Семенов, А.С. Микроструктурные модели мультимеханизмов неупругого деформирования: основные уравнения и примеры использования / А.С. Семенов, А.И. Грищенко, И.Р. Муртазин. – DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.08 // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2025. – № 5. – С. 97–110.

Perm Polytech Style: Semenov A.S., Grishchenko A.I., Murtazin I.R. Microstructural models of multi-mechanisms of inelastic deformation: basic equations and application examples. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2025, no. 5, pp. 97-110. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.5.08

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/2025.5.08
УДК 539.3

МИКРОСТРУКТУРНЫЕ МОДЕЛИ МУЛЬТИМЕХАНИЗМОВ НЕУПРУГОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ: ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ПРИМЕРЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

А.С. Семенов, А.И. Грищенко, И.Р. Муртазин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

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

Ключевые слова:

пластичность и вязкопластичность монокристаллов, микроструктурные модели, октаэдрические системы скольжения, кубические системы скольжения, кристаллографическая ориентация.

АННОТАЦИЯ

По аналогии с феноменологическими моделями мультимеханизмов неупругого деформирования предложены микроструктурные модели мультимеханизмов неупругого деформирования для описания поведения монокристаллических и поликристаллических металлических материалов. Наряду с общим формализмом учета взаимного влияния различных механизмов деформирования и упрочнения детально рассматриваются два упрощенных варианта теории: (i) многофазные модели без учета взаимного влияния механизмов упрочнения, (ii) однофазные модели с учетом взаимного влияния механизмов упрочнения. Предложенные модели учитывают комбинации различных систем скольжения, нелинейное изотропное и кинематическое упрочнение, используя для их описания скалярные внутренние переменные. Рассматриваются как двучленные, так и трехчленные законы эволюции внутренних переменных, обеспечивающие наличие как горизонтальной асимптоты на диаграмме деформирования, так и наклонной, соответствующей асимптотическому линейному упрочнению. Исследована термодинамическая состоятельность рассматриваемых моделей материала. Представлены результаты верификации предложенной модели и методы идентификации параметров микроструктурной модели неупругого деформирования материала как при испытании монокристаллических сплавов на никелевой основе AM1 и PWA1480, так и поликристаллических образцов из технически чистого никеля НП2.

© **Семенов Артем Семенович** – д. ф.-м. н., профессор Высшей школы механики и процессов управления,
e-mail: semenov.artem@googlemail.com, ID: 0000-0002-8225-3487
Грищенко Алексей Иванович – ассистент Высшей школы механики и процессов управления,
e-mail: gai-gr@yandex.ru, ID: 0000-0001-6029-5670
Муртазин Ильнар Робертович – инженер-исследователь ПИШ НОЦ «Цифровой инжиниринг в атомной и термоядерной энергетике», ассистент Высшей школы механики и процессов управления;
e-mail: murtazin_ir@spbstu.ru, ID: 0000-0002-7580-5669

Artem S. Semenov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor at the Higher School of Mechanics and Control Processes, e-mail: semenov.artem@googlemail.com, ID: 0000-0002-8225-3487
Alexey I. Grishchenko – Assistant at the Higher School of Mechanics and Control Processes,
e-mail: gai-gr@yandex.ru, ID: 0000-0001-6029-5670
Ilnar R. Murtazin – Research Engineer at the National Research Center "Digital Engineering in Nuclear and Thermonuclear Power Engineering", Assistant at the Higher School of Mechanics and Control Processes;
e-mail: murtazin_ir@spbstu.ru, ID: 0000-0002-7580-5669

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)

MICROSTRUCTURAL MODELS OF MULTI-MECHANISMS OF INELASTIC DEFORMATION: BASIC EQUATIONS AND APPLICATION EXAMPLES

A.S. Semenov, A.I. Grishchenko, I.R. Murtazin

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

ARTICLE INFO

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

Keywords:

crystal plasticity and viscoplasticity, micromechanical models, octahedral slip systems, cubic slip systems, crystallographic orientation.

