Анализ поведения двухфазных сплавов: перспективы применения многоуровневых физически-ориентированных моделей (обзор) / П.В. Трусов, Е.С. Макаревич, Н.Д. Няшина, Н.В. Котельникова. – DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.09 // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2025. – № 5. – С. 111–143.

Perm Polytech Style: Trusov P.V., Makarevich E.S., Nyashina N.D., Kotelnikova N.V. Analysis of the behavior of two-phase alloys: prospects for the application of multi-scale physically-based models (review). *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2025, no. 5, pp. 111-143. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.09

пермский политех

ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА
№ 5, 2025
PNRPU MECHANICS BULLETIN
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.09
УДК 539.3

АНАЛИЗ ПОВЕДЕНИЯ ДВУХФАЗНЫХ СПЛАВОВ: ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ МНОГОУРОВНЕВЫХ ФИЗИЧЕСКИ-ОРИЕНТИРОВАННЫХ МОДЕЛЕЙ (ОБЗОР)

П.В. Трусов, Е.С. Макаревич, Н.Д. Няшина, Н.В. Котельникова

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 27 сентября 2025 г.
Одобрена: 09 октября 2025 г.
Принята к публикации:
25 октября 2025 г.

Ключевые слова:

дуплексные стали; многоуровневые статистические, прямые и самосогласованные конститутивные модели; описание структуры, механизмов деформирования, фазовых превращений.

АННОТАЦИЯ

Нержавеющие дуплексные стали приобретают все более широкое применение в различных отраслях промышленности в силу их высоких эксплуатационных характеристик. Значительная часть изделий из этих материалов изготавливается методами термомеханической обработки, технологические режимы которых в настоящее время определяются с обязательным использованием математических моделей. Важнейшим элементом математических моделей (ММ) являются конститутивные модели (или определяющие соотношения), корректность формулировок которых в основном определяет адекватность разрабатываемых ММ.

Общепризнанным в настоящее время является утверждение о зависимости физико-механических свойств металлов и сплавов главным образом от их структуры на мезо- и микроуровнях. Последнее накладывает на выбор или разработку конститутивных моделей (КМ) дополнительные требования: они должны позволять описывать эволюцию в процессах термомеханической обработки структуры материалов. Широко применяемые в технологических расчетах макрофеноменологические теории пластичности (вязкопластичности, ползучести и т.п.) дают возможности определения характеристик напряженно-деформированного состояния, требуемой мощности обрабатывающего оборудования и других интегральных параметров, однако в них не заложены возможности анализа изменяющейся структуры.

В связи с этим в последние десятилетия все более широкое распространения приобретают многоуровневые модели, основанные на введении внутренних переменных, многоуровневом подходе и физических теориях пластичности (упругопластичности, упруговязкопластичности). КМ данного класса оперируют связями и переменными, явным образом описывающими физические механизмы, обеспечивающие и сопровождающие процессы термомеханической обработки, и их носители. Вследствие аналогичности многих физических механизмов, отвечающих за процессы неупругого формоизменения, для широких классов металлов и сплавов многоуровневые КМ обладают значительной универсальностью. Учитывая весьма сложные физические процессы, наблюдаемые при термомеханической обработке дуплекс-сталей, для их описания указанный класс КМ представляется наиболее перспективным, чем и обусловлен выбор темы предлагаемого обзора.

© **Трусов Петр Валентинович** – д. ф.-м. н., профессор, зав. кафедрой математического моделирования систем и процессов, e-mail: tpv@pstu.ru, ID: 0000-0001-8997-5493
Макаревич Елена Сергеевна – к. ф.-м. н., доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, e-mail: esmakarevich@pstu.ru, ID: 0000-0001-8933-504X
Няшина Наталья Дмитриевна – к. ф.-м. н., доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, e-mail: nnyashina73@gmail.com, ID: 0009-0008-2934-2553
Котельникова Наталья Васильевна – ст. преподаватель кафедры математического моделирования систем и процессов, e-mail: kotelnickova@gmail.com, ID: 0000-0002-3741-1562

Peter V. Trusov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, The Head of the Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, e-mail: tpv@pstu.ru, ID: 0000-0001-8997-5493
Elena S. Makarevich – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Ass. Professor, Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, e-mail: esmakarevich@pstu.ru, ID:: 0000-0001-8933-504X
Natalya D. Nyashina – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Ass. Professor, Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, e-mail: nnyashina73@gmail.com, ID: 0009-0008-2934-2553
Natalya V. Kotelnikova – Senior Lecturer, Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, e-mail: kotelnickova@gmail.com, ID: 0000-0002-3741-1562

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)

ANALYSIS OF THE BEHAVIOR OF TWO-PHASE ALLOYS: PROSPECTS FOR THE APPLICATION OF MULTI-SCALE PHYSICALLY-BASED MODELS (REVIEW)

P.V. Trusov, E.S. Makarevich, N.D. Nyashina, N.V. Kotelnikova

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 27 September 2025
Approved: 09 October 2025
Accepted for publication:
25 October 2025

Keywords:

duplex steels; multilevel statistical, direct and self-consistent constitutive models; description of the structure, deformation mechanisms, phase transformations.

ABSTRACT

Duplex stainless steels are increasingly used in various industries due to their high performance characteristics. A significant portion of products made from these materials are manufactured using thermomechanical processing methods, the process modes of which are currently determined with the mandatory use of mathematical models. The most important element of mathematical models (MM) are constitutive models (or constitutive relations), the correctness of the formulations of which mainly determines the adequacy of the developed MM.

At present, it is generally accepted that the physical and mechanical properties of metals and alloys depend mainly on their structure at the meso- and microlevels. The latter imposes additional requirements on the selection or formulation of constitutive models (CM): they must allow one to describe the evolution of the structure of materials in the processes of thermomechanical processing. Macrophenomenological theories of plasticity (viscoplasticity, creep, etc.), widely used in technological calculations, provide the ability to determine the characteristics of the stress-strain state, the required power of processing equipment and other integral parameters, but they do not include the ability to analyze a changing structure.

In this regard, in recent decades, multilevel models based on the introduction of internal variables, a multilevel approach and physical theories of plasticity (elastoplasticity, elastoviscoplasticity) have become increasingly widespread. CMs of this class operate with relationships and variables that explicitly describe the physical mechanisms that ensure and accompany the processes of thermomechanical processing, and their carriers. Due to the similarity of many physical mechanisms responsible for inelastic deformation processes for wide classes of metals and alloys, multilevel CMs have significant versatility. Taking into account the very complex physical processes observed during thermomechanical processing of duplex steels, the specified class of CMs seems to be the most promising for their description, which is the reason for choosing the topic of the proposed review.

Введение

В связи с возрастающими требованиями к рабочим характеристикам изделий из металлов и сплавов интенсивно расширяется класс многофазных и многокомпонентных материалов, обладающих уникальными физико-механическими свойствами. Усложнение состава сплавов обусловливает их более сложную мезо- и микроструктуру и их эволюцию в процессах термомеханической обработки. Особое внимание конструкторов и технологов в последние десятилетия привлекают двухфазные сплавы на основе железа – дуплексные стали, которые являются основным объектом рассмотрения настоящей работы; области применения, экспериментальные методы и результаты, макрофеноменологические определяющие соотношения для описания поведения этих сталей приведены в кратком обзоре [Трусов и др., 2025]. Поскольку методология исследования поведения многофазных материалов обладает значительной универсальностью, будут затронуты работы, относящиеся и к другим двухфазным сплавам.

Мощным и в значительной степени универсальным инструментом для исследования неупругого деформирования анизотропных гетерогенных кристаллических материалов являются конститутивные модели, основанные на явном описании физических механизмов деформирования. Такие модели обычно называют физическими теориями пластичности или микромеханическими моделями. Для численного анализа практических инженерных задач, возникающих в металлургии, они часто применятся совместно с методом конечных элементов. В этой связи можно упомянуть обширный обзор таких моделей, представленный в работах [Roters et al., 2010 a,b, 2011]. В цитируемых работах обсуждаются конститутивные модели, кинематика, схемы осреднения и многомасштабные подходы, лежащие в основе этих моделей, применение их для описания деформирования, рекристаллизации и фазовых переходов в многофазных дуплексных и TRIP-сталях, прогнозирования поврежденности, формирования текстур при термомеханической обработке.

Разработка новых и совершенствование существующих технологий переработки материалов в современных условиях немыслима без создания математических моделей («цифровых двойников») проектируемых технологий обработки. Центральное место в моделях технологических процессов занимают определяющие соотношения (или конститутивные модели (КМ)), служащие для установления отклика (напряжений или скоростей изменения напряжений) конкретных материалов на термомеханические воздействия (изменения конфигурации исследуемых тел, температуры и воз-

можных других воздействий, например, радиации, электромагнитных полей). В качестве определяющих соотношений (ОС) в значительной части работ, посвященных моделированию технологических процессов обработки металлов и сплавов методами пластического деформирования, используются уравнения классической теории пластичности [Ильюшин, 1963; Качанов, 1969; Малинин, 1975; Ишлинский, Ивлев, 2003; Трусов, Швейкин, 2011а; и др.]. ОС данного класса основаны на результатах экспериментов, проводимых на макрообразцах конкретных материалов, не учитывают структуру сплавов, в силу чего не обладают универсальностью.

В настоящее время общепризнанным является факт решающего влияния на физико-механические характеристики моно- и поликристаллических материалов их мезо- и микроструктуры. В связи с этим в последние десятилетия интенсивно развиваются многоуровневые физически-ориентированные КМ [Horstemeyer, 2009; McDowell, 2010; Трусов, Швейкин, 2019], в которых структура материалов на различных уровнях описывается явным образом. Одним из классификационных признаков КМ данного класса является число структурно-масштабных уровней, на которых ведется рассмотрение. Наибольшее распространение получили двухуровневые (макро- и мезоуровень) модели; элементом макроуровня является представительный макрообъем поликристалла (сотни и тысячи зерен), мезоуровня – кристаллит (зерно, субзерно, фрагмент). В последние 10–15 лет появились трехуровневые модели, в которых на микроуровне рассматривается эволюция плотностей дислокаций на системах скольжения (СС); с краткой справкой о таких моделей можно ознакомиться в [Грибов, Трусов, 2022; Trusov, Gribov, 2022]. Отдельную группу моделей для описания поведения металлов и сплавов при термомеханических воздействиях составляют модели, основанные на дислокационной и атомарной динамике. По способу связи переменных различных структурно-масштабных уровней модели данного класса можно разделить на три группы: статистические, самосогласованные и прямые [Трусов, Швейкин, 2011б, в]. В каждой из этих групп для определения скоростей (или приращений) неупругих деформаций используются жесткопластические, вязкоупругие, упругопластические (УП) или упруговязкопластические (УВП) соотношения. В качестве ОС для определения связей напряжений (или их скоростей изменения) с упругими составляющими тензоров деформации или скоростей деформаций применяются гипер- или гипоупругие соотношения [Трусов, Швейкин, 2019]. В работе [Mollens, 2022] приведены результаты применения многоуровневого подхода к моделированию поведения литой дуплексной нержавеющей стали и обзор работ по данной тематике.

Одним из ключевых вопросов применения самосогласованных микромеханических моделей для описания поведения при деформировании многофазных поликристаллических материалов является проблема гомогенизации – процедура осреднения методом среднего поля для прогнозирования эффективных свойств по известным полям структурных элементов. Этому вопросу посвящены, например, работы [Friebel et al., 2006; Ryu et al., 2019]. В статье [Friebel et al., 2006] предложены несколько схем осреднения, основанные на модификациях модели Эшелби, которые позволяют получать эффективные свойства линейных вязкоупругих композиционных материалов, представляющих собой матрицы, армированные несколькими фазами включений с покрытием. В статье [Ryu et al., 2019] приводится обзор применения процедур гомогенизации к различным физическим явлениям, включая упругость, тепло- и электропроводность, электрическую и магнитную поляризацию, мультифизическим явлениям; предлагаются модификации подходов, учитывающие анизотропию свойств матрицы и дефекты на межфазных границах.

Однако оба подхода к микромеханическому моделированию имеют недостатки: прямые модели для достаточно точного описания состояния поликристаллов требуют построения мелкой сетки с большим числом степеней свободы, это ограничивает сложность и размер исследуемых структур; самосогласованный метод, в котором идеальные кристаллы рассматриваются как деформирующиеся, будучи погруженными в однородную среду с осредненными свойствами, требует подходов для нескольких включений, вместо классического метода Эшелби с одним включением, что также увеличивает ресурсоемкость численных решений. Поэтому был предложен новый метод, основанный на алгоритмах быстрого преобразования Фурье (БПФ). Теоретические основы этого подхода были предложены в работах Moulinec H., Suquet P., Michel J.C. (для описания упругого [Moulinec, Suquet, 1994], упругопластического [Moulinec, Suquet, 1998], вязкопластического [Michel et al., 2000] поведения композитов, состоящих из двух изотропных фаз с различными свойствами).

В работе [Lebensohn, 2001] представлена модификация модели БПФ для прогнозирования эволюции морфологии и текстуры в ГЦК поликристаллах при вязкопластическом деформировании, обсуждаются численные характеристики метода и условия его сходимости. В статье [Liu et al., 2010] приводится сравнение результатов расчетов эволюции текстур, корреляции между поворотами зерен и градиентами деформации при применении алгоритма быстрого преобразования Фурье и прямой микромеханической модели.

Таким образом, учитывая сложное строение многофазных и многокомпонентных сплавов и широкий спектр физических механизмов, реализующих и сопровождающих процессы их термомеханической обработки, для описания последних наиболее перспективными представляется применение именно многоуровневых физически-ориентированных КМ, обзору которых и посвящена настоящая работа. Построение обзора связано с основным классификационным признаком – способом связи переменных различных уровней.

1. Статистические модели

Двухуровневая модель для описания поведения дуплексной стали (40 % аустенита, 60 % феррита), основанная на модификациях моделей среднего поля, предложенных Бервейлером и Зауи [Berveiller, Zaoui, 1979] и Кайето и Пильвеном [Cailletaud, Pilvin, 1994], в сочетании с применением УВП модели на мезоуровне, рассмотрена в [Evrard et al., 2008]. Для определения скоростей сдвига в модели мезоуровня использован степенной закон, упрочнение определяется по плотностям дислокаций на системах скольжения (СС) [Franciosi, Zaoui, 1982], эволюция которых устанавливается простым балансовым уравнением [Essmann, Mughrabi, 1979]. Отдельный раздел посвящен описанию процедуры идентификации, отмечается возможность для идентификации физически-ориентированных моделей относительно простых механических испытаний (на одноосное монотонное нагружение). Циклическое разупрочнение описывается в модели посредством эволюции дислокационных структур в феррите с применением закона, предложенного в работе [Hoc, Forest, 2001], модифицированного с учетом неоднородного распределения дислокаций в феррите. Модель показала удовлетворительное соответствие полученных с ее помощью результатов расчета напряженно-деформированного состояния в опытах на циклическое пропорциональное и непропорциональное нагружение экспериментальным данным в части описания циклического упрочнения, однако оказалась неспособной воспроизвести наблюдаемую в испытаниях следующую стадию – циклического разупрочнения. В связи с этим в [Evrard et al., 2010] рассмотрен модифицированный вариант модели, в котором для определения критических напряжений в зернах феррита применена предложенная в [Estrin et al., 1998; Tóth et al., 2002] «композиционная» модель. Согласно последней дислокации в процессе циклического неупругого деформирования образуют стенки (жесткие подобласти с высокой плотностью дислокаций) и каналы между ними с относительно низкой плотностью дислокаций. Модифицированная модель позволила описать все стадии изменения амплитудных напряжений при циклическом нагружении с постоянной амплитудой деформации: упрочнение, разупрочнение, установившийся режим.

В статье [Chai, Lillbacka, 2006] рассмотрены различные аспекты экспериментальных и численных исследований малоцикловых усталостных повреждений и зарождения трещин в стали SAF 2507 с химическим составом 7Ni-4Mo-25Cr-1.2Mn-0.3N-0.8Si-0.03C-73Fe в отожженном состоянии и после обработки старением. Для вычислительных экспериментов была использована двухуровневая статистическая модель представительного макрообъема, состоящего из монокристаллических однофазных зерен феррита и аустенита со случайной ориентацией, неупругое деформирование монокристаллов описывается с помощью физической теории пластичности. Циклические нагрузки установлены граничными условиями, определенными на границах представительного макрообъема (аналога макрообразца). Макронапряжения вычисляются осреднением напряжений в зернах по всему макрообъему. При моделировании было установлено, что повреждение материала и зарождение трещин начинаются в ферритной фазе для отожженного материала, а в образцах, подвергнутых старению, повреждения могут появляться в обеих фазах.

В работе [Mayeur, McDowell, 2007] представлена конститутивная модель на основе физической теории пластичности для дуплексного сплава Ti-6Al-4V. Дуплексная структура представлена матрицей из ГПУ кристаллов α-фазы и вторичными α+β доменами с ламеллярной структурой, состоящей из реек α-фазы и β-фазы с ОЦК решеткой. Отмечается, что основной механизм деформации – это движение винтовых дислокаций в первичной α-фазе по призматической плоскости, но возможно скольжение и по другим системам. В модели учитывается анизотропия подвижности дислокаций и критических напряжений сдвига для разных типов систем скольжения; соотношение для определения скорости сдвига по системах скольжения α-фазы выбрано в форме, предложенной в работе [Cailletaud, 1992]. Проведенная серия расчетов 3D-модели в пакете ABAQUS (2005) UMAT показала, что имеющиеся 2D-модели не способны адекватно описывать деформационное поведение подобных сплавов, поскольку не учитывают наиболее важные аспекты структуры. Расчеты проводились для случайно текстурированного материала, а также для базальных, поперечных и базальных/поперечных (относительно ГПУ-решетки) текстурированных материалов.

В ряде экспериментальных работ, например [Choi et al., 2012; Zhao et al., 2016; Hou et al., 2021], исследующих поведение обедненных дуплексных сталей, установлено, что деформация ферритной фазы определялась преимущественно скольжением дислокаций, а ведущим механизмом деформация аустенитной фазы являлось мартенситное превращение в последовательности: γ-аустенит → ε-мартенсит → α′-мартенсит, что приводит к повышению прочности и пластичности материала за счет так называемого эффекта пластичности, индуцированной фазовым превращением (TRIP). Подходы к моделированию такого превращения в двухфазных ферритно-аустенитных сплавах предложены в работах [Tjahjanto et al., 2008; Kang et al., 2017]. В статье [Tjahjanto et al., 2008] представлена кристаллографическая модель для описания процесса упругопластического превращения в аустенитной области. Модель сформулирована в терминах больших деформаций, кинематика фазового перехода в которой описывается кристаллографической теорией мартенситных трансформаций, учитывается объемная деформация, вызванная фазовым превращением, пластическое деформирование за счет движения дислокаций в ГЦК кристалле аустенита. Движущие силы для фазового перехода и пластичности получены из термодинамических принципов, учитывающих вклады энергий, связанных в том

числе с дислокациями. Для описания упругопластического поведения ферритной матрицы принята пластическая модель ОЦК кристаллов. Эта модель учитывает асимметрию скольжений в направлениях двойников и антидвойников, которая характеризует поведение решеток этого типа. Аналогичная модель применена в работе [Kang et al., 2017] для обедненной дуплексной стали, в которой исследовалось влияние текстуры аустенитной фазы.

Авторы работы [Le Joncour et al., 2010] исследовали взаимосвязь между поврежденностью на разных масштабах путём количественного измерения параметров экспериментальных образцов, подвергающихся растяжению, с последующим сопоставлением с модельными результатами. На мезо- и макромасштабе параметр поврежденности D определялся по отклонению экспериментально измеренных характеристик от предсказаний базовой модели (не учитывающей повреждения), например, для макромасштаба $D = 1 - \left(\frac{\sigma_{\text{exp}}}{\sigma_{\text{mod}}} \right)^2$. Вычислены критические диапазоны для параметра поврежденности $(D = 0,7 - 0,9)$. В модели явным образом не описывается эволюция и накопление повреждений, но продемонстрировано, что поврежденности на макромасштабах предшествует поврежденность на мезомасштабах.

Статья [Krupp et al., 2010] посвящена комплексному исследованию механизмов усталостного разрушения дуплексной стали в режимах многоцикловой и гигацикловой усталостной нагрузки. Авторами предложена двумерная численная модель распространения короткой трещины, учитывающая анизотропию упругих и пластических свойств фаз, реальную микроструктуру (ориентации зёрен, распределение фаз) и физически обоснованную зависимость эволюции дислокационных субструктур от разориентации соседних зерен. Модель также учитывает формирование полос скольжения и взаимодействие трещин с границами зерен и фаз. Рост трещины в модели описывается либо классическим законом Пэриса, либо (для случая коротких трещин) следующим соотношением:

$$\frac{da}{dN} = C\Delta CTSD, \tag{1}$$

где a – длина трещины, N – число циклов, C – параметр модели, описывающий степень необратимости $\Delta CTSD$ (изменение амплитуды сдвигов в вершине трещины за цикл). Несмотря на ряд упрощений, принятых при моделировании, сильной стороной работы является попытка учета мезо- и микродефектов и их влияния на разрушение. В дальнейших работах авторского коллектива соотношение было модифицировано:

$$\frac{da}{dN} = C \cdot \left(\Delta CTSD \right)^m, \tag{2}$$

где m – параметр модели, близкий к единице [Marinelli et al., 2013]. В последующих работах авторы учитывали не только распространение, но и зарождение трещин [Krupp, Alvarez-Armas, 2014; Krupp et al., 2014]. Авторами было предложено соотношение:

$$\frac{a}{N_i} = \frac{2\lambda}{9\pi \cdot d \cdot h^2 \cdot (1-\upsilon)} \Delta\gamma^2, \tag{3}$$

где N_i – число циклов, необходимое для зарождения трещины длиной a, λ – степень необратимости деформации при циклической нагрузке ($0 < \lambda < 1$), d – средний размер зерна, v – коэффициент Пуассона, h – расстояние между полосами скольжения, $\Delta\gamma$ – амплитуда циклической сдвиговой деформации (определяется экспериментально). Вычисления, проведенные при помощи МКЭ с использованием ФТП и указанного соотношения, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Работа [Poshadel et al., 2019] посвящена экспериментальному и численному исследованию возникновения и развития пластической деформации в обедненной дуплексной нержавеющей стали LDX-2101 с низким содержанием никеля и молибдена в зависимости от его механических свойств – модуля упругости и критического напряжения сдвига по системам скольжения. Численное моделирование проведено методом конечных элементов с учетом упругопластического поведения поликристаллического двухфазного агрегата. В модели в рамках нелинейной кинематики учтены возможные большие деформации и большие повороты кристаллов с кубической и гексагональной решетками, анизотропия скоростей сдвигов по ограниченному числу систем скольжения, изменение ориентации кристаллов и упрочнение систем скольжения. Численные эксперименты по нагружению представительного макрообъема двухфазного поликристалла воспроизводили экспериментальную нагрузку: одноосное нагружение, внутреннее давление в трубчатых образцах. Авторы предложили методологию, позволяющую по одному параметру (учитывающему решение упругой задачи и знание поверхности текучести для отдельного монокристалла) предсказывать, при каких макронапряжениях материал переходит в пластическое состояние.

Взаимовлияние деформирования дислокационным скольжением и двойникованием зерен феррита и аустенита на формирование текстуры с использованием экспериментальных и теоретических методов рассматривается в [Chalapathi et al., 2020]. Исследуемые образцы из дуплексной стали SAF2906 подвергались прокатке с последовательным обжатием на 20, 40, 60 и 80 %; микроструктура анализировалась с использованием рентгеновской и электронной микроскопии. Для численного исследования применялись жесткопластические модели Тейлора [Taylor, 1938] и LAMEL [Van Houtte et al., 1999]; рассматривалось деформирование однофазных и двухфазных материалов, без учета и с учетом двойни-

кования (в кристаллитах аустенита). Результаты расчетов свидетельствуют о лучшем соответствии теоретических и экспериментальных результатов по параметрам текстуры при учете двойникования, несмотря на то что доля двойников при максимальных обжатиях до 80 % не превышает 15 %. Отмечается, что двойникование в зернах аустенита оказывает влияние на упрочнение и деформирование феррита.

Исследованию влияния мартенситного превращения в листовой дуплексной стали (65 % феррита и 35 % аустенита) на предельное формоизменение посвящена статья [Zhang et al., 2021]. Для анализа структуры листовых образцов использована электронная микроскопия. Расчеты произведены с применением статистической (с использованием гипотезы Фойгта) упруговязкопластической модели со степенным законом Хатчинсона для определения скоростей сдвигов по СС. Мартенсит образуется на пересечении полос сдвига и дефектов упаковки, принят силовой критерий превращения (достижение на пересекающихся плоскостях дефектов упаковки критического напряжения). Рассмотрены различные виды нагружения: одноосное и двухосное растяжение, нагружение в условиях плоскодеформированного состояния, показано значительное влияние вида нагружения на превращение аустенита в мартенсит. Результаты демонстрируют существенное повышение предельных деформаций при учете мартенситного перехода.

