



Научный обзор

DOI: 10.15593/perm.mech/2022.2.11

УДК 539.3

## ЭВОЛЮЦИЯ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ ПРИ ИНТЕНСИВНОМ ПЛАСТИЧЕСКОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ: МНОГОУРОВНЕВЫЕ МОДЕЛИ

П.В. Трусов, Т.В. Останина, А.И. Швейкин

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

### О СТАТЬЕ

Получена: 27 февраля 2022 г.

Одобрена: 29 марта 2022 г.

Принята к публикации:

04 июля 2022 г.

#### Ключевые слова:

многоуровневые конститутивные модели, физические теории упруго-вязкопластичности, изменение зеренной и субзеренной структуры поликристаллических металлов и сплавов.

### АННОТАЦИЯ

Хорошо известно, что эксплуатационные свойства изделий из металлов и сплавов определяются главным образом мезо- и микроструктурой последних. Структура материалов формируется и претерпевает существенные изменения в процессах изготовления деталей и конструкций методами термомеханической обработки. Важным параметром, определяющим физико-механические характеристики материалов, является зеренная структура (размер, форма, взаиморасположения зерен и включений различных фаз). Особое внимание в последние десятилетия в связи с этим уделяется процессам интенсивной пластической деформации (ИПД), позволяющим получать зеренную структуру субмикро- и нанокристаллического строения, обеспечивающую существенное повышение эксплуатационных свойств изделиям из металлов и сплавов. Разработка технологий ИПД в современных условиях немаловажна без математического моделирования рассматриваемых процессов; важнейшей составляющей при разработке такого «инструментария» являются определяющие соотношения (или – более широко – конститутивные модели). В связи с вышесказанным последние должны обладать возможностью описывать эволюционирующую структуру на различных масштабных уровнях. До настоящего времени в практике деятельности разработчиков технологий переработки материалов преобладает применение макромеханических моделей, основанных на классических континуальных теориях пластичности, вязкопластичности, ползучести. Со второй половины XX в. и до настоящего времени предлагаются различные усовершенствования конститутивных моделей указанного выше класса, в которые вводятся дополнительные параметры и кинетические уравнения для них, описывающие те или иные характеристики структуры материалов. Как правило, такие модели позволяют получить адекватную картину изменяющейся структуры, однако – для конкретных материалов и способов термомеханической обработки. При этом подобные модели, к сожалению, не обладают необходимой универсальностью, при изменении материала или способа обработки их приходится существенно «подгонять» под конкретные условия, вплоть до

© Трусов Петр Валентинович – д.ф.-м.н., проф., зав. каф., e-mail: [tpv@matmod.pstu.ac.ru](mailto:tpv@matmod.pstu.ac.ru), ID: 0000-0001-8997-5493.

Останина Татьяна Викторовна – к.ф.-м.н., доц., 29, e-mail: [tv-ostanina@yandex.ru](mailto:tv-ostanina@yandex.ru), ID: 0000-0001-7541-2980.

Швейкин Алексей Игоревич – д.ф.-м.н., проф., e-mail: [shveykin@pstu.ru](mailto:shveykin@pstu.ru), ID: 0000-0002-2656-0781.

**Peter V. Trusov** – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department, e-mail: [tpv@matmod.pstu.ac.ru](mailto:tpv@matmod.pstu.ac.ru), ID: 0000-0001-8997-5493.

**Tatyana V. Ostanina** – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, e-mail: [tv-ostanina@yandex.ru](mailto:tv-ostanina@yandex.ru), ID: 0000-0001-7541-2980.

**Alexey I. Shveykin** – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, e-mail: [shveykin@pstu.ru](mailto:shveykin@pstu.ru), ID: 0000-0002-2656-0781.



полного изменения входящих в модель соотношений. Краткий обзор работ, посвященных созданию и применению моделей данного класса, приведен в предыдущей статье авторов. Наиболее перспективными и обладающими значительной степенью универсальности, по мнению авторов, в настоящее время являются многоуровневые конститутивные модели, основанные на введении внутренних переменных и физических теориях пластичности (упруговязкопластичности). Обзор работ, в которых рассматриваются различные аспекты построения, модификации, численной реализации и применения таких моделей, предлагается в настоящей статье. Основное внимание уделено моделям, ориентированным на описание изменения структуры материалов, обусловленных дислокационно-дисклиниционными механизмами; приведена краткая справка о моделях, в которых учитываются термически активируемые диффузионные механизмы, за счет которых реализуются процессы возврата и рекристаллизации.

© ПНИПУ

## EVOLUTION OF THE GRAIN STRUCTURE OF METALS AND ALLOYS UNDER INTENSE PLASTIC DEFORMATION: MULTILEVEL MODELS

P.V. Trusov, T.V. Ostanina, A.I. Shveykin

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

### ARTICLE INFO

Received: 27 February 2022  
Approved: 29 March 2022  
Accepted for publication: 04 July 2022

#### Keywords:

multilevel constitutive models, physical theories of elastoviscoplasticity, change in grain and subgrain structure of polycrystalline metals and alloys.

### ABSTRACT

It is well known that the performance properties of products made of metals and alloys are determined mainly by the meso- and microstructure of the latter. The structure of materials is formed and undergoes significant changes in the processes of manufacturing parts and structures using thermomechanical processing methods. A very important parameter that determines the physical and mechanical characteristics of materials is the grain structure (size, shape, relative positions of grains and inclusions of various phases). In recent decades, in this regard, special attention has been paid to the processes of severe plastic deformation (SPD), which make it possible to obtain a submicro- and nanocrystalline grain structure, which provides a significant increase in the performance properties of products made of metals and alloys. The development of SPD technologies in modern conditions is unthinkable without mathematical modeling of the processes under consideration; the most important component in the development of such a "toolkit" are constitutive relations (or, more broadly, constitutive models). In connection with the foregoing, the latter should be able to describe the evolutionary structure at various scale levels. Until now, the practice of developers of materials processing technologies has been dominated by the use of macrophenomenological models based on classical continuum theories of plasticity, viscoplasticity, and creep. From the second half of the 20th century to the present, various improvements to the constitutive models of the above class have been proposed, in which additional parameters and kinetic equations are introduced for them, describing certain characteristics of the structure of materials. As a rule, such models make it possible to obtain an adequate picture of the changing structure, however, for specific materials and methods of thermomechanical treatment. At the same time, such models, unfortunately, do not have the necessary universality; when changing the material or processing method, they have to be significantly "customized" to specific conditions, up to a complete change in the relationships included in the model. A brief review of works devoted to the creation and application of models of this class is given in the previous article by the authors. The most promising and possessing a significant degree of universality, according to the authors, are currently multilevel constitutive models based on the introduction of internal variables and physical theories of plasticity (elastoviscoplasticity). A review of works that consider various aspects of the formulation, modification, numerical implementation and application of such models is proposed in this article. The main attention is paid to models focused on the description of changes in the structure of materials due to dislocation-disclination mechanisms; a brief note is given on models that take into account thermally activated diffusion mechanisms, due to which the processes of recovery and recrystallization are realized.

© PNRPU

#### Основные обозначения

$\theta_r$  – гомологическая температура;  
 $\theta$  – абсолютная температура;  
 $D$  – размер зерна;  
 $d$  – средний размер субзерен;  
 $\sigma$  – интенсивность напряжений;  
 $m$  – показатель скоростной чувствительности напряжения течения;  
 $\mu$  – модуль сдвига;

$b$  – модуль вектора Бюргерса;  
 $\dot{\epsilon}$  – интенсивность скорости деформации;  
 $R$  – газовая постоянная;  
 $Q$  – энергия активации пластического деформирования;  
 $\varphi$  – объемная доля рекристаллизованных зерен;  
 $\mathbf{D}$  – тензор деформации скорости;  
 $\mathbf{f}$  – градиент места;  
 $\hat{\nabla}$  – оператор Гамильтона, определенный в отсчетной конфигурации.

## Введение

В настоящее время неоспоримым фактом является весьма значимое (а во многих аспектах – определяющее) влияние мезо- и микроструктуры металлов и сплавов на весь комплекс физико-механических характеристик образцов и готовых изделий из данных материалов [Хоникомб, 1972; Панин и др., 1982; Полухин и др., 1982; Белл, 1984 а, б; Рыбин, 1986; Кан, Хаазен, 1987; Лахтин, Леонтьева, 1990; Лихачев, Малинин, 1991; Панин, 1998; Носкова, Мулюков, 2003; Кривцов, 2007; Романова и др., 2017; и др.]. Одними из наиболее важных характеристик структуры являются параметры зеренного строения поликристаллических материалов, описывающие форму, размеры, законы распределения ориентаций кристаллитов. Например, один из наиболее важных параметров поликристаллических материалов – предел текучести – весьма чувствителен к размеру зерна, что отражено в известном законе Холла – Петча [Hall, 1951; Petch, 1953]. Влияние зеренной структуры на комплекс физико-механических свойств поликристаллических металлов и сплавов, технологии их получения и эксплуатационные характеристики изделий из них отмечены в предыдущих обзорах авторов [Останина и др., 2020; Трусов и др., 2022], в которых приведен и соответствующий список литературы.

Наиболее распространенными методами формирования требуемой структуры поликристаллов являются различные виды интенсивного пластического деформирования (ИПД), наиболее часто реализуемые в процессах обработки металлов давлением (ОМД). Разработка новых и совершенствование существующих методов ИПД с помощью эмпирического подхода чрезвычайно ресурсозатратна, в связи с чем для решения указанных проблем в настоящее время практически всегда используются различные математические модели [Vinogradov, Estrin, 2018]. Базовой составляющей последних, от которой в наибольшей степени зависит качество, адекватность моделей, являются определяющие соотношения (ОС), или конститутивные модели (КМ). Значительная часть моделей, используемых в практике работы технологов, основана на применении макрофеноменологических теорий пластичности [Ильюшин, 1963; Качанов, 1969; Васин, 1971; Зубчанинов, 2000; Бондарь, 2004; и др.]. Модели, использующие указанный класс ОС, внесли значительный вклад в развитие технологий ОМД, однако они не позволяют анализировать эволюцию структуры материалов в процессах их обработки. В связи с этим в последние десятилетия все большее распространение и развитие получают многоуровневые модели для описания поведения поликристаллических металлов и сплавов [Horstemeyer et al., 2005; Horstemeyer, 2009; McDowell, 2010; Roters et al., 2010 a,b; Roters, 2011; Diehl, 2017; Beyerlein, Knezevic, 2018; Knezevic, Beyerlein, 2018; Трусов, Швейкин, 2019; Yang et al., 2020; и др.], базирующиеся на введении внутренних переменных [Rice, 1971, 1975; Mandel, 1973; Halphen, Nguyen, 1975; Жермен, 1983; Horstemeyer,

McDowell, 1998; McDowell, 2005; Ашихмин и др., 2006; Maugin, 2015; и др.] и физических теориях упругопластичности и упруговязкопластичности (ФТП) (см., например, обзор [Трусов, Волегов, 2011а, б, в]), включающих явное описание физических механизмов и их «носителей». Модели данного класса позволяют анализировать и происходящие при термомеханических воздействиях изменения зеренной структуры (см., например, [Latypov et al., 2016]). Настоящая статья посвящена обзору существующих многоуровневых моделей, включающих подмодели для описания изменения зеренной структуры.

Можно выделить три основные группы моделей данного класса: статистические, самосогласованные и прямые. В статистических моделях [Taylor, 1938; Leffers, 1994; Estrin et al., 1998; Hines et al., 1998; Tóth et al., 2002; Van Houtte, 2009; Li, 2009; Dancette et al., 2010; Tóth et al., 2010; Trusov, Shveykin, 2013a; Toth, Gu, 2013, 2014; и др.] элементы мезоуровня (кристаллиты) рассматриваются относительно независимо друг от друга; «объединение» элементов мезоуровня в элемент макроуровня осуществляется для части характеристик на основе принимаемых гипотез кинематического или статического типа, по остальным параметрам осуществляется статистическое осреднение. В самосогласованных моделях [Lebensohn, Tomé, 1993; Beyerlein et al., 2003; Lebensohn et al., 2007; M'Guil et al., 2009; Beyerlein et al., 2011; Lebensohn et al., 2012; Kim, Oh, 2012; Frydrych, Kowalczyk-Gajewska, 2016; Guo, Seefeldt, 2017; и др.] на мезоуровне рассматривается поведение отдельных элементов мезоуровня в окружении матрицы материала с эффективными характеристиками, определяемыми итерационным путем по свойствам элементов мезоуровня с применением той или иной процедуры осреднения последних. В прямых моделях [Raabe et al., 2002; Buchheit et al., 2005; Rezvanian et al., 2006; Wu et al., 2006; Rezvanian et al., 2007; Estrin, Kim, 2007; Chang et al., 2010; Lemiale et al., 2010; Roters, 2011; Ding et al., 2012; Quey et al., 2012; Kumar, Mahesh, 2013; Trusov, Shveykin, 2013b; Ardeljan et al., 2014; Cantor et al., 2015; и др.] реализуется решение краевых задач на мезомасштабном уровне (в подавляющем большинстве работ применяется метод конечных элементов). Применение самосогласованных и тем более прямых моделей связано с чрезвычайно большими вычислительными затратами, поэтому для моделирования реальных технологических процессов термомеханической обработки материалов в ближайшее время наиболее перспективными представляются статистические модели. В то же время для исследования особенностей поведения металлов и сплавов (в основном – на уровне представительного макрообъема) и «тонких» аспектов эволюции микроструктуры часто используются прямые и самосогласованные модели. Следует отметить, что в самосогласованных моделях обычно все параметры принимаются однородными в пределах зерна, а форма зерен – канонической (как правило – эллипсоидальной). В прямых моделях зерна представляются совокупностью (от десятков до сотен)

элементов (кристаллитов), форма зерен может использоваться любая; в пределах элементов параметры обычно принимаются однородными, но в пределах зерна эти параметры могут существенно изменяться. При этом в число указанных параметров входят тензоры ориентации решеток кристаллитов, изменение которых описывается физически обоснованными эволюционными соотношениями. В связи с вышесказанным трансформация зеренной структуры в прямых моделях определяется непосредственно из решения краевой задачи. Заметим, что прямые модели основаны, как правило, на лагранжевом подходе; при исследовании интенсивных неупругих деформаций связанные с материалом конечные элементы (КЭ) претерпевают значительные искажения, что приводит к возрастанию численных погрешностей. В связи с этим обстоятельством при реализации прямых моделей, как и при использовании классических континуальных теорий упругопластичности (упруговязкопластичности), возникает необходимость перестроения КЭ-сетки; с подходами и методами перестроения сеток можно познакомиться, например, в статье [Sedighiani et al., 2021].

Следует отметить, что на изменение зеренной структуры влияет широкий спектр физических механизмов, действующих на различных структурно-масштабных уровнях; их относительный вклад зависит от условий обработки заготовки, физико-химического состава, исходного состояния материала. Как представляется, отделить эти механизмы друг от друга, исходя из основных параметров внешних воздействий (например, температуры, скорости и степени деформации) и состояния материала в отсчетной конфигурации (количество и геометрия фаз, законы распределения зерен и субзерен по размерам и ориентациям), практически невозможно. В связи с вышесказанным для классификации процессов трансформации зеренной структуры и математических моделей описания последней можно использовать подобное разделение только по превалированию, ведущей роли того или иного механизма (или нескольких основных механизмов). Из анализа известных авторам результатов экспериментальных и теоретических работ [Останина и др., 2020] можно констатировать, что значительная часть исследователей в качестве основного механизма принимает движение и взаимодействие дислокаций и дисклинаций, их самоорганизацию с образованием субструктур с пониженным уровнем внутренней энергии. Подобные механизмы и соответствующие им носители перестройки структуры характерны для деформирования при относительно низких температурах (ниже  $0,2-0,3 \theta_r$  – гомологическая температура). Для краткости указанные механизмы и модели, в которых эти механизмы принимаются основными, будем называть дислокационно-дисклинационными.

Однако значительная часть процессов ОМД (особенно – труднодеформируемых сплавов) осуществляется при температурах, превышающих (во многих случаях – существенно) указанные выше гомологические темпера-

туры. Кроме того, даже при реализации процессов ОМД при невысоких температурах, последние часто сопровождаются различными операциями термической обработки (отпуск, отжиг, т.е. выдержка изделий при повышенных температурах в течение длительного времени). При температурах, больших  $0,5 \theta_r$ , в поликристаллических материалах, испытавших и/или испытывающих большие неупругие деформации, на изменение структуры оказывает влияние альтернативный (при определенных условиях – превалирующий) механизм, осуществляемый за счет атомарной диффузии. В этих условиях в металлах и сплавах реализуются процессы перестройки зеренной структуры за счет возврата, статической и динамической рекристаллизации [Хоникомб, 1972; Лахтин, Леонтьева, 1990]. Для краткости в дальнейшем указанные механизмы и реализуемые процессы перестройки структуры будем называть диффузионными, а модели для их описания – диффузионно-ориентированными.

Как отмечено выше, провести четкие границы между рассматриваемыми двумя основными механизмами трансформации зеренной (субзеренной) структуры поликристаллических материалов представляется невозможным. Движение и взаимодействие дислокаций и дисклинаций также являются термически чувствительными процессами, в которых диффузия играет важную роль. При этом следует учитывать, что диссипируемая при неупругой деформации внутренняя энергия (по разным оценкам – от 50–60 до 98 % от подводимой механической энергии) ведет к повышению температуры и увеличению влияния диффузии; при этом возрастание плотности дислокаций и точечных дефектов (в первую очередь – вакансий) в процессе неупругого деформирования также ведет к возрастанию интенсивности диффузионных процессов (в том числе за счет «туннельной» диффузии). С другой стороны, процессы возврата и рекристаллизации ведут к перестройкам дислокационной субструктуры, в значительной степени уменьшают плотность дислокаций и дисклинаций. Заметим, что с энергетической точки зрения движущей силой реализации обоих основных механизмов является стремление системы понизить уровень внутренней энергии, накопленной на дефектах различных структурно-масштабных уровней. В связи с этим используемую в дальнейшем классификацию рассматриваемых многоуровневых моделей на два основных класса следует воспринимать с определенной степенью условности, устанавливаемой по превалирующим механизмам.

## 1. Многоуровневые модели, ориентированные на описание дислокационно-дисклинационных механизмов изменения структуры

Как отмечено во введении, в последние десятилетия весьма интенсивно развиваются многоуровневые модели для описания поведения поликристаллических металлов и сплавов, которые базируются на явном рассмотрении физических механизмов неупругого де-

формирования кристаллитов; последнее определило использование для ФТП в англоязычной литературе термина *crystal plasticity*.

В работе [Leffers, 1994] отмечается, что в широко распространенных самосогласованных моделях, используемых для описания формирования текстуры, непосредственное взаимодействие соседних кристаллитов не учитывается, рассматривается поведение отдельных кристаллитов в окружении матрицы с эффективными свойствами. В цитируемой работе предлагается модель для описания деформирования поликристаллических материалов в процессе листовой прокатки. Модель в значительной мере опирается на экспериментальные данные, согласно которым при плоской прокатке зерна подразделяются на блоки ячеек в форме тонких полос с определенной ориентацией по отношению к осям обработки. В соответствии с этими данными автором предлагается представить каждый кристаллит совокупностью семейств из двух прилегающих полос, для которых записаны условия совместности деформаций. Для осредненных по двум полосам семейства деформаций используется гипотеза Фойгта (Тейлора). Деформирование в каждой из двух полос семейства реализуется по различным системам скольжения. Во избежание наложения материала соседних полос или появления пустот (в силу различия сдвиговых деформаций) предлагается модифицированная модель ротации, принуждающая полосы семейства разворачиваться вокруг одной оси в разные стороны, обеспечивая выполнение условия сплошности. Приведен пример применения модели для прокатки поликристаллических листов, результаты демонстрируют менее острую, чем модель Тейлора, текстуру, что согласуется с экспериментальными данными. Детальное изложение предлагаемой модели приведено в статьях [Leffers, 2001a, b].

В работе [Butler, McDowell, 1998] со ссылкой на ранее опубликованные результаты теоретических и экспериментальных (нагружение трубчатых образцов из чистой меди сжатием – кручением) исследований приведены характерные особенности формирования дислокационных субструктур в процессах пластического деформирования. Сопоставление экспериментальных и теоретических (полученных с использованием двухуровневых статистических моделей, основанных на гипотезе Фойгта или гипотезе «смягченных ограничений») данных показывает более «острые» текстуры, полученные расчетным путем, что авторы связывают с принятыми кинематическими гипотезами. Отмечается, что быстрый рост плотности дислокаций ведет к самоорганизации последних в низкоэнергетические структуры типа плотных стенок дислокаций, микрополос, полос сдвига. С ростом деформаций микрополосы и стенки, «захватывая» образующиеся дислокации (в первую очередь – геометрически необходимые дислокации (ГНД)), образуют тонкие слоистые некристаллографические границы, отделяющие разориентированные (на  $15\text{--}20^\circ$  и более) области кристаллита (зерна) – так назы-

ваемые «геометрически необходимые границы (ГНГ)». Образование ГНГ ведет к замедлению процесса текстурообразования, поскольку новые границы служат в качестве «носителей» дополнительных механизмов диссипации и накопления энергии. Одновременно ГНГ затрудняют движение дислокаций, что приводит к повышению напряжения течения.

Для описания процесса образования субзерен в мультипликативное разложение градиента места мезоуровня вводится сомножитель, отвечающий за искажение кристаллита за счет ГНД, и дополнительная внутренняя переменная, характеризующая расстояние между стенками ГНД (в дальнейшем эта величина принимается равной среднему размеру субзерна); для описания скорости изменения этих параметров предлагаются феноменологические соотношения. Данная модификация статистической модели позволяет уменьшить резкость текстуры, учесть дополнительную релаксацию напряжений за счет вклада ГНД, однако не дает возможности определять реальную структуру разориентированных на определенные углы субзерен (фрагментов).

В работе [Hines et al., 1998] рассматривается процесс измельчения зерен (называемый авторами рекристаллизацией за счет прогрессирующей разориентации (ротации) субзерен) в полосах сдвига, наблюдаемый во многих материалах при высокоскоростных нагружениях. Приведен краткий обзор результатов экспериментальных исследований высокоскоростных ( $3 \cdot 10^4\text{--}4 \cdot 10^4 \text{ c}^{-1}$ ) испытаний образцов из различных материалов (меди, тантала, алюминия, никеля). Отмечается, что в полосах сдвига температура и продолжительность процесса недостаточны для реализации рекристаллизации за счет диффузионных механизмов. Тем не менее данный процесс действительно имеет черты рекристаллизации: в полосах сдвига образуются новые субзерна, отделенные от исходной матрицы высокоугловыми границами и с низкой плотностью дислокаций внутри. Из экспериментальных и теоретических результатов, описанных в обзоре, отмечается возможность коалесценции ячеек за счет их разворотов и утонения дислокационных стенок, что приводит к укрупнению субзерен. Приведены также данные о существенной зависимости процесса фрагментации от скорости деформации.

Для теоретического анализа используется модификация вязкопластической модели типа Тейлора, упругими деформациями пренебрегают. Рассмотрение процесса эволюционирующей разориентации субзерен предлагается осуществить на основе модели бикристалла, две части которого в отчетной конфигурации разориентированы относительно друг друга на небольшие углы (не более  $2\text{--}3^\circ$ ). На общей фасетке границы кристаллов заданы условия сопряжения по компонентам градиента скорости перемещений и вектора напряжений, для нормальной составляющей последнего допускается, что компоненты деватора напряжений могут терпеть разрыв, компенсирующийся скачком среднего напряжения. Для остальных компонент тензоров гради-

ента скорости перемещений и напряжений в каждой паре субзерен принимается правило смесей. Спин решетки определяется разностью тензора вихря и антисимметричной части тензора скоростей сдвига. Приведено описание алгоритма численной реализации модели. Представлены результаты расчетов для простого сдвига различным образом ориентированных относительно осей нагружения образцов бикристаллов меди (ГЦК) и тантала (ОЦК-решетка).

В статье [Mika, Dawson, 1999] для исследования эволюции разориентации кристаллитов на меж- и внутризеренных границах использована прямая вязкопластическая модель. Работа осуществлена на поликристаллическом образце, содержащем в анализируемой области 172 зерна в форме 12-гранников (ромбических додекаэдров); для устранения краевых эффектов данная область окружена 144 аналогичными элементами. Образец деформируется в условиях стесненной плоской осадки, по мнению авторов, воспроизводящей условия плоской прокатки. Каждое из зерен аппроксимировано 576 конечными элементами в форме тетраэдров. Приведены результаты расчетов в виде функций распределения ориентаций межзеренных и внутризеренных границ (относительно характерных осей нагружения) и углов разориентаций между соседствующими кристаллитами для различных степеней осадки (от 0 до 50 %).

Физические теории упругопластичности позволяют не только получать информацию о сдвигах по системам скольжения (СС) и поворотах кристаллической решетки зерен, но и исследовать формирование и эволюцию дислокационных субструктур; один из вариантов такого типа моделей представлен в статье [Ortiz, Repetto, 1999]. В первой части цитируемой работы с использованием формализма классической неравновесной термодинамики приведена вариационная постановка задачи упругопластичности, рассмотрен ее инкрементальный вариант. В соответствии с последней траектория деформации (приращения сдвигов) определяется из условия минимума приращения энергии деформации на шаге. Данная формулировка далее применена для физической теории упругопластичности; отмечается потеря выпуклости функционала вариационной постановки («псевдоупругого потенциала») при кинематическом разупрочнении (вследствие вращения решетки) и учета латентного упрочнения. Отмечается, что известные экспериментальные данные свидетельствуют о существовании в кристаллитах областей, деформируемых одиночным скольжением и отделенных друг от друга тонкими прослойками дислокационных субструктур (плоскими скоплениями, стенками и др.). В предлагаемой модели переход к локальному одиночному скольжению («пятнистому сдвигу») и образование тонкой микроструктуры связывается с потерей выпуклости потенциала вследствие латентного упрочнения.