ABSTRACT

By analogy with phenomenological models of multi-mechanisms of inelastic deformation, microstructural models of multi-mechanisms are proposed to describe the behavior of single-crystal and polycrystalline materials. Along with the general formalism for accounting for the mutual influence of various deformation and hardening mechanisms, two simplified versions of the theory are considered in detail: (i) multiphase models without taking into account the mutual influence of hardening mechanisms, (ii) single-phase models taking into account the mutual influence of hardening mechanisms. The proposed models take into account various slip systems, the presence of linear and nonlinear isotropic and kinematic hardening, and use various scalar internal variables to describe them. Both two-term and three-term laws of evolution of internal variables are considered, ensuring the presence of both a horizontal asymptote on the strain-stress curve and an inclined one corresponding to asymptotic linear hardening. The thermodynamic consistency of the models under consideration is investigated. The results of verification of the proposed model and methods for identifying material parameters are presented.

Введение

Учет многообразия механизмов неупругого деформирования (скольжение, двойникование, фазовые переходы, зернограничная и объемная диффузия, зарождение и рост дефектов, взаимодействие дислокаций друг с другом и с точечными дефектами, рекристаллизация, старение и деградация свойств и др.), наблюдающихся на нано-, микро- и мезоуровнях, приводит к необходимости разработки феноменологических и микроструктурных *моделей мультимеханизмов* пластического и вязкопластического деформирования. Существующие модели мультимеханизмов в подавляющем большинстве случаев ориентированы на описание поведения поликристаллических материалов [1–7]. В данной работе рассматривается разработка и верификация моделей мультимеханизмов на основе формализма микроструктурных моделей [8–14] преимущественно для монокристаллических материалов.

Жаропрочные монокристаллические сплавы на никелевой основе [15] получили широкое распространение на практике при изготовлении лопаток газотурбинных двигателей и стационарных газотурбинных установок. Преимуществом монокристаллических материалов в сравнении с поликристаллическими материалами является отсутствие межзеренных границ, по которым при высокотемпературной ползучести происходит разрушение. Применение монокристаллических лопаток позволяет увеличить температуру газа в горячем тракте турбины, что в результате приводит к повышению удельной мощности и экономичности газотурбинных установок.

В отечественном гражданском авиадвигателестроении впервые монокристаллические рабочие и направляющие лопатки были использованы в двигателе ПД-14 для самолетов МС-21 [16; 17]. Следует отметить, что отличительными особенностями жаропрочных монокристаллических сплавов на никелевой основе являются: ярко выраженная анизотропия механических свойств [15; 18–24], повышенные показатели длительной прочности и сопротивления высокотемпературной ползучести [18], высокая коррозионная стойкость [19], а также рост сопротивления малоцикловой усталости, обусловленный уменьшением модуля упругости в осевом направлении лопаток [15; 20].

В отличие от ранних работ, посвященных разработке феноменологических моделей и учету только механизмов пластического деформирования и ползучести [1], особенностью современного этапа разработки моделей мультимеханизмов для поликристаллов является учет микроструктурных особенностей, неизотермичности процессов деформирования, процессов двойникования, фазовых переходов [7].

Целью данной работы является разработка термодинамически согласованных микроструктурных моделей мультимеханизмов неупругого деформирования моно- и поликристаллических материалов с учетом взаимного влияния друг на друга различных механизмов деформирования, упрочнения и преобразования фаз, а также верификация предложенных определяющих уравнений и идентификация их параметров. Предложенная модель является развитием (обобщением) микроструктурной модели монокристаллов Кайо [9; 13], учитывающей нелинейное кинематическое и изотропное упрочнение на микроуровне.

1. Модели мультимеханизмов неупругого деформирования монокристаллов

Для описания многообразия наблюдаемых явлений (эффектов) в модели деформирования монокристаллического материала рассматривается наличие различных

механизмов неупругого деформирования (МД) и различных систем скольжения (СС) для каждого механизма деформирования. Предполагается, что неупругое деформирование осуществляется путем множественного скольжения/двойникования/фазового перехода, реализуемого в активных СС, представляющих собой совокупность плоскостей скольжения/двойникования (плотноупакованных плоскостей атомов) и направлений скольжения (направлений наиплотнейшей упаковки атомов в указанных плоскостях).