Физически-ориентированная УВП модель для описания поведения сталей, испытывающих TRIP-эффект, сформулированная с использованием термодинамического подхода, рассматривается в [Connolly et al., 2022]. В модели учитываются влияние температуры, деформации и скорости деформации. Детально описана процедура вывода эволюционных уравнений, описывающих кинетику фазового перехода, скорости сдвигов по системам скольжения, генерацию тепловой энергии. Приведена процедура идентификации модели. Представлены результаты применения модели для случаев плоского, одноосного и двухосного деформирования в широком диапазоне температур (–10 ÷ 70 °C) и скоростей деформации ($5\cdot10^{-4}\div10^{2}$ c^{-1}); показано, что с увеличением параметра трехосности возрастает объемная доля мартенсита.

2. Самосогласованные модели

Для исследования поведения образцов дуплексной стали (50 % феррит – 50 % аустенит) в [Baczmański, Braham, 2004] предлагается совместное использование экспериментальных (дифракция нейтронов и механические испытания на растяжения) и теоретического методов. Методом дифракции нейтронов определены начальные критические напряжения в каждой из фаз и отношение коэффициентов упрочнения, сумма коэффициентов устанавливается из механических испытаний. Для теоретического анализа применена самосогласованная упругопластическая (УП) модель. Отмечается применимость предлагаемой методики для определения свойств как отдельных фаз, так и поликристаллического двухфазного материала.

В работе [Jia N. et al., 2006] в натурных и вычислительных экспериментах на одноосное сжатие образцов из супер-дуплексной нержавеющей стали SAF 2507 рассматривается эволюция полей деформаций, напряжений в фазах и межкристаллитных напряжений. Применение упругопластической самосогласованной модели показало, что после разгрузки после пластического деформирования в аустенитной фазе сохраняются значительные межкристаллитные напряжения, которые существенно превышают напряжения в отдельных фазах. Этот результат был подтвержден экспериментально методом дифракции нейтронов.

В работе [Dakhlaoui et al., 2006] упругопластическая самосогласованная модель используется для описания влияния остаточных напряжений на механическое поведение дуплексной стали X2CrNiMoN22-5-3 (0.015C-1.6Mn-22.4Cr-5.4Ni-2.9Mo-0.12Cu-0.001S-0.17N%) (UR45N) при испытаниях на растяжение и сжатие. Модель позволила спрогнозировать критические сдвиговые напряжения на системах скольжения и параметры деформационного упрочнения материала.

В работе [Dakhlaoui et al., 2007] приведены определенные методом дифракции рентгеновских лучей при испытаниях образцов на одноосное растяжение параметры, характеризующие индивидуальное упругопластическое поведение каждой из фаз в дуплексной аустенитно-ферритной стали. Расчет упругих констант при интерпретации результатов экспериментов осуществляется с помощью самосогласованной конститутивной модели, учитывающей анизотропию свойств исследуемых материалов. Разработанная упругопластическая модель используется для прогнозирования эволюции внутренних напряжений в процессе деформирования и определения критических напряжений сдвига по системам скольжения и параметров деформационного упрочнения материала. На основе анализа результатов, полученных для различных образцов материала, устанавливается влияние химического состава на упругопластическое поведение отдельных фаз.

Для исследования деформирования образцов из дуплексной стали SAF 2507 (Fe-25Cr-7Ni-4Mo-1.2Mn-0.8Si-0.3N%) в [Jia et al., 2008, 2011], обладающих начальной текстурой, используется самосогласованная упруговязкопластическая (УВП) модель, в которой в качестве механизмов деформирования рассматривается скольжение краевых дислокаций (в [Jia et al., 2011] учитывается также двойникование). Для моделирования процесса холодной прокатки (с обжатиями до 25: 50 и 85 %) используются схемы плоского и обобщенного плоского деформированного состояния. Особое внимание уделяется описанию формирования текстуры, отмечается значительное влияние на эволюцию ориентаций взаимодействия зерен аустенита и феррита. Отмечается

наличие остаточных напряжений от предшествующей термообработки образцов, обусловленных различием механических характеристик и коэффициентов температурного расширения. Сравнение теоретических результатов с данными собственных экспериментов исследования искажения решетки (методом дифракции нейтронов [Jia et al., 2008]) и текстуры (методом дифракции рентгеновских лучей) обнаруживает удовлетворительное качественное соответствие.

Описанию вязкого разрушения в дуплексных нержавеющих сталях посвящена работа [Panicaud et al., 2011]. Авторы предполагают, что повреждения зарождаются только в ферритной фазе, в то время как аустенитная фаза сохраняет высокую пластичность. Сравниваются два подхода: модификация модели, предложенной в [Lipinski, Berveiller, 1989], и модификация модели Кайето [Cailletaud, 1992]. В первом подходе в самосогласованную модель Липинского – Бервейе добавлен скалярный параметр поврежденности, определяемый феноменологически и одинаковый для микро- и мезомасштаба. Эволюция критических напряжений сдвига на СС $\dot{\tau}_C^s$ описывается следующим соотношением:

$$\dot{\tau}_C^s = \left(1-d^g\right)\sum_t H^{st}\dot{\gamma}^t - \frac{1}{2}\left(2\sum_t H^{st}\gamma^t + \frac{1}{\sqrt{1-d^g}}\tau_{C0}^s\right)\dot{d}^g = \\ = \left(1-d^g\right)\sum_t H^{st}\dot{\gamma}^t - \frac{1}{2}\left(\sum_t H^{st}\gamma^t + \frac{1}{1-d^g}\tau_C^s\right)\dot{d}^g \quad (4)$$

где s, t – номера систем скольжения, d^g – параметр поврежденности для зерна g, H – матрица упрочнения, γ – сдвиги по системе скольжения, τ_{C0}^s – начальные значения критических напряжений. Модель хорошо согласуется с экспериментальными данными, однако не отражает физику накопления повреждений, а также многомасштабность процесса разрушения. В рамках второго подхода предложено расширение микромеханической модели Кайето. На микромасштабе учитывается скалярный параметр поврежденности, в частности, в матрице упрочнения $\tilde{H}^{st} = \sqrt{1-d^s}\sqrt{1-d^t}H^{st}$, где d – параметр поврежденности, отнесенный к системе скольжения, H – матрица упрочнения для неповрежденного материала, $\tilde{H}$ – матрица упрочнения для поврежденного материала. На мезомасштабе поврежденность описывается тензором второго ранга. Выводится связь между параметрами разных уровней (поврежденность на уровне зерна является следствием накопления поврежденности на системах скольжения). Модель позволяет описывать как хрупкое разрушение, так и накопление пластических дефектов за счёт учета разных механизмов накопления повреждений. Существенным недостатком модели является огромное количество параметров, подлежащих идентификации. Авторы предлагают компромисс: использовать физические идеи второго подхода, но реализовывать их в более простой и вычислительно эффективной схеме, согласно первому подходу.

В [Baczmański et al., 2016] приведены описание методики и результаты экспериментального и теоретического исследования поведения при растяжении образцов из дуплексных сталей UR45N и UR52N с примерно одинаковым содержанием феррита и аустенита. Измерения искажений решеток зерен феррита и аустенита осуществлялось с использованием дифракции нейтронного и синхротронного излучения. Для численного анализа применена самосогласованная упругопластическая модель с анизотропным законом упрочнения и учетом поврежденности зерен. Для описания поврежденности и тензора касательной жесткости использована ранее предложенная авторами модель [Panicaud et al., 2011]. Показано, что микроповреждения появляются в зернах феррита, что приводит к перераспределению напряжений и снижению скорости упрочнения.

В работах [Jacob, Povoden-Karadeniz, 2020a, b] обсуждается физически обоснованная модель осаждения σ-фазы, описывающая эффект сегрегации Cr и Mo на границах зёрен феррита. В термодинамической и термокинетических моделях учитываются свободная энергия системы, коэффициенты диффузии, а также межфазное натяжение. Построены диаграммы осаждения σ-фазы в зависимости от температуры и времени. Хотя σ-фаза в основном зарождается в феррите, авторы показывают, что в аустените σ-фаза также может образовываться, особенно при высоких температурах (~1050 °C). Дополнительным важны выводом является тот факт, что снижение молибдена – наиболее эффективный способ замедления образования σ-фазы.

В [Laukkanen et al., 2021] для исследования влияния фазового состава и морфологии фаз аустенита и феррита на характеристики откольного разрушения предлагается использовать самосогласованную упруговязкопластическую модель. Для описания разрушения применена ранее разработанная авторами вероятностная модель. Рассмотрены три типа образцов с различным содержание аустенита (тип A – 12,4÷17,7 %, B – 17,3÷25,3 %, C – 46 %). Показано, что уменьшение доли аустенита и изменение морфологии зерен аустенита от слоистой к глобулярной ведет к снижению прочностных свойств. При этом отмечается, что крупные зерна феррита способствуют снижению прочностных характеристик.

Исследованию поведения образцов двухфазных (феррит + мартенсит) сталей DP 590, DP 780, DP 980, DP 1180 и мартенситной стали MS 1700 при монотонном и циклическом одноосном нагружении посвящена статья [Daroju et al., 2022]. Для теоретического анализа использована самосогласованная упругопластическая модель, первоначально предложенная в работах [Turner, Tomé, 1994], в сочетании с континуальной дислокационной подмоделью для описания упрочнения – разупрочнения, предложенной в [Zecevic et al., 2016]. В рамках представленной модели поликристалл описывается в виде совокупности эллипсоидальных зерен с определенной кристаллографической ориентацией и объемной долей. При осреднении для получения инте-

гральных свойств материала в рамках стандартной самосогласованной схемы, обеспечивающей равновесие напряжений и совместность деформаций [Eshelby, 1957], каждое зерно рассматривается как упругопластическое включение в однородной эквивалентной среде, свойства которой и являются искомыми свойствами поликристалла. В рамках представленной модели используется коротационная производная Зарембы – Яумана [Zaremba, 1903; Jaumann, 1911], подробно описаны конститутивные соотношения на уровне зерна, а также на уровне поликристалла. Тензор спина решетки как для ферритных, так и для мартенситных зерен определяется через приложенную скорость поворота, антисимметричную составляющую тензора Эшелби [Lebensohn, Tomé, 1993] и пластический спин, определяемый через скорости сдвигов по системам скольжения. Предложена подмодель для описания закона упрочнения по системам скольжения в кристаллитах, основанного на анализе плотностей дислокаций с учетом физического механизма аннигиляции дислокаций, отражающего экспериментально наблюдаемое снижение плотности дислокаций при смене знака деформации. Особое внимание уделено рассмотрению эффекта Баушингера, нелинейного поведения при разгрузке, особенностей упрочнения – разупрочнения при циклическом нагружении, для описания которых в модели используются остаточные микронапряжения («обратные напряжения» – backstress). Для идентификации и верификации модели использованы результаты собственных механических испытаний и электронной микроскопии. Авторами показано, что разработанная конститутивная модель демонстрирует хорошее соответствие расчетных и экспериментальных данных как в экспериментах на монотонное нагружение, так и в процессах циклического деформирования при различных уровнях предварительной пластической деформации. В работе [Knezevic, 2024] разработанная многоуровневая упругопластическая самосогласованная модель, служащая для определения отклика материала в каждой точке, в сочетании с методом конечных элементов, используемого для решения краевой задачи на макроуровне, применяется для прогнозирования изменения геометрических характеристик готовых изделий при листовой формовке заготовок из дуплексных ферритно-мартенситных сталей DP 590, DP 780, DP 1180. В рамках процедуры идентификации путем калибровки результатов моделирования по экспериментальным данным для сталей DP590, DP780 и DP1180 с использованием одноэлементной модели устанавливаются параметры, характеризующие изменение сопротивления сдвигу по системам скольжения в феррите и мартенсите, и «обратные напряжения», описывающие эффекты кинематического упрочнения. С найденными параметрами проведена серия вычислительных экспериментов по гибке с вытяжкой стальных листов с использованием конечно-элементной реализации разработанной самосогласованной модели. Полученные в результате характеристики геометрии образца после изгиба подтверждены экспериментальными измерениями, полученными при формовке заготовок из стали DP780 в состоянии поставки, а также для предварительно деформированного листа аналогичной стали. Модельные расчеты проведены также для образцов из сталей марок DP590 и DP1180. С позиции точности прогнозирования геометрии изготавливаемой детали показана важность учета при моделировании «обратных напряжений», деформационного упрочнения и остаточных напряжений.

В работе [Muñoz et al., 2022] представлены результаты экспериментальных и численных исследований эволюции микроструктуры, порождаемой пластической деформацией анизотропии и механического поведения дуплексной нержавеющей стали, обработанной методом равноканального углового прессования (РКУП) после одного и двух проходов. С помощью вязкопластической самосогласованной модели проведены вычислительные эксперименты на одноосное растяжение, получена количественная оценка эволюции микроструктуры и механических свойств дуплексной ультрамелкозернистой нержавеющей стали; было показано, что за счет разных скоростей сдвигов аустенит является фазой, которая обеспечивает большее упрочнение, в то время как феррит обеспечивает высокую пластичность.

Для исследования поведения дуплексной стали CF8M (AFNOR Z3CND1910), обладающей слоистой структурой (ламели аустенита γ и феррита α), в [Tsekpuia et al., 2023] предлагается 3-уровневая самосогласованная модель. На микроуровне (кристаллитов α и γ фаз) использована УВП-модель со степенным законом для скоростей деформаций и анизотропным законом упрочнения. На мезоуровне рассматривается зерно, состоящее из набора ламелей, отклик которого определяется осреднением с учетом объемных долей фаз; на границах между слоями принимаются условия идеального контакта. Взаимоориентация слоев феррита и аустенита полагается подчиняющейся ориентационным соотношениям Курдюмова – Закса (24 возможных варианта). Отклик на макроуровне (для представительного объема поликристаллического агрегата) определяется с использованием самосогласованной модели. В численных экспериментах, проведенных на одноосное монотонное и циклическое нагружение как для материала в состоянии поставки, так и подвергнутого старению, показана существенная неоднородность напряжений и деформаций в слоях феррита и аустенита. Отмечается значительная зависимость напряжения в феррите от ориентации габитусной плоскости по отношению к направлению нагружения. Старение приводит к возрастанию неоднородности напряженно-деформированного состояния между фазовыми составляющими.

Работа [Baczmański et al., 2024] посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию упругопластических свойств дуплексной нержавеющей стали, в частности, критических сдвиговых напряжений, необходимых для активации систем скольжения, в аусте-

нитной и ферритной фазах. Предложен и применен метод экспериментального определения тензора напряжений для групп зерен с преимущественной ориентацией в ферритной и аустенитной фазах в процессе испытаний на растяжение, что впервые позволило определить критические сдвиговые напряжения для систем скольжения, активированных в обеих фазах, непосредственно из эксперимента без использования для пересчета результатов каких-либо упругопластических моделей. Полученные экспериментальные данные сопоставлены с результатами моделирования с использованием упругопластической самосогласованной конститутивной модели, предложенной в работах [Lipinski, Berveiller, 1989, Lipinski et al., 1995], содержащей два структурно-масштабных уровня – уровень представительного макрообъема для определения осредненных характеристик процесса деформирования и уровень отдельного зерна. В рамках модели учитывались экспериментально определенные критические сдвиговые напряжения в аустенитной и ферритной фазах, а для описания упрочнения применен закон Воуса, согласно которому критические сдвиговые напряжения в зерне связываются с суммарной пластической деформацией сдвига ϑ, накопленной по всем системам скольжения в рассматриваемом зерне g:

$$\tau^g_{Voce} = \tau^{ph}_0 + \left(\tau^{ph}_1 + \theta^{ph}_1 \vartheta\right)\left[1 - \exp\left(-\frac{\theta^{ph}_0}{\tau^{ph}_1}\vartheta\right)\right], \qquad (5)$$

где параметры $\tau^{ph}_0, \tau^{ph}_1, \theta^{ph}_0, \theta^{ph}_1$ определяются для каждой из фаз, а матрица упрочнения H^{st} описывает взаимодействия между системами скольжения в зерне:

$$H^{st} = \frac{\partial \tau^g_{Voce}}{\partial \theta^g} h^{st}; \qquad \dot{\tau}^s_c = \sum_t H^{st}\dot{\gamma}^t . \qquad (6)$$

В работе [Jeon et al., 2024] упруговязкопластическая самосогласованная модель поликристалла применена для моделирования упругой разгрузки двухфазной стали марки DP980 после U-образной гибки. При моделировании учитывались микроструктурные особенности каждой из фаз (кристаллографическая текстура, упругие константы, параметры упрочнения по системам скольжения). Для калибровки модели потребовалось определение 12 параметров, включая 4 параметра закона упрочнения для каждой из фаз, 3 упругие константы и показатель вязкопластичности, что, несмотря на простоту применяемого способа описания упрочнения, позволило авторам добиться хорошей точности описания упругой разгрузки с использованием метода конечных элементов с разработанной пользовательской моделью материала в пакете ABAQUS. Авторами показано, что несмотря на относительную простоту стратегии моделирования, модель успешно описывает такие важные для листовой прокатки металлов особенности поведения как эффект Баушингера, нелинейность кривых зависимости напряжений от деформации в процессах «нагружение – разгрузка – нагружение» и релаксацию напряжений.

В работе [Pulvermacher et al., 2024] представлена упругопластическая самосогласованная модель Клаусена и Томе [Clausen et al., 2008], адаптированная для двухфазных материалов (с учетом взаимодействия фаз через эффективную жесткость) и расширенная для учета специфической двухфазной текстуры. Показана важность анализа полюсных фигур, который позволяет перейти от точечных измерений к полному пространственному анализу НДС, прогнозировать остаточные напряжения. В качестве механизмов упрочнения рассматривается взаимодействие движущихся дислокаций с дислокациями леса, а также с дислокационными субструктурами, что подчеркивает физическую ориентированность модели. При этом не учитывается зернограничное упрочнение, что является существенным недостатком при моделировании сталей.

3. Прямые модели

Прямая упруговязкопластическая модель [Trusov, Shveikin, 2013] со степенным законом Хатчинсона [Hutchinson, 1976] и изотропным законом упрочнения использована в [Hartig, Mecking, 2005] для анализа одноосного сжатия образцов из двухфазного сплава Fe (ОЦК)–Cu (ГЦК) с различным содержанием фаз (Fe – 0; 17; 50; 83 и 100 %). Сопоставление теоретических результатов с данными собственных экспериментов (осадка при комнатной температуре со средней скоростью деформации 10^{-4} с$^{-1}$) демонстрирует удовлетворительное соответствие зависимости σ–ε и ориентаций зерен железа, однако текстура кристаллитов меди значительно отличается, что авторы объясняют недостаточной детальностью аппроксимации зерен конечными элементами.

Появление остаточных поверхностных напряжений рассматривается в работе [Mary et al., 2005]. 2D-термомеханическая модель применена для расчета остаточных напряжений на поверхности образцов из дуплексного сплава 2205 (UNS S31803) после полировки и шлифования. Для построения конечно-элементной сетки использовались реальные микроструктуры и ориентации зерен каждой фазы, полученные экспериментально с помощью метода дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD).

В работе [Düber et al., 2006] рассматривается численная 2D-микромеханическая модель распространения коротких трещин в виртуальном поликристаллическом образце дуплексной стали, сгенерированном с помощью многогранников Вороного [Медведев, 2000]. В модели учтены экспериментально полученные распределения кристаллографической ориентации зерен аустенита и мартенсита, скорость распространения трещин в фазах. С помощью закона Холла – Петча была определена барьерная прочность границ фаз и зерен. Микромеханическая модель была встроена в метод граничных элементов. Эксперименты проводились на циклическое нагру-

жение образцов дуплексной стали X2CrNiMoN22-5-3 (0.02C-1.8Mn-21.9Cr-5.6Ni-3.1Mo-0.5Si-0.1871N%).

Необходимо отметить, что в прямых микромеханических моделях, используемых для описания поведения многофазных материалов, расчетная область часто аппроксимируется с помощью многогранников Вороного, которые более реалистично моделируют зеренную структуру поликристалла, что особенно важно для описания возникновения и распространения трещин, фазовых превращений – процессов, зависящих от механических полей. В связи с этим следует упомянуть работы, посвященные разработке соответствующих алгоритмов. Прежде всего – часто цитируемая работа [Quey et al., 2011], в которой описаны алгоритмы построения сетки крупномасштабных трехмерных поликристаллов со случайной морфологией и распределением ориентаций. Особое внимание уделяется регуляризации геометрии (удаление незначащих деталей морфологии), сравнению нескольких алгоритмов для оптимизации качества сетки, алгоритмам перестройки конечно-элементной сетки для задач с большими деформациями. Алгоритмы позволяют генерировать представительные объемы поликристаллов, содержащих до 10^5 зерен. Представленные алгоритмы реализованы и распространяются в свободном (открытом) программном пакете Neper. В работе [Zheng et al., 2022] предложена модификация алгоритма Вороного – Лагерра, позволяющая контролировать размер и форму зерен, моделировать трехмерные границы зерен с заданной толщиной. Применение подобных алгоритмов для двухфазной феррито-перлитной стали представлено в статье [Nygårds, Gudmundson, 2002]; было показано, что для адекватного моделирования деформационных кривых достаточно ячейки периодичности, содержащей всего пять зерен.

В экспериментах на циклическое нагружение, описанных в работе [Lillbacka et al., 2007], установлено, что напряженно-деформированное состояние дуплексных сталей UNS S32750 и UNS S32906 в значительной степени зависит от амплитуды приложенной нагрузки или деформации, что объясняется разницей упругопластических свойств фаз. В работе рассматриваются вычислительные эксперименты с использованием многоуровневой модели для подтверждения этой гипотезы. В расчетах применяется двумерная зеренная структура, полученная с помощью алгоритма генерации многогранников Вороного.

В статье [El Bartali et al., 2010] рассматривается применение квази-2D-микромеханической модели для образца с размерами 63×60 мкм^2. Была сгенерирована кристаллическая плоская структура, толщина образца – одно зерно. Распределение ориентаций зерен образца дуплексной стали X2CrNiMoN25-07 (0.024C-24.7Cr-6.54Ni-2.84Mo-0.79Mn-0.62Si-0.17N%) определено с помощью электронной микроскопии. Пластическое поведение зерен аустенита и феррита описывалось в рамках физической теории пластичности, учитывающей скольжение дислокаций по системам скольжения, поля напряжений и деформаций определялись методом конечных элементов.

Для описания механизмов начала разрушения в двухфазной ферритно-мартенситной стали DP800 при растяжении в работе [Kadkhodapour et al., 2011] предлагается использовать численные и экспериментальные методы. Для описания разрушения применяется микромеханическая модель с реально наблюдаемой микроструктурой, учитывающая возникновение и рост пустот. Показано, что локализация деформации, которая приводит к появлению сильно деформированных областей, является основной причиной разрушения на заключительной стадии.

В [Watanabe et al., 2012] рассматривается подход к описанию поведения феррито-перлитной стали, основанный на двухуровневой модели. Исследуемый материал полагается состоящим из хаотично ориентированных (по равномерному закону распределения) зерен феррита и колоний перлита, состоящего из чередующихся слоев феррита и пластинок цементита. Для описания деформирования кристаллитов феррита используется прямая упругопластическая модель [Трусов, Швейкин, 2019]. Пластины цементита полагаются упругодеформируемыми с анизотропией общего вида (тензор упругих свойств содержит 21 независимую компоненту). Для анализа поведения колоний перлита формулируется подмодель анизотропной упругопластичности, основанная на введении внутренних переменных и формализме теории пластического течения с двумя поверхностями текучести. Для определения параметров представительного объема перлита применены численные эксперименты с использованием прямой упругопластической модели. Приведены результаты расчетов по одноосному растяжению образцов стали с различным содержанием перлитной фазы, показано удовлетворительное соответствие теоретических и экспериментальных результатов. Данный подход использован также в работе [Mehtonen et al., 2014] при исследовании зависимости поведения стали ферритного класса от параметров процесса деформирования и содержания хрома. В качестве эволюционного уравнения для плотности дислокаций принято простое балансовое уравнение, в котором источниковый член зависит от характеристик процесса деформирования и содержания хрома, а стоковый (отвечающий за аннигиляцию дислокаций и эффекты возврата) – только от условий процесса деформирования. Для определения параметров ОС использованы результаты собственных экспериментов на сжатие до величины деформации 0.4 цилиндрических образцов при температурах 950, 1000, 1050 °C и скоростях деформации 0,01; 0,1 и 1 с$^{-1}$.