В работе используется мультипликативное разложение градиента места [Bilby et al., 1957; Kroner, 1959; Lee, Liu, 1967; Lee, 1969]; скорость изменения пласти-

ческой составляющей в кристаллите  $\dot{\mathbf{f}}^p$  определяется скоростями сдвигов по СС. Следуя данным [Nye, 1953], вводится тензор плотности дислокаций  $\rho$ , который определяется через  $\dot{\mathbf{f}}^p$ ,  $\rho = \dot{\mathbf{f}}^p \times \overset{\circ}{\nabla}$  ( $\overset{\circ}{\nabla}$  – оператор Гамильтона, определенный в отсчетной конфигурации), который в конечном счете выражается через сдвиги по СС. Кристаллит далее рассматривается как совокупность областей однородно деформируемого материала (пластическое деформирование реализуется однородным одиночным сдвигом), отделенных тонкими прослойками – границами. На границах упругая и пластическая составляющие градиента места терпят разрыв, градиент места  $\dot{\mathbf{f}}$  удовлетворяет условиям совместности в слабом смысле (почти всюду, кроме прослоек, где градиент места может испытывать разрыв по сдвигам вдоль границы). По величине разрыва пластической составляющей градиента места с помощью приведенного выше соотношения устанавливается плотность дислокаций в прослойке; таким образом, граница представляется дипольной стенкой дислокаций, принадлежащих двум СС по обе стороны от прослойки.

Предусматривается возможность образования многоуровневых границ-прослоек, для чего используется модель бинарного дерева (ветвящегося графа, из каждого узла исходят либо 2, либо 0 ветвей; градиент места в узлах равен среднему градиентов места, приписанных ветвям; на нулевом уровне («корне») градиент места равен среднему для кристаллита). Наличие многоуровневых прослоек, в которых допускается сдвиг, позволяет при их достаточном количестве обеспечить любую предписанную деформацию за счет одиночных сдвигов. Приведены примеры определения различно ориентированных границ в ГЦК-кристаллах, которые согласуются с экспериментально наблюдаемыми субструктурами при различных видах нагружения. В заключительной части статьи приведен способ внесения в модель абсолютных масштабов тонкой структуры, основанный на введении в полную энергию аддитивной добавки от собственной энергии дислокаций; приведены примеры вычисления размеров ячеек дислокационных субструктур, результаты находятся в хорошем качественном и количественном соответствии с экспериментальными данными. Детальное изложение алгоритма реализации предлагаемой модели представлено в работе [Ortiz et al., 2000]. Результаты применения модели к анализу эволюции микроструктуры образцов из сплава Al–Cu, обработанных в процессе равноканального углового прессования (РКУП), показывают удовлетворительное соответствие экспериментальным данным [Sivakumar, Ortiz, 2004].

Для теоретического исследования процессов разворотов зерен (субзерен, фрагментов) в работе [Delannay, 2001] использованы две модели – прямая упругопластическая модель и LAMEL [Van Houtte et al., 1999]; отметим, что именно с формированием разориентированной структуры автор связывает измельчение зерен. В прямой модели каждое зерно описывалось одним ку-

бическим (в отсчетной конфигурации) элементом с семью узлами (точками интегрирования). Исследовалось влияние начальной ориентации нескольких выделенных зерен и различных распределений ориентаций остальных зерен, входящих в представительный макрообъем (1200 зерен), на средние ориентации и разориентации в пределах зерна, определяемые по ориентациям в точках интегрирования. Значительная часть работы посвящена анализу экспериментальных данных по измельчению зерен при холодной прокатке образцов из алюминиевого сплава 1050. Результаты теоретических расчетов с использованием прямой модели демонстрируют удовлетворительное соответствие с экспериментальными данными. Показано качественное соответствие результатов расчетов с помощью обеих моделей – прямой и LAMEL.

Сопоставлению результатов применения различных моделей (типа Тейлора – Бишопа – Хилла (ТБХ) и Закса, их модификаций [Raabe, 1995; Мао, 1998] и прямой) для анализа формирования текстуры и разворотов субзерен поликристаллических материалов с ГЦК-решеткой (на примере алюминия) посвящена статья [Raabe et al., 2002]. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными, полученными авторами на образцах, прокатанных до обжатия в 95 % (логарифмическая деформация сжатия вдоль нормали равна 3). Показано, что лучшее (по сравнению с классическими моделями типа ТБХ и Закса) качественное и количественное соответствие с экспериментальными данными обнаруживают текстуры, определенные с помощью прямой и модифицированных моделей Закса и Тейлора. Полученные результаты свидетельствуют о существенной зависимости текстуры от учета взаимодействия соседних зерен; особенно сильно данная зависимость проявляется для кристаллитов с неустойчивой ориентацией, т.е. таких, для которых незначительные изменения внешних воздействий влекут резкое изменение активности СС. В то же время разделение зерен на субзерна зависит главным образом от исходной ориентации зерен по отношению к осям обработки, влияние соседних зерен на этот процесс менее значительно.

В работе [Barnett, Montheillet, 2002] для описания процесса измельчения зеренной структуре при кручении образцов из алюминиевого сплава 1050 используется вязкопластическая статистическая модель с показателем скоростной чувствительности  $m = 0,05$ , что приближает ее к пластической модели типа Тейлора – Бишопа – Хилла (ТБХ). Принята гипотеза Фойгта, используется модель ротации Тейлора. В отсчетной конфигурации принимается, что зерна включают агрегаты субзерен, разориентированные по отношению к номинальной ориентации зерна случайным образом (с нормальным законом распределения) на углы в пределах  $1^\circ$ . Показано, что при больших деформациях (превышающих по эквивалентной деформации 2) большая часть малоугловых границ превращается в большеугловые с осями разориентировки, преимущественно ориентиро-

ванными в радиальном направлении образцов. Теоретические результаты подтверждаются полученными авторами экспериментальными данными.

Результаты исследования процесса холодного РКУП ГЦК-поликристаллов с использованием самосогласованной вязкопластической модели представлены в [Beyerlein et al., 2003]; упрочнением пренебрегалось. Исследованы известные наиболее распространенные 4 маршрута РКУ: А (без поворота заготовки), В<sub>А</sub> (кантовка на  $90^\circ$  после каждого прохода в противоположных направлениях), В<sub>С</sub> (кантовка на  $90^\circ$  после каждого прохода в одном направлении), С (кантовка на  $180^\circ$  после каждого прохода); расчеты для каждого маршрута проведены для четырех проходов. Для описания измельчения зерен предлагается простая геометрическая модель, состоящая в следующем. Каждое зерно аппроксимируется эллипсоидом с длиной осей  $L$  (наибольшая),  $M$  (средняя) и  $S$  (наименьшая). В процессе деформирования зерна испытывают аффинные изменения конфигурации, т.е. сохраняют форму эллипсоидов. При выполнении условий ( $L/S > R$ ,  $M/S < R/2$ ) зерно разделяется на два, при выполнении условий ( $L/S > R$ ,  $M/S > R/2$ ) – на четыре новых зерна; здесь  $R$  – эмпирически подбираемый параметр. Показано, что выбор маршрута оказывает существенное влияние на распределение зерен по ориентациям, геометрии (равноосности) и размерам. Отмечается, что для более точного описания процесса измельчения зерен необходима разработка более «тонких» моделей, основанных на рассмотрении формирования ячеек и фрагментов.

Результаты детального исследования влияния количества и размеров конечных элементов, аппроксимирующих зерна поликристаллического материала, с применением прямой упруговязкопластической модели содержатся в [Buchheit et al., 2005]. Исследования проведены для образцов из поликристаллической меди (ГЦК-решетка), подвергаемых одноосному растяжению. Количество элементов («субзерен»), аппроксимирующих зерна, изменялось в широких пределах – от 1 до 512. Для описания ротации решеток субзерен принята модель Тейлора; при достижении значительных углов разориентации соседствующих субзерен последние можно рассматривать как новые зерна. Отмечается, что более детальное разбиение зерен не приводит к существенному изменению зависимости напряжений от накопленных пластических деформаций. Хотя измельчение сетки позволяет более детально описать формирование текстуры, особенно – для зерен с неустойчивыми ориентациями, качественно полюсные фигуры, полученные на мелких и крупных сетках, можно считать аналогичными.

Дисклинационная модель для описания измельчения зерен предложена в работах [Орлова и др., 2005; Enikeev et al., 2007] (в работе [Орлова и др., 2005] – в плоской, в [Enikeev et al., 2007] – в объемной постановке). Полагается, что дисклинации, расположенные в стыках зерен, порождаются несовместностью дефор-

мации зерна и окружения. С использованием известных экспериментальных данных принимается, что при достижении стыковых дисклинаций критической мощности (примерно  $1\sim 3^\circ$ ) они могут прорасти в тело зерна с угла малоугловой границы. С накоплением угла разворота субзерен из исходного зерна получается 4 новых зерна. В статье [Орлова и др., 2005] приведен также энергетический анализ процесса дробления зерен. Для анализа пластического деформирования используется самосогласованная упруговязкопластическая модель. Результаты исследования процесса РКУП (маршрут С) показывают, что совместное использование самосогласованной упруговязкопластической и дисклинационной моделей позволяет более адекватно описать формирование текстуры [Enikeev et al., 2007].

В [Nazarov et al., 2006] для описания измельчения зерен предлагается использовать дисклинационную модель в сочетании с самосогласованной вязкопластической моделью. Каждое зерно аппроксимируется эллипсоидом; для использования дисклинационной модели зерно вписывается в прямоугольный параллелепипед. Скорость накопления дисклинаций полагается пропорциональной разнице деформации скорости однородного континуума (матрицы) и зерна. Деформирование ведет к образованию в плоскостях, содержащих по паре главных диагоналей параллелепипеда, дислокационных стенок и разворотов двух из четырех формирующихся субзерен. Развороты субзерен описываются дисклинациями. Дальнейшее деформирование приводит к увеличению углов разориентировки (мощности дисклинаций); при достижении углов разворота, соответствующих переходу от мало- к высокоугловым границам ( $10\text{--}15^\circ$ ), каждое из субзерен рассматривается как отдельное зерно. Приведены и обсуждаются результаты моделирования поликристаллического агрегата из 230 зерен, подвергнутого простому сдвигу.

В работе [Wu et al., 2006] для исследования измельчения зерен в процессе РКУП (по схеме С) предлагается использовать прямую упруговязкопластическую модель, подробное описание которой приведено в статье [Wu, Lloyd, 2004]. Задача поставлена в плоской постановке; процесс деформирования рассматривается как последовательные этапы знакопеременного простого сдвига. В отсчетной конфигурации исследуется область, состоящая из  $10\times 10$  квадратов, имитирующих зерна поликристалла (алюминиевый сплав AA6111-T4). Каждое из зерен аппроксимируется совокупностью субзерен – конечных элементов (от  $4\times 4$  до  $8\times 8$  на зерно) квадратной в отсчетной конфигурации формы. Принимается, что при достижении определенной минимальной разориентировки рассматриваемого субзерна с окружающими элементами критического значения  $\theta_c$  (в расчетах принято  $\theta_c=11^\circ$ ) данное субзерно рассматривается как отдельное зерно. Получены результаты по распределению ориентаций, текстуре и эволюции размера зерен. Отмечается, что измельчение зеренной структуры происходит преимущественно в первых про-

ходах РКУП. Численные результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

Описание процесса измельчения зерен, основанное на прямой упруговязкопластической модели, рассмотрено в [Rezvanian, 2006; Rezvanian et al., 2006, 2007, 2008]. Для определения скорости изменения напряжений использованы гипотеза аддитивности упругой и пластической составляющей тензора деформации скорости и изотропный гипотетический закон с производной Зарембы – Яуманна [Zaremba, 1903; Jaumann, 1911] тензора напряжений Коши и «пластическим» спином. Пластическая составляющая тензора деформации скорости определяется по скоростям сдвига, последние – из вязкопластического закона, учитывающего влияние температуры. Используется подмодель ЕТМВ (Estrin, Tóth, Molinari, Bréchet) [Mughrabi, 1983, 1988; Estrin et al., 1998; Tóth et al., 2002], согласно которой исследуемый материал полагается состоящим из двух «фаз» – ячеек и стенок между ними; предложены эволюционные уравнения для определения изменения плотностей дислокаций в каждой из этих подобластей и объемной доли каждой из «фаз». Следует отметить, что неустойчивость равномерного распределения дислокаций, их склонность к образованию низкоэнергетических структур (стенок, ячеек) интенсивно исследовалась как экспериментально, так и теоретически еще с середины XX в. [Nabarro et al., 1964; Nine, 1967; Kuhlmann-Wilsdorf, Nine, 1967; Holt, 1970; Kuhlmann-Wilsdorf, Hansen, 1991; и др.]; авторы указанных работ отмечают, что процесс формирования и топология ячеек существенным образом зависят от свойств решетки, энергии дефекта упаковки, температуры, действующих напряжений. Принимается, что скорости сдвигов по СС в ячейках и в стенках одинаковы; при этом не поясняется, что следует понимать под СС в стенках, представляющих собой тонкие области с высокой плотностью дислокаций (из контекста следует, что СС в стенках считаются просто продолжениями аналогичных систем в ячейках). Сдвиговые напряжения на СС принимаются равными взвешенной (с объемными долями) сумме напряжений в ячейках и стенках. Критические сдвиговые напряжения в каждой из «фаз» определяются по суммарной плотности статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций. Приведены кинетические уравнения для определения изменения плотностей статистически накопленных (СНД) и геометрически необходимых (ГНД) дислокаций в каждой из «фаз»; отдельно рассмотрено соотношение для определения изменения плотности зернограницных дислокаций (ЗГД).

Детально описаны алгоритмы и численные схемы, использованные для реализации модели. Для описания зеренной структуры использован метод многогранников Вороного. В основу методики положен метод конечных элементов в плоской постановке. Приведены результаты решения (характеристики НДС, значения углов поворота решеток зерен, плотности СНД, ГНД и ЗГД, размеры ячеек, скорости накопленных сдвигов по СС,



критические напряжения на СС) нескольких задач (о прокатке алюминиевой полосы, одноосном растяжении медного образца). Приведены результаты исследования влияния размеров зерен и их разориентации на эволюцию микроструктуры и поведение материала. Отмечается удовлетворительное соответствие численных и имеющихся экспериментальных данных.

В рамках прямой упруговязкопластической модели в работе [Aoyagi, Shizawa, 2007] вводятся две дополнительные переменные: тензор плотности ГНД, определяемый градиентом сдвигов по СС, и так называемый тензор «геометрически необходимой несовместности (ГНН)», устанавливаемый вторыми градиентами сдвигов и характеризующий плотность дислокационных диполей. Оба тензора входят в соотношения для определения упрочнения, причем ГНН используется для описания возврата за счет аннигиляции дислокаций диполей. Предлагаемая модель реализована в плоской постановке методом конечных элементов (МКЭ); показано возникновение в процессе деформирования мало- и большеугловых границ в зернах.

Результаты, полученные с применением упруговязкопластической модели тейлоровского типа для коммерческой и высокой степени чистоты  $\alpha$ -титана (ГПУ-решетка), представлены в статье [Wu et al., 2008]. Неупругая составляющая градиента скорости перемещений принимается равной сумме скоростей сдвига и двойникования, умноженных на соответствующие ориентационные тензоры. Величина скоростей сдвига по каждой СС определяется степенным законом; скорость сдвига по системам двойникования определяется произведением фиксированного сдвига двойника и скорости изменения объемной доли двойников каждой ориентации, последняя также определяется степенным законом. При достижении критической объемной доли двойников (в цитируемой работе – 0,4) предполагается, что зерно испытывает фрагментацию с образованием нескольких «потомков», сохраняющих параметры достигнутого упрочнения, но различающихся ориентациями, определяемыми ротациями решетки при двойниковании. Разориентированные фрагменты в дальнейшем рассматриваются как отдельные зерна.

Описаны состав используемых материалов, методика экспериментов для определения полюсных фигур (включая установление начальной текстуры) и идентификации модели. В качестве образцов использовался листовой материал после глубокой прокатки и термообработки. Для идентификации и верификации модели проводилась серия испытаний по осадке образцов в трех взаимноперпендикулярных направлениях (в направлении прокатки, поперечном и по направлению нормали к плоскости листа). Показано хорошее соответствие результатов расчета кривой  $\sigma$ - $\epsilon$  с экспериментальными данными по осадке в направлении прокатки, не использованными на стадии идентификации. Сравнение теоретически полученных полюсных фигур и соответствующих экспериментальных данных также обнаруживает удовлетворительное соответствие.

В работе [Li, 2009] для качественной оценки степени измельчения зерен поликристаллических образцов с ОЦК-решеткой в процессах равноканального углового прессования (РКУП) при углах излома  $90^\circ$  и  $120^\circ$  использована статистическая вязкопластическая модель типа Тейлора – Бишопа – Хилла (ТБХ). Рассмотрены три маршрута: А, В и С. Основываясь на экспериментальном факте наличия связи между фрагментацией и накоплением избыточных дислокаций одного знака (ГНД), с одной стороны, и увеличением плотности ГНД при возрастании числа активных СС – с другой, автор предлагает связать степень измельчения зерен с количеством новых активируемых на последовательных проходах СС. На основе полученных данных делается вывод о наибольшей эффективности для измельчения зерен маршрута В, несколько более низкой – маршрута А; наименьшую эффективность демонстрирует маршрут С.

Результаты исследования влияния начальной разориентации соседних зерен на развитие текстуры при простом сдвиге поликристаллического образца с ГЦК-решеткой представлены в [Chang et al., 2010]. Задача рассматривается в плоской постановке. Для анализа использована прямая упруговязкопластическая модель со степенным законом течения и анизотропным упрочнением в сочетании с МКЭ, реализация модели осуществлена с применением пакета ABAQUS. Исследуемая квадратная в отсчетной конфигурации область покрыта 400 ( $20 \times 20$ ) подобластями – зернами, каждое зерно подразделяется на  $3 \times 3$  субзерна, в отсчетной конфигурации все субзерна каждого зерна имеют одинаковую ориентацию. Анализируются два варианта разориентаций соседних зерен (при неизменной общей для области функции распределения ориентаций): а) с преимущественно малыми ( $90\%$  зерен имеют углы разориентации с соседними зернами в интервале  $10$ – $20^\circ$ ); б) с преимущественно большими ( $90\%$  зерен разориентированы на  $50$ – $60^\circ$ ) разориентировками. При деформировании субзерна имеют возможность вращаться относительно соседних зерен и субзерен. Показано, что с ростом деформации средние углы разориентировок между субзернами возрастают. В то же время с увеличением накопленной деформации имеет место «размытие» начальных пиков функции распределения углов разориентировок; при этом для варианта б) темп «размытия» выше, чем для варианта а), что объясняется большей неоднородностью деформаций и более сильными взаимодействиями между зернами для варианта б).

Модификация упруговязкопластической модели тейлоровского типа представлена в серии работ [Tóth et al., 2010; Toth, Gu, 2013]. Для описания деформационного упрочнения принята ячеистая модель кристаллитов, приведены эволюционные уравнения для плотностей дислокаций внутри и в стенках ячеек, при этом в стенках дислокации подразделяются на статистически накопленные и геометрически необходимые. Особое внимание уделено описанию фрагментации зерен. Согласно предлагаемой модели фрагментации полагается,

что внутренность зерен испытывает повороты как жесткое целое, тогда как на их периферии ротация тормозится окружающими зернами, в результате чего решетка приграничной области накапливает искажения (кривизны–кручения). С искажениями решетки авторы связывают так называемые дислокации, генерируемые кривизной (решетки). При описании поликристаллического агрегата каждое из рассматриваемых зерен кубической формы подразделяется на  $27 \times 27 \times 27$  кубических элемента (три последовательные генерации с разбивкой по три элемента на ребро); следует отметить, что при этом истинная геометрия зерен не описывается, модель является статистической, хотя и с привнесением признаков прямых моделей в части отслеживания информации о взаиморасположении и взаимоориентации элементов. В начальной конфигурации все элементы, принадлежащие данному зерну, имеют одинаковые ориентации и параметры, определяющие деформирование. В каждой генерации из 27 элементов центральный кубик испытывает повороты, определяемые градиентом места; до достижения критического значения разориентации (в работе в качестве такового принято отклонение кристаллографических направлений в  $5^\circ$ ) все элементы, входящие в агрегат соответствующей генерации, считаются имеющими одинаковую ориентацию и упрочнение по системам скольжения. При достижении элементом разориентации (с центральным элементом своей генерации) критического значения в дальнейшем он рассматривается как отдельное зерно. Модель использована для исследования эволюции зеренной структуры и напряженно-деформированного состояния образца из технически чистой меди, подвергаемого РКУП. Показано, что результаты расчетов распределения размеров зерен, разориентаций, полюсных фигур и упрочнения удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Результаты применения модели для анализа измельчения зерен и формирования текстуры при модифицированном процессе углового прессования (с уменьшением диаметра выходного канала) образцов из коммерчески чистого алюминия приведены в работе [Gu, Toth, 2012]; показано значительное уменьшение размеров зерен по сравнению с обычным РКУП. В статье [Toth, Gu, 2014] приведен также краткий обзор наиболее распространенных методов получения ультрамелкозернистых материалов, обсуждаются особенности формирующейся микроструктуры, связи последней с механическими характеристиками.

Детальное изложение модели, основанной на принципе виртуальных скоростей, псевдоконтинууме Коссе-ра и прямой вязкопластической модели, представлено в [Kim, Oh, 2012]. Для описания процесса измельчения зерен предполагается возможность появления внутренних поверхностей разрыва спина, т.е. появления разориентированных частей кристаллита; скорости перемещений принимаются непрерывными. Для определения моментных напряжений, действующих на поверхностях разрыва, используется энергетический подход; поверх-

ностная энергия аппроксимируется линейной функцией угла разориентировки. Проверка адекватности модели проведена на тестовом примере стесненной осадки (на 20 %) монокристаллического образца в плоской постановке. Предполагается, что разделение монокристалла на разориентированные субзерна (зерна) осуществляется по априори намеченным границам. Детально исследуется влияние на эволюцию структуры материала начальной ориентации кристалла, энергии дефекта упаковки, параметров, входящих в определяющие уравнения. Показано, что измельчение зерен приводит к уменьшению работы на пластических деформациях, что позволяет использовать критерий минимума работы.

Модификация самосогласованной вязкопластической модели, ориентированная на описание эволюции разориентации частей зерен (в дальнейшем – субкристаллов) и формирования измельченной зеренной структуры, рассмотрена в работе [Ostapovets et al., 2012]. Следуя мнению [Wu et al., 2010], возникновение разворотов субкристаллов связывается с дислокационными реакциями, в результате которых образуются сидячие дислокации; дальнейшее неупругое деформирование приводит к формированию в окрестностях сидячих дислокаций дислокационных скоплений (стенок), которые можно рассматривать как малоугловые границы. Продолжающееся пластическое деформирование ведет к увеличению углов разориентации, формированию большеугловых границ и разделению исходного зерна на субзерна. При этом каждый субкристалл в рамках самосогласованной модели рассматривается как эллипсоид, находящийся в матрице с эффективными характеристиками. Приведены соотношения для определения приращений углов поворота вокруг осей, ориентация которых в кристаллографической системе координат (КСК) определяется типом упомянутых выше дислокационных реакций, в зависимости от приращений сдвигов по системам скольжения. Модель применена для исследования процесса РКУП монокристаллического образца из технически чистого магния для двух ориентировок КСК относительно характерных осей обработки. Результаты расчетов по распределению ориентаций и долям границ с различным числом совпадающих узлов сопоставляются с данными проведенных авторами экспериментов; соответствие результатов можно считать удовлетворительным.

Методика и результаты детального экспериментального и теоретического исследования фрагментации поликристаллического алюминия, подвергнутого стесненной осадке при температуре  $400^\circ\text{C}$ , содержатся в [Quey et al., 2012]. Осадка осуществлялась в несколько этапов (до степеней деформации 0,19; 0,42; 0,77) с промежуточными разгрузками до достижения суммарной деформации 1,2; между указанными этапами деформации осуществлялось перестроение сетки с использованием методики, изложенной в [Quey et al., 2011]. Для теоретического анализа в качестве основы принята прямая упруговязкопластическая модель, изложен-

ная в статье [Marin, Dawson, 1998a, b], с разбиением каждого зерна в среднем на 600 десяти-узловых элементов на начальной стадии деформирования и на 1250 элементов – на завершающей стадии. Результаты расчетов и экспериментальные данные показывают, что фрагментации подвергается лишь часть зерен (от 10 до 20 %), в остальных развороты частей зерен в среднем следуют общему тренду. При этом наибольшую склонность к фрагментации испытывают зерна, симметричные элементы которых близки к плоскостям симметрии образца (соответствующим симметрии нагружения). Отмечается, что доля фрагментированных зерен растет примерно пропорционально деформации, достигая при степени деформации 1,2 значения 20 %, что находится в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными.

