# 3次元多結晶モデルによる結晶粒界における局所応力評価

Evaluation of Local Stress at Grain Boundaries by Three-Dimensional Polycrystalline Model

釜谷 昌幸 (Masayuki Kamaya) \*1 北村 隆行 (Takayuki Kitamura) \*2

要約 応力腐食割れの発生を予測する上で、き裂発生の応力依存性を明らかにすることは重要である. 粒界応力腐食割れにおいて、き裂発生は材料表面において結晶粒界に作用する引張応力(粒界垂直応力)とせん断応力(粒界せん断応力)が駆動力となっている. しかし、材料表面では結晶粒の弾性率の異方性に起因する変形拘束の影響により、局所的な応力分布が不均一となる. また、結晶粒界では荷重方向に対する傾き(粒界傾斜)も粒界垂直応力や粒界せん断応力に影響を及ぼす. したがって、材料表面でのき裂発生駆動力は複雑に変化し、その分布特性は明らかになっていない. そこで本研究では、モンテカルロ法により100個の結晶粒で構成される多結晶体モデルを作成し、弾性有限要素解析により一様引張り条件下での多結晶体表面の応力分布を解析した. その結果、多結晶表面では不均一な局所応力分布が発生し、粒界垂直応力および粒界せん断応力の最大値が一様均質体中での最大値の1.6倍以上になる場合もあることが明らかとなった. また、それらの応力が粒界傾斜に依存することも明らかになった. そこで、粒界垂直応力と粒界せん断応力の統計的な推定のため、これらの応力の分布特性を定量化した.

キーワード 多結晶材料,き裂発生,結晶粒界,応力腐食割れ,垂直応力,せん断応力,有限要素法

In order to predict the initiation of stress corrosion cracking, the dependency of Abstract stress on the initiation behavior has to be clarified. In the case of intergranular stress corrosion cracking, the tensile normal stress acting on the grain boundary (normal GB stress) and shear stress acting on the grain boundary (shear GB stress) at the surface play important roles as driving force of the crack initiation. However, the local stress in a polycrystalline body is inhomogeneous which stems from the anisotropy of elasticity of each grain. Moreover, the inclination of grain boundary to the load axis (grain boundary inclination) affects on the normal GB stress and shear GB stress. Therefore, the local stress at the surface, which relates to the driving force for crack initiation, is complex and difficult to quantify. In this study, the stress at the surface was evaluated by elastic finite element method under a remote uniform tensile stress condition by using three-dimensional polycrystalline bodies consisting of 100 grains generated by a Monte Carlo method. It was revealed that the local stress on the polycrystalline body is inhomogeneous under uniform applied stress and the maximum normal GB stress and shear GB stress become more than 1.6 times of stress that is obtained under homogeneous and isotropic body. It was also shown that the stresses depend on the grain boundary inclination. Finally, the statistical parameters of the distributions of the normal GB stress and shear GB stress were identified for the statistical estimation of these stresses.

Keywords Polycrystalline material, Crack initiation, Grain boundary, Stress corrosion cracking, Normal stress, Shear stress, Finite element method

#### 1. 緒言

応力腐食割れ (Stress Corrosion Cracking, 以後 SCC) では、潜伏期間を経て微小なき裂が発生し、それが成長して検査等で発見されるような巨視的なき裂に至る(1)(2). ここで、材料や環境が不変ならば、き裂挙動は力学的な駆動力と材料の抵抗の関係で決まる. したがって、駆動力を定量化し、SCC 挙動と

の関係を経験的に明らかにすることによって、き裂成長や発生といった SCC 挙動を予測することが可能となる.

