

УДК 539.3

DOI: 10.32326/1814-9146-2021-83-4-451-461

**МНОГОУРОВНЕВАЯ ФИЗИЧЕСКИ-ОРИЕНТИРОВАННАЯ  
МОДЕЛЬ: ПРИМЕНЕНИЕ К ОПИСАНИЮ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ  
ДИНАМИЧЕСКОЙ РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ\***

© 2021 г. **Кондратьев Н.С., Трусев П.В., Подседерцев А.Н.**

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет,  
Пермь, Российская Федерация*

tpv@matmod.pstu.ac.ru

*Поступила в редакцию 25.08.2021*

Создание математических моделей, позволяющих описывать изменения структуры материала и напряженно-деформированного состояния при термомеханических воздействиях, является актуальной задачей. С этой целью разработана многоуровневая физически-ориентированная модель для исследования неупругого деформирования поликристаллов. Формулируется задача моделирования двух этапов деформирования образца из поликристаллической меди. На первом этапе исследуется предварительная холодная интенсивная пластическая деформация при сложном нагружении. Рассматриваются два варианта предварительной подготовки образцов – однородное деформирование, соответствующее равноканальному угловому пресованию, и нагружение по замкнутой траектории деформации. На втором этапе рассматривается одноосное высокотемпературное деформирование до начала интенсивного процесса динамической рекристаллизации. Приводится описание способа оценки величины объемной доли рекристаллизованного материала в рамках многоуровневой модели. Исследуется влияние на рекристаллизацию температуры деформирования, предварительной деформации, деформационной текстуры, среднего угла взаимной разориентации соседних зерен. Указанные параметры определяют развитие динамической рекристаллизации, поскольку ее основной физической причиной является разность запасенной энергии между соседними зернами. Показано, что разработанная математическая модель пригодна для описания термической активации динамической рекристаллизации при значении температур в диапазоне  $0,4-0,7$  гомологической температуры. Сложность траектории нагружения определяет вид деформационной текстуры, ее «остроту» или «рассеянность», углы взаимной разориентации соседних зерен. Представлены результаты проведенных вычислительных экспериментов. Согласно предложенному способу определена величина деформации на высокотемпературном этапе, при которой начинается интенсивный рост новых рекристаллизованных зерен.

*Ключевые слова:* динамическая рекристаллизация, многоуровневые модели, микроструктура, зеренная структура, деформационная текстура, запасенная энергия.

---

\* Выполнено при финансовой поддержке РФН (грант №17-19-01292).

## Введение

В настоящее время в области металлургии и металлообработки сформулирована проблема создания функциональных материалов и изделий из них, которые обладают повышенными механическими характеристиками в конкретных условиях эксплуатации [1–3]. Значительная часть деталей, используемых в различных отраслях промышленности, изготавливается методами обработки металлов давлением (ОМД). Процессы ОМД, как правило, проходят при повышенных температурах или сопровождаются промежуточными, финишными стадиями отжига [4, 5]. При реализации указанных технологических процессов происходят существенные изменения структуры поликристаллов – размера зерен, плотности дислокаций, текстуры, взаимной ориентации зерен, вызванные интенсивной горячей пластической деформацией [6, 7]. Повышенные значения температур деформирования или термообработка в большинстве случаев сопровождаются дополнительными (по отношению к холодному деформированию) процессами эволюции структуры. Наиболее значимыми из них являются возврат, рекристаллизация, фазовые переходы, межзеренное скольжение. Понимание физических механизмов формирования, эволюции структуры и прогнозирование свойств материала с применением методов математического моделирования имеют важное как фундаментальное, так и практическое значение [1, 4, 8–13].

Предметом исследования настоящей статьи является моделирование предварительной интенсивной деформации при последующем горячем деформировании (в диапазоне температур порядка  $(0,4-0,7)\theta_m$ ,  $\theta_m$  – гомологическая температура), в котором реализуется динамическая рекристаллизация, имеющая наибольшее влияние на изменение зеренной и дислокационной структур [4, 12]. В случае динамической рекристаллизации формируются практически бездефектные (малодефектные) зерна (зародыши рекристаллизации), которые в дальнейшем увеличивают свой объем за счет окружающих более дефектных зерен [4, 12, 14]. Образование зародышей рекристаллизации может происходить по различным физическим механизмам [15], в зависимости от этого рекристаллизацию разделяют на прерывистую и непрерывную [4, 12, 14]. Рассматривается прерывистая динамическая рекристаллизация, которая характерна для материалов с низкой энергией дефекта упаковки [4, 12, 14]. При рекристаллизации этого типа образование зародышей из субзерен, расположенных вблизи исходных границ зерен, происходит неоднородно по объему поликристалла на ранней стадии горячей деформации [16, 17]. Рекристаллизация является эффективным способом формирования мелкозернистой структуры материала [4, 12].

Для исследования напряженно-деформированного состояния, формирования и эволюции структуры материала при горячем деформировании применяется двухуровневая модель, основанная на введении внутренних переменных и физической теории упруговязкопластичности [1]. Использована разработанная авторами модифицированная статистическая модель, явным образом учитывающая взаиморасположение зерен и границ между ними. Способ описания зеренной структуры изложен в [18, 19]. Структура поликристалла в предлагаемой модифицированной статистической модели определена, если для каждого зерна задан его объем, форма, указаны плоские участки границы и соседние зерна. Для геометрического описания полиэдрической зеренной структуры использован свободно распространяемый программный пакет Nperg [20]; полученные данные передаются в расчетный модуль статистической модели.

