Романов, К.А. Многоуровневая статистическая конститутивная модель на базе континуальной дислокационной динамики и ее применение для комплексного описания трансформации структуры меди при равноканальном угловом прессовании / К.А. Романов, А.И. Швейкин. – DOI: 10.15593/perm.mech/2025.4.01 // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2025. – № 4. – С. 5–23.

Perm Polytech Style: Romanov K.A., Shveykin A.I. A statistical crystal plasticity model based on continuum dislocation dynamics and its application to the comprehensive analysis of microstructure evolution in copper during equal-channel angular pressing. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2025, no. 4, pp. 5-23. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.4.01

пермский политех

ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА
№ 4, 2025
PNRPU MECHANICS BULLETIN
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2025.4.01
УДК 539.3

МНОГОУРОВНЕВАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ КОНСТИТУТИВНАЯ МОДЕЛЬ НА БАЗЕ КОНТИНУАЛЬНОЙ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ДИНАМИКИ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ КОМПЛЕКСНОГО ОПИСАНИЯ ТРАНСФОРМАЦИИ СТРУКТУРЫ МЕДИ ПРИ РАВНОКАНАЛЬНОМ УГЛОВОМ ПРЕССОВАНИИ

К.А. Романов, А.И. Швейкин

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 01 августа 2025 г.
Одобрена: 17 сентября 2025 г.
Принята к публикации:
25 сентября 2025 г.

Ключевые слова:

многоуровневые статистические конститутивные модели, континуальная дислокационная динамика, фрагментация, измельчение зерен, РКУП, размер зерна, размер фрагментов, статистически накопленные дислокации, геометрически необходимые дислокации, угол разориентации фрагментов.

АННОТАЦИЯ

В ходе технологических процессов (ТП) обработки давлением металлов и сплавов, особенно с применением методов интенсивной пластической деформации, происходит изменение их зеренной структуры. При низких гомологических температурах доминирующим процессом перестроения внутренней структуры материала является фрагментация, которая реализуется за счет образования блоков ячеек и постепенной их эволюции в субзерна и новые мелкие зерна за счет разворотов друг относительно друга в ходе деформирования.

Развитие вычислительных средств в последние десятилетия позволяет все более эффективно применять для анализа и совершенствования реальных ТП аппарат математического моделирования. При этом для исследования происходящих в ходе ТП изменений внутри материала целесообразно использовать многоуровневые конститутивные модели (КМ), основанные на принципах физической теории пластичности, за счет явного учета в них эволюции внутренней структуры материала и реализующихся механизмов деформирования. В работе предлагается новая многоуровневая статистическая КМ на базе континуальной дислокационной динамики для описания фрагментации зерен металлов с ГЦК-решеткой. Разработанная КМ комплексно описывает процесс фрагментации: учитывает эволюцию плотности статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций, а также её влияние на изменение средних значений углов разориентации, размеров фрагментов и зерен в поликристалле.

Верификация результатов моделирования осуществлялась на опытных данных для четырех проходов равноканального углового прессования меди при комнатной температуре по маршруту Вс (с поворотом заготовки). Полученные в КМ результаты предсказания изменения напряженно-деформированного состояния и ключевых параметров структуры (размеров зерен, текстуры, углов разориентации и размеров фрагментов, плотностей дислокаций) находятся в удовлетворительном соответствии с данными экспериментов.

© **Романов Кирилл Андреевич** – м. н. с. лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, e-mail: k.a.kriv@mail.ru.
Швейкин Алексей Игоревич – д. ф.-м. н., доцент, в. н. с. лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, e-mail: shveykin@pstu.ru.

Kirill A. Romanov – Junior Researcher, Laboratory of Multilevel Structural and Functional Materials Modeling, e-mail: k.a.kriv@mail.ru.
Alexey I. Shveykin – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher, Laboratory of Multilevel Structural and Functional Materials Modeling, e-mail: shveykin@pstu.ru.

Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

A STATISTICAL CRYSTAL PLASTICITY MODEL BASED ON CONTINUUM DISLOCATION DYNAMICS AND ITS APPLICATION TO THE COMPREHENSIVE ANALYSIS OF MICROSTRUCTURE EVOLUTION IN COPPER DURING EQUAL-CHANNEL ANGULAR PRESSING

K.A. Romanov, A.I. Shveykin

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 01 August 2025
Approved: 17 September 2025
Accepted for publication:
25 September 2025

Keywords:

statistical crystal plasticity models, continuum dislocation dynamics, grain fragmentation, grain refinement, ECAP, grain size, fragment size, statistically stored dislocations, geometrically necessary dislocations, fragment disorientation angle.

ABSTRACT

During metal forming processes, especially those involving severe plastic deformation techniques, the grain structure of metals and alloys undergoes significant changes. At low homologous temperatures, the predominant mechanism of microstructural reorganization is fragmentation. This process occurs through the formation of dislocation cell blocks and their gradual evolution into subgrains and new fine grains via mutual rotations during deformation.

Advances in computational capabilities over recent decades have increasingly enabled the application of mathematical modeling to analyze and optimize technological forming processes. To investigate microstructural transformations during these processes, multilevel constitutive models grounded in the crystal plasticity are particularly suitable. These models explicitly account for the evolution of internal structure and deformation mechanisms. This work proposes a novel multilevel statistical constitutive model based on continuum dislocation dynamics to describe grain fragmentation in face-centered cubic metals. The developed model comprehensively characterizes the fragmentation process by tracking the evolution of statistically stored dislocation and geometrically necessary dislocation densities, quantifying their influence on key microstructural parameters: average misorientation angle, average fragment size and average grain size in polycrystal.

Model verification was performed against experimental data from four passes of equal-channel angular pressing of copper at room temperature via route Bc (workpiece rotation between passes). The model demonstrates satisfactory agreement with experimental results in predicting stress-strain states and critical structural parameters (grain size, crystallographic textures, disorientation angle and fragment size, dislocation densities).

Введение

При изготовлении изделий, конструкций из металлов и сплавов применяются различные технологические процессы обработки металлов давлением (ОМД). Помимо классических процессов ОМД, направленных на изменение формы с попутным улучшением свойств материала, таких как, например, ковка, объемная и листовая штамповка, волочение, прокатка [1; 2], в последнее время активно развиваются процессы с использованием методов так называемой интенсивной пластической деформации (ИПД), ориентированные только на значительное улучшение свойств материала без существенного изменения формы заготовки [3–5]. Примерами процессов ИПД являются равноканальное угловое прессование (РКУП) [6; 7], кручение под высоким давлением [8; 9], многонаправленная штамповка [10; 11], обкатка роликами [12–14] и др. Основным отличием процессов ИПД от классических ОМД является высокая стесненность детали при обработке, что позволяет проводить деформирование до нескольких сотен и тысяч процентов без разрушения [4; 15]. В процессах ИПД вследствие указанной стесненности материала активно реализуются процессы фрагментации и динамической рекристаллизации, приводящие к существенному изменению размеров зерен материала [3; 5; 16; 17].

В настоящей работе под термином «фрагментация» (измельчение) будем понимать процесс перехода при низких гомологических температурах исходного крупнозернистого материала в мелкозернистый за счет реализующихся внутризеренных дислокационных механизмов деформирования, к которым относятся образование блочно-ячеистой структуры, развороты ячеек и блоков друг относительно друга с образованием субзерен и их дальнейшая трансформация в зерна за счет поворотов [3; 5; 17–19]. При гомологических температурах выше 0,5 дополнительно активизируется процесс миграции мало- и большеугловых границ, который является одним из характерных для динамической рекристаллизации механизмов деформирования [16; 20–22]. В настоящей работе происходящие при повышенных температурах механизмы деформирования не рассматриваются, то есть процесс динамической рекристаллизации остается за рамками исследования. При фрагментации реализуется уменьшение размеров зерен на мезоуровне, которое приводит к улучшению эксплуатационных физико-механических характеристик готового изделия на макроуровне. В материалах с мелким размером зерна повышается прочность, твердость, улучшаются усталостные свойства, электропроводность, магнитные свойства и др. [5]. Изделия из материалов с мелким размером зерна при низких скоростях деформа-

ции и повышенных температурах способны деформироваться в режиме сверхпластичности [5; 23]. Углубленное понимание реализующихся на мезоуровне механизмов деформирования в ходе фрагментации и управление ими с целью получения изделий с требуемыми эксплуатационными характеристиками является актуальной задачей для совершенствования технологических процессов обработки металлов.

В последние десятилетия с развитием средств вычислительной техники применение аппарата математического моделирования позволяет все более детально прогнозировать реальные технологических процессы [24]. При математическом описании поведения материала в ходе деформирования используют конститутивные модели (определяющие соотношения). В подавляющем большинстве работ используются макрофеноменологические определяющие соотношения, и большой прогресс индустрии XX в. связан с эффективным применением таких моделей в совокупности с методом конечных элементов [25–27], что позволило с высокой степенью адекватности определять напряженно-деформированное состояние материала, остаточные напряжения первого рода, силовые параметры установки и другие интегральные характеристики. Однако в макрофеноменологических моделях отсутствует возможность явным образом описать эволюцию структуры материала, которая определяет эксплуатационные характеристики изделий. Следовательно, для применения таких моделей при проектировании новых технологических процессов, в которых может реализоваться широкий спектр воздействий, для учета различных видов нагружений (траекторий деформирования) необходимо вводить напрямую аппроксимацию большого набора экспериментальных данных при разных условиях, что крайне ресурсоемко. Поэтому в последние десятилетия развиваются основанные на физических теориях многоуровневые модели (в зарубежной литературе принят термин crystal plasticity models) [24; 28–35]. Основным преимуществом многоуровневых моделей перед макрофеноменологическими является возможность явным образом учесть элементы внутренней структуры материала и реализующиеся на различных структурно-масштабных уровнях механизмы деформирования за счет введения внутренних переменных [36–38].

Многоуровневые конститутивные модели (КМ) в зависимости от гипотезы о связи переменных на соседних уровнях подразделяются на три группы: прямые (в зарубежной литературе – crystal plasticity finite element models) [24; 35; 39], статистические (в зарубежной литературе – Taylor models) [40; 41] и самосогласованные (в зарубежной литературе – self-consistent models) [24; 42]. Заметим, что статистические модели являются наиболее вычислительно эффективными и позволяют с достаточной степенью адекватности описывать технологические процессы обработки металлов. В настоящей работе в качестве базовой модели для описания изменения напряженно-деформированного состояния ГЦК-поликристалла при ИПД используется ранее разработанная двухуровневая статистическая конститутивная модель на базе физических теорий пластичности [33; 43], основными механизмами деформирования в которой являются внутризеренное дислокационное скольжение и ротации решеток кристаллитов.

Важным направлением развития аппарата многоуровневых КМ является разработка и интеграция в них корректных соотношений для учета различных механизмов деформирования, в частности, фрагментации – в соответствии с приведенной выше аргументацией. Такие расширенные КМ могут применяться для описания и совершенствования реальных технологических процессов ИПД и ОМД, а также для решения задачи функционального проектирования изделий из металлов и сплавов, в рамках которой определяется их оптимальная структура при функционировании [44]. Заметим, что ранее созданы, в том числе в коллективе, к которому относятся авторы настоящей статьи, многоуровневые КМ для описания динамической рекристаллизации [21; 22; 45–47], зернограничного скольжения [48–50], деформирования сплавов в режиме сверхпластичности [23; 51] и др. [52–54].

На сегодняшний день существует ряд конститутивных моделей для описания фрагментации, которые, согласно обзору [55; 56], можно разделить на три группы: макрофеноменологические модели [57–60], континуальные физически-ориентированные модели [61–64] и многоуровневые модели на базе физических теорий [43; 65–69]. Заметим, что макрофеноменологические и континуальные физически-ориентированные модели, согласно приведенной выше аргументации, не целесообразно использовать напрямую для описания процессов ИПД, однако часть соотношений моделей указанных типов может успешно применяться для расширения функционала многоуровневых КМ [43; 70; 71]. В рамках введенной классификации моделей найдено лишь несколько работ, в которых процесс фрагментации описывается на двух структурных уровнях – уровне зерен и уровне блоков ячеек/субзерен [58; 66]. В большинстве разработанных моделей рассматривается эволюция либо размера зерна при деформировании без явного учета эволюции более мелких структурных элементов [68; 69], либо размера отдельных ячеек/блоков ячеек/субзерен с применением гипотезы о соответствии последнего среднему размеру зерна при очень больших деформациях [43; 61–63; 65; 70]. При этом все указанные модели не в полной мере описывают процесс фрагментации в плане соответствия физическим наблюдениям. Авторам настоящей статьи не удалось найти исследований, в которых процесс фрагментации моделируется в рамках многоуровневого подхода с комплексным учетом изменения размеров зерен, субзерен, разориентации и эволюции плотностей дислокаций в них. Таким образом, можно заключить, что среди существующих моделей фрагментации мало таких, где в достаточном объеме учитываются экспериментальные наблюдения процесса измельчения, и при этом модель является вычислительно эффективной. Отметим, что авторами настоящей статьи ранее была реали-

зована двухуровневая статистическая КМ с модифицированной моделью ETMB (Y. Estrin, L.S. Toth, A. Molinari, Y. Brechet) [43], в которой рассматривалась эволюция среднего размера ячейки при РКУП меди при комнатной температуре и приближенно описывался процесс измельчения без детального учета ключевых механизмов деформирования.

Целью настоящей работы является создание математической модели, которая с детальностью, достаточной для углубленного моделирования технологических процессов обработки металлов, описывает реальную физику процесса измельчения зерен при деформировании (учитывает эволюцию плотности статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций, значения среднего размера фрагментов и зерна, угол разориентации фрагментов), но при этом является вычислительно эффективной (позволит за приемлемое время проводить моделирование поведения материала в ходе реальных технологических процессов). Предлагаемая модель фрагментации, интегрированная в многоуровневую КМ, при явном описании физических процессов перестроения зеренной структуры позволит детально и адекватно моделировать эволюцию структуры материала при различных сценариях термомеханических воздействий.

В первом разделе статьи кратко описывается структура базовой двухуровневой статистической КМ неупругого деформирования ГЦК-поликристалла. Модель фрагментации, сформулированная на базе континуальной дислокационной динамики, приводится в разделе 2. В третьем разделе содержится анализ результатов, полученных с помощью двухуровневой статистической КМ и дислокационной модели фрагментации при описании РКУП меди при комнатной температуре.