Прямые модели, позволяющие учитывать неоднородность деформирования и ротаций в пределах зерен, требуют больших вычислительных ресурсов, в связи с чем исследователями предлагаются различные варианты более эффективного описания неомогенности деформаций кристаллитов. В серии статей [Agul Kumar et al., 2011; Agul Kumar, Mahesh, 2012, 2013] рассматривается одна из таких моделей для описания неоднородного деформирования и измельчения зерен поликристалла. Приведен обзор литературы по подходам и методам исследования измельчения зерен в процессах неупругого деформирования. Считается, что дробление является результатом формирования в зернах полос сдвига, микро- и макрополос деформации. Для их описания каждое из зерен предлагается представить совокупностью полосовых областей, в каждой из которой приняты условия однородности; в качестве базовой используется жесткопластическая модель типа Тейлора – Бишопа – Хилла, ротации кристаллической решетки определяются с помощью модели Тейлора. Для поликристаллического агрегата и каждого зерна принята гипотеза Фойгта (Тейлора); для описания возникновения полос неоднородности вводятся случайные отклонения ориентаций решеток полос. Показано, что при определенных ориентировках зерен по отношению к характерным осям деформирования между полосовыми областями развивается значительная разориентация решетки; сформулирован критерий для определения границ неустойчивых разориентировок. Принимается, что полосы сдвига могут менять ориентацию относительно кристаллической решетки; для определения ориентации используется критерий минимума мощности диссипации на сдвигах. Предложено описание формирования дислокационных стенок и связанного с этим процессом упрочнения СС. Приведены примеры применения модели для нагружения в условиях плоской деформации, показано качественное соответствие теоретических и экспериментальных результатов.

В работе [Li, 2013] приведены результаты исследования влияния различных маршрутов РКУП на формирование текстуры и измельчение зерен поликристаллов с ГЦК-решеткой. Используется комбинированный под-

ход, согласно которому на первом этапе с помощью макрофеноменологической теории пластического течения и МКЭ определяется история деформирования для всей исследуемой области. На втором этапе для нескольких характерных точек поперечного сечения заготовки осуществляются расчеты характеристик, описывающих поведение представительных макрообъемов (выделенных точек), с применением самосогласованной вязкопластической модели при определенном на первом этапе кинематическом нагружении. По аналогии с данными [Li, 2009] для качественной оценки степени измельчения зерен используется критерий количества новых СС, активируемых в последовательных проходах.

Результаты подобных исследований приведены в статье [Li et al., 2013]. Рассмотрен процесс РКУП образцов с ГЦК-решеткой (алюминиевые сплавы, медь) при углах излома канала 90° и 120°; исследованы маршруты прессования (8 проходов) с углами поворота образцов вокруг продольной оси от 0° до 180° с шагом в 15°. Нагружение рассматриваемого образца (представительного макрообъема) в каждом проходе осуществлено простым сдвигом, величина сдвига задана из аналитического решения. Для теоретического исследования использована самосогласованная вязкопластическая модель. Получены результаты расчетов с использованием геометрической модели измельчения зерен, предложенной в [Beyerlein et al., 2003]; показано, что данная модель не позволяет корректно описать наблюдаемые на практике тенденции изменения размеров зерен при различных режимах (углах излома канала и углах поворота образцов). По мнению авторов, для качественной оценки степени измельчения зерен и их разориентации более приемлемым является параметр, характеризующий относительную долю «новых» активируемых систем скольжения (отнесенную к общему числу активных СС на каждом проходе), осредненную по всем проходам. Для исследуемых углов излома канала получены наиболее эффективные (с точки зрения измельчения зеренной структуры) значения поворотов образцов между проходами. Для верификации модели авторами проведены эксперименты по прессованию образцов из технически чистой меди; показано удовлетворительное качественное соответствие результатов экспериментов и расчетов.

Комбинированная модель, включающая прямую упругопластическую подмодель и клеточный автомат (КА), рассматривается в работах [Svyetlichnyu, 2013; Svyetlichnyu et al., 2015]. Алгоритм реализации модели основан на пошаговой процедуре. На основе информации о плотностях дислокаций на каждом шаге нагружения анализируется состояние ячеек КА, покрывающих сетку конечных элементов, используемую в прямой подмодели. При достижении критической плотности дислокаций на СС в соответствующих ячейках автомата формируются дислокационные стенки, трактуемые как малоугловые границы. Дальнейшее деформирование приводит к разворотам ячеек, преобразованию малоуг-

ловых границ в большеугловые, образованию субзерен и новых зерен меньших, чем исходные, размеров. Приведены примеры применения предлагаемой модели для исследования интенсивного деформирования образцов из алюминия и некоторых сталей; сопоставление численных и экспериментальных результатов показывает их удовлетворительное соответствие.

Гибридная модель, основанная на МКЭ в упруго-пластической постановке и подмодели ЕТМВ для описания эволюции дислокационной субструктуры, рассмотрена в статье [Hassani-Gangaraj et al., 2015]. В качестве базовой модели материала использована классическая теория упругопластичности (теория течения с изотропным упрочнением и критерием Мизеса). Средний размер ячеек (трактуемый как размер зерен) принимается обратно пропорциональным корню квадратному из суммарной плотности дислокаций. Указанная дислокационная подмодель, управляющим параметром в которой, определяющим эволюцию плотностей дислокаций в стенках и ячейках, является интенсивность пластической составляющей тензора деформации скорости, применена для расчета напряжения течения. Для численной реализации модели использованы МКЭ, пошаговая схема нагружения, итерационная процедура (для определения плотностей дислокаций, напряжения течения и приращения пластических деформаций на шаге нагружения) и явная схема интегрирования. Модель применена для анализа напряженно-деформированного состояния (включая остаточные напряжения), изменения по глубине структуры (размеров ячеек, плотности дислокаций) и физико-механических характеристик материала (сталь AISI 4340) приповерхностных слоев образца, подвергнутого поверхностной обработке (обдувкой дробью). Исследовано влияние на указанные характеристики скорости, радиуса и твердости дроби, «степени покрытия» (отношения суммарной площади отпечатков к площади обрабатываемой поверхности). Результаты проведенных авторами экспериментов (включая исследования микроструктуры с помощью электронной микроскопии) находятся в удовлетворительном соответствии с расчетными данными.

В работе [Frydrych, Kowalczyk-Gajewska, 2016] для анализа измельчения зерен предлагается 3-уровневая вязкопластическая модель. Элементом верхнего уровня является представительный макрообъем поликристалла, состоящий из большого количества (нескольких сотен) зерен. В качестве элемента второго структурно-масштабного уровня принимается зерно. Каждое из зерен представляется совокупностью (в работе – 100) «субзерен» (элементов 3-го структурно-масштабного уровня), разориентированных относительно друг друга в отчетной конфигурации по случайному закону на небольшие углы (не более  $1^\circ$ ). Для связи переменных соседних уровней рассматриваются в разных комбинациях два возможных подхода: применение «полностью стесненной» модели Тейлора (гипотезы Фойгта) и самосогласованной модели. На нижнем уровне используется

вязкопластическая модель со степенным законом течения и анизотропным законом упрочнения (с насыщением). Трехуровневая модель применена для исследования деформирования образцов из чистого алюминия и алюминиевого сплава в процессе равноканального углового (РКУ) прессования (4 прохода с кантовкой на  $90^\circ$  в одном направлении после каждого прохода). Показано, что различие в начальных ориентировках субзерен приводит к отличиям в активности СС, что обуславливает нарастание разориентировок. При достижении определенной разориентировки субзерна по отношению к средней ориентировке зерна субзерно рассматривается как новое зерно. В работах [Frydrych, Kowalczyk-Gajewska, 2018; Frydrych, 2019] на основе результатов, представленных в цитируемой выше статье, для связи параметров представительного макрообъема и зерна использована схема Тейлора, для связи переменных уровня зерен и субзерен – самосогласованная модель. В работе [Frydrych, Kowalczyk-Gajewska, 2018] предложена модификация модели для учета процесса двойникования в металлах и сплавах с ГПУ-решеткой; для описания двойникования субзерен использован вероятностный подход. Приведены результаты применения модели для анализа холодной прокатки образца из титана. В [Frydrych, 2019] представлены результаты расчетов для случая интенсивного неупругого деформирования образцов из нержавеющей стали аустенитного и ферритного классов.

В [Lebensohn et al., 2016] указывается, что стандартная самосогласованная вязкопластическая (ССВП) модель [Lebensohn et al., 2012], оперирующая только осредненными по зернам параметрами (первыми моментами), не позволяет анализировать неоднородные поля напряжений, деформаций, поворотов решетки в пределах кристаллитов, в силу чего не дает возможности рассматривать измельчение зерен. В связи с этим были разработаны различные модификации ССВП-модели, наиболее математически корректной из которых авторы считают схему второго порядка, рассмотренную в работах [Ponte Castañeda, 2002; Liu, Ponte Castañeda, 2004; Lebensohn et al., 2004, 2007], включающую в рассмотрение вторые моменты (осредненные флуктуации) полей, определяющих напряженно-деформированное состояние в каждом зерне. С использованием последней в цитируемой статье [Lebensohn et al., 2016] авторы подробно описывают встроенный в ССВП-модель алгоритм вычисления вторых моментов поля скоростей ротаций решетки в каждом из зерен. Удовлетворительное качественное соответствие результатов, полученных с помощью предложенной модифицированной ССВП-модели, с данными экспериментальных исследований и результатами расчетов с использованием прямой модели свидетельствует о возможности применения данной модификации для описания фрагментации. Процедуры численной реализации предложенного подхода подробно рассматриваются в работе [Zecevic et al., 2017]. Приведены примеры применения модифицированной

ССВП-модели (растяжение медного и стесненная осадка алюминиевого образцов). Сопоставление теоретических результатов с экспериментальными данными подтверждает приемлемость модели для описания фрагментации.

Дальнейшему развитию рассматриваемой модели посвящена статья [Zecevic et al., 2018]. При определении вторых моментов принимается, что флуктуации напряжений в зернах обусловлены: 1) различием свойств зерен, входящих в поликристаллический агрегат, и 2) флуктуацией ориентации решетки в пределах зерен (при этом принимается линейная зависимость флуктуаций напряжений от флуктуаций ориентаций); аналогичные предположения приняты при определении флуктуаций спинов решетки. Приведено подробное описание процедуры определения необходимых вторых (ковариационных) моментов флуктуаций. Интегрирование флуктуаций спинов на каждом шаге интегрирования позволяет определить флуктуации разориентаций (в ориентационном пространстве) на следующем временном слое. В каждый момент процесса деформирования определяются главные векторы и главные значения ковариационной матрицы флуктуаций разориентации. При достижении первым (наибольшим) главным значением этой матрицы критического значения считается, что «родительское» зерно разбивается на два новых, разориентированных на угол, определяемый по величине указанного главного значения, с осью поворота, направленной вдоль соответствующего главного вектора. Приведены примеры применения предлагаемой модели для исследования одноосного растяжения и стесненной осадки (плоскодеформированное состояние) ГЦК-поликристаллов. Сопоставление результатов по распределению внутриверенных разориентаций и текстуре с экспериментальными данными и результатами расчетов с использованием прямой модели обнаруживает удовлетворительное соответствие.

В работе [Guo, Seefeldt, 2017] для описания фрагментации предлагается модификация самосогласованной вязкопластической модели, согласно которой в зерне допускается возникновение узкой полосы интенсивного сдвига. Возникновение уступа на границе зерна и окружающей матрицы приводит к возникновению в соседних зернах микрополос сдвига и двойников, т.е. локализованных разориентированных областей (полос переориентации). Модифицированная модель была применена для анализа эволюции текстуры в процессе прокатки (обжатия на 30, 50 и 80 %, температура 300 К) и одного прохода РКУП (температура 473 К) образцов из технически чистого титана. Для оценки адекватности модели численные результаты сопоставлялись с данными экспериментов, проведенных авторами. Показано, что модифицированная модель дает лучшее согласование экспериментальных и теоретических данных по сравнению с обычной самосогласованной моделью.

В работе [Sheikh, Ebrahmi, 2017] представлены результаты теоретического исследования экструзии с про-

тиводавлением прутков прямоугольного поперечного по схеме знакопеременного сдвига. Согласно указанной схеме в первой половине рабочей части инструмента материал испытывает простой сдвиг в одном направлении, в результате которого поперечное сечение приобретает форму параллелограмма; во второй половине матрицы заготовка подвергается простому сдвигу в обратном направлении, приводящем к восстановлению исходной формы поперечного сечения. Противодавление прикладывается для более полного заполнения матрицы. Предложена модификация дислокационной подмодели: введен дополнительный параметр, позволяющий приближенно учитывать динамический возврат. В рамках МКЭ используется классическая упругопластическая теория с критерием Мизеса, деформационным и скоростным упрочнением, учетом влияния температуры. На макроуровне с помощью МКЭ в упругопластической постановке определяется напряженно-деформированное состояние в исследуемой области. Затем в центральной части поперечного сечения выделяется представительный объем («кубик») с размерами  $1 \times 1 \times 1$  мм, нагружение для которого задается из решения задачи на макроуровне. Для исследования изменения в процессе нагружения микроструктуры выделенного представительного объема (ПО) применена прямая упруговязкопластическая модель, включающая отмеченную выше подмодель ЕТМВ.

Результаты расчетов, проведенные для медных образцов, свидетельствуют о существенном влиянии деформирования на участке «обратного» простого сдвига (во второй половине рабочей части матрицы) на размер ячеек, объемную долю и толщину стенок. Исследовано влияние на напряженно-деформированное состояние, формирование текстуры и изменение среднего размера ячеек противодавления и параметра, отвечающего за динамический возврат. Сопоставление теоретических результатов с известными экспериментальными данными обнаруживает приемлемое соответствие. Заметим, что, как показано в носящей преимущественно экспериментальный характер статье [Shah et al., 2018], применение данной дислокационной модели для описания измельчения зеренной структуры при динамическом нагружении (скорость деформации  $1,2 \cdot 10^3 \text{ c}^{-1}$ ) медных образцов также продемонстрировало удовлетворительное согласование с данными натуральных испытаний.

В работе [Wang et al., 2018] рассмотрены результаты применения комбинированной модели для исследования поверхностной обработки обдувкой дробью плоской поверхности образцов из стали AISI 4340. Используемая модель практически идентична описанной в цитируемой выше работе [Hassani-Gangaraj et al., 2015]. Приведены результаты исследования влияния на измельчение зерен в приповерхностном слое детали от размеров и угла падения дроби при различных «степенях покрытия». Отмечается, что при малых размерах дроби измельчение зерен в приповерхностном слое происходит до меньших размеров, чем при применении

крупной дроби, однако глубина проработки при этом меньше, чем для второго случая. Показано, что при достаточно продолжительной обработке (с достижением «степени покрытия» 650 % и выше) можно добиться уменьшения размеров зерен более чем на порядок (вплоть до наноразмеров).

В работе [Kobaissy et al., 2019] для описания измельчения зерен в процессе РКУП предлагается использовать вязкопластическую модель типа Линя (с учетом упругих деформаций) [Lin, 1957], модифицированную континуальным описанием эволюции плотностей дислокаций на СС. В эволюционных уравнениях для плотностей статистически накопленных дислокаций (СНД) учитываются процессы зарождения, аннигиляции, иммобилизации и мобилизации дислокаций. Для определения плотностей геометрически необходимых дислокаций (ГНД) предлагается схема приближенного определения ротора пластической составляющей градиента скорости перемещений (в соответствии с соотношением Ная [Nye, 1953]). Описание упругих деформаций осуществляется с помощью упругого закона, сформулированного в терминах разгруженной конфигурации; пластическая составляющая градиента скорости перемещений устанавливается законом Орована, в котором скорость перемещений дислокаций определяется степенным законом (от отношения действующих и критических сдвиговых напряжений). Принимается, что основная часть ГНД концентрируется в окрестностях границ зерен, что приводит к повышению сопротивления движению дислокаций и различиям вследствие этого поворотов решетки кристаллитов в центральной части и вблизи границ зерен. В соответствии с принятой в работе [Tóth et al., 2010] концепцией, повороты решетки в центральной части зерен происходят с большей интенсивностью, чем в приграничных областях. Для описания этого эффекта в работе вводится так называемый «коэффициент задержки» ротации, принятый постоянной величиной.

Задача рассматривается в плоской постановке, для численной реализации используется квадратная сетка; каждая ячейка (зерно) в процессе фрагментации может образовать за один акт деления 4 субзерна, всего допускается 5 последовательных трансформаций, в результате чего каждое зерно может разделиться на 1024 субзерна, которые при достижении определенного критического значения разориентации (в работе – 5°) рассматриваются как отдельные зерна. Приведено краткое описание алгоритма реализации модели и блок-схема программы. Приведены результаты применения предложенной модели для описания эволюции напряженно-деформированного состояния и микроструктуры поликристаллической меди (идентификация осуществлена с использованием данных, приведенных в работе [Toth et al., 1992]) в процессе РКУП, описываемого как простой сдвиг в области излома канала. Показано, что модель удовлетворительно описывает эволюцию дислокационной субструктуры, зеренной структуры и формирование текстуры.

Статья [Tohidlou, Bertram, 2019] посвящена исследованию влияния анизотропии закона упрочнения на результаты расчетов эволюции микроструктуры монокристаллического образца, подвергнутого одному проходу РКУП. Для анализа использована прямая упруго-вязкопластическая модель; рассмотрены 4 различных анизотропных закона упрочнения, параметр латентного упрочнения  $h$  (отношение коэффициента упрочнения в неактивных СС к аналогичному параметру в активных СС), который менялся в интервале от 0 до 2. Образование субзерен (зерен) устанавливается по разориентации решеток материала, приписанного к точкам интегрирования в КЭ-процедуре, реализуемой в пакете ABAQUS; используемая модель ротации отдельно не обсуждается. Результаты расчетов показывают, что с возрастанием  $h$  постепенно увеличивается разориентация субзерен; наименьшему числу сформировавшихся субзерен соответствует  $h = 1,0$ , максимальному – значение  $h = 2,0$ .

Результаты экспериментального и теоретического исследования одного из новых процессов ИПД – так называемой механической обработки пластическим течением (экструзия через боковую щель тонкой пластинки из замкнутого контейнера) – представлены в работе [Vu et al., 2020]. Для теоретического исследования применен комбинированный подход; на первом этапе с помощью МКЭ в жесткопластической реализации (пакет DEFORM-2D/3D V11.0 FE) в области пластического течения выделены три основные области (малых, средних и больших деформаций), разделенные на зоны с примерно одинаковыми градиентами скоростей перемещений, определены значения компонент градиентов скоростей перемещений, принимаемые постоянными для этих характерных зон. Для детального исследования изменения напряженно-деформированного состояния и структуры далее используются представительные макрообъемы, для описания деформирования которых были применены две модели: самосогласованная вязкопластическая и статистическая модель тейлоровского типа. В рамках статистической модели для описания процесса измельчения зерен использован подход, предложенный в работе [Tóth et al., 2010]. Показано, что в области малых деформаций удовлетворительное описание формирования текстуры может быть получено с помощью самосогласованной модели, тогда как в областях средних и больших деформаций с экспериментальными данными в лучшем соответствии находятся результаты моделирования с помощью статистической модели.

Наряду с измельчением зерен в процессах ИПД может иметь место и обратный процесс – укрупнения (коалесценции) зерен, для исследования которого в статье [Zhang, Toth, 2020] предлагается использовать статистическую модель. На начальной стадии с помощью метода клеточных автоматов строится исходная зеренная структура (имитация процесса кристаллизации) представительного макрообъема (ПО), включающая 10 000 кристаллитов с ГЦК-решеткой. Каждое зерно покрывается сеткой точек – маркеров (порядка нескольких сотен),

в которых ориентация решетки совпадает с ориентацией КСК зерна. Далее ПО подвергается деформации простого сдвига (до степени деформации  $\delta$ ). Для расчета напряженно-деформированного состояния и ориентации кристаллитов применяется вязкопластическая модель типа ТБХ. Принимается, что при достижении углов разориентировки хотя бы в двух точках-маркерах соседних зерен значений меньше  $5^\circ$ , эти соседние зерна считаются объединенными в одно зерно. Показано, что в зависимости от исходного закона распределения ориентаций (начальной текстуры) значительная часть (от 20 до 40 %) зерен может объединиться.

Одним из появившихся в последние десятилетия процессов ИПД является так называемое перемешивание трением, используемое при изготовлении деталей из слабо- или нерастворимых компонентов (например, Al+Si, Cu+Ag, Cu+Nb, Cu+Fe и др.). Одним из преимуществ данного процесса является существенное измельчение зеренной структуры. В работе [Gwalani et al., 2021] для изучения механизмов и особенностей деформирования в указанном процессе предлагается теоретическое и экспериментальное исследование модельной задачи циклического сдвигового нагружения. Для моделирования использована прямая упруговязкопластическая модель (реализация в пакете DAMASK), в которой зерна в отсчетной конфигурации представляются совокупностью субзерен. Для определения эволюции ориентаций субзерен принята модель материального поворота с использованием (полного) ортогонального тензора  $\mathbf{r}$ , входящего в разложение градиента места ( $\mathbf{f} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{u}$ ). Отметим, что в [Horstemeyer et al., 2005; Швейкин и др., 2010] показано, что указанный спин близок к устанавливаемому моделью поворота Тейлора. Возникновение разориентаций авторы связывают с возникновением геометрически необходимых дислокаций, для определения полей которых используется соотношение Ная [Nye, 1953].

Для анализа фрагментации монокристаллического алюминиевого образца в процессе плоской прокатки (6 проходов, суммарное обжатие – 90 %) в работе [Wang et al., 2021] использована многомасштабная прямая упруговязкопластическая модель; ротации решетки определяются с помощью модели Тейлора. На верхнем масштабном уровне задача решается с использованием МКЭ с характерными размерами в десятки микрометров (60 и 30 мкм); показано, что в результате деформирования образуется полосовая структура с разнонаправленными разворотами решетки (антисимметричными относительно срединной плоскости прокатываемой полосы). На втором этапе из исследуемой области выделяются две подобласти (одна – в центральной части, вторая – в окрестности поверхности прокатываемой полосы), для которых с использованием кинематических граничных условий, полученных из решения задачи на верхнем масштабном уровне, исследуется деформирование с использованием КЭ-сетки с характерными размерами 2 и 1 мкм (в зависимости от номера прохода). Для области, примыкающей

к поверхности полосы, аналогичные расчеты выполнены с дальнейшим измельчением сетки (с характерным размером  $\sim 0.27$  мкм). Расчеты на измельченной сетке позволили выявить формирование субструктуры, образуемой блоками ячеек.

## 2. Многоуровневые модели, включающие описание диффузионных механизмов

Обработка методами ИПД, особенно трудно-деформируемых сплавов, осуществляется обычно при высоких температурах, при которых существенное влияние на эволюцию мезо- и микроструктуры оказывают процессы возврата и рекристаллизации. Анализ и методам исследования указанных механизмов трансформации зеренной (субзеренной) структуры поликристаллических металлов и сплавов посвящено огромное количество как экспериментальных, так и теоретических работ (см., например, [Bailey, Hirsch, 1960; Doherty et al., 1997; Gottstein et al., 1998; Ponge, Gottstein, 1998; Huang, Humphreys, 2000; Ding, Guo, 2001; Roucoules et al., 2003; Kugler, Turk, 2004; Figueiredo, Langdon, 2010; Hallberg, 2011; Brown, Bammann, 2012; Sakai et al., 2014; Takaki et al., 2014; Habibnejad-korayem et al., 2016; Huang, Logé, 2016; Zhang et al., 2016; Ding et al., 2018; Ilin et al., 2018; Sun et al., 2018; Xiao et al., 2018; Chen et al., 2019; Cao et al., 2019; De Farias Azevedo, Padilha, 2020; Lv J. et al., 2020; Gokuli, Runnels, 2021; Mahnken, Westermann, 2021; и др.]), по обзору которых авторами готовится отдельная публикация. Следует отметить, что в большинстве из указанных выше публикаций для определения параметров напряженно-деформированного состояния, применяемых далее для оценок плотности дислокаций, накопленной энергии, используются либо экспериментальные данные, либо феноменологические модели пластичности (часто – в сочетании с МКЭ). Для описания процессов возврата и рекристаллизации применяются различные модификации либо модели фазового поля, либо метода клеточных автоматов.

Здесь представлена только краткая справка об основных подходах и методах описания указанных механизмов, основанных на многоуровневых моделях и физических теориях пластичности; следует отметить относительную малочисленность публикаций по данной тематике в настоящее время. Для исследования подобных процессов деформирования и сопровождающей их эволюции структуры материала на различных масштабных уровнях эффективным инструментом является совместное применение прямых или самосогласованных моделей в сочетании с методом фазового поля (МФП) [Takaki et al., 2007; Takaki, Tomita, 2010; и др.] или методом клеточных автоматов (МКА) [Raabe, Becker, 2000; Raabe, 2002; Li et al., 2016; и др.]. Одной из первых работ, в которых совместно применены многоуровневые модели, основанные на ФТП и МКА, является статья [Raabe, Becker, 2000]. Для анализа НДС, определения накопленных сдвигов по системам скольжения

(полагаемых пропорциональными плотностям дислокаций на СС) и ротации решеток кристаллитов использована прямая упруговязкопластическая модель, реализованная в пакете ABAQUS. Для описания процесса рекристаллизации принята ранее разработанная модель клеточного автомата [Raabe, 1999], использующая априори заданные параметры состояния ячеек; правила для переключения состояния ячейки автомата (из исходного дефектного (деформированного) состояния в рекристаллизованное) основаны на вероятностном законе (отражающем случайные флуктуации температуры) и уравнении для скорости движения границы рекристаллизованной части кристаллита, предложенного в [Turnbull, 1951] и базирующегося на энергетическом критерии (уменьшения энтальпии Гиббса). Подробно рассмотрена процедура передачи информации о состоянии материала, полученная с использованием прямой модели, в модель клеточного автомата. Приведены результаты применения модели для анализа изменения структуры материала в процессе его статической рекристаллизации после осадки поликристаллического образца из технически чистого алюминия до величины логарифмической деформации 0,434.

