



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2022.2.06

УДК 539.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ

А.И. Грищенко, А.С. Семенов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 14 декабря 2021 г.

Одобрена: 23 июня 2022 г.

Принята к публикации:

08 июля 2022 г.

Ключевые слова:

монокристалл, системы скольжения, γ - и γ' -фазы, пластичность, микроструктурные модели, конечно-элементная гомогенизация, реологические модели.

АННОТАЦИЯ

Разработана и верифицирована микромеханически мотивированная модель упругопластического деформирования двухфазных монокристаллических сплавов на никелевой основе, предсказывающая их поведение при высокотемпературных механических воздействиях с учетом наличия γ - и γ' -фаз. Использование модели актуально при выполнении уточненных расчетов напряженно-деформированного состояния охлаждаемых монокристаллических лопаток газотурбинных установок. Формулировка определяющих уравнений для каждой из фаз учитывала анизотропию упругих и пластических свойств, наличие октаэдрических систем скольжения, особенности кубической сингонии, различные механизмы упрочнения, включающие кинематическое, изотропное и латентное. Идентификация упругих и пластических констант материала для γ - и γ' -фаз производилась на основе известных диаграмм деформирования для каждой фазы.

Определение эффективных свойств и диаграмм деформирования монокристаллического сплава с учетом наличия γ - и γ' -фаз производилось как на основе конечно-элементной гомогенизации для элементарного представительного объема, так и с использованием простейших реологических (структурных) моделей материала, рассматривающих последовательное и параллельное соединение фаз. Путем многовариантных вычислительных экспериментов и аналитических оценок определены зависимости упругопластических свойств двухфазных монокристаллических сплавов на никелевой основе от объемной доли γ' -фазы.

В целях определения оптимальной стратегии решения рассматриваемого класса задач проведены многовариантные вычислительные эксперименты для различных видов граничных условий задачи гомогенизации, числа ячеек периодичности, форм включения γ' -фазы, объемных долей γ' -фазы, видов упрочнения, вариантов реологических моделей и даны соответствующие рекомендации.

Результаты моделирования с использованием предложенной двухуровневой микроструктурной модели материала демонстрируют хорошее соответствие с экспериментальными данными для монокристаллического жаропрочного сплава CMSX-4.

© ПНИПУ

© Грищенко Алексей Иванович – асс., e-mail: gai-gr@yandex.ru.

Семенов Артем Семенович – к.ф.-м.н., доц., e-mail: semenov.artem@gmail.com.

Alexey I. Grishchenko – Assistant, e-mail: gai-gr@yandex.ru.

Artem S. Semenov – CSc of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, e-mail: semenov.artem@gmail.com.



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)

MODELING OF THE ELASTOPLASTIC DEFORMATION PROCESS OF SINGLE CRYSTAL SUPERALLOYS

A.I. Grishchenko, A.S. Semenov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 14 December 2021
Approved: 23 June 2022
Accepted for publication: 08 July 2022

Keywords:

single crystal, slip systems, γ and γ' phases, plasticity, micromechanical models, finite element homogenization, rheological models.

ABSTRACT

The aim of the research is the development and verification of a micromechanically motivated model of elastoplastic deformation of two-phase single-crystal nickel-based alloys, predicting behavior under high-temperature thermomechanical actions with taking into account the presence of γ and γ' phases. The model is relevant for computations of the stress-strain state of cooled single crystal blades of gas turbine units.

The constitutive equations for each of the phases took into account the anisotropy of elastic and plastic properties, the presence of octahedral slip systems, features of the cubic system, and various hardening mechanisms, including kinematic, isotropic and latent ones. The identification of the elastic and plastic constants of the material for the γ and γ' phases was carried out on the basis of the known stress-strain curves for each phase.

The determination of the effective properties and deformation diagrams of a two-phase single-crystal alloy, taking into account the presence of γ - γ' phases, was carried out both on the basis of finite element homogenization for the representative volume element, and using the simplest rheological (structural) models of the material, considering serial and parallel connection of phases. The dependences of the elastoplastic properties of two-phase single-crystal nickel-based alloys on the volume fraction of the γ' phase are determined by computational experiments and analytical estimates.

In order to determine the optimal strategy for solving the class of problems under consideration, multivariant computational experiments were carried out for various types of boundary conditions of the homogenization problem, the number of periodicity cells, forms of inclusion of the γ' phase, volume fractions of the γ' phase, types of hardening, variants of rheological models and appropriate recommendations were given.

The simulation results using the proposed two-level microstructural model of the material demonstrate a good agreement with the experimental data for the single-crystal superalloy CMSX-4.

© PNRPU

Введение

Монокристаллические сплавы на никелевой основе [1; 2] представляют собой класс жаропрочных материалов, обладающих исключительными показателями длительной прочности. Данные материалы нашли широкое применение в авиационных и энергетических турбинах, ракетных двигателях и в других сложных конструкциях, эксплуатируемых в экстремальных условиях. В настоящее время монокристаллические никелевые суперсплавы остаются практически безальтернативными материалами для лопаток газотурбинных двигателей 5-го и 6-го поколений [3]. Следствием бурного развития монокристаллических сплавов последних нескольких десятилетий стало появление сплавов, которые без потери прочности могут работать при средней температуре 1050 °С, причем кратковременно температура может достигать 1200 °С, что составляет примерно 90 % от температуры плавления материала [4]. К другим отличительным особенностям можно отнести анизотропию механических свойств [4–6], высокие характеристики длительной прочности и сопротивления высокотемпературной ползучести за счет отсутствия межзеренных границ [5], снижение термических напряжений и рост сопротивления малоциклового усталости за счет уменьшения модуля упругости в осевом направлении лопатки, а также высокую стойкость к коррозии [1].

На микроскопическом уровне монокристаллические сплавы на никелевой основе представляют собой структуру, которая состоит из двух фаз: матрицы из γ -фазы, формирующейся на основе Ni_3Al и квазипериодически расположенных дисперсных включений γ' -фазы [2] (рис. 1). Частицы γ' -фазы представляют собой кубоиды со средним размером ~ 500 нм, разделенные прослойками γ -фазы с поперечным размером 50–90 нм, объемная доля γ' -фазы составляет порядка 70 % [2].

Возрастающие требования к надежности и экономичности, а также высокая стоимость экспериментальных исследований и натурных испытаний приводят к необходимости численного моделирования процессов деформирования и разрушения ответственных элементов газотурбинных двигателей (ГТД) и установок (ГТУ) [7–9].

Для прогнозирования НДС монокристаллических лопаток при сложных программах термомеханического нагружения можно рассматривать два основных подхода [6; 10–12]:

- применение феноменологических моделей пластичности и ползучести, описывающих поведение материала на макроскопическом уровне. В этом случае необходимо учитывать анизотропию в упругих свойствах и в критерии пластичности, простые модификации критерия Мизеса обладают неудовлетворительной предсказательной способностью для монокристалла с кубической симметрией [10; 13]. Наиболее корректный прогноз

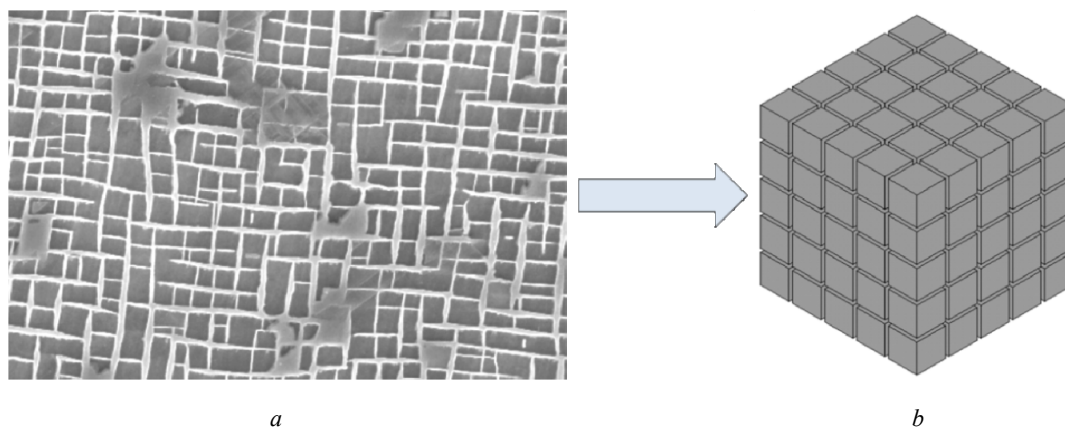


Рис. 1. Микроструктура монокристаллического сплава на никелевой основе [2] (a); 3D-идеализация (γ -фаза не показана) (b)

Fig. 1. Nickel-based superalloy microstructure: [2] (a); 3D idealization (γ phase not shown) (b)

дает использование тензорно-полиномиальном критерия пластичности четвертого порядка [13];

- применение микромеханических моделей, учитывающих, что неупругие деформации происходят в соответствии с механизмом скольжения по активным системам скольжения и в значительной мере зависят от кристаллографической ориентации монокристалла по отношению к направлению внешнего воздействия [6; 10; 13; 14].

На данный момент существует достаточно большое количество микромеханических [6–24] и феноменологических [6; 14; 15; 25–27] моделей неупругого деформирования, однако модели, учитывающие наличие γ - и γ' -фаз и изменение соотношения их объемов при высокотемпературной ползучести, находятся на стадии разработки [1; 28–30].

Целью исследования является разработка многоуровневой микромеханически мотивированной модели упругопластического деформирования монокристаллических сплавов на никелевой основе, учитывающей наличие γ - и γ' -фаз.

1. Модели отдельных фаз монокристаллического материала

Для прогнозирования НДС монокристаллических лопаток при сложных программах термомеханического нагружения рационально применять микромеханические модели неупругого деформирования материала, учитывающие, что неупругие деформации происходят в соответствии с механизмом скольжения по активным системам скольжения и в значительной мере зависят от кристаллографической ориентации монокристалла по отношению к направлению внешнего воздействия.

При использовании микромеханических моделей материала [10; 14–16] предполагается, что пластическое течение в отдельной фазе монокристаллического материала осуществляется как результат возможного скольжения в N -системах скольжения, характеризующихся нормалью к α -й плоскости скольжения \mathbf{n}^α и направлением скольжения \mathbf{l}^α ($\alpha = 1, \dots, N$).