Экспериментально-теоретический метод для анализа деформирования образцов из двухфазной (феррит-мартенсит) стали DP980 (одноосное растяжение при комнатной температуре) рассматривается в [Woo et al., 2012]. Для определения зеренной структуры и распределения ориентаций кристаллитов каждой из фаз ис-

пользована дифракция электронов, искажения решетки и напряжения установлены с помощью дифракции нейтронов. Для теоретического исследования применена прямая УВП-модель со степенным законом течения и изотропным законом упрочнения; для определения параметров модели использованы экспериментальные результаты по измерению напряжений. Показано, что распределение ориентаций существенно влияет на локализацию деформаций и начало формирование пор в зернах феррита, примыкающих к кристаллитам мартенсита.

Для исследования влияния неоднородности полей деформации на вязкое разрушение дуплексной стали 0.02C-0.4Si-1.5Mn-22Cr-5Ni-2.6Mo-0.17N при одноосном растяжении в работе [Jeong C.U. et al., 2014] применяется конечно-элементный метод совместно с физической теорией пластичности. В модели исследуется кинетическая устойчивость начальных ориентаций микрокристаллов фаз и ее влияние на вязкое разрушение образца. Было установлено, что области, склонные к вязкому разрушению, находятся в аустенитной фазе вблизи межфазных границ.

Статья [Olden et al., 2013] посвящена численному моделированию диффузии водорода в дуплексной нержавеющей стали методом конечных элементов (МКЭ) с использованием программного комплекса ABAQUS. Авторы рассматривают три модели структуры фаз: крупные, мелкие и вытянутые эллиптические включения аустенита. Показано, что вытянутые включения, ориентированные вдоль направления диффузии, обеспечивают наибольшую скорость переноса. Мелкие же включения замедляют диффузию на начальных стадиях (из-за большей площади границ раздела и большего числа «ловушек»), но при длительной диффузии быстрее насыщаются водородом и перестают тормозить его поток. Также авторы моделируют влияние встроенной микротрещины на распределение водорода и демонстрируют эффект аккумуляции водорода вблизи вершины трещины. Подтверждается доминирующая роль пластической деформации в накоплении водорода у дефектов. Для описания захвата водорода дислокациями используется эмпирическое соотношение [Taha, Mahmoud, 2001]:

$$C_T = \left(49.0 \cdot \varepsilon_p + 0.1\right) \cdot C_L , \qquad (7)$$

где C_T – концентрация в «ловушках», C_L – концентрация в решётке, ε_p – мера накопленной пластической деформации. Показано, что за счёт пластической деформации концентрация водорода в «ловушках» возрастает, причем в феррите концентрация в 6 раз выше решёточной, в аустените – в 8 раз.

Методика и результаты экспериментальных и теоретических исследований одноосного растяжения образцов из нержавеющей дуплексной стали (0.02C-0.53Si-1.52Mn-22.1Cr-5.6Ni-3.1Mo-0.16N) приведены в [Jeong et al., 2015]. Испытания проводились при комнатной температуре, скорость деформации – 10^{-3} $с^{-1}$. После растяжения на 10, 15 и 20 % с помощью электронной микроскопии исследовалось изменение микроструктуры (формы и размеров зерен, разориентации кристаллитов, формирование ячеистой и дислокационной субструктуры). Для теоретического исследования использовалась прямая упруговязкопластическая (УВП) модель [Трусов, Швейкин, 2019]. Значительные разориентации наблюдались в окрестностях межфазных и большеугловых границ. Отмечаются особенности деформирования разных фаз: в феррите, имеющем высокие значения ЭДУ, формируется ячеистая структура, в имеющем низкую ЭДУ аустените деформирование реализуется плоским скольжением. Пластическое течение начинается в зернах аустенита, который в отличие от работы [Spigarelli et al., 2010], где рассмотрено деформирование при высоких температурах, считается более мягкой фазой, затем по мере увеличения напряжений распространяется на зерна феррита. Результаты расчетов качественно согласуются с экспериментальными данными, хотя наблюдаются отличия в определении разориентации кристаллитов.

В работе [Dönges et al., 2015a] рассмотрены методы и результаты экспериментального исследования и численного описания эволюции повреждений в дуплексной нержавеющей стали X2CrNiMoN22-5-3 (0÷0.03C-0÷1.0Si-0÷2.0Mn-0÷0.035P-0÷0.015S-21.0÷23.0Cr-4.5÷6.5Ni-2.5÷3.5Mo-0.1÷0.22N%) (318 LN) при циклическом нагружении до одного миллиарда циклов. Экспериментально установлено, что необратимая доля циклической пластической деформации, вызванная амплитудами нагрузки, близкими к пределу долговечности, вызывает усталостные повреждения: развитие полосы скольжения, зарождение усталостной трещины, распространение короткой усталостной трещины. Выявленные механизмы повреждений были включены в 3D-конечно-элементную модель, учитывающую физические механизмы пластичности. Вычислительный эксперимент позволил описать усталостную долговечность образцов с реальными микроструктурами, полученными, например, с помощью автоматизированного анализа результатов, установленных методом дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD); расчеты показали, что фазовые границы могут существенно влиять на усталостное поведение, блокируя развитие инициирующего повреждения в виде полос скольжения или микротрещин. Моделирование позволяет прогнозировать возникновение микротрещин и их эволюцию – останавливаются ли они внутри зерна, блокируются ли границами зерен или фаз.

Аналогичная модель была применена в работе [Dönges et al., 2015b] для малоцикловых нагрузок. В работе экспериментально установлено, что образцы, не разрушенные после одного миллиарда циклов нагружения, практически не содержали микротрещины, достигших или преодолевших первый микроструктурный барьер (границу фазы или зерна); это позволяет заключить, что пределом усталости материала можно считать максимальное макроскопическое напряжение

или амплитуду деформации, не приводящую к распространению усталостной трещины через всё зерно, в котором она зародилась. Эти экспериментальные результаты были также получены в конечно-элементной модели мезоуровня с учетом пластического деформирования кристаллов, выявленных механизмов разрушения в зернах и влияния границ. Было показано, что модель позволяет определить предел усталости как реальных, так и синтезированных микроструктур.

Методика и результаты экспериментального и теоретического исследования поведения образцов из нержавеющей дуплексной стали (0.03C-0.6Si-1.8Mn-21.9Cr-2.5Ni-0.6Mo-0.5Cu-0.17N%) рассмотрены в [Kim et al., 2016]. Анализировались микроструктура и напряженно-деформированное состояние плоских образцов, полученных из листового проката, при одноосном растяжении. Для исследования микроструктуры использованы методы электронной микрографии. Теоретические расчеты осуществлены для представительного объема с помощью прямой УВП модели, в которую встроена подмодель для описания фазового превращения γ-фазы (аустенита) в α′-фазу (мартенсит). В основу данной подмодели заложен механизм формирования мартенсита на пересечении полос скольжения и дефектов упаковки. Особое внимание уделено исследованию влияния устойчивости ориентаций фаз, заданных в отсчетной конфигурации, на неоднородность деформирования и фазовые превращения. Показано, что устойчивость начальных ориентаций кристаллитов γ-фазы мало влияет на собственно процесс трансформации, однако число активируемых вариантов α′-фазы существенно зависит от указанной устойчивости и ориентаций окружающих зерен.

В работе [Ravi et al., 2019] предложен и апробирован подход к моделированию анизотропного отклика многофазных сталей, в рамках которого поведение материала на макроуровне характеризуется осредненным откликом представительного объема на мезомасштабе, полученного путем прямого численного моделирования методом конечных элементов. В рамках генерируемых представительных объемов для корректного учета анизотропии свойств и межфазных взаимодействий учитываются наиболее важные микроструктурные характеристики рассматриваемого материала – распределение фаз, ориентация зерен, морфология и т.п. В данной работе модели материалов для каждой из фаз строятся на основе специфических функций пластического потенциала, компоненты которых определяются на основе законов физической теории пластичности; на уровне отдельных зерен для материала каждой из фаз используются различные законы упрочнения. Приведенные результаты численных экспериментов с использованием разработанной модели на синтезированной микроструктуре дуплексной аустенитно-ферритной стали демонстрируют хорошее соответствие кривым течения, полученным в экспериментах на одноосное растяжение для той же марки дуплексной нержавеющей стали. Дополнительно оценивался прогноз анизотропии свойств материала на основе анализа экспериментальных данных дифракции нейтронов и экспериментов по виртуальной дифракции, проведенных на синтезированной статистической микроструктуре; предложен подход к прогнозированию анизотропного предела текучести многофазного материала.

Методика и результаты экспериментальных исследований и теоретического построения эволюционирующих поверхностей текучести для листовых образцов из двухфазных сталей (DP590, DP780, DP980) и алюминиевого сплава 6016 представлены в [Cai et al., 2020]. Для теоретического анализа применена прямая УВП модель с анизотропным законом упрочнения. Эксперименты осуществлены растяжением по двум взаимно перпендикулярным направлениям крестообразных образцов при различных сочетаниях прикладываемых нагрузок. Натурные и численные результаты использованы для определения параметров известных анизотропных критериев текучести. Особое внимание уделено анализу влияния жестких включений и текстуры.

В работе [Qayyum et al., 2020] приведены результаты прямого моделирования представительного объема (ПО) двухфазного материала (мартенсит-феррит) и осуществлен анализ влияния толщины элемента ПО на изменение отклика материала при моделировании на мезо- и макроуровнях (локальных и интегральных характеристик напряжений и деформаций) с целью определения минимальной толщины такого слоя для получения адекватных результатов. Показано, что даже при совпадении интегральных характеристик напряжений и деформаций для образцов ПО различной толщины, локальное распределение напряжений и деформаций в рамках рассматриваемых ПО с различной толщиной и размером зерна демонстрирует значительные различия при статистическом сравнении; в частности, вероятностные характеристики распределения напряжений и деформаций для двумерных ПО значительно отличаются от трехмерных. Предложены критерии выбора размеров ПО материала при проведении вычислительных экспериментов на моделях двухфазных материалов по отношению к среднему размеру зерна.

В работе [Qian, Y.et al., 2020] упругопластическая модель совместно с методом конечных элементов применяется для описания поведения при одноосном квазистатическом растяжении дуплексного титанового сплава Ti-5Al-2.5Cr-0.5Fe-4.5Mo-1Sn-2Zr-3Zn (%). В модели учтены анизотропия механических свойств монокристаллов фаз, тип и ориентация решеток отдельных монокристаллов, упрочнение систем скольжения и изменение взаимной ориентации кристаллов в макрообразце. Посредством анализа величины вклада каждого типа систем скольжения в общую деформацию было установлено, что в α-фазе, имеющей ГПУ-решетку, деформация определяется скольжением главным образом по базальной и призматической системам скольжения. Проведен статистический анализ изменений угла разориентаций соседних зерен на разных стадиях деформи-

рования: анализ показал, что на начальной стадии деформирования разориентация увеличивается только между зернами α-фазы, затем, при увеличении деформации, зерна α-фазы деформируют и поворачивают зерна β-фазы, далее начинает увеличиваться разориентация между зернами разных фаз. Проведенные исследования позволяют установить ведущие механизмы деформирования двухфазного материала на разных стадиях деформирования.

В работе [Qin, Beese, 2021] с использованием конечно-элементной модели представительного объема материала рассмотрено поведение дуплексной стали марки DP600 при разрушении в зависимости от вида напряженно-деформированного состояния. Для описания процесса разрушения на микроуровне в модель включены подмодели разрушения для феррита и мартенсита, рассматривается поведение материала при разрушении для семи различных видов напряженно-деформированного состояния. Для сопоставления результатов моделирования процессов накопления повреждений и разрушения с экспериментально определенными деформациями до разрушения предложены пять критериев разрушения материала на уровне представительного макрообъема, в том числе три – основанные на геометрии в соответствии с критической длиной трещины или площадью разрушения, и два – основанные на критическом снижении несущей способности. Показано, что неоднородность микроструктуры приводит к образованию неоднородных полей деформаций и играет решающую роль в процессах разрушения материала, зависящего от напряженного состояния.

Работа [Galán-López et al., 2021] посвящена развитию прямой вязкопластической модели для описания механического поведение многофазных бейнитных высокопрочных сталей (AHSS). В модели учтены генерация и аннигиляция дислокаций, их взаимодействия с препятствиями, такими как границы зерен и включения карбидов. Была проведена верификация модели на одно- и двухосных испытаниях. Результаты численных экспериментов позволили построить поверхности текучести и предельные диаграммы формуемости.

Результаты применения микромеханической модели для описания появления бимодальных структур в образцах из дуплексной нержавеющей стали, подвергнутых обработке трением с перемешиванием (Friction Stir Processing – FSP), представлены в работе [Hu et al., 2022]. При подобной обработке материал испытывает пластическое деформирование совместно с динамической рекристаллизацией, что вызывает появление несовместных деформаций и, как следствие, накопление дислокаций на границах фаз, которое привело к взаимопроникающему зарождению зерен аустенита и феррита (бимодальная структура) на межфазной границе. Как показали экспериментальные исследования с образцами из дуплексной стали 2205, подобная структура обеспечивает стали уникальное сочетание одновременно прочности и пластичности. Предел прочности и удлинение при растяжении были улучшены на 140 и 109 % соответственно по сравнению с таковыми для материалов, не обработанных таким образом.

В [Asgharzadeh et al., 2023] рассматривается применение прямой упругопластической модели для анализа поведения двухфазных материалов. Структура сплава представлена относительно крупными (7,8 мкм) зернами матрицы и частицами жестких включений субмикронных размеров, имеющих различные размеры, объемную долю, расположение и свойства. Критические напряжения сдвига определяются суммой решеточного сопротивления, вклада от взаимодействия дислокаций и напряжения от барьеров (соотношение Холла – Петча). Для определения упрочнения, обусловленного взаимодействием дислокаций, использована дислокационная модель Кокса [Kocks, 1976]. На первом этапе проведены расчеты НДС при растяжении представительного объема в форме куба в отсчетной конфигурации с ребром 64 мкм, содержащего 670 зерен матричной фазы и 0,5 миллиона включений. Для расчетов использована равномерная сетка из 32,8 млн кубических элементов с размером ребра 0,32 мкм. Для решения задачи о растяжении ПО до 20 % понадобилось свыше 60 суток на 24-ядерном компьютере с тактовой частотой 3 ГГц. В связи с этим авторами предложена так называемая процедура гомогенизации, состоящая в определении эффективных характеристик двухфазной среды, определяемых на виртуальных образцах меньшего размера, для определения НДС в которых использовалась сетка, содержащая 1 млн элементов. Детально исследовано влияние жесткости (деформируемости) частиц включений, их размеров, объемной доли, расположения в поликристалле (на границах и в объеме зерен). Предлагаемый подход позволил уменьшить время расчетов для представительного гомогенизированного объема на 99 % по сравнению с расчетом по исходной прямой модели.

Прямая УВП модель использована в [Chalapathi et al., 2023] для исследования двухосного деформирования (с равными деформациями по каждой из взаимно перпендикулярных осей) плоских крестообразных образцов из дуплексной стали SAF2906. Для описания эволюции критических напряжений сдвига на СС применена дислокационная модель Мекинга – Кокса [Mecking, Kocks, 1981]. Показано, что межфазные взаимодействия аустенита и феррита незначительно влияют на формирование текстуры, но существенно увеличивают упрочнение поликристаллического образца. Результаты расчетов сопоставляются с данными собственных экспериментов, показано их удовлетворительное соответствие.

Комплексный подход к изучению деформирования стали со сложной структурой рассмотрен в [Tran et al., 2023]. Исследуемый сплав содержит фазы феррита (46,2 %), бейнита (36,1 %), мартенсита (9,4 %) и аустенита (8,3 %). Для измерения деформаций при испытаниях плоских макрообразцов на растяжение использован метод корреляции цифровых изображений. Для анализа микроструктуры (включая ориентации и иска-

жения решеток кристаллитов) применены методы электронной микроскопии (дифракции электронной и нейтронов, рентгеновский метод). Для теоретического исследования использована прямая УВП-модель со степенным законом Хатчинсона [Hutchinson, 1976] и анизотропным упрочнением. Наличие относительно высокого содержания бейнита ведет к существенной неоднородности деформаций и напряжений; максимальные пластические деформации достигаются в ферритной фазе, тогда как в зернах бейнита действуют высокие напряжения; для окрестностей границ феррит – бейнит характерны высокие градиенты деформаций и напряжений. Отмечается, что все указанные области (внутренности зерен феррита и бейнита и их границы) могут являться зонами инициации вязкого разрушения.

В работе [Basu et al. 2023] представлены результаты исследования механизмов локализации деформации в дуплексных сталях (феррит – мартенсит). Для генерации расчетной области применяются двумерные фазовые карты, полученные методом дифракции обратно рассеянных электронов, и соответствующие микроструктурам исследуемых областей материала, которые были интегрированы в конечно-элементную модель, основанную на использовании теории пластического течения Мизеса и расчете плотностей дислокаций, и учитывающую локальную деформацию феррита и мартенсита, а также их влияние на совокупный отклик. При этом использовалась двумерная осесимметричная модель, подробная информация о соотношениях и параметрах которой содержится в работах [Khandelwal et al., 2021; Basu et al., 2022].

Результаты экспериментального и теоретического исследования влияния анизотропии холоднокатаной листовой заготовки из «обедненной» [Трусов и др., 2025] дуплексной стали, склонной к TRIP-эффекту, на деформирование и разрушение образцов представлены в [Zhang et al., 2023a]. С помощью электронной микроскопии (дифракции электронов) исследована микроструктура заготовки и ее эволюция в процессе деформирования; в начальной конфигурации материал имеет волокнистую структуру, вытянутую в направлении прокатки. Эксперименты проведены на растяжение плоских образцов и глубокую вытяжку цилиндров с различными радиусами при комнатной температуре и низкой скорости деформации (10^{-3} $с^{-1}$). Для теоретического анализа применена прямая УВП-модель (в трехмерной постановке) со степенным законом вязкопластичности и анизотропным упрочнением. Для описания мартенситного превращения принят критерий в терминах касательных напряжений, действующих на плоскостях залегания дефектов упаковок. Показано, что распределение деформаций и напряжений между зернами феррита и аустенита, а также интенсивность мартенситного превращения существенно зависят от направления растяжения (вдоль или поперек направления прокатки). При этом зарождение микротрещин происходит в основном на границах кристаллитов феррита и мартенсита, причем при растяжении в направлении, поперечно направлению прокатки, они возникают при меньших деформациях. К рассмотренной статье примыкает работа [Zhang et al., 2023b], в которой приведены результаты исследования влияния температуры на поведение при одноосном растяжении образцов из того же материала, полученные с помощью тех же «инструментов». Растяжение осуществлялось со скоростью деформации 10^{-3} $с^{-1}$ при температурах в интервале [20, 60] °C. Показано, что при увеличении температуры доля мартенсита, индуцированного за счет пластической деформации (TRIP-эффекта) снижается, при 60 °C доля мартенситной фазы практически равна нулю. Детально анализируется распределение деформаций в кристаллитах различных фаз; отмечается, что с уменьшением температуры происходит выравнивание деформаций в аустените и мартенсите. При снижении температуры деформирования наблюдается также увеличение предельного напряжения и предельной деформации.

Используя экспериментальные методы и подходы физически-ориентированного многоуровневого моделирования авторы [Vermeij et al., 2023] рассматривают механизмы деформирования, способствующие и препятствующие зарождению повреждений в двухфазных сталях на примере стали DP600. Показано, что реечный мартенсит в структуре стали может деформироваться существенно анизотропно, испытывая большие пластические деформации при благоприятной ориентации габитусных плоскостей (за счет реечной морфологии и проскальзывания по границам субструктур). В ходе исследования деформации отслеживались *in situ* в наномасштабе, сопоставлялись с подробными картами микроструктуры и классифицировались для каждого варианта мартенсита по скольжению в плоскости габитуса или вне плоскости габитуса с выявлением активных систем скольжения на уровне отдельных вариантов мартенсита с параллельным проведением расчетов с помощью прямой конститутивной модели. В ряде экспериментов зафиксирована высокая пластичность мартенситных субструктур, обусловленная скольжением вдоль благоприятно ориентированной плоскости габитуса.

В [Aydiner et al., 2024] приведены результаты численного исследования механизмов разрушения двухфазных сталей (феррит – мартенсит) с изучением эволюции микроструктуры в процессах трехосного деформирования на представительных объемах (ПО) материала по различным механизмам – декогезия феррит-феррит, декогезия феррит-мартенсит и растрескивание мартенсита. При моделировании ПО материала в качестве конститутивной модели для феррита применяется физически-ориентированная вязкопластическая модель совместно с моделью когезионного разрушения. В процессе идентификации параметров модели межзеренного разрушения для описания отклика феррита и мартенсита применяется теория пластического течения Мизеса с изотропным законом упрочнения. Моделирование проведено для различных микроструктурных

морфологий на сгенерированных с использованием пакета Neper представительных объемах материала при различных объемных долях мартенситной фазы для 4 различных видов трехосного нагружения. Исследования показывают [Das, Chattopadhyay, 2009; Avramovic-Cingara et al., 2009; Calcagnotto M. et al., 2011], что морфология мартенситной фазы при сохранении схожих объемных долей существенно влияет на процессы пластического деформирования материала и реализацию механизмов первичного разрушения.

Результаты экспериментального и теоретического исследования одноосного растяжения образцов из двухфазной стали (Fe-0.34C-0.1Si-1.94Mn-7.88Cr-7.85Ni-4Mo-1.54Al%), полученных холодной и теплой прокаткой и имеющих ультратонкую слоистую структуру, приведены в [Zhai et al., 2024]. Особое внимание уделено анализу возникновения «зуба текучести», который авторы связывают с отрывом дислокаций от атмосфер примесных атомов, генерацией мобильных дислокаций границами зерен и формированием полос Людерса. Расчеты осуществлены с использованием МКЭ, в качестве определяющего соотношения использована теория пластического течения, пластическая составляющая скорости деформации в которой определяется из уравнения Орована по скалярной плотности и скорости мобильных дислокаций. Для определения плотностей мобильных и иммобильных дислокаций использованы феноменологические соотношения, скорость движения мобильных дислокаций зависит от энергии активации, действующих напряжений и напряжения течения. Полагается, что при пересечении полос скольжения образуются зародыши мартенсита, для определения объемной доли мартенсита использована модель Олсона – Коэна. Напряжения течения зависят от плотности дислокаций и доли мартенситной фазы. Приведены результаты расчетов, качественно согласующиеся с экспериментальными данными.

В [Zhou et al., 2024] рассмотрены методика и результаты экспериментального и численного исследования влияния старения на изменение поведения феррита и аустенита. Для экспериментов использованы поликристаллические микростержни каждой из фаз, подвергаемые одноосному сжатию. Для анализа микроструктуры, дислокационных субструктур и компонентного состава использованы методы оптической и электронной микроскопии. Основное внимание уделено изменению дислокационных субструктур и фазового состава; показано, что при старении в феррите наблюдается спинодальный распад на фазы, насыщенные Cr (α′) и с обедненным содержанием хрома. Кроме того, возникают жесткие частицы так называемой G-фазы (с повышенным содержанием никеля). Для теоретического анализа использована прямая упруговязкопластическая модель, для определения критических напряжений в которой применена дислокационная подмодель. В последней плотности дислокаций на СС представляются суммой плотностей краевых и винтовых дислокаций, скорости изменения которых связаны со скоростями сдвигов. Для идентификации модели использованы результаты экспериментов по осадке микростержней в состоянии поставки и после старении в течение 1000 и 5000 часов при температуре 400 °C. Показано удовлетворительное соответствие численных и экспериментальных результатов.

В [Zhang et al., 2024a] представлены методика и результаты экспериментального и численного анализа осадки микростержней из двухфазного (включения зерен α в матрице β фазы) титана. Для расчетов использована прямая УВП модель со степенным законом течения и анизотропным упрочнением. В законе упрочнения учтено влияние геометрически необходимых дислокаций, плотность которых определена по пластической составляющей градиента места (соотношение Ная [Nye, 1953]). Показано значительное влияние включений α фазы на концентрацию напряжений, активацию и распределение сдвигов на СС в матрице β фазы.

В работе [Sarand, Misirlioglu, 2024] метод конечных элементов совместно с физически-ориентированной моделью пластичности кристаллов применяется для прямого численного моделирования развития механизмов деформирования в двухфазной мартенситно-ферритной стали марки DP600 при различных видах нагружения (растяжение, сжатие, сдвиг). На основе карт сплава, полученных экспериментально методом дифракции отраженных электронов, созданы модельные представительные объемы материала, состоящие из ферритных и мартенситных элементов, на которые в дальнейшем накладывались расчетные сетки различного разрешения. При этом используется предложенный авторами «однослойный 3D-режим», обеспечивающий реализованной схеме высокую вычислительную эффективность. В процессе численного моделирования для изучения влияния мартенситной фазы были разработаны два подхода; в рамках первого физическая теория пластичности применялась для описания поведения ферритной фазы при деформировании с описанием упрочнения по системам скольжения за счет эволюции плотностей дислокаций; в рамках второго авторами предложена гибридная модель за счет внедрения описания пластического течения мартенситной фазы с помощью теории течения Мизеса с изотропным законом упрочнения. Особое внимание уделено анализу взаимодействия мартенситной фазы с окружающей ферритной матрицей. Вычислительные эксперименты показали, что в процессе деформирования наблюдаются большие градиенты перемещений, развитие текстуры и локальные изменения плотности дислокаций, а следовательно, и эффекты локализации пластических деформаций в феррите вблизи мартенситных областей. Также показано существенное влияние типа нагружения на деформационное упрочнение.