В статье [Takaki et al., 2007] для исследования эволюции микроструктуры в процессе деформирования и дальнейшей статической рекристаллизации предлагается совместное применение прямой упруговязкопластической модели и МФП (в формулировке, предложенной в работах [Kobayashi et al., 2000; Warren et al., 2003]). Скорости сдвигов устанавливаются с помощью степенного закона; критические напряжения на СС находятся по плотности дислокаций. Приведены эволюционные уравнения для плотностей СНД и ГНД, скорости изменения которых выражаются через скорости сдвигов. Рассмотрен случай плоской постановки; в МФП использованы два параметра порядка: угол ориентации СС и фазового состояния элемента (кристаллита) – исходное деформированное и рекристаллизованное. Функционал свободной энергии содержит члены, зависящие от параметров порядка и их градиентов; составляющая, характеризующая состояние деформированных кристаллитов, зависит также от суммарной плотности дислокаций. С использованием формализма МФП получены эволюционные уравнения для параметров порядка. Описана процедура численной реализации комплексной модели, для дискретизации по пространству применен МКЭ с адаптивной сеткой, для дискретизации по времени – схема Крэнка – Николсона. Приведены результаты решения тестовой задачи.

Дальнейшее развитие предлагаемого подхода с использованием так называемой модели многофазного поля (ММФП), предложенной в [Steinbach, Pezzolla, 1999], содержится в работе [Takaki, Tomita, 2010]. Следуя формализму, описанному в указанной статье, получены эволюционные уравнения для параметров порядка, определяющих состояние субзерен рассматриваемого поликристаллического агрегата. Рассмотрен

пример (в плоской постановке) применения предлагаемой модели для анализа эволюции зеренной структуры при статической рекристаллизации после предварительной осадки поликристаллического образца на 30, 40 и 50 %. Для определения НДС, субзеренной структуры и запасенной энергии использована прямая упруговязкопластическая модель. Дальнейшее изменение структуры в процессе статической рекристаллизации исследуется с помощью ММФП, реализация алгоритма которой осуществлена с помощью метода конечных разностей. Показано, что увеличение предварительной пластической деформации ведет к смещению пика распределения размеров новых зерен в область более низких значений.

В работе [Chuan et al., 2013] для исследования изменения структуры титанового сплава IMI834 (Ti–5.8Al–4Sn–3.5Zr–0.7Nb–0.5Mo–0.35Si–0.06C) при высокотемпературном деформировании предлагается использовать комбинированный подход, основанный на прямой упруговязкопластической модели и клеточном автомате (КА). Первая из них реализована в пакете ABAQUS и служит для определения параметров напряженно-деформированного состояния и определения плотности дислокаций. Модель КА используется для описания процесса прерывистой (гетерогенной) динамической рекристаллизации. В исходном состоянии исследуемый образец сплава состоит из двух фаз –  $\alpha$  и  $\beta$ . При деформировании наибольшее различие в дефектной структуре имеет место на границах указанных фаз, где образуются области повышенной плотности геометрически необходимых дислокаций, а следовательно, высокой запасенной энергии. Приведено описание алгоритма реализации и процедуры идентификации предлагаемой модели. Показано, что скорость роста и размеры рекристаллизованных зерен в среднем возрастают при повышении температуры и/или снижении скорости деформации, тогда как относительный объем рекристаллизованных зерен растет с уменьшением температуры и ростом скорости деформации. Отмечено удовлетворительное соответствие результатов расчетов и натуральных экспериментов.

В работе [Zhao et al., 2016] для описания эволюции зеренной структуры за счет динамической рекристаллизации предлагается комбинированная модель, базирующаяся на упруговязкопластической модели, реализуемой с помощью быстрого преобразования Фурье [Lebensohn et al., 2012], и модели фазового поля. В самосогласованной модели для определения скоростей сдвига использована дислокационная модель, оперирующая плотностями на системах скольжения как статистически накопленных, так и геометрически необходимых дислокаций [Ma, Roters, 2004; Ma et al., 2006]. Принимается, что рекристаллизация осуществляется путем возникновения и роста зародышей на границах зерен; для описания генерации зародышей используется статистический подход с вероятностями, зависящими от температуры, суммарной плотности дислокаций и разо-



риентации примыкающих к границе кристаллитов. Эволюцию рекристаллизующихся зерен предлагается анализировать с использованием модели фазового поля; введены два параметра порядка, характеризующих состояние материала и определяющих внутреннюю энергию кристаллитов и границ, сформулированы эволюционные уравнения для них. В качестве примера применения модели рассмотрена осадка представительного макрообъема поликристаллической чистой (99,99 %) меди (скорость деформации –  $1,6 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ , температура – 723 К); результаты расчетов качественно соответствуют экспериментальным данным. В то же время отмечается ряд новых эффектов, которые ранее не освещались при описании экспериментальных результатов; в частности, быстрый рост плотности дислокаций в рекристаллизованных зернах непосредственно после их формирования, клинообразную форму образующихся рекристаллизованных зерен, сохраняющую линию тройного стыка. В работе [Zhao P. et al., 2018] представлены и подробно проанализированы результаты применения модели для одноосного сжатия образца в диапазоне температур от 573 до 723 К при постоянной скорости деформации  $1,6 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ .

Подробное описание структуры и алгоритмов реализации комбинированной (прямая упруговязкопластическая модель и МКА) модели, ориентированной на описание горячего деформирования представительного макрообъема поликристаллического материала, рассмотрены в статье [Li et al., 2016]. МКА использован для анализа изменения дислокационной и зеренной структуры кристаллитов за счет рекристаллизации и встроена в прямую модель с «привязкой» тактов МКА к временным шагам вычисления изменения напряженно-деформированного состояния в прямой модели, реализованной в пакете ABAQUS. Движущей силой процесса динамической рекристаллизации является разность накопленных энергий соседних кристаллитов, определяемая по плотностям дислокаций; последние, в свою очередь, находятся из кинетических уравнений для скоростей изменений плотностей дислокаций на СС, вычисляемых по скоростям сдвигов, устанавливаемым в прямой модели. Приведены результаты применения модели для исследования горячей (1273 К и 1323 К) изотермической осадки при трех скоростях деформации (0,01; 0,1 и  $1,0 \text{ с}^{-1}$ ) образцов из поликристаллического титанового сплава TA15 (Ti – 6Al – 2Zr – 1Mo – 1V). Отмечается существенная неоднородность НДС и дислокационной субструктуры в пределах зерен, особенно – в окрестностях тройных и четверных стыков, подтверждаемая экспериментальными данными.

Методика и результаты экспериментального и теоретического исследования поведения образцов из алюминиевого сплава AA6063, подвергаемого горячей осадке при температурах (400÷600°C) и скоростях деформации (0,01; 0,1; 1; 10)  $\text{с}^{-1}$ , приведены в работе [Ali et al., 2017]. Для теоретического анализа использована упруговязкопластическая модель типа ТБХ с ани-

зотропным законом упрочнения, параметры последнего зависят от скорости деформации (а начальное критическое напряжение – еще и от температуры). В указанных условиях в сплаве AA6063 реализуются процессы рекристаллизации, для описания которой применяется вероятностная модель. Вероятность образования зародышей рекристаллизованных зерен зависит от плотности дислокаций в рассматриваемых точках; движущей силой роста рекристаллизованных зерен является разность накопленных энергий, также определяемая плотностями дислокаций исследуемого зерна и его соседей. Плотности дислокаций предлагается определять по критическим напряжениям сдвига на СС. Для идентификации и верификации модели использованы результаты собственных экспериментов авторов.

Серия статей [Zhou et al., 2017, 2018; Tang et al., 2019] посвящена различным аспектам построения и результатам применения комбинированной модели, включающей самосогласованную упруговязкопластическую модель, модели для описания динамической рекристаллизации и эволюции плотностей дислокаций. Критические напряжения по системам скольжения, интенсивность образования зародышей и движущие силы миграции границ рекристаллизующихся зерен устанавливаются по плотностям дислокаций. Модель применена для анализа одноосного сжатия образцов из меди [Zhou et al., 2017] и магниевых сплавов [Zhou et al., 2018; Tang et al., 2019] при повышенных температурах и различных скоростях деформации. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных по кривым «напряжение – деформация», законам распределения зерен по размерам и ориентациям обнаруживает удовлетворительное соответствие.

В серии статей [Ask et al., 2018a, b, 2019] предлагаются различные модификации модели для описания эволюции зеренной структуры поликристаллических материалов, в которых ротации решеток осуществляются как за счет неупругого деформирования, так и рекристаллизации. Для деформационных (внутризеренных) разворотов кристаллитов относительно друг друга используется прямая упруговязкопластическая модель в сочетании с теорией Коссера, в которой «директоры» связаны с кристаллической решеткой. Для описания процесса рекристаллизации (миграции границ) и связанных с ней разворотов на границах зерен применен метод фазового поля. Вывод определяющих и эволюционных уравнений для внутренних переменных осуществлен с использованием термодинамического подхода; подробно рассмотрены формулировки термодинамического потенциала (свободной энергии Гельмгольца) и диссипативной функции. Приведены результаты решения нескольких тестовых задач; показано, что модель качественно удовлетворительно описывает процессы в поликристаллических металлах при горячем деформировании.

Комбинированная модель для описания процесса горячего деформирования представительного объема поликристаллического материала с ГПУ-решеткой (магниевого сплава AZ61) с учетом динамической рекри-

сталлизации рассмотрена в [Tutcuoglu et al., 2019a]. Для анализа НДС используется прямая упруговязкопластическая модель с анизотропным упрочнением и степенным законом для скоростей сдвигов, осуществляемых за счет движения дислокаций и двойникования. Изменение зеренной структуры определяется с помощью статистической модели Монте-Карло; вероятности образования зародышей новых зерен и продвижение границ зерен зависят от накопленной энергии и температуры. Значительная часть статьи посвящена описанию численной процедуры реализации модели, осуществляемой с помощью быстрого преобразования Фурье, в том числе – проверке практической сходимости алгоритма при увеличении сеточного разбиения. Приведен пример применения модели к исследованию деформирования рассматриваемого представительного объема (128 зерен) простым сдвигом, моделирующим процесс РКУ. Показано, что зависимость сдвигового напряжения от сдвиговой деформации имеет волнообразный характер, отражающий конкурирующие процессы деформационного упрочнения и разупрочнения за счет рекристаллизации. В статье [Tutcuoglu et al., 2019b] рассмотрено сопоставление адекватности описанной выше модели и ее модификации, в которой для определения НДС используется статистическая упруговязкопластическая модель типа ТБХ. Сопоставление осуществлено для случая горячей осадки медного образца до величины деформации в 100%. Отмечается, что хотя модель типа ТБХ демонстрирует более значительные отличия от экспериментальных данных (как по зависимости напряжений от деформаций, так и по зеренной структуре), однако обнаруживает приемлемую точность в режимах, когда рекристаллизация реализуется в основном миграцией границ. При этом применение для анализа НДС модели типа ТБХ показывает существенно большую вычислительную эффективность.

Расширение описанной выше ([Lebensohn et al., 2016; Zecevic et al., 2017, 2018]) модели на рассмотрение процессов рекристаллизации поликристаллических образцов с ГЦК- и ОЦК-решетками содержится в работе [Zecevic et al., 2019]. Отметим, что в цитируемых работах флуктуации ориентаций рассматривались в ориентационном пространстве. Для модификации модели с целью применения ее для описания рекристаллизации требуется определение распределения флуктуаций разориентаций в физическом пространстве. Для этого вводится гипотеза о распределении флуктуаций ориентаций в малой окрестности каждой точки зерна в физическом пространстве по изотропному нормальному закону (Гаусса). Если аналогичный закон распределения флуктуаций ориентаций принимается для всех точек в ориентационном пространстве, то для распределения флуктуаций разориентаций субзерен в каждом зерне будет справедлив закон распределения Максвелла. Как и во многих работах по рекристаллизации, принимается, что формирование зародышей новых (рекристаллизованных) зерен и их рост реализуются в областях с большими градиентами ориен-

таций и разностей накопленной энергии. Энергия зерен определяется осреднением по субзернам; принимается гипотеза, что разориентация зерна с соседними зернами пропорциональна осредненной разориентации по всем субзернам, входящим в рассматриваемое зерно. Полагается, что в зерне могут образовываться зародыши новых зерен (субзерна) при достижении в нем критических значений накопленной энергии и разориентаций между субзернами. Зародыши в таких зернах могут возникать либо на границах зерен, либо в полосах переориентации (наличие последних в зернах определяется бимодальным распределением разориентаций субзерен); для описания процесса образования зародышей используется вероятностный подход. Рекристаллизация осуществляется ростом зерен (за счет движения границ зерен), имеющих пониженный уровень накопленной энергии по сравнению со средним по представительному объему поликристалла. Представлено описание алгоритма реализации предлагаемой модели; приведены результаты расчетов для образцов из меди и двух марок стали, подтверждающие адекватность модели. Рассмотренная модель, модифицированная для описания поведения образцов из сплава WE43 на магниевой основе (3,7–4,3% Y, 2,4–4,4% Nd, 0,4% Zr, ГПУ-решетка), представлена в статье [Zecevic et al., 2020]. Приведены результаты расчетов для случая осадки образцов в широких диапазонах температур (300–675 K) и скоростей деформации ( $0.001 \div 10 \text{ с}^{-1}$ ). Отмечается, что скопление частиц вторичной фазы по границам зерен приводит к образованию множества зародышей рекристаллизации, формированию на границах мелкозернистой структуры, что обуславливает реализацию деформирования в режиме сверхпластичности.

Исследование процессов ИПД с использованием МКЭ в лагранжевой постановке сопряжено с известными сложностями вырождения КЭ-сетки. В связи с этим для решения подобных проблем по аналогии с развитыми в гидродинамике подходами (например, различными модификациями методов частиц в ячейках) были разработаны так называемые бессеточные методы [Belytschko et al., 1996; Chen et al., 2017]. В исследовании [Kumar et al., 2020] подробно изложена процедура реализации бессеточного метода на примере исследования РКУ прессования медного образца. Согласно методу анализ процесса деформирования сводится к описанию движения конечного числа материальных точек (представительных макрообъемов (ПО)); поля градиентов деформаций для каждой из них устанавливаются по движению точек в локальной окрестности исследуемой точки. Для описания отклика материала в ПО предлагается использовать двухуровневую упруговязкопластическую модель, основанную на гипотезе Фойгта (Тейлора). Изменение зеренной структуры авторы связывают с процессом динамической рекристаллизации; для описания зарождения новых зерен принят вероятностный подход в сочетании с энергетическим критерием (зарождение нового зерна реализуется в случае достижения в нем критического значения накопленной энер-

гии, определяемой как часть работы на неупругих деформациях). Дальнейшее изменение размера зерна определяется разностью накопленной энергии в рассматриваемом зерне и аналогичной энергии, осредненной по представительному объему (отрицательная разность ведет к увеличению размера зерна, и наоборот). Отмечается качественное соответствие численных результатов экспериментальным данным.

Статья [Zhang et al., 2020] посвящена детальному исследованию эволюции мезо- и микроструктуры при горячем деформировании титановых сплавов. В исходном состоянии сплав состоит из ламелей  $\alpha$  (ГПУ-решетка) и  $\beta$  (ОЦК) фаз. При деформировании за счет термически активируемой диффузии атомов Al и Mo в местах с повышенной плотностью геометрически необходимых дислокаций (ГНД) на поверхностях раздела фаз формируются канавки, которые приводят к разбиению тонких пластин  $\alpha$  фазы на колонии отдельных субзерен с округлой формой. Для описания изменения НДС и плотностей дислокаций применяется прямая упруговязкопластическая модель; скорости изменения плотностей статистически накопленных дислокаций (СНД) на системах скольжения определяются по скоростям сдвига (модель Кокса – Мекинга), плотностей ГНД – по градиентам скоростей сдвига. Для анализа диффузионных процессов используется метод Монте-Карло. Подробно описан алгоритм реализации модели, приведены результаты ее применения (в двумерной постановке) для анализа горячей осадки образца из титанового сплава IM834.

В статье [Tam et al., 2021] приведено описание модели, ориентированной на исследование поведения магниевого сплава AZ31 при одноосном растяжении образцов, вырезанных по нормали к плоскости прокатанной толстолистовой заготовки, под углом  $45^\circ$  к нормали и в поперечном по отношению к направлению прокатки, при температурах ( $25 \div 200^\circ\text{C}$ ) до деформации 30 %. В качестве основы использована самосогласованная упруговязкопластическая модель, учитывающая влияние температуры, деформирование за счет движения краевых дислокаций по разным системам скольжения ГПУ-решетки и двойникование [Tam et al., 2020]. Упрочнение описывается с использованием дислокационной модели; плотности дислокаций на системах скольжения определяются с помощью модели Кокса – Мекинга. Образование зародышей рекристаллизованных зерен полагается возможным при превышении плотности дислокаций критического значения, возникновение зародышей устанавливается случайным законом, вероятность в котором принимается зависящей от поверхностной энергии и скорости образования зародышей. Скорость роста рекристаллизованных зерен зависит от свойств решетки, температуры и движущей силы – разности плотностей дислокаций в исходных и рекристаллизованных зернах. При достижении зародышем размера в 1 % от размера родительского зерна он считается отдельным зерном, для задания ориентации которого также используется случайный выбор оси поворота, вокруг которой решетка нового зерна поворачи-

вается на  $15^\circ$  относительно решетки исходного зерна. Для каждого типа образцов проведены численные эксперименты с тщательным анализом результатов (активность различных систем скольжения и двойникования, доля рекристаллизованных зерен, полюсные фигуры и т.д.). Особое внимание уделено параметрическому анализу подмодели рекристаллизации; так, исследуется влияние на результаты начального размера зародышей, критической плотности дислокаций, закона ротации образовавшихся новых зерен и т.д. Показано качественное соответствие теоретических и экспериментальных результатов.

В последние годы появились работы, в которых для описания процессов деформирования и эволюции структуры материалов используются подходы и методы искусственного интеллекта [Gorji et al., 2020; Sun et al., 2021]. В рамках работ данного направления для определения НДС принимаются ОС в одной из известных формулировок (например, теории пластического течения), параметры которых устанавливаются с помощью искусственных нейронных сетей путем «тренировки» на массивах входных и выходных параметров, полученных либо в натуральных экспериментах [Gorji et al., 2020], либо с применением физически обоснованных моделей (например, многоуровневых [Sun et al., 2021]). С позиций настоящего обзора определенный интерес представляют модели второго типа, поскольку в числе параметров в них фигурируют и характеристики эволюционирующей структуры исследуемых материалов.

В статье [Sun et al., 2021] рассматривается применение подобной модели (второго типа) для анализа деформирования конструкции, реализуемой на двух уровнях. На уровне конструкции расчеты осуществляются с помощью МКЭ и упругопластических ОС, в качестве которых приняты соотношения анизотропной теории пластического течения. В уравнение для определения функции текучести, используемой в последней, входят аналоги 2-го и 3-го инвариантов тензора напряжений Коши с коэффициентами при степенях напряжений, характеризующими анизотропию материала (10 априори неизвестных коэффициентов). Для определения указанных коэффициентов в ОС, применяемых в МКЭ верхнего уровня, используется модель нижнего уровня – представительного объема (ПО). Для описания поведения ПО применяется прямая дислокационно-ориентированная упруговязкопластическая модель с учетом динамической рекристаллизации, которая анализируется с помощью метода клеточных автоматов. Модель ПО служит для формирования большой базы данных для «тренировки», идентификации и верификации ОС верхнего уровня; в качестве входных данных для модели ПО служат параметры произвольного нагружения (деформации, скорости деформации, температура), выходными характеристиками являются материальные параметры, используемые в ОС верхнего уровня, и данные о микроструктуре. Для уточнения коэффициентов ОС используется нейронная сеть; в случае, если при решении краевой задачи для конст-

рукции оказывается, что нагружение существенно отличается от имеющихся в базе данные вариантов, то для новых программ нагружения вновь проводятся расчеты на модели ПО и уточняются коэффициенты ОС. Как представляется, данный подход едва ли обладает высокой эффективностью, поскольку неупруго деформируемые тела обладают памятью, в связи с чем даже находящиеся в пределах заданного допуска отклонения в отклике, определяемом с помощью ОС верхнего уровня, могут привести к весьма значительным ошибкам при расчетах с большими деформациями. В реальных процессах обработки металлов давлением макроточки (представительные макрообъемы) заготовки испытывают сложные и значительно отличающиеся для разных макроточек воздействия, ведущие к существенно различающимся изменениям структуры, а следовательно, и отклика материала.

## Заключение

Представлен краткий обзор работ, посвященных многоуровневым физически-ориентированным моделям для описания эволюции зеренной структуры при интенсивном пластическом деформировании различных металлических сплавов. Больше внимание уделяется работам, в которых исследуются процессы, проводимые при относительно невысоких температурах,

заведомо меньших температур, при которых могут реализовываться твердотельные фазовые переходы. В то же время поскольку реальные технологические процессы, особенно для обработки трудно-деформируемых сплавов, приходится проводить при повышенных температурах, частично затронуты публикации, посвященные моделированию процессов возврата и рекристаллизации. Анализ рассмотренных публикаций позволяет принять на текущий момент наиболее перспективными для описания изменения зеренной структуры при неупругих деформациях многоуровневые модели на базе физических теорий пластичности, которым в силу этого уделено основное внимание в настоящем обзоре. Однако имеющиеся модели данного класса имеют определенные недостатки; в частности, во многих моделях не учитывается реализующийся механизм появления разориентировки границ за счет дисклинаций и/или априори навязывается расположение дислокационных стенок, то есть отсутствует физически обоснованный критерий появления разориентировки. Поэтому стоит задача развития моделей указанного класса. Возможный путь решения этой задачи связан с введением в модели явного описания моментных факторов, элементов дефектной структуры (дислокаций, дисклинаций, границ зерен) и их взаимодействий, на основе которого будут определены развороты кристаллитов (субзерен, фрагментов).

## Библиографический список

1. Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Трусов П.В. Конститутивные соотношения с внутренними переменными: общая структура и приложение к текстурообразованию в поликристаллах // Вестник Пермского государственного технического университета. Математическое моделирование систем и процессов. – 2006. – № 14. – С. 11–26.
2. Белл Дж.Ф. Экспериментальные основы механики деформируемых твердых тел. Ч. 1. Малые деформации. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1984а. – 600 с.
3. Белл Дж.Ф. Экспериментальные основы механики деформируемых твердых тел. Ч. 2. Конечные деформации. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1984б. – 432 с.
4. Бондарь В.С. Неупругость. Варианты теории. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 144 с.
5. Васин Р.А. Некоторые вопросы связи напряжений и деформаций при сложном нагружении // Упругость и неупругость. – М.: МГУ, 1971. – Вып. 1. – С. 59–126.
6. Жермен П. Курс механики сплошных сред. Общая теория. – М.: Высшая школа, 1983. – 399 с.
7. Зубчанинов В.Г. Механика сплошных деформируемых сред. – Тверь: Изд-во ТГТУ, Чудо, 2000. – 703 с.
8. Ильющин А.А. Пластичность. Основы общей математической теории. – М.: АН СССР, 1963. – 272 с.
9. Кан Р.У., Хаазен П. Физическое металловедение: в 3 т. Т. 3. Физико-механические свойства металлов и сплавов. – М.: Металлургия, 1987. – 663 с.
10. Качанов Л.М. Основы теории пластичности. – М.: Наука, 1969. – 420 с.
11. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 304 с.
12. Лахтин Ю.М., Леонтьева В.П. Материаловедение: учебник для высших технических учебных заведений. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Машиностроение, 1990. – 528 с.
13. Лихачев В.А., Малинин В.Г. Структурно-аналитическая теория прочности. – СПб.: Наука, 1993. – 471 с.
14. Носкова Н.И., Мулюков Р.Р. Субмикроструктурные и нанокристаллические металлы и сплавы. – Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – 279 с.
15. Орлова Т.С. и др. Измельчение зеренной структуры поликристаллов в ходе пластической деформации за счет релаксации стыковых дисклинационных конфигураций / Т.С. Орлова, А.А. Назаров, Н.А. Еникеев, И.В. Александров, Р.З. Валиев, А.Е. Романов // Физика твердого тела. – 2005. – Т. 47, вып. 5. – С. 820–826.
16. Останина Т.В., Швейкин А.И., Трусов П.В. Измельчение зеренной структуры металлов и сплавов при интенсивном пластическом деформировании: экспериментальные данные и анализ механизмов измельчения // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2020. – № 3. – С. 85–111. DOI: 10.15593/perm.mech/2020.2.08
17. Панин В.Е. Основы физической мезомеханики // ФММ. – 1998. – Т. 1. – С. 5–22.
18. Панин В.Е. и др. Структурные уровни деформации твердых тел / В.Е. Панин, Ю.В. Гриняев, Т.Ф. Елсукова, А.Г. Иванчин // Изв. вузов. Физика. – 1982. – № 6. – С. 5–27.
19. Полухин П.И., Горелик С.С., Воронцов В.К. Физические основы пластической деформации. – М.: Металлургия, 1982. – 584 с.
20. Романова В.А. и др. Микромеханическая модель эволюции деформационного рельефа в поликристаллических материалах / В.А. Романова, Р.Р. Балахонов, А.В. Панин, Е.Е. Ба