1. Базовая двухуровневая статистическая конститутивная модель для описания неупругого деформирования ГЦК-поликристалла

При использовании аппарата многоуровневого моделирования описание деформирования материала происходит на нескольких структурно-масштабных уровнях. В двухуровневой статистической КМ исследуют поведение представительного объема (ПО) материала на макроуровне, который содержит достаточное для осреднения количество кристаллитов (элементов мезоуровня). Для определения изменения напряженно-деформированного состояния и внутренней структуры в отдельном кристаллите необходимо решить систему обыкновенных дифференциальных уравнений [33].

На макроуровне напряжения в ПО равны среднему значению напряжений в отдельных кристаллитах $\mathbf{K} = \langle \boldsymbol{\kappa} \rangle$ [33], где $\mathbf{K}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа макроуровня, $\boldsymbol{\kappa} = \overset{\circ}{\rho}/\hat{\rho}\,\boldsymbol{\sigma}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа мезоуровня, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши мезоуровня, $\overset{0}{\rho}$, $\hat{\rho}$ – плотность материала кристаллита в отсчетной (разгруженной) и актуальной конфигурациях, $\langle\cdot\rangle$ – обозначение операции осреднения. В настоящей работе принимается, что отсчетная конфигурация каждого отдельного кристаллита является естественной. Для связи кинематических воздействий на макро- и мезоуровне используется расширенная гипотеза Фойгта, в которой скорость деформации для каждого отдельного кристаллита совпадает со скоростью деформаций для всего ПО [33].

В качестве основного механизма неупругого деформирования рассматривается внутризеренное дислокационное скольжение и учитываются вызванные им повороты решетки. Подробно структура такой базовой двухуровневой статистической КМ для отдельного кристаллита описана ранее в работах [33; 43]. В рамках КМ для описания внутризеренного дислокационного скольжения записываются уравнения для вычисления скорости сдвигов по системам скольжения (уравнение Орована [72]) $\dot{\gamma}^{(k)} = \rho_m^{(k)} v^{(k)} b,\ k = \overline{1,K}$, где $\rho_m^{(k)}$ – плотность подвижных дислокаций на системе скольжения k, определяемая в модели фрагментации в разделе 2, b – модуль вектора Бюргерса, $v^{(k)} = v_0 \left(\left| \tau^{(k)} \right| / \tau_c^{(k)} \right)^m H\left(\left| \tau^{(k)} \right| - \tau_c^{(k)} \right) sign\left(\tau^{(k)} \right),\ k = \overline{1,K}$ – скорость движения дислокаций на системе скольжения k, v_0 – характерная скорость движения дислокаций, $\tau^{(k)}$, $\tau_c^{(k)}$ – касательное и критическое касательное напряжение на системе скольжения k, m – показатель скоростной чувствительности материала, $H(\cdot)$ – функция Хэвисайда, $sign(\cdot)$ – знак переменной.

В качестве эволюционного уравнения для критических напряжений сдвига (закона упрочнения) используется соотношение с учетом влияния на упрочнение материала различных механизмов:

$$\begin{gathered} \tau_c^{(k)} = \tau_{c0}^{(k)} + \tau_{cHPf}^{(k)} + \tau_{cHPg}^{(k)} + \tau_{cBH}^{(k)}, \\ \tau_{cHPf}^{(k)} = k_{HPf} \Big/ \sqrt{d_f}, \\ \tau_{cHPg}^{(k)} = k_{HPg} \Big/ \sqrt{d_g}, \\ \tau_{cBH}^{(k)} = \alpha_{BH} G b \sum_{s=1}^{K} \Omega^{(ks)} \sqrt{\rho_{SSD}^{(s)}}, \end{gathered} \tag{1}$$

где $(1)_2$, $(1)_3$ – соотношения Холла – Петча, учитывающие влияние на упрочнение границ фрагментов и зерен соответственно [73–75], k_{HPf}, k_{HPg} – константы, $(1)_4$ – соотношение, аналогичное предложенному Бейли и Хиршем [76–78], учитывающее взаимодействие дислокаций, α_{BH} – параметр Бейли – Хирша, G – модуль сдвига, $\Omega^{(ki)}$ – компоненты матрицы взаимодействия дислокаций на системе скольжения с номером k с дислокациями на системе скольжения с номером s (принимают значения 1 для компланарных систем скольжения и q_{lat} для

некомпланарных систем скольжения). Заметим, что подобная форма соотношения (1) без учета влияния размера фрагментов на упрочнение применяется во многих работах, например, в [65; 68; 77; 78]. Размер фрагмента d_f, средний размер зерна d_g, плотность статистически накопленных дислокаций $\rho_{SSD}^{(s)}$ вычисляется с помощью подмодели фрагментации, подробно описанной в разделе 2.

Для описания ротации решеток кристаллитов используется модель решеточного поворота, детально описанная в работах [79–81]. Заметим, что ранее в работе [81] была показана близость получаемого в КМ отклика при использовании модели решеточного поворота и широко применяемых в многоуровневых КМ модели ротации Тейлора [82–85] и модели «материального поворота» со спином, определенном на ортогональном тензоре, сопровождающем упругую деформацию [86–89].

При применении сложных КМ для описания реальных технологических процессов, безусловно, возникает вопрос об их корректности и адекватности. Для построенных на базе дифференциальных уравнений моделей, в частности двухуровневых статистических КМ, «стандартным» методом проверки их корректности является анализ устойчивости к малым возмущениям параметров. В работе [90] разработана методика оценки устойчивости КМ к возмущениям начальных условий, воздействий и параметрам оператора, согласно которой проведены исследования устойчивости моделей, описывающих неупругое деформирование ГЦК и ГПУ металлов [91; 92]. Также отметим, что для моделирования процессов ИПД с поворотами заготовки между проходами КМ должна адекватно описывать нагружения с изменяющимся направлением деформирования. В работе [52] было проведено исследование способности базовой двухуровневой статистической КМ описывать нагружения с изломом траектории деформирования и показано, что КМ для неупругого деформирования ГЦК-поликристалла применима для описания воздействий подобного класса. Отметим, что аналогичная предложенной в настоящей работе КМ с интегрированной моделью ETMB для приближенного описания фрагментации ранее применялась для описания измельчения в ходе РКУП меди при комнатной температуре [43] и при холодной прокатке листа стали 08Х18Н10 (зарубежный аналог – AISI 304) [93]. Таким образом, согласно ранее проведенным исследованиям, двухуровневая статистическая КМ может использоваться в качестве базовой для дополнения более детальным учетом фрагментации с целью описания реальных технологических процессов.

2. Подмодель для описания фрагментации зерен на базе континуальной дислокационной динамики

В настоящей работе для описания уменьшения размеров зерен в процессе фрагментации разработана и численно реализована дислокационная модель (ДМ). Структура ДМ сформулирована на основе детального анализа физических представлений о процессе измельчения [5; 17; 94; 95] и ранее разработанной модификации [43] модели ETMB [61; 70] для приближенного описания измельчения. Дислокационная модель разработана для комплексного и адекватного учета эволюции структуры материала и ключевых механизмов деформирования в ходе процесса фрагментации и при этом обладает вычислительной ресурсоемкостью, достаточной для дальнейшего эффективного моделирования реальных технологических процессов (это подтверждается результатами расчетов, приведенными в разделе 3). Отметим, что в некоторых моделях явно, а не статистически, учитывается генерация новых зерен [68; 69], что существенно повышает ресурсоемкость модели и приводит к неэффективности (иногда – и невозможности) численного моделирования реальных технологических процессов.

Объектом исследования в дислокационной модели фрагментации является состоящий из N_g зерен представительный объем материала. Зерна в ПО отделены друг от друга большеугловыми границами зерен [95]. По аналогии с моделью ETMB [61; 70] в рамках ДМ каждому зерну приписывается эффективный (средний) фрагмент, описываемый плотностью статистически накопленных дислокаций (СНД) $\rho_{SSD}^{(i)}$, плотностью геометрически необходимых дислокаций (ГНД) $\rho_{GND}^{(i)}$, размером $d_f^{(i)}$ и углом разориентации $\theta^{(i)}$, $i=\overline{1,N_g}$. Заметим, что указанные параметры эффективного фрагмента соответствуют осредненным параметрам по всем реальным фрагментам в зерне. В настоящей работе термином «фрагмент» описывается объем материала, который отделен от других фрагментов малоугловыми геометрически необходимыми дислокационными границами, то есть при моделировании процесса фрагментации в зависимости от стадии деформирования фрагменту соответствует либо блок ячеек, либо субзерно [94; 95]. В рамках всего ПО вводятся величины удельной площади (на единицу объема) границ фрагментов S_f и границ зерен S_g.

В ДМ для описания процесса измельчения на уровне поликристалла вводятся величины среднего размера фрагментов $\overline{d}_f$ и среднего размера зерна d_g. Средний размер фрагментов определяется осреднением размеров эффективных фрагментов $d_f^{(i)}$ для зерен, которые вычисляются на основе плотностей СНД, ГНД и удельной площади границ зерен. Средний размер зерна в поликристалле определяется с помощью величины удельной площади границ зерен, которая вычисляется на основе средних углов разориентации фрагментов $\overline{\theta}$ и удельной площади границ фрагментов S_f. В соотношении для определения последней учитывается генерация новых границ фрагментов на основе средних плотностей ГНД $\overline{\rho}_{GND}$, при этом средний угол разориента-

ции фрагментов в зерне также вычисляется на основе плотности ГНД. При вычислении плотности СНД и ГНД в эффективном фрагменте учитываются ключевые дислокационные процессы, протекающие в зерне.

Введение размеров характерных элементов структуры материала на двух масштабных уровнях позволяет более подробно описать процесс фрагментации зерен на начальных этапах деформирования. В отличие от модели ETMB [61; 70], где описывается только изменение среднего размера ячейки и поэтому средний размер зерна можно определить только при очень больших деформациях в ходе процессов ИПД [5], считая его сопоставимым со средним размером ячейки, в предлагаемой дислокационной модели по отдельности описывается уменьшение размеров фрагментов и их развороты на уровне зерен на основе происходящих в них дислокационных процессов, а также на уровне поликристалла явно учитывается уменьшение среднего размера зерна за счет увеличения удельной площади границ фрагментов при переходе фрагментов в новые зерна. При этом явный переход блоков ячеек и отдельных ячеек в субзерна для сокращения ресурсоемкости в модели не описывается, но о нем косвенно можно судить по величинам углов разориентации фрагментов. В рамках приведенной в разделе 1 двухуровневой статистической КМ каждое зерно поликристалла и соответствующий ему эффективный фрагмент в ДМ описывается с помощью уравнений мезоуровня [33]. При реализации ДМ подразумевается, что исходная структура фрагментов в каждом зерне уже сформирована, и с использованием описанных ниже уравнений моделируется её эволюция при деформировании.

Рассмотрим далее подробно ключевые соотношения ДМ. На уровне эффективного фрагмента, соответствующего отдельному зерну в поликристалле, последовательно вычисляются плотность дислокаций внутри фрагмента (статистически накопленные дислокации), плотность дислокаций в границе фрагмента (геометрически необходимые дислокации), размер эффективного фрагмента и угол разориентации его с окружением. Заметим, что при описании указанных уравнений для краткости номер эффективного фрагмента опущен. На уровне поликристалла с использованием осреднения указанных выше величин для зерен определяются удельная площадь границ фрагментов, удельная площадь границ зерен, средний размер фрагментов и средний размер зерна в поликристалле.

2.1. Описание эволюции плотности дислокаций внутри фрагментов

Статистически накопленными дислокациями являются дислокации внутри фрагмента, в частности дислокации, формирующие ячейки [96]. Отметим, что в ДМ для повышения численной эффективности ячейки явно не описываются. В настоящей работе формулируется модель описания эволюции плотности СНД в рамках подхода континуальной дислокационной динамики [68; 69; 78; 97; 98], в котором суммарная плотность статистически накопленных дислокаций делится на плотность подвижных $\rho_m^{(k)}$ и неподвижных дислокаций $\rho_{im}^{(k)}$. Заметим, что в настоящей работе не рассматривается явное разделение дислокаций на краевые и винтовые, предполагая наличие дислокаций обоих типов в общей плотности СНД. В отличие от дискретной дислокационной динамики [99; 100], в которой для анализа эффектов при неупругом деформировании материала моделируется коллективное поведение отдельных дислокаций и их взаимодействие, в континуальной дислокационной динамике вводятся плотности дислокаций, описывающие дислокационные процессы интегрально (в среднем) [97].