Монокристаллические сплавы на никелевой основе имеют гранецентрированную кубическую (ГЦК) кристаллическую решетку, для которых насчитывается двенадцать октаэдрических систем скольжения вида $\{111\} \langle 011 \rangle$ (рис. 2, a), шесть кубических систем скольжения вида $\{001\} \langle 011 \rangle$ (рис. 2, b). Октаэдрические системы скольжения состоят из четырех плоскостей скольжения $\{111\}$, при этом в каждой из этих плоскостей существует три независимых направления скольжения $\langle 011 \rangle$. Для кубической системы скольжения характерны три плоскости $\{001\}$ с двумя независимыми направлениями $\langle 011 \rangle$ в каждой из этих плоскостей.

В то же время в монокристаллических сплавах пластическое течение может осуществляться за счет механизма двойникования, представляющего собой процесс локализованного сдвига, при котором кристаллическая решетка в кристалле-двойнике является зеркальным отражением исходной решетки относительно плоскости двойникования [14; 31–34]. Для сплавов с ГЦК-решеткой насчитывается двенадцать октаэдрических систем двойникования вида $\{111\} \langle 112 \rangle$. Несмотря на то что механизм двойникования оказывает влияние на неупругое деформирование, обусловленное скольжением [14], его вклад в полную деформацию не превышает 5%. Кроме того, реализация механизма двойникования происходит в основном при низких температурах и больших напряжениях (около 30 МПа для никеля) или при высоких скоростях деформаций [34]. В связи с этим учет данного механизма в настоящей работе не производился.

В случае конечных деформаций используется концепция мультипликативного разложения градиента деформации \mathbf{F} (см. рис. 3):

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p, \quad (1)$$

где пластическая составляющая определяется уравнениями [1; 16; 23; 35]:

$$\dot{\mathbf{L}}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{n}^\alpha \mathbf{l}^\alpha, \quad (2)$$

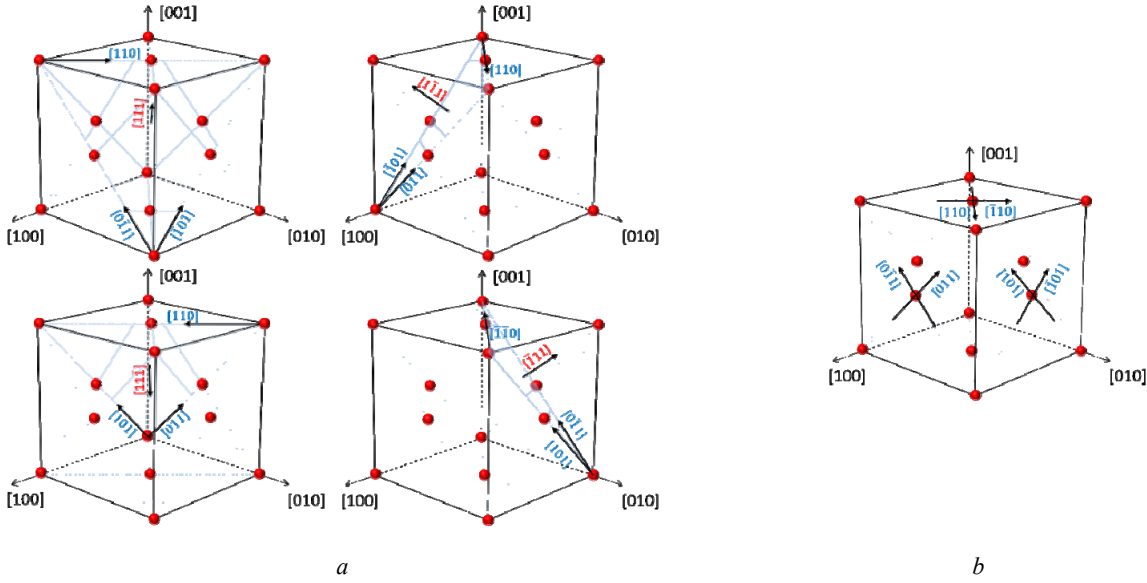


Рис. 2. Октаэдрические (а) и кубические (b) системы скольжения в монокристалле с кубической гранецентрированной решеткой

Fig. 2. Octahedral (a) and cubic (b) slip systems in cubic face-centered crystal

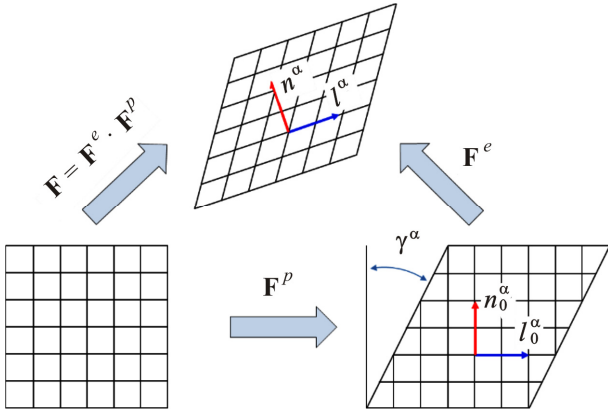


Рис. 3. Иллюстрация концепции мультипликативного разложения градиента деформации \mathbf{F} при упругопластическом деформировании монокристалла

Fig. 3. Illustration of the concept multiplicative expansion of the strain gradient \mathbf{F} during elastoplastic deformation of a single crystal

$$\dot{\gamma}^\alpha = f(\tau^\alpha, \dots), \quad (3)$$

$$\tau^\alpha = \mathbf{n}^\alpha \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{l}^\alpha, \quad (4)$$

а упругая при помощи равенств [16, 23, 35]:

$$\mathbf{E}^e = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^e - \mathbf{1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^{eT} - \mathbf{1}), \quad (5)$$

$$\mathbf{S}^e = {}^4\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^e, \quad (6)$$

$$\mathbf{S}^e = \mathcal{L}\mathbf{F}^{e-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{eT}, \quad (7)$$

где $\dot{\gamma}^\alpha$ – скорость скольжения в системе скольжения α , которая зависит от напряженного состояния (касательных напряжений τ^α , приведенных к данной системе скольжения), а также может зависеть еще от ряда внутренних переменных, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши, \mathbf{E}^e – упругая составляющая тензора деформации Грина – Лагранжа,

\mathbf{C}^e – упругая составляющая меры деформации Коши – Грина, \mathbf{S}^e – второй тензор напряжений Пиолы – Кирхгофа, $J = \det \mathbf{F}$ – определитель градиента деформации, $\mathbf{1}$ – единичный тензор. Для замыкания связи между напряжениями и деформациями вводятся соотношения (3) (для каждой системы скольжения), связывающие скорость скольжения $\dot{\gamma}^\alpha$ и касательные напряжения τ^α .

В случае малых деформаций следствием (1) и (2) имеем

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p, \quad (8)$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha \frac{1}{2}(\mathbf{n}^\alpha \mathbf{l}^\alpha + \mathbf{l}^\alpha \mathbf{n}^\alpha). \quad (9)$$

Предполагается, что скорость накопления неупругой деформации определяется вкладом всех активных систем скольжения (для которых касательные напряжения τ^α превосходят некоторый порог).

Выражения (4) и (9) становятся более компактными при введении обозначения для тензора Шмида

$$\mathbf{P}^\alpha = \frac{1}{2}(\mathbf{n}^\alpha \mathbf{l}^\alpha + \mathbf{l}^\alpha \mathbf{n}^\alpha) = (\mathbf{n}^\alpha \mathbf{l}^\alpha)^{Sym} \quad (10)$$

и могут быть записаны в виде:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{P}^\alpha, \quad (11)$$

$$\tau^\alpha = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}^\alpha. \quad (12)$$

Определяющие уравнения линейно-упругого анизотропного материала имеют вид:

$$\boldsymbol{\sigma} = {}^4\mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^e, \quad (13)$$

где ${}^4\mathbf{D}$ – тензор упругих модулей четвертого ранга, число независимых констант и структура которого определяется группой симметрии материала. Для случая

кубической симметрии он определяется тремя независимыми константами.

Выбор конкретной формы выражения для скорости неупругих сдвиговых деформаций $\dot{\gamma}^\alpha$ зависит от класса рассматриваемых явлений (пластичность, вязкопластичность, вязкоупругость), а также от особенностей неупругого деформирования рассматриваемого монокристалла. В настоящей работе рассматриваются модели упругопластического деформирования. Для упругопластической модели скорости неупругих сдвиговых деформаций $\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\lambda}^\alpha \text{sign}(\tau_\alpha - X_\alpha)$ вычисляются на основе условия пластичности для α -й системы скольжения

$$f^\alpha = |\tau^\alpha - X^\alpha| - R^\alpha - \tau_0 = 0, \quad (14)$$

где $\dot{\lambda}^\alpha \geq 0$ – пластические множители, X^α – микронапряжения сдвига, характеризующие местоположение центра поверхности нагружения $f^\alpha = 0$, R^α – переменная, характеризующая изменение размера поверхности нагружения. В случае $f^\alpha < 0$ α -я система скольжения является неактивной. В этом случае принимается $\dot{\gamma}^\alpha = 0$.

Внутренние переменные состояния, характеризующие нелинейное изотропное и нелинейное кинематическое упрочнение, могут быть определены на основе уравнений [21]:

$$R^\alpha = Q \sum_{\beta=1}^N h^{\alpha\beta} r^\beta, \quad \dot{r}^\alpha = (1 - br^\alpha) \dot{\lambda}^\alpha, \quad (15a)$$

$$X^\alpha = Cx^\alpha, \quad \dot{x}^\alpha = [\text{sign}(\tau^\alpha - X^\alpha) - Dx^\alpha] \dot{\lambda}^\alpha, \quad (15b)$$

где $(\alpha = 1, \dots, N)$.

Учет перекрестного (латентного) упрочнения осуществляется путем рассмотрения взаимного влияния различных систем друг на друга, осуществляемого благодаря недиагональной структуре матрицы изотропного упрочнения $h^{\alpha\beta}$, задаваемой в виде [14; 36]:

$$h^{\alpha\beta} = H[q + (1-q)\delta_{\alpha\beta}]. \quad (16)$$

В уравнениях (14)–(16) τ_0, b, Q, q, H, C, D – константы материала, в общем случае допускающие зависимость от температуры, $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера.