Разработанная двухуровневая модель дополнена соотношениями для моделирования динамической рекристаллизации. Исследуется двухстадийное деформирование, на первой стадии рассматривается предварительная холодная интенсивная пластическая деформация, на второй – высокотемпературное деформирование. Целью исследования является установление влияния на начальном этапе второй стадии (высокотемпературного деформирования) предшествующей пластической деформации (сформировавшейся текстуры, среднего угла взаимной разориентации соседних зерен) и температуры деформирования на реализацию процесса динамической рекристаллизации. Ранее авторами был предложен способ определения критической деформации инициации динамической рекристаллизации [18], где не исследовалось влияние температуры на этот процесс. Полагалось, что температура деформирования соответствует энергии активации динамической рекристаллизации, и для этого случая определялась доля потенциально активных зародышей рекристаллизации. В рамках настоящей статьи рассматривается развитие этого подхода и, помимо активных зародышей рекристаллизации, приводится оценка увеличения доли рекристаллизованного материала на начальной стадии высокотемпературного нагружения за счет роста зерен. Предлагается способ определения величины деформации на стадии горячего деформирования, при которой активируется процесс рекристаллизации.

### 1. Модификация двухуровневой модели для описания динамической рекристаллизации

Постановку задачи описания деформирования представительного макрообъема поликристаллического металла на основе двухуровневой статистической модели можно найти в публикациях [1, 18]. Рассматривается задача исследования начальной стадии роста рекристаллизованных зерен, способ определения активных зародышей рекристаллизации заключается в следующем [18]. Полагается, что зародышами рекристаллизации являются субзерна, расположенные вблизи плоских участков (фасеток) границы. Принимается, что исходный размер субзерен  $r$  подчиняется закону Рэлея со средним значением  $r_0$ , равным 0,25 мкм [17], эволюция размеров субзерен в модели не учитывается. Для зародышей рекристаллизации полагается справедливым критерий Бейли – Хирша образования новых рекристаллизованных зерен, согласно которому уменьшение локальной объемной энергии за счет устранения дефектов должно быть больше или равно увеличению зернограницной энергии в результате увеличения протяженности границы при образовании рекристаллизованного зерна [21]:

$$f^{(i,j)} = e_{st}^{(i,j)} - e_{gb}^{(i,j)} \frac{\Delta\hat{s}}{\Delta\hat{v}} \geq 0, \quad (1)$$

где  $\Delta\hat{s}$  – увеличение площади границы при изменении объема зерна на величину  $\Delta\hat{v}$  в результате рекристаллизации,  $e_{st}^{(i,j)}$  – разность величин удельной (на единицу объема) запасенной энергии в зернах  $i$  и  $j$ ,  $e_{gb}^{(i,j)}$  – удельная (на единицу площади) энергия межзеренной границы между  $i$ -м и  $j$ -м зернами. Величина разности запасенной энергии  $e_{st}^{(i,j)}$  вычисляется с применением многоуровневой модели неупругого деформирования [18].

При выполнении критерия рекристаллизации (1) зародыши могут развиваться в новые зерна. Помимо выполнения критерия (1), для миграции высокоугловых

границ новых зерен необходима соответствующая температура, которая обеспечивает мобильность (подвижность) высокоугловых границ. Эта зависимость обычно принимается в виде закона Аррениуса [4]:

$$m = m_0 \exp\left(-\frac{Q}{R\theta}\right), \quad (2)$$

где  $\theta$  – абсолютная температура,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $Q$  – энергия активации процесса миграции межзеренной границы,  $m_0$  – определяемая экспериментально предэкспонента. Скорость миграции высокоугловой границы  $v_m$  определяется произведением движущей силы  $f$  (индексы соседних кристаллитов опущены) на мобильность  $m$  [4]:

$$v_m = fm. \quad (3)$$

Проводится оценка объемной доли рекристаллизованного материала. Определяются активные зародыши рекристаллизации, удовлетворяющие условию (1). Согласно соотношению (3), находится скорость миграции  $v_m$  границ каждого зародыша рекристаллизации. Полагается, что каждый зародыш целиком прорастает вглубь соседнего зерна и его форма для упрощения принимается шарообразной. В этом случае  $v_m$  равна скорости изменения радиуса шара  $r$ , описывающего форму рекристаллизованного зерна, то есть  $\dot{r} = v_m$  (точка над величиной означает полную материальную производную), объем шара  $v_r = (4/3)\pi r^3$ . В вышеприведенных соотношениях номер рассматриваемого  $i$ -го кристаллита опущен. Объемная доля рекристаллизованного материала  $X$  в поликристалле определяется согласно соотношению:

$$X = \frac{V_r}{V_0}, \quad V_r = \sum_{i=1}^{N_r} v_r^{(i)}, \quad (4)$$

где  $V_0$  – исходный объем рассматриваемого представительного объема поликристалла,  $V_r$  – объем рекристаллизованного материала,  $N_r$  – число активных рекристаллизующихся зерен. В численных экспериментах, представленных далее, высокотемпературное деформирование проводилось до величины объемной доли рекристаллизованного материала  $X_c$ , равной 20%.