Под подвижными дислокациями в контексте предлагаемой КМ–ДМ будем понимать такие, которые при приложении касательных напряжений, равных критическим, будут перемещаться. Подвижными дислокациями в основном являются дислокации во внутренностях, а неподвижными – дислокации в стенках ячейки, которые образуются из подвижных дислокаций при их взаимодействии друг с другом и состоят из дислокационных диполей, узлов, клубков, скоплений и т.п. Таким образом, плотность СНД в эффективном фрагменте делится на интегральную плотность подвижных дислокаций (фактически дислокаций во внутренностях ячеек) и неподвижных (дислокаций в стенках ячеек):

$$\rho_{SSD}^{(k)} = \rho_m^{(k)} + \rho_{im}^{(k)}, \quad k = \overline{1,K}. \tag{2}$$

Эволюционное уравнение для плотности подвижных дислокаций состоит из девяти слагаемых, описывающих основные механизмы взаимодействия дислокаций (соотношения (3), (5) для расчета плотности СНД приводятся согласно работам [68; 69; 78; 97; 98; 101]):

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_m^{(k)} = {} & \alpha_1 \rho_m^{(k)} \left|v^{(k)}\right| \Big/ d^{(k)} - 2\alpha_2 R_c \left(\rho_m^{(k)}\right)^2 \left|v^{(k)}\right| - \\ & - \alpha_3 \rho_m^{(k)} \left|v^{(k)}\right| \Big/ d^{(k)} + \alpha_4 \left(\left|\tau^{(k)}\right| \Big/ \tau_c^{(k)}\right)^{\xi} \rho_{im}^{(k)} \left|v^{(k)}\right| \Big/ d^{(k)} + \\ & + \alpha_5 \sum_{s=1}^{K_{cs}} P^{(k)(s)} \rho_m^{(s)} \left|v^{(k)}\right| \Big/ d^{(k)} - \alpha_6 R_c \rho_m^{(k)} \rho_{im}^{(k)} \left|v^{(k)}\right| - \\ & - \alpha_7 \rho_m^{(k)} \left|v^{(k)}\right| \Big/ d^{(k)} + \alpha_8 \left(\left|\tau^{(k)}\right| \Big/ \tau_c^{(k)}\right)^{\xi} \rho_{GND}^{(k)} \left|v^{(k)}\right| \Big/ d^{(k)} - \\ & - \alpha_9 R_c \rho_m^{(k)} \rho_{GND}^{(k)} \left|v^{(k)}\right|, \quad k = \overline{1,K},\end{aligned} \tag{3}$$

где $\alpha_1 - \alpha_9$ – коэффициенты, отвечающие за вклад различных механизмов в скорость изменения плотности подвижных, неподвижных и геометрически необходимых дислокаций [68; 69; 78; 97; 98; 101], $d^{(k)}$ – средняя длина свободного пробега дислокаций, определяемая ниже, R_c – критическое расстояние для реализации аннигиляции дислокаций, ξ – константа, K_{cs} – количество плоскостей для переползания (для ГЦК $K_{cs} = 2$), $P^{(k)(s)}$ – матрица вероятности для переползания, полу-

ченная методом Монте-Карло (компоненты могут принимать значения: (0) – нет переползания, (+1) – «приход» дислокаций на систему скольжения *k*, (–1) – «уход» дислокаций с системы скольжения *s*) [97; 102; 103].

Первые шесть слагаемых в (3) записываются на основе работ [68; 69; 78; 97; 98]. Первое слагаемое описывает увеличение плотности подвижных дислокаций за счет генерации их источниками Франка – Рида. Второе слагаемое описывает аннигиляцию двух подвижных дислокаций противоположного знака. Третье слагаемое отражает возможность подвижных дислокаций стать неподвижными СНД вследствие перехода дислокаций из внутренностей в стенки ячейки. Четвертое слагаемое описывает возможность неподвижных дислокаций стать подвижными по причине обратного перехода из стенок во внутренности ячейки при достижении критических напряжений. В пятом слагаемом учитывается переползание винтовых дислокаций (в зарубежной литературе принят термин cross-slip) из одной плоскости скольжения в другую [97; 102; 103]. Шестое слагаемое отражает аннигиляцию между подвижными и неподвижными дислокациями. Следующие слагаемые записываются по аналогии с моделью, предложенной в [101]. Седьмое слагаемое описывает переход подвижных дислокаций в ГНД по аналогии с третьим слагаемым. Восьмое слагаемое по аналогии с четвертым слагаемым учитывает возможность перехода из ГНД в подвижные дислокации. Девятое слагаемое необходимо для учета аннигиляции подвижных дислокаций и ГНД и записывается по аналогии с шестым слагаемым.

При определении значений слагаемых в (3) используется средняя длина свободного пробега дислокаций по системам скольжения $d^{(k)}$, которая вычисляется как среднее гармоническое:

$$\frac{2}{d^{(k)}} = \frac{1}{d_{\rho}^{(k)}} + \frac{1}{d_g}, \quad k = \overline{1,K}, \tag{4}$$

$$d_{\rho}^{(k)} = \frac{K_f}{\sqrt{\sum_{s=1}^{K} \Omega^{(ks)} \left(\rho_{SSD}^{(s)} + \rho_{GND}^{(s)} \right)}},$$

где $d_{\rho}^{(k)}$ – оценка средней длины свободного пробега по системе скольжения на основе плотности дислокаций в зерне, d_g – оценка средней длины свободного пробега на основе среднего размера зерна в ПО, K_f – константа. Формула (4) предложена для учета влияния границ зерен на процесс фрагментации. Первое значение в правой части (4) характеризует оценку средней длины свободного пробега на основе плотности дислокаций в зернах (оценка снизу), а второе – на основе величины среднего размера зерна (оценка сверху). Здесь под «оценкой снизу» и «оценкой сверху» подразумевается, что величина $d_{\rho}^{(k)}$ должна быть меньше величины d_g согласно физическим соображениям. Таким образом, при малых деформациях первое слагаемое будет вносить бóльший вклад в выражение для $d^{(k)}$, а с ростом деформаций (например, при очень больших деформациях в ходе ИПД) две оценки для средней длины свободного пробега будут сближаться, что свидетельствует об увеличении влияния границ зерен. Заметим, что аналогичное соотношение было предложено в работе [104] при описании деформирования материала с изменяющейся траекторией нагружения.

Для плотности неподвижных дислокаций в соответствии с (3) эволюционное уравнение выглядит следующим образом:

$$\dot{\rho}_{im}^{(k)} = \alpha_3 \rho_m^{(k)} \left| v^{(k)} \right| \Big/ d^{(k)} - \alpha_4 \left(\left| \tau^{(k)} \right| \Big/ \tau_c^{(k)} \right)^{\xi} \rho_{im}^{(k)} \left| v^{(k)} \right| \Big/ d^{(k)} - \\ - \alpha_6 R_c \rho_m^{(k)} \rho_{im}^{(k)} \left| v^{(k)} \right| - \alpha_{10} \rho_{im}^{(k)} \left| v^{(k)} \right| \Big/ d^{(k)}, \quad k = \overline{1,K}. \tag{5}$$

Последнее слагаемое в (5) по аналогии с третьим и седьмым слагаемым в (3) описывает переход некоторой доли неподвижных дислокаций в ГНД, тем самым учитывая переход стенок ячеек в границы фрагментов [101].

Коэффициенты $\alpha_1 - \alpha_{10}$ могут быть получены либо из вычислительных экспериментов дискретной дислокационной динамики [97], либо в ходе идентификации по экспериментальным данным. Отметим, что соотношения (3), (5) более детально учитывают происходящие при деформировании дислокационные процессы на системах скольжения в отличие от модели ETMB, где аналогичные процессы учитываются интегрально [61; 70].

2.2. Описание эволюции плотностей дислокаций на границах фрагментов

Геометрически необходимые дислокации – дислокации, составляющие геометрически необходимые границы между фрагментами. Скорость изменения плотности геометрически необходимых дислокаций вычисляется аналогично плотности подвижных и неподвижных СНД на основе соотношений (3), (5) [101]:

$$\dot{\rho}_{GND}^{(k)} = \alpha_7 \rho_m^{(k)} \left| v^{(k)} \right| \Big/ d^{(k)} - \alpha_8 \left(\left| \tau^{(k)} \right| \Big/ \tau_c^{(k)} \right)^{\xi} \rho_{GND}^{(k)} \left| v^{(k)} \right| \Big/ d^{(k)} \\ - \alpha_9 R_c \rho_m^{(k)} \rho_{GND}^{(k)} \left| v^{(k)} \right| + \alpha_{10} \rho_{im}^{(k)} \left| v^{(k)} \right| \Big/ d^{(k)}, \quad k = \overline{1,K}. \tag{6}$$

Заметим, что для определения плотности ГНД зачастую используют формулу на основе тензора Ная, представляющего собой ротор от скорости неупругой деформации [68; 78; 105; 106]. Однако при таком способе вычисления плотности ГНД явно не учитываются дислокационные процессы, которые необходимо принимать во внимание при сложном нагружении.

2.3. Описание эволюции размера эффективного фрагмента

Размер эффективного фрагмента в зерне определяется как среднее значение $d_{\rho}^{(k)}$ по всем системам скольжения:

$$d_f = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} d_{\rho}^{(k)} . \quad (7)$$

Далее по найденным размерам эффективных фрагментов аналогично модифицированной модели ETMB [43] вычисляется средний размер фрагментов в поликристалле. Отметим, что при больших деформациях он будет сопоставим со средним размером зерна.

2.4. Описание разориентации фрагментов

В ДМ моделирование разориентации фрагментов в зерне описывается с использованием доли ГНД, составляющих границы фрагментов, и для среднего угла разориентации θ в рамках зерна записывается соотношение на основе известной зависимости [107; 108]:

$$\dot{\theta} = \beta \frac{b}{2} \left(\rho_{GND}\right)^{-1/2} \dot{\rho}_{GND} , \quad (8)$$

где $\rho_{GND} = \sum_{k=1}^{K} \rho_{GND}^{(k)}$ – суммарное значение плотности ГНД на системах скольжения в рамках эффективного фрагмента, β – коэффициент.

В рамках ДМ соотношение (8) описывает в среднем разориентацию фрагментов в зерне. При этом при деформировании реального материала при увеличении разориентации между фрагментами (блоками ячеек, субзернами) происходит увеличение числа новых зерен в поликристалле за счет трансформации в них фрагментов. Однако в предлагаемой статистической КМ–ДМ реализуется работа с постоянным количеством зерен в ПО, для описания изменения средних размеров которых вводится соответствующая внутренняя переменная модели. Принятие указанной гипотезы связано с необходимостью сохранения относительной простоты и умеренной вычислительной ресурсоемкости модели.

По вычисленным в соотношениях (7), (8) для отдельных эффективных фрагментов характеристикам далее определяются величины для всего поликристалла в целом. Заметим, что в уравнениях ниже используются величины, полученные объемным осреднением по всем составляющим ПО зернам.

2.5. Описание изменения удельной площади границ фрагментов и границ зерен

Для описания процесса фрагментации вводится удельная к объему всего поликристалла площадь границ фрагментов S_f [109; 110]. В работе учитывается изменение S_f за счет двух механизмов. Первый механизм описывает формирование границ фрагментов, в рамках которого происходит увеличение удельной площади при перестройке дислокационной структуры в ходе деформирования. Второй механизм учитывает уменьшение удельной площади границ фрагментов при трансформации их в границы зерен в ходе разворотов. Тогда эволюционное соотношение для удельной площади границ фрагментов в ПО можно записать следующим образом [109; 110]:

$$\begin{aligned} \dot{S}_f &= \dot{S}_f^{+} + \dot{S}_f^{-} , \\ \dot{S}_f^{+} &= \zeta_1 \left(b/\theta_0\right) \bar{\dot{\rho}}_{GND} , \\ \dot{S}_f^{-} &= -\zeta_2 S_f \bar{\dot{\theta}} , \end{aligned} \quad (9)$$

где θ_0 – угол разориентации новообразованной границы фрагмента, ζ_1, ζ_2 – константы, описывающие долю влияния соответствующих механизмов, $\bar{\dot{\rho}}_{GND} = \sum_{i=1}^{N_g} w^{(i)} \dot{\rho}_{GND}^{(i)}$ – средняя по объему скорость изменения суммарной плотности ГНД, $\bar{\dot{\theta}} = \sum_{i=1}^{N_g} w^{(i)} \dot{\theta}^{(i)}$ – среднее по объему значение скорости изменения угла разориентации фрагментов, $w^{(i)} = \left(d_f^{(i)}\right)^3 \Big/ \sum_{j=1}^{N_g} \left(d_f^{(j)}\right)^3$ – объемная доля эффективного фрагмента i в ПО, вычисляемая по среднему размеру фрагментов в зерне (7).

По аналогии с границами фрагментов для границ зерен в рамках ПО также можно ввести величину удельной площади границ зерен S_g и записать соотношение для её эволюции, которое учитывает изменение удельной площади границ зерен за счет разворотов фрагментов [109; 110]:

$$\dot{S}_g = \eta S_f \bar{\dot{\theta}} , \quad (10)$$

где η – константа.

2.6. Описание эволюции среднего размера фрагментов и среднего размера зерна

Средний размер фрагментов в поликристалле вычисляется объемным осреднением по размерам эффективных фрагментов в отдельных зернах:

$$\bar{d}_f = \sum_{i=1}^{N_g} w^{(i)} d_f^{(i)} . \quad (11)$$

В поликристалле $\bar{d}_f$ вводится по аналогии с модифицированной моделью ETMB [43] для описания процесса фрагментации с учетом дислокационных процессов, происходящих на уровне отдельных фрагментов в зерне. При этом в ДМ дополнительно вводится средний размер зерна в ПО, который определяется с учетом переходов фрагментов в новые зерна. Совокупность введенных соотношений позволяет более адекватно описать процесс фрагментации на начальных этапах деформирования.

Для описания эволюции среднего размера зерна в поликристалле используется стереологическое соотношение, основанное на удельной площади границ зерен в ПО [109; 110]:

$$d_g = 2/S_g . \quad (12)$$

3. Результаты и обсуждение

В разделе приведены результаты моделирования равноканального углового прессовании меди при комнатной температуре, полученные с помощью разработанной многоуровневой КМ–ДМ, описанной в разделах 1 и 2.

В ходе равноканального углового прессования происходит многократное продавливание заготовки через матрицу в виде двух пересекающихся каналов с внутренним углом Φ, внешним углом Ψ и одинаковой площадью поперечного сечения, вследствие чего в образце происходит простой сдвиг в области соединения каналов матрицы [7]. Для приближенного моделирования РКУП по маршруту Вс при $\Phi = 90°$, $\Psi = 20°$ в статистической КМ использовался кинематический способ определения нагружения. Для поликристалла по предложенному в [111] алгоритму задавалась история изменения градиента скорости перемещений $\hat{\nabla}\mathbf{V}^{\mathrm{T}}(t)$, где $\hat{\nabla}$ – оператор Гамильтона в актуальной конфигурации, $\mathbf{V}(t)$ – скорость движения материальной точки на макроуровне, которая имитирует характерные для маршрута Вс повороты заготовки на 90º по часовой стрелке вокруг продольной оси между проходами. Для соответствия реальному процессу РКУП в КМ задавалась разгрузка между проходами, для моделирования которой использовался итерационный подход с заданием градиента скорости пропорциональным тензору напряжений с отрицательным коэффициентом (–0.01) (ГПа·с)$^{-1}$. Для исследования влияния РКУП на механические свойства образца в настоящей работе проводился расчет для одноосного растяжения заготовки без предварительной обработки РКУП и после различного числа проходов и разгрузки. Для описания в КМ одноосного растяжения вдоль оси Ox_1 лабораторной системы координат (ЛСК) задавался постоянный транспонированный градиент скорости макроуровня в следующем виде $\hat{\nabla}\mathbf{V}^{\mathrm{T}} = \dot{\varepsilon}\mathbf{p}_1\mathbf{p}_1 - \dot{\varepsilon}/2\,\mathbf{p}_2\mathbf{p}_2 - \dot{\varepsilon}/2\,\mathbf{p}_3\mathbf{p}_3$, где $\dot{\varepsilon} = 3.3\cdot10^{-3}$ с$^{-1}$ – скорость деформации, $\mathbf{p}_i, i = \overline{1,3}$ – базис ЛСК; как показано в [112], этот способ является приближением для описания истинно одноосного нагружения с использованием статистических КМ.