- тухтина, М.С. Казаченок, В.С. Шахиджанов // Физическая мезомеханика. – 2017. – Т. 20, № 3. – С. 81–90.
21. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.
  22. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 1. Жесткопластические и упруго-пластические модели // Вестник ПГТУ. Механика. – 2011а. – №.1. – С. 5–45.
  23. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 2. Вязкопластические и упруго-вязкопластические модели // Вестник ПГТУ. Механика. – 2011б. – №.2. – С. 101–131.
  24. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 3. Теории упрочнения, градиентные теории // Вестник ПГТУ. Механика. – 2011в. – №.3. – С. 146–197.
  25. Трусов П.В., Останина Т.В., Швейкин А.И. Эволюция зеренной структуры металлов и сплавов при интенсивном пластическом деформировании: континуальные модели // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2022. – № 1. – С. 123–155.
  26. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019. – 605 с. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV
  27. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1972. – 408 с.
  28. Швейкин А.И., Ашихмин В.Н., Трусов П.В. О моделях ротации решетки при деформировании металлов // Вестник ПГТУ. Механика. – 2010. – № 1. – С. 111–127.
  29. Ali U. et al. Experimental investigation and through process crystal plasticity-static recrystallization modeling of temperature and strain rate effects during hot compression of AA6063 / U. Ali, D. Odoh, W. Muhammad, A. Brahme, R.K. Mishra, M. Wells, K. Inal // Materials Science & Engineering A. – 2017. – Vol. 700. – P. 374–386. DOI: 10.1016/j.msea.2017.06.030
  30. Aoyagi Y., Shizawa K. Multiscale crystal plasticity modeling based on geometrically necessary crystal defects and simulation on fine-graining for polycrystal // Int. J. Plasticity. – 2007. – Vol. 23. – P. 1022–1040. DOI: 10.1016/j.ijplas.2006.10.009
  31. Ardeljan M., Beyerlein I.J., Knezevic M. A dislocation density based crystal plasticity finite element model: Application to a two-phase polycrystalline HCP/BCC composites // J. Mech. and Phys. Solids. – 2014. – Vol. 66. – P. 16–31. DOI: 10.1016/j.jmps.2014.01.006
  32. Arul Kumar M.A., Mahesh S., Parameswaran V. A 'stack' model of rate-independent polycrystals // Int. J. Plasticity. – 2011. – Vol. 27. – P. 962–981. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.10.010
  33. Arul Kumar M., Mahesh S. Banding in single crystals during plastic deformation // Int. J. Plasticity. – 2012. – Vol. 36. – P. 15–33. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.03.008
  34. Arul Kumar M., Mahesh S. Subdivision and microtexture development in f.c.c. grains during plane strain compression // Int. J. Plasticity. – 2013. – Vol. 44. – P. 95–110. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.12.004
  35. Ask A. et al. A Cosserat crystal plasticity and phase field theory for grain boundary / A. Ask, S. Forest, B. Appolaire, K. Ammar, O.U. Salman // J. Mechanics and Physics of Solids. – 2018а. – Vol. 115. – P. 167–194. DOI: 10.1016/j.jmps.2018.03.006
  36. Ask A. et al. Cosserat crystal plasticity with dislocation driven grain boundary migration / A. Ask, S. Forest, B. Appolaire, K. Ammar // J. Micromechanics and Molecular Physics. – 2018b. – Vol. 3, no. 3–4. – P. 1840009. DOI: 10.1142/S242491301840009X
  37. Ask A. et al. A Cosserat–phase-field theory of crystal plasticity and grain boundary migration at finite deformation / A. Ask, S. Forest, B. Appolaire, K. Ammar // Continuum Mech. Thermodyn. – 2019. – Vol. 31. – P. 1109–1141. DOI: 10.1007/s00161-018-0727-6
  38. Bailey J.E., Hirsch P.B. The dislocation distribution, flow stress, and stored energy in cold-worked polycrystalline silver // Philosophical Magazine. Ser. 8. – 1960. – Vol. 5, iss. 53. – P. 485–497. DOI: 10.1080/14786436008238300
  39. Barnett M.R., Montheillet F. The generation of new high-angle boundaries in aluminium during hot torsion // Acta Materialia. – 2002. – Vol. 50. – P. 2285–2296. DOI: 10.1016/S1359-6454(02)00048-4
  40. Belytschko T. et al. Meshless methods: an overview and recent developments / T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming, P. Krysl // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. – 1996. – Vol. 139, iss. 1. – P. 3–47. DOI: 10.1016/S0045-7825(96)01078-X
  41. Beyerlein I.J., Lebensohn R.A., Tomé C.N. Modeling texture and microstructural evolution in the equal channel angular extrusion process // Materials Science and Engineering. – 2003. – Vol. A345. – P. 122–138. DOI: 10.1016/S0921-5093(02)00457-4
  42. Beyerlein I.J., McCabe R.J., Tome C.N. Effect of microstructure on the nucleation of deformation twins in polycrystalline high-purity magnesium: A multi-scale modeling study // J. Mech. Phys. Solids. – 2011. – Vol. 59. – P. 988–1003. DOI: 10.1016/j.jmps.2011.02.007
  43. Beyerlein I., Knezevic M. Review of microstructure and micromechanism-based constitutive modeling of polycrystals with a low-symmetry crystal structure // J. Mater. Res. – 2018. – Vol. 33, no. 22. – P. 3711–3738. DOI: 10.1557/jmr.2018.333
  44. Bilby B.A., Gardner L.R.T., Stroh A.N. Continuous distributions of dislocations and the theory of plasticity // In: Proc. 9th Int. Congr. Appl. Mech. Bruxelles, 1956. – Universiter de Bruxelles, 1957. – Vol. 8. – P. 35–44.
  45. Brown A.A., Bammann D.J. Validation of a model for static and dynamic recrystallization in metals // Int. J. Plasticity. – 2012. – Vol. 32–33. – P. 17–35. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.12.006
  46. Buchheit T.E., Wellman G.W., Battaile C.C. Investigating the limits of polycrystal plasticity modeling // Int. J. Plasticity. – 2005. – Vol. 21. – P. 221–249. DOI: 10.1016/j.ijplas.2003.10.009
  47. Butler G.C., McDowell D.L. Polycrystal constraint and grain subdivision // Int. J. Plasticity. – 1998. – Vol. 14, no. 8. – P. 703–717. DOI: 10.1016/S0749-6419(98)00018-7
  48. Cantor D., Estrada N., Azéma É. New approach to grain fragmentation for discrete element methods // Geomechanics from Micro to Macro. – 2015. – P. 257–262. DOI: 10.1201/b17395-45
  49. Cao Z. et al. Cellular automaton simulation of dynamic recrystallization behavior in V–10Cr–5Ti alloy under hot deformation conditions / Z. Cao, Y. Sun, C. Zhou, Z. Wan, W. Yang, L. Ren, L. Hu // Trans. Nonferrous Met. Soc. China. – 2019. – Vol. 29 – P. 98–111. DOI: 10.1016/S1003-6326(18)64919-2
  50. Chang H.-J. et al. Texture evolution in FCC metals from initially different misorientation distributions under shear deformation / H.-J. Chang, H.N. Han, S.-J. Park, J.-H. Cho, K.H. Oh // Met. Mater. Int. – 2010. – Vol. 16, no. 4. – P. 553–558. DOI: 10.1007/s12540-010-0805-1
  51. Chen J.-S., Hillman M., Chi S.-W. Meshfree methods: progress made after 20 years // J. Eng. Mech. – 2017. – Vol. 143, iss. 4. – P. 04017001. DOI: 10.1061/(ASCE)EM.1943-7889.0001176
  52. Chen L. et al. Modelling of constitutive relationship, dynamic recrystallization and grain size of 40Cr steel during hot deformation process / L. Chen, W. Sun, J. Lin, G. Zhao, G. Wang //

Results in Physics. – 2019. – Vol. 12. – P. 784–792. DOI: 10.1016/j.rinp.2018.12.046

53. Chuan W., He Y., Wei L.H. Modeling of discontinuous dynamic recrystallization of a near- $\alpha$  titanium alloy IM1834 during isothermal hot compression by combining a cellular automaton model with a crystal plasticity finite element method // Computational Materials Science. – 2013. – Vol. 79. – P. 944–959. DOI: 10.1016/j.commatsci.2013.08.004

54. Dancette S. et al. Multisite model prediction of texture induced anisotropy in brass / S. Dancette, L. Delannay, T. Jodlowski, J. Giovanola // Int. J. Mater. Form. – 2010. – Vol. 3 (1). – P. 251–254. DOI: 10.1007/s12289-010-0754-8

55. Delannay L. Observation and modelling of grain interactions and grain subdivision in rolled cubic polycrystals // PhD in Materials Engineering at the Katholieke Universiteit Leuven (K.U. Leuven, Belgium). – 2001. – 181 p.

56. Diehl M. Review and outlook: mechanical, thermodynamic, and kinetic continuum modeling of metallic materials at the grain scale // MRS Communications. – 2017. – Vol. 7. – P. 735–746. DOI: 10.1557/mrc.2017.98

57. Ding H., Shen N., Shin Y.C. Predictive modeling of grain refinement during multi-pass cold rolling // J. Materials Processing Technology. – 2012. – Vol. 212. – P. 1003–1013. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2011.12.005

58. Ding R., Guo Z.X. Coupled quantitative simulation of microstructural evolution and plastic flow during dynamic recrystallization // Acta mater. – 2001. – Vol. 49, iss. 16. – P. 3163–3175. DOI: 10.1016/S1359-6454(01)00233-6

59. Ding S., Khan S.A., Yanagimoto J. Constitutive descriptions and microstructure evolution of extruded A5083 aluminum alloy during hot compression // Materials Science & Engineering A. – 2018. – Vol. 728. – P. 133–143. DOI: 10.1016/j.msea.2018.05.025

60. Doherty R.D. et al. Current issues in recrystallization: a review / R.D. Doherty, D.A. Hughes, F.J. Humphreys, J.J. Jonas, D. Juul Jensen, M.E. Kassner, W.E. King, T.R. McNelley, H.J. McQueen, A.D. Rollett // Materials Science and Engineering. – 1997. – Vol. A238. – P. 219–274. DOI: 10.1016/S0921-5093(97)00424-3

61. Enikeev N.A. et al. Modelling grain refinement in fcc metals during equal-channel angular pressing by route “C” / N.A. Enikeev, M.F. Abdullin, A.A. Nazarov, I.J. Beyerlein // Int. J. Mat. Res. (formerly Z. Metallkd.). – 2007. – Vol. 98, no. 3. – P. 167–171. DOI: 10.3139/146.101451

62. Estrin Y. [et al.] A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation / Estrin Y., Tóth L.S., Molinari A., Bréchet Y. // Acta mater. – 1998. – Vol. 46, no. 15. – P. 5509–5522. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00196-7

63. Estrin Y., Kim H.S. Modelling microstructure evolution toward ultrafine crystallinity produced by severe plastic deformation // J. Mater. Sci. – 2007. – Vol. 42. – P. 1512–1516. DOI: 10.1007/s10853-006-1282-2

64. De Farias Azevedo C.R., Padilha A.F. History of the recrystallisation of metals: A summary of ideas and findings until the 1950s // Materials Research. – 2020. – Vol. 23, iss. 2. – e20200082 (15 p). DOI: 10.1590/1980-5373-MR-2020-0082

65. Figueiredo R.B., Langdon T.G. Grain refinement and mechanical behavior of a magnesium alloy processed by ECAP // J. Mater. Sci. – 2010. – Vol. 45. – P. 4827–4836. DOI: 10.1007/s10853-010-4589-y

66. Frydrych K. Simulations of grain refinement in various steels using the three-scale crystal plasticity model // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2019. – Vol. 50A. – P. 4913–4919. DOI: 10.1007/s11661-019-05373-z

67. Frydrych K., Kowalczyk-Gajewska K. A three-scale crystal plasticity model accounting for grain refinement in fcc metals subjected to severe plastic deformations // Materials Science & Engineering. – 2016. – Vol. A658. – P. 490–502. DOI: 10.1016/j.msea.2016.01.101

68. Frydrych K., Kowalczyk-Gajewska K. Microstructure evolution in cold-rolled pure titanium: Modeling by the three-scale crystal plasticity approach accounting for twinning // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2018. – Vol. 49A. – P. 3610–3623. DOI: 10.1007/s11661-018-4676-2

69. Gokuli M., Runnels B. Multiphase field modeling of grain boundary migration mediated by emergent disconnections // Acta Materialia. – 2021. – Vol. 217. – P. 117149. DOI: 10.1016/j.actamat.2021.117149

70. Gorji M.B. et al. On the potential of recurrent neural networks for modeling path dependent plasticity / Gorji M.B., Mozaffar M., Heidenreich J.N., Cao J., Mohr D. // J. Mechanics and Physics of Solids. – 2020. – Vol. 143. – P. 103972. DOI: 10.1016/j.jmps.2020.103972

71. Gottstein G., Molodov D.A., Shvindlerman L.S. Grain boundary migration in metals: recent developments // Interface Sci. – 1998. – Vol. 6. – P. 7–22. DOI: 10.1023/A:1008641617937

72. Gu C.F., Toth L.S. Texture development and grain refinement in non-equal-channel angular-pressed Al // Scripta Materialia. – 2012. – Vol. 67. – P. 33–36. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2012.03.014

73. Guo X., Seefeldt M. Modeling grain fragmentation and deformation textures for titanium using a combined approach of the viscoplastic self-consistent model and a shear fluctuation model // J. Mater. Sci. – 2017. – Vol. 52. – P. 8132–8148. DOI: 10.1007/s10853-017-1021-x

74. Gwalani B. et al. Lattice misorientation evolution and grain refinement in Al-Si alloys under high-strain shear deformation / B. Gwalani, W. Fu, M. Olszta, J. Silverstein, D.R. Yadav, P. Manimunda, A. Guzman, K. Xie, A. Rohatgi, S. Mathaudhu, C.A. Powell, P.V. Sushko, Y. Li, A. Devaraj // Materialia. – 2021. – Vol. 18. – P. 101146. DOI: 10.1016/j.mta.2021.101146

75. Nabarro F.R.N., Basinski Z.S., Holt D.B. The plasticity of pure single crystals // Advances in Physics. – 1964. – Vol. 13, iss. 50. – P. 193–323, DOI: 10.1080/00018736400101031

76. Habibnejad-korayem M. et al. Modelling of uniaxially pre-strained and annealed AZ31 magnesium sheet based on microstructural considerations / M. Habibnejad-korayem, M.K. Jain, H.S. Zurob, R.K. Mishra // Acta Materialia. – 2016. – Vol. 113. – P. 155–169. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.04.001

77. Hall E.O. The deformation and aging of mild steel. III. Discussion and results // Proc. Phys. Soc. of London. – 1951. – Vol. B64. – P. 747–753. DOI: 10.1088/0370-1301/64/9/303

78. Hallberg H. Approaches to modeling of recrystallization // Metals. – 2011. – Vol. 1, no. 1. – P. 16–48. DOI: 10.3390/met1010016

79. Halphen B., Nguyen Q. Sur les matériaux standard généralisés // J. Mécanique. – 1975. – Vol. 14. – P. 39–63.

80. Hassani-Gangaraj S.M. et al. Experimental assessment and simulation of surface nanocrystallization by severe shot peening / S.M. Hassani-Gangaraj, K.S. Cho, H.-J.L. Voigt, M. Guagliano, C.A. Schuh // Acta Materialia. – 2015. – Vol. 97. – P. 105–115. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.06.054

81. Hines J.A., Vecchio K.S., Ahzi S. A model for microstructure evolution in adiabatic shear bands // Metallurgical and Materials Transactions A. – 1998. – Vol. 29. – P. 191–203. DOI: 10.1007/s11661-998-0172-4

82. Holt D.L. Dislocation cell formation in metals // J. Applied Physics. – 1970. – Vol. 41, no. 8. – P. 3197–3201. DOI: 10.1063/1.1659399

83. Horstemeyer M.F. Multiscale modeling: A review // *Practical Aspects of Computational Chemistry* // J. Leszczynski and M.K. Shukla (eds.). – Springer Science + Business Media B.V., 2009. – P. 87–135. DOI: 10.1007/978-90-481-2687-3\_4
84. Horstemeyer M.F., McDowell D.L. Modeling effects of dislocation substructure in polycrystal elastoviscoplasticity // *Mechanics of Materials*. – 1998. – Vol. 27. – P. 145–163. DOI: 10.1016/S0167-6636(97)00037-9
85. Horstemeyer M.F., Potirniche G.P., Marin E.B. Crystal plasticity // In *Handbook of Materials Modeling* / S. Yip (ed.). – Springer: Netherlands, 2005. – P. 1133–1149.
86. Van Houtte P. Crystal plasticity based modelling of deformation textures // *Microstructure and Texture in Steels* / Haldar, A., Suwas S., Bhattacharjee D. (eds.). – Springer, 2009. – P. 209–224.
87. Van Houtte P., Delannay L., Samajdar I. Quantitative prediction of cold roll-ing textures in low-carbon steel by means of the LAMEL model // *Textures and Microstructures*. – 1999. – Vol. 31. – P. 109–149. DOI: 10.1155/TSM.31.109
88. Huang Y., Humphreys F.J. Subgrain growth and low angle boundary mobility in aluminium crystals of orientation  $\{110\}<001>$  // *Acta mater.* – 2000. – Vol. 48. – P. 2017–2030. DOI: 10.1016/S1359-6454(99)00418-8
89. Huang K., Logé R.E. A review of dynamic recrystallization phenomena in metallic materials // *Materials and Design*. – 2016. – Vol. 111. – P. 548–574. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.09.012
90. Ilin D.N. et al. Full field modeling of recrystallization: Effect of intragranular strain gradients on grain boundary shape and kinetics / D.N. Ilin, N. Bozzolo, T. Toulorge, M. Bernacki // *Computational Materials Science*. – 2018. – Vol. 150. – P. 149–161. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.03.063
91. Jaumann G. Geschlossenes System physikalischer und chemischer Differential-gesetze // *Sitzber. Akad. Wiss. Wien, Abt. IIa*. – 1911. – B. 120. – S. 385–530.
92. Kim H.-K., Oh S.-I. An interfacial energy incorporated couple stress crystal plasticity and the finite element simulation of grain subdivision // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2012. – Vol. 60. – P. 1815–1841. DOI: 10.1016/j.jmps.2012. 07.004
93. Knezevic M., Beyerlein I. Multiscale modeling of microstructure-property relationships of polycrystalline metals during thermo-mechanical deformation // *Adv. Eng. Mater.* – 2018. – Vol. 20. – P. 1700956. DOI: 10.1002/adem.201700956
94. Kobaiassy A.H. et al. Continuum dislocation dynamics-based grain fragmentation modeling / A.H. Kobaiassy, G. Ayoub, L.S. Toth, S. Mustapha, M. Shehadeh // *Int. J. Plasticity*. – 2019. – Vol. 114. – P. 252–271. DOI: 10.1016/j.ijplas.2018.11.006
95. Kobayashi R., Warren J.A., Carter W.C. A continuum model of grain boundaries // *Physica D*. – 2000. – Vol. 140. – P. 141–150. DOI: 10.1016/S0167-2789(00)00023-3
96. Kroner E. Allgemeine kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen // *Arch. Rational Mech. Anal.* – 1959. – B. 4 (1). – S. 273–334. DOI: 10.1007/BF00281393
97. Kugler G., Turk R. Modeling the dynamic recrystallization under multi-stage hot deformation // *Acta Materialia*. – 2004. – Vol. 52. – P. 4659–4668. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.06.022
98. Kuhlmann-Wilsdorf D., Hansen N. Geometrically necessary, incidental and subgrain boundaries // *Scripta Metallurgica et Materialia*. – 1991. – Vol. 25, no. 7. – P. 1557–1562. DOI: 10.1016/0956-716X(91)90451-6
99. Kuhlmann-Wilsdorf D., Nine H.D. Striations on copper single crystals subjected to torsional fatigue. II. On the mechanism of fatigue striation formation and fatigue failure at low strain amplitudes // *J. Applied Physics*. – 1967. – Vol. 38, no. 4. – P. 1683–1693. DOI: 10.1063/1.1709742
100. Kumar M.A., Mahesh S. Subdivision and microtexture development in f.c.c. grains during plane strain compression // *Int. J. Plasticity*. – 2013. – Vol. 44. – P. 95–110. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.12.004
101. Kumar S. et al. A meshless multiscale approach to modeling severe plastic deformation of metals: Application to ECAE of pure copper / S. Kumar, A.D. Tutcuoglu, Y. Hollenweger, D.M. Kochmann // *Computational Materials Science*. – 2020. – Vol. 173. – 109329 (17 p.). DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.109329
102. Latypov M.I. et al. Modeling and characterization of texture evolution in twist extrusion / M.I. Latypov, M.-G. Lee, Y. Beygelzimer, D. Prilepo, Y. Gusar, H.S. Kim // *Metallurgical and Materials Trans. A*. – 2016. – Vol. 47A. – P. 1248–1260. DOI: 10.1007/s11661-015-3298-1
103. Lebensohn R.A., Kanjarla A.K., Eisenlohr P. An elasto-viscoplastic formulation based on fast Fourier transforms for the prediction of micromechanical fields in polycrystalline materials // *Int. J. Plasticity*. – 2012. – Vol. 32–33. – P. 59–69. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.12.005
104. Lebensohn R.A., Liu Y., Ponte Castañeda P. On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals: comparison with full-field numerical simulations // *Acta Materialia*. – 2004. – Vol. 52. – P. 5347–5361. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.07.040
105. Lebensohn R.A., Tomé C.N. A self-consistent anisotropic approach // *Acta Metall.* – 1993. – Vol. 41. – P. 2611–2624. DOI: 10.1016/0956-7151(93)90130-K
106. Lebensohn R.A., Tomé C.N., Ponte Castañeda P. Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations // *Philosophical Magazine*. – 2007. – Vol. 87, no. 28. – P. 4287–4322. DOI: 10.1080/14786430701432619
107. Lebensohn R.A. et al. Average intragranular misorientation trends in polycrystalline materials predicted by a viscoplastic self-consistent approach / R.A. Lebensohn, M. Zecevic, M. Knezevic, R.J. McCabe // *Acta Materialia*. – 2016. – Vol. 104. – P. 228–236. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.10.035
108. Lee E.H. Elastic plastic deformation at finite strain // *ASME J. Appl. Mech.* – 1969. – Vol. 36. – P. 1–6. DOI: 10.1115/1.3564580
109. Lee E.H., Liu D.T. Finite-strain elastic-plastic theory with application to plane-wave analysis // *J. Appl. Phys.* – 1967. – Vol. 38. – P. 19–27. DOI: 10.1063/1.1708953
110. Leffers T. Lattice rotations during plastic deformation with grain subdivision // *Materials Science Forum*. – 1994. – Vol. 157–162. – P. 1815–1820. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.157-162.1815
111. Leffers T. A model for rolling deformation with grain subdivision. P.I: The initial stage // *Int. J. Plasticity*. – 2001a. – Vol. 17. – P. 469–489. DOI: 10.1016/S0749-6419(00)00059-0
112. Leffers T. A model for rolling deformation with grain subdivision. P. II: The subsequent stage // *Int. J. Plasticity*. – 2001b. – Vol. 17. – P. 491–511. DOI: 10.1016/S0749-6419(00)00060-7
113. Lemiale V. et al. Grain refinement under high strain rate impact: A numerical approach / V. Lemiale, Y. Estrin, H.S. Kim, R. O'Donnell // *Computational Materials Science*. – 2010. – Vol. 48. – P. 124–132. DOI: 10.1016/j.commatsci.2009.12.018
114. Li H., Sun X., Yang H. A three-dimensional cellular automata-crystal plasticity finite element model for predicting the multiscale interaction among heterogeneous deformation, DRX microstructural evolution and mechanical responses in titanium alloys // *Int. J. Plasticity*. – 2016. – Vol. 87. – P. 154–180. DOI: 10.1016/j.ijplas.2016.09.008
115. Li S. Dependencies of grain refinement on processing route and die angle in equal channel angular extrusion of bcc mate-