Наряду с объемной долей рекристаллизованного материала  $X$  важной количественной характеристикой, определяющей течение процесса рекристаллизации, является высвобождаемая энергия  $E_{rel}$ . В предположении выделения всей запасенной в процессе предшествующей деформации энергии в рекристаллизованном материале величина  $E_{rel}$  может быть оценена соотношением:

$$E_{rel} = \sum_{i=1}^{N_r} e_{st}^{(i)} v_r^{(i)}. \quad (5)$$

Как показано ранее [18], существенное влияние на разность запасенной энергии и, следовательно, интенсивность процесса рекристаллизации оказывает значение углов взаимной разориентации между соседними зернами  $\varphi_r$ . С этой величиной тесно связана деформационная текстура, формирование которой, как правило, ведет к уменьшению среднего угла  $\varphi_r$ . Текстура образца из поликристаллического материала определяется видом и сложностью траектории деформирования [1]. Таким образом, на процесс динамической рекристаллизации должна существенно влиять не только величина интенсивности деформации  $\varepsilon_u$ , но и траектория нагружения. С целью проверки этого утверждения был проведен ряд численных экспериментов с

различными видами предварительной деформации. Применяемая статистическая двухуровневая математическая модель [18] основана на гипотезе Фойгта. В этом случае предписанным является кинематическое воздействие, заданное градиентом скорости перемещений  $\hat{\nabla}\mathbf{V}$ . На первом этапе рассматриваются интенсивные пластические деформации при комнатной температуре, соответствующие: 1) равноканальному угловому прессованию (РКУП) (градиент скорости перемещений  $\hat{\nabla}\mathbf{V}_1$ ) с углом между «коленами»  $\Phi = 90^\circ$ ; 2) однородному деформированию образца по замкнутой траектории деформации ( $\hat{\nabla}\mathbf{V}_2$ ), которая представляет собой сдвиг относительно соответствующих осей и деформирование в обратном направлении. На втором этапе рассматривается одноосное растяжение ( $\hat{\nabla}\mathbf{V}_3$ ):

$$\begin{aligned}\hat{\nabla}\mathbf{V}_1 &= \dot{\gamma}\mathbf{p}_1\mathbf{p}_1 - \dot{\gamma}\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2 + \dot{\gamma}\mathbf{p}_2\mathbf{p}_1 + \dot{\gamma}\mathbf{p}_2\mathbf{p}_2, \\ \hat{\nabla}\mathbf{V}_2 &= \dot{\gamma}\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2, \\ \hat{\nabla}\mathbf{V}_3 &= \dot{\gamma}\mathbf{p}_1\mathbf{p}_1 - \frac{\dot{\gamma}}{2}\mathbf{p}_2\mathbf{p}_2 - \frac{\dot{\gamma}}{2}\mathbf{p}_3\mathbf{p}_3,\end{aligned}\tag{6}$$

где  $\mathbf{p}_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) – ортонормированный базис лабораторной системы координат. Далее по тексту деформация, соответствующая градиенту скорости перемещений  $\hat{\nabla}\mathbf{V}_1$ , обозначается как  $A$ , а соответствующая градиенту  $\hat{\nabla}\mathbf{V}_2$  – как  $B$ . В численных экспериментах использовано значение параметра кинематического нагружения  $\dot{\gamma} = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ . Величина накопленной деформации  $\varepsilon_u^1$ , соответствующая одному проходу материала РКУП, определяется выражением  $\varepsilon_u^1 = (2/\sqrt{3})\text{ctg}(\Phi/2) \approx 1,15$  [22, 23], одному циклу по замкнутой траектории деформации  $B$  соответствует деформирование с градиентом скорости перемещений  $\hat{\nabla}\mathbf{V}_2$  на величину  $\varepsilon_u^1/2$  и реверсное нагружение с  $-\hat{\nabla}\mathbf{V}_2$  на эту же величину.

## 2. Результаты моделирования и их анализ

Исследуется неупругое деформирование образцов из поликристаллической меди. Значения упругих модулей определены в [24], параметров упрочнения – в [25] (с учетом зернограницного упрочнения [26]), доля запасенной энергии  $\alpha$  принята равной 0,1 [27], температура плавления меди 1356 К. При вычислениях использованы значения параметров модели рекристаллизации:  $e_{gb} = 0,625 \text{ Дж/м}^2$  [4] – удельная энергия межзеренной границы,  $Q = 121 \text{ кДж/моль}$  [4] – энергия активации миграции границ зерен. Значение параметра мобильности  $m_0$  межзеренных границ оценивалось из натуральных экспериментов и принято равным  $1,5 \cdot 10^{-6} \text{ с}\cdot\text{м}^2/\text{кг}$  [4].