Для проведения процедуры идентификации и отображения результатов моделирования вычислялись интенсивность напряжений $\sigma_M = \sqrt{3/2\,\mathbf{S}:\mathbf{S}}$, интенсивность накопленных деформаций $\varepsilon_M = \int_0^t \sqrt{2/3\,\mathbf{D}_{dev}(t):\mathbf{D}_{dev}(t)}dt$, средняя для ПО общая плотность дислокаций на системах скольжения $\rho_{tot} = \frac{1}{N_g}\sum_{i=1}^{N_g}\sum_{j=1}^{K}\left(\rho_{SSD}^{(i)(j)} + \rho_{GND}^{(i)(j)}\right)$, для чего использовались девиатор напряжений $\mathbf{S} = \mathbf{K} - 1/3\,I_1(\mathbf{K})\mathbf{I}$ и девиатор симметричной части градиента скорости перемещений $\mathbf{D}_{dev}(t) = \mathbf{D}(t) - 1/3\,I_1(\mathbf{D}(t))\mathbf{I}$.

В ходе идентификации с использованием платформы IOSO [113], возможности которой включают в себя многокритериальную и многопараметрическую оптимизацию сложных нелинейных систем, подбирались такие значения параметров модели, при которых достигается оптимальное соответствие экспериментальным данным по напряжениям течения при растяжении образца без предварительного РКУП $\sigma_M(\varepsilon_M)$, общей плотности дислокаций $\rho_{tot}(j)$ и среднему размеру зерна $d_g(j)$ после различного числа проходов РКУП $j = \overline{1, N_{pass}}$. Верификация результатов моделирования осуществлялась по пределам текучести на растяжение $\sigma_{0.2}(j)$ и текстурам после различного числа проходов РКУП $j = \overline{1, N_{pass}}$, N_{pass} – общее число рассматриваемых проходов РКУП. При этом часть параметров является известными справочными данными и их значения были взяты из литературных источников [68; 78; 86; 114]. В таблице приведены значения и источник определения параметров моделей.

Параметры КМ и ДМ для меди

Parameters of CM and DM for copper

π_{1111}	π_{1122}	π_{1212}	q_{lat}	m	τ_{c0}	b	G
168,4 ГПа [114]	121.4 ГПа [114]	75,4 ГПа [114]	1,4 [86]	83,3 [86]	0,008 ГПа *	$2{,}56\cdot10^{-10}$ м [68]	44,7 ГПа [68]
v_0	ξ	α_{BH}	k_{HPf}	k_{HPg}	K_f	β	ζ_1
10^{-7} м/с	0,5 [78]	0,0222	10^{-6} ГПа·м$^{1/2}$	10^{-4} ГПа·м$^{1/2}$	14,4	$4{,}9\cdot10^{3}$	$4{,}7\cdot10^{3}$
ζ_2	η	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6
45	0,1	0,57	3,0	0,1	0,03	0,018	2,0
α_7	α_8	α_9	α_{10}	$\rho_{GND}\big\vert_{t=0}$	$\rho_{m,im}\big\vert_{t=0}$	$\theta\big\vert_{t=0}$	$d_g\big\vert_{t=0}$
0,06	0,003	1,0	0,005	10^{12} м$^{-2}$	$1{,}4\cdot10^{13}$ м$^{-2}$	0,2º	60 мкм [115]

Примечание: *Значения параметров, определенные в процедуре идентификации, приведены без ссылок на литературный источник.

На рис. 1 приведена зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций для растяжения вдоль оси Ox_1 ЛСК без предварительного РКУП.

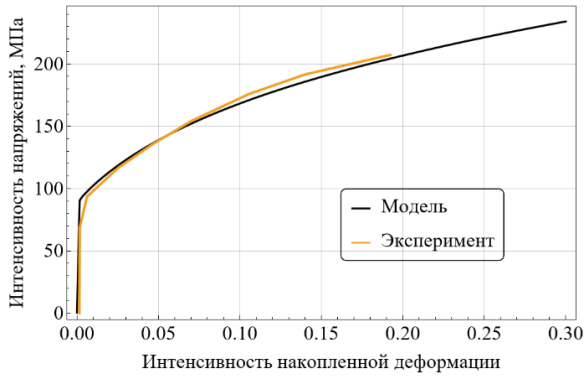


Рис. 1. Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленной деформации для растяжения вдоль оси Ox_1 ЛСК без предварительного РКУП

Fig. 1. Dependences of the equivalent stress on equivalent strain for tension along the Ox_1 axis of the LCS without prior ECAP

Согласно результатам на рис. 1, разработанная модель корректно описывает монотонное нагружение образца. Полученные результаты по пределам текучести на растяжение после одного и двух проходов РКУП по маршруту Вс (270 и 384 МПа соответственно) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными, приведенными в работе [116] (295 и 372 МПа).

При пластическом деформировании материалов уже на начальных этапах в них образуется характерная для проводимого процесса нагружения текстура, которая оказывает существенное влияние на дальнейший процесс деформирования и свойства материала. Прямые полюсные фигуры на рис. 2, полученные в двухуровневой статистической КМ, качественно соответствуют экспериментальным текстурам, приведенным в [111]. По результатам на рис. 2 видно, что текстуры в зависимости от прохода не меняют своего положения относительно плоскости сдвига, которая для РКУП по маршруту Вс меняется от прохода к проходу. Плоскостью сдвига на рис. 2 является плоскость НЭ–ПН, где НЭ – направление экструзии, ПН – перпендикулярное НЭ направление.

На рис. 3 приведены зависимости средних по поликристаллу плотностей дислокаций, среднего размера фрагментов и среднего размера зерна от интенсивности накопленной деформации после четырех проходов РКУП по маршруту Вс.

По результатам на рис. 3, *a* можно заключить, что разработанная ДМ качественно описывает экспериментальную зависимость плотностей дислокаций от числа проходов РКУП [115] и соответствует рассчитанным по модели ETMB данным [116]. Результаты моделирования демонстрируют резкий рост плотности после первого прохода, который вызван сменой траектории нагружения в начале второго этапа деформирования. При изменении направления нагружения в КМ активируются
неактивные на первом этапе системы скольжения, на которых плотность дислокаций не изменилась (или изменилась незначительно) за первый проход. Это приводит к тому, что при втором проходе, согласно уравнениям (3), (5), (6), плотности дислокаций на системах скольжения активно растут за счет генерации дислокаций. Похожая картина наблюдается на третьем и четвертом проходах, но в меньшей степени, так как распределение плотностей дислокаций на системах скольжения становится более однородным. Таким образом, возможным направлением развития предложенной ДМ (и аппарата континуальной дислокационной динамики в целом) является модификация соотношений (3), (5), (6) более детальным учетом дислокационных реакций, проявляющихся при нагружениях с изломом траектории деформирования.

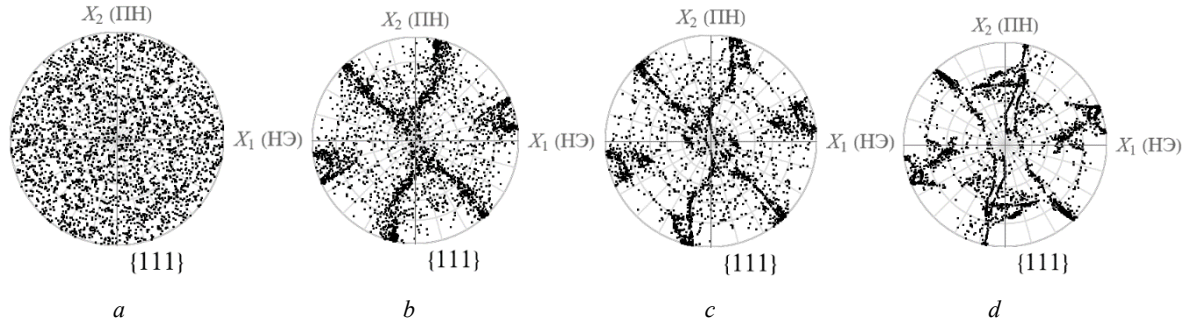
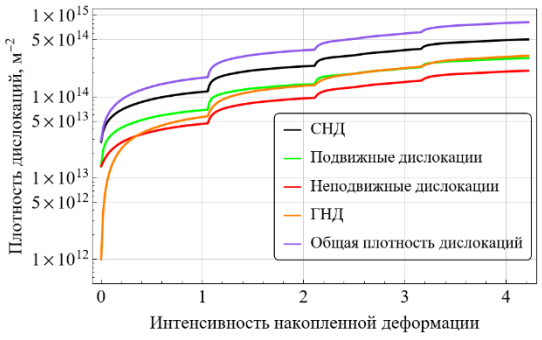
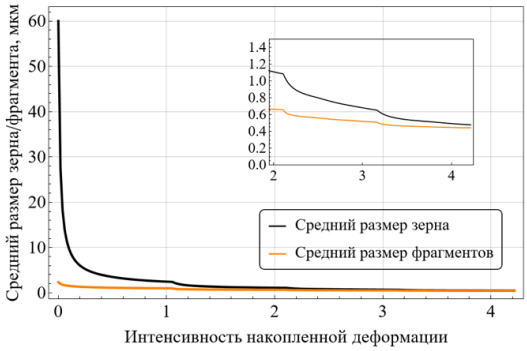


Рис. 2. Текстуры после различного числа проходов РКУП по маршруту Вс: *a* – начальная; *b* – после первого прохода; *c* – после второго прохода, *d* – после четвертого прохода

Fig. 2. Textures after different numbers of ECAP passes via route Bc: *a* – initial state; *b* – by the end of the first pass; *c* – by the end of the second pass; *d* – by the end of the fourth pass



a



b

Рис. 3. Зависимости: *a* – плотности дислокаций, *b* – среднего размера фрагментов и среднего размера зерна от интенсивности накопленной деформации после четырех проходов РКУП по маршруту Вс

Fig. 3. Dependences of (*a*) – the dislocation density, (*b*) – the average fragment size and the average grain size on the equivalent strain after four ECAP passes via route Bc

Данные рис. 3, *b*, показывают, что полученные в ДМ значения среднего размера зерна после четвертого прохода РКУП (0,5 мкм) удовлетворительно соответствует экспериментальным данным [115] (0,3 мкм) и [116] (0,7 мкм). Также полученные зависимости среднего размера зерна от числа проходов в целом соответствуют результатам работ с использованием других моделей фрагментации [68; 116]. При больших деформациях (после четвертого прохода РКУП) средний размер зерна и средний размер фрагментов практически совпадают, что согласуется с известным в литературе фактом [117]. Заметим, что в ранее предложенной модификации модели ETMB [43] средний размер ячейки получался меньше среднего размера фрагмента и среднего размера зерна в ДМ, что иллюстрирует лучшую адекватность разработанной КМ–ДМ.

На рис. 4 приведена зависимость среднего угла разориентации фрагментов после четырех проходов РКУП от интенсивности накопленной деформации, которая качественно согласуется с расчетными и экспериментальными данными [116].

Разработанная многоуровневая КМ для описания напряженно-деформированного состояния и фрагментации зерен материала относится к классу статистических моделей, которые, как отмечено во введении, являются более вычислительно эффективными по сравнению с самосогласованными и прямыми моделями. При численной реализации модели использовался компонентно-ориентированный подход к программированию [118], что в совокупности с использованием оптимизированной библиотеки векторно-матричной алгебры и апробированных численных схем [33] позволило создать эффективные численные реализации разработанной многоуровневой КМ.

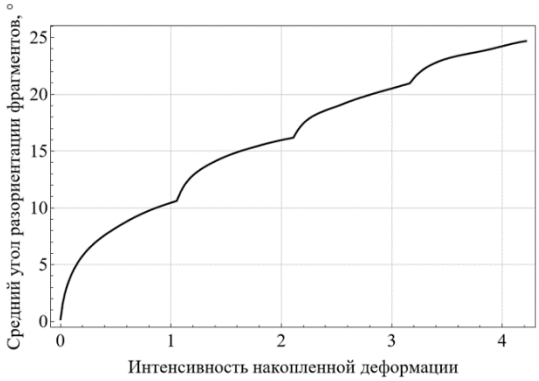


Рис. 4. Зависимость среднего угла разориентации фрагментов в ПО от интенсивности накопленной деформации после четырех проходов РКУП

Fig. 4. Dependence of the average fragment disorientation angle in the representative volume element on the equivalent strain after four ECAP passes

Заключение

В работе предложена новая двухуровневая статистическая конститутивная модель на базе континуальной дислокационной динамики для комплексного описания фрагментации зерен в ходе технологических процессов обработки металлов и сплавов. В отличие от большинства существующих моделей фрагментации, созданная модель совокупно учитывает эволюцию плотностей статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций, значений среднего размера фрагментов и зерен, угла разориентации фрагментов и, следовательно, позволяет детальней описывать изменение внутренней структуры материала в ходе реальных технологических процессов механической обработки и её влияние на характеристики изделия на макроуровне. Разработанная модель применена для описания поведения медного образца при равноканальном угловом прессовании по маршруту Вс при комнатной температуре. Полученные результаты моделирования согласуются с данными натурных экспериментов и свидетельствуют о способности модели адекватно описывать напряженно-деформированное состояние исходного образца, зависимость пределов текучести от числа проходов, эволюцию плотности статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций, значений среднего размера фрагментов и зерен, среднего угла разориентации фрагментов.

В расчетах выявлено, что плотности дислокаций резко повышаются при смене направления деформирования, что вызвано их неравномерным распределением по системам скольжения. В связи с этим перспективным представляется более детальный учет в модели дислокационных реакций, проявляющихся при смене нагружения. Кроме того, дальнейшее развитие модели может быть связано с более полным учетом влияния изменяющейся температуры и скорости деформации.