Результаты применения прямой упруговязкопластической модели для анализа деформирования представительного макрообъема нержавеющей дуплексной

стали, склонной к TRIP-эффекту (transformation-induced plasticity), приведены в [Zhang et al., 2025b]. Для описания мартенситного перехода принят простой критерий (по достижению критических напряжений на пересекающихся системах дефекта упаковки). Особое внимание уделено рассмотрению образования микротрещин, формирующихся в границах зерен и фаз. Основной причиной полагается несовместность сдвигов по системам скольжения граничащих кристаллитов, для оценки которой использован параметр, характеризующий различие ориентаций СС и скоростей сдвигов по ним [Bieler et al., 2014, 2019; Haouala et al., 2020]. Показано, что микротрещины образуются в основном на межфазных границах и межзеренных границах аустенита и феррита, после чего распространяются по фасеткам границ.

В работе [Aghenzour et al., 2025] представлен комплексный подход к 3D-моделированию микроструктуры литых дуплексных нержавеющих сталей (феррит – аустенит), основанный на анализе экспериментальных данных, который позволил провести иерархическую декомпозицию элементов микроструктуры материала (с выделением первичных зерен, пакетов, блоков, реек) и сформировать способ описания реальной микроструктуры в рамках конститутивной модели, а также управлять различными параметрами этой структуры для формирования образцов материала с различными характеристиками для проведения вычислительных экспериментов. Предложена прямая физически ориентированная модель, в рамках алгоритма реализации которой на первом этапе осуществляется формирование структуры элемента представительного объема материала, содержащего равноосные ферритные зерна, а на втором этапе осуществляется иерархическое разделение этих первичных зерен путем создания пакетов, блоков и реек, каждая из которых затем относится к аустенитной или ферритной фазам, при реализации которой используются модули открытой библиотеки Python DAMASK [Roters et al., 2019]. С использованием специально разработанного кода реализации МКЭ для моделирования распространения ультразвуковых волн через гетерогенные микроструктуры [Dorval et al., 2023, 2025] проведено моделирование распространения продольной плоской волны на сгенерированных элементах представительных объемов для каждого образца с анализом затухания и фазовой скорости, результаты которого показали, что затухание и фазовая скорость существенно не зависят от объемной доли феррита в структуре материала, а преимущественно зависят от размера зерна (особенно на высоких частотах), показано хорошее соответствие результатов моделирования данным экспериментальных измерений, проведенным на исследуемых образцах, намечены направления дальнейших исследований.

В работе [Jung, Kim, 2025] нелинейное вязкопластическое поведение двухфазного материала мартенсит-феррит рассмотрено на примере дуплекс стали марки DP980 в испытаниях на нагрузку-разгрузку с одновременным анализом эволюции микроструктуры материала с использованием прямой физически-ориентированной модели, интегрированной в конечно-элементный (ABAQUS) решатель. Для исследования сложного характера деформационных процессов в двухфазном материале на микроуровне, зависящих от предыстории нагружения, предложена микромеханическая модель и явным образом сгенерирован трехмерный представительный объем материала, состоящий из мартенситных и ферритных элементов, упругий отклик которого на внешнее механическое воздействие исследован с учетом зависимости от скорости воздействия численно методом конечных элементов, и проанализированы особенности пластического деформирования каждой из фаз.

В работе [Liu et al., 2025] рассмотрено применение прямой физически-ориентированной модели совместно с методом конечных элементов для анализа напряженно-деформированного состояния образцов из дуплексной (аустенитно-ферритной) нержавеющей стали 2205 (0,02 % C, 0,45 % Si, 1,45 % Mn, 22,07 % Cr, 5,1 % Ni, 3,37 % Mo, 0,13 % N) и интеграции разработанной модели с данными *in situ* экспериментов (дифракция нейтронов, дифракция обратно рассеянных электронов) для количественной оценки микромеханического отклика представительного объема материала на основе анализа микроструктуры. Предложенный авторами динамический механизм упрочнения, индуцированного неоднородным распределением деформаций между фазами, продемонстрирован в вычислительных экспериментах на одноосное растяжение и подтвержден натурными испытаниями при комнатной температуре, что позволило достичь одновременного повышения как прочности, так и пластичности исследуемого образца. Проблема создания перспективных материалов с повышенными характеристиками прочности и пластичности рассматривается и в работе [Zhang et al., 2025a], в рамках которой методом холодной прокатки с последующим отжигом при температурах от 900 до 1000 °C в течение 1 мин была синтезирована гетероструктурная дуплексная нержавеющая сталь 2205. После отжига при 950 °C предел текучести и прочность на растяжение значительно повысились с исходных значений 341 и 513 МПа до 657 и 816 МПа соответственно. Одновременно с этим относительное удлинение увеличилось с 36 до 41,7 %. С помощью просвечивающей электронной микроскопии и дифракции обратно рассеянных электронов были изучены микроструктурное деформационное поведение и основные механизмы упрочнения; показано, что измельчение зерна, дислокационное упрочнение и упрочнение, индуцированное неоднородным распределением деформаций между фазами, в совокупности, способствовали синергетическому повышению прочности и пластичности материала.

Авторы работы [Xia et al., 2025] рассмотрели возможности использования для расчетов микроструктурных изменений 2D-представительных объемов материалов (вместо трехмерных микроструктур) при реализа-

ции прямых физически-ориентированных конститутивных моделей двухфазных мартенситно-ферритных сталей при одноосном растяжении. С использованием синтезированной микроструктуры была разработана прямая полностью трехмерная конститутивная модель представительного объема материала. Далее были предложены 2D-модели с четырьмя различными условиями для «внеплоскостных» эффектов: плоское напряжение, плоская деформация и два введенных авторами условия обобщенного плоского напряженного состояния. Результаты были сопоставлены с результатами трехмерной модели с использованием кривых «напряжение – деформация», полей «внеплоскостных» напряжений, а также их статистического анализа в условиях одноосного растяжения и сделан вывод о том, что применение модели с обобщенным плосконапряженным состоянием обеспечивает наиболее точное приближение к результатам трехмерного моделирования независимо от морфологии зерен, объемной доли мартенсита и текстуры.

4. Гибридные (комбинированные) модели

В [Bugat et al., 1999] для анализа деформирования дуплексной стали CF8M предлагается использовать 3-уровневую модель. На микроуровне для описания поведения кристаллитов каждой из фаз (феррита δ и аустенита γ) применяется упруговязкопластическая (УВП) модель со степенным законом течения Хатчинсона [Hutchinson, 1976] и анизотропным упрочнением. На мезоуровне рассматривается бикристалл пересекающихся полос δ и γ. Для определения отклика элемента мезоуровня принята модель среднего поля [Berveiller, Zaoui, 1979], параметры которой найдены с помощью прямой конечно-элементной модели бикристалла. Представительный объем макроуровня включает 24 элемента мезоуровня (по числу возможных взаимоориентаций кристаллитов феррита и аустенита согласно ориентационным соотношениям Курдюмова – Закса), для определения отклика на макроуровне также применяется модель среднего поля. Адекватность модели подтверждается удовлетворительным соответствием теоретических и экспериментальных результатов опытов на монотонное и циклическое одноосное нагружение.

Работа [Simon et al., 2019] посвящена комплексному исследованию остаточных напряжений, возникающих в дуплексной нержавеющей стали в процессе глубокой вытяжки. Работа фокусируется на микромеханических напряжениях между фазами, которые могут существенно влиять на поведение многофазных материалов при циклических нагрузках. Представлена двухуровневая модель, на верхнем масштабном уровне используется МКЭ-решатель. Моделирование на нижнем масштабном уровне основано на теории среднего поля, которая позволяет эффективно оценивать локальные напряжения и деформации в каждой фазе на основе усреднённых (макроскопических) полей. Модель показывает хорошее соответствие с экспериментальными данными в областях с малыми деформациями, но в точках с высокими деформациями наблюдаются существенные расхождения. Это можно объяснить упрощенными законами упрочнения и отсутствием описания эволюции текстуры.

В работе [Eghtesad, Knezevic, 2020] представлена микроструктурная физически-ориентированная модель на уровне ячейки поликристалла, предназначенная для описания процессов упругопластического деформирования поликристаллических агрегатов с учетом анизотропии свойств и зависимости от скорости деформирования и температуры при больших пластических деформациях. При переходе с уровня ячейки на уровень кристалла используется микромеханическая схема гомогенизации на основе упруговязкопластического быстрого преобразования Фурье. Многоуровневая модель адаптирована для реализации на высокопроизводительной вычислительной платформе на графических процессорах (GPU) для достижения вычислительной эффективности при моделировании сложных микроструктур и применена для описания процессов деформирования листовых двухфазных ферритно-мартенситных сталей (DP590, DP780, DP980, DP1180) при монотонном и циклическом нагружении (в том числе при нелинейной разгрузке, знакопеременном нагружении, с учетом изменения скорости упрочнения при смене знака деформирования за счет эволюционирующей микроструктуры, включая эволюцию плотности дислокаций и изменение кристаллографической ориентации зерен в процессе деформирования).

При разработке многоуровневых моделей деформирования дуплексных сталей одним из ключевых шагов является генерация начальной структуры, а также описание ее трансформации. В статье [Santos et al., 2021] предложена процедура генерации начальной дуплексной матрицы, а также процедура описания зарождения и роста σ-фазы. Используется метод каузальных конусов (Causal Cone Method), который является дискретной реализацией классической JMAK-теории [Колмогоров, 1937; Avrami, 1939; Johnson, Mehl, 1939], применяемой для описания зарождения и роста новых структур в металлах. Авторы отмечают соответствие смоделированных структур наблюдаемым в экспериментальных образцах.

Детальному исследованию влияния различных факторов на формирование текстуры при холодной прокатке (моделируемой как осадка в условиях плоской деформации) образцов из двухфазной стали (ГЦК+ОЦК) посвящена работа [Chalapathi et al., 2022]. Основное внимание уделено анализу влияния условий сопряжений кристаллитов рассматриваемых фаз; рассмотрены различные варианты взаимоориентаций в соответствии с ориентационными отношениями Бейна, Курдюмова – Закса, Нисияма – Вассерман и случайным распределениям Маккензи. Исследуются различные сочетания начальных ориентаций зерен (текстур) каждой из фаз и ориентационных отношений. Кроме того, рассмотрено влияние соотношений критических напряжений на СС кристаллитов каждой из фаз и законов упрочнения. Рас-

четы осуществлены с использованием прямой вязкопластической модели, реализованной с помощью метода быстрого преобразования Фурье. Показано, что наибольшее влияние на текстуру прокатки оказывает начальное распределение ориентаций кристаллитов. Отмечается незначительное влияние на эволюцию ориентаций соотношения критических напряжений сдвига СС рассматриваемых фаз и закона упрочнения.

Методика и результаты экспериментальных и теоретических исследований образцов из дуплексной стали 2205 представлены в [Dong et al., 2022]. Рассматриваются опыты на растяжение плоских образцов, содержащих в центральной части область сварки (встык). Детально описывается полученная с помощью электронной микроскопии микроструктура сварной зоны, зоны термического влияния и материала остальной части образцов. Для теоретического анализа применяется комбинированная модель. На макроуровне для расчета напряженно-деформированного состояния использована феноменологическая теория пластического течения. Напряжения течения полагается определяемым суммой четырех составляющих: «решеточного» сопротивления (напряжения Пайерлса – Набарро), вкладов от твердорастворного, зернограничного и дислокационного упрочнения; для описания последнего принята модель Кокса – Мекинга для анализа эволюции скалярной плотности дислокаций [Kocks, Mecking, 1979]. Для исследования деформирования на мезоуровне для выделенных подобластей образца использована прямая упруговязкопластическая модель; граничные условия для указанных подобластей определяются из решения задачи на макроуровне. Показана существенная неоднородность деформаций и напряжений в различных зонах сварного соединения, что обусловлено отличиями в структуре материала (например, более мелким зерном металла в зоне сварки).

Рассмотрению влияния микроструктурных факторов на склонность дуплексной нержавеющей стали 2205 к водородному охрупчиванию посвящена работа [Wu et al., 2022a]. Авторы используют микроструктурно-ориентированное моделирование для анализа перераспределения водорода и напряжений в условиях пластической деформации. Ключевым элементом модели является модифицированное уравнение диффузии водорода, учитывающее наличие «ловушек», в роли которых выступают дислокации. Уравнение учитывает термодинамическое равновесие между водородом в решетке и в «ловушках», движущую силу от градиента гидростатического напряжения, изменение плотности «ловушек» (дислокаций) при пластической деформации. В результате наблюдается аккумуляция водорода в зонах концентрации напряжений (вблизи границ раздела фаз), активизация дислокаций-«ловушек», особенно в аустените (где рост плотности дислокаций выше), перетекание водорода из аустенита в феррит через границы фаз. Моделирование представительного объёма при помощи МКЭ демонстрирует ожидаемые результаты распределения нагрузки в двухфазных сплавах: феррит испытывает более высокие напряжения из-за его большей жесткости, аустенит испытывает более высокие пластические деформации из-за большей пластичности), на границах раздела фаз возникают локальные концентрации напряжений из-за несовместности деформаций. В статье из этой же серии работ [Wu et al., 2022b] авторы предлагают количественную, физически обоснованную модель, описывающую влияние границ раздела фаз (ГРФ) на процесс диффузии водорода. Здесь, в отличие от предыдущей работы, в качестве «ловушек» рассматривается уже ГРФ. Предлагается рассматривать ГРФ не как идеальную математическую поверхность, а как очень тонкий слой с собственными диффузионными и растворяющими свойствами. Это позволяет ввести два ключевых параметра: энергию связывания на границе (отвечает за эффект «ловушки») и энергию барьера диффузии через границу (отвечает за транспортный барьер). Получена общая формула для эффективного коэффициента, входящего в уравнение диффузии:

$$\left[1+\Sigma_i \frac{N_i N_L K_i}{\left(N_L + C_L K_i\right)^2}\right]\frac{\partial C_L}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C_L}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 C_L}{\partial y^2}\right), \quad (8)$$

где C_L – концентрация водорода в междоузлиях кристаллической решетки, N_i – концентрация ловушек i-го типа, N_L – концентрация междоузлий в кристаллической решетке, K_i – константа равновесия ловушки i-го типа, D – коэффициент диффузии. Предложена методика идентификации параметров приведенного соотношения.

Для исследования деформирования листовых заготовок из двухфазных (феррит – мартенсит) сталей в [Liu et al., 2024] предлагается применить комбинированную модель. Для описания процесса изготовления реальных изделий, имеющих значительные размеры, используется метод конечных элементов (МКЭ) с макрофеноменологической теорией пластического течения, учитывающей анизотропию материала. Для определения входящих в определяющие соотношения (ОС) анизотропной теории течения параметров вводится представительный макрообъем, для которого применяется прямая физически-ориентированная модель с анизотропным законом упрочнения систем скольжения, учетом «обратных напряжений», разупрочнением, деградацией упругих свойств. Для построения представительного объема используется полученная методами электронной микроскопии зеренная структура двухфазной стали. Полученные результаты расчета гибки листовой заготовки показывают удовлетворительное соответствие экспериментальным данным.

В работе [Zhang T. et al., 2024b] гибридная конститутивная модель применяется для описания процесса формовки элементов конструкций из высокопрочной дуплексной нержавеющей стали. В рамках разработанного авторами подхода кривая «напряжение – деформация» материала определяется на основе растяжения представительного объема макроуровня, явным образом сгенерированного состоящим из элементов мартенсит-

ной и ферритной фаз с использование пакета DREAM 3D [Roters et al., 2019]. В рамках модели поведение каждой из фаз описывается конститутивными соотношениями на основе теории пластического течения с дислокационным упрочнением, зависящим от напряжения Пайерлса с учетом концентрации легирующих элементов [Sodjit S., Uthaisangsuk V., 2012] и дополнительного упрочнения, определяемого с учетом текущего содержания углерода в ферритной и мартенситной фазах. Полученная на основе гипотезы единой кривой конститутивная модель на макроуровне используется при решении задач формовки и разрушения. В результате расчетов для стали DP1180 получены средние относительные погрешности 5,83, 6,85 и 10,71 % при определении кривой «напряжения – деформации», предельной кривой формовки и коэффициента расширения отверстия, соответственно.

В работе [Zandomeni, Seifert, 2025] рассматривается механическое поведение дуплексных сталей, подверженных негативному воздействию водорода – водородному охрупчиванию. Влияние водорода на механические свойства стали определяется не только его химической активностью, но и микроструктурными характеристиками материала, такими как размер зерна, распределение фаз, различные типы границ зерен. В работе представлена микромеханическая градиентная модель пластичности монокристалла, учитывающая эволюцию геометрически необходимых плотностей дислокаций в двухфазном материале. В статье [Dadfarnia et al., 2015] представлена модель переноса водорода подвижными дислокациями, которые играют важную роль в установлении локальных условий, способствующих разрушению. Основные теоретические аспекты диффузии водорода в микромеханических моделях пластичности представлены в работе [Hassan et al., 2018].

В работе [Han et al., 2025] прямая физически-ориентированная модель с достаточно простыми определяющими соотношениями [Kalidindi, 1998, Tasan et al., 2014], генерацией 2D представительных объемов двухфазного (феррит-мартенсит) материала с использованием DREAM 3D [Roters et al., 2019] и фиксированным количеством варьируемых параметров интегрирована в сверточную нейронную сеть с использованием нефограмм локальных напряжений. Фундаментальная физическая теория пластичности применяется при моделировании для ограничения направления обучения в рамках стратегии глубокого обучения. Показано, что модель может точно предсказывать кривые напряжения – деформации, характер деформационного упрочнения и точку начала образования шейки для двухфазных ферритно-мартенситных сталей разного состава, полученных при различных условиях обработки.

5. Дислокационная и атомарная динамика

При построении феноменологических ОС (в большинстве случаев – для одноосного нагружения, связи σ–ε) часто напряжения течения связывают напрямую с плотностью дислокаций. В [Roters et al., 2000] рассмотрена модель, оперирующая тремя скалярными плотностями дислокаций: мобильные, иммобильные дислокации в стенках и внутренности дислокационных ячеек. Сформулирована система эволюционных уравнений, в которой учтены генерация, аннигиляция и образование барьеров дислокациями, а также формирование вторичных частиц и взаимодействие с ними дислокаций. Модель применена для описания одноосного сжатия при температуре 350°C и скорости деформации 10^{-3} $с^{-1}$ образцов из однофазного и двухфазного алюминиевых сплавов; показано удовлетворительное соответствие расчетных и экспериментальных данных.

Построению феноменологического ОС, связывающего одноосные напряжение, деформацию и скорость деформации, для описания деформирования образцов из дуплексной стали LDX 2101 (Fe – 21,5 % Cr, 1,5 % Ni, 0,03 % C, 5 % Mn, 0,22 % N, 0,3 % Mo, 0,7 % Si, 0,35 % Cu) посвящена статья [Haghdadi et al., 2016]. Для идентификации модели использованы результаты проведенных экспериментов по сжатию образцов до деформации 0,7 в диапазоне температур 900÷1250 °C при скоростях деформации 0,01; 0,1; 1, 10 и 50 $с^{-1}$. Для описания упрочнения применена дислокационно-ориентированная модель Эстрина – Мекинга [Estrin, Mecking, 1984], дополненная для учета разупрочнения за счет рекристаллизации соотношением модели JMAK [Колмогоров, 1937; Avrami, 1939; Johnson, Mehl, 1939]. С использованием этих соотношений получено ОС, связывающее только переменные макроуровня; показана адекватность полученной модели.

Значительная часть нержавеющих дуплексных сталей в определенных режимах обработки может испытывать мартенситное превращение, в том числе – обусловленное действием напряжений или деформаций, т.е. они проявляют склонность к так называемому TRIP-эффекту (transformation-induced plasticity). Для описания твердотельного мартенситного перехода широкое распространение получил механизм, предложенный Олсоном и Коэном [Olson, Cohen, 1972]. Согласно этому предложению, преобразование α-фазы (ГЦК) в α′-фазу (ОЦК) осуществляется в зонах пересечения полос скольжения расщепленных дислокаций. В [Sinclair, Hoagland, 2008] с применением атомарной динамики с использованием потенциала погруженного атома показано качественное соответствие полученных результатов реализуемости модели Олсона – Коэна. В то же время отмечаются отличия от экспериментальных данных в ориентационных соотношениях, что авторы объясняют активацией в натурном эксперименте пластических деформаций, не учитываемых в расчетах с использованием атомарной динамики.

Одной из ключевых проблем в эксплуатации двухфазных (аустенитно-ферритных) нержавеющих сталей является явление низкотемпературного охрупчивания, связанного со спинодальным распадом ферритной фазы. В ряде работ [Emo et al., 2014; Rolinska et al., 2025]

подчеркивается ограниченность классических моделей и необходимость явного учета физики и термодинамики данных гетерогенных многомасштабных процессов. Статья [Das Y. et al., 2021] посвящена моделированию изменения механических свойств стали на основе количественных данных о наноструктуре, полученных методом малоуглового рассеяния нейтронов. Исследуется связь между изменением твердости феррита ΔHV и приращением критических касательных напряжений $\Delta\tau_{CRSS}$, для вычисления которых используются и сравниваются две модели. В модели [Kato M., 1981] используется соотношение:

$$\Delta\tau_{CRSS} = A\eta E/2 + 0.65\left(\frac{\Delta G b}{\Lambda}\right), \qquad (9)$$

где A – амплитуда колебаний концентрации хрома, η – параметр решеточной деформации, E – модуль упругости, ΔG – изменение модуля сдвига, b – величина вектора Бюргерса, Λ – длина волны спинодального распада. В модели [Ardell A.J., 1985] используется соотношение

$$\Delta\tau_{CRSS} = N\left(A\eta E\right)^{5/3}\left(\frac{\Lambda b}{\Gamma}\right)^{2/3}, \qquad (10)$$

где N – параметр модели, зависящий от типа дислокаций, а Γ – сила линейного натяжения дислокации, равная 0,182, 0,591 и 0,284 для краевых, винтовых и смешанных дислокаций. Таким образом, в рассматриваемых моделях упрочнение реализуется за счет когерентных внутренних напряжений, за счет изменения модуля упругости и за счет препятствования движению дислокаций спиноидальных доменов. Результаты, полученные в вычислительных экспериментах с использованием обеих моделей, хорошо согласуются с экспериментальными данными при температурах до 325 °C. Также отмечена преобладающая роль краевых дислокаций в деформации феррита.

Связи спиноидального распада и процесса осаждения G-фазы посвящена работа [Emo et al., 2014]. Авторы ставят перед собой задачу объяснения физической природы этой связи при помощи атомистического моделирования (метод Монте-Карло). Рассматривается упрощенный тернарный сплав (железо, хром, прочие примеси) с использованием упрощенной модели парных взаимодействий. Демонстрируется соответствие полученной структуры экспериментальным данным. Подтверждена синергия спиноидального распада и процесса осаждения G-фазы. Синергия объясняется общим механизмом диффузии – вакансии (и, следовательно, атомы) движутся преимущественно вдоль границ α/α'. Это создает «транспортный коридор» для построения G-фазы.

Результаты исследования нано-дуплексной стали с использованием атомарной динамики рассмотрены в [Li et al., 2025]. Особое внимание уделяется анализу влияния морфологии двойников на поведение исследуемого образца размером 20×20×20 нм. Показано, что существует оптимальное расстояние между нанодвойниками, равное 3,78 нм, при котором прочность и пластичность стали максимальны, а асимметрия отклика материала при растяжении и сжатии минимальна. Результаты демонстрируют зависимость от этого расстояния механизмов генерации и движения дислокаций, а также активности реализации двух различных механизмов мартенситного превращения.

Заключение

Изделия из дуплексных сталей, обладающих высокими коррозионными и прочностными свойствами, находят все более широкое применение в различных областях промышленности. В связи с этим возрастает потребность в создании математических моделей, позволяющих с высокой степенью адекватности описывать процессы термомеханической обработки и эксплуатации готовых изделий из этих сталей. Поскольку физико-механические свойства, поведение металлов и сплавов определяются главным образом их мезо- и микроструктурой, для разработки моделей процессов обработки требуются физически-ориентированные многоуровневые конститутивные модели материалов. Последние позволяют явным образом описывать физические механизмы, реализующие и сопровождающие процессы термомеханической обработки, и их носители, в силу чего обладают значительной универсальностью. Поведение дуплексных сталей при термомеханических воздействиях определяется широким набором взаимовлияющих физических механизмов (движение и взаимодействие дислокаций, двойникование, фазовые превращения, диффузия), в силу чего использование многоуровневых физически-ориентированных конститутивных моделей представляется наиболее эффективным для разработки математических моделей технологических процессов изготовления и эксплуатации изделий из этих материалов. В предлагаемом кратком обзоре рассмотрены основные классы многоуровневых моделей (статистические, самосогласованные и прямые) и некоторые комбинированные подходы. Приведено описание пока еще немногочисленных работ, посвященных методам дислокационной и атомарной динамики. При этом основное внимание уделено рассмотрению особенностей применения физически-ориентированных конститутивных моделей для описания поведения многофазных сплавов.