На рис. 1а показаны диаграммы предварительной деформации для движений  $A$  и  $B$ . На рис. 1б показана эволюция среднего угла разориентации. Видно, что при деформации  $A$  происходит интенсивное уменьшение среднего угла  $\varphi_r$ , при замкнутой деформации  $B$  значение  $\varphi_r$  практически возвращается к своему начальному значению, что определяется разворотами кристаллитов при сложном деформировании.

На рис. 2 показаны соответствующие деформационные текстуры в момент окончания предварительной деформации. Для деформации  $A$  текстура является более «острой» по сравнению с текстурой для  $B$ . Формирование текстуры и эволюция углов взаимной разориентации соседних зерен зависят не только от величины деформации (уменьшение накопленной деформации приводит к уменьшению «остроты» текстуры), но и от сложности траектории нагружения.

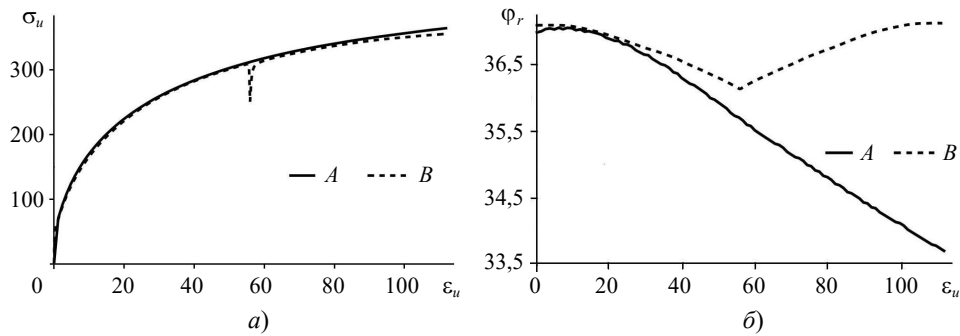


Рис. 1. Диаграмма нагружения поликристалла меди для движений  $A$  и  $B$  (а), эволюция среднего угла разориентации  $\varphi_r$  для движений  $A$  и  $B$  (б)

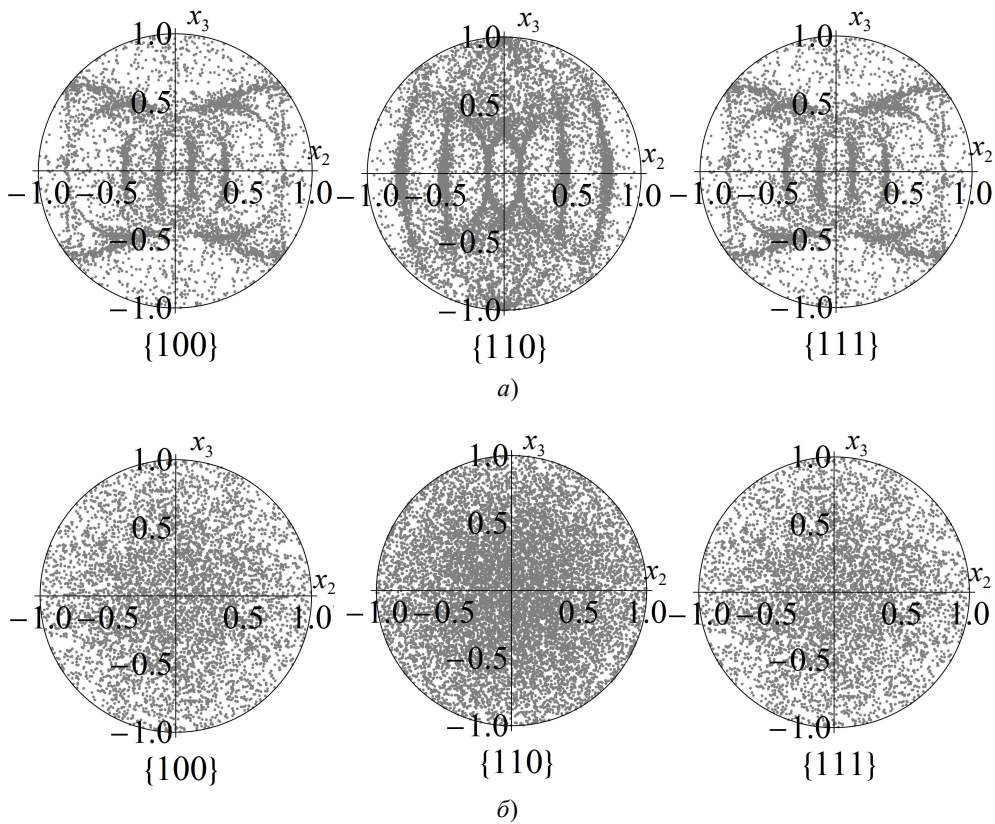


Рис. 2. Расчетные полюсные фигуры  $\{100\}$ ,  $\{110\}$ ,  $\{111\}$  для одного прохода РКУП деформации  $A$  (а) и для одного цикла замкнутой деформации  $B$  (б)

На рис. 3а показана зависимость величины деформации  $\varepsilon_{ис}$ , соответствующей значению  $X_c = 0,2$  на втором этапе горячего деформирования, от гомологической температуры  $\theta_m$  при различных предварительных деформациях  $A$  и  $B$ . Рассматривался диапазон температур от 0,42 до 0,7 гомологической температуры  $\theta_m$ . При обеих предварительных деформациях  $A$  и  $B$  большинство зародышей рекристаллизации находятся в активном состоянии, то есть для них выполнен критерий (1). Вследствие этого при температурах порядка  $0,48\theta_m$  границы зерен начинают движение и отличие