Библиографический список

1. Начала металлургии: учебник для вузов / В.И. Коротич [и др.] / под ред. В.И. Коротича. – Екатеринбург: УГТУ, 2000. – 392 с.
2. Металлургические технологии / Ю.Н. Симонов [и др.]. – Пермь: Издательство ПНИПУ, 2012. – 293 с.
3. Langdon, T.G. Twenty-five years of ultrafine-grained materials: Achieving exceptional properties through grain refinement / T.G. Langdon // Acta Materialia. – 2013. – Vol. 62, no. 19. – P. 7035–7059. DOI: 10.1016/j.actamat.2013.08.018
4. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances / K. Edalati [et al.] // Materials Research Letters. – 2022. – Vol. 10, no. 4. – P. 163–256. DOI: 10.1080/21663831.2022.2029779
5. Ultrafine-Grained Materials / R.Z. Valiev [et al.]. – Cham: Springer International Publishing, 2024. – 177 p. DOI: 10.1007/978-3-031-31729-3
6. Plastic working of metals by simple shear / V.M. Segal [et al.] // Russian metallurgy (Metally). – 1981. – Vol. 1. – P. 99–105.
7. Valiev, R.Z. Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement / R.Z. Valiev, T.G. Langdon // Progress in Materials Science. – 2006. – Vol. 51. – P. 881–981. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2006.02.003
8. Zhilyaev, A.P. Using high-pressure torsion for metal processing: Fundamentals and applications / A.P. Zhilyaev, T.G. Langdon // Progress in Materials Science. – 2008. – Vol. 53. – P. 893–979. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2008.03.002
9. Edalati, K. A Review on High-Pressure Torsion (HPT) from 1935 to 1988 / K. Edalati, Z. Horita // Materials Science & Engineering A. – 2016. – Vol. 652. – P. 325–352. DOI: 10.1016/j.msea.2015.11.074.
10. Salishchev, G.A. Formation of submicrocrystalline structure in the titanium alloy VT8 and its influence on mechanical properties / G.A. Salishchev, O.R. Valiakhmetov, R.M. Galeyev // Journal of materials science. – 1993. – Vol. 28. – P. 2898–2902. DOI: 10.1007/BF00354692
11. Effect of Pass Strain on Grain Refinement in 7475 Al Alloy during Hot Multidirectional Forging / O. Sitdikov [et al.] // Materials Transactions. – 2004. – Vol. 45, no. 7. – P. 2232–2238. DOI: 10.2320/matertrans.45.2232
12. Novel ultra-high straining process for bulk materials – development of the accumulative roll-bonding (ARB) process / Y. Saito [et al.] // Acta Materialia. – 1999. – Vol. 47, no. 2. – P. 579–583. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00365-6
13. ARB (Accumulative Roll-Bonding) and other new Techniques to Produce Bulk Ultrafine Grained Materials / N. Tsuji [et al.] // Advanced engineering materials. – 2003. – Vol. 5, no. 5. – P. 338–344. DOI: 10.1002/adem.200310077
14. Jamaati, R. Effect of stacking fault energy on nanostructure formation under accumulative roll bonding (ARB) process / R. Jamaati, M.R. Toroghinejad, H. Edris // Materials Science & Engineering A. – 2013. – Vol. 578. – P. 191–196. DOI: 10.1016/j.msea.2013.04.090
15. Estrin, Y. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science / Y. Estrin, A. Vinogradov // Acta Materialia. – 2013. – Vol. 61. – P. 782–817. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.10.038
16. Dynamic and post-dynamic recrystallization under hot, cold and severe plastic deformation conditions / T. Sakai [et al.] // Progress in Materials Science. – 2014. – Vol. 60. – P. 130–207. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2013.09.002.
17. Structural evolutions of metallic materials processed by severe plastic deformation / Y. Cao [et al.] // Materials Science & Engineering R. – 2018. – Vol. 133. – P. 1–59. DOI: 10.1016/j.mser.2018.06.001
18. Рыбин, В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов / В.В. Рыбин. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.
19. Останина, Т.В. Измельчение зеренной структуры металлов и сплавов при интенсивном пластическом деформировании: экспериментальные данные и анализ механизмов / Т.В. Останина, А.И. Швейкин, П.В. Трусов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2020. – № 2. – С. 85–111. DOI: 10.15593/perm.mech/2020.2.08
20. Alaneme, K.K. Recrystallization mechanisms and microstructure development in emerging metallic materials: A review / K.K. Alaneme, E.A. Okotete // Journal of Science: Advanced Materials and Devices. – 2019. – Vol. 4, no. 1. – P. 19–33. DOI: 10.1016/j.jsamd.2018.12.007
21. Trusov, P. Description of Dynamic Recrystallization by Means of An Advanced Statistical Multilevel Model: Grain Structure Evolution Analysis / P. Trusov, N. Kondratev, A. Podsedertsev // Crystals. – 2022. – Vol. 12. – 653. DOI: 10.3390/ cryst12050653
22. Trusov, P. Grain Structure Rearrangement by Means the Advanced Statistical Model Modified for Describing Dynamic Recrystallization / P. Trusov, N. Kondratev, A. Podsedertsev // Metals. – 2023. – Vol. 13. – 113. DOI: 10.3390/met13010113
23. Трусов, П.В. Многоуровневая модель для описания пластического и сверхпластического деформирования поликристаллических материалов / П.В. Трусов, Э.Р. Шарифуллина, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2019. – Т. 22, № 2. – С. 5–23. DOI: 10.24411/1683-805X-2019-12001
24. Handbook of Materials Modeling. Methods: Theory and Modeling / ed. by W. Andreoni, S. Yip. – Cham: Springer International Publishing, 2020. – 1971 p. DOI: 10.1007/978-3-319-44677-6
25. Hibbitt, H.D. A finite element formulation of large strain and large displacement / H.D. Hibbitt, P.V. Marcal, J.R. Rice // International Journal of Solids and Structures. – 1970. – Vol. 6, no. 8. – P. 1069–1086. DOI: 10.1016/0020-7683(70)90048-X
26. McMeeking, R.M. Finite-element formulation for problems of large elastic-plastic deformation / R.M. McMeeking, J.R. Rice // International Journal of Solids and Structures. – 1975. – Vol. 11, no. 5. – P. 601–616. DOI: 10.1016/0020-7683(75)90033-5
27. Osias, J.R. Finite elasto-plastic deformation–I: Theory and numerical examples / J.R. Osias, J.L. Swedlow // International Journal of Solids and Structures. – 1974. – Vol. 10, no. 3. – P. 321–339. DOI: 10.1016/0020-7683(74)90081-X
28. McDowell, D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity / D.L. McDowell // International Journal of Plasticity. – 2010. – Vol. 26. – P. 1280–1309. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.02.008

29. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / F. Roters [et al.] // Acta Materialia. – 2010. – Vol. 58. – P. 1152–1211. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.10.058.

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

31. Beyerlein, I. Review of microstructure and micromechanism-based constitutive modeling of polycrystals with a low-symmetry crystal structure / I. Beyerlein, M. Knezevic // Journal of Materials Research. – 2018. – Vol. 33, no. 22. – P. 3711–3738. DOI: 10.1557/jmr.2018.333

32. DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale / F. Roters [et al.] // Computational Materials Science. – 2019. – Vol. 158. – P. 420–478. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.04.030

33. Трусов, П.В. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения / П.В. Трусов, А.И. Швейкин. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019. – 605 с. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV

34. Multilevel Models in Physical Mesomechanics of Metals and Alloys: Results and Prospects / P.V. Trusov [et al.] // Physical Mesomechanics. – 2021. – Vol. 24, no. 4. – P. 391–417. DOI: 10.1134/S1029959921040056

35. OXFORD-UMAT: An efficient and versatile crystal plasticity framework / E. Demir [et al.] // International Journal of Solids and Structures. – 2025. – Vol. 307. – 113110. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2024.113110

36. Horstemeyer, M.F. Historical review of internal state variable theory for inelasticity / M.F. Horstemeyer, D.J. Bammann // International Journal of Plasticity. – 2010. – Vol. 26, no. 9. – P. 1310–1334. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.06.005

37. Constitutive relations and their application to the description of microstructure evolution / P.V. Trusov [et al.] // Physical Mesomechanics. – 2010. – Vol. 13, no. 1–2. – P. 38–46. DOI: 10.1016/j.physme.2010.03.005

38. Maugin, G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermomechanics (1893–2013) / G.A. Maugin // Mechanics Research Communications. – 2015. – Vol. 69. – P. 79–86. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2015.06.00

39. Трусов, П.В. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели / П.В. Трусов, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2011-2. – Т. 14, № 5. – С. 5–30.

40. Taylor, G.I. Plastic strain in metals / G.I. Taylor // Journal of the Institute of Metals. – 1938. – Vol. 62 – P. 307–325.

41. Трусов, П.В. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели / П.В. Трусов, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2011-1. – Т. 14, № 4. – С. 17–28.

42. Lebensohn, R.A. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals: application to zirconium alloys / R.A. Lebensohn, C.N. Tomé // Acta Metallurgica et Materialia. – 1993. – Vol. 41. – P. 2611–2624. DOI: 10.1016/0956-7151(93)90130-K

43. Romanov, K. Advanced Statistical Crystal Plasticity Model: Description of Copper Grain Structure Refinement during Equal Channel Angular Pressing / K. Romanov, A. Shveykin, P. Trusov // Metals. – 2023. – Vol. 13. – 953. DOI: 10.3390/met13050953

44. Остапович, К.В. Проектирование рационально текстурированных поликристаллических изделий на основе двухуровневой статистической модели упруговязкопластического деформирования: дис. … канд. физ.-мат. наук / Остапович Кирилл Вадимович, 2023. – 123 с.

45. A Multilevel Physically Based Model of Recrystallization: Analysis of the Influence of Subgrain Coalescence at Grain Boundaries on the Formation of Recrystallization Nuclei in Metal / P. Trusov [et al.] // Materials. – 2023. – Vol. 16. – 2810. DOI: 10.3390/ma16072810

46. Chatterjee, R. Evaluating the influence of deformation variables on dynamic recrystallization behavior using a crystal plasticity model / R. Chatterjee, S.V.S. Narayana Murty, A. Alankar // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2023. – Vol. 31, no. 4. – 045002. DOI: 10.1088/1361-651X/acc961

47. A straightforward 3D polycrystal plasticity finite element method for dynamic/static recrystallization simulation / G. Zhou [et al.] // Journal of Materials Science & Technology. – 2025. – Vol. 220. – P. 180–198. DOI: 10.1016/j.jmst.2024.09.005

48. Shveykin, A. Statistical Crystal Plasticity Model Advanced for Grain Boundary Sliding Description / A. Shveykin, P. Trusov, E. Sharifullina // Crystals. – 2020. – Vol. 10. – 822. DOI: 10.3390/cryst10090822

49. Crystal plasticity based modeling of grain boundary sliding in magnesium alloy AZ31B sheet / Z. Li [et al.] // Transactions of Nonferrous Metals Society of China. – 2021. – Vol. 31, no. 1. – P. 138–155. DOI: 10.1016/S1003-6326(20)65483-8

50. Venkataraman, A. A crystal plasticity model with an atomistically informed description of grain boundary sliding for improved predictions of deformation fields / A. Venkataraman, M.D. Sangid // Computational Materials Science. – 2021. – Vol. 197. – 110589. DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110589

51. Li, G. A new set of physically-based unified viscoplastic constitutive equations for superplastic deformation of Al-Zn-Mg-Cu alloy / G. Li, H. Ding, J. Wang // Mechanics Research Communications. – 2022. – Vol. 123. – 103904. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2022.103904

52. Shveykin, A. Some Issues with Statistical Crystal Plasticity Models: Description of the Effects Triggered in FCC Crystals by Loading with Strain-Path Changes / A. Shveykin, K. Romanov, P. Trusov // Materials. – 2022. – Vol. 15, no. 19. – 6586. DOI: 10.3390/ma15196586

53. Trusov, P.V. The three-level elastoviscoplastic model and its application to describing complex cyclic loading of materials with different stacking fault energies / P.V. Trusov, D.S. Gribov // Materials. – 2022. – Vol. 15. – 760 (17 p.). DOI: 10.3390/ma15030760

54. Швейкин, А.И. Двухуровневая конститутивная модель металла с комплексным учетом изменяющихся температурно-скоростных условий / А.И. Швейкин, А.А. Вшивкова, П.В. Трусов // Физическая мезомеханика. – 2024. – Т. 27, № 2. – С. 50–68. DOI: 10.55652/1683-805X_2024_27_2_50-68

55. Трусов, П.В. Эволюция зеренной структуры металлов и сплавов при интенсивном пластическом деформировании: континуальные модели / П.В. Трусов, Т.В. Останина, А.И. Швейкин // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2022. – № 1. – С. 123–155. DOI: 10.15593/perm.mech/2022.1.11

56. Трусов, П.В. Эволюция зеренной структуры металлов и сплавов при интенсивном пластическом деформировании: многоуровневые модели / П.В. Трусов, Т.В. Останина, А.И. Швейкин // Вестник Пермского национального исследо-

вательского политехнического университета. Механика. – 2022-2. – № 2. – С. 114–146. DOI: 10.15593/perm.mech/2022.2.11

57. Beygelzimer, Y. Grain refinement versus voids accumulation during severe plastic deformations of polycrystals: mathematical simulation / Y. Beygelzimer // Mechanics of Materials. – 2005. – Vol. 37. – P. 753–767. DOI: 10.1016/j.mechmat.2004.07.006

58. Petryk, H. A quantitative model of grain refinement and strain hardening during severe plastic deformation / H. Petryk, S. Stupkiewicz // Materials Science and Engineering A. – 2007. – Vol. 444. – P. 214–219. DOI: 10.1016/j.msea.2006.08.076

59. Adiabatic heating and the saturation of grain refinement during SPD of metals and alloys: experimental assessment and computer modeling / A.P. Zhilyaev [et al.] // Journal of Materials Science. – 2013. – Vol. 48. – P. 4626–4636. DOI: 10.1007/s10853-013-7254-4