- rials // *Computational Materials Science*. – 2009. – Vol. 46. – P. 1044–1050. DOI: 10.1016/j.commatsci.2009.05.010
116. Li S. Application of crystal plasticity modeling in equal channel angular extrusion // *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*. – 2013. – Vol. 23. – P. 170–179. DOI: 10.1016/S1003-6326(13)62444-9.
117. Li S., Li X., Yang L. Role of strain path change in grain refinement by severe plastic deformation: A case study of equal channel angular extrusion // *Acta Materialia*. – 2013. – Vol. 61. – P. 4398–4413. DOI: 10.1016/j.actamat.2013.04.010
118. Lin T.H. Analysis of elastic and plastic strains of a face-centered cubic crystal // *J. Mech. Phys. Solids*. – 1957. – Vol. 5, iss. 1. – P. 143–149. DOI: 10.1016/0022-5096(57)90058-3
119. Liu Y., Ponte Castañeda P. Second-order theory for the effective behavior and field fluctuations in viscoplastic polycrystals // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2004. – Vol. 52. – P. 467–495. DOI: 10.1016/S0022-5096(03)00078-4
120. Lv J. et al. A review of microstructural evolution and modelling of aluminium alloys under hot forming conditions / J. Lv, J.-H. Zheng, V.A. Yardley, Z. Shi, J. Lin // *Metals*. – 2020. – Vol. 10. – P. 1516 (33 p.). DOI: 10.3390/met10111516
121. Ma A., Roters F.A. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals // *Acta Materialia*. – 2004. – Vol. 52 – P. 3603–3612. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.04.012
122. Ma A., Roters F., Raabe D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations // *Acta Materialia*. – 2006. – Vol. 54 – P. 2169–2179. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.01.005
123. Mahnken R., Westermann H. A non-equilibrium thermodynamic framework for viscoplasticity incorporating dynamic recrystallization at large strains // *Int. J. Plasticity*. – 2021. – Vol. 142. – P. 102988. DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.102988
124. Mao W. Modeling of rolling texture in aluminum // *Materials Science and Engineering*. – 1998. – Vol. A257. – P. 171–177. DOI: 10.1016/S0921-5093(98)00836-3
125. Mandel J. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques // *Int. J. Solids Structures*. – 1973. – Vol. 9. – P. 725–740. DOI: 10.1016/0020-7683(73)90120-0
126. Marin E.B., Dawson P.R. On modelling the elasto-viscoplastic response of metals using polycrystal plasticity // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* – 1998a. – Vol. 165. – P. 1–21. DOI: 10.1016/S0045-7825(98)00034-6
127. Marin E.B., Dawson P.R. Elastoplastic finite element analyses of metal deformations using polycrystal constitutive models // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* – 1998b. – Vol. 165. – P. 23–41. DOI: 10.1016/S0045-7825(98)00033-4
128. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893–2013) // *Mechanics Research Communications*. – 2015. – Vol. 69. – P. 79–86. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2015.06.00
129. McDowell D.L. Internal state variable theory // *Handbook of Materials Modeling / S. Yip (ed.)*. – Springer, 2005. – P. 1151–1169. DOI: 10.1007/978-1-4020-3286-8\_58
130. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity // *Int. J. Plasticity*. – 2010. – Vol. 26. – P. 1280–1309. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.02.008
131. M'Guil S. et al. A comparison of viscoplastic intermediate approaches for deformation texture evolution in face-centered cubic polycrystals / S. M'Guil, S. Ahzi, H. Youssef, M. Baniassadi, J.J. Gracio // *Acta Mater.* – 2009. – Vol. 57. – P. 2496–2508. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.02.001.
132. Mika D.P., Dawson P.R. Polycrystal plasticity modeling of intracrystalline boundary textures // *Acta mater.* – 1999. – Vol. 47, no. 4. – P. 1355–1369. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00386-3
133. Mughrabi H. Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals // *Acta Metallurgica*. – 1983. – Vol. 31, iss. 9. – P. 1367–1379. DOI: 10.1016/0001-6160(83)90007-X
134. Mughrabi H. Dislocation clustering and long-range internal stresses in monotonically and cyclically deformed metal crystals // *Rev. Phys. Appl. (Paris)*. – 1988. – Vol. 23, no. 4. – P. 367–379. DOI: 10.1051/rphysap:01988002304036700
135. Nabarro F.R.N., Basinski Z.S., Holt D.B. The plasticity of pure single crystals // *Advances in Physics*. – 1964. – Vol. 13, iss. 50. – P. 193–323, DOI: 10.1080/00018736400101031
136. Nazarov A.A. et al. Modeling of grain subdivision during severe plastic deformation by VPSC method combined with disclination analysis / A.A. Nazarov, N.A. Enikeev, A.E. Romanov, T.S. Orlova, I.V. Alexandrov, I.J. Beyerlein // In: *Nanostructured Materials by High-Pressure Severe Plastic Deformation*. Eds. Y.T. Zhu and V. Varyukhin. – Springer, 2006. – P. 61–66. DOI: 10.1007/1-4020-3923-9\_8
137. Nine H.D. Striations on copper single crystals subjected to torsional fatigue. I. A test of the relation of cross slip to fatigue striation formation // *J. Applied Physics*. – 1967. – Vol. 38, no. 4. – P. 1678–1682. DOI: 10.1063/1.1709741
138. Nye J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals // *Acta Metall.* – 1953. – Vol. 1. – P. 153–162. DOI: 10.1016/0001-6160(53)90054-6
139. Ortiz M., Repetto E.A. Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals // *J. Mechanics and Physics of Solids*. – 1999. – Vol. 49. – P. 397–462. DOI: 10.1016/S0022-5096(97)00096-3
140. Ortiz M., Repetto E.A., Stainier L. A theory of subgrain dislocation structures // *J. Mechanics and Physics of Solids*. – 2000. – Vol. 48. – P. 2077–2114. DOI: 10.1016/S0022-5096(99)00104-0
141. Ostapovets A. et al. New misorientation scheme for a visco-plastic self-consistent model: Equal channel angular pressing of magnesium single crystals / A. Ostapovets, P. Šedá, A. Jäger, P. Lejček // *Int. J. Plasticity*. – 2012. – Vol. 29. – P. 1–12. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.07.006
142. Petch N.J. The cleavage strength of polycrystals // *J. Iron and Steel Inst.* – 1953. – Vol. 174. – P. 25–28.
143. Ponge D., Gottstein G. Necklace formation during dynamic recrystallization: mechanisms and impact on flow behavior // *Acta mater.* – 1998. – Vol. 46, no. 1. – P. 69–80. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.812.167
144. Ponte Castañeda P. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations: I–theory // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2002. – Vol. 50. – P. 737–757. DOI: 10.1016/S0022-5096(01)00099-0
145. Quey R., Dawson P.R., Barbe F. Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* – 2011. – Vol. 200. – P. 1729–1745. DOI: 10.1016/j.cma.2011.01.002
146. Quey R., Dawson P.R., Driver J.H. Grain orientation fragmentation in hot-deformed aluminium: Experiment and simulation // *J. Mechanics and Physics of Solids*. – 2012. – Vol. 60. – P. 509–524. DOI: 10.1016/j.jmps.2011.11.005
147. Raabe D. Texture simulation for hot rolling of aluminium by use of a Taylor model considering grain interactions // *Acta Metall. Mater.* – 1995. – Vol. 43, no. 3. – P. 1023–1028. DOI: 10.1016/0956-7151(94)00302-X
148. Raabe D. Introduction of a scalable three-dimensional cellular automaton with a probabilistic switching rule for the



discrete mesoscale simulation of recrystallization phenomena // *Phil. Mag. A.* – 1999. – Vol. 79, iss. 10. – P. 2339–2358. – DOI: 10.1080/01418619908214288

149. Raabe D. Cellular automata in materials science with particular reference to recrystallization simulation // *Annu. Rev. Mater. Res.* – 2002. – Vol. 32. – P. 53–76. DOI: 10.1146/annurev.matsci.32.090601.152855

150. Raabe D., Becker R.C. Coupling of a crystal plasticity finite-element model with a probabilistic cellular automaton for simulating primary static recrystallization in aluminium // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2000. – Vol. 8. – P. 445–462. DOI: 10.1088/0965-0393/8/4/304

151. Raabe D., Zhao Z., Mao W. On the dependence of in-grain subdivision and deformation texture of aluminum on grain interaction // *Acta Materialia.* – 2002. – Vol. 50. – P. 4379–4394. DOI: 10.1016/S1359-6454(02)00276-8

152. Rezvanian O. Grain subdivision and microstructural interfacial scale effects in polycrystalline materials. PhD (Mechanical Engineering). – North Carolina State University (USA), 2006. – 157 p.

153. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Microstructural modeling of grain subdivision and large strain inhomogeneous deformation modes in f.c.c. crystalline materials // *Mechanics of Materials.* – 2006. – Vol. 38. – P. 1159–1169. DOI: 10.1016/j.mechmat.2005.12.006

154. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Statistically stored, geometrically necessary and grain boundary dislocation densities: microstructural representation and modelling // *Proc. R. Soc. A.* – 2007. – Vol. 463. – P. 2833–2853. DOI: 10.1098/rspa.2007.0020

155. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Microstructural modeling in f.c.c. crystalline materials in a unified dislocation-density framework // *Materials Science and Engineering A.* – 2008. – Vol. 494. – P. 80–85. DOI: 10.1016/j.msea.2007.10.091

156. Rice J.R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity // *J. Mech. Phys. Solids.* – 1971. – Vol. 19. – P. 433–455. DOI: 10.1016/0022-5096(71)90010-X

157. Rice J.R. Continuum mechanics and thermodynamics of plasticity in relation to microscale deformation mechanisms // *Constitutive Equations in Plasticity* / ed. A.S. Argon. – Cambridge, Mass.: M.I.T. Press, 1975. – P. 23–75.

158. Roters F. *Advanced Material Models for the Crystal Plasticity Finite Element Method: Development of a general CPFEM framework.* – RWTH Aachen: Aachen, 2011. – 226 p.

159. Roters F. et al. *Crystal Plasticity Finite Element Methods: in Materials Science and Engineering* / F. Roters, P. Eisenlohr, T.R. Bieler, D. Raabe. – WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA., 2010a. – 209 p. DOI: 10.1002/9783527631483

160. Roters F. et al. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, T.R. Bieler, D. Raabe // *Acta Materialia.* – 2010b. – Vol. 58. – P. 1152–1211. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.10.058.

161. Roucoules C., Pietrzyk M., Hodgson P.D. Analysis of work hardening and recrystallization during the hot working of steel using a statistically based internal variable model // *Materials Science and Engineering A.* – 2003. – Vol. 339. – P. 1–9. DOI: 10.1016/S0921-5093(02)00120-X

162. Sakai T. et al. Dynamic and post-dynamic recrystallization under hot, cold and severe plastic deformation conditions / T. Sakai, A. Belyakov, R. Kaibyshev, H. Miura, J.J. Jonas // *Progress in Materials Science.* – 2014. – Vol. 60. – P. 130–207. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2013.09.002

163. Sedighiani K. et al. Large-deformation crystal plasticity simulation of microstructure and microtexture evolution through adaptive remeshing / Sedighiani K., Shah V., Traka K., Diehl M., Roters F., Sietsma J., Raabe D. // *Int. J. Plasticity.* – 2021. – Vol. 146. – P. 103078. DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.103078

164. Shah P.N., Shin Y.C., Sun T. Investigation on temporal evolution of the grain refinement in copper under high strain rate loading via in-situ synchrotron measurement and predictive modeling // *Acta Materialia.* – 2018. – Vol. 143. – P. 43–54. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.10.005

165. Sheikh H., Ebrahimi R. Modeling the effect of strain reversal on grain refinement and crystallographic texture during simple shear extrusion // *Int. J. Solids and Structures.* – 2017. – Vol. 126–127. – P. 175–186. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2017.08.004

166. Sivakumar S.M., Ortiz M. Microstructure evolution in the equal channel angular extrusion process // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* – 2004. – Vol. 193. – P. 5177–5194. DOI: 10.1016/j.cma.2004.01.036

167. Steinbach I., Pezzolla F. A generalized field method for multiphase transformations using interface fields // *Physica D.* – 1999. – Vol. 134. – P. 385–393. DOI: 10.1016/S0167-2789(99)00129-3

168. Sun X. et al. Cross-scale prediction from RVE to component / X. Sun, H. Li, M. Zhan, J. Zhou, J. Zhang, J. Gao // *Int. J. Plasticity.* – 2021. – Vol. 140. – P. 102973. DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.102973

169. Sun Z.C. et al. Modeling of continuous dynamic recrystallization of Al–Zn–Cu–Mg alloy during hot deformation based on the internal-state-variable (ISV) method / Z.C. Sun, H.L. Wu, J. Cao, Z.K. Yin // *Int. J. Plasticity.* – 2018. – Vol. 106. – P. 73–87. DOI: 10.1016/j.ijplas.2018.03.002

170. Svyetlichnyy D.S. Modeling of grain refinement by cellular automata // *Computational Materials Science.* – 2013. – Vol. 77. – P. 408–416. DOI: 10.1016/j.commatsci.2013.04.065

171. Svyetlichnyy D.S., Muszka K., Majta J. Three-dimensional frontal cellular automata modeling of the grain refinement during severe plastic deformation of microalloyed steel // *Computational Materials Science.* – 2015. – Vol. 102. – P. 159–166. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.02.034

172. Takaki T. et al. Phase-field model during static recrystallization based on crystal-plasticity theory / T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Higa, Y. Tomita // *J. Computer-Aided Mater. Des.* – 2007. – Vol. 14. – P. 75–84. DOI: 10.1007/s10820-007-9083-8

173. Takaki T., Tomita Y. Static recrystallization simulations starting from predicted deformation microstructure by coupling multi-phase-field method and finite element method based on crystal plasticity // *Int. J. Mech. Sciences.* – 2010. – Vol. 52. – P. 320–328. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2009.09.037

174. Takaki T. et al. Multiscale modeling of hot-working with dynamic recrystallization by coupling microstructure evolution and macroscopic mechanical behavior / T. Takaki, C. Yoshimoto, A. Yamanaka, Y. Tomita // *Int. J. Plasticity.* – 2014. – Vol. 52. – P. 105–116. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.09.001

175. Tam K.J. et al. Modelling the temperature and texture effects on the deformation mechanisms of magnesium alloy AZ31 / K.J. Tam, M.W. Vaughan, L. Shen, M. Knezevic, I. Karaman, G. Proust // *Int. J. Mechanical Sciences.* – 2020. – Vol. 182. – P. 105727. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2020.105727

176. Tam K.J. et al. Modelling dynamic recrystallisation in magnesium alloy AZ31 / K.J. Tam, M.W. Vaughan, L. Shen, M. Knezevic, I. Karaman, G. Proust // *Int. J. Plasticity.* – 2021. – Vol. 142. – P. 102995. DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.102995

177. Tang T. et al. A polycrystal plasticity based thermo-mechanical-dynamic recrystallization coupled modeling

- method and its application to light weight alloys / T. Tang, G. Zhou, Z. Li, D. Li, L. Peng, Y. Peng, P. Wu, H. Wang, M.-G. Lee // *Int. J. Plasticity*. – 2019. – Vol. 116. – P. 159–191. DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.01.001
178. Taylor G.I. Plastic strain in metals // *J. Inst. Metals*. – 1938. – Vol. 62. – P. 307–324.
179. Tohidlou E., Bertram A. Effect of strain hardening on sub-grain formation during ECAP process // *Mechanics of Materials*. – 2019. – Vol. 137. P. 103077. DOI: 10.1016/j.mechmat.2019.103077
180. Toth L.S., Gu C.F. Modeling of disorientation axis distribution in severely deformed copper // *Scripta Materialia*. – 2013. – Vol. 69. – P. 183–186. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2013.03.025
181. Toth L.S., Gu C. Ultrafine-grain metals by severe plastic deformation // *Materials Characterization*. – 2014. – Vol. 92. – P. 1–14. DOI: 10.1016/j.matchar.2014.02.003
182. Toth L.S. et al. Texture development and length changes in copper bars subjected to free end torsion / L.S. Toth, J.J. Jonas, D. Daniel, J.A. Bailey // *Textures and Microstructures*. – 1992. – Vol. 19. – P. 245–262. DOI: 10.1155/TSM.19.245
183. Tóth L.S., Molinari A., Estrin Y. Strain hardening at large strains as predicted by dislocation based polycrystal plasticity model // *Trans. ASME. J. Engng Materials and Technology*. – 2002. – Vol. 124. – P. 71–77. DOI: 10.1115/1.1421350
184. Tóth L.S. et al. A model of grain fragmentation based on lattice curvature / L.S. Tóth, Y. Estrin, R. Lapovok, C. Gu // *Acta Materialia*. – 2010. – Vol. 58. – P. 1782–1794. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.11.020
185. Toupin R.A. Elastic materials with couple-stresses // *Arch. Rational Mech. Anal.* – 1962. – Vol. 11. – P. 385–414. DOI: 10.1007/BF00253945
186. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Statistical models // *Physical Mesomechanics*. – 2013a. – Vol. 16, Iss. 1. – P. 23–33. DOI: 10.1134/S102995991301003
187. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Direct models // *Physical Mesomechanics*. – 2013b. – Vol. 16, iss. 2. – P. 99–124. DOI: 10.1134/S1029959913020021
188. Turnbull D. Theory of grain boundary migration rates // *JOM*. – 1951. – Vol. 3. – P. 661–665. DOI: 10.1007/BF03397362
189. Tutcuoglu A.D. et al. Stochastic modeling of discontinuous dynamic recrystallization at finite strains in hcp metals / A.D. Tutcuoglu, A. Vidyasagar, K. Bhattacharya, D.M. Kochmann // *J. Mechanics and Physics of Solids*. – 2019a. – Vol. 122. – P. 590–612. DOI: 10.1016/j.jmps.2018.09.032
190. Tutcuoglu A.D. et al. High- vs. low-fidelity models for dynamic recrystallization in copper / A.D. Tutcuoglu, Y. Hollenweger, A. Stoy, D.M. Kochmann // *Materialia*. – 2019b. – Vol. 7. – P. 100411. DOI: 10.1016/j.mtla.2019.100411
191. Vinogradov A., Estrin Y. Analytical and numerical approaches to modelling of severe plastic deformation // *Progress in Materials Science*. – 2018. – Vol. 95. – P. 172–242. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2018.02.001
192. Vu V.Q. et al. Modeling of crystallographic texture in plastic flow machining / V.Q. Vu, L.S. Toth, Y. Beygelzimer, R. Kulagin, A.H. Kobayashi // *Adv. Eng. Mater.* – 2020. – Vol. 22. – P. 1900661. DOI: 10.1002/adem.201900661
193. Wang C. et al. Numerical study of grain refinement induced by severe shot peening / C. Wang, L. Wang, X. Wang, Y. Xu // *Int. J. Mechanical Sciences*. – 2018. – Vol. 146–147. – P. 280–294. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2018.08.005
194. Wang H. et al. A crystal plasticity FE study of macro- and micro-subdivision in aluminium single crystals {001}<110> multi-pass rolled to a high reduction / H. Wang, C. Lu, K. Tieu, Y. Liu // *J. Materials Science & Technology*. – 2021. – Vol. 76. – P. 231–246. DOI: 10.1016/j.jmst.2020.10.020
195. Warren J.A. et al. Extending phase field models of solidification to polycrystalline materials / J.A. Warren, R. Kobayashi, A.E. Lobkovsky, W.C. Carter // *Acta Mater.* – 2003. – Vol. 51. – P. 6035–6058. DOI: 10.1016/S1359-6454(03)00388-4
196. Wu B.L. et al. Fragmentation of large grains in AZ31 magnesium alloy during ECAE via route A / B.L. Wu, G. Wan, Y.D. Zhang, X.H. Du, F. Wagner, C. Esling // *Materials Science and Engineering A*. – 2010. – Vol. 527. – P. 3365–3372. DOI: 10.1016/j.msea.2010.02.040
197. Wu P.D., Huang Y., Lloyd D.J. Studying grain fragmentation in ECATE by simulating simple shear // *Scripta Materialia*. – 2006. – Vol. 54. – P. 2107–2112. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2006.03.016
198. Wu P.D., Lloyd D.J. Analysis of surface roughening in AA6111 automotive sheet // *Acta Materialia*. – 2004. – Vol. 52. – P. 1785–1798. DOI: 10.1016/j.actamat.2003.12.039
199. Wu X.-P. et al. Modeling anisotropic stress-strain response and crystallographic texture evolution in  $\alpha$ -titanium during large plastic deformation using Taylor-type models: influence of initial texture and purity / X.-P. Wu, S.R. Kalindindi, C. Necker, A.A. Salem // *Metallurg. and Mater. Trans.* – 2008. – Vol. 39A. – P. 3046–3054. DOI: 10.1007/s11661-008-9651-x
200. Xiao N. et al. Modelling discontinuous dynamic recrystallization using a quantitative multi-order-parameter phase-field method / N. Xiao, P. Hodgson, B. Rolfe, D. Li // *Computational Materials Science*. – 2018. – Vol. 155. – P. 298–311. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.09.001
201. Yang H. et al. Temperature dependent evolution of anisotropy and asymmetry of  $\alpha$ -Ti in thermomechanical working: Characterization and modeling / H. Yang, H. Li, J. Ma, D. Wei, J. Chen, M.W. Fu // *Int. J. Plasticity*. – 2020. – Vol. 127. – P. 102650. DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.102650
202. Zaremba S. Sur une forme perfectionnée de la théorie de la relaxation // *Bull. Int. Acad. Sci. Cracovie*. – 1903. – P. 595–614.
203. Zecevic M. et al. Predicting intragranular misorientation distributions in polycrystalline metals using the viscoplastic self-consistent formulation / M. Zecevic, W. Pantleon, R.A. Lebensohn, R.J. McCabe, M. Knezevic // *Acta Materialia*. – 2017. – Vol. 140. – P. 398–410. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.08.056
204. Zecevic M. et al. Modeling of intragranular misorientation and grain fragmentation in polycrystalline materials using the viscoplastic self-consistent formulation / M. Zecevic, R.A. Lebensohn, R.J. McCabe, M. Knezevic // *Int. J. Plasticity*. – 2018. – Vol. 109. – P. 193–211. DOI: 10.1016/j.ijplas.2018.06.004
205. Zecevic M. et al. Modelling recrystallization textures driven by intragranular fluctuations implemented in the viscoplastic self-consistent formulation / M. Zecevic, R.A. Lebensohn, R.J. McCabe, M. Knezevic // *Acta Materialia*. – 2019. – Vol. 164. – P. 530–546. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.11.002
206. Zecevic M. et al. Modeling of the thermo-mechanical response and texture evolution of WE43 Mg alloy in the dynamic recrystallization regime using a viscoplastic self-consistent formulation / M. Zecevic, M. Knezevic, B. McWilliams, R.A. Lebensohn // *Int. J. Plasticity*. – 2020. – Vol. 130. – P. 102705. DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102705
207. Zhang C. et al. The kinetics and cellular automaton modeling of dynamic recrystallization behavior of a medium carbon Cr–Ni–Mo alloyed steel in hot working process / C. Zhang, L. Zhang, Q. Xu, Y. Xia, W. Shen // *Materials Science & Engineering A*. – 2016. – Vol. 678. – P. 33–43. DOI: 10.1016/j.msea.2016.09.056

208. Zhang C., Toth L.S. Polycrystal simulation of texture-induced grain coarsening during severe plastic deformation // *Materials*. – 2020. – Vol. 13. – P. 5834. DOI: 10.3390/ma13245834

209. Zhang J. et al. A multi-scale MCCPFEM framework: Modeling of thermal interface grooving and deformation anisotropy of titanium alloy with lamellar colony / J. Zhang, H. Li, X. Sun, M. Zhan // *Int. J. Plasticity*. – 2020. – Vol. 135. – P. 102804. DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102804

210. Zhao P. et al. An integrated full-field model of concurrent plastic deformation and microstructure evolution: Application to 3D simulation of dynamic recrystallization in polycrystalline copper / P. Zhao, T.S.E. Low, Y. Wang, S.R. Niezgodna // *Int. J. Plasticity*. – 2016. – Vol. 80. – P. 38–55. DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.12.010

## References

1. Ashikhmin V.N., Volegov P.S., Trusov P.V. Konstitutivnyye sootnosheniya s vnutrennimi peremennymi: obshchaya struktura i prilozheniye k teksturoobrazovaniyu v polikristallakh [Constitutive relations with internal variables: general structure and application to texture formation in polycrystals]. *Vestnik Permskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Matematicheskoe modelirovanie sistem i pr*, 2006, no. 14, pp. 11–26.

2. Bell J.F. Eksperimental'nyye osnovy mekhaniki deformiruyemykh tverdykh tel. Ch. 1. Malye deformatsii. [Experimental foundations of the mechanics of deformable solids. Part 1. Small strains]. *Moscow, Nauka. Gl. red. fiz.-mat. lit.*, 1984a, 600 p.

3. Bell J.F. Eksperimental'nyye osnovy mekhaniki deformiruyemykh tverdykh tel. Ch. 2. Konechnyye deformatsii. [Experimental foundations of the mechanics of deformable solids. Part 2. Finite strains]. *Moscow, Nauka. Gl. red. fiz.-mat. lit.*, 1984b, 432 p.

4. Bondar V.S. Neuprugost'. Varianty teorii. [Inelasticity. Theory variants]. *Moscow, FIZMATLIT*, 2004, 144 p.

5. Vasin R.A. Nekotoryye voprosy svyazi napryazheniy i deformatsiy pri slozhnom nagruzhenii [Some questions of the connection between stresses and deformations under complex loading]. *Uprugost' i neuprugost'. Vyp. 1, MOSCOW, MGU*, 1971, pp. 59–126.

6. Germain P. Kurs mekhaniki sploshnykh sred. Obshchaya teoriya. [A course in continuum mechanics. General theory]. *Moscow, Vysshaya shkola*, 1983, 399 p.

7. Zubchaninov V.G. Mekhanika sploshnykh deformiruyemykh sred. [Mechanics of continuous deformable media]. *Tver': Izd-vo TGTU, ChuDo*, 2000, 703 p.

8. Ilyushin A.A. Plastichnost'. Osnovy obshchey matematicheskoy teorii. [Plastic. Fundamentals of general mathematical theory]. *Moscow, AN SSSR*, 1963, 272 p.

9. Kan R.U., Haazen P. (eds.) Fizicheskoye metalovedeniye: V 3-kh t., T. 3. Fiziko-mekhanicheskiye svoystva metallov i splavov. [Physical metallurgy: In 3 vols, V. 3. Physical and mechanical properties of metals and alloys], *MOSCOW, Metallurgiya*, 1987, 663 p.

10. Kachanov L.M. Osnovy teorii plastichnosti. [Fundamentals of the theory of plasticity], *Moscow, Nauka*, 1969, 420 p.

11. Krivtsov A.M. Deformirovaniye i razrusheniye tverdykh tel s mikrostrukturoy. [Deformation and destruction of solids with microstructure]. *Moscow, FIZMATLIT*, 2007, 304 p.

12. Lakhtin Yu.M., Leontieva V.P. Materialovedeniye: Uchebnik dlya vysshikh tekhnicheskikh uchebnykh zavedeniy, 3-ye izd., pererab. i dop. [Materials Science: Textbook for higher technical educational institutions, 3rd ed., revised. and additional]. *Moscow, Mashinostroenie*, 1990, 528 p.

13. Likhachev V.A., Malinin V.G. Strukturno – analiticheskaya teoriya prochnosti. [Structural-analytical theory of strength]. *Saint. Petersburg: Nauka*, 1993, 471 p.