き裂成長については、き裂先端という応力特異場で発生する事象であることから、破壊力学に基づいた駆動力の定量化が必要となる。そして、応力拡大係数がき裂成長速度と相関関係にある、つまり成長の駆動力を代表するパラメータであることが経験的

<sup>\*1 (</sup>株)原子力安全システム研究所 技術システム研究所

<sup>\*2</sup> 京都大学大学院工学研究科

に示されている<sup>(3)</sup>. 応力拡大係数はき裂形状, 応力分布そして境界条件により決定されるので, き裂の成長に伴う局所的な応力(応力拡大係数)の変化を考慮することで, き裂成長を予測することができる. そして, 実際の原子力発電プラントにおいても, この応力拡大係数と成長速度の相関関係を用いたき裂成長予測手法が健全性評価に適用されている<sup>(4)(5)</sup>.

一方, 局所破壊現象であるき裂発生については, 材料表面での局所応力分布から発生の駆動力を評価 することになる. しかし、き裂発生の対象となるよ うな結晶粒サイズ相当の微視組織的レベルでは、結 晶粒の弾性率の異方性に起因する変形拘束の影響に より, 局所的な応力分布が不均一となる<sup>(6)~(8)</sup>. また, 結晶粒界に沿って発生する粒界き裂の場合は、き裂 の発生する結晶粒界の荷重方向に対する傾き(以後, 粒界傾斜) も駆動力に影響を及ぼすことが考えられる. 実際に、加圧水型原子炉1次系環境下におけるニッ ケル合金の SCC においては、き裂の発生した粒界傾 斜の分布より、結晶粒界に垂直な応力成分(以後、粒 界垂直応力) がき裂発生の駆動力と相関のあることが 考察されている(9). このような微視組織に依存する局 所的な応力分布の不均一性は、それらが平均化され るような大きなき裂の成長駆動力 (応力拡大係数)を 算出する場合には無視することができる<sup>(10) (11)</sup>. しか し、微小なき裂の発生駆動力は、巨視的には均一で 一様な応力が負荷された場合でも,変形拘束と結晶 粒の幾何学的な形状に依存して変化することになる. また、き裂発生においては発生箇所が必ずしも限定 されず、実機においては多数のき裂が密集して発生 することがしばしば見受けられる、このことも、き 裂発生の予測を困難にする要因となっている. そし て、これまでき裂発生を予測するための確立された 手法は見当たらない(12)(13). き裂発生を予測するため には、まずき裂の発生する表面上における局所的な 応力分布を明らかにし、発生駆動力を定量化する必 要がある.

局所的な応力分布を解析するには、有限要素解析などの数値的なアプローチが有効な手段となる(6)(14)~(19). Sumigawaらは、37個の結晶粒で構成された銅平板の3次元的な結晶粒形状と結晶方位を実験的に同定し、それに基づいた有限要素モデルを作成することで、結晶すべり方向での分解せん断応力を解析した(20). そして、その材料を用いた高サイクル疲労試験を実施し、き裂発生の前兆である固執すべり帯の発生位置と、有限要素解析から得られる固執すべり帯の発

生駆動力である結晶すべり方向での分解せん断応力が大きくなる部分が一致することを確認した.このことは、結晶粒形状と方位を忠実に再現した有限要素モデルを用いることで、多結晶体表面付近の不均一応力分布を求めることができることを示している.しかし、このような有限要素解析を現実のプラントや実用材料を用いた試験片に対して実施することと現実的でない.また、SCCなどの発生駆動力となる結晶粒界での応力に関して、局所的な分布特性はこれまで明らかにされていない.そこで本研究では、結晶粒界における局所応力分布の統計的な傾向を明らかにすることを試みる.

本研究では、モンテカル口法により100個の結晶 粒で構成されるニッケル合金を模擬した多結晶モデルを作成する。そして、一様引張条件下での弾性有限要素解析から多結晶体表面の応力分布を詳細に解析する。対象とする応力は、粒界き裂発生に寄与すると考えられる、材料表面における結晶粒界の法線方向成分の引張応力(粒界垂直応力)と、粒界面のせん断応力の最大値(粒界せん断応力)とする。そして、これらの応力の微視組織レベルでの局所応力分布を考察する。

## 2. 解析方法

#### 2.1 **解析モデル**

解析対象は、図1に示す一様な引張応力S。の作用する長さ2L、幅L、厚さLの直方体とする.この直方体中に以下の手順で多結晶粒を作成する<sup>(21)</sup>.