в значениях  $\varepsilon_{uc}$  практически отсутствует. На рис. 3б показана зависимость  $E_{rel}$  от  $\varepsilon_u$  на этапе горячего деформирования при температуре деформирования  $0,41\theta_m$ . Среднее значение разности запасенной энергии для деформации  $B$  больше, чем для  $A$ , поэтому высвобождение запасенной энергии происходит более активно на стадии горячего деформирования. При этом одноосное деформирование второй стадии влияет на динамическую рекристаллизацию, что сказывается на характере зависимости  $E_{rel}(\varepsilon_u)$ . Полученные результаты свидетельствуют о термической активации процесса динамической рекристаллизации; при температурах ниже  $0,4\theta_m$  движение большеугловых границ зерен практически не происходит, повышение температуры ведет к увеличению скорости роста рекристаллизованных зерен, их объемной доли и высвобождаемой энергии. Большие значения среднего угла разориентации  $\varphi_r$  (см. рис. 1б) способствуют повышению интенсивности процесса рекристаллизации, формируемая текстура снижает значения  $\varphi_r$  и, соответственно, замедляет рекристаллизацию.

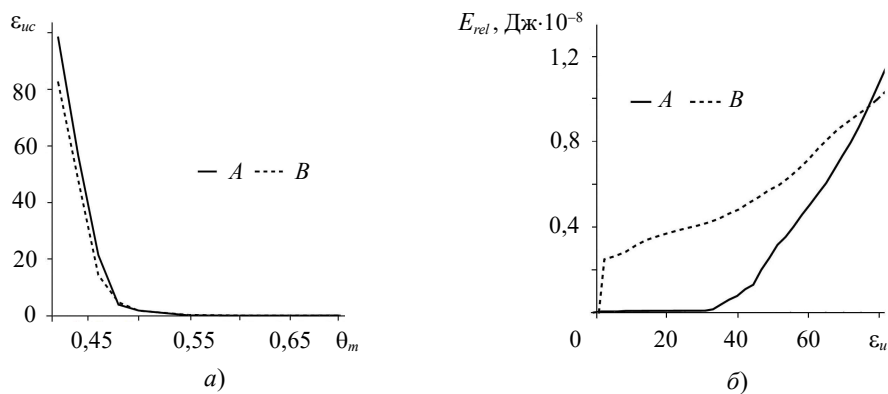


Рис. 3. Расчеты зависимости достижения значения  $\varepsilon_{uc}$  от температуры деформирования  $\theta$  (а), зависимость  $E_{rel}$  от  $\varepsilon_u$  при температуре деформирования  $0,41\theta_m$  (б)

### Заключение

Основной движущей силой процесса рекристаллизации является разность запасенной энергии, которая определяется дефектной (в первую очередь дислокационной) структурой внутри и на границах зерен. Эволюция дислокационной субструктуры зависит от распределения ориентаций зерен в текущей конфигурации, температуры, сложности траектории деформации. Вид нагружения в процессах интенсивной пластической деформации определяет деформационную текстуру и взаимную ориентацию соседних зерен, следовательно, запасенную энергию в зернах поликристалла, а также их разность. Полученные результаты подтверждают эти выводы. Для деформации  $A$  РКУП за один проход формируется «острая» текстура; наоборот, деформирование по замкнутой траектории  $B$  почти полностью «размывает» текстуру. Это определяет результаты моделирования рекристаллизации: величина деформации интенсивного начала процесса рекристаллизации меньше для деформации  $B$ , чем для  $A$ . Соответственно необходимая температура начала рекристаллизации для деформации  $A$  больше, чем для  $B$ . Высвобождаемая при горячем деформировании энергия пропорциональна объемной доле рекристаллизованного материала и запасенной энергии на предварительном этапе деформирования. Следовательно, ее скорость зависит как от интенсивности рекристаллизации, так и начального уровня разности запасенной энергии.