Следствием (8), (13)–(16), может быть получена система нелинейных дифференциальных уравнений относительно $\dot{\lambda}^\alpha$. Например, в случае $D \neq 0, b \neq 0$ получаем следующую систему:

$$\sum_{\beta=1}^N [Qh_{\alpha\beta} e^{-b\lambda^\beta} + (\delta_{\alpha\beta} C e^{-D\lambda^\beta} + \mathbf{P}^\alpha \cdot \cdot \cdot \mathbf{D} \cdot \cdot \cdot \mathbf{P}^\beta \text{sign}(\tau^\alpha - X^\alpha)) \text{sign}(\tau^\beta - X^\beta)] \dot{\lambda}^\beta = \mathbf{D} \cdot \cdot \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}} \text{sign}(\tau^\alpha - X^\alpha). \quad (17)$$

В случае линейного кинематического упрочнения $R^\alpha \equiv 0, D = 0$ она вырождается к системе линейных уравнений:

$$\sum_{\beta=1}^N [\delta_{\alpha\beta} C + \mathbf{P}^\alpha \cdot \cdot \cdot \mathbf{D} \cdot \cdot \cdot \mathbf{P}^\beta \text{sign} \tau^\alpha \text{sign} \tau^\beta] \dot{\lambda}^\beta = \mathbf{D} \cdot \cdot \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}} \text{sign} \tau^\alpha. \quad (18)$$

В случае линейного изотропного упрочнения $X^\alpha \equiv 0, b = 0$ получаем следующую систему:

$$\sum_{\beta=1}^N [Qh_{\alpha\beta} + \mathbf{P}^\alpha \cdot \cdot \cdot \mathbf{D} \cdot \cdot \cdot \mathbf{P}^\beta \text{sign} \tau^\alpha \text{sign} \tau^\beta] \dot{\lambda}^\beta = \mathbf{D} \cdot \cdot \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}} \text{sign} \tau^\alpha. \quad (19)$$

При суммировании по β в формулах (15a, 17–19) учитываются только активные системы скольжения, для которых $f^\beta = 0$. Для неактивных систем скольжения с $f^\beta < 0$ принимается $\dot{\lambda}^\beta = 0$.

В случае чисто кинематического упрочнения в случае одноосного растяжения вдоль направления [001] для заданной истории изменения $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\epsilon}_{[001]} \boldsymbol{\epsilon}_{[001]} \boldsymbol{\sigma}_{[001][001]}$ пластические множители $\dot{\lambda}^\alpha$ вследствие (12), (14) и (15b) принимают следующий вид:

$$\dot{\lambda}^\alpha = \begin{cases} -\frac{1}{D} \ln \left[1 + \frac{D}{C} (\tau_0 - \tau^\alpha \text{sign}(\tau^\alpha - X^\alpha)) \right], & D \neq 0, \\ -\frac{1}{C} [\tau_0 - \tau^\alpha \text{sign}(\tau^\alpha - X^\alpha)], & D = 0. \end{cases} \quad (20)$$

Интегрирование (9) с учетом (8), (20) дает следующее выражение для осевых деформаций в случае $D \neq 0$:

$$\boldsymbol{\epsilon}_{[001][001]} = \begin{cases} \frac{\boldsymbol{\sigma}_{[001][001]}}{E_{[001]}}, & \boldsymbol{\sigma}_{[001][001]} \leq \sqrt{6}\tau_0, \\ \frac{\boldsymbol{\sigma}_{[001][001]}}{E_{[001]}} - \frac{8}{\sqrt{6}} \frac{1}{D} \times \\ \times \ln \left[1 + \frac{D}{C} \left(\tau_0 - \frac{\boldsymbol{\sigma}_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right) \right], & \boldsymbol{\sigma}_{[001][001]} \geq \sqrt{6}\tau_0. \end{cases} \quad (21)$$

В случае $D = 0$ получается билинейное соотношение между деформациями и напряжениями:

$$\boldsymbol{\epsilon}_{[001][001]} = \begin{cases} \frac{\boldsymbol{\sigma}_{[001][001]}}{E_{[001]}}, & \boldsymbol{\sigma}_{[001][001]} \leq \sqrt{6}\tau_0, \\ \frac{\boldsymbol{\sigma}_{[001][001]}}{E_{[001]}} - \frac{8}{\sqrt{6}} \frac{1}{C} \times \\ \times \left[\tau_0 - \frac{\boldsymbol{\sigma}_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right], & \boldsymbol{\sigma}_{[001][001]} \geq \sqrt{6}\tau_0. \end{cases} \quad (22)$$

Аналогично для случая чисто изотропного упрочнения следствием интегрирования (9) с учетом (8) и (15a) получаем:

$$\lambda^a = \begin{cases} -\frac{1}{b} \ln \left[1 + \frac{b}{QH(1+7q)} (\tau_0 - \tau^a \text{sign}(\tau^a)) \right]; & b \neq 0, \\ -\frac{1}{QH(1+7q)} (\tau_0 - \tau^a \text{sign}(\tau^a)); & b = 0. \end{cases} \quad (23)$$

Для случая $b \neq 0$ осевые деформации определяются выражением:

$$\varepsilon_{[001][001]} = \begin{cases} \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{[001]}}, & \sigma_{[001][001]} \leq \sqrt{6}\tau_0, \\ \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{[001]}} - \frac{8}{\sqrt{6}} \frac{1}{b} \times \\ \times \ln \left[1 + \frac{b}{QH(1+7q)} \times \right. \\ \left. \times \left(\tau_0 - \frac{\sigma_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right) \right], & \sigma_{[001][001]} \geq \sqrt{6}\tau_0. \end{cases} \quad (24)$$

При $b = 0$ устанавливается билинейная связь между деформациями и напряжениями:

$$\varepsilon_{[001][001]} = \begin{cases} \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{[001]}}, & \sigma_{[001][001]} \leq \sqrt{6}\tau_0, \\ \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{[001]}} - \frac{8}{\sqrt{6}} \frac{b}{QH(1+7q)} \times \\ \times \left(\tau_0 - \frac{\sigma_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right), & \sigma_{[001][001]} \geq \sqrt{6}\tau_0. \end{cases} \quad (25)$$

Различие между предсказаниями моделей изотропного и кинематического упрочнения наблюдается только при немонотонном (циклическом) нагружении. При монотонном нагружении обе модели материала приводят при соответствующем выборе констант к одинаковому результату, что следует из сравнения уравнений (19) и (21).

Уравнения (21), (22) и (24), (25) могут быть использованы для идентификации параметров модели (15) для октаэдрических систем скольжения на основе экспериментов по одноосному растяжению монокристаллических сплавов с ГЦК-решеткой вдоль направления [001] (при растяжении вдоль данного направления кубические системы скольжения не активны). Соответствующие параметры модели для кубических систем скольжения могут быть определены из опытов по одноосному растяжению вдоль направлений, отличных от [001], с учетом ранее найденных констант моделей для октаэдрических систем скольжения.

2. Элементарный представительный объем двухфазного монокристаллического материала

На микроуровне монокристаллические сплавы на никелевой основе представляет собой неидеальную периодическую двухфазную структуру (см. рис. 1, а),

поэтому возможно введение различных представительных объемов с различной степенью упрощения реальной ситуации. Возможность введения элементарного представительного объема (ЭПО) может быть реализована для материала со статически однородным распределением характеристик при учете сепарабельности масштабов неоднородностей. В этом случае возможно введение понятия наименьшего объема, содержащего априори всю статистическую информацию относительно распределения и морфологии неоднородностей материала. Свойства любого объема больших размеров можно получить последовательными переносами или дополнительными реализациями известных статистических характеристик.

В монокристаллических сплавах на никелевой основе частицы γ' -фазы образуют квазипериодическую трехмерную решетку. Соответственно, в таком случае в качестве ЭПО можно рассматривать единичное включение γ' -фазы, окруженное γ -матрицей, конечно-элементная (КЭ) модель которого представлена на рис. 4. На рис. 5 показаны представительные объемы с различными долями γ' -фазы, используемые в дальнейшем.

Отдельного внимания заслуживает вопрос об условии контакта между отдельными фазами. Значительный вклад во взаимное воздействие отдельных фаз друг на друга вносит взаимодействие дислокаций на границе их раздела. В ряде работ, например в [37], с целью учета взаимодействия дислокаций на границе фаз вводят в рассмотрение дополнительную третью фазу и соответствующий ей интерфейсный слой, другим распространенным подходом является добавление дополнительных слагаемых в уравнение для касательных напряжений τ^a [38]. Однако недостатком данных моделей является существенное увеличение числа их параметров, что ввиду недостаточного количества экспериментальных данных приводит к проблеме их идентификации. В данной работе принята гипотеза об идеальном контакте между отдельными фазами, предложенная в исследовании [39].

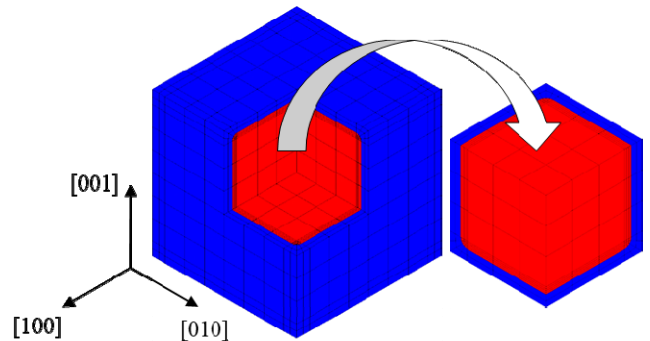


Рис. 4. Конечно-элементная модель ЭПО γ / γ' -микроструктуры монокристаллического сплава на никелевой основе (объемная доля γ' -фазы 70 %)

Fig. 4. Finite element models of RVE of γ / γ' microstructure of a nickel-based superalloy (volume fraction of the γ' phase is 70 %)

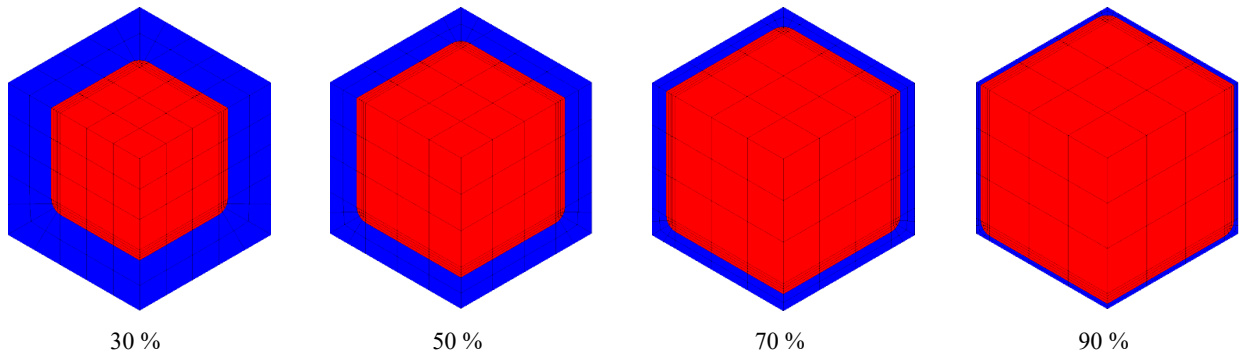


Рис. 5. Конечно-элементные модели ЭПО γ / γ' -микроструктуры монокристаллического сплава на никелевой основе с разной объемной долей γ' -фазы