211. Zhao P., Wang Y., Niezgodna S.R. Microstructural and micromechanical evolution during dynamic recrystallization // *Int. J. Plasticity*. – 2018. – Vol. 100. – P. 52–68. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.09.009

212. Zhou G. et al. A polycrystal plasticity based discontinuous dynamic recrystallization simulation method and its application to copper / G. Zhou, Z. Li, D. Li, Y. Peng, H.S. Zurob, P. Wu // *Int. J. Plasticity*. – 2017. – Vol. 91. – P. 48–76. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.01.001

213. Zhou G. et al. Misorientation development in continuous dynamic recrystallization of AZ31B alloy sheet and polycrystal plasticity simulation / G. Zhou, Z. Li, D. Li, Y. Peng, H. Wang, P. Wu // *Materials Science & Engineering A*. – 2018. – Vol. 730. – P. 438–456. DOI: 10.1016/j.msea.2018.05.095

14. Noskova N.I., Mulyukov R.R. Submikrokristallicheskiye i nanokristallicheskiye metally i splavy. [Submicrocrystalline and nanocrystalline metals and alloys]. *Yekaterinburg: UrO RAN*, 2003, 279 p.

15. Orlova T.S. et al. Izmel'cheniye zerennoy struktury polikristallov v khode plasticheskoy deformatsii za schet relaksatsii stykovykh disklinatsionnykh konfiguratsiy. [Refining the grain structure of polycrystals during plastic deformation due to relaxation of butt disclination configurations] / Orlova T.S., Nazarov A.A., Enikeev N.A., Aleksandrov I.V., Valiev R.Z., Romanov A. *Fizika tverdogo tela*. 2005, vol. 47, iss. 5. P. 820–826.

16. Ostanina T.V., Shveikin A.I., Trusov P.V. Izmel'cheniye zerennoy struktury metallov i splavov pri intensivnom plasticheskom deformirovani: eksperimental'nyye dannyye i analiz mekhanizmov izmel'cheniya. [Refining of the grain structure of metals and alloys during severe plastic deformation: experimental data and analysis of grinding mechanisms]. *Bulletin of PNIPU. Mechanics*, 2020, no. 3, pp. 85–111. DOI: 10.15593/perm.mech/2020.2.08

17. Panin V.E. Osnovy fizicheskoy mezomekhaniki [Fundamentals of physical mesomechanics]. *FMM*, 1998, V. 1, P. 5–22.

18. Panin V.E. et al. Strukturnyye urovni deformatsii tverdykh tel. [Structural levels of deformation of solids] / Panin V.E., Grinyayev Yu.V., Elsukova T.F., Ivanchin A.G. *Izv. vuzov. Fizika*, 1982, no. 6, P. 5–27.

19. Polukhin P.I., Gorelik S.S., Vorontsov V.K. Fizicheskiye osnovy plasticheskoy deformatsii. [Physical foundations of plastic deformation], *MOSCOW, Metallurgiya*, 1982, 584 p.

20. Romanova V.A. et al. Mikromekhanicheskaya model' evolyutsii deformatsionnogo rel'yefa v polikristallicheskikh materialakh. [Micromechanical model of deformation relief evolution in polycrystalline materials] / Romanova V.A., Balakhonov R.R., Panin A.V., Batukhtina E.E., Kazachenok M.S., Shakhidzhanov V.S. *Fizicheskaya mezomekhanika*, 2017, vol. 20, no. 3, P. 81–90.

21. Rybin V.V. Bol'shiye plasticheskiye deformatsii i razrusheniye metallov. [Large plastic strains and destruction of metals], *Moscow, Metallurgiya*, 1986, 224 p.

22. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskiye teorii plastichnosti: teoriya i prilozheniya k opisaniyu neuprugogo deformirovaniya materialov. CH. 1. Zhestko-plasticheskiye i uprugoplasticheskiye modeli. [Physical theories of plasticity: Theory and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 1. Rigid-plastic and elastic-plastic models]. *PNRPU. Mechanics Bulletin*, 2011a, no. 1, P. 5–45.

23. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskiye teorii plastichnosti: teoriya i prilozheniya k opisaniyu neuprugogo deformirovaniya materialov. Ch. 2. Vyazkoplasticheskiye i uprugovyazkoplasticheskiye modeli. [Physical theories of plasticity: Theory

and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 2. Viscoplastic and elasticviscoplastic models]. *PNRPU. Mechanics Bulletin*, 2011b, no. 2, P. 101–131.

24. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskiye teorii plastichnosti: teoriya i prilozheniya k opisaniyu neuprugogo deformirovaniya materialov. Ch. 3. Teorii uprochneniya, gradiyentnyye teorii. [Physical theories of plasticity: Theory and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 3. Hardening theories, gradient theories]. *PNRPU. Mechanics Bulletin*. 2011c, no. 3, P. 146–197.

25. Trusov P.V., Ostanina T.V., Shveikin A.I. Evolyutsiya zerennoy struktury metallov i splavov pri intensivnom plasticheskom deformirovani: kontinual'nyye modeli. [Evolution of the grain structure of metals and alloys under severe plastic deformation: continuum models]. *PNRPU. Mechanics Bulletin*, 2022, no. 1, P. 123–155.

26. Trusov P.V., Shveikin A.I. Mnogourovnevyye modeli mono- i polikristallicheskih materialov: teoriya, algoritmy, primery primeneniya. [Multilevel models of mono- and polycrystalline materials: theory, algorithms, application examples], *Novosibirsk: Izd-vo SO RAN*, 2019, 605 p. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV

27. Honeycombe R. Plasticheskaya deformatsiya metallov. [Plastic deformation of metals], *Moscow, Mir*, 1972, 408 p.

28. Shveikin A.I., Ashikhmin V.N., Trusov P.V. O modelyakh rotatsii reshetki pri de-formirovani metallov. [On models of lattice rotation during deformation of metals]. *PNRPU. Mechanics Bulletin*, 2010, no. 1, P. 111–127.

29. Ali U. et al. Experimental investigation and through process crystal plasticity-static recrystallization modeling of temperature and strain rate effects during hot compression of AA6063 / Ali U., Odoh D., Muhammad W., Brahme A., Mishra R.K., Wells M., Inal K. *Materials Science & Engineering A*, 2017, vol. 700, P. 374–386. DOI: 10.1016/j.msea.2017.06.030

30. Aoyagi Y., Shizawa K. Multiscale crystal plasticity modeling based on geometrically necessary crystal defects and simulation on fine-graining for polycrystal. *Int. J. Plasticity*, 2007, vol. 23, P. 1022–1040. DOI: 10.1016/j.ijplas.2006.10.009

31. Ardeljan M., Beyerlein I.J., Knezevic M. A dislocation density based crystal plasticity finite element model: Application to a two-phase polycrystalline HCP/BCC composites. *J. Mech. and Phys. Solids*, 2014, vol. 66, P. 16–31. DOI: 10.1016/j.jmps.2014.01.006

32. Arul Kumar M.A., Mahesh S., Parameswaran V. A 'stack' model of rate-independent polycrystals. *Int. J. Plasticity*, 2011, vol. 27, P. 962–981. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.10.010

33. Arul Kumar M., Mahesh S. Banding in single crystals during plastic deformation. *Int. J. Plasticity*, 2012, vol. 36, P. 15–33. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.03.008

34. Arul Kumar M., Mahesh S. Subdivision and microtexture development in f.c.c. grains during plane strain compression. *Int. J. Plasticity*, 2013, vol. 44, P. 95–110. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.12.004

35. Ask A. et al. A Cosserat crystal plasticity and phase field theory for grain boundary / Ask A., Forest S., Appolaire B., Ammar K., Salman O.U. *J. Mechanics and Physics of Solids*, 2018a, vol. 115, P. 167–194. DOI: 10.1016/j.jmps.2018.03.006

36. Ask A. et al. Cosserat crystal plasticity with dislocation driven grain boundary migration / Ask A., Forest S., Appolaire B., Ammar K. *J. Micromechanics and Molecular Physics*. 2018b, vol. 3, no. 3–4. 1840009 (32 p.) DOI: 10.1142/S242491301840009X

37. Ask A. et al. A Cosserat–phase-field theory of crystal plasticity and grain boundary migration at finite deformation / Ask A., Forest S., Appolaire B., Ammar K. *Continuum Mech. Thermodyn*, 2019, vol. 31, P. 1109–1141. DOI: 10.1007/s00161-018-0727-6

38. Bailey J.E., Hirsch P.B. The dislocation distribution, flow stress, and stored energy in cold-worked polycrystalline silver. *Philosophical Magazine. Ser. 8*, 1960, vol. 5, iss. 53, P. 485–497. DOI: 10.1080/14786436008238300

39. Barnett M.R., Montheillet F. The generation of new high-angle boundaries in aluminium during hot torsion. *Acta Materialia*, 2002, vol. 50, P. 2285–2296. DOI: 10.1016/S1359-6454(02)00048-4

40. Belytschko T. et al. Meshless methods: an overview and recent developments / Belytschko T., Krongauz Y., Organ D., Fleming M., Krysl P. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 1996, vol. 139, is. 1, P. 3–47. DOI: 10.1016/S0045-7825(96)01078-X

41. Beyerlein I.J., Lebensohn R.A., Tomé C.N. Modeling texture and microstructural evolution in the equal channel angular extrusion process. *Materials Science and Engineering*, 2003, vol. A345, pp. 122–138. DOI: 10.1016/S0921-5093(02)00457-4

42. Beyerlein I.J., McCabe R.J., Tome C.N. Effect of microstructure on the nucleation of deformation twins in polycrystalline high-purity magnesium: A multi-scale modeling study. *J. Mech. Phys. Solids*, 2011, vol. 59, P. 988–1003. DOI: 10.1016/j.jmps.2011.02.007

43. Beyerlein I., Knezevic M. Review of microstructure and micromechanism-based constitutive modeling of polycrystals with a low-symmetry crystal structure. *J. Mater. Res*, 2018, vol. 33, no. 22, pp. 3711–3738. DOI: 10.1557/jmr.2018.333

44. Bilby B.A., Gardner L.R.T., Stroh A.N. Continuous distributions of dislocations and the theory of plasticity. In: *Proc. 9th Int. Congr. Appl. Mech. Bruxelles, 1956, Universiter de Bruxelles*, 1957, vol. 8, P. 35–44.

45. Brown A.A., Bammann D.J. Validation of a model for static and dynamic recrystallization in metals. *Int. J. Plasticity*, 2012, vol. 32–33, P. 17–35. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.12.006

46. Buchheit T.E., Wellman G.W., Battaile C.C. Investigating the limits of polycrystal plasticity modeling. *Int. J. Plasticity*, 2005, vol. 21, P. 221–249. DOI: 10.1016/j.ijplas.2003.10.009

47. Butler G.C., McDowell D.L. Polycrystal constraint and grain subdivision. *Int. J. Plasticity*, 1998, vol. 14, no. 8, P. 703–717. DOI: 10.1016/S0749-6419(98)00018-7

48. Cantor D., Estrada N., Azéma É. New approach to grain fragmentation for discrete element methods. *Geomechanics from Micro to Macro*, 2015, pp. 257–262. DOI: 10.1201/b17395-45

49. Cao Z. et al. Cellular automaton simulation of dynamic recrystallization behavior in V–10Cr–5Ti alloy under hot deformation conditions / Cao Z., Sun Y., Zhou C., Wan Z., Yang W., Ren L., Hu L. *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, 2019, vol. 29, P. 98–111. DOI: 10.1016/S1003-6326(18)64919-2

50. Chang H.-J. et al. Texture evolution in FCC metals from initially different misorientation distributions under shear deformation / Chang H.-J., Han H.N., Park S.-J., Cho J.-H., Oh K.H. *Met. Mater. Int*, 2010, vol. 16, no. 4, P. 553–558. DOI: 10.1007/s12540-010-0805-1

51. Chen J.-S., Hillman M., Chi S.-W. Meshfree methods: progress made after 20 years. *J. Eng. Mech*, 2017, vol. 143, is. 4, 04017001. DOI: 10.1061/(ASCE)EM.1943-7889.0001176

52. Chen L. et al. Modelling of constitutive relationship, dynamic recrystallization and grain size of 40Cr steel during hot deformation process / Chen L., Sun W., Lin J., Zhao G., Wang G. *Results in Physics*, 2019, vol. 12, P. 784–792. DOI: 10.1016/j.rinp.2018.12.046

53. Chuan W., He Y., Wei L.H. Modeling of discontinuous dynamic recrystallization of a near- $\alpha$  titanium alloy IMI834 during isothermal hot compression by combining a cellular automaton model with a crystal plasticity finite element method. *Computational Materials Science*, 2013, vol. 79, P. 944–959. DOI: 10.1016/j.commatsci.2013.08.004

54. Dancette S. et al. Multisite model prediction of texture induced anisotropy in brass / Dancette S., Delannay L., Jodkowski T., Giovanola J. *Int. J. Mater. Form.* 2010, vol. 3 (1), P. 251–254. DOI: 10.1007/s12289-010-0754-8

55. Delannay L. Observation and modelling of grain interactions and grain subdivision in rolled cubic polycrystals. *PhD in Materials Engineering at the Katholieke Universiteit Leuven (K.U. Leuven, Belgium)*, 2001, 181 p.
56. Diehl M. Review and outlook: mechanical, thermodynamic, and kinetic continuum modeling of metallic materials at the grain scale. *MRS Communications*, 2017, vol. 7, P. 735–746. DOI: 10.1557/mrc.2017.98
57. Ding H., Shen N., Shin Y.C. Predictive modeling of grain refinement during multi-pass cold rolling. *J. Materials Processing Technology*, 2012, vol. 212, P. 1003–1013. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2011.12.005
58. Ding R., Guo Z.X. Coupled quantitative simulation of microstructural evolution and plastic flow during dynamic recrystallization. *Acta mater*, 2001, vol. 49, iss. 16, P. 3163–3175. DOI: 10.1016/S1359-6454(01)00233-6
59. Ding S., Khan S.A., Yanagimoto J. Constitutive descriptions and microstructure evolution of extruded A5083 aluminum alloy during hot compression. *Materials Science & Engineering A*, 2018, vol. 728, P. 133–143. DOI: 10.1016/j.msea.2018.05.025
60. Doherty R.D. et al. Current issues in recrystallization: a review / Doherty R.D., Hughes D.A., Humphreys F.J., Jonas J.J., Jensen D. Juul, Kassner M.E., King W.E., McNelley T.R., McQueen H.J., Rollett A.D. *Materials Science and Engineering*, 1997, vol. A238, P. 219–274. DOI: 10.1016/S0921-5093(97)00424-3
61. Enikeev N.A. et al. Modelling grain refinement in fcc metals during equal-channel angular pressing by route “C” / Enikeev N.A., Abdullin M.F., Nazarov A.A., Beyerlein I.J. *Int. J. Mat. Res. (formerly Z. Metallkd.)*, 2007, vol. 98, no. 3, P. 167–171. DOI: 10.3139/146.101451
62. Estrin Y. et al. A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation / Estrin Y., Tóth L.S., Molinari A., Bréchet Y. *Acta mater*, 1998, vol. 46, no. 15, pp. 5509–5522. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00196-7
63. Estrin Y., Kim H.S. Modelling microstructure evolution toward ultrafine crystallinity produced by severe plastic deformation. *J. Mater. Sci.* 2007, vol. 42, P. 1512–1516. DOI: 10.1007/s10853-006-1282-2
64. De Farias Azevedo C.R., Padilha A.F. History of the recrystallisation of metals: A summary of ideas and findings until the 1950s. *Materials Research*, 2020, vol. 23, iss. 2, e20200082 (15 p). DOI: 10.1590/1980-5373-MR-2020-0082
65. Figueiredo R.B., Langdon T.G. Grain refinement and mechanical behavior of a magnesium alloy processed by ECAP. *J. Mater. Sci.* 2010, vol. 45, P. 4827–4836. DOI: 10.1007/s10853-010-4589-y
66. Frydrych K. Simulations of grain refinement in various steels using the three-scale crystal plasticity model. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2019, vol. 50A, P. 4913–4919. DOI: 10.1007/s11661-019-05373-z
67. Frydrych K., Kowalczyk-Gajewska K. A three-scale crystal plasticity model accounting for grain refinement in fcc metals subjected to severe plastic deformations. *Materials Science & Engineering*, 2016, vol. A658, P. 490–502. DOI: 10.1016/j.msea.2016.01.101
68. Frydrych K., Kowalczyk-Gajewska K. Microstructure evolution in cold-rolled pure titanium: Modeling by the three-scale crystal plasticity approach accounting for twinning. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2018, vol. 49A, P. 3610–3623. DOI: 10.1007/s11661-018-4676-2
69. Gokuli M., Runnels B. Multiphase field modeling of grain boundary migration mediated by emergent disconnections. *Acta Materialia*, 2021, vol. 217, 117149 (11 p.). DOI: 10.1016/j.actamat.2021.117149
70. Gorji M.B. et al. On the potential of recurrent neural networks for modeling path dependent plasticity / Gorji M.B., Mozaffar M., Heidenreich J.N., Cao J., Mohr D. *J. Mechanics and Physics of Solids*, 2020, vol. 143, 103972 (27 p.). DOI: 10.1016/j.jmps.2020.103972
71. Gottstein G., Molodov D.A., Shvindlerman L.S. Grain boundary migration in metals: recent developments. *Interface Sci.* 1998, vol. 6, P. 7–22. DOI: 10.1023/A: 1008641617937
72. Gu C.F., Toth L.S. Texture development and grain refinement in non-equal-channel angular-pressed Al. *Scripta Materialia*, 2012, vol. 67, P. 33–36. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2012.03.014
73. Guo X., Seefeldt M. Modeling grain fragmentation and deformation textures for titanium using a combined approach of the viscoplastic self-consistent model and a shear fluctuation model. *J. Mater. Sci.*, 2017, vol. 52, pp. 8132–8148. DOI: 10.1007/s10853-017-1021-x
74. Gwalani B. et al. Lattice misorientation evolution and grain refinement in Al–Si alloys under high-strain shear deformation / Gwalani B., Fu W., Olszta M., Silverstein J., Yadav D.R., Manimunda P., Guzman A., Xie K., Rohatgi A., Mathaudhu S., Powell C.A., Sushko P.V., Li Y., Devaraj A. *Materialia*, 2021, vol. 18, 101146. DOI: 10.1016/j.mta.2021.101146
75. Nabarro F.R.N., Basinski Z.S., Holt D.B. The plasticity of pure single crystals. *Advances in Physics*, 1964, vol. 13, iss. 50, P. 193–323. DOI: 10.1080/00018736400101031
76. Habibnejad-korayem M. et al. Modelling of uniaxially pre-strained and annealed AZ31 magnesium sheet based on microstructural considerations / Habibnejad-korayem M., Jain M.K., Zurob H.S., Mishra R.K. *Acta Materialia*, 2016, vol. 113, p. 155–169. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.04.001
77. Hall E.O. The deformation and aging of mild steel. III. Discussion and results. *Proc. Phys. Soc. of London*, 1951, vol. B64, P. 747–753. DOI: 10.1088/0370-1301/64/9/303
78. Hallberg H. Approaches to modeling of recrystallization. *Metals*, 2011, vol. 1, no. 1, P. 16–48. DOI: 10.3390/met1010016
79. Halphen B., Nguyen Q. Sur les matériaux standard généralisés. *J. Mécanique*, 1975, vol. 14, P. 39–63.
80. Hassani-Gangaraj S.M. et al. Experimental assessment and simulation of surface nanocrystallization by severe shot peening / Hassani-Gangaraj S.M., Cho K.S., Voigt H.-J.L., Guagliano M., Schuh C.A. *Acta Materialia*, 2015, vol. 97, P. 105–115. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.06.054
81. Hines J.A., Vecchio K.S., Ahzi S. A model for microstructure evolution in adiabatic shear bands. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1998, vol. 29, P. 191–203. DOI: 10.1007/s11661-998-0172-4
82. Holt D.L. Dislocation cell formation in metals. *J. Applied Physics*, 1970, vol. 41, no. 8, P. 3197–3201. DOI: 10.1063/1.1659399
83. Horstemeyer M.F. Multiscale modeling: A review. In «Practical Aspects of Computational Chemistry». J. Leszczynski and M.K. Shukla (eds.), Springer Science + Business Media B.V., 2009, P. 87–135. DOI: 10.1007/978-90-481-2687-3\_4
84. Horstemeyer M.F., McDowell D.L. Modeling effects of dislocation substructure in polycrystal elastoviscoplasticity. *Mechanics of Materials*, 1998, vol. 27, P. 145–163. DOI: 10.1016/S0167-6636(97)00037-9
85. Horstemeyer M.F., Potirniche G.P., Marin E.B. Crystal plasticity. In *Handbook of Materials Modeling. S. Yip (ed.)*, Springer: Netherlands, 2005, P. 1133–1149.
86. Van Houtte P. Crystal plasticity based modelling of deformation textures. In: Haldar, A., Suwas S., Bhattacharjee D. (Eds.), *Microstructure and Texture in Steels*, Springer, 2009, P. 209–224.
87. Van Houtte P., Delannay L., Samajdar I. Quantitative prediction of cold rolling textures in low-carbon steel by means of the LAMEL model. *Textures and Microstructures*, 1999, vol. 31, P. 109–149. DOI: 10.1155/TSM.31.109
88. Huang Y., Humphreys F.J. Subgrain growth and low angle boundary mobility in aluminium crystals of orientation

- {110}<001>. *Acta mater*, 2000, vol. 48, P. 2017–2030. DOI: 10.1016/S1359-6454(99)00418-8
89. Huang K., Logé R.E. A review of dynamic recrystallization phenomena in metallic materials. *Materials and Design*, 2016, vol. 111, P. 548–574. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.09.012
90. Ilin D.N. et al. Full field modeling of recrystallization: Effect of intragranular strain gradients on grain boundary shape and kinetics / Ilin D.N., Bozzolo N., Toulorge T., Bernacki M. *Computational Materials Science*, 2018, vol. 150, P. 149–161. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.03.063
91. Jaumann G. Geschlossenes System physikalischer und chemischer Differential-gesetze. *Sitzber. Akad. Wiss. Wien, Abt. IIa*, 1911, B. 120, S. 385–530.
92. Kim H.-K., Oh S.-I. An interfacial energy incorporated couple stress crystal plasticity and the finite element simulation of grain subdivision. *J. Mech. Phys. Solids*, 2012, vol. 60, P. 1815–1841. DOI: 10.1016/j.jmps.2012.07.004
93. Knezevic M., Beyerlein I. Multiscale modeling of microstructure-property relationships of polycrystalline metals during thermo-mechanical deformation. *Adv. Eng. Mater*, 2018, vol. 20, 1700956 (19 pages). DOI: 10.1002/adem.201700956
94. Kobaiassy A.H. et al. Continuum dislocation dynamics-based grain fragmentation modeling / Kobaiassy A.H., Ayoub G., Toth L.S., Mustapha S., Shehadeh M. *Int. J. Plasticity*, 2019, vol. 114, P. 252–271. DOI: 10.1016/j.ijplas.2018.11.006
95. Kobayashi R., Warren J.A., Carter W.C. A continuum model of grain boundaries. *Physica D*, 2000, vol. 140, P. 141–150. DOI: 10.1016/S0167-2789(00)00023-3
96. Kroner E. Allgemeine kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen. *Arch. Rational Mech. Anal*, 1959, B. 4 (1). S. 273–334. DOI: 10.1007/BF00281393
97. Kugler G., Turk R. Modeling the dynamic recrystallization under multi-stage hot deformation. *Acta Materialia*, 2004, vol. 52, P. 4659–4668. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.06.022
98. Kuhlmann-Wilsdorf D., Hansen N. Geometrically necessary, incidental and subgrain boundaries. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 1991, vol. 25, no. 7, P. 1557–1562. DOI: 10.1016/0956-716X(91)90451-6
99. Kuhlmann-Wilsdorf D., Nine H.D. Striations on copper single crystals subjected to torsional fatigue. II. On the mechanism of fatigue striation formation and fatigue failure at low strain amplitudes. *J. Applied Physics*, 1967, vol. 38, no. 4, P. 1683–1693. DOI: 10.1063/1.1709742
100. Kumar M.A., Mahesh S. Subdivision and microtexture development in f.c.c. grains during plane strain compression. *Int. J. Plasticity*, 2013, vol. 44, P. 95–110. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.12.004
101. Kumar S. et al. A meshless multiscale approach to modeling severe plastic deformation of metals: Application to ECAE of pure copper / Kumar S., Tutcuoglu A.D., Hollenweger Y., Kochmann D.M. *Computational Materials Science*, 2020, vol. 173, 109329 (17 p.). DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.109329
102. Latypov M.I. et al. Modeling and characterization of texture evolution in twist extrusion / Latypov M.I., Lee M.-G., Beygelzimer Y., Prilepo D., Gusar Y. and Kim H.S. *Metallurgical and Materials Trans. A*, 2016, vol. 47A, P. 1248–1260. DOI: 10.1007/s11661-015-3298-1
103. Lebensohn R.A., Kanjarla A.K., Eisenlohr P. An elasto-viscoplastic formulation based on fast Fourier transforms for the prediction of micromechanical fields in polycrystalline materials. *Int. J. Plasticity*, 2012, vol. 32–33, P. 59–69. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.12.005
104. Lebensohn R.A., Liu Y., Ponte Castañeda P. On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals: comparison with full-field numerical simulations. *Acta Materialia*, 2004, vol. 52, P. 5347–5361. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.07.040
105. Lebensohn R.A., Tomé C.N. A self-consistent anisotropic approach. *Acta Metall*, 1993, vol. 41, P. 2611–2624. DOI: 10.1016/0956-7151(93)90130-K
106. Lebensohn R.A., Tomé C.N., Ponte Castañeda P. Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations. *Philosophical Magazine*, 2007, vol. 87, no. 28, P. 4287–4322. DOI: 10.1080/14786430701432619
107. Lebensohn R.A. et al. Average intragranular misorientation trends in polycrystalline materials predicted by a viscoplastic self-consistent approach / Lebensohn R.A., Zecevic M., Knezevic M., McCabe R.J. *Acta Materialia*, 2016, vol. 104, P. 228–236. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.10.035
108. Lee E.H. Elastic plastic deformation at finite strain. *ASME J. Appl. Mech*, 1969, vol. 36, P. 1–6. DOI: 10.1115/1.3564580
109. Lee E.H., Liu D.T. Finite-strain elastic-plastic theory with application to plane-wave analysis. *J. Appl. Phys*, 1967, vol. 38, P. 19–27. DOI: 10.1063/1.1708953
110. Leffers T. Lattice rotations during plastic deformation with grain subdivision. *Materials Science Forum*, 1994, Vols 157–162, P. 1815–1820. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.157-162.1815
111. Leffers T. A model for rolling deformation with grain subdivision. P.I: The initial stage. *Int. J. Plasticity*, 2001a, vol. 17, P. 469–489. DOI: 10.1016/S0749-6419(00)00059-0
112. Leffers T. A model for rolling deformation with grain subdivision. P. II: The subsequent stage. *Int. J. Plasticity*, 2001b, vol. 17, P. 491–511. DOI: 10.1016/S0749-6419(00)00060-7
113. Lemiale V. et al. Grain refinement under high strain rate impact: A numerical approach / Lemiale V., Estrin Y., Kim H.S., O'Donnell R. *Computational Materials Science*, 2010, vol. 48, P. 124–132. DOI: 10.1016/j.commatsci.2009.12.018
114. Li H., Sun X., Yang H. A three-dimensional cellular automata-crystal plasticity finite element model for predicting the multiscale interaction among heterogeneous deformation, DRX microstructural evolution and mechanical responses in titanium alloys. *Int. J. Plasticity*, 2016, vol. 87, P. 154–180. DOI: 10.1016/j.ijplas.2016.09.008
115. Li S. Dependencies of grain refinement on processing route and die angle in equal channel angular extrusion of bcc materials. *Computational Materials Science*, 2009, vol. 46, P. 1044–1050. DOI: 10.1016/j.commatsci.2009.05.010
116. Li S. Application of crystal plasticity modeling in equal channel angular extrusion. *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, 2013, vol. 23, P. 170–179. DOI: 10.1016/S1003-6326(13)62444-9.
117. Li S., Li X., Yang L. Role of strain path change in grain refinement by severe plastic deformation: A case study of equal channel angular extrusion. *Acta Materialia*, 2013, vol. 61, P. 4398–4413. DOI: 10.1016/j.actamat.2013.04.010
118. Lin T.H. Analysis of elastic and plastic strains of a face-centered cubic crystal. *J. Mech. Phys. Solids*, 1957, vol. 5, iss. 1, P. 143–149. DOI: 10.1016/0022-5096(57)90058-3
119. Liu Y., Ponte Castañeda P. Second-order theory for the effective behavior and field fluctuations in viscoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 2004, vol. 52, P. 467–495. DOI: 10.1016/S0022-5096(03)00078-4
120. Lv J. et al. A review of microstructural evolution and modelling of aluminium alloys under hot forming conditions / Lv J., Zheng J.-H., Yardley V.A., Shi Z., Lin J. *Metals*, 2020, vol. 10, 1516 (33 p.). DOI: 10.3390/met10111516
121. Ma A., Roters F.A. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals. *Acta Materialia*, 2004, vol. 52, P. 3603–3612. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.04.012
122. Ma A., Roters F., Raabe D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometri-