#### Список литературы

1. Трусов П.В., Швейкин А.И. *Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения*. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019. 605 с. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV.
2. Beyerlein I.J., Knezevic M. Review of microstructure and micromechanism-based constitutive modeling of polycrystals with a low-symmetry crystal structure. *Journal of Materials Research*. 2018. Vol. 33. No 22. P. 3711–3738. DOI: 10.1557/jmr.2018.333.
3. Liu P.W., Wang Z., Xiao Y.H., Lebensohn R.A., Liu Y.C., Horstemeyer M.F., Cui X.Y., Chen L. Integration of phase-field model and crystal plasticity for the prediction of process-structure-property relation of additively manufactured metallic materials. *International Journal of Plasticity*. 2020. Vol. 128. Article No 102670. DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102670.
4. Rollett A., Rohrer G.S., Humphreys J. *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*. Oxford: Elsevier, 2017. 734 p.
5. Zecevic M., Lebensohn R.A., McCabe R.J., Knezevic M. Modelling recrystallization textures driven by intragranular fluctuations implemented in the viscoplastic self-consistent formulation. *Acta Materialia*. 2019. Vol. 164. P. 530–546. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.11.002.
6. Valiev R.Z., Estrin Y., Horita Z., Langdon T.G., Zehetbauer M.J., Zhu Y.T. Fundamentals of superior properties in bulk nanoSPD materials. *Materials Research Letters*. 2016. Vol. 4. Iss. 1. P. 1–21. DOI: 10.1080/21663831.2015.1060543.
7. Glezer A.M., Kozlov E.V., Koneva N.A., Popova N.A. E., Kurzina I.A. *Plastic Deformation of Nanostructured Materials*. Boca Raton: CRC Press, 2017. 334 p.
8. Zhou G., Li Z., Li D., Peng Y., Zurob H.S., Wu P. A polycrystal plasticity based discontinuous dynamic recrystallization simulation method and its application to copper. *International Journal of Plasticity*. 2017. Vol. 91. P. 48–76. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.01.001.
9. Zhou G., Li Z., Li D., Peng Y., Wang H., Wu P. Misorientation development in continuous dynamic recrystallization of AZ31B alloy sheet and polycrystal plasticity simulation. *Materials Science & Engineering A*. 2018. Vol. 730. P. 438–456. DOI: 10.1016/j.msea.2018.05.095.
10. Borodin E.N., Bratov V. Non-equilibrium approach to prediction of microstructure evolution for metals undergoing severe plastic deformation. *Materials Characterization*. 2018. Vol. 141. P. 267–278. DOI: 10.1016/j.matchar.2018.05.002.
11. Tanga T., Zhou G., Li Z., Li D., Peng L., Peng Y., Wu P., Wang H., Lee M.-G. A polycrystal plasticity based thermo-mechanical-dynamic recrystallization coupled modeling method and its application to light weight alloys. *International Journal of Plasticity*. 2019. Vol. 116. P. 159–191. DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.01.001.
12. Nasiri Z., Ghaemifar S., Naghizadeh M., Mirzadeh H. Thermal mechanisms of grain refinement in steels: A review. *Metals and Materials International*. 2021. Vol. 27. No 7. P. 2078–2094. DOI: 10.1007/s12540-020-00700-1.
13. Buzolin R.H., Canelo-Yubero D., Warchomicka F., Lasnik M., Krumphals A., Poletti M.C. Refinement of the Ti-17 microstructure after hot deformation: Coupled mesoscale model. *Materials Science & Engineering A*. 2021. Vol. 800. Article No 140268. DOI: 10.1016/j.msea.2020.140268.
14. Huang K., Logé R.E. A review of dynamic recrystallization phenomena in metallic materials. *Materials & Design*. 2016. Vol. 111. P. 548–574. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.09.012.
15. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Механизмы образования зародышей рекристаллизации в металлах при термомеханической обработке. *Вестник ПНИПУ. Механика*. 2016. №4. С. 151–174. DOI: 10.15593/perm.mech/2016.4.09.
16. Ponge D., Gottstein G. Necklace formation during dynamic recrystallization: mechanisms and impact on flow behavior. *Acta Materialia*. 1998. Vol. 46. Iss 1. P. 69–80. DOI: 10.1016/S1359-6454(97)00233-4.
17. Cram D.G., Zurob H.S., Brechet Y.J.M., Hutchinson C.R. Modelling discontinuous dynamic recrystallization using a physically based model for nucleation. *Acta Materialia*. 2009. Vol. 57. Iss 17. P. 5218–5228. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.07.024.
18. Кондратьев Н.С., Трусов П.В., Подседерцев А.Н. Многоуровневая модель поликристаллов: применение к оценке влияния текстуры и разориентации зерен на величину критической деформации инициации динамической рекристаллизации. *Вестник ПНИПУ. Механика*. 2021. №4. (В печати).



19. Kondratev N.S., Podsedertsev A.N., Trusov P.V. The grain structure construction of polycrystals for modified two-level crystal plasticity statistical models. *Procedia Structural Integrity*. 2021. (In print).
20. Quey R., Renversade L. Optimal polyhedral description of 3D polycrystals: Method and application to statistical and synchrotron X-ray diffraction data. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2018. Vol. 330. P. 308–333. DOI: 10.1016/j.cma.2017.10.029.
21. Bailey J.E., Hirsch P.B. The recrystallization process in some polycrystalline metals. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1962. Vol. 267. No 1328. P. 11–30. DOI: 10.1098/rspa.1962.0080.
22. Beyerlein I.J., Tomé C.N. Analytical modeling of material flow in equal channel angular extrusion (ECAE). *Materials Science and Engineering: A*. 2004. Vol. 380. Iss. 1-2. P. 171–190. DOI: 10.1016/j.msea.2004.03.063.
23. Segal V.M., Reznikov V.I., Drobyshovski A.E., Kopylov V.I. Plastic working of metals by simple shear. *Russian Metallurgy (Metally)*. 1981. Vol. 1. P. 99–105.
24. Simmons G., Wang H. *Single Crystal Elastic Properties and Calculated Aggregate Properties: A Handbook*. Cambridge: M.I.T. Press, 1971. 370 p.
25. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2004. Vol. 193. No 48-51. P. 5359–5383. DOI: 10.1016/j.cma.2003.12.068.
26. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Описание упрочнения систем дислокационного скольжения за счет границ кристаллитов в поликристаллическом агрегате. *Вестник ПНИИПУ. Механика*. 2012. №3. С. 78–97.
27. Bever M.B., Holt D.L., Titchener A.L. The stored energy of cold work. *Progress in Materials Science*. 1973. Vol. 17. P. 5–177. DOI: 10.1016/0079-6425(73)90001-7.