60. A constitutive model incorporating grain refinement strengthening on metallic alloys / S.C. Cao [et al.] // Journal of Materials Science & Technology. – 2021. – Vol. 88. – P. 233–239. DOI: 10.1016/j.jmst.2021.02.004

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

62. Borodin, E.N. Non-equilibrium approach to prediction of microstructure evolution for metals undergoing severe plastic deformation / E.N. Borodin, V. Bratov // Materials Characterization. – 2018. – Vol. 141. – P. 267–278. DOI: 10.1016/j.matchar.2018.05.002

63. Firouzabadi, S.S. Cell-structure and flow stress investigation of largely strained non-heattreatable Al-alloys using dislocation based model / S.S. Firouzabadi, M. Kazeminezhad // Materials Science & Engineering A. – 2019. – Vol. 739. – P. 167–172. DOI: 10.1016/j.msea.2018.10.007

64. Coupled quantitative modeling of microstructural evolution and plastic flow during continuous dynamic recrystallization / F. Chen [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2022. – Vol. 156. – 103372. DOI: 10.1016/j.ijplas.2022.103372

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

66. Frydrych, K. A three-scale crystal plasticity model accounting for grain refinement in fcc metals subjected to severe plastic deformations / K. Frydrych, K. Kowalczyk-Gajewska // Materials Science & Engineering. – 2016. – Vol. 658. – P. 490–502. DOI: 10.1016/j.msea. 2016.01.101

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

68. Continuum dislocation dynamics-based grain fragmentation modeling / A.H. Kobaissy [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2019. – Vol. 114. – P. 252–271. DOI: 10.1016/j.ijplas.2018.11.006

69. Modeling of the ECAP Induced Strain Hardening Behavior in FCC Metals / A.H. Kobaissy [et al.] // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2020. – Vol. 51, no. 10. – P. 5453–5474. DOI: 10.1007/s11661-020-05971-2

70. Toth, L.S. Strain hardening at large strains as predicted by dislocation based polycrystal plasticity model / L.S. Toth, A. Molinari, Y. Estrin // Journal of Engineering Materials and Technology. – 2002. – Vol. 124. – P. 71–77. DOI: 10.1115/1.1421350

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

72. Orowan, E. Problems of plastic gliding / E. Orowan // Proceedings of the Physical Society. – 1940. – Vol. 52, no. 1. – 8 p. DOI: 10.1088/0959-5309/52/1/303

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

74. Petch, N.J. The cleavage strength of polycrystalls / N.J. Petch // Journal of the Iron and Steel Institute. – 1953. – Vol. 174. – P. 25–28.

75. Cordero, Z.C. Six decades of the Hall–Petch effect – a survey of grain-size strengthening studies on pure metals / Z.C. Cordero, B.E. Knight, C.A. Schuh // International Materials Reviews. – 2016. – Vol. 61, no. 8. – P. 495–512. DOI: 10.1080/09506608.2016.1191808

76. Bailey, J.E. The dislocation distribution, flow stress, and stored energy in cold-worked polycrystalline silver / J.E. Bailey, P.B. Hirsch // Philosophical Magazine. – 1960. – Vol. 5, no. 23. – P. 485–497. DOI: 10.1080/14786436008238300

77. Ohashi, T. A multiscale approach for modeling scale-dependent yield stress in polycrystalline metals / T. Ohashi, M. Kawamukai, H. Zbib // International Journal of Plasticity. – 2007. – Vol. 23. – P. 897–914. DOI: 10.1016/j.ijplas.2006.10.002

78. Lyu, H. A dislocation-based model for deformation and size effect in multi-phase steels / H. Lyu, A. Ruimi, H.M. Zbib // International Journal of Plasticity. – 2015. – Vol. 72. – P. 44–59. DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.05.005

79. Трусов, П.В. О разложении движения, независимых от выбора системы отсчета производных и определяющих соотношениях при больших градиентах перемещений: взгляд с позиций многоуровневого моделирования / П.В. Трусов, А.И. Швейкин, А.Ю. Янц // Физическая мезомеханика. – 2016. – Т. 19, № 2. – С. 49–65.

80. Shveykin, A.I. Multilevel models of polycrystalline metals: comparison of relations describing the crystallite lattice rotations / A.I. Shveykin, P.V. Trusov // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2019. – Vol. 10, no. 1. – P. 1–20. DOI: 10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2018028673

81. Trusov, P. Some Issues on Crystal Plasticity Models Formulation: Motion Decomposition and Constitutive Law Variants / P. Trusov, A. Shveykin, N. Kondratev // Crystals. – 2021. – Vol. 11. – 1392. DOI: 10.3390/cryst11111392

82. Deformation Texture Prediction: From the Taylor Model to the Advanced Lamel Model / P. Van Houtte [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2005. – Vol. 21. – P. 589–624. DOI: 10.1016/j.ijplas.2004.04.011

83. Modeling Lattice Strain Evolution at Finite Strains and Experimental Verification for Copper and Stainless Steel Using in Situ Neutron Diffraction / C. Neil [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2010. – Vol. 26. – P. 1772–1791. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.03.005

84. Zecevic, M. An Implicit Formulation of the Elasto-Plastic Self-Consistent Polycrystal Plasticity Model and its Implementation in Implicit Finite Elements / M. Zecevic, M. Knezevic // Mechanics of Materials. – 2019. – Vol. 136. – 103065. DOI: 10.1016/j.mechmat.2019.103065

85. A Comparative Study between Elasto-Plastic Self-Consistent Crystal Plasticity and Anisotropic Yield Function with Distortional Hardening Formulations for Sheet Metal Forming / Z. Feng [et al.] // Mechanics of Materials. – 2020. – Vol. 148. – 103422. DOI: 10.1016/j.mechmat.2020.103422

86. Anand, L. Single-Crystal Elasto-Viscoplasticity: Application to Texture Evolution in Polycrystalline Metals at Large Strains / L. Anand // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2004. – Vol. 193. – P. 5359–5383. DOI: 10.1016/j.cma.2003.12.068

87. Latent Hardening and Plastic Anisotropy Evolution in AA6060 Aluminium Alloy / M. Khadyko [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2016. – Vol. 76. – P. 51–74. DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.07.010

88. Lieou, C.K. Thermodynamic Theory of Crystal Plasticity: Formulation and Application to Polycrystal fcc Copper / C.K. Lieou, C.A. Bronkhorst // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2020. – Vol. 138. – 103905. DOI: 10.1016/j.jmps.2020.103905

89. A Multiplicative Finite Strain Crystal Plasticity Formulation based on Additive Elastic Corrector Rates: Theory and Numerical Implementation / M. Zhang [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2021. – Vol. 137. – 102899. DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102899

90. Швейкин, А.И. Об одном подходе к численной оценке устойчивости многоуровневых конститутивных моделей материалов / А.И. Швейкин, П.В. Трусов, К.А. Романов // Вычислительная механика сплошных сред. – 2021-1. – Т. 14, № 1. – С. 61–76. DOI: 10.7242/1999-6691/2021.14.1.6

91. Швейкин, А.И. Некоторые результаты численной оценки устойчивости двухуровневой конститутивной модели ГЦК-поликристалла / А.И. Швейкин, П.В. Трусов, К.А. Романов // Вычислительная механика сплошных сред. – 2021-2. – Т. 14, № 2. – С. 127–143. DOI: 10.7242/1999-6691/2021.14.2.11

92. Shveykin, A. Stability of Crystal Plasticity Constitutive Models: Observations in Numerical Studies and Analytical Justification / A. Shveykin, P. Trusov, K. Romanov // Metals. – 2024. – Vol. 14. – 947. DOI: 10.3390/met14080947

93. Romanov, K.A. Two-level statistical constitutive model with integrated ETMB model: description of grain structure refinement of AISI 304 steel in cold bending / K.A. Romanov, A.I. Shveykin // Russian Physics Journal. – 2024. – Vol. 67 – P. 1555–1561 – DOI: 10.1007/s11182-024-03281-3

94. Overview no. 96 evolution of f.c.c. deformation structures in polyslip / B. Bay [et al.] // Acta Metallurgica et Materialia. – 1992. – Vol. 40, no. 2. – P. 205–219. DOI: 10.1016/0956-7151(92)90296-Q

95. Hansen, N. 17 – Plastic Deformation of Metals and Alloys / N. Hansen, C.Y. Barlow // Physical Metallurgy (Fifth Edition). – 2014 – P. 1681–1764. DOI: 10.1016/B978-0-444-53770-6.00017-4

96. Rezvanian, O. Statistically stored, geometrically necessary and grain boundary dislocation densities: microstructural representation and modelling / O. Rezvanian, M.A. Zikry, A.M. Rajendran // Proceedings of the royal society A. – 2007. – Vol. 463. – P. 2833–2853. DOI: 10.1098/rspa.2007. 0020

97. Predicting plastic flow and irradiation hardening of iron single crystal with mechanism-based continuum dislocation dynamics / D. Li [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2014. – Vol. 52. – P. 3–17. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.01.015

98. A study of the hot and cold deformation of twin-roll cast magnesium alloy AZ31 / H. Askari [et al.] // Philosophical Magazine. – 2014. – Vol. 94, no. 4. – P. 381–403. DOI: 10.1080/14786435.2013.853884

99. Devincre, B. Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations / B. Devincre, L. Kubin, T. Hoc // Scripta Materialia. – 2006. – Vol. 54, no. 5. – P. 741–746. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2005.10.066

100. A discrete dislocation dynamics framework for modeling polycrystal plasticity with hardening / T.N. Tak [et al.] // International Journal of Solids and Structures. – 2023. – Vol. 281. – 112442. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2023.112442

101. Motaman, S.A.H. Microstructural constitutive model for polycrystal viscoplasticity in cold and warm regimes based on continuum dislocation dynamics / S.A.H. Motaman, U. Prahl // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2019. – Vol. 122. – P. 205–243. DOI: 10.1016/j.jmps.2018.09.002

102. Models for long-/short-range interactions and cross slip in 3D dislocation simulation of BCC single crystals / M. Rhee [et al.] // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 1998. – Vol. 6, no. 4. – 467. DOI: 10.1088/0965-0393/6/4/012

103. A Continuum Dislocation Dynamics Crystal Plasticity Approach to Irradiated Body-Centered Cubic α-Iron / S.A. Pitts [et al.] // Journal of Engineering Materials and Technology. – 2022. – Vol. 144. – 011018. DOI: 10.1115/1.4052256

104. A crystallographic dislocation model for describing hardening of polycrystals during strain path changes. Application to low carbon steels / K. Kitayama [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2013. – Vol. 46. – P. 54–69. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.09.004

105. Nye, J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals / J.F. Nye // Acta Metallurgica. – 1953. – Vol. 1, no. 2. – P. 153–162. DOI: 10.1016/0001-6160(53)90054-6

106. Shizawa, K. A thermodynamical theory of gradient elastoplasticity with dislocation density tensor. I: Fundamentals / K. Shizawa, H.M. Zbib // International Journal of Plasticity. – 1999. – Vol. 15, no. 9. – P. 899–938. DOI: 10.1016/S0749-6419(99)00018-2

107. Burgers, J.M. Geometrical considerations concerning the structural irregularities to be assumed in a crystal / J.M. Burgers // Proceedings of the Physical Society. – 1940. – Vol. 52, no. 1. – P. 23–33. DOI: 10.1088/0959-5309/52/1/304

108. Kuhlmann-Wilsdorf, D. Geometrically necessary, incidental and subgrain boundaries / D. Kuhlmann-Wilsdorf, N. Hansen // Scripta Metallurgica et Materialia. – 1991. – Vol. 25, no. 7. – P. 1557–1562. DOI: 10.1016/0956-716X(91)90451-6

109. Gourdet, S. A model of continuous dynamic recrystallization / S. Gourdet, F. Montheillet // Acta Materialia. – 2003. – Vol. 51. – P. 2685–2699. DOI: 10.1016/S1359-6454(03)00078-8

110. 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 [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2018. – Vol. 106. – P. 73–87. DOI: 10.1016/j.ijplas.2018.03.002

111. Beyerlein, I.J. Texture evolution in equal-channel angular extrusion / I.J. Beyerlein, L.S. Toth // Progress in Materials Science. – 2009. – Vol. 54, no. 4. – P. 427–510. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2009.01.001

112. Bronkhorst, C.A. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals / C.A. Bronkhorst, S.R. Kalidindi, L. Anand // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences. – 1992. – Vol. 341. – P. 443–477. DOI: 10.1098/rsta.1992.0111

113. “Sigma Technology”. Novel Optimization Strategy – IOSO [Electronic resource] URL: https://iosotech.com/ (accessed: 17.08.2025).

114. Harder, J. FEM-simulation of the hardening behavior of FCC single crystals / J. Harder // Acta Mechanica. – 2001. – Vol. 150. – P. 197–217. DOI: 10.1007/BF01181812

115. Thermal stability of ultrafine grains size of pure copper obtained by equal-channel angular pressing / N. Lugo [et al.] // Journal of Materials Science. – 2010. – Vol. 45. – P. 2264–2273. DOI: 10.1007/s10853-009-4139-7

116. Influence of stacking fault energy and temperature on microstructures and mechanical properties of fcc pure metals processed by equal-channel angular pressing / F. Liu [et al.] // Materials Science and Engineering: A. – 2016. – Vol. 662. – P. 578–587. DOI: 10.1016/j.msea.2016.03.022

117. Prangnell, P.B. Ultra-fine grain structures in aluminium alloys by severe deformation processing / P.B. Prangnell, J.R. Bowen, P.J. Apps // Materials Science and Engineering A. – 2004. – Vol. 375–377. – P. 178–185. DOI: 10.1016/j.msea.2003.10.170

118. Vico: An entity-component-system based co-simulation framework / L.I. Hatledal [et al.] // Simulation Modelling Practice and Theory. – 2021. – Vol. 108. – 102243. DOI: 10.1016/j.simpat.2020.102243

References

1. Nachala metallurgii: Uchebnik dlia vuzov [Fundamentals of metallurgy: textbook for universities] / V.I. Korotich et al / Ed. by V.I. Korotich. Ekaterinburg: UGTU, 2000. 392 p.