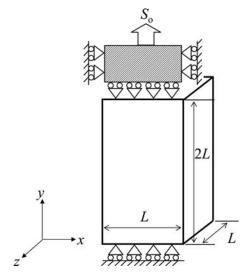


図1 解析対象の形状と境界条件

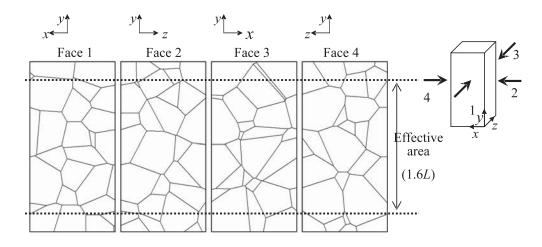


図2 作成された多結晶体構造の例

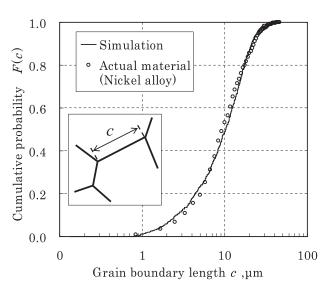


図3 粒界長さの分布 (ニッケル合金、L=60 µm)

直方体内部に N<sub>r</sub> 個の核をランダムに配置する. 結晶粒はそれぞれの核から一定の速度で等方的 に成長させる.

2つの結晶粒がぶつかった境界を結晶粒界とし、その方向への結晶粒の成長を止める.

直方体内部が全て結晶粒で埋まるまで結晶粒を 成長させる。

本研究では、核の個数  $N_r = 100$  とする、つまり、直方体は 100 個の結晶粒で構成される、図 2 に作成した多結晶モデルの一例を示す、核を配置する乱数を変えることで 15 の多結晶体を作成し、それらの表面で観察される結晶粒界 (ただし、直方体のコーナー部にかかる結晶粒界を除く) の長さの分布を、ニッケル合

金の断面観察結果とともに図3に示す。ここで、L =  $60 \mu$ mとしている。両者はよく一致しており、本手法により多結晶体形状がよく模擬できることが分かる。なお、それぞれの結晶粒方位は、一様乱数を用いてランダムに設定する。

#### 2.2 有限要素解析

作成された15の多結晶体について有限要素分割を 実施する.結晶粒構造は3次元的に入り組んでおり 要素分割には多大な労力が必要であるが,本研究で は専用プログラムを使用することで比較的に容易に 要素分割を実現した.このプログラムは有限要素法 のプリ・ポストアプリケーションPATRAN<sup>(22)</sup>にPCL (Patran Command Language) 言語を用いて作成したプログラムを組み込んだもので,多結晶体の3次元的 な結晶粒形状データから半自動的に有限要素分割を 実施することができる.4節点4面体要素を使用して, おおよそ400000要素で構成されるモデルを作成する. とくに,結晶粒界や粒界3重点近傍において,相対 的に小さい要素に分割するようにする.

各結晶粒の弾性率は、ニッケル単結晶の弾性率である $C_{11}=246.5$  GPa、 $C_{12}=147.3$  GPa、 $C_{44}=124.7$  GPa $^{(23)}$ とし、各結晶粒の方位を考慮した弾性解析を行う、つまり、実際の材料と同様に、それぞれの結晶粒は弾性変形の異方性を有することになる、解析には汎用有限要素解析コード ABAQUS Version  $6.5^{(24)}$ を用いる。