Тензор неупругой деформации $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in}$ в общем случае наличия различных МД и СС определяется выражением:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in} = \sum_{i=1}^{N_M} \sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}} \dot{\gamma}_i^{\alpha} \mathbf{P}_i^{\alpha}, \tag{1}$$

где N_{M} – количество различных механизмов неупругого деформирования (например, одновременное проявление октаэдрической и кубической СС, пластических и вязких деформаций); N_{SS_i} – число (активных) СС, зависящее в общем случае от конкретного МД (i = 1, …., N_{M}); $\dot{\gamma}_i^{\alpha}$ – скорость сдвига (скольжения) в α-й СС для i-го МД

$$\dot{\gamma}_i^{\alpha} = \dot{\gamma}_i^{\alpha}(\tau_i^{\alpha}, \dot{\tau}_i^{\alpha}, X_i^{\alpha}, R_i^{\alpha}), \tag{2}$$

которая зависит от касательных напряжений τ_i^{α}:

$$\tau_i^{\alpha} = \boldsymbol{\sigma} \cdot\cdot \mathbf{P}_i^{\alpha}, \tag{3}$$

набора внутренних переменных состояния $X_i^{\alpha}, R_i^{\alpha}$ для описания кинематического и изотропного упрочнения. $\mathbf{P}_i^{\alpha}$ – тензор Шмида, определяемый исключительно геометрией кристаллической решетки

$$\mathbf{P}_i^{\alpha} = \frac{1}{2}\left(\mathbf{n}_i^{\alpha}\mathbf{l}_i^{\alpha} + \mathbf{l}_i^{\alpha}\mathbf{n}_i^{\alpha}\right) = \left(\mathbf{n}_i^{\alpha}\mathbf{l}_i^{\alpha}\right)^{Sym}. \tag{4}$$

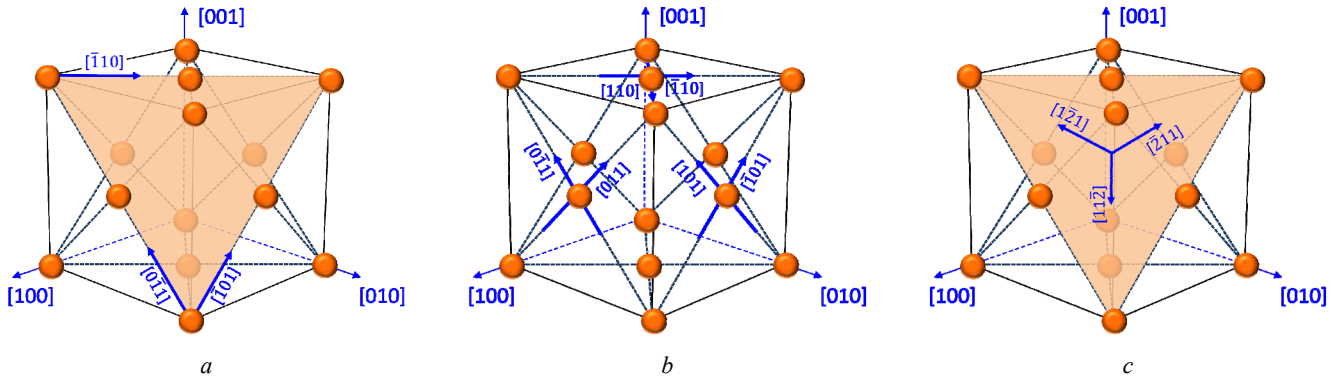
В качестве характерного примера многофазной модели деформирования могут рассматриваться монокристаллические сплавы на никелевой основе, которые имеют гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку и, соответственно, характеризуются двумя фазами (семействами СС) [1]: семейство *октаэдрических* СС, насчитывающее двенадцать СС вида {111}<011> (рис. 1, *a*) и семейство *кубических* СС вида {001}<011> (рис. 1, *b*), включающее в себя шесть СС. Октаэдрические СС состоят из четырех плоскостей скольжения {111}, при этом в каждой из этих плоскостей существует три различных направления скольжения <011>. Для кубической СС характерны три плоскости {001} с двумя независимыми направлениями <011> в каждой из этих плоскостей. Вклад кубических систем скольжения подтверждается наличием соответствующих линий скольжения при высокотемпературном воздействии [25; 26].

Суммирование деформаций в (1) восходит к методу реологических моделей и к простейшим методам гомогенизации, а также является математически наипростейшим способом учета вкладов деформаций различных механизмов неупругого деформирования (различной природы, различных микроструктурных изменений (трансформаций)).