Библиографический список

1. Грибов, Д.С. Дислокационно-ориентированная трехуровневая модель для описания деформирования поликристаллов: структура, алгоритм реализации, примеры применения для исследования сложного циклического нагружения / Д.С. Грибов, П.В. Трусов // Физическая мезомеханика. – 2022. – Т. 25, № 4. – С. 94–105. DOI: 10.55652/1683-805X_2022_25_4_94

2. Ильюшин, А.А. Пластичность. Основы общей математической теории / А.А. Ильюшин. – М.: АН СССР, 1963. – 272 с.

3. Ишлинский, А.Ю. Математическая теория пластичности / А.Ю. Ишлинский, Д.Д. Ивлев. – М.: Физматлит, 2003. – 704 с.

4. Качанов, Л.М. Основы теории пластичности / Л.М. Качанов. – М.: Наука, 1969. – 420 с.

5. Колмогоров, А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов / А.Н. Колмогоров // Изв. АН СССР. Сер. матем. – 1937. – Т. 1, № 3. – С. 355–359.

6. Малинин, Н.Н. Прикладная теория пластичности и ползучести / Н.Н. Малинин. – М.: Машиностроение, 1975. – 400 с.

7. Медведев, Н.Н. Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем / Н.Н. Медведев. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. – 214 с.

8. Трусов, П.В. Дуплексные стали: структура, эксперименты, макрофеноменологические конститутивные модели (обзор) / П.В. Трусов, Н.В. Котельникова, Е.С. Макаревич, Н.Д. Няшина // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2025. – № 3. – С. 114–134. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.3.10

9. Трусов, П.В. Теория пластичности / П.В. Трусов, А.И. Швейкин. – Пермь: Изд-во ПНИПУ. – 2011а. – 419 с.

10. Трусов, П.В. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели / П.В. Трусов, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2011б. – Т. 14, № 4. – С. 17–28. DOI: 10.24411/1683-805X-2011-00029

11. Трусов, П.В. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели / П.В. Трусов, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2011в. – Т. 14, № 5. – С. 5–30. DOI: 10.24411/1683-805X-2011-00021

12. Трусов, П.В. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения / П.В. Трусов, А.И. Швейкин. – Новосибирск: Издательство СО РАН, 2019. – 605 с. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV (ISBN 978-5-7692-1661-9)

13. Aghenzour, Z. Characterisation and 3D modelling of Cast Duplex Stainless Steel microstructure: Application to ultrasonic wave propagation simulations / Z. Aghenzour, P.-E. Lhuillier, N. Leymarie, V. Dorval, A. Imperiale // Int. J. of Pressure Vessels and Piping. – 2025. – Vol. 214. – 105430. (17 p.). DOI: 10.1016/j.ijpvp.2024.105430

14. Ardell, A.J. Precipitation Hardening / A.J. Ardell // Metallurgical Transactions A. – 1985. – Vol. 16, no. 12. – P. 2131–2165. DOI: 110.1007/BF02670416

15. Asgharzadeh, A. A computationally efficient multiscale, multi-phase modeling approach based on CP FEM to assess the effect of second phase particles on mechanical properties / A. Asgharzadeh, T. Park, S.N. Tiji, F. Pourboghrat // Crystals. – 2023. – Vol. 13. – 1199 (24 p.). DOI: 10.3390/cryst13081199

16. Avrami, M. Kinetics of phase change. I. General theory / M. Avrami // J. Chemical Physics. – 1939. – Vol. 7, no. 12. – P.1103–1112. DOI: 10.1063/1.1750380

17. Avramovic-Cingara, G. Effect of martensite distribution on damage behaviour in DP600 dual phase steels / G. Avramovic-Cingara, Y. Ososkov, M. Jain, D. Wilkinson [et al.] // Mater. Sci. Eng. A. – 2009. – Vol. 516(1). – P. 7–16. DOI: 10.1016/j.msea.2009.03.055

18. Aydiner, I.U. Investigation of failure mechanisms in dual-phase steels through cohesive zone modeling and crystal plasticity frameworks / I.U. Aydiner, B. Tatli, T. Yalçinkaya // Int. J. Plasticity. – 2024. – Vol. 174. – 103898 (24 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.103898

19. Baczmański, A. Elastoplastic properties of duplex steel determined using neutron diffraction and self-consistent model / A. Baczmański, C. Braham // Acta Materialia. – 2004. – Vol. 52. – P. 1133–1142. DOI: 10.1016/j.actamat.2003.10.046

20. Baczmański, A. Elastoplastic deformation and damage process in duplex stainless steels studied using synchrotron and neutron diffractions in comparison with a self-consistent model / A. Baczmański, Y. Zhao, E. Gadalińska, L. Le Joncour, S. Wroński, C. Braham, B. Panicaud, M. François, T. Buslaps, K. Soloducha // Int. J. Plasticity. – 2016. – Vol. 81. – P. 102–122. DOI: 10.1016/j.ijplas.2016.01.018

21. Baczmański, A. Study of grain stresses and crystallographic slips in duplex steel using neutron diffraction / A. Baczmański, S. Wroński, M. François, L. Le Joncour, B. Panicaud, C. Braham, A. Ludwik, K. Wierzbanowski, V. Klosek // Int. J. of Mechanical Sciences. – 2024. – Vol. 283. – 109745 (21 p.). DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2024.109745

22. Basu, S. Study of microstructure-property correlations in dual phase steels for achieving enhanced strength and reduced strain partitioning / S. Basu, A. Patra, B.N. Jaya, S. Ganguly, M. Dutta, I. Samajdar // Materialia. – 2022. – Vol. 25. – 101522. DOI: 10.1016/j.mtla.2022.101522

23. Basu, S. Correlative characterization and plasticity modeling of microscopic strain localizations in a dual phase steel / S. Basu, B.N. Jaya, H. Seekala, S. Phani, A. Patra, S. Ganguly, M. Dutta, I. Samajdar // Materials Characterization. – 2023. – Vol. 197. – 112704 (17 p.). DOI: 10.1016/j.matchar.2023.112704

24. Berveiller, M. An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing poly-crystals / M. Berveiller, A. Zaoui // J. Mech. Phys.Solids. – 1979. – Vol. 26. – P. 325–344. DOI: 10.1016/0022-5096(78)90003-0

25. Bieler, T.R. Grain boundaries and interfaces in slip transfer / T.R. Bieler, P. Eisenlohr, C. Zhang, H.J. Phukan, M.A. Crimp // Current Opinion in Solid State and Materials Science. – 2014. – Vol. 18. – P. 212–226. DOI: 10.1016/j.cossms.2014.05.003

26. Bieler, T.R. An analysis of (the lack of) slip transfer between near-cube oriented grains in pure Al / T.R. Bieler, R. Alizadeh, M. Peña-Ortega, J. Llorca // Int. J. Plasticity. – 2019. – Vol. 118. – P. 269–290. DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.02.014

27. Bugat, S. Micromechanical modeling of the behavior of duplex stainless steels / S. Bugat, J. Besson, A. Pineau // Computational Materials Science. – 1999. – Vol. 16. – P. 158–166. DOI: 10.1016/S0927-0256(99)00058-0

28. Cai, Z.Y. A modified yield function for modeling of the evolving yielding behavior and micro-mechanism in biaxial deformation of sheet metals / Z.Y. Cai, B. Meng, M. Wan, X.D. Wu, M.W. Fu // Int. J. Plasticity. – 2020. – Vol.129. – 102707 (28 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102707

29. Cailletaud, G. A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals / G. Cailletaud // International Journal of Plasticity. – 1992. – Vol. 8. – P. 55–73. DOI: 10.1016/0749-6419(92)90038-E

30. Cailletaud, G. Utilisation des mode´les polycristallins pour lecalcul par éléments finis / G. Cailletaud, P. Pilvin // Revue Européenne des Eléments Finis. – 1994. – Vol. 3 (4). – P. 515–541. DOI: 10.1080/12506559.1994.10511147

31. Calcagnotto, M. Deformation and fracture mechanisms in fine- and ultrafine-grained fgerrite/martensite dual-phase steels and the effect of aging / M. Calcagnotto, Y. Adachi, D. Ponge,

D. Raabe // Acta Mater. – 2011. – Vol. 59(2). – P. 658–670. DOI: 10.1016/j.actamat.2010.10.002

32. Chai, G. Damage and crack initiation behavior of duplex stainless steel during cyclic loading / G. Chai, R. Lillbacka // Key Engineering Materials. – 2006. – Vols. 324–325 – P. 1117–1122. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.324-325.1117

33. Chalapathi, D. Role of deformation twinning and second phase on the texture evolution in a duplex stainless steel during cold rolling: Experimental and modelling study / D. Chalapathi, P.V. Sivaprasad, A.K. Kanjarla // Materials Science & Engineering A. – 2020. – Vol. 780. – 139155 (16 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2020.139155

34. Chalapathi, D. A crystal plasticity investigation on the influence of orientation relationships on texture evolution during rolling in fcc/bcc two phase materials / D. Chalapathi, P.V. Sivaprasad, A.K. Kanjarla // Materials Today Communications. – 2022. – Vol. 31. – 103300 (14 p.). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2022.103300

35. Chalapathi, D. Biaxial deformation behaviour of duplex stainless steels: Experiments and crystal plasticity based stress predictions / D. Chalapathi, L.K. Bhaskar, P.V. Sivaprasad, G. Chai, R. Kumar, A.K. Kanjarla // Materials Science & Engineering A. – 2023. – Vol. 864. – 144597 (11 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2023.144597

36. Choi, J.Y. TRIP aided deformation of a near-Ni-free, Mn–N bearing duplex stainless steel / J.Y. Choi, J.H. Ji, S.W. Hwang, K.-T. Park // Materials Science and Engineering A. – 2012. – Vol. 535. – P. 32–39. DOI: 10.1016/j.msea.2011.12.037

37. Clausen, B. Reorientation and stress relaxation due to twinning: Modeling and experimental characterization for Mg / B. Clausen, C.N. Tome, D.W. Brown, S.R. Agnew // Acta Materialia. 2008. – Vol. 56, no. 10. – P. 2456–2468. DOI: 10.1016/j.actamat.2008.01.057

38. Connolly, D.S. A novel crystal plasticity model incorporating transformation induced plasticity for a wide range of strain rates and temperatures / D.S. Connolly, C.P. Kohar, K. Inal // Int. J. Plasticity. – 2022. – Vol. 152. – 103188 (32 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.103188

39. Dadfarnia, M. Modeling hydrogen transport by dislocations / M. Dadfarnia, M.L. Martin, A. Nagao, P. Sofronis, I.M. Robertson // Journal of the mechanics and physics of solids. – 2015. – Vol. 78. – P. 511–525. DOI: 10.1016/j.jmps.2015.03.002

40. Dakhlaoui, R. Effect of residual stresses on individual phase mechanical properties of austeno-ferritic duplex stainless steel / R. Dakhlaoui, A. Baczmański, C. Braham, S. Wroński, K. Wierzbanowski, E.C. Oliver // Acta Materialia. – 2006. – Vol. 54, iss. 19. – P. 5027–5039. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.06.035

41. Dakhlaoui, R. Mechanical properties of phases in austeno-ferritic duplex stainless steel – Surface stresses studied by X-ray diffraction / R. Dakhlaoui, C. Braham, A. Baczmanski // Materials Science and Engineering A. – 2007. – Vol. 444. – P. 1267–1275. DOI: 10.1016/j.msea.2006.06.074

42. Daroju, S. Experimental characterization and crysal plasticity modeling of dual-phase steels subjected to strain path reversals / S. Daroju, T. Kuwabara, M. Knezevic // Mechanics of Materials. – 2022. – Vol. 168. – 104293 (18 p.). DOI: 10.1016/j.mechmat.2022.104293

43. Das, D. Influence of martensite morphology on the work-hardening behavior of high strength ferrite–martensite dual-phase steel / D. Das, P.P. Chattopadhyay // J. Mater. Sci. – 2009. – Vol. 44. – P. 2957–2965. DOI: 10.1007/s10853-009-3392-0

44. Das, Y. Quantitative Nanostructure and Hardness Evolution in Duplex Stainless Steels: Under Real Low-Temperature Service Conditions / Y. Das, J. Liu, H. Ehteshami, J. Odqvist, N.H. Pettersson, S. Wessman, S. King, P. Hedström // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2021. – Vol. 52, no. 12. – P. 5173–5186. DOI: 10.1007/s11661-021-06547-4

45. Dong, Z. Microstructure-based multiscale and heterogeneous elasto-plastic properties of 2205 duplex stainless steel welded joints: Experimental and modeling / Z. Dong, X.-F. Xie, W. Jiang, Y. Wan, X. Zhai, X. Zhao // Int. J. Plasticity. – 2022. – Vol. 159. – 103474 (23 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2022.103474

46. Dönges, B. Experimental investigation and numerical description of the damage evolution in a duplex stainless steel subjected to VHCF-loading / B. Dönges, K. Istomin, M. Söker, N. Schell, U. Krupp, U. Pietsch, C.-P. Fritzen, H.-J. Christ // Materials Science and Engineering: A. – 2015a. – Vol. 646. – P. 8–18. DOI: 10.1016/j.msea.2015.08.021

47. Dönges, B. Experimental investigation and simulation of the fatigue mechanisms of a duplex stainless steel under HCF and VHCF loading conditions / B. Dönges, C.P. Fritzen, H.J. Christ // Key Engineering Materials. – 2015b. – Vol. 664. – P. 267–274. DOI: 10.4028/www.scientific.net/kem.664.267

48. Dorval, V. Determining ultrasonic propagation effective properties in complex heterogeneous media through microstructure-scale simulation / V. Dorval, N. Leymarie, A. Imperiale, E. Demaldent, Z. Aghenzour, P.-E. Lhuillier // Research and Review Journal of Nondestructive Testing. – 2023. – 28132 (6 p.). DOI: 10.58286/28132

49. Dorval, V. Numerical estimation of ultrasonic phase velocity and attenuation for longitudinal and shear waves in polycrystalline materials / V. Dorval, N. Leymarie, A. Imperiale, E. Demaldent, P.-E. Lhuillier // Ultrasonics. – 2025. – Vol. 148. – 107517 (11 p.). DOI: 10.1016/j.ultras.2024.107517

50. Düber, O. Experimental characterization and two-dimensional simulation of short-crack propagation in an austenitic–ferritic duplex steel / O. Düber, B. Künkler, U. Krupp, H.-J. Christ, C.-P. Fritzen // International Journal of Fatigue. – 2006. – Vol. 28, iss. 9. – P. 983–992. DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2005.07.048

51. Eghtesad, A. High-performance full-field crystal plasticity with dislocation-based hardening and slip system back-stress laws: Application to modeling deformation of dual-phase steels / A. Eghtesad, M. Knezevic // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2020. – Vol. 134. – 103750 (19 p.). DOI: 10.1016/j.jmps.2019.103750

52. El Bartali, A. Strain heterogeneities between phases in a duplex stainless steel. Comparison between measures and simulation / A. El Bartali, P. Evrard, V. Aubin, S. Hereńu, I. Alvarez, A. Armas, S. Degallaix-Moreuil // Procedia Engineering. – 2010. – Vol. 2, iss. 1. – P. 2229–2237. DOI: 10.1016/j.proeng.2010.03.239

53. Emo, J. Kinetics of secondary phase precipitation during spinodal decomposition in duplex stainless steels: A kinetic Monte Carlo model – Comparison with atom probe tomography experiments / J. Emo, C. Pareige, S. Saillet, C. Domain, P. Pareige // Journal of Nuclear Materials. – 2014. – Vol. 451, no. 1–3. – P. 361–365. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2014.04.025

54. Eshelby, J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems / J.D. Eshelby // Proc. Roy. Soc. Lond. A. – 1957. – Vol. 241. – P. 376–396.

55. Essmann, U. Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocations densities / U. Essmann, H. Mughrabi // Philosophical Magazine. – 1979. – Vol. 40. – P. 731–756. DOI: 10.1080/01418617908234871

56. Estrin, Y. A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation / Y. Estrin, L.S. Tóth, A. Molinari, Y. Brechet // Acta Materiala. – 1998. – Vol. 46. – P. 5509–5522. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00196-7

57. Estrin, Y. A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one-parameter models / Y. Estrin, H. Mecking // Acta Metal. – 1984. – Vol. 32. – P. 57–70. DOI: 10.1016/0001-6160(84)90202-5

58. Evrard, P. Implementation and validation of a polycrystalline model for a bi-phased steel under non-proportional loading paths / P. Evrard, V. Aubin, Ph. Pilvin, S. Degallaix, D. Kondo // Mechanics Research Communications. – 2008. – Vol. 35. – P. 336–343. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2008.01.006

59. Evrard, P. Polycrystalline modeling of the cyclic hardening/softening behavior of an austenitic–ferritic stainless steel / P. Evrard, A. Armas, V. Aubin, S. Degallaix // Mechanics of Materials. – 2010. – Vol. 42. – P. 395–404. DOI: 10.1016/j.mechmat.2010.01.007

60. Franciosi, F. Multislip in f.c.c single crystals: a theoretical approach compared with experimental data / F. Franciosi, A. Zaoui // Acta. Metall. – 1982. – Vol. 30, no. 8. – P. 1627–1637. DOI: 10.1016/0001-6160(82)90184-5

61. Friebel, C. General mean-field homogenization schemes for viscoelastic composites containing multiple phases of coated inclusions / C. Friebel, I. Doghri, V. Legat // International Journal of Solids and Structures. – 2006. – Vol. 43, iss. 9. – P. 2513–2541. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2005.06.035

62. Galán-López, J. Advanced crystal plasticity modeling of multi-phase steels: work-hardening, strain rate sensitivity and formability / J. Galán-López, B. Shakerifard, J. Ochoa-Avendaño, L.A.I. Kestens // Appl. Sci. – 2021. – Vol. 11. – 6122 (23 p.). DOI: 10.3390/app11136122

63. Haghdadi, N. Physically-based constitutive modelling of hot deformation behavior in a LDX 2101 duplex stainless steel / N. Haghdadi, D. Martin, P. Hodgson // Materials & Design. – 2016. – Vol. 106. – P. 420–427. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.05.118

64. Han, S. Fitting free mechanical response prediction in dual-phase steels by crystal plasticity theory guided deep learning / S. Han, C. Wang, Q. Lai, L. Wang, W. Xu, H. Di // Acta Materialia. – 2025. – Vol. 289. – 120936 (15 p.). DOI: 10.1016/j.actamat.2025.120936

65. Haouala, S. Effect of slip transmission at grain boundaries in Al bicrystals / S. Haouala, R. Alizadeh, T.R. Bieler, J. Segurado, J. LLorca // Int. J. Plasticity. – 2020. – Vol. 126. – 102600 (21 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.09.006

66. Hartig, Ch. Finite element modelling of two phase Fe–Cu polycrystals / Ch. Hartig, H. Mecking // Computational Materials Science. – 2005. – Vol. 32. – P. 370–377. DOI: 10.1016/j.commatsci.2004.09.030

67. Hassan, H. Micromechanical modelling of coupled crystal plasticity and hydrogen diffusion / H. Hassan, K. Govind, A. Hartmaier // Philosophical Magazine. – 2018. – Vol. 99, iss. 1 – P. 92–115. DOI: 10.1080/14786435.2018.1530466

68. Hoc, T. Polycrystal modelling of IF-TI steel under complex loading path / T. Hoc, S. Forest // International Journal of Plasticity. – 2001. – Vol. 17, iss. 1. – P. 65–85. DOI: 10.1016/S0749-6419(00)00019-X

69. Horstemeyer, M.F. Multiscale modeling: A review / M.F. Horstemeyer // In «Practical Aspects of Computational Chemistry». J. Leszczynski and M.K. Shukla (eds.). – Springer Science + Business Media B.V., 2009. – P. 87–135. DOI: 10.1007/978-90-481-2687-3_4

70. Hou, P. Synchrotron x-ray diffraction and crystal plasticity modeling study of martensitic transformation, texture development, and stress partitioning in deep-drawn TRIP steels / P. Hou, Y. Li, W. Zhang, D. Chae, J.-S. Park, Y. Ren, Y. Gao, H. Choo // Materialia. – 2021. – Vol. 21, no. 8. – 101162 (39 p.). DOI: 10.1016/j.mtla.2021.101162

71. Hu, Y. Simultaneous enhancement of strength and ductility in friction stir processed 2205 duplex stainless steel with a bimodal structure: experiments and crystal plasticity modeling / Y. Hu, Z. Fang, Y. Peng, W. Yang, X. Ma, J. Li, Y. Zhao, B. Wang // Physics, Mechanics & Astronomy. – 2022. – Vol. 65, iss. 2. – 224612 (16 p.). DOI: 10.1007/s11433-021-1807-y

72. Hutchinson, J.W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials / J.W. Hutchinson // Proc. R. Soc. Lond. Ser. A. Math. Phys. Sci. – 1976. – Vol. 348, iss. 1652. – P. 101–126. DOI: 10.1098/rspa.1976.0027

73. Jacob, A. Predictive computations of intermetallic σ phase evolution in duplex steel. I) Thermodynamic modeling of σ phase in the Fe–Cr–Mn–Mo–Ni system / A. Jacob, E. Povoden-Karadeniz // CALPHAD: Computer coupling of phase diagrams and thermochemistry. – 2020a. – Vol. 71. – P. 101998. DOI: 10.1016/j.calphad.2020.101998

74. Jacob, A. Predictive computations of intermetallic σ phase evolution in duplex steel. II) Thermo-kinetic simulation in duplex and hyper duplex stainless steels / A. Jacob, E. Povoden-Karadeniz // CALPHAD: Computer coupling of phase diagrams and thermochemistry. – 2020b. – Vol. 71. – P. 101810. DOI: 10.1016/j.calphad.2020.101810

75. Jaumann, G. Geschlossenes system physikalischer und chemischer differential-gesetze / G. Jaumann // Sitzber. Akad. Wiss. Wien, Abt. IIa. – 1911. – B. 120. – S. 385–530.

76. Jeon, B. Direct application of elasto-visco-plastic self-consistent crystal plasticity model to U-draw bending and spring-back of dual-phase high strength steel / B. Jeon, Sh.-Y. Lee, J. Lee, Y. Jeong // Int. J. Plasticity. – 2024. – Vol. 181. – 104098 (23 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.104098

77. Jeong, C.U. Effect of kinematic stability of initial orientation on deformation heterogeneity and ductile failure in duplex stainless steel during uniaxial tension / C.U. Jeong, W. Woo, J.Y. Choi, S.-H. Choi // Acta Materialia. – 2014. – Vol. 67. – P. 21–31. DOI: 10.1016/j.actamat.2013.12.020

78. Jeong, C.U. A study on the micromechanical behaviors of duplex stainless steel under uniaxial tension using ex-situ experimentation and the crystal plasticity finite element method / C.U. Jeong, Y.-U. Heo, J.Y. Choi, W. Woo, S.-H. Choi // Int. J. Plasticity. – 2015. – Vol. 75. – P. 22–38. DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.07.005

79. Jia, N. Interactions between the phase stress and the grain-orientation-dependent stress in duplex stainless steel during deformation / N. Jia, R. Peng, Y. Wang, G. Chai, S. Johansson, G. Wang, P. Liaw // Acta Materialia. – 2006. – Vol. 54. – P. 3907–3916. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.04.019

80. Jia, N. Micromechanical behavior and texture evolution of duplex stainless steel studied by neutron diffraction and self-consistent modeling / N. Jia, R.L. Peng, Y. Wang, S. Johansson, P. Liaw // Acta Materialia. – 2008. – Vol. 56. – P. 782–793. DOI: 10.1016/j.actamat.2007.10.040

81. Jia, N. Self-consistent modeling of rolling textures in an austenitic–ferritic duplex steel / N. Jia, R.L. Peng, Y.D. Wang, X. Zhao // Materials Science and Engineering A. – 2011. – Vol. 528. – P. 3615–3624. DOI: 10.1016/j.msea.2011.01.027

82. Johnson, W.A. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth / W.A. Johnson, R.F. Mehl // Trans. AIME. – 1939. – Vol. 135. – P. 416–442. https://ci.nii.ac.jp/naid/10029008838

83. Jung, J. Investigation of the history-dependent nonlinear micro-viscoplasticity behavior of dual-phase steel using crystal plasticity finite element method / J. Jung, J.H. Kim // Mechanics of Materials. – 2025. – Vol. 200. – 105202 (10 p.). DOI: 10.1016/j.mechmat.2024.105202

84. Kadkhodapour, J. A micro mechanical study on failure initiation of dual phase steels under tension using single crystal plasticity model / J. Kadkhodapour, A. Butz, S. Ziaei-Rad, S. Schmauder // International Journal of Plasticity. – 2011. – Vol. 27. – P. 1103–1125. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.12.001

85. Kalidindi, S.R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models / S.R. Kalidindi // J. Mech. Phys. Solids. – 1998. – Vol. 46. – P. 267–271. DOI: 10.1016/S0022-5096 (97)00051-3, and 273–290

86. Kang, J.-Y. Effect of austenitic texture on tensile behavior of lean duplex stainless steel with transformation induced plasticity (TRIP) / J.-Y. Kang, H. Kim, K.-I. Kim, C.-H. Lee, H.N. Han, K.-H. Oh, T.-H. Lee // Materials Science and Engineering: A. – 2017. – Vol. 681. – P. 114–120. DOI: 10.1016/j.msea.2016.11.001

87. Kato, M. Hardening by spinodally modulated structure in b.c.c. alloys / M. Kato // Acta Metallurgica. – 1981. – Vol. 29, no. 1. – P. 79–87.