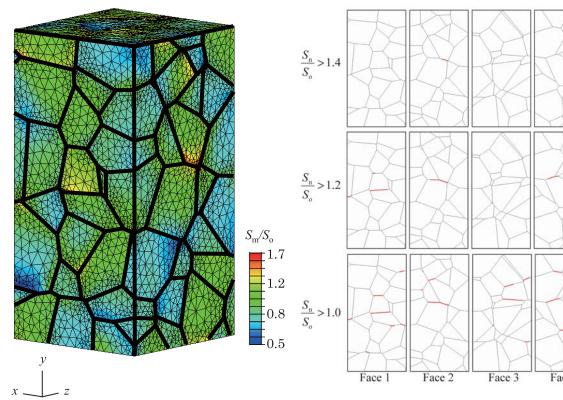


図4 多結晶体表面におけるミーゼス相当応力分布

# 3. 解析結果および考察

#### 

図4は、多結体表面のミーゼス相当応力 Smの分布を示す. 多結晶体の上下端に一様な応力 S。が負荷されているにもかかわらず、多結晶体表面の応力分布は不均一で、Sm/S。がおおよそ 0.5 から 1.7 の範囲でばらついている. 図では相対的に応力が小さい部分を青色で示しているが、青色の部分が特定の結晶粒に集中している傾向が見られる. つまり、応力の分布が結晶粒界近傍で不連続に変化し、結晶粒界は応力の大小が分かれている. また、局所的には応力の大きい領域と小さい領域は、結晶粒界または粒界3重点近傍で出現しやすい傾向が見られる. このと考えられる.

図4と同じ多結晶体における粒界垂直応力および 粒界せん断応力の大きい粒界を図5および図6にそれ ぞれ示す.図では、応力値がしきい値より大きな箇

図5 多結晶体表面での結晶粒界と粒界垂直応力の分布

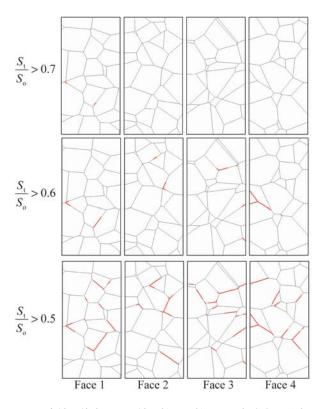


図6 多結晶体表面での結晶粒界と粒界せん断応力の分布

所を赤色の太線で示している. 粒界垂直応力は, 荷 重方向に対する粒界面の傾きの影響を大きく受け, 荷重方向に垂直な粒界で大きくなる傾向にある. 結 晶粒に異方性がない均質一様体では粒界垂直応力は S<sub>n</sub>/S<sub>o</sub> = 1となるはずであるが、本モデルでは最大で S<sub>n</sub>/S<sub>o</sub> = 1.60 となる粒界が存在する. また, 同一粒 界内では粒界3重点付近で粒界垂直応力が大きくな る傾向が見られる.一方, 粒界せん断応力は傾斜し た粒界で大きくなる傾向にあるが、均質一様体での 値 S<sub>t</sub>/S<sub>o</sub> = 0.5 より大きな最大 S<sub>t</sub>/S<sub>o</sub> = 0.86 となる粒 界が出現すること、粒界3重点付近で大きくなる傾 向は粒界垂直応力と同様である. 粒界垂直応力と粒 界せん断応力の分布の比較では、応力が大きくなる 結晶粒界、またはその粒界を構成する結晶粒が共通 している傾向が見られる。また、図4では主にFace1 と Face 2 のミーゼス相当応力分布を表示しているが、 近傍の応力が大きくなる結晶粒界が、粒界垂直応力 と粒界せん断応力の大きな結晶粒界と対応する傾向 が見られる.

結晶粒毎に、それぞれの結晶粒界全長に沿った応力の平均、平均粒界垂直応力 S<sub>na</sub> および平均粒界せん断応力 S<sub>ta</sub> を下式により計算する.

$$S_{\rm na} = \frac{\sum_{i} S_{\rm n}^{(i)} l_{i}}{\sum_{i} l_{i}} \tag{1}$$

$$S_{ta} = \frac{\sum_{i} S_{t}^{(i)} l_{i}}{\sum_{i} l_{i}}$$
 (2)

ここで、 $S_n^{(i)}$ 、 $S_t^{(i)}$ と $I_i$  は表面における粒界に沿った $I_i$  番目の要素の粒界垂直応力、粒界せん断応力と粒界に沿った長さを示す。そして、 $I_i$ 5 の多結晶体から得られた平均粒界垂直応力および平均粒界せん断応力