В качестве примеров разложения (1) могут быть рассмотрены варианты пластического деформирования монокристалла при одновременной активации октаэдрической и кубической СС (N_{M} = 2, N_{SS_1} = 12, N_{SS_2} = 6):

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p} = \sum_{\alpha=1}^{12} \dot{\gamma}_{oct}^{\alpha} \mathbf{P}_{oct}^{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^{6} \dot{\gamma}_{cub}^{\alpha} \mathbf{P}_{cub}^{\alpha}, \tag{5}$$

соприсутствия вязкоупругих и пластических деформаций монокристалла (N_{M} = 2):



a *b* *c*

Рис. 1. Системы скольжения в монокристалле с кубической гранецентрированной решеткой: *a*) октаэдрические {111} <011> (на примере плоскости (111)), *b*) кубические {001} <011>, *c*) октаэдрические {111} <112> (на примере плоскости (111))

Fig. 1. Slip systems in cubic face-centered crystal: *a*) octahedral {111} <011> (using the (111) plane as an example), *b*) cubic {001} <011>, *c*) octahedral {111} <112> (using the (111) plane as an example)

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in} = \sum_{\alpha=1}^{12} \dot{\gamma}_{ve}^{\alpha}\, \mathbf{P}_{ve}^{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^{12} \dot{\gamma}_{pl}^{\alpha}\, \mathbf{P}_{pl}^{\alpha}, \qquad (6)$$

фазового перехода ($N_{\text{М}} = 2$):

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{tr} = \sum_{\alpha=1}^{N_B} \eta^{\alpha}\, \boldsymbol{\varepsilon}_{I}^{\alpha} + \left(1 - \sum_{\alpha=1}^{N_B} \eta^{\alpha}\right) \boldsymbol{\varepsilon}_{II}, \qquad (7)$$

где η^{α} – объемная доля α фазы, N_B – количество ориентационных вариантов деформации Бейна.

Выбор формы конкретного выражения для скорости неупругих сдвиговых деформаций $\dot{\gamma}_i^{\alpha}$ (2) зависит от условий нагружения, особенностей неупругого деформирования рассматриваемого монокристалла и определятся механизмами неупругого деформирования монокристалла (классом рассматриваемых явлений):

- Для описания нелинейного *вязкоупругого* деформирования используется степенная аппроксимация связи скорости сдвига $\dot{\gamma}_i^{\alpha}$ со сдвиговыми напряжениями τ_i^{α} в СС [8; 11; 14]

$$\dot{\gamma}_i^{\alpha} = A_i \left|\tau_i^{\alpha}\right|^{n_i} \left(\gamma_i^{\alpha}\right)^{m_i} sign(\tau_i^{\alpha}), \qquad \sum_i, \sum_{\alpha}. \qquad (8)$$

Естественным обобщением (8) на случай учета взаимного влияния различных МД и СС является соотношение

$$\dot{\gamma}_i^{\alpha} = \sum_{j=1}^{N_M} \sum_{\beta=1}^{N_{SS_j}} A_{ij}^{\alpha\beta} \left|\tau_j^{\beta}\right|^{n_j} \left(\gamma_j^{\beta}\right)^{m_j} sign(\tau_j^{\beta}). \qquad (9)$$

Уравнение (9) соответствует структуре уравнений для внутренних переменных X_i^{α} и R_i^{α}, рассматриваемых ниже.

- Для описания *вязкопластического* деформирования вводится предельный (пороговый) уровень напряжений, ниже которого изменения неупругих деформаций не наблюдается, а выше сохраняется степенная аппроксимация:

$$\dot{\gamma}_i^{\alpha} = \left\langle \frac{\left|\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right| - R_i^{\alpha} - \tau_{0_i}}{K_i} \right\rangle^{n_i} sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right), \sum_i, \sum_{\alpha}, \qquad (10)$$

где скобки Мак-Койли определяются выражениями $\langle x \rangle = 0$ при $x \le 0$ и $\langle x \rangle = x$ при $x > 0$, X_i^{α} – внутренние переменные (микронапряжения), характеризующие местоположение центра поверхности нагружения, R_i^{α} – внутренние переменные, характеризующие изменение размера поверхности нагружения, K_i – коэффициенты, характеризующие вязкие свойства i МД. Обобщением уравнения (10) на случай учета взаимного влияния различных МД и СС является соотношение

$$\dot{\gamma}_i^{\alpha} = \sum_{j=1}^{N_M} \sum_{\beta=1}^{N_{SS_j}} \left\langle \frac{\left|\tau_j^{\beta} - X_j^{\beta}\right| - R_j^{\beta} - \tau_{0_j}}{K_{ij}^{\alpha\beta}} \right\rangle^{n_j} sign\left(\tau_j^{\beta} - X_j^{\beta}\right). \qquad (11)$$