88. Khandelwal, S. A machine learning-based surrogate modeling framework for predicting the history-dependent deformation of dual phase microstructures / S. Khandelwal, S. Basu, A. Patra // Mater. Today Commun. – 2021. – Vol. 29. – 102914 (14 p.). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2021.102914

89. Kim, E.-Y. Effect of kinematic stability of the austenite phase on phase transformation behavior and deformation heterogeneity in duplex stainless steel using the crystal plasticity finite element method / E.-Y. Kim, W.C. Woo, Y.-U. Heo, B.S. Seong, J.Y. Choi, S.-H. Choi // Int. J. Plasticity. – 2016. – Vol. 79. – P. 48–67. DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.12.009

90. Knezevic, M. Crystal plasticity-based finite element simulations of load reversals and hat-shaped draw-bending for predicting the springback behavior of dual-phase steel sheets / M. Knezevic // Int. J. of Solids and Structures. – 2024. – Vol. 300. – 112924 (16 p.). DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2024.112924

91. Kocks, U.F. Laws for work-hardening and low-temperature creep / U.F. Kocks // J. Eng. Mater. Tech. – 1976. – Vol. 98, no. 1. – P. 76–85. DOI: 10.1115/1.3443340

92. Kocks, U.F. A mechanism for static and dynamic recovery / U.F. Kocks, H. Mecking // Strength of Metals and Alloys. Procs 5th Int. Conf. – 1979. – Vol. 1. – P. 345–350. DOI: 10.1016/B978-1-4832-8412-5.50063-1

93. Krupp, U. The significance of microstructural barriers during fatigue of a duplex steel in the high- and very-high-cycle-fatigue (HCF/VHCF) regime / U. Krupp, H. Knobbe, H.-J. Christ, P. Köster, C.-P. Fritzen // International Journal of Fatigue. – 2010. – Vol. 32, no. 5. – P. 914–920. DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2009.09.010

94. Krupp, U. Short fatigue crack propagation during low-cycle, high cycle and very-high-cycle fatigue of duplex steel – An unified approach / U. Krupp, I. Alvarez-Armas // International Journal of Fatigue. – 2014. – Vol. 65. – P. 78–85. DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2013.06.018

95. Krupp, U. Significance and mechanism of the crack initiation process during very high cycle fatigue of duplex stainless steel / U. Krupp, A. Giertler, M. Söker, H. Fu, B. Dönges, H.-J. Christ, K. Istomin, A. Hüsecken, U. Pietsch, C.-P. Fritzen, W. Ludwig // Procedia Engineering. – 2014. – Vol. 74. – P. 143–146. DOI: 10.1016/j.proeng.2014.06.238

96. Laukkanen, A. Micromechanics driven design of ferritic–austenitic duplex stainless steel microstructures for improved cleavage fracture toughness / A. Laukkanen, S. Uusikallio, M. Lindroos, T. Andersson, J. Kömi, D. Porter // Engng Fracture Mechanics. – 2021. – Vol. 253. – 107878 (19 p.). DOI: 10.1016/j.engfracmech.2021.107878

97. 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. Metall. Mater. – 1993. – Vol. 41. – P. 2611–2624.

98. Lebensohn, R. N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using fast Fourier transform / R. Lebensohn // Acta Materialia. – 2001. – Vol. 49, iss. 14. – P. 2723–2737. DOI: 10.1016/S1359-6454(01)00172-0

99. Le Joncour, L. Damage in duplex steels studied at mesoscopic and macroscopic scales / L. Le Joncour, B. Panicaud, A. Baczmański, M. François, C. Braham, A. Paradowska, S. Wroński, R. Chiron // Mechanics of Materials. – 2010. – Vol. 42, no. 12. – P. 1048–1063. DOI: 10.1016/j.mechmat.2010.10.003

100. Li, L. Molecular dynamics simulation of the mechanical behavior of duplex stainless steels with nanotwin structure / L. Li, D. Wu, W. Liu, Z. Zhang, X. Li, J. Zhou // JMEPEG. – 2025. – Vol. 34. – P. 3608–3617. DOI: 10.1007/s11665-024-09400-y

101. Lillbacka, R.Cyclic stress–strain behavior and load sharing in duplex stainless steels: Aspects of modeling and experiments / R. Lillbacka, G. Chai, M. Ekh, P. Liu, E. Johnson, K. Runesson // Acta Materialia. – 2007. – Vol. 55. – P. 5359–5368. DOI: 10.1016/j.actamat.2007.05.056

102. Lipinski, P. Elastoplasticity of micro-inhomogeneous metals at large strains / P. Lipinski, M. Berveiller // International Journal of Plasticity. – 1989. – Vol. 5. – P. 149–172. DOI: 10.1016/0749-6419(89)90027-2

103. Lipinski, P. Transition theories of elasticplastic deformation of metallic polycrystals / P. Lipinski, M. Berveiller, E. Reubrez, J. Morreale // Arch Appl Mech. – 1995. – Vol. 65. – P. 291–311. DOI: 10.1007/BF00789222

104. Liu, B. Comparison of finite element and fast Fourier transform crystal plasticity solvers for texture prediction / B. Liu, D. Raabe, F. Roters, P. Eisenlohr, R.A. Lebensohn // Modelling and simulation in materials science and engineering. – 2010. – Vol. 18. – 085005 (21p.). DOI: 10.1088/0965-0393/18/8/085005

105. Liu, T. Dynamic hetero-deformation induced hardening through strength reversal between hetero-zones in austenite-ferrite duplex steel / T. Liu, X. Zhang, W. Song, C. Li, P. Wang, D. Li, Y. Zhu, Y. Li // Acta Materialia. – 2025. – Vol. 293. – 121120 (18 p.). DOI: 10.1016/j.actamat.2025.121120

106. Liu, W. Virtual laboratory enabled constitutive modelling of dual phase steels / W. Liu, X. Li, M. Liu, H. Cui, J. Huang, Y. Pang, J. Ma // Int. J. Plasticity. – 2024. – Vol. 175. – 103930 (29 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.103930

107. Liu, Z. Ultrasonic backscattering model of lamellar duplex phase microstructures in polycrystalline materials / Z. Liu, J. Li, Y. Zheng, C. He // Ultrasonics. – 2025. – Vol. 149. – 107581 (16 p.). DOI: 10.1016/j.ultras.2025.107581

108. Marinelli, M.C. The effect of the embrittlement on the fatigue limit and crack propagation in a duplex stainless steel during high cycle fatigue / M.C. Marinelli, U. Krupp, M. Kübbeler, S. Herenu, A. Armas // Engineering Fracture Mechanics. – 2013. – Vol. 110. – P. 421–429. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2013.03.034

109. Mary, N. Finite-element and XRD methods for the determination of the residual surface stress field and the elastic–plastic behaviour of duplex steels / N. Mary, V. Vignal, R. Oltra, L. Coudreuse // Philosophical Magazine. – 2005. – Vol. 85, iss. 12. – P. 1227–1242. DOI: 10.1080/14786430412331333329

110. Mayeur, J.R. A three-dimensional crystal plasticity model for duplex Ti–6Al–4V / J.R. Mayeur, D.L. McDowell // International Journal of Plasticity. – 2007. – Vol. 23, iss. 9. – P. 1457–1485. DOI: 10.1016/j.ijplas.2006.11.006

111. McDowell, D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity / D.L. McDowell // Int. J. Plasticity. – 2010. – Vol. 26. – P. 1280–1309. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010. 02.008

112. Mecking, H. Kinetics of flow and strain-hardening / H. Mecking, U.F. Kocks // Acta Metallurgica. – 1981. – Vol. 29, iss. 11. – P. 1865–1875. DOI: 10.1016/0001-6160(81)90112-7

113. Mehtonen, S.V. Modeling of the high temperature flow behavior of stabilized 12–27 wt% Cr ferritic stainless steels / S.V. Mehtonen, L.P. Karjalainen, D.A. Porter // Materials Science & Engineering A. – 2014. – Vol. 607. – P. 44–52. DOI: 10.1016/j.msea.2014.03.124

114. Michel, J.C. Computational method based on augmented lagrangians and fast fourier transforms for composites with high contrast / J.C. Michel, H. Moulinec, P.A. Suquet // Computer Modeling in Engineering & Sciences. – 2000. – Vol. 1, iss. 2. – P. 79–88. DOI: 10.3970/cmes.2000.001.239

115. Mollens, M. Development of a multi-scale approach for modeling cast duplex stainless behavior / M. Mollens // Material chemistry. Université Paris-Saclay. – 2022. English. ⟨NNT: 2022UPAST168⟩

116. Moulinec, H. A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites / H. Moulinec, P. Suquet // Comptes Rendus de l'Académie des sciences. Série II. Mécanique, physique, chimie, astronomie. – 1994. – Vol. 318, iss. II. – P. 1417–1423.

117. Moulinec, H. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure / H. Moulinec, P. Suquet // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 1998. – Vol. 157, iss. 1-2. – P. 69–94. DOI: 10.1016/S0045-7825(97)00218-1

118. Muñoz, J.A. Strengthening of duplex stainless steel processed by equal channel angular pressing (ECAP) / J.A. Muñoz, M. Chand, J.W. Signorelli, J. Calvo, J.M. Cabrera // The International Journal of Advanced Manufacturing Technology. – 2022. – Vol. 123. – P. 2261–2278. DOI: 10.1007/s00170-022-10311-2

119. Nye, J. Some geometrical relations in dislocated crystals / J. Nye // Acta Metall. – 1953. – Vol. 1, iss. 2. – P. 153–162. DOI: 10.1016/0001-6160(53)90054-6

120. Nygårds, M. Three-dimensional periodic Voronoi grain models and micromechanical FE-simulations of a two-phase steel / M. Nygårds, P. Gudmundson // Computational Materials Science – 2002. – Vol. 24, iss. 4. – P. 513–519. DOI: 10.1016/S0927-0256(02)00156-8

121. Olden, V. FE simulation of hydrogen diffusion in duplex stainless steel / V. Olden, A. Saai, L. Jemblie, R. Johansen // International Journal of Hydrogen Energy. – 2014. – Vol. 39, iss. 3. – P. 1156–1163. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.10.101

122. Olson, G.B. A mechanism for the strain-induced nucleation of martensitic transformations / G.B. Olson, M. Cohen // J. Less-Common Metals. – 1972. – Vol. 28. – P. 107–118. DOI: 10.1016/0022-5088(72)90173-7

123. Panicaud, B. Theoretical modelling of ductile damage in duplex stainless steels – Comparison between two micromechanical elasto-plastic approaches / B. Panicaud, K. Saanouni, A. Baczmański, M. François, L. Cauvin, L. Le Joncour // Computational Materials Science. – 2011. – Vol. 50, № 6. – P. 1908–1916. DOI: 10.1016/j.commatsci.2011.01.038

124. Poshadel, A.C. Initiation and propagation of plastic yielding in duplex stainless steel / A.C. Poshadel, M.A. Gharghouri, P.R. Dawson // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2019. – Vol. 50. – P. 1202–1230. DOI: 10.1007/s11661-018-5009-1

125. Pulvermacher, S. Analysis of phase-specific strain pole figures for duplex steels under elasto-plastic uniaxial tension–experiment vs. EPSC modelling / S. Pulvermacher, F. Loebich, A. Prahs, H. Liu, S. Cabeza, T. Pirling, M. Hofmann, J. Gibmeier // Crystals. – 2024. – Vol. 14, no. 3. Art. 206. DOI: 10.3390/cryst14030206

126. Qayyum, F. Effect of 3D representative volume element (RVE) thickness on stress and strain partitioning in crystal plasticity simulations of multi-phase materials / F. Qayyum, A.A. Chaudhry, S. Guk, M. Schmidtchen, R. Kawalla, U. Prahl // Crystals. – 2020. – Vol. 10. – 944 (18 p.). DOI: 10.3390/cryst10100944

127. Qian, Y. Crystal plasticity finite element method for slip systems evolution analysis of α/β duplex titanium alloys during quasi-static tensile testing / Y. Qian, Q. Fan, X. Liu, D. Wang, Y. Zhou // Applied Sciences. – 2020. – Vol. 10. – 7782. DOI: 10.3390/app10217782

128. Qin, S. Identification of stress state dependent fracture micromechanisms in DP600 through representative volume element modeling / S. Qin, A.M. Beese // Int. J. Mech. Sci. – 2021. – Vol. 1994. – P. 106209 (10 p.). DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2020.106209

129. Quey, R. Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing / R. Quey, P.R. Dawson, F. Barbe // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 2011. – Vol. 200. – P. 1729–1745. DOI: 10.1016/j.cma.2011.01.002

130. Ravi, S.K. Multi-scale material modelling to predict the material anisotropy of multiphase steels / S.K. Ravi, M. Seefeldt, A.V. Bael, J. Gawad // Computational Materials Science – 2019. – Vol. 160(7). – P. 382–396. DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.01.028

131. Rolinska, M. Kinetics of phase separation in super duplex stainless steel 2507 revealed by in situ neutron scattering for various intermediate heat treatments / M. Rolinska, G. Spartacus, A. Dahlström, W. Mu, T.G.A. Youngs, J. Odqvist, P. Hedström // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2025. – Vol. 56. – P. 4082–4091. DOI: 10.1007/s11661-025-07906-1

132. Roters, F. Advanced material models for the crystal plasticity finite element method: Development of a general CPFEM framework / F. Roters. – RWTH Aachen: Aachen, 2011. – 226 p. DOI: 10.18154/RWTH-CONV-144865

133. Roters, F. Work hardening in heterogeneous alloys–a microstructural approach based on three internal state variables / F. Roters, D. Raabe, G. Gottstein // Acta mater. – 2000. – Vol. 48. – P. 4181–4189. DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00289-5

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

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

136. Roters, F. 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, M. Diehl, P. Shanthraj, P. Eisenlohr, C. Reuber, S.L. Wong, T. Maiti, A. Ebrahimi, T. Hochrainer, H.O. Fabritius, S. Nikolov, M. Friák, N. Fujita, N. Grilli, K.G.F. Janssens, N. Jia, P.J.J. Kok, D. Ma, F. Meier, E. Werner, M. Stricker, D. Weygand, D. Raabe // Comput. Mater. Sci. – 2019. – Vol. 158. – P. 420–478. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.04.030

137. Ryu, S. Micromechanics-based homogenization of the effective physical properties of composites with an anisotropic matrix and interfacial imperfections / S. Ryu, S. Lee, J. Jung, J. Lee, Y. Kim // Frontiers in Materials. – 2019. – Vol. 6. – Art. 21 (17 p.). DOI: 10.3389/fmats.2019.00021

138. Santos, A.G.C. Computational modeling of a 3D matrix of duplex stainless steel and its ultimate strength in function of the sigma phase evolution / A.G.C. Santos, N.F. Ignácio, M.S. Fernandes, D.M. Baía, F.N. Moreira, W.L.S. Assis, P.R. Rios // Jour-

nal of materials research and technology. – 2021. – Vol. 15. – P. 2625–2632. DOI: 10.1016/j.jmrt.2021.09.051

139. Sarand, M.H.J. A physics-based plasticity study of the mechanism of inhomogeneous strain evolution in dual phase 600 steel / M.H.J. Sarand, I.B. Misirloglu // Int. J. Plasticity. – 2024. – Vol. 174. – 103918 (28 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.103918

140. Simon, N. Phase-specific residual stresses induced by deep drawing of lean duplex steel: measurement vs. simulation / N. Simon, H. Erdle, S. Walzer, J. Gibmeier, T. Böhlke, M. Liewald // Production Engineering. – 2019. – Vol. 13, no. 3. – P. 227–237. DOI: 10.1007/s11740-019-00877-4

141. Sinclair, C.W. A molecular dynamics study of the fcc → bcc transformation at fault intersections / C.W. Sinclair, R.G. Hoagland // Acta Materialia. – 2008. – Vol. 56. – P. 4160–4171. DOI: 10.1016/j.actamat.2008.04.043

142. Sodjit, S. Microstructure based prediction of strain hardening behavior of dual phase steels / S. Sodjit, V. Uthaisangsuk // Mater. Des. – 2012. – Vol. 41. – P. 370–379. DOI: 10.1016/j.matdes.2012.05.010

143. Spigarelli, S. Constitutive equations for prediction of the flow behaviour of duplex stainless steels / S. Spigarelli, M. El Mehtedi, P. Ricci, C. Mapelli // Materials Science and Engineering A. – 2010. – Vol. 527. – P. 4218–4228. DOI: 10.1016/j.msea.2010.03.029

144. Taha, M. Direct observations of hydrogen-enhanced crack propagation in iron / M. Taha, S.R. Mahmoud // Scripta Materialia. – 2001. – Vol. 45, iss. 5. – P. 549–554. DOI: 10.1016/S0013-7944(00)00126-0

145. Tasan, C.C. Integrated experimental–simulation analysis of stress and strain partitioning in multiphase alloys / C.C. Tasan, M. Diehl, D. Yan, C. Zambaldi, P. Shanthraj, F. Roters, D. Raabe // Acta Mater. – 2014. – Vol. 81. – P. 386–400. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.07.071

146. Taylor, G.I. Plastic strain in metals / G.I. Taylor // J. Inst. Metals. – 1938. – Vol. 62. – P. 307–324.

147. Tjahjanto, D.D. Crystallographically based model for transformation-induced plasticity in multiphase carbon steels / D.D. Tjahjanto, S. Turteltaub, A.S.J. Suiker // Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2008. – Vol. 19. – P. 399–422. DOI: 10.1007/s00161-007-0061-x

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

149. Tran, M.T. Micromechanical properties and deformation behavior of the constituent phases in 3rd generation complex phase AHSS: In-situ neutron experiment and crystal plasticity simulation / M.T. Tran, X.M. Nguyen, H. Kim, H. Chae, W. Woo, H.W. Lee, D.-K. Kim // Int. J. Plasticity. – 2023. – Vol. 171. – 103812 (26 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2023.103812

150. 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

151. Trusov, P.V. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Direct models / P.V. Trusov, A.I. Shveikin // Physical Mesomechanics. – 2013. – Vol. 16, no. 2. – P. 99–124. DOI: 10.1134/S1029959913020021

152. Tsekpuia, E. A microstructure-based three-scale homogenization model for predicting the elasto-viscoplastic behavior of duplex stainless steels / E. Tsekpuia, A. Guery, N. Gey, S. Berbenni // Int. J. Plasticity. – 2023. – Vol. 164. – 103575 (30 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2023.103575

153. Turner, P.A. A study of residual stresses in Zircaloy-2 with rod texture / P.A. Turner, C.N. Tomé // Acta Metallurgica et Materialia. – 1994. – Vol. 42, iss. 12. – P. 4143–4153. DOI: 10.1016/0956-7151(94)90191-0

154. Van Houtte, P. Quantitative prediction of cold rolling textures in low–carbon steel by means of the LAMEL model / P. Van Houtte, L. Delannay, I. Samajdar // Textures and Microstructures. – 1999. – Vol. 31. – P.109–149. DOI: 10.1155/TSM.31. 109

155. Vermeij, T. Martensite plasticity and damage competition in dual-phase steel: A micromechanical exmerimental-numerical study / T. Vermeij, C.J.A. Mornout, V. Rezazadeh, J.P.M. Hoefnagels // Acta Materialia. – 2023. – Vol. 254. – 119020 (20 p.). DOI: 10.1016/j.actamat.2022.119020

156. Watanabe, I. Multiscale prediction of mechanical behavior of ferrite–pearlite steel with numerical material testing / I. Watanabe, D. Setoyama, N. Nagasako, N. Iwata, K. Nakanishi // Int. J. Numer. Meth. Engng. – 2012. – Vol. 89. – P. 829–845. DOI: 10.1002/nme.3264

157. Woo, W. Stress–strain relationship between ferrite and martensite in a dual-phase steel studied by in situ neutron diffraction and crystal plasticity theories / W. Woo, V.T. Em, E.-Y. Kim, S.H. Han, Y.S. Han, S.-H. Choi // Acta Materialia. – 2012. – Vol. 60. – P. 6972–6981. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.08.054

158. Wu, Q. Modeling the heterogeneous effects of retained austenite on the behavior of martensitic high strength steels / Q. Wu, P. Shanthraj, M.A. Zikry // Int. J. Fract. – 2013. – Vol. 184. – P. 241–252. DOI: 10.1007/s10704-013-9879-3

159. Wu, W. Identification of microstructure factors affecting hydrogen embrittlement of a 2205 duplex stainless steel / W. Wu, S. Liu, W. Li, J. Li // Corrosion Science. – 2022a. – Vol. 192. – Art. 110643. DOI: 10.1016/j.corsci.2022.110643

160. Wu, W. Effect of hydrogen trapping on hydrogen permeation in a 2205 duplex stainless steel: Role of austenite–ferrite interface / W. Wu, X. Zhang, W. Li, H. Fu, S. Liu, Y. Wang, J. Li // Corrosion Science. – 2022b. – Vol. 202. – P. 110332. DOI: 10.1016/j.corsci.2022.110332

161. Xia, D. Out-of-plane constraint for 2D representative volume element model of dual phase steels under uniaxial tension / D. Xia, Y. Li, S. Qin // Computational Materials Science. – 2025. – Vol. 246. – 113490 (12 p.). DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113490

162. Zandomeni, R. Steps toward microstructure-based modeling of the influence of hydrogen on the fatigue behavior of duplex steels: non-local cyclic polycrystal plasticity / R. Zandomeni, T. Seifert // In: Altenbach H., Hitzler L., Johlitz M., Merkel M., Öchsner A. (eds) Lectures Notes on Advanced Structured Materials 3. Advanced Structured Materials. – 2025. – P. 351–367. DOI: 10.1007/978-3-031-77403-4_21

163. Zaremba, S. Sur une forme perfectionnée de la théorie de la relaxation / S. Zaremba // Bull. Int. Acad. Sci. Cracovie. – 1903. – P. 595–614

164. Zecevic, M. Dual-phase steel sheets under cyclic tension–compression to large strains: Experiments and crystal plasticity modeling / M. Zecevic, Y.P. Korkolis, T. Kuwabara, M. Knezevic // J. Mechanics and Physics of Solids. – 2016. – Vol. 96. – P. 65–87. DOI: 10.1016/j.jmps.2016.07.003

165. Zhai, Y. Experimental and numerical investigation of the yield point phenomenon and strain partitioning behavior in a dual-phase steel with lamellar structure / Y. Zhai, W. Su, F. Guo, X. Zheng, B. Yang, Q. Wang, Y. Li, W. Cao, C. Huang // Materials Science & Engineering A. – 2024. – Vol. 897. – 146356 (17 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2024.146356

166. Zhang, L. Heterogeneous structure design and strengthening mechanism study of 2205 duplex stainless steel / L. Zhang, K. Song,

X. Zhang, Ch. Ma, X. Hai // Materials Today Communications. – 2025a. – Vol. 42. – P. 111481 (9 p.). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2024.111481

167. Zhang, M. Slip analysis and mechanical deformation behavior in dual-phase titanium alloy: Integrating crystal plasticity simulations with in-situ micro-compression / M. Zhang, B. Tang, W. Chen, K. Li, Y. Xie, B. Yin, J. Li // Materials Science & Engineering A. – 2024a. – Vol. 892. – 146061 (13 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2023.146061

168. Zhang, P. A crystal plasticity formulation for simulating the formability of a transformation induced plasticity steel / P. Zhang, C.P. Kohar, A.P. Brahme, S.-H. Choi, R.K. Mishra, K. Inal // J. Materials Processing Tech. – 2021. – Vol. 287. – 116493 (20 p.). DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2019.116493

169. Zhang, T. Microstructure-based modelling of formability for advanced high strength dual-phase steels / T. Zhang, H. Liu, H. Xie, J. Liu, M. Huo, L. Li, F. Jia, D. Pan, H. Wu, T. Yang, X. Zhang, Z. Wang, V. Linton, F. Jiang, Z. Jiang // Materials Science & Engineering A. – 2024b. – Vol. 915. – 147227 (12 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2024.147227

170. Zhang, W. The effect of phase distribution of constituent-fiber structure on the deformation heterogeneity of TRIP-assisted lean duplex stainless steel / W. Zhang, Y. Wang, X. Li, S. Hao, Y. Chi, X. Ma, L. Chen, M. Jin // Materials Science & Engineering A. – 2023a. – Vol. 878. – 145216 (19 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2023.145216

171. Zhang, W. Quantitatively assessing the contributions of temperature-dependent deformation-induced martensitic transformation to uniform elongation and work hardening of TRIP-assisted duplex stainless steel via crystal plasticity / W. Zhang, S. Guo, S. Liu, X. Li, S. Hao, M. Jin, X. Cai, L. Chen // Materials Science & Engineering A. – 2023b. – Vol. 887. – 145758 (17 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2023.145758

172. Zhang, W. The interfacial damage of the deformation heterogeneity in the transformation-induced plasticity (TRIP)-assisted duplex stainless steel / W. Zhang, M. Jin, S. Hao, M. Huo, Z. Huang, L. Chen, W. Xia // Int. J. Plasticity. – 2025b. – Vol. 184. – 104209 (25 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.104209

173. Zhao, Y. Development of TRIP-Aided Lean Duplex Stainless Steel by Twin-Roll Strip Casting and Its Deformation Mechanism / Y. Zhao, W. Zhang, X. Liu // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2016. – Vol. 47. – P. 6292–6303. DOI: 10.1007/s11661-016-3771-5

174. Zheng, X. Modeling of polycrystalline material microstructure with 3D grain boundary based on Laguerre–Voronoi tessellation / X. Zheng, T. Sun, J. Zhou, R. Zhang, P. Ming // Materials. – 2022. – Vol. 15(6). – 1996 (20p.). DOI: 10.3390/ma15061996

175. Zhou, Q. Effect of thermal ageing on the deformation behaviour of ferrite and austenite in a duplex stainless steel: Micropillar characterisation and dislocation density modelling / Q. Zhou, L. Cong, L. Gan, C. Ling, D. Li, E.P. Busso // Acta Materialia. – 2024. – Vol. 265. – 119599 (14 p.). DOI: 10.1016/j.actamat.2023.119599

References

1. Gribov D.S., Trusov P.V. Three-level dislocation-based model for describing the deformation of polycrystals: structure, implementation algorithm, examples for studying nonproportional cyclic loading. *Physical Mesomechanics*, 2022, vol. 25, no. 4, pp. 94-105. DOI: 10.55652/1683-805X_2022_25_4_94

2. Il'yushin A.A. Plastichnost'. Plastichnost'. *Osnovy obshchei matematicheskoi teorii* [Plasticity. Fundamentals of General Mathematical Theory]. Moscow, Akademiia nauk SSSR, 1963, 272 p.