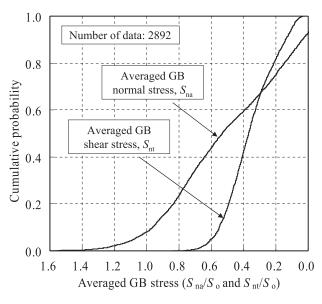


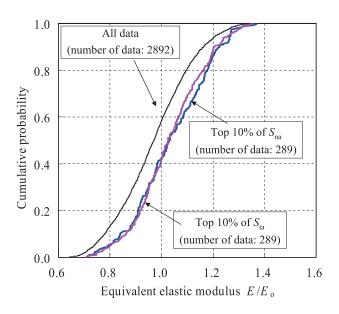
図7 平均粒界垂直応力および粒界せん断応力の累積確率分布

の累積分布を図7に示す.この図を含む以後の結果では、荷重が負荷される端部の影響を除外するために、荷重方向に沿った上下それぞれ0.2Lの範囲(図2で Effective area と表示した範囲)以外にかかる粒界の結果は除外している.得られた値の最大値はそれぞれ $S_{na}/S_o = 1.69$  および $S_{ta}/S_o = 0.78$ であった.値はほぼ一様に分布しているが、応力値の大きい方から10%の傾きが緩やか、つまり分布が疎になっている.

#### 3.2 **結晶方位の影響**

変形異方性に起因する拘束応力は、隣接する結晶 粒との相対的な弾性定数の関係が大きく影響を及ぼ すことが指摘されている(11). そこで、結晶粒界を構 成する2つの結晶粒の荷重方向の等価弾性率を算出 し、その平均値の累積分布を図8に示した. 荷重方 向の等価弾性率がそれぞれの結晶粒 (結晶粒界)で異 なっていることが分かる. ここで、弾性率は15の多 結晶体端部の変位と荷重から算出される弾性率の平 均値(E。= 214.0 GPaで基準化している. バルクの 弾性率と同じになるE/E。= 1で累積割合が0.5になっ ていない原因として、結晶粒サイズ分布に起因する ばらつきや、結晶粒個々の特性とその集合体の特性 の違いなどが考えられる.

図には平均粒界垂直応力および平均粒界せん断応力値の大きい方から10%の結晶粒界のみを対象にした等価弾性率の累積分布も示した。相対的に大きな



粒界垂直応力または粒界せん断応力となる結晶粒界を構成する結晶粒では等価弾性率が大きい傾向にある.このことは、結晶粒の弾性異方性による変形拘束が、大きな粒界垂直応力および粒界せん断応力の発生に寄与していることを示唆している.つまり、多結晶体中では隣接結晶粒同士の拘束のため、弾性率が異なっても粒界での変位が同じとなり、荷重方向の応力を考えた場合、等価弾性率の大きな結晶粒が相対的に大きな荷重を分担することになる.

# 3.3 粒界傾斜の影響

図9は、図4で示したモデルから算出される荷重方向に対する粒界面の角度(粒界傾斜)p(図13参照)と粒界垂直応力および粒界せん断応力の関係を示す。図中の白丸は(1)および(2)式から算出した平均粒

2.0  $S_{\rm n}/S_{\rm o}$ 1.5 Averaged normal G.B. stress,  $=\cos^2 p$ 1.0 0.5 Number of data: 203 -0.5 0.0 0.2 0.4 0.6 1.0 0.8 G.B. inclination,  $\cos^2 p$ (a) 粒界垂直応力 1.0  $S_{t}/S_{o}$ 0.8 Averaged shear G.B. stress, 0.6 0.4 0.2 0.0  $0.5\sin 2p$ Number of data: 203 -0.2 0.2 0.00.4 0.6 0.8 1.0 G.B. inclination,  $\cos^2 p$ 

