクロ応答とミクロ変形状態

$\theta = 0^\circ$ のマクロ応答を図-9 に示す。両者はほぼ同じ応答である。ミクロスケールにおける変形状態は図-10 であり、モデル F とモデル E は一見、全く異なる変形状態である。この場合、モデル F に対してモデル E では大きな結晶粒の拘束作用が大きく、局所的に大きな塑性変形が生じ難い。しかし、前節で指摘したようにこの粒間作用は粒内の変形状態を支配してはいるが、マクロ応答にはほとんど影響を与えない。すなわち、結晶粒内の非均質変形を許容した場合、粒間作用のマクロ応答への影響は消え、マクロ応答はミクロスケール内に想定された結晶方位の塑性特性によって決まると結論付けられる。

なお、図-8 では結晶方位 1 の面積が多いモデルとなっているが、他の結晶方位に変えたとしてもマクロ応答に差が生じないことを確認している。

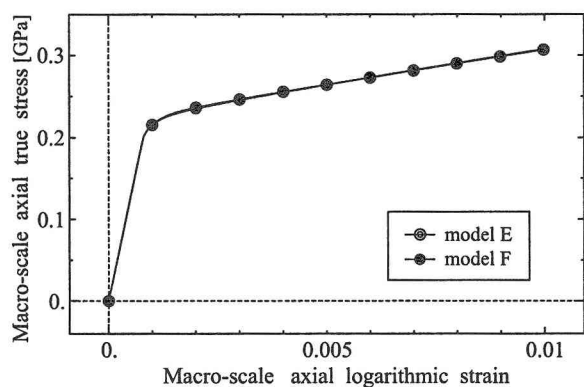


図-9 面積不均一モデルのマクロ応答 ($\theta = 0^\circ$)

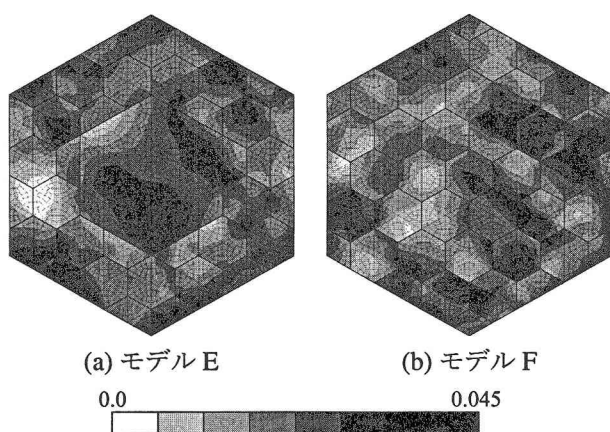


図-10 面積不均一モデルの相当塑性ひずみ分布

5. 結論

本研究では、多結晶金属の均質化法に基づくマルチスケールモデリング解析手法を用いて、結晶粒の塑性異方性に着目した多結晶金属のミクロスケールにおける結晶粒間および粒内の非均質変形とマクロ応答の関係、ミクロスケールでの結晶粒の幾何学的特性の影響に関する数値解析を行った。これにより、以下の知見が得られた。

- 結晶粒間の干渉作用は結晶粒内の変形を考慮しなければ、強く働き過ぎる。
- 結晶粒の変形特性の違いにより粒界部で塑性変形が集中することから、ミクロな幾何構造が異なると塑性ひずみの分布は全く異なるものとなる。
- ミクロスケールにおける非均質変形が異なっても領域内に想定されている結晶方位がランダムに与えられているならば領域全体の平均量であるマクロ応答は同じになる。

という知見が得られた。したがって、結晶粒間の干渉作用はミクロスケールにおける塑性変形状態を支配するものであるが、結晶粒内の非均質変形を十分に考慮すれば、マクロ応答への影響は小さいといえる。

近年、転位論¹³⁾や分子動力学¹⁴⁾に基づき、さらにミクロな階層から多結晶金属のマルチスケールモデルを構築しようとする研究が進められている。ミクロなスケールとの連成を考慮しようというこれらの研究では結晶粒の非弾性変形状態が興味の対象となり、その場合には結晶粒形状の影響は無視できないと考えられる。

参考文献

- 1) Taylor, G. I.: Plastic Strain in Metals, *J. Inst. Metals*, Vol. 62, pp.307-324, 1938.
- 2) Hill, R.: Continuum micro-mechanics of elasto-plastic polycrystals, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 13, pp.89-101, 1965.
- 3) Kalidindi, S. R., Bronkhorst, C. and Anand, A. L.: Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of metals, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 40, pp.537-569, 1992.
- 4) Iwakuma, T. and Nemat-Nasser, S.: Finite elastic-plastic deformation of polycrystalline metals, *Proc. R. Soc. Lond.*, Vol.A394, pp.87-119, 1984.
- 5) Asaro, R. J.: Crystal plasticity, *J. Appl. Mech*, Vol.50, pp.921-934, 1983.
- 6) Nakamachi, E., Xie, C. L. and Harimoto, M.: Drawability assessment of BCC steel sheet by using elastic/crystalline viscoplastic finite element analyses, *Int. J. Mech. Sci.*, Vol.43, pp.631-652, 2001.
- 7) Harren, S. V. and Asaro, R. J.: Nonuniform deformations in polycrystals and aspects of the validity of the Taylor model, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 37, pp. 191-232, 1989.
- 8) Becher, R.: Analysis of texture evolution in channel die compression-I. Effects of grain interaction, *Acta metall. mater.*, Vol. 39, pp. 1211-1230, 1991.
- 9) Terada, K., Saiki, I., Matsui, K. and Yamakawa, Y.: Two-scale kinematics and linearization for simultaneous two-scale analysis of periodic heterogeneous solids at finite strain, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.192, pp.3531-3563, 2003.
- 10) 渡邊育夢, 寺田賢二郎, 松井和己, 秋山雅義, 根石豊: 多結晶金属のマルチスケール解析, 応用力学論文集, 6, (2003), 239-246.
- 11) Allaire, G.: Homogenization and two-scale convergence, *SIAM J. Math. Anal.*, Vol.23, pp.1482-1518, 1992.
- 12) Lee, E. H.: Elastic-plastic deformation at finite strains, *J. Appl. Mech*, Vol.36, pp.1-6, 1969.
- 13) Shizawa, K., Kikuchi, K. and Zbib, H. M.: A strain-gradient thermodynamic theory of plasticity based on dislocation density and incompatibility tensors, *Mater. Sci. Eng. A*, Vol.309-310, pp.416-419, 2001.
- 14) Horstemeyer, M. F., Baskes, M. I., Parantil, V. C., Philliber, J. and Vonderheide, S.: A multiscale analysis of fixed-end simple shear using molecular dynamics, crystal plasticity, and a macroscopic internal state variable theory, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol.11, pp.265-286, 2003.

(2004 年 4 月 16 日 受付)