3. Ishlinskiy A.YU., Ivlev D.D. *Matematicheskaya teoriya plastichnosti* [Mathematical theory of plasticity]. Moscow, FIZMATLIT, 2003, 704 p.

4. Kachanov L.M. *Osnovy teorii plastichnosti* [Fundamentals of the Plasticity Theory]. Moscow, Nauka, 1969, 420 p.

5. Kolmogorov A.N. *K statisticheskoy teorii kristallizatsii metallov* [On the statistical theory of metals crystallization]. *Izvestiia akademii nauk SSSR. Matematica*, 1937, vol. 1, no. 3, pp. 355-359.

6. Malinin N.N. *Prikladnaia teoriia plastichnosti i polzuchesti* [Applied Theory of Plasticity and Creep]. Moscow, Mashinostroenie, 1975, 400 p.

7. Medvedev N.N. *Metod Voronogo-Delone v issledovanii struktury nekristallicheskikh system* [The Voronoi-Delaunay method in the study of the structure of non-crystalline systems]. Novosibirsk, Izdatel'stvo Sibirskogo otdeleniia Rossiiskoi akademii nauk, 2000, 214 p.

8. 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, application examples]. Novosibirsk, Izdatel'stvo Sibirskogo otdeleniia Rossiiskoi akademii nauk, 2019, 605 p. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV

9. Trusov P.V., Kotelnikova N.V., Makarevich E.S., Nyashina N.D. Duplex steels: structure, experiments, macrophenomenological constitutive models (Review). *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2025, no. 3, pp. 114-134.

10. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel physical models of single- and polycrystals. Direct models. *Physical Mesomechanics*, 2011, vol. 14, no. 5, pp. 5-30. DOI: 10.24411/1683-805X-2011-00021

11. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel physical models of single- and polycrystals. Statistical models. *Physical Mesomechanics*, 2011, vol. 14, no. 4, pp. 17-28. DOI: 10.24411/1683-805X-2011-00029

12. Trusov P.V., Shveykin A.I. Teoriia plastichnosti [Theory of plasticity]. Perm, Permskii natsional'nyi issledovatel'skii politekhnicheskii universitet, 2011, 419 p.

13. Aghenzour Z., Lhuillier P.-E., Leymarie N., Dorval V., Imperiale A. Characterisation and 3D modelling of Cast Duplex Stainless Steel microstructure: Application to ultrasonic wave propagation simulations. *Int. J. of Pressure Vessels and Piping*, 2025, vol. 214, pp. 105430 (17 p.). DOI: 10.1016/j.ijpvp.2024.105430

14. Ardell A.J. Precipitation Hardening. *Metallurgical Transactions A*, 1985, vol. 16, no. 12, pp. 2131–2165. DOI: 110.1007/BF02670416

15. Asgharzadeh A., Park T., Tiji S.N., Pourboghrat F. A computationally efficient multiscale multi-phase modeling approach based on CP FEM to assess the effect of second phase particles on mechanical properties. *Crystals*, 2023, vol. 13, pp. 1199 (24 p.). DOI: 10.3390/cryst13081199

16. Avrami M. Kinetics of phase change. I. General theory. *J. Chemical Physics*, 1939, vol. 7, no. 12, pp. 1103–1112. DOI: 10.1063/1.1750380

17. Avramovic-Cingara G., Ososkov Y., Jain M., Wilkinson D. Effect of martensite distribution on damage behaviour in DP600 dual phase steels. *Mater. Sci. Eng. A*, 2009, vol. 516(1), pp. 7-16. DOI: 10.1016/j.msea.2009.03.055

18. Aydiner I.U., Tatli B., Yalçinkaya T. Investigation of failure mechanisms in dual-phase steels through cohesive zone modeling and crystal plasticity frameworks. *Int. J. Plasticity*, 2024, vol. 174, pp. 103898 (24 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.103898

19. Baczmański A., Braham C. Elastoplastic properties of duplex steel determined using neutron diffraction and self-consistent model. *Acta Materialia*, 2004, vol. 52, pp. 1133–1142. DOI: 10.1016/j.actamat.2003.10.046

20. Baczmański A., Zhao Y., Gadalińska E., Le Joncour L., Wroński S., Braham C., Panicaud B., François M., Buslaps T., Soloducha K. Elastoplastic deformation and damage process in duplex stainless steels studied using synchrotron and neutron diffractions in comparison with a self-consistent model. *Int. J. Plasticity*, 2016, vol. 81, pp. 102–122. DOI: 10.1016/j.ijplas.2016.01.018

21. Baczmański A., Wroński S., François M., Le Joncour L., Panicaud B., Braham C., Ludwik A., Wierzbanowski K., Klosek V. Study of grain stresses and crystallographic slips in duplex steel using neutron diffraction. *Int. J. of Mechanical Sciences*, 2024, vol. 283, pp. 109745 (21 p.). DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2024.109745

22. Basu S., Patra A., Jaya B.N., Ganguly S., Dutta M., Samajdar I. Study of microstructure-property correlations in dual phase steels for achieving enhanced strength and reduced strain partitioning. *Materialia*, 2022, vol. 25, pp. 101522. DOI: 10.1016/j.mtla.2022.101522

23. Basu S., Jaya B.N., Seekala H., Phani S., Patra A., Ganguly S., Dutta M., Samajdar I. Correlative characterization and plasticity modeling of microscopic strain localizations in a dual phase steel. *Materials Characterization*, 2023, vol. 197, pp. 112704 (17 p.). DOI: 10.1016/j.matchar.2023.112704

24. Berveiller M., Zaoui A. An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing poly-crystals. *J. Mech. Phys.Solids*, 1979, vol. 26, pp. 325–344. DOI: 10.1016/0022-5096(78)90003-0

25. Bieler T.R., Eisenlohr P., Zhang C., Phukan H.J., Crimp M.A. Grain boundaries and interfaces in slip transfer. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2014, vol. 18, pp. 212–226. DOI: 10.1016/j.cossms.2014.05.003

26. Bieler T.R., Alizadeh R., Peña-Ortega M., Llorca J. An analysis of (the lack of) slip transfer between near-cube oriented grains in pure Al. *Int. J. Plasticity*, 2019, vol. 118, pp. 269–290. DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.02.014

27. Bugat S., Besson J., Pineau A. Micromechanical modeling of the behavior of duplex stainless steels. *Computational Materials Science*, 1999, vol. 16, pp. 158–166. DOI: 10.1016/S0927-0256(99)00058-0

28. Cai Z.Y., Meng B., Wan M., Wu X.D., Fu M.W. A modified yield function for modeling of the evolving yielding behavior and micro-mechanism in biaxial deformation of sheet metals. *Int. J. Plasticity*, 2020, vol. 129, pp. 102707 (28 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102707

29. Cailletaud G. A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals. *International Journal of Plasticity*, 1992, vol. 8, pp. 55–73. DOI: 10.1016/0749-6419(92)90038-E.

30. Cailletaud G., Pilvin P. Utilisation des mode´les polycristallins pour lecalcul par éléments finis. *Revue Européenne des Eléments Finis*, 1994, vol. 3 (4), pp. 515–541. DOI: 10.1080/12506559.1994.10511147

31. Calcagnotto M., Adachi Y., Ponge D., Raabe D. Deformation and fracture mechanisms in fine- and ultrafine-grained fgerrite/martensite dual-phase steels and the effect of aging. *Acta Mater.*, 2011, Vol.59(2), pp. 658–670. DOI: 10.1016/j.actamat.2010.10.002

32. Chai G., Lillbacka R. Damage and crack initiation behavior of duplex stainless steel during cyclic loading. *Key Engineering Materials*, 2006, vols. 324-325, pp. 1117-1122. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.324-325.1117

33. Chalapathi D., Sivaprasad P.V., Kanjarla A.K. Role of deformation twinning and second phase on the texture evolution in a duplex stainless steel during cold rolling: Experimental and modelling study. *Materials Science & Engineering A*, 2020, vol. 780, pp. 139155 (16 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2020.139155

34. Chalapathi D., Sivaprasad P.V., Kanjarla A.K. A crystal plasticity investigation on the influence of orientation relationships on texture evolution during rolling in fcc/bcc two phase materials. *Materials Today Communications*, 2022, vol. 31, pp. 103300 (14 p.). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2022.103300

35. Chalapathi D., Bhaskar L.K., Sivaprasad P.V., Chai G., Kumar R., Kanjarla A.K. Biaxial deformation behaviour of duplex stainless steels: Experiments and crystal plasticity based stress predictions. *Materials Science & Engineering A*, 2023, vol. 864, pp. 144597 (11 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2023.144597

36. Choi J.Y., Ji J.H., Hwang S.W., Park K.-T. TRIP aided deformation of a near-Ni-free, Mn–N bearing duplex stainless steel. *Materials Science and Engineering A*, 2012, vol. 535, pp. 32–39. doi:10.1016/j.msea.2011.12.037

37. Clausen B., Tome C.N., Brown D.W., Agnew S.R. Reorientation and stress relaxation due to twinning: Modeling and experimental characterization for Mg. *Acta Materialia*, 2008, vol. 56, no. 10, pp. 2456–2468. DOI: 10.1016/j.actamat.2008.01.057

38. Connolly D.S., Kohar C.P., Inal K. A novel crystal plasticity model incorporating transformation induced plasticity for a wide range of strain rates and temperatures. *Int. J. Plasticity*, 2022, vol. 152, pp. 103188 (32 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.103188

39. Dadfarnia M., Martin M.L., Nagao A., Sofronis P., Robertson I.M. Modeling hydrogen transport by dislocations. *Journal of the mechanics and physics of solids*, 2015, vol. 78, pp. 511-525. DOI: 10.1016/j.jmps.2015.03.002

40. Dakhlaoui R., Baczmański A., Braham C., Wroński S., Wierzbanowski K., Oliver E.C. Effect of residual stresses on individual phase mechanical properties of austeno-ferritic duplex stainless steel. *Acta Materialia*, 2006, vol. 54, Iss. 19, pp. 5027-5039. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.06.035

41. Dakhlaoui R., Braham C., Baczmanski A. Mechanical properties of phases in austeno-ferritic duplex stainless steel – Surface stresses studied by X-ray diffraction. *Materials Science and Engineering A*, 2007, vol. 444, pp. 1267–1275. DOI: 10.1016/j.msea.2006.06.074

42. Daroju S., Kuwabara T., Knezevic M. Experimental characterization and crysal plasticity modeling of dual-phase steels subjected to strain path reversals. *Mechanics of Materials*, 2022, vol. 168, pp. 104293 (18 p.). DOI: 10.1016/j.mechmat.2022.104293

43. Das D., Chattopadhyay P.P. Influence of martensite morphology on the work-hardening behavior of high strength ferrite–martensite dual-phase steel. *J. Mater. Sci.*, 2009, vol. 44, pp. 2957–2965. DOI: 10.1007/s10853-009-3392-0

44. Das Y., Liu J., Ehteshami H., Odqvist J., Pettersson N.H., Wessman S., King S., Hedström P. Quantitative nanostructure and hardness evolution in duplex stainless steels: Under real low-temperature service conditions. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2021, vol. 52, no. 12, pp. 5173–5186. DOI: 10.1007/s11661-021-06547-4

45. Dong Z., Xie X.-F., Jiang W., Wan Y., Zhai X., Zhao X. Microstructure-based multiscale and heterogeneous elasto-plastic properties of 2205 duplex stainless steel welded joints: Experimental and modeling. *Int. J. Plasticity*, 2022, vol. 159, pp. 103474 (23 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2022.103474

46. Dönges B., Istomin K., Söker M., Schell N., Krupp U., Pietsch U., Fritzen C.-P., Christ H.-J. Experimental investigation and numerical description of the damage evolution in a duplex stainless steel subjected to VHCF-loading. *Materials Science and Engineering: A*, 2015a, vol. 646, pp. 8-18. DOI: 10.1016/j.msea.2015.08.021

47. Dönges B., Fritzen C.P., Christ H.J. Experimental investigation and simulation of the fatigue mechanisms of a duplex

stainless steel under HCF and VHCF loading conditions. *Key Engineering Materials*, 2015b, vol. 664, pp. 267–274. DOI: 10.4028/www.scientific.net/kem.664.267

48. Dorval V., Leymarie N., Imperiale A., Demaldent E., Aghenzour Z., Lhuillier P.-E. Determining ultrasonic propagation effective properties in complex heterogeneous media through microstructure-scale simulation. *Research and Review Journal of Nondestructive Testing*, 2023, pp. 28132 (6 p.). DOI: 10.58286/28132

49. Dorval V., Leymarie N., Imperiale A., Demaldent E., Lhuillier P.-E. Numerical estimation of ultrasonic phase velocity and attenuation for longitudinal and shear waves in polycrystalline materials. *Ultrasonics*, 2025, vol. 148, pp. 107517 (11 p.). DOI: 10.1016/j.ultras.2024.107517

50. Düber O., Künkler B., Krupp U., Christ H.-J., Fritzen C.-P. Experimental characterization and two-dimensional simulation of short-crack propagation in an austenitic–ferritic duplex steel. *International Journal of Fatigue*, 2006, vol. 28, Iss. 9, pp. 983-992. DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2005.07.048

51. Eghtesad A., Knezevic M. High-performance full-field crystal plasticity with dislocation-based hardening and slip system backstress laws: Application to modeling deformation of dual-phase steels. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2020, vol. 134, pp. 103750 (19 p.). DOI: 10.1016/j.jmps.2019.103750

52. El Bartali A., Evrard P., Aubin V., Hereńu S., Alvarez I., Armas A., Degallaix-Moreuil S. Strain heterogeneities between phases in a duplex stainless steel. Comparison between measures and simulation. *Procedia Engineering*, 2010, vol. 2, Iss.1, pp. 2229-2237. DOI: 10.1016/j.proeng.2010.03.239

53. Emo J., Pareige C., Saillet S., Domain C., Pareige P. Kinetics of secondary phase precipitation during spinodal decomposition in duplex stainless steels: A kinetic Monte Carlo model – Comparison with atom probe tomography experiments. *Journal of Nuclear Materials*, 2014, vol. 451, no. 1–3, pp. 361–365. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2014.04.025

54. Eshelby J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 1957, vol. 241, pp. 376–396.

55. Essmann U., Mughrabi H. Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocations densities. *Philosophical Magazine*, 1979, vol. 40, pp. 731–756. DOI: 10.1080/01418617908234871

56. Estrin Y., Tóth L.S., Molinari A., Brechet Y. A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation. *Acta Materiala*, 1998, vol. 46, pp. 5509–5522. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00196-7

57. Estrin Y., Mecking H. A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one-parameter models. *Acta Metal*, 1984, vol. 32, pp. 57–70. DOI: 10.1016/0001-6160(84)90202-5

58. Evrard P., Aubin V., Pilvin Ph., Degallaix S., Kondo D. Implementation and validation of a polycrystalline model for a biphased steel under non-proportional loading paths. *Mechanics Research Communications*, 2008, vol. 35, pp. 336–343. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2008.01.006

59. Evrard P., Armas A., Aubin V., Degallaix S. Polycrystalline modeling of the cyclic hardening/softening behavior of an austenitic–ferritic stainless steel. *Mechanics of Materials*, 2010, vol. 42, pp. 395–404. DOI: 10.1016/j.mechmat.2010.01.007

60. Franciosi F., Zaoui A. Multislip in f.c.c single crystals: a theoretical approach compared with experimental data. *Acta. Metall*, 1982, vol. 30, no. 8, pp. 1627–1637. DOI: 10.1016/0001-6160(82)90184-5

61. Friebel C., Doghri I., Legat V. General mean-field homogenization schemes for viscoelastic composites containing multiple phases of coated inclusions. *International Journal of Solids and Structures*, 2006, vol. 43, Iss. 9, pp. 2513-2541. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2005.06.035

62. Galán-López J., Shakerifard B., Ochoa-Avendaño J., Kestens L.A.I. Advanced crystal plasticity modeling of multiphase steels: work-hardening, strain rate sensitivity and formability. *Appl. Sci*., 2021, vol. 11, pp. 6122 (23 p.). DOI: 10.3390/app11136122

63. Haghdadi N., Martin D., Hodgson P. Physically-based constitutive modelling of hot deformation behavior in a LDX 2101 duplex stainless steel. *Materials & Design*, 2016, vol. 106, pp. 420–427. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.05.118

64. Han S., Wang C., Lai Q., Wang L., Xu W., Di H. Fitting free mechanical response prediction in dual-phase steels by crystal plasticity theory guided deep learning. *Acta Materialia*, 2025, vol. 289, pp. 120936 (15 p.). DOI: 10.1016/j.actamat.2025.120936

65. Haouala S., Alizadeh R., Bieler T.R., Segurado J., Llorca J. Effect of slip transmission at grain boundaries in Al bicrystals. *Int. J. Plasticity*, 2020, vol. 126, pp. 102600 (21 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.09.006

66. Hartig Ch., Mecking H. Finite element modelling of two phase Fe–Cu polycrystals. *Computational Materials Science*, 2005, vol. 32, pp. 370–377. DOI: 10.1016/j.commatsci.2004.09.030

67. Hassan H., Govind K., Hartmaier A. Micromechanical modelling of coupled crystal plasticity and hydrogen diffusion. *Philosophical Magazine*, 2018, vol. 99, Iss. 1, pp. 92–115. DOI: 10.1080/14786435.2018.1530466

68. Hoc T., Forest S. Polycrystal modelling of IF-TI steel under complex loading path. *International Journal of Plasticity*, 2001, vol. 17, Iss.1, pp. 65–85. DOI: 10.1016/S0749-6419(00)00019-X

69. Horstemeyer M.F. Multiscale modeling: A review. In: Practical Aspects of Computational Chemistry. Eds. J. Leszczynski, M.K. Shukla. Dordrecht, Springer, 2009, pp. 87-135. DOI: 10.1007/978-90-481-2687-3_4

70. Hou P., Li Y., Zhang W., Chae D., Park J.-S., Ren Y., Gao Y., Choo H. Synchrotron x-ray diffraction and crystal plasticity modeling study of martensitic transformation, texture development, and stress partitioning in deep-drawn TRIP steels. *Materialia*, 2021, vol. 21, no. 8, pp. 101162 (39 p.). DOI: 10.1016/j.mtla.2021.101162

71. Hu Y., Fang Z., Peng Y., Yang W., Ma X., Li J., Zhao Y., Wang B. Simultaneous enhancement of strength and ductility in friction stir processed 2205 duplex stainless steel with a bimodal structure: experiments and crystal plasticity modeling. *Physics, Mechanics & Astronomy*, 2022, vol. 65, Iss. 2, pp. 224612 (16 p.). DOI: 10.1007/s11433-021-1807-y

72. Hutchinson J.W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A. Math. Phys. Sci*., 1976, vol. 348, Iss. 1652, pp. 101–126. DOI: 10.1098/rspa.1976.0027

73. Jacob A., Povoden-Karadeniz E. Predictive computations of intermetallic σ phase evolution in duplex steel. I) Thermodynamic modeling of σ phase in the Fe–Cr–Mn–Mo–Ni system. *CALPHAD: Computer coupling of phase diagrams and thermochemistry*, 2020a, vol. 71, pp. 101998. DOI: 10.1016/j.calphad.2020.101998

74. Jacob A., Povoden-Karadeniz E. Predictive computations of intermetallic σ phase evolution in duplex steel. II) Thermo-kinetic simulation in duplex and hyper duplex stainless steels. *CALPHAD: Computer coupling of phase diagrams and thermochemistry*, 2020b, vol. 71, pp. 101810. DOI: 10.1016/j.calphad.2020.101810

75. Jaumann G. Geschlossenes system physikalischer und chemischer differential-gesetze. *Sitzber. Akad. Wiss. Wien*, Abt. IIa, 1911, B.120, S.385–530.

76. Jeon B., Lee Sh.-Y., Lee J., Jeong Y. Direct application of elasto-visco-plastic self-consistent crystal plasticity model to U-draw bending and springback of dual-phase high strength steel. *Int. J. Plasticity*, 2024, vol. 181, pp. 104098 (23 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.104098

77. Jeong C.U., Woo W., Choi J.Y., Choi S.-H. Effect of kinematic stability of initial orientation on deformation heterogeneity and ductile failure in duplex stainless steel during uniaxial tension. *Acta Materialia*, 2014, vol. 67, pp. 21-31. DOI: 10.1016/j.actamat.2013.12.020

78. Jeong C.U., Heo Y.-U., Choi J.Y., Woo W., Choi S.-H. A study on the micromechanical behaviors of duplex stainless steel under uniaxial tension using ex-situ experimentation and the crystal plasticity finite element method. *Int. J. Plasticity*, 2015, vol. 75, pp. 22–38. DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.07.005

79. Jia N., Peng R., Wang Y., Chai G., Johansson S., Wang G., Liaw P. Interactions between the phase stress and the grain-orientation-dependent stress in duplex stainless steel during deformation. *Acta Materialia*, 2006, vol. 54, pp. 3907–3916. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.04.019

80. Jia N., Peng R.L., Wang Y., Johansson S., Liaw P. Micromechanical behavior and texture evolution of duplex stainless steel studied by neutron diffraction and self-consistent modeling. *Acta Materialia*, 2008, vol. 56, pp. 782–793. DOI: 10.1016/j.actamat.2007.10.040

81. Jia N., Peng R.L., Wang Y.D., Zhao X. Self-consistent modeling of rolling textures in an austenitic–ferritic duplex steel. *Materials Science and Engineering A*, 2011, vol. 528, pp. 3615–3624. DOI: 10.1016/j.msea.2011.01.027

82. Johnson W.A., Mehl R.F. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth. *Trans. AIME*, 1939, vol. 135, pp. 416-442. https://ci.nii.ac.jp/naid/10029008838

83. Jung J., Kim J.H. Investigation of the history-dependent nonlinear micro-viscoplasticity behavior of dual-phase steel using crystal plasticity finite element method. *Mechanics of Materials*, 2025, vol. 200, pp. 105202 (10 p.) DOI: 10.1016/j.mechmat.2024.105202

84. Kadkhodapour J., Butz A., Ziaei-Rad S., Schmauder S. A micro mechanical study on failure initiation of dual phase steels under tension using single crystal plasticity model. *International Journal of Plasticity*, 2011, vol. 27, pp. 1103–1125. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.12.001

85. Kalidindi S.R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models. *J. Mech. Phys. Solids*, 1998, vol. 46, pp. 267–271. DOI: 10.1016/S0022-5096 (97)00051-3, and 273–290

86. Kang J.-Y., Kim H., Kim K.-I., Lee C.-H., Han H.N., Oh K.-H., Lee T.-H. Effect of austenitic texture on tensile behavior of lean duplex stainless steel with transformation induced plasticity (TRIP). *Materials Science and Engineering: A*, 2017, vol. 681, pp. 114-120. DOI: 10.1016/j.msea.2016.11.001

87. Kato M. Hardening by spinodally modulated structure in b.c.c. alloys. *Acta Metallurgica*, 1981, vol. 29, no. 1, pp. 79–87.