Fig. 5. Finite element models of RVE of γ / γ' microstructure of a nickel-based superalloy with different volume fractions of γ' phase

3. Определение эффективных свойств двухфазного монокристаллического материала

3.1. Конечно-элементная гомогенизация

Для определения эффективных свойств монокристаллических сплавов с различной долей γ' рассматривалась задача КЭ-гомогенизации. В целях поиска оптимальной стратегии решения в расчетах для сравнения рассматривались три типа граничных условий (ГУ):

кинематические граничные условия

$$\mathbf{u}|_{S_u} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \cdot \mathbf{r}; \quad (26)$$

статические граничные условия

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{S_\sigma} = \mathbf{n} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}^*; \quad (27)$$

условия периодичности

$$\mathbf{u}|_{S_{u1}} = \mathbf{u}|_{S_{u2}} + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (28)$$

где \mathbf{u} – вектор перемещений, \mathbf{r} – радиус вектор, $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^*$ – заданный постоянный симметричный тензор, соответствующий различным деформируемым состояниям (осевые растяжения/сжатия и сдвиги), $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$ – заданный постоянный симметричный тензор, соответствующий различным напряженным состояниям (осевые растяжения/сжатия и сдвиги). Условие периодичности (28) может быть переписано в виде $\mathbf{u}|_{S_{u1}} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \cdot \mathbf{r} + \tilde{\mathbf{w}}$, где флуктуации $\tilde{\mathbf{w}}$ являются периодическими, то есть принимающими одинаковые значения на противоположных сторонах ЭПО. В этом случае вектор напряжений $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ принимает противоположные значения на противоположных сторонах ЭПО. Граничные условия (26)–(28) удовлетворяют условию макрооднородности Хилла $\overline{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$, что обеспечивает существование и единственность соответствующих краевых задач, а также равенство энергий при деформировании гомогенизованного и гетерогенного материала ЭПО.

Для определения гомогенизованного напряженно-деформированного состояния использовались осред-

ненные по представительному объему значения тензоров деформаций и напряжений, полученных в КЭ решении:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{V_{\text{эпо}}} \int_{V_{\text{эпо}}} \boldsymbol{\varepsilon} dV, \quad (29)$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V_{\text{эпо}}} \int_{V_{\text{эпо}}} \boldsymbol{\sigma} dV. \quad (30)$$

При решении задач гомогенизации нагрузка прикладывалась вдоль кристаллографического направления [001].

Диаграммы деформирования при растяжении вдоль направления [001] для отдельных компонент ЭПО взяты из литературы [37] и представлены на рис. 6. Упругие характеристики элементов ЭПО приведены в табл. 1 [23]. Параметры модели (15) для случаев изотропного и кинематического упрочнения представлены в табл. 2.

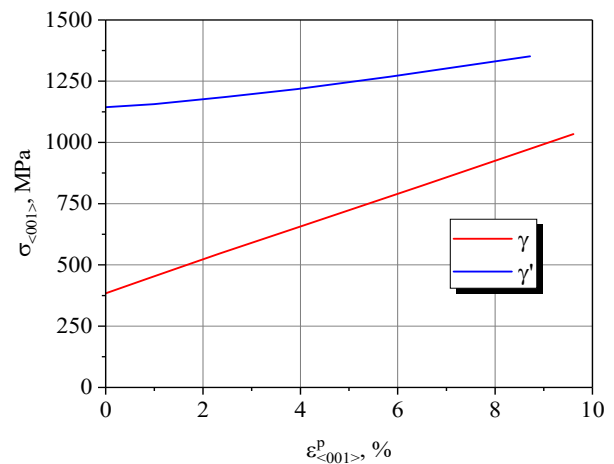


Рис. 6. Кривые деформирования γ - и γ' -фаз при растяжении вдоль направления $\langle 001 \rangle$ при $T = 650 \text{ }^\circ\text{C}$ [40]

Fig. 6. Stress-strain of γ and γ' phases under tension along the $\langle 001 \rangle$ direction at $T = 650 \text{ }^\circ\text{C}$ [40]

Расчеты выполнялись с использованием КЭ-программного комплекса PANTOCRATOR [41], обладающего возможностью получения КЭ-решения нелинейных краевых задач с использованием микроструктурных упруго-

пластических и упруговязкопластических моделей деформирования материала, а также встроенными средствами процедуры гомогенизации гетерогенных сред.

Таблица 1

Упругие характеристики элементов [23]

Table 1

Elastic characteristics of elements [23]

Параметр	γ -фаза	γ' -фаза
$E_{[001]}$, ГПа	84,3	95,1
$\nu_{[001][010]}$, [-]	0,4	0,4
$G_{[001][010]}$, ГПа	96,67	100,11

Таблица 2

Параметры упругопластических моделей (14)–(16)

Table 2

Parameters of elastic–plastic models (14)–(16)

Тип упрочнения	Параметр	γ -фаза	γ' -фаза
Кинематическое	$\sigma_{T[001]}$, МПа	375	1130
	C , МПа	10522	3656
	D , [-]	10	10
Изотропное	$\sigma_{T[001]}$, МПа	375	1144
	H , [-]	1	1
	q , [-]	0,7	0,7
	b , [-]	10	10
	Q , МПа	1780	600

Примечание: $\sigma_{T[001]} = \tau_0 \sqrt{6}$.

Для оценки точности численных решений был проведен анализ практической сходимости значений эффективных модулей упругости ЭПО с объемной долей γ' -фазы, равной 70 %, при увеличении числа КЭ и ячеек периодичности. Ввиду близости значений упругих свойств обеих фаз для всех типов граничных условий (26)–(28) удовлетворительная (статистически существенная) точность (достаточно близкой к асимптотическому (предельному) значению) достигается уже при использовании ЭПО, включающих только одну ячейку периодичности (см. рис. 4). Также для оценки влияния типа граничных условий построены эффективные диаграммы деформирования ЭПО. Установлено, что незначительные отличия эффективных кривых деформирования наблюдаются только в области малых пластических деформаций (см. рис. 7), что позволяет использовать любой из рассмотренных типов ГУ. В дальнейшем, при проведении расчетов, использовались ГУ периодичности (28).

С целью верификации произведено сравнение результатов КЭ-гомогенизации с экспериментальными данными для сплава CMSX-4 [42], для которого в исходном состоянии при температурах меньше 1000 °C доля γ' -фазы составляет около 70 % [43]. Сравнение диаграмм пластического деформирования представлено на рис. 8. При уровне деформаций ниже 5 % наблюдается хорошее совпадение с экспериментом, отклонение при больших деформациях вызвано инфинитезимальностью используемых моделей и может быть уменьшено учетом конечности деформаций.

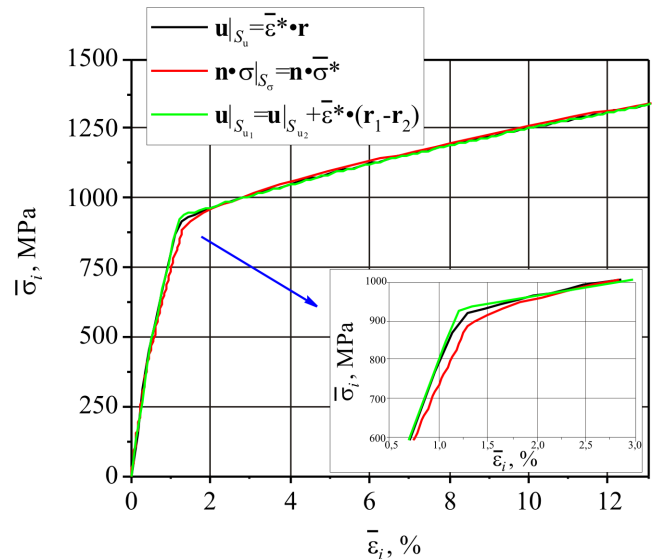


Рис. 7. Сравнение влияния различных типов граничных условий на диаграмму деформирования

Fig. 7. Comparison of the influence of different types of boundary conditions on the stress-strain curves

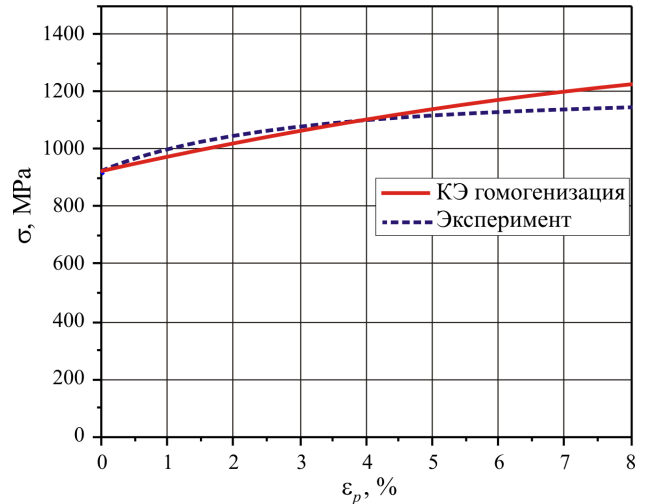


Рис. 8. Сравнение кривой пластического деформирования сплава CMSX-4 при 650 °C с результатами КЭ-гомогенизации

Fig. 8. Comparison of the plastic deformation curve of the CMSX-4 alloy at 650 °C with the results of FE homogenization

3.2. Реологические (структурные) модели монокристаллического материала

Альтернативным подходом к определению эффективных свойств монокристаллических сплавов является их оценка при помощи реологических (структурных) моделей [44–46]. Простейшую оценку кривых деформирования монокристаллических сплавов дает использование подходов Рейса [47] (последовательное соединение элементов) и Фойгта [48] (параллельное соединение элементов) (рис. 9), опирающиеся на предположения о равенстве напряжений и деформаций в отдельных структурных элементах соответственно. Каждый из реологических (структурных) элементов для γ - или γ' -фазы является упругопластическим.