- Для описания *упругопластического* деформирования при достижении предела текучести вводится квазилинейная связь между скоростью неупругих сдвиговых деформаций $\dot{\gamma}_i^{\alpha}$ и скоростью сдвиговых напряжений $\dot{\tau}_i^{\alpha}$:

$$\dot{\gamma}_i^{\alpha} = \begin{cases} \sum_{\beta=1}^{N_{SS_i}} \left[q^{\alpha\beta}\right]^{-1} sign\left(\tau_i^{\beta} - X_i^{\beta}\right) \dot{\tau}_i^{\beta} & \text{для } \left|\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right| - R_i^{\alpha} - \tau_{0_i} = 0, \\ 0 & \text{для } \left|\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right| - R_i^{\alpha} - \tau_{0_i} < 0. \end{cases} \qquad (12)$$

Обобщением (12) на случай учета взаимного влияния различных МД и СС является соотношение

$$\dot{\gamma}_i^{\alpha} = \begin{cases} \sum_{j=1}^{N_M} \sum_{\beta=1}^{N_{SS_j}} \left[q_{ij}^{\alpha\beta}\right]^{-1} sign\left(\tau_j^{\beta} - X_j^{\beta}\right) \dot{\tau}_j^{\beta} & \text{для } \left|\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right| - R_i^{\alpha} - \tau_{0_i} = 0, \\ 0 & \text{для } \left|\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right| - R_i^{\alpha} - \tau_{0_i} < 0. \end{cases} \qquad (13)$$

Уравнения (12) и (13) получены на основе условия пластичности для α-ой СС i-го МД

$$f_i^{\alpha} = \left|\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right| - R_i^{\alpha} - \tau_{0_i} = 0, \qquad (14)$$

где X_i^{α} – микронапряжения сдвига для α-й СС i-го МД, характеризующие местоположение центра поверхности нагружения $f_i^{\alpha} = 0$ (пары параллельных плоскостей в пространстве напряжений вида $\boldsymbol{\sigma} \cdot\cdot\, \mathbf{P}_i^{\alpha} = X_i^{\alpha} \pm \left(R_i^{\alpha} + \tau_{0_i}\right)$, R_i^{α} – переменные, характеризующие изменение размера поверхности нагружения (удаления пары плоскостей от общего центра). В случае $f_i^{\alpha} < 0$ α-я СС i-го МД является неактивной. В этом случае принимается $\dot{\gamma}_i^{\alpha} = 0$.

В общем случае в модели мультимеханизмов внутренние силы X_i^{α} и R_i^{α}, определяющие местоположение гиперплоскостей нагружения (14) и характеризующие кинематическое и изотропное упрочнение, определяются на основе соотношений:

$$X_i^{\alpha} = \sum_{j=1}^{N_M} \sum_{\beta=1}^{N_{SS_j}} C_{ij}^{\alpha\beta} x_j^{\beta}, \qquad (15)$$

$$R_i^{\alpha} = \sum_{j=1}^{N_M} \sum_{\beta=1}^{N_{SS_j}} Q_{ij}^{\alpha\beta} r_j^{\beta}, \qquad (16)$$

где $i = 1,..., N_M$, $\alpha = 1,..., N_{SS_i}$. Энергетически сопряженные с внутренними силами внутренние переменные состояния x_i^{α} и r_i^{α}, соответствующие нелинейному кинематическому и изотропному упрочнению, определяются уравнениями эволюции [9]:

$$\dot{x}_i^{\alpha} = \left[\operatorname{sign}\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right) - D_i\, x_i^{\alpha}\right] \dot{\gamma}_i^{\alpha} sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right), \sum_i, \sum_{\alpha}, \qquad (17)$$

$$\dot{r}_i^{\alpha} = (1 - b_i r_i^{\alpha}) \dot{\gamma}_i^{\alpha} sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right), \sum_i, \sum_{\alpha}, \qquad (18)$$

где $i = 1,..., N_M$, $\alpha = 1,..., N_{SS_i}$. Комбинация $\dot{\lambda}_i^{\alpha} = \dot{\gamma}_i^{\alpha} sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right)$ представляет собой неотрица-

тельный пластический множитель, удовлетворяющий условиям Куна – Такера:

$$\dot{\lambda}_i^{\alpha} f_i^{\alpha} = 0, \quad f_i^{\alpha} \le 0, \quad \dot{\lambda}_i^{\alpha} \ge 0 . \tag{19}$$