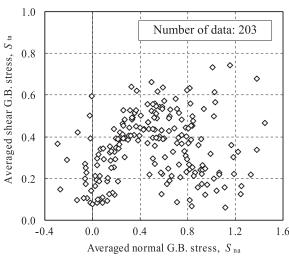
図9 結晶粒界での応力と粒界傾斜の関係

(b) 粒界せん断応力

界垂直応力 S<sub>na</sub> および平均粒界せん断応力 S<sub>ta</sub> を示し、エラーバーはその粒界に沿った要素での最大と最小の範囲を示している.図中に太線で示した直線は、次式で与えられる均質一様体中での応力と粒界傾斜の関係を示している.

$$S_{na} = S_o \cos^2 p$$
 (均質一樣体中) (3)

粒界での応力は粒界傾斜の影響を大きく受け、均質一様体中での値とよい相関を示すものの、そこから 0.5 S。以上逸脱する場合も見られるなど、ばらつきも見られる。また、同一結晶粒界内でも値は一定でなく、大きなばらつきが存在する場合もある。図 4、5 および 6 でも示したように、粒界 3 重点近傍では応力が相対的に大きく (小さく) なる傾向が見られるなど、同一粒界内でも応力は一様でない。



(a) 平均粒界せん断応力と平均粒界垂直応力の関係

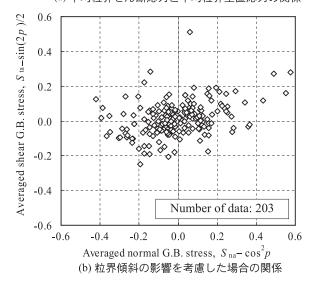


図 10 粒界垂直応力と粒界せん断応力の関係

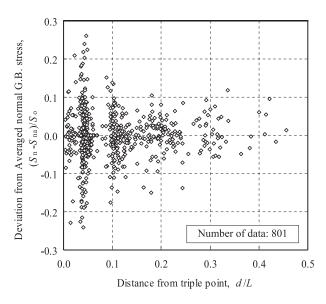


図11 粒界3重点からの距離と粒界垂直応力の関係

# 3.4 粒界垂直応力と粒界せん断応力の関係

同一結晶粒界における平均粒界垂直応力と平均粒界せん断応力の関係を図10(a)に示した.図10(b)には、図9で示した均質一様体中の応力からの偏差について、両応力の関係を示している.図10(b)では多少の相関が見られるものの、粒界垂直応力と粒界せん断応力に相関はほとんど見られない.図8でも示したように、応力の大きさが等価弾性率、つまり変形拘束に大きく影響を受ける場合、両者はよい相関を示す傾向にあるはずであるが、粒界傾斜など他の影響因子により明確な相関が現れないようである.

#### 3.5 **粒界**3**重点の影響**

同一粒界内での応力値の変化の要因を考察するため、粒界に沿った各要素の粒界垂直応力 S<sub>n</sub> とその粒界での平均値 S<sub>na</sub> の偏差 (S<sub>n</sub>-S<sub>na</sub>)と粒界 3 重点からの距離 d の関係を図 11 に示す・粒界 3 重点に近づくほど、粒界垂直応力のばらつきが大きくなっている。最大粒界垂直応力 S<sub>n</sub> も粒界 3 重点近傍で発生している・図は省略するが、粒界せん断応力も同様の関係が見られた・このことから、粒界 3 重点近傍ではき裂発生駆動力が大きく、き裂発生の起点となりやすいと言える・

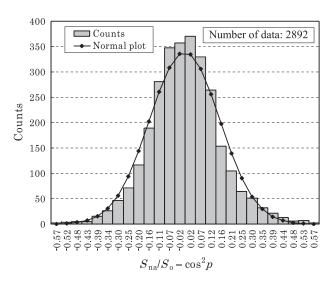


図12 平均粒界垂直応力の変化量(Sna/So-cos<sup>2</sup>p)の分布

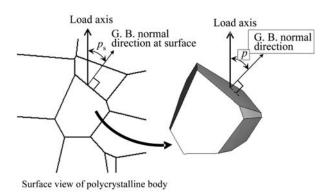


図13 結晶粒界の傾斜角度の定義 (p:粒界傾斜、p<sub>s</sub>:表面での粒界傾斜)