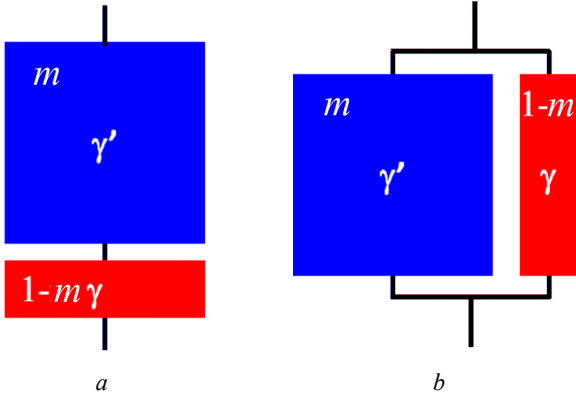


Рис. 9. Реологические (структурные) модели монокристаллических сплавов на никелевой основе: а – модель Рейса, б – модель Фойгта

Fig. 9. Rheological (structural) models of nickel-based single-crystal alloys: a) Reuss model, b) Voigt model

Использование последовательного соединения реологических (структурных) элементов (модель Рейса, рис. 10, а) позволяет записать выражение для скоростей деформации в следующем виде:

$$\dot{\epsilon} = (1 - m)\dot{\epsilon}_\gamma + m\dot{\epsilon}_{\gamma'}, \quad (31)$$

а скорость неупругих деформаций определяется следующим образом [35; 49]:

$$\dot{\epsilon}^p = (1 - m) \sum_{\alpha=1}^{N_\gamma} \dot{\gamma}_\gamma^\alpha \mathbf{P}^\alpha + m \sum_{\alpha=1}^{N_{\gamma'}} \dot{\gamma}_{\gamma'}^\alpha \mathbf{P}^\alpha, \quad (32)$$

где $m \in [0, 1]$ – объемная доля γ' -фазы, N_γ и $N_{\gamma'}$ – число активных систем скольжения в структурных элементах, соответствующих γ - и γ' -фазе соответственно. В данной работе фазовые переходы не рассматриваются, поэтому m является константой.

Интегрирование (32) с учетом формул (31), (21) в случае чисто кинематического упрочнения при нагружении вдоль направления [001] дает следующее выражение для деформаций (для случая $D_\gamma \neq 0, D_{\gamma'} \neq 0$):

$$\epsilon_{[001][001]} = \begin{cases} \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{\text{Reus}[001]}}; \sigma_{[001][001]} \leq \sqrt{6}\tau_{0_\gamma}, \\ \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{\text{Reus}[001]}} - (1-m) \frac{8}{\sqrt{6}} \frac{1}{D_\gamma} \times \\ \times \ln \left[1 + \frac{D_\gamma}{C_\gamma} \left(\tau_{0_\gamma} - \frac{\sigma_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right) \right]; \sqrt{6}\tau_{0_\gamma} \leq \sigma_{[001][001]} \leq \sqrt{6}\tau_{0_{\gamma'}}, \\ \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{\text{Reus}[001]}} - \frac{8}{\sqrt{6}} \left\{ \frac{(1-m)}{D_\gamma} \ln \left[1 + \frac{D_\gamma}{C_\gamma} \left(\tau_{0_\gamma} - \frac{\sigma_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right) \right] \right\} + \\ + \frac{m}{D_{\gamma'}} \ln \left[1 + \frac{D_{\gamma'}}{C_{\gamma'}} \left(\tau_{0_{\gamma'}} - \frac{\sigma_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right) \right]; \sigma_{[001][001]} \geq \sqrt{6}\tau_{0_{\gamma'}}. \end{cases} \quad (33)$$

где $E_{\text{Reus}[001]} = \frac{E_{\gamma[001]}E_{\gamma'[001]}}{(1-m)E_{\gamma[001]} + mE_{\gamma'[001]}}$.

Аналогично для случая чисто изотропного упрочнения (при $b_\gamma \neq 0, b_{\gamma'} \neq 0$):

$$\epsilon_{[001][001]} = \begin{cases} \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{\text{Reus}[001]}}; \sigma_{[001][001]} \leq \sqrt{6}\tau_{0_\gamma}, \\ \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{\text{Reus}[001]}} - \frac{8}{\sqrt{6}} \frac{(1-m)}{b_\gamma} \times \\ \times \ln \left[1 + \frac{b_\gamma \left(\tau_{0_\gamma} - \frac{\sigma_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right)}{Q_\gamma H_\gamma (1+7q_\gamma)} \right]; \\ \sqrt{6}\tau_{0_\gamma} \leq \sigma_{[001][001]} \leq \sqrt{6}\tau_{0_{\gamma'}}, \\ \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{\text{Reus}[001]}} - \frac{8}{\sqrt{6}} \left\{ \frac{(1-m)}{b_\gamma} \ln \left[1 + \frac{b_\gamma \left(\tau_{0_\gamma} - \frac{\sigma_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right)}{Q_\gamma H_\gamma (1+7q_\gamma)} \right] \right\} + \\ + \frac{m}{b_{\gamma'}} \ln \left[1 + \frac{b_{\gamma'} \left(\tau_{0_{\gamma'}} - \frac{\sigma_{[001][001]}}{\sqrt{6}} \right)}{Q_{\gamma'} H_{\gamma'} (1+7q_{\gamma'})} \right]; \\ \sigma_{[001][001]} \geq \sqrt{6}\tau_{0_{\gamma'}}. \end{cases} \quad (34)$$

Модель Фойгта (параллельное соединение структурных элементов, рис. 10, б) позволяет получить следующее выражение для тензора напряжений:

$$\sigma = (1 - m)\sigma_\gamma + m\sigma_{\gamma'}. \quad (35)$$

Ввиду трансцендентности уравнений (21), (22) и (24), (25) относительно $\sigma_{[001]}$, выражения для напряжений в отдельных структурных элементах не могут быть получены аналитически через деформацию. В связи с этим разрешение данных уравнений было выполнено численно, при помощи метода Ньютона.

Кроме того, приближенное решение данных уравнений может быть получено путем линеаризации выражений (20), (23). Действительно, при условии $\frac{D}{C} \left| \tau_0 - \tau^\alpha \text{sign}(\tau^\alpha - X^\alpha) \right| \ll 1$ для случая кинематического упрочнения и $\frac{b}{QH(1+7q)} \left| \tau_0 - \tau^\alpha \text{sign}(\tau^\alpha - X^\alpha) \right| \ll 1$ для изотропного упрочнения (20) и (23) могут быть переписаны в виде:

$$\lambda^\alpha = -\frac{1}{C} \left(\tau_0 - \tau^\alpha \text{sign}(\tau^\alpha - X^\alpha) \right), \quad (36)$$

$$\lambda^a = -\frac{1}{QH(1+7q)} \left(\tau_0 - \tau^\alpha \text{sign}(\tau^\alpha) \right). \quad (37)$$

Уравнение (35) совместно с выражениями (11), (36) и (37) при монотонном нагружении вдоль направления [001] позволяет получить следующее выражение для деформаций:

Таблица 3

Сравнение результатов расчета напряжений при различных уровнях пластических деформаций с использованием различных методов с экспериментальными данными

Table 3

Comparison of the results of stress calculation at different levels of plastic deformations using various methods with experimental data

$\varepsilon_{[001][001]}^p, \%$	$\sigma_{[001][001]}, \text{ МПа}$				
	Эксперимент CMSX-4[41]	КЭ гомогениз.	Рейс	Фойгт	Фойгт (линеаризация)
0,2	950	924	426	920	920
1	1005	970	627	955	955
5	1115	1332	1180	1106	1122

$$\varepsilon_{[001][001]} = \begin{cases} \frac{\sigma_{[001][001]}}{(1-m)E_{\gamma[001]} + mE_{\gamma'[001]}}; \\ \sigma_{\gamma} \leq \sqrt{6}\tau_{0\gamma}, \\ \frac{\sigma_{[001][001]} - (1-m)\frac{8\tau_{0\gamma}}{\sqrt{6}C_{\gamma}}E_{T_{\gamma}[001]}}{(1-m)E_{T_{\gamma}[001]} + mE_{T_{\gamma}'[001]}}; \\ (\sigma_{\gamma} \geq \sqrt{6}\tau_{0\gamma}) \& (\sigma_{\gamma'} \leq \sqrt{6}\tau_{0\gamma'}) \\ \frac{\sigma_{[001][001]} - \frac{8}{\sqrt{6}C} \left[m\frac{\tau_{0\gamma'}}{C_{\gamma'}}E_{T_{\gamma'}} + (1-m)\frac{\tau_{0\gamma}}{C_{\gamma}}E_{T_{\gamma}[001]} \right]}{(1-m)E_{T_{\gamma}[001]} + mE_{T_{\gamma}'[001]}}; \\ \sigma_{\gamma'} \geq \sqrt{6}\tau_{0\gamma'}, \end{cases} \quad (38)$$

где для случая кинематического упрочнения:

$$E_{T_{\gamma}[001]} = \frac{3C_{\gamma}E_{\gamma[001]}}{3C_{\gamma} + 4E_{\gamma[001]}}, \quad E_{T_{\gamma}'[001]} = \frac{3C_{\gamma'}E_{\gamma'[001]}}{3C_{\gamma'} + 4E_{\gamma'[001]}}$$

ного упрочнения: $E_{T_{\gamma}} = \frac{3Q_{\gamma}H_{\gamma}(1+7q_{\gamma})E_{\gamma[001]}}{3Q_{\gamma}H_{\gamma}(1+7q_{\gamma}) + 4E_{\gamma[001]}}$,

$$E_{T_{\gamma'}} = \frac{3Q_{\gamma'}H_{\gamma'}(1+7q_{\gamma'})E_{\gamma'[001]}}{3Q_{\gamma'}H_{\gamma'}(1+7q_{\gamma'}) + 4E_{\gamma'[001]}}$$

γ - и γ' -фазе соответственно, определяемые на основе (22) или (25).

На рис. 10 представлено сравнение кривых деформирования, полученных при помощи разных реологических моделей с результатами КЭ-гомогенизации. Наилучшее совпадение демонстрирует модель Фойгта, удовлетворительное совпадение показывает модель Фойгта с линейризацией определяющих соотношений для отдельных структурных элементов (38). Наихудшее совпадение демонстрирует модель Рейса (33), (34).

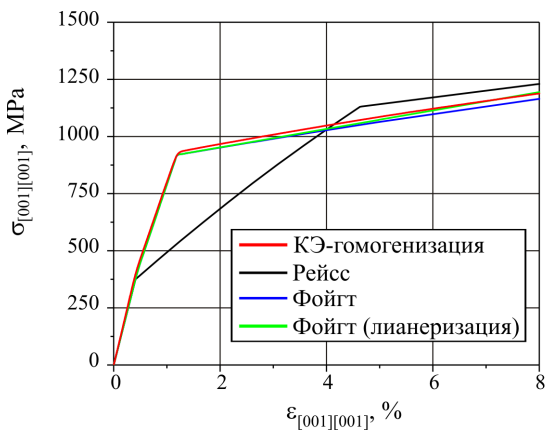


Рис. 10. Сравнение кривых деформирования для двухфазного монокристалла, полученных при помощи различных реологических моделей, с результатами КЭ-гомогенизации

Fig. 10. Comparison of strain-stress curves for a two-phase single crystal obtained with the use of different rheological with the FE homogenization results

Результаты сравнения напряжений при различных уровнях пластических деформаций с экспериментальными значениями для всех рассмотренных подходов к гомогенизации представлены в табл. 3.