При $D_i = 0$ и $b_i = 0$ приходим простейшему случаю линейного упрочнения для билинейных диаграмм деформирования:

$$\dot{x}_i^{\alpha} = \dot{\gamma}_i^{\alpha}, \tag{20}$$

$$\dot{r}_i^{\alpha} = \dot{\gamma}_i^{\alpha} sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right). \tag{21}$$

Введенные в (17) и (18) двучленные выражения законов нелинейного упрочнения обеспечивают выход кривых деформирования на горизонтальную асимптоту. Их обобщением, позволяющим получать диаграммы деформирования с наклонной асимптотой (линейное асимптотическое упрочнение), являются трехчленные варианты уравнений эволюции внутренних переменных, которые вводятся здесь по аналогии с феноменологическими моделями [27]

$$\dot{x}_i^{\alpha} = \left[sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right) + B_i \gamma_i^{\alpha} - D_i x_i^{\alpha} \right] \dot{\gamma}_i^{\alpha} sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right), \sum_i , \sum_{\alpha} . \tag{22}$$

$$\dot{r}_i^{\alpha} = \left[1 + A_i \gamma_i^{\alpha} sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right) - b_i r_i^{\alpha} \right] \dot{\gamma}_i^{\alpha} sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right). \sum_i , \sum_{\alpha} . \tag{23}$$

В уравнениях (14)–(23) $\tau_{0_i}, B_i, D_i, C_{ij}^{\alpha\beta}, A_i, b_i, Q_{ij}^{\alpha\beta}$ – константы материала, в общем случае допускающие зависимость от температуры, $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера. Элементы матриц $\left[q^{\alpha\beta} \right]$ и $\left[q_{ij}^{\alpha\beta} \right]$ из (12) и (13) для случая эволюции внутренних переменных (15)–(18) определяются равенствами:

$$q^{\alpha\beta} = \delta^{\alpha\beta} C \left(1 - D x^{\beta} sign\left(\tau_i^{\beta} - X_i^{\beta}\right)\right) + Q^{\alpha\beta} \left(1 - b r^{\beta}\right), \tag{24}$$

$$q_{ij}^{\alpha\beta} = C_{ij}^{\alpha\beta} \left(1 - D_i x_j^{\beta} sign\left(\tau_i^{\beta} - X_i^{\beta}\right)\right) + Q_{ij}^{\alpha\beta} \left(1 - b_i r_j^{\beta}\right). \tag{25}$$

В качестве упрощающих предположений для матрицы перекрестных связей различных механизмов $C_{ij}^{\alpha\beta}$ могут быть использованы следующие варианты представлений, требующих меньшее количество констант материала:

$$C_{ij}^{\alpha\beta} = C_{ij} \left[p + (1-p)\delta_{\alpha\beta} \right], \tag{26}$$

$$C_{ij}^{\alpha\beta} = \delta_{ij} C^{\alpha\beta}, \tag{27}$$

$$C_{ij}^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} C. \tag{28}$$

Учет взаимного влияния различных механизмов деформирования, упрочнения, фаз в общем случае требует значительного количества параметров материала. Например, необходимо располагать $2\left(\sum_{j=1}^{N_M} N_{SS_j}\right)\left(\sum_{j=1}^{N_M} N_{SS_j}\right)$ константами материала для $C_{ij}^{\alpha\beta}$ и $Q_{ij}^{\alpha\beta}$, фигурирующих в уравнениях (12) и (13) (для $N_{\text{M}} = 2$, $N_{\text{SS}_1} = N_{\text{SS}_2} = 12$ это число в общем случае может достигать суммарно для $C_{ij}^{\alpha\beta}$ и $Q_{ij}^{\alpha\beta}$ 1152, а при принятии упрощающего предположения о неразличимости влияния несобственных СС $C_{ij}^{\alpha\beta} = C_{ij}\left[p + (1-p)\delta_{\alpha\beta} \right]$ и $Q_{ij}^{\alpha\beta} = Q_{ij}\left[q + (1-q)\delta_{\alpha\beta} \right]$ – 10 независимых констант), $\sum_{j=1}^{N_M} N_{SSj}$ констант материала для $A_j^{\beta}, n_j^{\beta}, m_j^{\beta}$ из уравнения (9) (для $N_{\text{M}} = 2$, $N_{\text{SS}_1} = N_{\text{SS}_2} = 12$ это число составит 24). В связи с необходимостью определения в общем случае значительного количества констант, могут быть рассмотрены упрощенные варианты, достаточные для описания некоторых классов явлений (эффектов, феноменов). Ниже детально рассмотрены два упрощенных подхода, актуальные для практики.