#### References

1. Trusov P.V., Shveykin A.I. *Mnogourovnevye modeli mono- i polikristallicheskih materialov: teoriya, algoritmy, primery primeneniia* [Multilevel Models of Mono- and Polycrystalline Materials: Theory, Algorithms, Application Examples]. Novosibirsk. SO RAN Publ. 2019. 605 p. (In Russian).
2. Beyerlein I.J., Knezevic M. Review of microstructure and micromechanism-based constitutive modeling of polycrystals with a low-symmetry crystal structure. *J. Mater. Res*. 2018. Vol. 33. No. 22. P. 3711–3738. DOI: 10.1557/jmr.2018.333.
3. Liu P.W., Wang Z., Xiao Y.H., Lebensohn R.A., Liu Y.C., Horstemeyer M.F., Cui X.Y., Chen L. Integration of phase-field model and crystal plasticity for the prediction of process-structure-property relation of additively manufactured metallic materials. *Int. J. Plasticity*. 2020. Vol. 128. (102670). DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102670.
4. Rollett A., Rohrer G.S., Humphreys J. *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*. Oxford. Elsevier. 2017. 734 p.
5. Zecevic M., Lebensohn R.A., McCabe R.J., Knezevic M. Modelling recrystallization textures driven by intragranular fluctuations implemented in the viscoplastic self-consistent formulation. *Acta Mater*. 2019. Vol. 164. P. 530–546. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.11.002.
6. Valiev R.Z., Estrin Y., Horita Z., Langdon T.G., Zehetbauer M.J., Zhu Y.T. Fundamentals of superior properties in bulk nanoSPD materials. *Mater. Res. Lett*. 2016. Vol. 4. Iss. 1. P. 1–21. DOI: 10.1080/21663831.2015.1060543.
7. Glezer A.M., Kozlov E.V., Koneva N.A., Popova N.A. E., Kurzina I.A. *Plastic Deformation of Nanostructured Materials*. Boca Raton. CRC Press. 2017. 334 p.
8. Zhou G., Li Z., Li D., Peng Y., Zurob H.S., Wu P. A polycrystal plasticity based discontinuous dynamic recrystallization simulation method and its application to copper. *Int. J. Plasticity*. 2017. Vol. 91. P. 48–76. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.01.001.
9. Zhou G., Li Z., Li D., Peng Y., Wang H., Wu P. Misorientation development in continuous dynamic recrystallization of AZ31B alloy sheet and polycrystal plasticity simulation. *Mat. Sci. Eng. A-Struct*. 2018. Vol. 730. P. 438–456. DOI: 10.1016/j.msea.2018.05.095.
10. Borodin E.N., Bratov V. Non-equilibrium approach to prediction of microstructure evolution

for metals undergoing severe plastic deformation. *Mater. Charact.* 2018. Vol. 141. P. 267–278. DOI: 10.1016/j.matchar.2018.05.002.

11. Tanga T., Zhou G., Li Z., Li D., Peng L., Peng Y., Wu P., Wang H., Lee M.-G. A polycrystal plasticity based thermo-mechanical-dynamic recrystallization coupled modeling method and its application to light weight alloys. *Int. J. Plasticity.* 2019. Vol. 116. P. 159–191. DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.01.001.

12. Nasiri Z., Ghaemifar S., Naghizadeh M., Mirzadeh H. Thermal mechanisms of grain refinement in steels: A review. *Mat. Sci. Eng. A-Struct.* 2021. Vol. 27. No 7. P. 2078–2094. DOI: 10.1007/s12540-020-00700-1.

13. Buzolin R.H., Canelo-Yubero D., Warchomicka F., Lasnik M., Krumphals A., Poletti M.C. Refinement of the Ti-17 microstructure after hot deformation: Coupled mesoscale model. *Mat. Sci. Eng. A-Struct.* 2021. Vol. 800. Article No 140268. DOI: 10.1016/j.msea.2020.140268.

14. Huang K., Logé R.E. A review of dynamic recrystallization phenomena in metallic materials. *Mater. Des.* 2016. Vol. 111. P. 548–574. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.09.012.

15. Kondratev N.S., Trusov P.V. Mekhanizmy obrazovaniya zarodyshey rekristallizatsii v metallakh pri termomekhanicheskoy obrabotke [Nucleation recrystallization mechanisms in metals at thermomechanical processing]. *Vestnik Permskogo natsionalnogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika [PNRPU Mechanics Bulletin]*. 2016. No 4. P. 151–174 (In Russian).

16. Ponge D., Gottstein G. Necklace formation during dynamic recrystallization: mechanisms and impact on flow behavior. *Acta Mater.* 1998. Vol. 46. Iss. 1. P. 69–80. DOI: 10.1016/S1359-6454(97)00233-4.