5. Идентификация параметров микромеханической модели на макроуровне для разных долей γ' -фазы

Предложенные выше подходы могут служить основой для многоуровневого конечно-элементного моделирования (КЭ²-метод [50]) процессов неупругого деформирования монокристаллических сплавов на никелевой основе, позволяющего напрямую учесть изменение объемной доли γ' -фазы в процессе эксплуатации деталей, изготовленных из рассматриваемого класса материалов. Уравнения изменения объемной доли γ' могут быть получены как на основе экспериментальных данных [43] (феноменологические модели), так и, например, путем решения задачи диффузии [51]–[53].

Однако данный подход неминуемо сопряжен со значительными вычислительными затратами. В качестве альтернативы может быть применен следующий двухступенчатый подход:

- для дискретного набора значений объемной доли γ' -фазы либо при помощи метода КЭ-гомогенизации, либо с применением реологических моделей определяются кривые деформирования;

- затем для каждой полученной кривой, соответствующей своему значению объемной доли γ' -фазы, в предположении, что она соответствует гомогенному материалу на макроуровне, определяются константы микромеханических моделей (8)–(16) путем аппроксимации данных кривых уравнениями (21), (22) или (24), (25).

Например, в случае кинематического упрочнения в предположении $D \neq 0$ для определения соответствующих констант следует рассмотреть минимум следующего функционала для каждой полученной кривой деформирования:

$$L(m) = \sum_{k=1}^{N_p} \left[\varepsilon_k^p(m) + \frac{8}{\sqrt{6}} \frac{1}{D_m} \times \times \ln \left[1 + \frac{D_m}{C_m} \left(\tau_{0m} - \frac{\sigma_k(m)}{\sqrt{6}} \right) \right] \right]^2 \rightarrow \min. \quad (39)$$

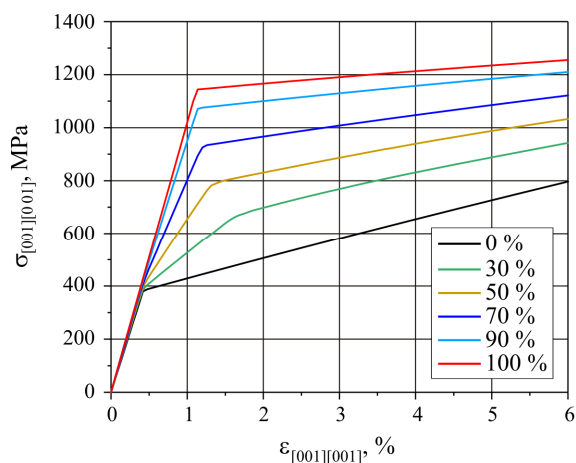


Рис. 11. Кривые деформирования монокристаллического сплава на никелевой основе для различных значений доли γ' -фазы, полученные на основе КЭ-гомогенизации

Fig. 11. Stress-strain curves of a nickel-based single-crystal alloy for various values of the fraction of the γ' phase, obtained based on FE homogenization results

Таблица 4

Формулы (14)–(16) для различных объемных долей γ' -фазы m

Table 4

Formulas (14)–(16) for different volume fractions of γ' phase m

Тип упрочнения	Параметр	Объемная доля γ' -фазы			
		30 %	50 %	70 %	90 %
Кинематическое	$\sigma_{T[001]}$, МПа	607,6	762,5	924,7	1074,4
	C , МПа	9245,8	7570,7	5761,9	4177,3
	D , [-]	10,2	11,1	12,1	14,8
Изотропное	$\sigma_{T[001]}$, МПа	607,6	762,4	924,6	1074,4
	H , [-]	1	1	1	1
	q , [-]	0,7	0,7	0,7	0,7
	b , [-]	10,2	11,1	12,0	14,7
	Q , [-]	1557,5	1279,8	969,6	704,1

Таким образом, может быть получена зависимость параметров макромеханической модели от объемной доли γ' -фазы. К недостаткам данного подхода можно

Библиографический список

1. Nickel base single crystals across length scales / L. Naze, V. Maurel, G. Eggeler, J. Cormier, G. Cailletaud. – Elsevier, 2021. – 610 p.
2. Pollock T.M., Tin S. Nickel-based superalloys for advanced turbine engines: chemistry, microstructure and properties // Journal of propulsion and power. – 2006. – Vol. 22, no. 2. – P. 361–374. DOI: <https://doi.org/10.2514/1.18239>
3. Каблов Е.Н., Толорайя В.Н., Орехов Н.Г. Монокристаллические никелевые ренийсодержащие сплавы для турбинных лопаток ГТД // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2002. – № 7. – С. 7–11.
4. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов / Р.Е. Шалин, И.Л. Светлов, Е.Б. Качанов, В.Н. Толорайя, О.С. Гаврилин. – М.: Машиностроение, 1997. – 333 с.

отнести неминуемую погрешность, которая вносится при аппроксимации кривых.

Полученные путем КЭ-гомогенизации кривые деформирования монокристаллического сплава для различных объемных долей γ' -фазы представлены на рис. 11. Результаты идентификации параметров микромеханических моделей (8)–(16) на макроуровне приведены в табл. 4.

Заключение

Предложены различные микромеханически мотивированные модели упругопластического деформирования монокристаллических сплавов, учитывающие наличие микроструктуры и изменение долей отдельных ее фаз. Рассмотрены два подхода анализа неупругого поведения: (i) численный на основе метода конечно-элементной гомогенизации для двухуровневой модели двухфазного монокристаллического материала с учетом изменения γ - γ' -микроструктуры сплава и (ii) аналитические оценки, используемые в механике композитов, получаемые в предположении равенства напряжений или деформаций в фазах.

Верификация моделей на основе экспериментальных кривых деформирования сплава CMSX-4 показала, что наилучшее соответствие дает метод конечно-элементной гомогенизации, несколько худшее соответствие демонстрируют аналитические оценки с использованием структурных моделей, основанных на подходе Фойгта. Аналитическая оценка по Рейсу продемонстрировала наибольшее расхождение с экспериментальными данными.

Предложены методы идентификации параметров разработанной двухуровневой модели на макроуровне для разных долей γ' -фазы.

Разработанные подходы могут быть использованы при проведении конечно-элементных расчетов охлаждаемых монокристаллических лопаток современных ГТУ при сложном непропорциональном комбинированном термомеханическом воздействии, учитывающих изменение фазового состава при длительной эксплуатации.

5. Каблов Е.Н., Петрушин Н.В., Елютин Е.С. Монокристаллические жаропрочные сплавы для газотурбинных двигателей // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2011. – № 2. – С. 38–52.

6. Семенов А.С., Беляев М.О., Грищенко А.И. Моделирование процесса возникновения овальности поперечного сечения образцов из монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов при растяжении // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2015. – №. 2. – P. 153–177. DOI: <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2017.2.09>

7. Расчетное определение ресурса рабочих и направляющих лопаток ГТУ. Часть 2. Монокристаллические материалы / Л.Б. Гецов [и др.] // Газотурбинные технологии. – 2011. – № 8. – С. 18–25.