2. Metallurgicheskie tekhnologii [Metallurgical technologies] / Iu.N. Simonov et al. Perm: PNRPU Publishing House, 2012. 293 p.

3. Langdon T.G. Twenty-five years of ultrafine-grained materials: Achieving exceptional properties through grain refinement // Acta Materialia. – 2013. – V. 62, No. 19. – P. 7035–7059. doi: 10.1016/j.actamat.2013.08.018.

4. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances / K. Edalati et al // Materials Research Letters. – 2022. – V. 10, No. 4. – P. 163–256. doi: 10.1080/21663831.2022.2029779.

5. Ultrafine-Grained Materials / R.Z. Valiev et al. – Cham: Springer International Publishing, 2024. – 177 p. doi: 10.1007/978-3-031-31729-3.

6. Plastic working of metals by simple shear / V.M. Segal et al // Russian metallurgy (Metally). – 1981. – V. 1. – P. 99–105.

7. Valiev R.Z., Langdon T.G. Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement // Progress in Materials Science. – 2006. – V. 51. – P. 881–981. doi: 10.1016/j.pmatsci.2006.02.003.

8. Zhilyaev A.P., Langdon T.G. Using high-pressure torsion for metal processing: Fundamentals and applications // Progress in Materials Science. – 2008. – V. 53. – P. 893–979. doi: 10.1016/j.pmatsci.2008.03.002.

9. Edalati K., Horita Z. A Review on High-Pressure Torsion (HPT) from 1935 to 1988 // Materials Science & Engineering A. – 2016. – V. 652. – P. 325–352. doi: 10.1016/j.msea.2015.11.074.

10. Salishchev G.A., Valiakhmetov O.R., Galeyev R.M. Formation of submicrocrystalline structure in the titanium alloy VT8 and its influence on mechanical properties // Journal of materials science. – 1993. – V. 28. – P. 2898–2902. doi: 10.1007/BF00354692.

11. Effect of Pass Strain on Grain Refinement in 7475 Al Alloy during Hot Multidirectional Forging / O. Sitdikov et al // Materials Transactions. – 2004. – V. 45, No. 7. – P. 2232–2238. doi: 10.2320/matertrans.45.2232.

12. Novel ultra-high straining process for bulk materials – development of the accumulative roll-bonding (ARB) process / Y. Saito et al // Acta Materialia. – 1999. – V. 47, No. 2. – P. 579–583. doi: 10.1016/S1359-6454(98)00365-6.

13. ARB (Accumulative Roll-Bonding) and other new Techniques to Produce Bulk Ultrafine Grained Materials / N. Tsuji et al // Advanced engineering materials. – 2003. – V. 5, No. 5. – P. 338–344. doi: 10.1002/adem.200310077.

14. Jamaati R., Toroghinejad M.R., Edris H. Effect of stacking fault energy on nanostructure formation under accumulative roll bonding (ARB) process // Materials Science & Engineering A. – 2013. – V. 578. – P. 191–196. doi: 10.1016/j.msea.2013.04.090.

15. Estrin Y., Vinogradov A. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science // Acta Materialia. – 2013. – V. 61. – P. 782–817. doi: 10.1016/j.actamat.2012.10.038.

16. Dynamic and post-dynamic recrystallization under hot, cold and severe plastic deformation conditions / T. Sakai et al // Progress in Materials Science. – 2014. – V. 60. – P. 130–207. doi: 10.1016/j.pmatsci.2013.09.002.

17. Structural evolutions of metallic materials processed by severe plastic deformation / Y. Cao et al // Materials Science & Engineering R. – 2018. – V. 133. – P. 1–59. doi: 10.1016/j.mser.2018.06.001.

18. Rybin V.V. Bol'shie plasticheskie deformatsii i razrushenie metallov [Large plastic deformations and fracture of metals]. Moscow, Metallurgiia, 1986. 224 p.

19. Ostanina T.V., Shveykin A.I., Trusov P.V. Izmel'chenie zerennoi struktury metallov i splavov pri intensivnom plasticheskom deformirovanii: eksperimental'nye dannye i analiz mekhanizmov [The grain structure refinement of metals and alloys under severe plastic deformation: experimental data and analysis of mechanisms] // PNRPU Mechanics Bulletin. 2020. No. 2. P. 85–111. doi: 10.15593/perm.mech/2020.2.08.

20. Alaneme K.K., Okotete E.A. Recrystallization mechanisms and microstructure development in emerging metallic materials: A review // Journal of Science: Advanced Materials and Devices. – 2019. – V. 4, No. 1. – P. 19–33. doi: 10.1016/j.jsamd.2018.12.007.

21. Trusov P., Kondratev N., Podsedertsev A. Description of Dynamic Recrystallization by Means of An Advanced Statistical Multilevel Model: Grain Structure Evolution Analysis // Crystals. – 2022. – V. 12. – 653. doi: 10.3390/ cryst12050653.

22. Trusov P., Kondratev N., Podsedertsev A. Grain Structure Rearrangement by Means the Advanced Statistical Model Modified for Describing Dynamic Recrystallization // Metals. – 2023. – V. 13. – 113. doi: 10.3390/met13010113.

23. Trusov P.V., Sharifullina E.R., Shveykin A.I. Mnogourovnevaia model' dlia opisaniia plasticheskogo i sverkhplasticheskogo deformirovaniia polikristallicheskikh materialov [Multilevel model for the description of plastic and superplastic deformation of polycrystalline materials] // Physical mesomechanics. 2019. V. 22, No. 5. – P. 402–419. doi: 10.1134/S1029959919050072.

24. Handbook of Materials Modeling. Methods: Theory and Modeling. / ed. by Andreoni W., Yip S. – Cham: Springer International Publishing, 2020. – 1971 p. doi: 10.1007/978-3-319-44677-6.

25. Hibbitt H.D., Marcal P.V., Rice J.R. A finite element formulation of large strain and large displacement // International Journal of Solids and Structures. – 1970. – V. 6, No. 8. – P. 1069–1086. doi: 10.1016/0020-7683(70)90048-X.

26. McMeeking R.M., Rice J.R. Finite-element formulation for problems of large elastic-plastic deformation // International Journal of Solids and Structures. – 1975. – V. 11, No. 5. – P. 601–616. doi: 10.1016/0020-7683(75)90033-5.

27. Osias J.R., Swedlow J.L. Finite elasto-plastic deformation–I: Theory and numerical examples // International Journal of Solids and Structures. – 1974. – V. 10, No. 3. – P. 321–339. doi: 10.1016/0020-7683(74)90081-X.

28. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity // International Journal of Plasticity. – 2010. – V. 26. – P. 1280–1309. doi: 10.1016/j.ijplas.2010.02.008.

29. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / F. Roters et al // Acta Materialia. – 2010. – V. 58. – P. 1152–1211. doi: 10.1016/j.actamat.2009.10.058.

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

31. Beyerlein I., Knezevic M. Review of microstructure and micromechanism-based constitutive modeling of polycrystals with a low-symmetry crystal structure // Journal of Materials Research. – 2018. – V. 33, No. 22. – P. 3711–3738. doi: 10.1557/jmr.2018.333.

32. DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale / F. Roters et al // Computational Materials Science. – 2019. – V. 158. – P. 420–478. doi: 10.1016/j.commatsci.2018.04.030.

33. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevye modeli mono- i polikristallicheskikh materialov: teoriia, algoritmy, primery primeneniia [Multilevel models of mono- and polycrystalline materials: theory, algorithms and applied examples]. Novosibirsk: Publishing House of SB RAS, 2019. 605 p. doi: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV.

34. Multilevel Models in Physical Mesomechanics of Metals and Alloys: Results and Prospects / P.V. Trusov et al // Physical Mesomechanics. – 2021. – V. 24, No. 4. – P. 391–417. doi: 10.1134/S1029959921040056.

35. OXFORD-UMAT: An efficient and versatile crystal plasticity framework / E. Demir et al // International Journal of Solids and Structures. – 2025. – V. 307. – 113110. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2024.113110.

36. Horstemeyer M.F., Bammann D.J. Historical review of internal state variable theory for inelasticity // International Journal of Plasticity. – 2010. – V. 26, No. 9. – P. 1310–1334. doi: 10.1016/j.ijplas.2010.06.005.

37. Constitutive relations and their application to the description of microstructure evolution / P.V. Trusov et al // Physical Mesomechanics. – 2010. – V. 13, No. 1–2. – P. 38–46. doi: 10.1016/j.physme.2010.03.005.

38. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermomechanics (1893-2013) // Mechanics Research Communications. – 2015. – V. 69. – P. 79–86. doi: 10.1016/j.mechrescom.2015.06.00.

39. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevye fizicheskie modeli mono- i polikristallov. Priamye modeli [Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Direct models] // Physical mesomechanics. 2013. V. 16, No. 2. P. 99–124. doi: 10.1134/S1029959913020021.

40. Taylor G.I. Plastic strain in metals // Journal of the Institute of Metals. – 1938. – V. 62 – P. 307–325.

41. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevye fizicheskie modeli mono- i polikristallov. Statisticheskie modeli [Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Statistical models] // Physical mesomechanics. 2013. V. 16, No. 1. P. 23–33. doi: 10.1134/S1029959913010037.

42. Lebensohn R.A., Tomé C.N. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals: application to zirconium alloys // Acta Metallurgica et Materialia. – 1993. – V. 41. – P. 2611–2624. doi: 10.1016/0956-7151(93)90130-K.

43. Romanov K., Shveykin A., Trusov P. Advanced Statistical Crystal Plasticity Model: Description of Copper Grain Structure Refinement during Equal Channel Angular Pressing // Metals. – 2023. – V. 13. – 953. doi: 10.3390/ met13050953.

44. Ostapovich K.V. Proektirovanie ratsional'no teksturirovannykh polikristallicheskikh izdelii na osnove dvukhurovnevoi statisticheskoi modeli uprugoviazkoplasticheskogo deformirovaniia [Design of rationally textured polycrystalline products based on a two-level statistical model of elasto-viscoplastic deformation]: Ph.D. Dissertation / Ostapovich Kirill Vadimovich, 2023. 123 p.

45. A Multilevel Physically Based Model of Recrystallization: Analysis of the Influence of Subgrain Coalescence at Grain Boundaries on the Formation of Recrystallization Nuclei in Metal / P. Trusov et al // Materials. – 2023. – V. 16. – 2810. doi: 10.3390/ma16072810.

46. Chatterjee R., Narayana Murty S.V.S, Alankar A. Evaluating the influence of deformation variables on dynamic recrystallization behavior using a crystal plasticity model // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2023. – V. 31, No. 4. – 045002. doi: 10.1088/1361-651X/acc961.

47. A straightforward 3D polycrystal plasticity finite element method for dynamic/static recrystallization simulation / G. Zhou et al // Journal of Materials Science & Technology. – 2025. – V. 220. – P. 180–198. doi: 10.1016/j.jmst.2024.09.005.

48. Shveykin A., Trusov P., Sharifullina E. Statistical Crystal Plasticity Model Advanced for Grain Boundary Sliding Description // Crystals. – 2020. – V. 10. – 822. doi: 10.3390/cryst10090822.

49. Crystal plasticity based modeling of grain boundary sliding in magnesium alloy AZ31B sheet / Z. Li et al // Transactions of Nonferrous Metals Society of China. – 2021. – V. 31, No. 1. – P. 138–155. doi: 10.1016/S1003-6326(20)65483-8.

50. Venkataraman A., Sangid M.D. A crystal plasticity model with an atomistically informed description of grain boundary sliding for improved predictions of deformation fields // Computational Materials Science. – 2021. – V. 197. – 110589. doi: 10.1016/j.commatsci.2021.110589.

51. Li G., Ding H., Wang J. A new set of physically-based unified viscoplastic constitutive equations for superplastic deformation of Al-Zn-Mg-Cu alloy // Mechanics Research Communications. – 2022. – V. 123. – 103904. doi: 10.1016/j.mechrescom.2022.103904.

52. Shveykin A., Romanov K., Trusov P. Some Issues with Statistical Crystal Plasticity Models: Description of the Effects Triggered in FCC Crystals by Loading with Strain-Path Changes // Materials. – 2022. – V. 15, No. 19. – 6586. doi: 10.3390/ma15196586.

53. Trusov P.V., Gribov D.S. The three-level elastoviscoplastic model and its application to describing complex cyclic loading of materials with different stacking fault energies // Materials. – 2022. – V. 15. – 760 (17 p.). doi: 10.3390/ma15030760.

54. Shveykin A.I., Vshivkova A.A., Trusov P.V. Dvukhurovnevaia konstitutivnaia model' metalla s kompleksnym uchetom izmeniaiushchikhsia temperaturno-skorostnykh uslovii [Two-level constitutive model of metal with a comprehensive account of temperature and strain rate changes] // Physical mesomechanics. 2024. V. 27, No. 4. P. 370–386. doi: 10.1134/S1029959924040027.

55. Trusov P.V., Ostanina T.V., Shveykin A.I. Evoliutsiia zerennoi struktury metallov i splavov pri intensivnom plasticheskom deformirovanii: kontinual'nye 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. doi: 10.15593/perm.mech/2022.1.11.

56. Trusov P.V., Ostanina T.V., Shveykin A.I. Evoliutsiia zerennoi struktury metallov i splavov pri intensivnom plasticheskom deformirovanii: mnogourovnevye modeli [Evolution of the grain structure of metals and alloys under severe plastic deformation: multilevel models] // PNRPU Mechanics Bulletin. 2022. No. 2. P. 114–146. doi: 10.15593/perm.mech/2022.2.11.

57. Beygelzimer Y. Grain refinement versus voids accumulation during severe plastic deformations of polycrystals: mathematical simulation // Mechanics of Materials. – 2005. – V. 37. – P. 753–767. doi: 10.1016/j.mechmat.2004.07.006.

58. Petryk H., Stupkiewicz S. A quantitative model of grain refinement and strain hardening during severe plastic deformation // Materials Science and Engineering A. – 2007. – V. 444. – P. 214–219. doi: 10.1016/j.msea.2006.08.076.

59. Adiabatic heating and the saturation of grain refinement during SPD of metals and alloys: experimental assessment and computer modeling / A.P. Zhilyaev et al // Journal of Materials Science. – 2013. – V. 48. – P. 4626–4636. doi: 10.1007/s10853-013-7254-4.