#### 3.6 統計的な傾向

これまでの結果から、粒界垂直応力、粒界せん断応力とも多結晶体中では大きくばらつき、その相関因子として等価弾性率、粒界傾斜、3重点からの距離などが示された。不均一な応力分布は、結晶粒の幾何学的な構造と結晶方位が同定できれば、本研究で用いた解析により推定することが可能であるが、実際の構造材料の3次元的な結晶粒構造や結晶方位を明らかにすることは容易でない。そこで、局所応力分布を統計的に推定する手段を考察する。これまでの検討結果より粒界垂直応力、粒界せん断応力は粒界傾斜pに大きく依存することが示された。そこで、(3)および(4)式からの逸脱量を対象に分布を定量化する。図12に粒界垂直応力の(3)式からの変化量(Sna/So-cos²p)の分布を示す。図から分布は正規分布に従うこと判断できる。粒界せん断応力につい

	$S_{\rm na}/S_{\rm o}$ - $\cos^2 p$		$S_{\rm ta}/S_{\rm o}$ -0.5 $\sin^2 p$	
	G. B. inclination	G. B. inclination at surface $p_s$	G. B. inclination	G. B. inclination at surface $p_s$
Number of data	2892	2892	2892	2892
Mean value	0.002	-0.062	0.013	0.057
Standard deviation	0.156	0.193	0.0922	0.138
Maximum value	0.768	0.753	0.510	0.733
Minimum value	-0.659	-0.864	-0.334	-0.372

表1 平均粒界垂直応力および平均粒界せん断応力の偏差の分布定数

ても、正規分布でよく近似できた.そこで、この分布の平均、標準偏差、そして最大、最小値を表 1 に示した.3 次元的な粒界傾斜 p は、材料の表面観察では必ずしも同定することが容易でないので、図 13 に示すように多結晶体表面での見かけ上の粒界傾斜  $p_s$  を定義し、 $p_s$  に対する分布定数も表 1 に示した.実際の応力値は、この分布に従う確率で(3) および(4) 式より逸脱していると仮定することで、統計的な推定が可能となる.

#### 4. 結論

多結晶体中の局所応力分布特性を検討するため実結晶粒構造を模擬した多結晶モデルを用いて、SCC のき裂発生駆動力と相関のある粒界垂直応力および粒界せん断応力の局所分布を評価し、以下の結果を得た.

- (1) 多結晶表面では不均一な局所応力分布が発生する. その結果, 粒界垂直応力および粒界せん断 応力はばらつき, その最大値は一様均質体中で の最大値の1.6倍以上になる場合もある.
- (2) 不均一応力分布は結晶粒の弾性率の異方性に起 因する. そのため、荷重方向の等価弾性率の大 きな結晶粒付近で大きな応力が発生する傾向が ある.
- (3) 粒界垂直応力および粒界せん断応力が粒界傾斜に大きく依存するが、同じ粒界内でも粒界3重点近傍で応力が大きくなるなど、ばらつきも見

られる.

(4) 粒界垂直応力と粒界せん断応力の統計的な分布 特性を明らかにした(表1). これにより、粒界 傾斜が分かれば、これらの応力を統計的に推定 できる.