8. Методика определения длительной прочности охлаждаемых лопаток из монокристаллических жаропрочных сплавов / Л.Б. Гецов [и др.] // Теплоэнергетика. – 2017. – №. 4. – P. 48–56. DOI: <https://doi.org/10.1134/S004036361704004X>
9. Конечно-элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин часть 2. Результаты расчетов / А.С. Семенов [и др.] // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. – 2019. – Т. 23, № 2.
10. Meric L., Poubanne P., Cailletaud G. Single crystal modelling for structural calculations: Part I – Model presentation // *Journal of Mechanical Design*. – 1991. – Vol. 113. – P. 162–170.
11. Конечно-элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин часть 1. Модели материала, критерии разрушения, идентификация параметров / А.С. Семенов [и др.] // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. – 2019. – Т. 23, №. 1.
12. Сопrotивление деформированию и разрушению монокристаллических жаропрочных сплавов при статическом и циклическом нагружении / А.С. Семёнов [и др.] // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета им. академика С.П. Королёва (национального исследовательского университета). – 2014. – №. 5–3 (47). – С. 70–79.
13. Семенов А.С. Идентификация параметров анизотропии феноменологического критерия пластичности монокристаллов на основе микромеханической модели // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. – 2014. – Т. 194, № 2. – С. 15–29.
14. Труссов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Издательство СО РАН, 2019. – 605 с.
15. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры / П.В. Труссов [и др.] // Физическая мезомеханика. – 2012. – Vol. 15, №. 1. – С. 33–56. DOI: <https://doi.org/10.24411/1683-805X-2012-00007>
16. Micromorphic approach to crystal plasticity and phase transformation / S. Forest [et al.] // *Plasticity and beyond*. – Springer, Vienna, 2014. – P. 131–198.
17. Asaro R.J., Rice J.R. Strain localization in ductile single crystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1977. – Vol. 25, no. 5. – P. 309–338. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(77\)90001-1](https://doi.org/10.1016/0022-5096(77)90001-1)
18. Asaro R.J. Crystal plasticity // *J. Appl. Mech.* – 1983. – Vol. 50. – P. 921–934.
19. Peirce D., Asaro R.J., Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids // *Acta metallurgica*. – 1983. – Vol. 31, no. 12. – P. 1951–1976. DOI: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(83\)90014-7](https://doi.org/10.1016/0001-6160(83)90014-7)
20. Cailletaud G. A micromechanical approach to inelastic behavior of metals // *International Journal of Plasticity*. – 1992. – Vol. 8, no. 1. – P. 55–73. DOI: [https://doi.org/10.1016/0749-6419\(92\)90038-E](https://doi.org/10.1016/0749-6419(92)90038-E)
21. Non-linear mechanics of materials / J. Besson [et al.]. – Springer Science & Business Media, 2009.
22. On the design of single crystal turbine blades / G. Cailletaud [et al.] // *Metallurgical Research & Technology*. – 2003. – Vol. 100, no. 2. – P. 165–172. DOI: <https://doi.org/10.1051/metal:2003137>
23. Busso E.P., Meissonnier F.T., O'dowd N.P. Gradient-dependent deformation of two-phase single crystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2000. – Vol. 48. – P. 2333–2361. DOI: [https://doi.org/10.1016/s0022-5096\(00\)00006-5](https://doi.org/10.1016/s0022-5096(00)00006-5)
24. Mandel J. Généralisation de la théorie de plasticité de WT Koiter // *International Journal of Solids and structures*. – 1965. – Vol. 1, no. 3. – P. 273–295.
25. Modeling and experiments on the indentation deformation and recrystallization of a single-crystal nickel-base superalloy / C. Zambaldi, F. Roters, D. Raabe, & U. Glatzel // *Materials Science and Engineering A-structural Materials Properties Microstructure and Processing*. – Vol. 454 (4). – P. 33–440.
26. Hill R. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1966. – Vol. 14, no. 2. – P. 95–102. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(66\)90040-8](https://doi.org/10.1016/0022-5096(66)90040-8)
27. Hill R., Rice J.R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1972. – Vol. 20, no. 6. – P. 401–41. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(72\)90017-8](https://doi.org/10.1016/0022-5096(72)90017-8)
28. Grishchenko A.I., Semenov A.S., Getsov L.B. Modeling inelastic deformation of single crystal superalloys with account of γ/γ' phases evolution // *Materials Physics and Mechanics*. – 2015. – Vol. 24, no. 3. – P. 325–330.
29. Cormier J., Cailletaud G. Constitutive modeling of the creep behavior of single crystal superalloys under non-isothermal conditions inducing phase transformations // *Materials Science and Engineering: A*. – 2010. – Vol. 527, no. 23. – P. 6300–6312. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.MSEA.2010.06.023>
30. Guo Z., Huang D., Yan X. Physics-based modeling of γ/γ' microstructure evolution and creep constitutive relation for single crystal superalloy // *International Journal of Plasticity*. – 2021. – Vol. 137. – P. 102916. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102916>
31. The role of $\langle 112 \rangle \{111\}$ slip in the initial plastic deformation of Ni-base superalloys at room temperature / C.X. Dang [et al.] // *Materials Characterization*. – 2020. – Vol. 170. – P. 110648. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2020.110648>
32. Mechanical twinning in Ni-based single crystal superalloys during multiaxial creep at 1050 °C / J.B. Le Graverend [et al.] // *Materials Science and Engineering: A*. – 2018. – Vol. 722. – P. 76–87. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.02.086>
33. On the microtwinning mechanism in a single crystal superalloy / D. Barba [et al.] // *Acta Materialia*. – 2017. – Vol. 135. – P. 314–329. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.05.072>
34. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1972. – 408 с.
35. Gupta S., Bronkhorst C.A. Crystal plasticity model for single crystal Ni-based superalloys: Capturing orientation and temperature dependence of flow stress // *International Journal of Plasticity*. – 2021. – Vol. 137. – P. 102896. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102896>
36. Kocks U.F., Brown T.J. Latent hardening in aluminum // *Acta Metallurgica*. – 1966. – Vol. 14, no. 2. – P. 87–98. DOI: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(66\)90290-2](https://doi.org/10.1016/0001-6160(66)90290-2)
37. Tinga T., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Incorporating strain gradient effects in a multiscale constitutive framework for nickel-base superalloys // *Philosophical Magazine*. – 2008. – Vol. 88. – P. 30–32. – P. 3793–3825. DOI: <https://doi.org/10.1080/14786430802337089>
38. Ghosh S., Keshavarz S., Weber G. Computational Multi-scale Modeling of Nickel-Based Superalloys Containing Gamma-Gamma' Precipitates // Altenbach, H., Brüning, M. (eds) *Inelastic Behavior of Materials and Structures Under Monotonic and Cyclic Loading*. *Advanced Structured Materials*. – 2015. – Vol. 57. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-14660-7_5

39. Nouailhas D., Cailletaud G. Finite element analysis of the mechanical behavior of two-phase single-crystal superalloys // *Scripta Materialia*. – 1996. – Vol. 34. – P. 565–571. DOI: [https://doi.org/10.1016/1359-6462\(95\)00547-1](https://doi.org/10.1016/1359-6462(95)00547-1)

40. Estevez R., Hoinard G., Franciosi P. Hardening anisotropy of γ/γ' superalloy single crystals-II. Numerical analysis of heterogeneity effects // *Acta materialia*. – 1997. – Vol. 45, no. 4. – P. 1567–1584. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(96\)00265-0](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(96)00265-0)

41. Семенов А.С. PANTOCRATOR – конечно-элементный программный комплекс, ориентированный на решение нелинейных задач механики // *Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности констр. и методы их решения: труды V Межд. конф.* – СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003. – С. 466–480.

42. Microstructure and mechanical properties of CMSX-4 single crystals prepared by additive manufacturing / C. Körner [et al.] // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2018. – Vol. 49, no. 9. – P. 3781–3792. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11661-018-4762-5>

43. Serin K., Göbenli G., Eggeler G. On the influence of stress state, stress level and temperature on γ -channel widening in the single crystal superalloy CMSX-4 // *Materials Science and Engineering: A*. – 2004. – Vol. 387. – P. 133–137. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2004.01.114>

44. Рейнер М. Реология: пер. с англ. – М.: Наука, 1965. – 224 с.

45. Пальмов В.А. Нелинейная механика деформируемых тел. – СПб.: Изд-в СПбГПУ, 2014. – 792 с.

46. Гохфельд Д.А., Садаков О.С. Пластичность и ползучесть элементов конструкций при повторных нагружениях. – М.: Машиностроение, 1984. – 256 с.

References

1. Naze L., Maurel V., Eggeler G., Cormier J., Cailletaud G. Nickel base single crystals across length scales, *Elsevier*, 2021. 610 p.

2. Pollock T. M., Tin S. Nickel-based superalloys for advanced turbine engines: chemistry, microstructure and properties. *Journal of propulsion and power*, 2006, vol. 22, no. 2, pp. 361–374. DOI: 10.2514/1.18239

3. Kablov E.N., Toloraiya V.N., Orekhov N.G. Monokristallicheskie nikelovyie renii` soderzhashchie splavy dlia turbinnnykh lopatok GTD [Single crystal rhenium-containing nickel alloys for turbine engine blades]. *Metallovedenie i termicheskaiia obrabotka metallov*. 2002. no. 7. Pp. 7–11.

4. Shalin R.E., Svetlov I.L., Kachanov E.B., Toloraiia V.N., Gavrilin O.S. Monokristally nikelovykh zharoprochnykh splavov [Single crystals of nickel based superalloys]. *Moscow, Mashinostroenie*, 1997, 333 p.

5. Kablov E.N., Petrushin N.V., Eliutin E.S. Monokristallicheskie zharoprochnye splavy dlia gazoturbinnnykh dvigatelei [Single-crystal superalloys for gas turbine engines]. *Vestnik Moskovskogo gosud. tekhnicheskogo universiteta im. N.E. Bauman. Seriiia «Mashinostroenie»*, 2011, no. SP2, pp. 38–52.

6. Semenov A.S., Beliaev M.O., Grishchenko A.I. Modelirovanie protessa vzniknoveniia oval`nosti poperechnogo secheniia obratciov iz monokristallicheskikh zharoprochnykh nikelovykh splavov pri rastiazhenii [Modeling of cross-section ovality of single crystal nickel-based superalloy samples under tension]. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2017, no. 2, pp. 153–177. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.2.09

7. Getsov L.B., Mikhaylov V.Ye., Kolotnikov M. Ye., Nozhnitskiy Yu.A., Solomonovich B.B., Megerramova L.A. Raschetnoye opredeleniye resursa rabochikh i napravlyayushchikh lopatok

47. Reuß A. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle // *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*. – 1929. – Vol. 9, no. 1. – P. 49–58. DOI: <https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104>

48. Voigt W. Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper // *Annalen der physik*. – 1889. – Vol. 274, no. 12. – P. 573–587. DOI: <https://doi.org/10.1051/JPHYSTAP:018900090020100>

49. Estrada Rodas E.A., Gorgannejad S., Neu R.W. Creep-fatigue behaviour of single-crystal Ni-base superalloy CMSX-8 // *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*. – 2019. – Vol. 42, no. 9. – P. 2155–2171. DOI: <https://doi.org/10.1002/9781119075646.ch71Citations>

50. Schröder J. A numerical two-scale homogenization scheme: the FE 2-method // *Plasticity and beyond*. – Springer, Vienna, 2014. – P. 1–64.

51. Veron M., Brechet Y., Louchet F. Directional coarsening of Ni-based superalloys: Computer simulation at the mesoscopic level // *Acta Materialia*. – 1996. – Vol. 44, №. 9. – P. 3633–3641. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(97\)00165-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(97)00165-6)

52. Svoboda J., Lukas P. Modelling of kinetics of directional coarsening in Ni-superalloys // *Acta materialia*. – 1996. – Vol. 44, no. 6. – P. 2557–2565. DOI: [https://doi.org/10.1016/1359-6454\(95\)00349-5](https://doi.org/10.1016/1359-6454(95)00349-5)

53. Louchet F., Hazotte A. A model for low stress cross-diffusional creep and directional coarsening of superalloys // *Scripta materialia*. – 1997. – Vol. 37, no. 5. – P. 589–597. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(97\)00165-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(97)00165-6)

GTU. Ch. 2. Monokristallicheskiye materialy [Computational definition of the resource of working and guide blades of gas turbines. Part 2. Monocrystalline materials], *Gazoturbinnnyie tekhnologii*, 2011, no. 8, pp. 18–25.

8. Getsov L.B., Semenov A.S., Besschetnov V.A., Grishchenko A.I., Semenov S.G., Long-term strength determination for cooled blades made of monocrystalline superalloys. *Thermal Engineering*, 2017. no. 64, pp. 280–287. DOI: 10.1134/S004036361704004X

9. Semenov A.S., Grishchenko A.I., Kolotnikov M. Ye., Getsov L.B. Konechno-elementnyi analiz termotciclicheskoi prochnosti lopatok gazovykh turbin chast` 2. Rezultaty raschetov / [Finite-element analysis of thermal fatigue of gas turbine blades. Part 2. Results of computations]. *Vestnyk Ufimskogo gosudarstvennogo aviatcionnogo tekhnicheskogo universiteta*, 2019, vol. 23, no. 2.

10. L. Meric, P. Poubanne, and G. Cailletaud. Single crystal modelling for structural calculations: Part I – Model presentation. *Journal of Mechanical Design*, 1991. V. 113, pp. 162–170.