60. A constitutive model incorporating grain refinement strengthening on metallic alloys / S.C. Cao et al // Journal of Materials Science & Technology. – 2021. – V. 88. – P. 233–239. doi: 10.1016/j.jmst.2021.02.004.

61. A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation / Y. Estrin et al // Acta Materialia. – 1998. – V. 46, No. 15. – P. 5509–5522. doi: 10.1016/S1359-6454(98)00196-7.

62. Borodin E.N., Bratov V. Non-equilibrium approach to prediction of microstructure evolution for metals undergoing severe plastic deformation // Materials Characterization. – 2018. – V. 141. – P. 267–278. doi: 10.1016/j.matchar.2018.05.002.

63. Firouzabadi S.S., Kazeminezhad M. Cell-structure and flow stress investigation of largely strained non-heattreatable Al-alloys using dislocation based model // Materials Science & Engineering A. – 2019. – V. 739. – P. 167–172. doi: 10.1016/j.msea.2018.10.007.

64. Coupled quantitative modeling of microstructural evolution and plastic flow during continuous dynamic recrystallization / F. Chen et al // International Journal of Plasticity. – 2022. – V. 156. – 103372. doi: 10.1016/j.ijplas.2022.103372.

65. 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. – V. 38. – P. 1159–1169. doi: 10.1016/j.mechmat. 2005.12.006.

66. 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. – V. 658. – P. 490–502. doi: 10.1016/j.msea. 2016.01.101.

67. 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. – V. 49. – P. 3610–3623. doi: 10.1007/s11661-018-4676-2.

68. Continuum dislocation dynamics-based grain fragmentation modeling / A.H. Kobaissy et al // International Journal of Plasticity. – 2019. – V. 114. – P. 252–271. doi: 10.1016/j.ijplas.2018.11.006.

69. Modeling of the ECAP Induced Strain Hardening Behavior in FCC Metals / A.H. Kobaissy et al // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2020. – V. 51, No. 10. – P. 5453–5474. doi: 10.1007/s11661-020-05971-2.

70. Toth L.S., Molinari A., Estrin Y. Strain hardening at large strains as predicted by dislocation based polycrystal plasticity model // Journal of Engineering Materials and Technology. – 2002. – V. 124. – P. 71–77. doi: 10.1115/1.1421350.

71. Sheikh H., Ebrahimi R. Modeling the effect of strain reversal on grain refinement and crystallographic texture during simple shear extrusion // International Journal of Solids and Structures. – 2017. – V. 126–127. – P. 175–186. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2017.08.004.

72. Orowan E. Problems of plastic gliding // Proceedings of the Physical Society. – 1940. – V. 52, No. 1. – 8 p. doi: 10.1088/0959-5309/52/1/303.

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

74. Petch N.J. The cleavage strength of polycrystalls // Journal of the Iron and Steel Institute. – 1953. – V. 174. – P. 25–28.

75. Cordero Z.C., Knight B.E., Schuh C.A. Six decades of the Hall–Petch effect – a survey of grain-size strengthening studies on pure metals // International Materials Reviews. – 2016. – V. 61, No. 8. – P. 495–512. doi: 10.1080/09506608.2016.1191808.

76. Bailey J.E., Hirsch P.B. The dislocation distribution, flow stress, and stored energy in cold-worked polycrystalline silver // Philosophical Magazine. – 1960. – V. 5, No. 23. – P. 485–497. doi: 10.1080/14786436008238300.

77. Ohashi T., Kawamukai M., Zbib H. A multiscale approach for modeling scale-dependent yield stress in polycrystalline metals // International Journal of Plasticity. – 2007. – V. 23. – P. 897–914. doi: 10.1016/j.ijplas.2006.10.002.

78. Lyu H., Ruimi A., Zbib H.M. A dislocation-based model for deformation and size effect in multi-phase steels // International Journal of Plasticity. – 2015. – V. 72. – P. 44–59. doi: 10.1016/j.ijplas.2015.05.005.

79. Trusov P.V., Shveykin A.I., Yants A.Iu. O razlozhenii dvizheniia, nezavisimykh ot vybora sistemy otscheta proizvodnykh i opredeliaiushchikh sootnosheniiakh pri bol'shikh gradientakh peremeshchenii: vzgliad s pozitsii mnogourovnevogo modelirovaniia [Motion decomposition, frame-indifferent derivatives, and constitutive relations at large displacement gradients from the viewpoint of multilevel modeling] // Physical mesomechanics. 2017. V. 20, No. 4. P. 357–376. doi: 10.1134/S1029959917040014.

80. Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel models of polycrystalline metals: comparison of relations describing the crystallite lattice rotations // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2019. – V. 10, No. 1. – P. 1–20. doi: 10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2018028673.

81. Trusov P., Shveykin A., Kondratev N. Some Issues on Crystal Plasticity Models Formulation: Motion Decomposition and Constitutive Law Variants // Crystals. – 2021. – V. 11. – 1392. doi: 10.3390/cryst11111392.

82. Deformation Texture Prediction: From the Taylor Model to the Advanced Lamel Model / P. Van Houtte et al // International Journal of Plasticity. – 2005. – V. 21. – P. 589–624. doi: 10.1016/j.ijplas.2004.04.011.

83. Modeling Lattice Strain Evolution at Finite Strains and Experimental Verification for Copper and Stainless Steel Using in Situ Neutron Diffraction / C. Neil et al // International Journal of Plasticity. – 2010. – V. 26. – P. 1772–1791. doi: 10.1016/j.ijplas.2010.03.005.

84. Zecevic M., Knezevic M. An Implicit Formulation of the Elasto-Plastic Self-Consistent Polycrystal Plasticity Model and its Implementation in Implicit Finite Elements // Mechanics of Materials. – 2019. – V. 136. – 103065. doi: 10.1016/j.mechmat.2019.103065.

85. A Comparative Study between Elasto-Plastic Self-Consistent Crystal Plasticity and Anisotropic Yield Function with Distortional Hardening Formulations for Sheet Metal Forming / Z. Feng et al // Mechanics of Materials. – 2020. – V. 148. – 103422. doi: 10.1016/j.mechmat.2020.103422.

86. Anand L. Single-Crystal Elasto-Viscoplasticity: Application to Texture Evolution in Polycrystalline Metals at Large Strains // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2004. – V. 193. – P. 5359–5383. doi: 10.1016/j.cma.2003.12.068.

87. Latent Hardening and Plastic Anisotropy Evolution in AA6060 Aluminium Alloy / M. Khadyko et al // International Journal of Plasticity. – 2016. –V. 76. – P. 51–74. doi: 10.1016/j.ijplas.2015.07.010.

88. Lieou C.K., Bronkhorst C.A. Thermodynamic Theory of Crystal Plasticity: Formulation and Application to Polycrystal fcc Copper // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2020. – V. 138. – 103905. doi: 10.1016/j.jmps.2020.103905.

89. A Multiplicative Finite Strain Crystal Plasticity Formulation based on Additive Elastic Corrector Rates: Theory and Numerical Implementation / M. Zhang et al // International Journal of Plasticity. – 2021. – V. 137. – 102899. doi: 10.1016/j.ijplas.2020.102899.

90. Shveykin A.I., Trusov P.V., Romanov K.A. Ob odnom podkhode k chislennoi otsenke ustoichivosti mnogourovnevykh konstitutivnykh modelei materialov [An approach to numerical estimating the stability of multilevel constitutive models] // Computational Continuum Mechanics. 2021. V. 14, No. 1. P. 61–76. doi: 10.7242/1999-6691/2021.14.1.6.

91. Shveykin A.I., Trusov P.V., Romanov K.A. Nekotorye rezul'taty chislennoi otsenki ustoichivosti dvukhurovnevoi konstitutivnoi modeli GTsK-polikristalla [Some results of numerical estimating the stability of the FCC metal two-level constitutive model] // Computational Continuum Mechanics. 2021. V. 14, No. 2. P. 127–143. doi: 10.7242/1999-6691/2021.14.2.11.

92. Shveykin A., Trusov P., Romanov K. Stability of Crystal Plasticity Constitutive Models: Observations in Numerical Studies and Analytical Justification // Metals. – 2024. – V. 14. – 947. doi: 10.3390/met14080947.

93. Romanov K.A., Shveykin A.I. Two-level statistical constitutive model with integrated ETMB model: description of grain structure refinement of AISI 304 steel in cold bending // Russian Physics Journal. – 2024. – V. 67 – P. 1555–1561 – doi: 10.1007/s11182-024-03281-3.

94. Overview no. 96 evolution of f.c.c. deformation structures in polyslip / B. Bay et al // Acta Metallurgica et Materialia. – 1992. – V. 40, No. 2. – P. 205–219. doi: 10.1016/0956-7151(92)90296-Q.

95. Hansen N., Barlow C.Y. 17 – Plastic Deformation of Metals and Alloys // Physical Metallurgy (Fifth Edition). – 2014 – P. 1681–1764. doi: 10.1016/B978-0-444-53770-6.00017-4.

96. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Statistically stored, geometrically necessary and grain boundary dislocation densities: microstructural representation and modelling // Proceedings of the royal society A. – 2007. – V. 463. – P. 2833–2853. doi: 10.1098/rspa.2007. 0020.

97. Predicting plastic flow and irradiation hardening of iron single crystal with mechanism-based continuum dislocation dynamics / D. Li et al // International Journal of Plasticity. – 2014. – V. 52. – P. 3–17. doi: 10.1016/j.ijplas.2013.01.015.

98. A study of the hot and cold deformation of twin-roll cast magnesium alloy AZ31 / H. Askari et al // Philosophical Magazine. – 2014. – V. 94, No. 4. – P. 381–403. doi: 10.1080/14786435.2013.853884.

99. Devincre B., Kubin L., Hoc T. Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations // Scripta Materialia. – 2006. – V. 54, No. 5. – P. 741–746. doi: 10.1016/j.scriptamat.2005.10.066.

100. A discrete dislocation dynamics framework for modeling polycrystal plasticity with hardening / T.N. Tak et al // International Journal of Solids and Structures. – 2023. – V. 281. – 112442. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2023.112442.

101. Motaman S.A.H., Prahl U. Microstructural constitutive model for polycrystal viscoplasticity in cold and warm regimes based on continuum dislocation dynamics // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2019. – V. 122. – P. 205–243. doi: 10.1016/j.jmps.2018.09.002.

102. Models for long-/short-range interactions and cross slip in 3D dislocation simulation of BCC single crystals / M. Rhee et al // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 1998. – V. 6, No. 4. – 467. doi: 10.1088/0965-0393/6/4/012.

103. A Continuum Dislocation Dynamics Crystal Plasticity Approach to Irradiated Body-Centered Cubic α-Iron / S.A. Pitts et al // Journal of Engineering Materials and Technology. – 2022. – V. 144. – 011018. doi: 10.1115/1.4052256.

104. A crystallographic dislocation model for describing hardening of polycrystals during strain path changes. Application to low carbon steels / K. Kitayama et al // International Journal of Plasticity. – 2013. – V. 46. – P. 54–69. doi: 10.1016/j.ijplas.2012.09.004.

105. Nye J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals // Acta Metallurgica. – 1953. – V. 1, No. 2. – P. 153–162. doi: 10.1016/0001-6160(53)90054-6.

106. Shizawa K., Zbib H.M. A thermodynamical theory of gradient elastoplasticity with dislocation density tensor. I: Fundamentals // International Journal of Plasticity. – 1999. – V. 15, No. 9. – P. 899–938. doi: 10.1016/S0749-6419(99)00018-2.

107. Burgers J.M. Geometrical considerations concerning the structural irregularities to be assumed in a crystal // Proceedings of the Physical Society. – 1940. – V. 52, No. 1. – P. 23–33. doi: 10.1088/0959-5309/52/1/304.

108. Kuhlmann-Wilsdorf D., Hansen N. Geometrically necessary, incidental and subgrain boundaries // Scripta Metallurgica et Materialia. – 1991. – V. 25, No. 7. – P. 1557–1562. doi: 10.1016/0956-716X(91)90451-6.

109. Gourdet S., Montheillet F. A model of continuous dynamic recrystallization // Acta Materialia. – 2003. – V. 51. – P. 2685–2699. doi: 10.1016/S1359-6454(03)00078-8.

110. 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 et al // International Journal of Plasticity. – 2018. – V. 106. – P. 73–87. doi: 10.1016/j.ijplas.2018.03.002.

111. Beyerlein I.J., Toth L.S. Texture evolution in equal-channel angular extrusion // Progress in Materials Science. – 2009. – V. 54, No. 4. – P. 427–510. doi: 10.1016/j.pmatsci.2009.01.001.

112. Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences. – 1992. – V. 341. – P. 443–477. doi: 10.1098/rsta.1992.0111.

113. "Sigma Technology". Novel Optimization Strategy – IOSO [Electronic resource] URL: https://iosotech.com/ (accessed: 17.08.2025).

114. Harder J. FEM-simulation of the hardening behavior of FCC single crystals // Acta Mechanica. – 2001. – V. 150. – P. 197–217. doi: 10.1007/BF01181812.

115. Thermal stability of ultrafine grains size of pure copper obtained by equal-channel angular pressing / N. Lugo et al // Journal of Materials Science. – 2010. – V. 45. – P. 2264–2273. doi: 10.1007/s10853-009-4139-7.

116. Influence of stacking fault energy and temperature on microstructures and mechanical properties of fcc pure metals processed by equal-channel angular pressing / F. Liu et al // Materials Science and Engineering: A. – 2016. – V. 662. – P. 578–587. doi: 10.1016/j.msea.2016.03.022.

117. Prangnell P.B., Bowen J.R., Apps P.J. Ultra-fine grain structures in aluminium alloys by severe deformation processing // Materials Science and Engineering A. – 2004. – V. 375–377. – P. 178–185. doi: 10.1016/j.msea.2003.10.170.

118. Vico: An entity-component-system based co-simulation framework / L.I. Hatledal et al // Simulation Modelling Practice and Theory. – 2021. – V. 108. – 102243. doi: 10.1016/j.simpat.2020.102243.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2024-0002.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов равноценен.

Funding. The study was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the state assignment in the laboratory of multilevel modeling of structural and functional materials, project No. FSNM-2024-0002.

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

The authors' contributions are equal.