1.1. Многофазные модели без учета взаимного влияния механизмов упрочнения

В этом случае учет наличия различных механизмов деформирования осуществляется лишь при вычислении неупругих деформаций (1), в то время как при вычислении внутренних переменных на основе уравнений (15)–(18) подобное влияние не учитывается. Отказ от учета взаимного влияния механизмов упрочнения друг на друга, то есть при принятии предположений $C_{ij}^{\alpha\beta} = \delta_{ij} C^{\alpha\beta}$ и $Q_{ij}^{\alpha\beta} = \delta_{ij} Q^{\alpha\beta}$, приводит к упрощению уравнений (15) и (16):

$$X_i^{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N_{SS}} C^{\alpha\beta} x_i^{\beta}, \tag{29}$$

$$R_i^{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N_{SS}} Q^{\alpha\beta} r_i^{\beta}, \tag{30}$$

где $i = 1,...,N_M$, $\alpha = 1,...,N_{SS}$. В этом случае вместо указанных выше в качестве примера при $N_{\text{M}} = 2$, $N_{\text{SS}_1} = N_{\text{SS}_2} = 12$ суммарно для $C_{ij}^{\alpha\beta}$ и $Q_{ij}^{\alpha\beta}$ 1152 констант достаточно знать 288, а при неразличимости влияния несобственных СС вместо 10 только 4 константы.

Отказ от учета взаимного влияния систем скольжения друг на друга, то есть при принятии предположений $C^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} C$ и $Q^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} Q$, приводит к упрощению уравнений (29) и (30):

$$X_i^{\alpha} = C x_i^{\alpha}, \tag{31}$$

$$R_i^{\alpha} = Q r_i^{\alpha}, \tag{32}$$

где $i = 1,...,N_M$, $\alpha = 1,...,N_{SS}$. В этом случае достаточно знать 2 константы C и Q.

На практике получил распространение также промежуточный вариант [9; 14] при учете взаимного влия-

ния систем скольжения друг на друга только для изотропного упрочнения, то есть при принятии предположений $C^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} C$ и $Q^{\alpha\beta} = Q\left[q + (1-q)\delta_{\alpha\beta}\right]$:

$$X_i^{\alpha} = C x_i^{\alpha}, \tag{33}$$

$$R_i^{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N_{SS}} Q^{\alpha\beta} r_i^{\beta} = Q \sum_{\beta=1}^{N_{SS}} \left[q + (1-q)\delta_{\alpha\beta} \right] r_i^{\beta}, \tag{34}$$

где $i = 1,...,N_M$, $\alpha = 1,...,N_{SS}$. Количество констант матриц перекрестного влияния снизилось до 3. В этом случае учет перекрестного (латентного) упрочнения осуществляется благодаря недиагональной структуре матрицы изотропного упрочнения $Q^{\alpha\beta}$.

1.2. Однофазные модели с учетом взаимного влияния механизмов упрочнения

В случае единого типа кристаллической решетки (одной фазы) для всех механизмов неупругого деформирования ($\mathbf{P}_i^{\alpha} = \mathbf{P}^{\alpha}$), то есть при сохранении возможности учета различных механизмов упрочнения в рамках одной фазы материала, уравнение (1) упрощается:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in} = \sum_{\alpha=1}^{N_{SS}} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{P}^{\alpha}, \tag{35}$$

где $\dot{\gamma}^{\alpha} = \sum_{i=1}^{N_M} \dot{\gamma}_i^{\alpha}$.

Вводя обозначения $\tilde{X}_{ij}^{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N_{SS_i}} C_{ij}^{\alpha\beta} x_j^{\beta}$ и $\tilde{R}_{ij}^{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N_{SS_i}} Q_{ij}^{\alpha\beta} r_j^{\beta}$, следствием (15) и (16) получаем

$$X_i^{\alpha} = \sum_{j=1}^{N_M} \tilde{X}_{ij}^{\alpha}, \tag{36}$$

$$R_i^{\alpha} = \sum_{j=1}^{N_M} \tilde{R}_{ij}^{\alpha}. \tag{37}$$

В данной интерпретации число механизмов может рассматриваться как число членов мультиэкспонентного упрочнения для повышения точности аппроксимации кривой деформирования

$$f_i^{\alpha} = \left| \tau_i^{\alpha} - \sum_{j=1}^{N_M} \tilde{X}_{ij}^{\alpha} \right| - \sum_{j=1}^{N_M} \tilde{R}_{ij}^{\alpha} - \tau_{0_i} = 0, \tag{38}$$