11. Semenov A.S., Grishchenko A.I., Kolotnikov M. Ye., Getsov L.B. Konechno-elementnyi analiz termotciclicheskoi prochnosti lopatok gazovykh turbin chast` 1. Modeli materiala, kriterii razrusheniia, identifikaciia parametrov / [Finite-element analysis of thermal fatigue of gas turbine blades. Part 1. Material models, fracture criteria, parameter identification]. *Vestnyk Ufimskogo gosudarstvennogo aviatcionnogo tekhnicheskogo universiteta*, 2019, vol. 23, no. 1.

12. Semenov A.S., Getsov L.B., Semenov S.G., Grishchenko A.I. Soprotivlenie deformirovaniu i razrusheniui monokristallicheskikh zharoprochnykh splavov pri staticheskom i tsiklicheskom

nagruzenii [Deformation and fracture of single-crystal superalloys under static and cyclic loading]. *Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo universiteta im. S.P. Koroleva*. 2014, vol. 47, no. 5–3, pp. 66–75.

13. Semenov A.S. Identifikatsiia parametrov anizotropii fenomenologicheskogo kriteriia plastichnosti dlia monokristallov na osnove mikromekhanicheskoi modeli [Identification of anisotropy parameters of phenomenological plasticity criterion for single crystals on the basis of micromechanical model]. *Nauchno-tekhnicheskie vedomosti S.-Peterburgskogo gosudarstvennogo politekhnicheskogo universiteta. Fiz.-mat. nauki*. 2014. vol. 194, no. 2, pp. 15–29.

14. Trusov, P.V. and Shveikin, A.I. Mnogourovnevye modeli mono- i polikristallicheskikh materialov: teoriia, algoritmy, primery primeniia [Multilevel Models of Mono- and Polycrystalline Materials: Theory, Algorithms, Examples of Application]. *Novosibirsk, Russia: Publishing House of the SB RAS*, 2019. 605 p.

15. Trusov P. V., Shveykin A. I. Multilevel physical models of single- and polycrystals. Statistical models. *Phys. Mesomech*, 2013, vol. 16, no. 1, pp. 23–33.

16. Micromorphic approach to crystal plasticity and phase transformation / Forest S. [et al.]. *Plasticity and beyond*, Springer, Vienna, 2014, pp. 131–198.

17. Asaro R. J., Rice J. R. Strain localization in ductile single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1977, vol. 25, no. 5, pp. 309–338. DOI: 10.1016/0022-5096(77)90001-1

18. Asaro R.J. Crystal plasticity. *J. Appl. Mech.* 1983. vol. 50. P. 921–934.

19. Peirce D., Asaro R.J., Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta metallurgica*, 1983, vol. 31, no. 12, pp. 1951–1976. DOI: 10.1016/0001-6160(83)90014-7

20. Cailletaud G. A micromechanical approach to inelastic behavior of metals. *International Journal of Plasticity*, 1992, vol. 8, no. 1, pp. 55–73. DOI: 10.1016/0749-6419(92)90038-E

21. Besson J. et al. *Non-linear mechanics of materials*, Springer Science & Business Media, 2009.

22. On the design of single crystal turbine blades / Cailletaud G. [et al.]. *Metallurgical Research & Technology*, 2003, vol. 100, no. 2, pp. 165–172. DOI: 10.1051/metal:2003137

23. Busso E. P., Meissonnier F. T., O'dowd N. P. Gradient-dependent deformation of two-phase single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, vol. 48, no. 11, pp. 2333–2361. DOI: 10.1016/S0022-5096(00)00006-5

24. Mandel J. Généralisation de la théorie de plasticité de WT Koiter. *International Journal of Solids and structures*, 1965, vol. 1, no. 3, pp. 273–295.

25. Zambaldi, C., Roters, F., Raabe, D., & Glatzel, U. Modeling and experiments on the indentation deformation and recrystallization of a single-crystal nickel-base superalloy. *Materials Science and Engineering A-structural Materials Properties Microstructure and Processing*, vol. 454, 4 pp 33–440.

26. Hill R. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1966, vol. 14, no. 2, pp. 95–102. DOI: 10.1016/0022-5096(66)90040-8

27. Hill R., Rice J. R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1972, vol. 20, no. 6, pp. 401–41. DOI: 10.1016/0022-5096(72)90017-8

28. Grishchenko A.I., Semenov A.S., Getsov L.B. Modeling inelastic deformation of single crystal superalloys with account of

γ/γ' phases evolution. *Materials Physics and Mechanics*, 2015, vol. 24, no. 3, pp. 325–330.

29. Cormier J., Cailletaud G. Constitutive modeling of the creep behavior of single crystal superalloys under non-isothermal conditions inducing phase transformations. *Materials Science and Engineering: A*, 2010, vol. 527, no. 23, pp. 6300–6312. DOI: 10.1016/J.MSEA.2010.06.023

30. Guo Z., Huang D., Yan X. Physics-based modeling of γ/γ' microstructure evolution and creep constitutive relation for single crystal superalloy. *International Journal of Plasticity*, 2021, vol. 137, pp. 102916. DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102916

31. The role of $\{112\}\{111\}$ slip in the initial plastic deformation of Ni-base superalloys at room temperature / Dang C.X. [et al.]. *Materials Characterization*, 2020, vol. 170, pp. 110648. DOI: 10.1016/j.matchar.2020.110648

32. Mechanical twinning in Ni-based single crystal superalloys during multiaxial creep at 1050 °C / Le Graverend J.B. [et al.]. *Materials Science and Engineering: A*, 2018, vol. 722, pp. 76–87. DOI: 10.1016/j.msea.2018.02.086

33. On the microtwinning mechanism in a single crystal superalloy / Barba D. [et al.]. *Acta Materialia*, 2017, vol. 135, pp. 314–329. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.05.072

34. Honeycombe R. *Plasticheskaia deformatsiia metallov* [The plastic deformation of metal], Moscow, Mir, 1972. 408 p.

35. Gupta S., Bronkhorst C. A. Crystal plasticity model for single crystal Ni-based superalloys: Capturing orientation and temperature dependence of flow stress. *International Journal of Plasticity*, 2021, vol. 137, pp. 102896. DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102896

36. Kocks U. F., Brown T. J. Latent hardening in aluminum. *Acta Metallurgica*, 1966, vol. 14, no. 2, pp. 87–98. DOI: 10.1016/0001-6160(66)90290-2

37. Tinga T., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Incorporating strain gradient effects in a multiscale constitutive framework for nickel-base superalloys. *Philosophical Magazine*, 2008. 88: 30–32, pp. 3793–3825, DOI: 10.1080/14786430802337089

38. Ghosh, S., Keshavarz, S., Weber, G. Computational Multiscale Modeling of Nickel-Based Superalloys Containing Gamma-Gamma' Precipitates. In: Altenbach, H., Brünig, M. (eds) *Inelastic Behavior of Materials and Structures Under Monotonic and Cyclic Loading. Advanced Structured Materials*, 2015, vol 57. Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-319-14660-7_5

39. Nouailhas, D., Cailletaud, G. Finite element analysis of the mechanical behavior of two-phase single-crystal superalloys. *Scripta Materialia*, 1996 vol. 34, pp 565–571. DOI: 10.1016/1359-6462(95)00547-1

40. Estevez R., Hoinard G., Franciosi P. Hardening anisotropy of γ/γ' superalloy single crystals—II. Numerical analysis of heterogeneity effects. *Acta materialia*, 1997, vol. 45, no. 4, pp. 1567–1584. DOI: 10.1016/S1359-6454(96)00265-0

41. Semenov A.S. PANTOCRATOR – konechno-elementnyi programmnyi kompleks, orientirovannyi na reshenie nelineinykh zadach mehaniki [PANTOCRATOR – the finite element program specialized on the non-linear problem solution], in *Proc. of the Vth Int. Conf. on scientific and engineering problems of predicting the reliability and service life of structures. St.-Petersburg*. 2003, pp. 466–480.

42. Microstructure and mechanical properties of CMSX-4 single crystals prepared by additive manufacturing / Körner C. [et al.]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2018, vol. 49, no. 9, pp. 3781–3792. DOI: 10.1007/s11661-018-4762-5

43. Serin K., Göbenli G., Eggeler G. On the influence of stress state, stress level and temperature on γ -channel widening in the single

crystal superalloy CMSX-4. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, vol. 387, pp. 133–137. DOI: 10.1016/j.msea.2004.01.114

44. Reiner M. Reologia [Rheology]. Moscow: Nauka, 1965. 224 p.

45. Palmov V.A. Nelineinaia mehanika deformiruemykh tel [Nonlinear Mechanics of Deformable Bodies]. *Saint Petersburg, SPbPU Publ.*, 2014, 793

46. Gokhfeld D. A., O. S. Sadakov Plastichnost' i polzuchest' elementov konstruktsii pri povtornykh nagruzheniiakh [Plasticity and Creep of Structural Elements Under Repeated Loading]. Moscow, *Mashinostroenie*, 1984, 256 p.

47. Reuß A. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 1929, vol. 9, no. 1, pp. 49–58. DOI: 10.1002/zamm.19290090104

48. Voigt W. Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper. *Annalen der physik*, 1889, vol. 274, no. 12, pp. 573–587. DOI: 10.1051/JPHYSTAP: 018900090020100

49. Estrada Rodas E.A., Gorgannejad S., Neu R.W. Creep-fatigue behaviour of single-crystal Ni-base superalloy CMSX-8. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2019, vol. 42, no. 9, pp. 2155–2171. DOI: 10.1002/9781119075646.ch71Citations

50. Schröder J. A numerical two-scale homogenization scheme: the FE 2-method. *Plasticity and beyond, Springer, Vienna*, 2014, pp. 1–64.

51. Veron M., Brechet Y., Louchet F. Directional coarsening of Ni-based superalloys: Computer simulation at the mesoscopic level. *Acta Materialia*, 1996, vol. 44, no. 9, pp. 3633–3641. DOI: 10.1016/S1359-6462(97)00165-6

52. Svoboda J., Lukas P. Modelling of kinetics of directional coarsening in Ni-superalloys. *Acta materialia*, 1996, vol. 44, no. 6, pp. 2557–2565. DOI: 10.1016/1359-6454(95)00349-5

53. Louchet F., Hazotte A. A model for low stress cross-diffusional creep and directional coarsening of superalloys. *Scripta materialia*, 1997, vol. 37, no. 5, pp. 589–597. DOI: 10.1016/S1359-6462(97)00165-6

Финансирование. Исследование частично финансируется Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы Исследовательского центра мирового уровня: Передовые цифровые технологии (соглашение №075-15-2020-311 от 20.04.2022).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Financing. The research is partially funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the World-class Research Center program: Advanced Digital Technologies (contract No. 075-15-2022-311 dated 20.04.2022).

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