88. Khandelwal S., Basu S., Patra A. A machine learning-based surrogate modeling framework for predicting the history-dependent deformation of dual phase microstructures. *Mater. Today Commun*., 2021, vol. 29, pp. 102914 (14 p.). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2021.102914

89. Kim E.-Y., Woo W.C., Heo Y.-U., Seong B.S., Choi J.Y., Choi S.-H. Effect of kinematic stability of the austenite phase on phase transformation behavior and deformation heterogeneity in duplex stainless steel using the crystal plasticity finite element method. *Int. J. Plasticity*, 2016, vol. 79, pp. 48–67. DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.12.009

90. Knezevic M. Crystal plasticity-based finite element simulations of load reversals and hat-shaped draw-bending for predicting the springback behavior of dual-phase steel sheets. *Int. J. of Solids and Structures*, 2024, vol. 300, pp. 112924 (16 p.). DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2024.112924

91. Kocks U.F. Laws for work-hardening and low-temperature creep. *J. Eng. Mater. Tech.*, 1976, vol. 98, no. 1, pp. 76–85. DOI: 10.1115/1.3443340

92. Kocks U.F., Mecking H. A mechanism for static and dynamic recovery. *Strength of Metals and Alloys. Procs 5th Int. Conf.*, 1979, vol. 1, pp. 345–350. DOI: 10.1016/B978-1-4832-8412-5.50063-1

93. Krupp U., Knobbe H., Christ H.-J., Köster P., Fritzen C.-P. The significance of microstructural barriers during fatigue of a duplex steel in the high- and very-high-cycle-fatigue (HCF/VHCF) regime. *International Journal of Fatigue*, 2010, vol. 32, no. 5, pp. 914–920. DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2009.09.010

94. Krupp U., Alvarez-Armas I. Short fatigue crack propagation during low-cycle, high cycle and very-high-cycle fatigue of duplex steel – An unified approach. *International Journal of Fatigue*, 2014, vol. 65, pp. 78–85. DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2013.06.018

95. Krupp U., Giertler A., Söker M., Fu H., Dönges B., Christ H.-J., Istomin K., Hüsecken A., Pietsch U., Fritzen C.-P., Ludwig W. Significance and mechanism of the crack initiation process during very high cycle fatigue of duplex stainless steel. *Procedia Engineering*, 2014, vol. 74, pp. 143–146. DOI: 10.1016/j.proeng.2014.06.238

96. Laukkanen A., Uusikallio S., Lindroos M., Andersson T., Kömi J., Porter D. Micromechanics driven design of ferritic–austenitic duplex stainless steel microstructures for improved cleavage fracture toughness. *Engng Fracture Mechanics*, 2021, vol. 253, pp. 107878 (19 p.). DOI: 10.1016/j.engfracmech.2021.107878

97. 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. Metall. Mater.*, 1993, vol. 41, pp. 2611-2624.

98. Lebensohn R. N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using fast Fourier transform. *Acta Materialia*, 2001, vol. 49, Iss. 14, pp. 2723–2737. DOI: 10.1016/S1359-6454(01)00172-0

99. Le Joncour L., Panicaud B., Baczmański A., François M., Braham C., Paradowska A., Wroński S., Chiron R. Damage in duplex steels studied at mesoscopic and macroscopic scales. *Mechanics of Materials*, 2010, vol. 42, no. 12, pp. 1048–1063. DOI: 10.1016/j.mechmat.2010.10.003

100. Li L., Wu D., Liu W., Zhang Z., Li X., Zhou J. Molecular dynamics simulation of the mechanical behavior of duplex stainless steels with nanotwin structure. *JMEPEG*, 2025, vol. 34, pp. 3608–3617. DOI: 10.1007/s11665-024-09400-y

101. Lillbacka R., Chai G., Ekh M., Liu P., Johnson E., Runesson K. Cyclic stress–strain behavior and load sharing in duplex stainless steels: Aspects of modeling and experiments. *Acta Materialia*, 2007, vol. 55, pp. 5359–5368. DOI: 10.1016/j.actamat.2007.05.056

102. Lipinski P., Berveiller M. Elastoplasticity of micro-inhomogeneous metals at large strains. *International Journal of Plasticity*, 1989, vol. 5, pp. 149–172. DOI: 10.1016/0749-6419(89)90027-2

103. Lipinski P., Berveiller M., Reubrez E., Morreale J. Transition theories of elasticplastic deformation of metallic polycrystals. *Arch Appl Mech.*, 1995, vol. 65, pp. 291–311. DOI: 10.1007/BF00789222

104. Liu B., Raabe D., Roters F., Eisenlohr P., Lebensohn R.A. Comparison of finite element and fast Fourier transform crystal plasticity solvers for texture prediction. *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 2010, vol. 18, pp. 085005 (21p.). DOI: 10.1088/0965-0393/18/8/085005

105. Liu T., Zhang X., Song W., Li C., Wang P., Li D., Zhu Y., Li Y. Dynamic hetero-deformation induced hardening through strength reversal between hetero-zones in austenite-ferrite duplex steel. *Acta Materialia*, 2025, vol. 293, pp. 121120 (18 p.). DOI: 10.1016/j.actamat.2025.121120

106. Liu W., Li X., Liu M., Cui H., Huang J., Pang Y., Ma J. Virtual laboratory enabled constitutive modelling of dual phase steels. *Int. J. Plasticity*, 2024, vol. 175, pp. 103930 (29 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.103930

107. Liu Z., Li J., Zheng Y., He C. Ultrasonic backscattering model of lamellar duplex phase microstructures in polycrystalline materials. *Ultrasonics*, 2025, vol. 149, pp. 107581 (16 p.). DOI: 10.1016/j.ultras.2025.107581

108. Marinelli M.C., Krupp U., Kübbeler M., Herenu S., Armas A. The effect of the embrittlement on the fatigue limit and crack propagation in a duplex stainless steel during high cycle fatigue. *Engineering Fracture Mechanics*, 2013, vol. 110, pp. 421–429. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2013.03.034

109. Mary N., Vignal V., Oltra R., Coudreuse L. Finite-element and XRD methods for the determination of the residual surface stress field and the elastic–plastic behaviour of duplex steels. *Philosophical Magazine*, 2005, vol. 85, Iss. 12, pp. 1227–1242. DOI: 10.1080/14786430412331333329

110. Mayeur J.R., McDowell D.L. A three-dimensional crystal plasticity model for duplex Ti–6Al–4V. *International Journal of Plasticity*, 2007, vol. 23, Iss. 9, pp. 1457–1485. DOI: 10.1016/j.ijplas.2006.11.006

111. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity. *Int. J. Plasticity*, 2010, vol. 26, pp. 1280–1309. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010. 02.008

112. Mecking H., Kocks U.F. Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metallurgica*, 1981, vol. 29, Iss. 11, pp. 1865-1875. DOI: 10.1016/0001-6160(81)90112-7

113. Mehtonen S.V., Karjalainen L.P., Porter D.A. Modeling of the high temperature flow behavior of stabilized 12–27 wt% Cr ferritic stainless steels. *Materials Science & Engineering A*, 2014, vol. 607, pp. 44–52. DOI: 10.1016/j.msea.2014.03.124

114. Michel J.C., Moulinec H., Suquet P.A. Computational method based on augmented lagrangians and fast fourier transforms for composites with high contrast. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, 2000, vol. 1, Iss. 2, pp. 79-88. DOI: 10.3970/cmes.2000.001.239

115. Mollens M. Development of a multi-scale approach for modeling cast duplex stainless behavior. Doctor's degree dissertation. Université Paris-Saclay, 2022, 246 p.

116. Moulinec H., Suquet P. A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites. *Comptes Rendus de l'Académie des sciences. Série II. Mécanique, physique, chimie, astronomie*, 1994, vol. 318, – Iss. II, pp. 1417–1423.

117. Moulinec H., Suquet P. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1998, vol. 157, Iss. 1-2, pp. 69-94. DOI: 10.1016/S0045-7825(97)00218-1

118. Muñoz J.A., Chand M., Signorelli J.W., Calvo J., Cabrera J.M. Strengthening of duplex stainless steel processed by equal channel angular pressing (ECAP). *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2022, vol. 123, pp. 2261–2278. DOI: 10.1007/s00170-022-10311-2

119. Nye J. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metall.*, 1953, vol. 1, Iss. 2, pp. 153–162. DOI: 10.1016/0001-6160(53)90054-6

120. Nygårds M., Gudmundson P. Three-dimensional periodic Voronoi grain models and micromechanical FE-simulations of a two-phase steel. *Computational Materials Science*, 2002, vol. 24, Iss. 4, pp. 513–519. DOI: 10.1016/S0927-0256(02)00156-8

121. Olden V., Saai A., Jemblie L., Johansen R. FE simulation of hydrogen diffusion in duplex stainless steel. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2014, vol. 39, Iss. 3, pp. 1156–1163. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.10.101

122. Olson G.B., Cohen M. A mechanism for the strain-induced nucleation of martensitic transformations. *J. Less-Common Metals*, 1972, vol. 28, pp. 107–118. DOI: 10.1016/0022-5088(72)90173-7

123. Panicaud B., Saanouni K., Baczmański A., François M., Cauvin L., Le Joncour L. Theoretical modelling of ductile damage in duplex stainless steels – Comparison between two micromechanical elasto-plastic approaches. *Computational Materials Science*, 2011, vol. 50, no. 6, pp. 1908–1916. DOI: 10.1016/j.commatsci.2011.01.038

124. Poshadel A.C., Gharghouri M.A., Dawson P.R. Initiation and propagation of plastic yielding in duplex stainless steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2019, vol. 50, pp. 1202–1230. DOI: 10.1007/s11661-018-5009-1

125. Pulvermacher S., Loebich F., Prahs A., Liu H., Cabeza S., Pirling T., Hofmann M., Gibmeier J. Analysis of phase-specific strain pole figures for duplex steels under elasto-plastic uniaxial tension – experiment vs. EPSC modelling. *Crystals*, 2024, vol. 14, no. 3, Art. 206. DOI: 10.3390/cryst14030206

126. Qayyum F., Chaudhry A.A., Guk S., Schmidtchen M., Kawalla R., Prahl U. Effect of 3D representative volume element (RVE) thickness on stress and strain partitioning in crystal plasticity simulations of multi-phase materials. *Crystals*, 2020, vol. 10, pp. 944 (18 p.). DOI: 10.3390/cryst10100944

127. Qian Y., Fan Q., Liu X., Wang D., Zhou Y. Crystal plasticity finite element method for slip systems evolution analysis of α/β duplex titanium alloys during quasi-static tensile testing. *Applied Sciences*, 2020, vol. 10, pp. 7782. DOI: 10.3390/app10217782

128. Qin S., Beese A.M. Identification of stress state dependent fracture micromechanisms in DP600 through representative volume element modeling. *Int. J. Mech. Sci.*, 2021, vol. 1994, pp. 106209 (10 p.). DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2020.106209

129. Quey R., Dawson P.R., Barbe F. Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 2011, vol. 200, pp. 1729–1745. DOI: 10.1016/j.cma.2011.01.002

130. Ravi S.K., Seefeldt M., Bael A.V., Gawad J. Multi-scale material modelling to predict the material anisotropy of multiphase steels. *Computational Materials Science*, 2019, vol. 160(7), pp. 382–396. DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.01.028

131. Rolinska M., Spartacus G., Dahlström A., Mu W., Youngs T.G.A., Odqvist J., Hedström P. Kinetics of phase separation in super duplex stainless steel 2507 revealed by in situ neutron scattering for various intermediate heat treatments. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2025, vol. 56, pp. 4082–4091. DOI: 10.1007/s11661-025-07906-1

132. Roters F. Advanced material models for the crystal plasticity finite element method: Development of a general CPFEM framework. Ph. D. Thesis. Aachen, 2011, 226 p. DOI: 10.18154/RWTH-CONV-144865

133. Roters F., Raabe D., Gottstein G. Work hardening in heterogeneous alloys – a microstructural approach based on three internal state variables. *Acta mater.*, 2000, vol. 48, pp. 4181–4189. DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00289-5

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

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

136. Roters F., Diehl M., Shanthraj P., Eisenlohr P., Reuber C., Wong S.L., Maiti T., Ebrahimi A., Hochrainer T., Fabritius H.O., Nikolov S., Friák M., Fujita N., Grilli N., Janssens K.G.F., Jia N., Kok P.J.J., Ma D., Meier F., Werner E., Stricker M., Weygand D., Raabe D. 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. *Comput. Mater. Sci.*, 2019, vol. 158, pp. 420–478. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.04.030

137. Ryu S., Lee S., Jung J., Lee J., Kim Y. Micromechanics-based homogenization of the effective physical properties of composites with an anisotropic matrix and interfacial imperfections. *Frontiers in Materials*, 2019, vol. 6, Art. 21 (17 p.). DOI: 10.3389/fmats.2019.00021

138. Santos A.G.C., Ignácio N.F., Fernandes M.S., Baía D.M., Moreira F.N., Assis W.L.S., Rios P.R. Computational modeling of a 3D matrix of duplex stainless steel and its ultimate strength in function of the sigma phase evolution. *Journal of materials research and technology*, 2021, vol. 15, pp. 2625–2632. DOI: 10.1016/j.jmrt.2021.09.051

139. Sarand M.H.J., Misirloglu I.B. A physics-based plasticity study of the mechanism of inhomogeneous strain evolution in dual phase 600 steel. *Int. J. Plasticity*, 2024, vol. 174, pp. 103918 (28 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.103918

140. Simon N., Erdle H., Walzer S., Gibmeier J., Böhlke T., Liewald M. Phase-specific residual stresses induced by deep drawing of lean duplex steel: measurement vs. simulation. *Production Engineering*, 2019, vol. 13, no. 3, pp. 227–237. DOI: 10.1007/s11740-019-00877-4

141. Sinclair C.W., Hoagland R.G. A molecular dynamics study of the fcc → bcc transformation at fault intersections. *Acta Materialia*, 2008, vol. 56, pp. 4160–4171. DOI: 10.1016/j.actamat.2008.04.043

142. Sodjit S., Uthaisangsuk V. Microstructure based prediction of strain hardening behavior of dual phase steels. *Mater. Des.*, 2012, vol. 41, pp. 370–379. DOI: 10.1016/j.matdes.2012.05.010

143. Spigarelli S., El Mehtedi M., Ricci P., Mapelli C. Constitutive equations for prediction of the flow behaviour of duplex stainless steels. *Materials Science and Engineering A*, 2010, vol. 527, pp. 4218–4228. DOI: 10.1016/j.msea.2010.03.029

144. Taha M., Mahmoud S.R. Direct observations of hydrogen-enhanced crack propagation in iron. *Scripta Materialia*, 2001, vol. 45, Iss. 5, pp. 549–554. DOI: 10.1016/S0013-7944(00)00126-0

145. Tasan C.C., Diehl M., Yan D., Zambaldi C., Shanthraj P., Roters F., Raabe D. Integrated experimental–simulation analysis of stress and strain partitioning in multiphase alloys. *Acta Mater.*, 2014, vol. 81, pp. 386–400. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.07.071

146. Taylor G.I. Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals*, 1938, vol. 62, pp. 307–324.

147. Tjahjanto D.D., Turteltaub S., Suiker A.S.J. Crystallographically based model for transformation-induced plasticity in multiphase carbon steels. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 2008, vol. 19, pp. 399–422. DOI: 10.1007/s00161-007-0061-x

148. Tóth L.S., Molinari A., Estrin Y. Strain hardening at large strains as predicted by dislocation based polycrystal model. *J. Engineering Materials and Technology*, 2002, vol. 124, pp. 71–77. DOI: 10.1115/1.1421350

149. Tran M.T., Nguyen X.M., Kim H., Chae H., Woo W., Lee H.W., Kim D.-K. Micromechanical properties and deformation behavior of the constituent phases in 3rd generation complex phase AHSS: In-situ neutron experiment and crystal plasticity simulation. *Int. J. Plasticity*, 2023, vol. 171, pp. 103812 (26 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2023.103812

150. 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, vol. 15, pp. 760 (17 p.). DOI: 10.3390/ma15030760

151. Trusov P.V., Shveikin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Direct models. *Physical Mesomechanics*, 2013, vol. 16, no. 2, pp. 99–124. DOI: 10.1134/S1029959913020021

152. Tsekpuia E., Guery A., Gey N., Berbenni S. A microstructure-based three-scale homogenization model for predicting the elasto-viscoplastic behavior of duplex stainless steels. *Int. J. Plasticity*, 2023, vol. 164, pp. 103575 (30 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2023.103575

153. Turner P.A., Tomé C.N. A study of residual stresses in Zircaloy-2 with rod texture. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1994, vol. 42, Iss. 12, pp. 4143–4153. DOI: 10.1016/0956-7151(94)90191-0

154. Van Houtte P., Delannay L., Samajdar I. Quantitative prediction of cold rolling textures in low–carbon steel by means of the LAMEL model. *Textures and Microstructures*, 1999, vol. 31, pp. 109–149. DOI: 10.1155/TSM.31. 109

155. Vermeij T., Mornout C.J.A., Rezazadeh V., Hoefnagels J.P.M. Martensite plasticity and damage competition in dual-phase steel: A micromechanical exmerimental-numerical study. *Acta Materialia*, 2023, vol. 254, pp. 119020 (20 p.). DOI: 10.1016/j.actamat.2022.119020

156. Watanabe I., Setoyama D., Nagasako N., Iwata N., Nakanishi K. Multiscale prediction of mechanical behavior of ferrite–pearlite steel with numerical material testing. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 2012, vol. 89, pp. 829–845. DOI: 10.1002/nme.3264

157. Woo W., Em V.T., Kim E.-Y., Han S.H., Han Y.S., Choi S.-H. Stress–strain relationship between ferrite and martensite in a dual-phase steel studied by in situ neutron diffraction and crystal plasticity theories. *Acta Materialia*, 2012, vol. 60, pp. 6972–6981. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.08.054

158. Wu Q., Shanthraj P., Zikry M.A. Modeling the heterogeneous effects of retained austenite on the behavior of martensitic high strength steels. *Int. J. Fract.*, 2013, vol. 184, pp. 241–252. DOI: 10.1007/s10704-013-9879-3

159. Wu W., Liu S., Li W., Li J. Identification of microstructure factors affecting hydrogen embrittlement of a 2205 duplex stainless steel. *Corrosion Science*, 2022a, vol. 192, Art. 110643. DOI: 10.1016/j.corsci.2022.110643

160. Wu W., Zhang X., Li W., Fu H., Liu S., Wang Y., Li J. Effect of hydrogen trapping on hydrogen permeation in a 2205 duplex stainless steel: Role of austenite–ferrite interface. *Corrosion Science*, 2022b, vol. 202, pp. 110332. DOI: 10.1016/j.corsci.2022.110332

161. Xia D., Li Y., Qin S. Out-of-plane constraint for 2D representative volume element model of dual phase steels under uni-

axial tension. *Computational Materials Science*, 2025, vol. 246, pp. 113490 (12 p.). DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113490

162. Zandomeni R., Seifert T. Steps toward microstructure-based modeling of the influence of hydrogen on the fatigue behavior of duplex steels: non-local cyclic polycrystal plasticity. In: *Lectures Notes on Advanced Structured Materials 3. Advanced Structured Materials.* Eds. H. Altenbach, L. Hitzler, M. Johlitz, M. Merkel, A. Öchsner. Springer, Cham, 2025, pp. 351-367. DOI: 10.1007/978-3-031-77403-4_21

163. Zaremba S. Sur une forme perfectionnée de la théorie de la relaxation. *Bull. Int. Acad. Sci. Cracovie*, 1903, pp. 595–614.

164. Zecevic M., Korkolis Y.P., Kuwabara T., Knezevic M. Dual-phase steel sheets under cyclic tension–compression to large strains: Experiments and crystal plasticity modeling. *J. Mechanics and Physics of Solids*, 2016, vol. 96, pp. 65–87. DOI: 10.1016/j.jmps.2016.07.003

165. Zhai Y., Su W., Guo F., Zheng X., Yang B., Wang Q., Li Y., Cao W., Huang C. Experimental and numerical investigation of the yield point phenomenon and strain partitioning behavior in a dual-phase steel with lamellar structure. *Materials Science & Engineering A*, 2024, vol. 897, pp. 146356 (17 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2024.146356

166. Zhang L., Song K., Zhang X., Ma Ch., Hai X. Heterogeneous structure design and strengthening mechanism study of 2205 duplex stainless steel. *Materials Today Communications*, 2025a, vol. 42, pp. 111481 (9 p.). DOI: 10.1016/j.mtcomm.2024.111481

167. Zhang M., Tang B., Chen W., Li K., Xie Y., Yin B., Li J. Slip analysis and mechanical deformation behavior in dual-phase titanium alloy: Integrating crystal plasticity simulations with in-situ micro-compression. *Materials Science & Engineering A*, 2024a, vol. 892, pp. 146061 (13 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2023.146061

168. Zhang P., Kohar C.P., Brahme A.P., Choi S.-H., Mishra R.K., Inal K. A crystal plasticity formulation for simulating the formability of a transformation induced plasticity steel. *J. Materials Processing Tech.*, 2021, vol. 287, pp. 116493 (20 p.). DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2019.116493

169. Zhang T., Liu H., Xie H., Liu J., Huo M., Li L., Jia F., Pan D., Wu H., Yang T., Zhang X., Wang Z., Linton V., Jiang F., Jiang Z. Microstructure-based modelling of formability for advanced high strength dual-phase steels. *Materials Science & Engineering A*, 2024b, vol. 915, pp. 147227 (12 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2024.147227

170. Zhang W., Wang Y., Li X., Hao S., Chi Y., Ma X., Chen L., Jin M. The effect of phase distribution of constituent-fiber structure on the deformation heterogeneity of TRIP-assisted lean duplex stainless steel. *Materials Science & Engineering A*, 2023a, vol. 878, pp. 145216 (19 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2023.145216

171. Zhang W., Guo S., Liu S., Li X., Hao S., Jin M., Cai X., Chen L. Quantitatively assessing the contributions of temperature-dependent deformation-induced martensitic transformation to uniform elongation and work hardening of TRIP-assisted duplex stainless steel via crystal plasticity. *Materials Science & Engineering A*, 2023b, vol. 887, pp. 145758 (17 p.). DOI: 10.1016/j.msea.2023.145758

172. Zhang W., Jin M., Hao S., Huo M., Huang Z., Chen L., Xia W. The interfacial damage of the deformation heterogeneity in the transformation-induced plasticity (TRIP)-assisted duplex stainless steel / W. Zhang, M. Jin, S. Hao, M. Huo, Z. Huang, L. Chen, W. Xia // Int. J. Plasticity. – 2025b. – Vol.184. – 104209 (25 p.). DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.104209

173. Zhao Y., Zhang W., Liu X. Development of TRIP-Aided Lean Duplex Stainless Steel by Twin-Roll Strip Casting and Its Deformation Mechanism. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2016, vol. 47, pp. 6292–6303. DOI: 10.1007/s11661-016-3771-5

174. Zheng X., Sun T., Zhou J., Zhang R., Ming P. Modeling of polycrystalline material microstructure with 3D grain boundary based on Laguerre–Voronoi tessellation. *Materials*, 2022, vol. 15(6), pp. 1996 (20p.). DOI: 10.3390/ma15061996

175. Zhou Q., Cong L., Gan L., Ling C., Li D., Busso E.P. Effect of thermal ageing on the deformation behaviour of ferrite and austenite in a duplex stainless steel: Micropillar characterisation and dislocation density modelling. *Acta Materialia*, 2024, vol. 265, pp. 119599 (14 p.). DOI: 10.1016/j.actamat.2023.119599

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-19-00785).
Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
Вклад авторов равноценен.

Financing. The work was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation (grant no. 25-19-00785).
Conflict of interest. The authors declare no conflict of interest.
The authors' contributions are equal.