- cally necessary dislocations. *Acta Materialia*, 2006, vol. 54, P. 2169–2179. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.01.005
123. Mahnken R., Westermann H. A non-equilibrium thermodynamic framework for viscoplasticity incorporating dynamic recrystallization at large strains. *Int. J. Plasticity*, 2021, vol. 142, 102988 (36 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.102988
124. Mao W. Modeling of rolling texture in aluminum. *Materials Science and Engineering*, 1998, vol. A257, P. 171–177. DOI: 10.1016/S0921-5093(98)00836-3
125. Mandel J. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *Int. J. Solids Structures*, 1973, vol. 9, P. 725–740. DOI: 10.1016/0020-7683(73)90120-0
126. Marin E.B., Dawson P.R. On modelling the elasto-viscoplastic response of metals using polycrystal plasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 1998a, vol. 165, P. 1–21. DOI: 10.1016/S0045-7825(98)00034-6
127. Marin E.B., Dawson P.R. Elastoplastic finite element analyses of metal deformations using polycrystal constitutive models. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 1998b, vol. 165, P. 23–41. DOI: 10.1016/S0045-7825(98)00033-4
128. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893–2013). *Mechanics Research Communications*, 2015, vol. 69, P. 79–86. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2015.06.00
129. McDowell D.L. Internal state variable theory // In: Handbook of Materials Modeling, S. Yip (ed.), Springer, 2005, P. 1151–1169. DOI: 10.1007/978-1-4020-3286-8\_58
130. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity. *Int. J. Plasticity*, 2010, vol. 26, P. 1280–1309. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.02.008
131. M'Guil S. et al. A comparison of viscoplastic intermediate approaches for deformation texture evolution in face-centered cubic polycrystals / M'Guil S., Ahzi S., Youssef H., Baniassadi M., Gracio J.J. *Acta Mater*, 2009, vol. 57, P. 2496–2508. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.02.001.
132. Mika D.P., Dawson P.R. Polycrystal plasticity modeling of intracrystalline boundary textures. *Acta mater*, 1999, vol. 47, no. 4, P. 1355–1369. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00386-3
133. Mughrabi H. Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals. *Acta Metallurgica*, 1983, vol. 31, iss. 9. P. 1367–1379. DOI: 10.1016/0001-6160(83)90007-X
134. Mughrabi H. Dislocation clustering and long-range internal stresses in monotonically and cyclically deformed metal crystals. *Rev. Phys. Appl. (Paris)*, 1988, vol. 23, no. 4, P. 367–379. DOI: 10.1051/rphysap:01988002304036700
135. Nabarro F.R.N., Basinski Z.S., Holt D.B. The plasticity of pure single crystals. *Advances in Physics*, 1964, vol. 13, iss. 50, P. 193–323, DOI: 10.1080/00018736400101031
136. Nazarov A.A. et al. Modeling of grain subdivision during severe plastic deformation by VPSC method combined with disclination analysis / Nazarov A.A., Enikeev N.A., Romanov A.E., Orlova T.S., Alexandrov I.V., Beyerlein I.J. In: *Nanostructured Materials by High-Pressure Severe Plastic Deformation*. Eds. Y.T. Zhu and V. Varyukhin, Springer: 2006, P. 61–66. DOI: 10.1007/1-4020-3923-9\_8
137. Nine H.D. Striations on copper single crystals subjected to torsional fatigue. I. A test of the relation of cross slip to fatigue striation formation. *J. Applied Physics*, 1967, vol. 38, no. 4. P. 1678–1682. DOI: 10.1063/1.1709741
138. Nye J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metall.* 1953, vol. 1, P. 153–162. DOI: 10.1016/0001-6160(53)90054-6
139. Ortiz M., Repetto E.A. Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals. *J. Mechanics and Physics of Solids*, 1999, vol. 49, P. 397–462. DOI: 10.1016/S0022-5096(97)00096-3
140. Ortiz M., Repetto E.A., Stainier L. A theory of subgrain dislocation structures. *J. Mechanics and Physics of Solids*, 2000, vol. 48, P. 2077–2114. DOI: 10.1016/S0022-5096(99)00104-0
141. Ostapovets A. et al. New misorientation scheme for a visco-plastic self-consistent model: Equal channel angular pressing of magnesium single crystals / Ostapovets A., Šedá P., Jäger A., Lejček P. *Int. J. Plasticity*, 2012, vol. 29, P. 1–12. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.07.006
142. Petch N.J. The cleavage strength of polycrystals. *J. Iron and Steel Inst*, 1953, vol. 174, P. 25–28.
143. Ponge D., Gottstein G. Necklace formation during dynamic recrystallization: mechanisms and impact on flow behavior. *Acta mater*, 1998. vol. 46, no. 1, P. 69–80. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.812.167
144. Ponte Castañeda P. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations: I–theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 2002, vol. 50, P. 737–757. DOI: 10.1016/S0022-5096(01)00099-0
145. Quey R., Dawson P.R., Barbe F. Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 2011, vol. 200, P. 1729–1745. DOI: 10.1016/j.cma.2011.01.002
146. Quey R., Dawson P.R., Driver J.H. Grain orientation fragmentation in hot-deformed aluminium: Experiment and simulation. *J. Mechanics and Physics of Solids*, 2012, vol. 60, P. 509–524. DOI: 10.1016/j.jmps.2011.11.005
147. Raabe D. Texture simulation for hot rolling of aluminium by use of a Taylor model considering grain interactions. *Acta Metall. Mater*, 1995, vol. 43, no. 3, P. 1023–1028. DOI: 10.1016/0956-7151(94)00302-X
148. Raabe D. Introduction of a scalable three-dimensional cellular automaton with a probabilistic switching rule for the discrete mesoscale simulation of recrystallization phenomena. *Phil. Mag. A*, 1999, vol. 79, iss. 10, P. 2339–2358, DOI: 10.1080/01418619908214288
149. Raabe D. Cellular automata in materials science with particular reference to recrystallization simulation. *Annu. Rev. Mater. Res*, 2002, vol. 32, P. 53–76. DOI: 10.1146/annurev.matsci.32.090601.152855
150. Raabe D., Becker R.C. Coupling of a crystal plasticity finite-element model with a probabilistic cellular automaton for simulating primary static recrystallization in aluminium. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng*, 2000, vol. 8, P. 445–462. DOI: 10.1088/0965-0393/8/4/304
151. Raabe D., Zhao Z., Mao W. On the dependence of in-grain subdivision and deformation texture of aluminum on grain interaction. *Acta Materialia*, 2002, vol. 50, P. 4379–4394. DOI: 10.1016/S1359-6454(02)00276-8
152. Rezvanian O. Grain subdivision and microstructural interfacial scale effects in polycrystalline materials. PhD (Mechanical Engineering). *North Carolina State University (USA)*, 2006, 157 p.
153. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Microstructural modeling of grain subdivision and large strain inhomogeneous deformation modes in f.c.c. crystalline materials. *Mechanics of Materials*, 2006, vol. 38, P. 1159–1169. DOI: 10.1016/j.mechmat.2005.12.006
154. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Statistically stored, geometrically necessary and grain boundary dislocation densities: microstructural representation and modelling. *Proc. R. Soc. A*, 2007, vol. 463, P. 2833–2853. DOI: 10.1098/rspa.2007.0020
155. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Microstructural modeling in f.c.c. crystalline materials in a unified dislocation-density framework. *Materials Science and Engineering A*, 2008. vol. 494, P. 80–85. DOI: 10.1016/j.msea.2007.10.091

156. Rice J.R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 1971, vol. 19, P. 433–455. DOI: 10.1016/0022-5096(71)90010-X
157. Rice J.R. Continuum mechanics and thermodynamics of plasticity in relation to microscale deformation mechanisms. In: *Constitutive Equations in Plasticity (Ed. A.S. Argon)*, Cambridge, Mass.: M.I.T. Press, 1975, P. 23–75.
158. Roters F. Advanced Material Models for the Crystal Plasticity Finite Element Method: Development of a general CPFEM framework, *RWTH Aachen: Aachen*, 2011, 226 p.
159. Roters F. et al. Crystal Plasticity Finite Element Methods: in Materials Science and Engineering / Roters F., Eisenlohr P., Bieler T.R., Raabe D, *WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.*, 2010a, 209 p. DOI: 10.1002/9783527631483
160. Roters F. et al. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., Tjahjanto D.D., Bieler T.R., Raabe D. *Acta Materialia*, 2010b. vol. 58, P. 1152–1211. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.10.058.
161. Roucoules C., Pietrzyk M., Hodgson P.D. Analysis of work hardening and recrystallization during the hot working of steel using a statistically based internal variable model. *Materials Science and Engineering A*, 2003, vol. 339, P. 1–9. DOI: 10.1016/S0921-5093(02)00120-X
162. Sakai T. et al. Dynamic and post-dynamic recrystallization under hot, cold and severe plastic deformation conditions / Sakai T., Belyakov A., Kaibyshev R., Miura H., Jonas J.J. *Progress in Materials Science*, 2014, vol. 60, P. 130–207. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2013.09.002
163. Sedighiani K. et al. Large-deformation crystal plasticity simulation of microstructure and microtexture evolution through adaptive remeshing / Sedighiani K., Shah V., Traka K., Diehl M., Roters F., Sietsma J., Raabe D. *Int. J. Plasticity*, 2021, vol. 146, 103078 (21 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.103078
164. Shah P.N., Shin Y.C., Sun T. Investigation on temporal evolution of the grain refinement in copper under high strain rate loading via in-situ synchrotron measurement and predictive modeling. *Acta Materialia*, 2018, vol. 143, P. 43–54. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.10.005
165. Sheikh H., Ebrahimi R. Modeling the effect of strain reversal on grain refinement and crystallographic texture during simple shear extrusion. *Int. J. Solids and Structures*, 2017, vol. 126–127, P. 175–186. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2017.08.004
166. Sivakumar S.M., Ortiz M. Microstructure evolution in the equal channel angular extrusion process. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 2004, vol. 193, P. 5177–5194. DOI: 10.1016/j.cma.2004.01.036
167. Steinbach I., Pezzolla F. A generalized field method for multiphase transformations using interface fields. *Physica D*, 1999, vol. 134, P. 385–393. DOI: 10.1016/S0167-2789(99)00129-3
168. Sun X. et al. Cross-scale prediction from RVE to component / Sun X., Li H., Zhan M., Zhou J., Zhang J., Gao J. *Int. J. Plasticity*, 2021, vol. 140, 102973 (32 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.102973
169. Sun Z.C. et al. Modeling of continuous dynamic recrystallization of Al–Zn–Cu–Mg alloy during hot deformation based on the internal-state-variable (ISV) method / Sun Z.C., Wu H.L., Cao J., Yin Z.K. *Int. J. Plasticity*, 2018, vol. 106, P. 73–87. DOI: 10.1016/j.ijplas.2018.03.002
170. Svyetlichnyy D.S. Modeling of grain refinement by cellular automata. *Computational Materials Science*, 2013, vol. 77, P. 408–416. DOI: 10.1016/j.commatsci.2013.04.065
171. Svyetlichnyy D.S., Muszka K., Majta J. Three-dimensional frontal cellular automata modeling of the grain refinement during severe plastic deformation of microalloyed steel. *Computational Materials Science*, 2015, vol. 102, P. 159–166. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.02.034
172. Takaki T. et al. Phase-field model during static recrystallization based on crystal-plasticity theory / Takaki T., Yamanaka A., Higa Y., Tomita Y. *J. Computer-Aided Mater. Des.*, 2007, vol. 14, P. 75–84. DOI: 10.1007/s10820-007-9083-8
173. Takaki T., Tomita Y. Static recrystallization simulations starting from predicted deformation microstructure by coupling multi-phase-field method and finite element method based on crystal plasticity. *Int. J. Mech. Sciences*, 2010, vol. 52, P. 320–328. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2009.09.037
174. Takaki T. et al. Multiscale modeling of hot-working with dynamic recrystallization by coupling microstructure evolution and macroscopic mechanical behavior / Takaki T., Yoshimoto C., Yamanaka A., Tomita Y. *Int. J. Plasticity*, 2014, vol. 52, P. 105–116. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.09.001
175. Tam K.J. et al. Modelling the temperature and texture effects on the deformation mechanisms of magnesium alloy AZ31 / Tam K.J., Vaughan M.W., Shen L., Knezevic M., Karaman I., Proust G. *Int. J. Mechanical Sciences*, 2020, vol. 182, 105727 (16 p.). DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2020.105727
176. Tam K.J. et al. Modelling dynamic recrystallisation in magnesium alloy AZ31 / Tam K.J., Vaughan M.W., Shen L., Knezevic M., Karaman I., Proust G. *Int. J. Plasticity*, 2021, vol. 142, 102995 (22 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.102995
177. Tang T. et al. A polycrystal plasticity based thermo-mechanical-dynamic recrystallization coupled modeling method and its application to light weight alloys / Tang T., Zhou G., Li Z., Li D., Peng L., Peng Y., Wu P., Wang H., Lee M.-G. *Int. J. Plasticity*, 2019, vol. 116, P. 159–191. DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.01.001
178. Taylor G.I. Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals*. 1938. vol. 62. P. 307–324.
179. Tohidlou E., Bertram A. Effect of strain hardening on sub-grain formation during ECAP process. *Mechanics of Materials*, 2019, vol. 137, 103077 (9 p.). DOI: 10.1016/j.mechmat.2019.103077
180. Toth L.S., Gu C.F. Modeling of disorientation axis distribution in severely deformed copper. *Scripta Materialia*, 2013, vol. 69, P. 183–186. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2013.03.025
181. Toth L.S., Gu C. Ultrafine-grain metals by severe plastic deformation. *Materials Characterization*, 2014, vol. 92, P. 1–14. DOI: 10.1016/j.matchar.2014.02.003
182. Toth L.S. et al. Texture development and length changes in copper bars subjected to free end torsion / Toth L.S., Jonas J.J., Daniel D., Bailey J.A. *Textures and Microstructures*, 1992, vol. 19, P. 245–262. DOI: 10.1155/TSM.19.245
183. Tóth L.S., Molinari A., Estrin Y. Strain hardening at large strains as predicted by dislocation based polycrystal plasticity model. *Trans. ASME. J. Engng Materials and Technology*, 2002, vol. 124, pp. 71–77. DOI: 10.1115/1.1421350
184. Tóth L.S. et al. A model of grain fragmentation based on lattice curvature / Tóth L.S., Estrin Y., Lapovok R., Gu C. *Acta Materialia*, 2010, vol. 58, P. 1782–1794. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.11.020
185. Toupin R.A. Elastic materials with couple-stresses. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 1962, vol. 11. P. 385–414. DOI: 10.1007/BF00253945
186. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Statistical models. *Physical Mesomechanics*, 2013a, vol. 16, is. 1, P. 23–33. DOI: 10.1134/S102995991301003
187. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Direct models. *Physical Mesomechanics*, 2013b, vol. 16, is. 2, P. 99–124. DOI: 10.1134/S1029959913020021
188. Turnbull D. Theory of grain boundary migration rates. *JOM*, 1951, vol. 3, P. 661–665. DOI: 10.1007/BF03397362



189. Tutcuoglu A.D. et al. Stochastic modeling of discontinuous dynamic recrystallization at finite strains in hcp metals / Tutcuoglu A.D., Vidyasagar A., Bhattacharya K., Kochmann D.M. *J. Mechanics and Physics of Solids*, 2019a, vol. 122, P. 590–612. DOI: 10.1016/j.jmps.2018.09.032
190. Tutcuoglu A.D. et al. High- vs. low-fidelity models for dynamic recrystallization in copper / Tutcuoglu A.D., Hollenweger Y., Stoy A., Kochmann D.M. *Materialia*, 2019b, vol. 7, 100411 (14 p.). DOI: 10.1016/j.mtla.2019.100411
191. Vinogradov A., Estrin Y. Analytical and numerical approaches to modelling of severe plastic deformation. *Progress in Materials Science*, 2018, vol. 95, P. 172–242. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2018.02.001
192. Vu V.Q. et al. Modeling of crystallographic texture in plastic flow machining / Vu V.Q., Toth L.S., Beygelzimer Y., Kulagin R., Kobayashi A.H. *Adv. Eng. Mater.*, 2020, vol. 22, 1900661 (10 p.). DOI: 10.1002/adem.201900661
193. Wang C. et al. Numerical study of grain refinement induced by severe shot peening / Wang C., Wang L., Wang X., Xu Y. *Int. J. Mechanical Sciences*, 2018, vol. 146–147, P. 280–294. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2018.08.005
194. Wang H. et al. A crystal plasticity FE study of macro- and micro-subdivision in aluminium single crystals {001}<110> multipass rolled to a high reduction / Wang H., Lu C., Tieu K., Liu Y. *J. Materials Science & Technology*, 2021, vol. 76, P. 231–246. DOI: 10.1016/j.jmst.2020.10.020
195. Warren J.A. et al. Extending phase field models of solidification to polycrystalline materials / Warren J.A., Kobayashi R., Lobkovsky A.E., Carter W.C. *Acta Mater.*, 2003, vol. 51, P. 6035–6058. DOI: 10.1016/S1359-6454(03)00388-4
196. Wu B.L. et al. Fragmentation of large grains in AZ31 magnesium alloy during ECAE via route A / Wu B.L., Wan G., Zhang Y.D., Du X.H., Wagner F., Esling C. *Materials Science and Engineering A*, 2010, vol. 527, P. 3365–3372. DOI: 10.1016/j.msea.2010.02.040
197. Wu P.D., Huang Y., Lloyd D.J. Studying grain fragmentation in ECATE by simulating simple shear. *Scripta Materialia*, 2006, vol. 54, P. 2107–2112. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2006.03.016
198. Wu P.D., Lloyd D.J. Analysis of surface roughening in AA6111 automotive sheet. *Acta Materialia*, 2004, vol. 52, P. 1785–1798. DOI: 10.1016/j.actamat.2003.12.039
199. Wu X.-P. et al. Modeling anisotropic stress-strain response and crystallographic texture evolution in a-titanium during large plastic deformation using Taylor-type models: influence of initial texture and purity / Wu X.-P., Kalindindi S.R., Necker C., Salem A.A. *Metallurg. and Mater. Trans.* 2008, vol. 39A, P. 3046–3054. DOI: 10.1007/s11661-008-9651-x
200. Xiao N. et al. Modelling discontinuous dynamic recrystallization using a quantitative multi-order-parameter phase-field method / Xiao N., Hodgson P., Rolfe B., Li D. *Computational Materials Science*, 2018, vol. 155, P. 298–311. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.09.001
201. Yang H. et al. Temperature dependent evolution of anisotropy and asymmetry of  $\alpha$ -Ti in thermomechanical working: Characterization and modeling / Yang H., Li H., Ma J., Wei D., Chen J., Fu M.W. *Int. J. Plasticity*, 2020, vol. 127, 102650 (40 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.102650
202. Zaremba S. Sur une forme perfectionnée de la théorie de la relaxation. *Bull. Int. Acad. Sci. Cracovie*, 1903, P. 595–614.
203. Zecevic M. et al. Predicting intragranular misorientation distributions in polycrystalline metals using the viscoplastic self-consistent formulation / Zecevic M., Pantleon W., Lebensohn R.A., McCabe R.J., Knezevic M. *Acta Materialia*, 2017, vol. 140, P. 398–410. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.08.056
204. Zecevic M. et al. Modeling of intragranular misorientation and grain fragmentation in polycrystalline materials using the viscoplastic self-consistent formulation / Zecevic M., Lebensohn R.A., McCabe R.J., Knezevic M. *Int. J. Plasticity*. 2018, vol. 109, P. 193–211. DOI: 10.1016/j.ijplas.2018.06.004
205. Zecevic M. et al. Modelling recrystallization textures driven by intragranular fluctuations implemented in the viscoplastic self-consistent formulation / Zecevic M., Lebensohn R.A., McCabe R.J., Knezevic M. *Acta Materialia*, 2019, vol. 164, P. 530–546. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.11.002
206. Zecevic M. et al. Modeling of the thermo-mechanical response and texture evolution of WE43 Mg alloy in the dynamic recrystallization regime using a viscoplastic self-consistent formulation / Zecevic M., Knezevic M., McWilliams B., Lebensohn R.A. *Int. J. Plasticity*, 2020, vol. 130, 102705. DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102705
207. Zhang C. et al. The kinetics and cellular automaton modeling of dynamic recrystallization behavior of a medium carbon Cr–Ni–Mo alloyed steel in hot working process / Zhang C., Zhang L., Xu Q., Xia Y., Shen W. *Materials Science & Engineering A*, 2016, vol. 678, P. 33–43. DOI: 10.1016/j.msea.2016.09.056
208. Zhang C., Toth L.S. Polycrystal simulation of texture-induced grain coarsening during severe plastic deformation. *Materials*, 2020, vol. 13, 5834 (16 p.). DOI: 10.3390/ma13245834
209. Zhang J. et al. A multi-scale MCCPFEM framework: Modeling of thermal interface grooving and deformation anisotropy of titanium alloy with lamellar colony / Zhang J., Li H., Sun X., Zhan M. *Int. J. Plasticity*, 2020, vol. 135, 102804 (29 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102804
210. Zhao P. et al. An integrated full-field model of concurrent plastic deformation and microstructure evolution: Application to 3D simulation of dynamic recrystallization in polycrystalline copper / Zhao P., Low T.S.E., Wang Y., Niezgodna S.R. *Int. J. Plasticity*. 2016, vol. 80, P. 38–55. DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.12.010
211. Zhao P., Wang Y., Niezgodna S.R. Microstructural and micromechanical evolution during dynamic recrystallization. *Int. J. Plasticity*, 2018, vol. 100, P. 52–68. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.09.009
212. Zhou G. et al. A polycrystal plasticity based discontinuous dynamic recrystallization simulation method and its application to copper / Zhou G., Li Z., Li D., Peng Y., Zurob H.S., Wu P. *Int. J. Plasticity*, 2017, vol. 91, P. 48–76. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.01.001
213. Zhou G. et al. Misorientation development in continuous dynamic recrystallization of AZ31B alloy sheet and polycrystal plasticity simulation / Zhou G., Li Z., Li D., Peng Y., Wang H., Wu P. *Materials Science & Engineering A*, 2018, vol. 730, P. 438–456. DOI: 10.1016/j.msea.2018.05.095

**Финансирование.** Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках реализации национального проекта «Наука и университеты» (в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2021-0012).

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Financing.** The research was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the national project "Science and Universities" (within the framework of the state task in the laboratory of multi-level modeling of structural and functional materials, project No. FSNM-2021-0012).

**Conflict of interest.** The authors declare no conflict of interest.