## 対対

- (1) R. N. Parkins, "The application of stress corrosion crack growth kinetics to predicting lifetimes of structures", Corrosion Science, 29, pp.1019-1038 (1989).
- (2) M. Akashi and G. Nakayama, "Stress corrosion crack initiation process model for BWR plant materials", Proc. Plant Aging and Life Prediction of Corrodible Structures, Sapporo, Japan, pp.99-106(1995).
- (3) 例えば、M. O. Speidel and R. Magdowski, "Stress corrosion crack growth in alloy 600 exposed to PWR and BWR environments", Proc. CORROSION/2000, NACE, Orlando, No. 222 (2000).
- (4) ASME, "ASME Boiler and Pressure Vessel Code Section XI", New York, USA, (2004).
- (5) JSME, "Codes for Nuclear Power Generation Facilities: Rules of Fitness-for-Service for Nuclear Power Plants", Tokyo, Japan (2004).
- (6) K. Hashimoto, H. Margolin, "The role of elastic

- interaction stresses on the onset of slip in polycrystalline alpha brass II. Rationalization of slip behavior", Acta Metall., 31[5], pp.787-800 (1983).
- (7) C. S. Nichols, R. F. Cook, D. R. Clarke, D. A. Smith, "Alternative length scales for polycrystalline materials", Acta Metal Mater., 39, pp.1657-1665 (1991).
- (8) B. M. Schroeter, D. L. McDowell, "Measurement of deformation fields in polycrystalline OFHC copper", International Journal of Plasticity, 19, pp.1355-1376 (2003).
- (9) M. Kamaya, "Influence of grain boundaries on short crack growth behaviour if IGSCC", Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, 27, pp.513-521 (2004).
- (10) M. Kamaya, T. Kitamura, "Stress intensity factors of microstructurally small crack", International Journal of Fracture, 124, pp.201-213 (2003).
- (11) 釜谷昌幸, 北村隆行, "多結晶体中における微視 組織的微小表面き裂の応力拡大係数", 日本機械 学会論文集, A 72[715], pp.293-300 (2006).
- (12) M. Kamaya and T. Kitamura, "A simulation on growth of multiple small cracks under stress corrosion", International Journal of Fracture, Vol.130, pp.787-801 (2004).
- (13) 釜谷昌幸,春名匠, "高温水中304ステンレス鋼の応力腐食割れにおける「発生支配型成長」の観察と予測", INSS Journal, Vol.12, p.222 (2005).
- (14) R. L. Mullen, Y. Y. Ballarini, Y. Yin, A. H. Heuer, "Monte Carlo simulation of effective elastic constants of polycrystalline thin films", Acta mater., 45, pp.2247-2255 (1997).
- (15) A. C. Lewis, J. F. Bingert, D. J. Rowenhorst, A. Gupta, A. B. Geltmacher, G. Spanos, "Two-and three-dimensional microstructural characterization of a super-austenitic stainless steel", Materials Science and Engineering: A, 418[1-2] pp.11-18 (2005).
- (16) Y. Zhao, R. Tryon, "Automatic 3-D simulation and micro-stress distribution of polycrystalline metallic materials", Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 193, pp.3919-3934 (2004).
- (17) T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, D. Jeulin, "Determination of the size of the representative volume element for random composites:

- statistical and numerical approach", Int. J. Solids Struct., 40, pp.3647-3679 (2003).
- (18) E. Iesulauro, G. Heber, P. A. Wawrzynek, A. R. Ingraffea, "Modeling of 3 D metallic polycrystals and simulation of crack initiation", International Conference on Computational Engineering & Science, UNLV & UNR, paper no.135 (2002).
- (19) G. B. Sarma, B. Radhakrishnan, T. Zacharia, "Finite element simulations of cold deformation at the mesoscale", Computational Materials Science, 12, pp.105-123 (1998).
- (20) T. Sumigawa, T. Kitamura, K. Ohishi, "Slip behaviour near a grain boundary in hish-cycle fatigue of poly-crystal copper", Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, 27, pp.495-503 (2004).
- (21) T. Kitamura, N. Tada and R. Ohtani, "Evaluation of creep fatigue damage based on initiation and growth of small cracks", In: Behavior of defects at high temperatures. ESIS 15, Mechanical Engineering Publications, pp.47-69 (1993).
- (22) MSC. Patran 2004 r 2, MSC Software (2004).
- (23) 長島晋一, "集合組織", 丸善 (1984), p.262.
- (24) ABAQUS Inc., "ABAQUS/Standard User's Manual Ver. 6.5", (2005) ABAQUS Inc., USA.