17. Cram D.G., Zurob H.S., Brechet Y.J.M., Hutchinson C.R. Modelling discontinuous dynamic recrystallization using a physically based model for nucleation. *Acta Mater.* 2009. Vol. 57. Iss. 17. P. 5218–5228. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.07.024.

18. Kondratev N.S., Trusov P.V., Podsedertsev A.N. Mnogourovnevaya model polikristallov: primeneniye k otsenke vliyaniya tekstury i razorientatsii zeren na velichinu kriticheskoy deformatsii initsiatsii dinamicheskoy rekristallizatsii [Multilevel model of polycrystals: application to assessing the effect of texture and grains misorientation on the critical deformation of the dynamic recrystallization initiation]. *Vestnik Permskogo natsionalnogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika [PNRPU Mechanics Bulletin]*. 2021. No 4 (In print). (In Russian).

19. Kondratev N.S., Podsedertsev A.N., Trusov P.V. The grain structure construction of polycrystals for modified two-level crystal plasticity statistical models. *Procedia Structural Integrity*. 2021. (In print).

20. Quey R., Renversade L. Optimal polyhedral description of 3D polycrystals: Method and application to statistical and synchrotron X-ray diffraction data. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 2018. Vol. 330. P. 308–333. DOI: 10.1016/j.cma.2017.10.029.

21. Bailey J.E., Hirsch P.B. The recrystallization process in some polycrystalline metals. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1962. Vol. 267. No 1328. P. 11–30. DOI: 10.1098/rspa.1962.0080.

22. Beyerlein I.J., Tomé C.N. Analytical modeling of material flow in equal channel angular extrusion (ECAE). *Mat. Sci. Eng. A-Struct.* 2004. Vol. 380. No. 1-2. P. 171–190. DOI: 10.1016/j.msea.2004.03.063.

23. Segal V.M., Reznikov V.I., Drobyshevski A.E., Kopylov V.I. Plastic working of metals by simple shear. *Russian Metallurgy (Metally)*. 1981. No 1. P. 99–105.

24. Simmons G., Wang H. *Single Crystal Elastic Properties and Calculated Aggregate Properties: A Handbook*. Cambridge. M.I.T. Press. 1971. 370 p.

25. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 2004. Vol. 193. No 48–51. P. 5359–5383. DOI: 10.1016/j.cma.2003.12.068.

26. Kondratev N.S., Trusov P.V. Opisanie uprochneniya sistem dislokatsionnogo skolzheniya za schet granits kristallitov v polikristallicheskom agregate [Description of hardening slip systems due to the boundaries of the crystallines in a polycrystalline aggregate]. *Vestnik Permskogo natsionalnogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika [PNRPU Mechanics Bulletin]*. 2012. Vol. 3. P. 78–97 (In Russian).

27. Bever M.B., Holt D.L., Titchener A.L. The stored energy of cold work. *Prog. Mater. Sci.* 1973. Vol. 17. P. 5–177. DOI: 10.1016/0079-6425(73)90001-7.

**MULTILEVEL PHYSICAL-ORIENTED MODEL: APPLICATION  
TO THE DESCRIPTION OF THE INITIAL STAGE  
OF DYNAMIC RECRYSTALLIZATION OF POLYCRYSTALS**

**Kondratev N.S., Trusov P.V., Podsedertsev A.N.**

*Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation*

Thermomechanical processing of metals and alloys is accompanied by deep changes of the material structure (including grain structure), which determines physical and mechanical properties and the working characteristics of products made from them. Its change is possible due to mechanical (fragmentation process) and/or temperature (recrystallization process) influences. Because of this, an urgent task is to create mathematical models that allow describing changes in the material structure and the stress-strain state under thermomechanical treatment. For this purpose, the multilevel physically oriented model was developed for researching inelastic deformation of polycrystals. The problem of modeling two stages deformation of a polycrystalline copper sample was formulated. At the first stage, preliminary cold intense plastic deformation under complex loading was investigated. Two variants of preliminary deformation were considered. They were homogeneous deformation corresponding to equal-channel angular compression (ECUP), and deformation with closed deformation trajectory. At the second stage, uniaxial high-temperature deformation was considered prior to the beginning of an intensive dynamic recrystallization. The paper describes the method for estimating the recrystallized material volume fraction within the framework of the multilevel model. The influence of the deformation temperature, the preliminary deformation, the deformation texture, and the average angle of mutual misorientation of neighboring grains on recrystallization was investigated. These parameters determine the development of dynamic recrystallization, since its main physical cause is the difference in stored energy between neighboring grains. It was shown that the developed mathematical model is suitable for describing the thermal activation of dynamic recrystallization at temperatures in the range of 0,4–0,7 homologous temperature. The deformation trajectory complexity determines the type of deformation texture, its “sharpness” or “dispersion”, the angles of neighboring grains mutual misorientation. The results of computational experiments are presented. According to the proposed method, the deformation at the high-temperature stage is determined, at which the intensive migration of new grains begins during recrystallization.

*Keywords:* dynamic recrystallization, multilevel models, microstructure, grain structure, deformation texture, stored energy.