как следствие которого при одноосном мягком нагружении вдоль [100] для октаэдрических СС {001}<011>) получаем:

$$\sigma_{[100][100]} = \sqrt{6}\tau_0 + \sqrt{6}\sum_{j=1}^{N_M} Q_j \left(1 + 7q_j\right)\left(1 - e^{-\frac{\sqrt{6} b_j \varepsilon^p_{[100][100]}}{8}}\right) + \\ + \sqrt{6}\sum_{j=1}^{N_M} \frac{C_j}{D_j}\left(1 - e^{-\frac{\sqrt{6} D_j \varepsilon^p_{[100][100]}}{8}}\right). \tag{39}$$

2. Термодинамические ограничения

Универсальное диссипативное неравенство, получаемое следствием подстановки первого закона термодинамики во второй, в случае ограничения рассмотрением только изотермических инфинитезимальных механических процессов имеет вид [28]:

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho\dot{\psi} \geq 0, \tag{40}$$

где $\psi = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}^e, x_i^{\alpha}, r_i^{\alpha})$ – свободная энергия, $\boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{in}$ – тензор упругих деформаций, $x_i^{\alpha}, r_i^{\alpha}$ – внутренние переменные. В соответствии с выбранным составом аргументов свободной энергии второе слагаемое в левой части неравенства (40) допускает представление

$$\rho\dot{\psi} = \rho\frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{\varepsilon}^e} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \rho\sum_{i=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}} \frac{\partial\psi}{\partial x_i^{\alpha}} \dot{x}_i^{\alpha} + \rho\sum_{i=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}} \frac{\partial\psi}{\partial r_i^{\alpha}} \dot{r}_i^{\alpha} = \\ = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \sum_{i=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}} X_i^{\alpha}\dot{x}_i^{\alpha} + \sum_{i=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}} R_i^{\alpha}\dot{r}_i^{\alpha}, \tag{41}$$

где введены обозначения для внутренних сил X_i^{α} и R_i^{α}, энергетически сопряженных с внутренними переменными x_i^{α} и r_i^{α}:

$$X_i^{\alpha} = \rho\frac{\partial\psi}{\partial x_i^{\alpha}}, \qquad R_i^{\alpha} = \rho\frac{\partial\psi}{\partial r_i^{\alpha}}. \tag{42}$$

Выбор свободной энергии в виде квадратичной формы:

$$\rho\psi = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon}^e : {}^4\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e + \sum_{i=1}^{N_M}\sum_{j=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}}\sum_{\beta=1}^{N_{SS_j}} C_{ij}^{\alpha\beta} x_i^{\alpha} x_j^{\beta} + \\ + \sum_{i=1}^{N_M}\sum_{j=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}}\sum_{\beta=1}^{N_{SS_j}} Q_{ij}^{\alpha\beta} r_i^{\alpha} r_j^{\beta}, \tag{43}$$

где ${}^4\mathbf{C}$ – тензор упругих модулей, обеспечивает выполнение равенств (15) и (16). Условие выпуклости свободной энергии (потенциала) (43) требует обеспечения положительной определенности тензора ${}^4\mathbf{C}$ и матриц $C_{ij}^{\alpha\beta}$ и $Q_{ij}^{\alpha\beta}$.

Универсальное диссипативное неравенство (40) с учетом (41) может быть переписано в виде:

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{in} - \sum_{i=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}} X_i^{\alpha}\dot{x}_i^{\alpha} - \sum_{i=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}} R_i^{\alpha}\dot{r}_i^{\alpha} \geq 0. \tag{44}$$

Подстановка уравнений эволюции внутренних переменных (17), (18) и уравнения для вычисления неупругой деформации с учетом различных механизмов деформирования (1) в (44) приводит к неравенству:

$$\sum_{i=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}} \left[\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right) sign\left(\tau_i^{\alpha} - X_i^{\alpha}\right) - R_i^{\alpha} + D_i X_i^{\alpha} x_i^{\alpha} + b_i R_i^{\alpha} r_i^{\alpha} \right] \dot{\lambda}_i^{\alpha} \geq 0, \tag{45}$$

откуда с учетом (14)–(16) следует:

$$\sum_{i=1}^{N_M}\sum_{\alpha=1}^{N_{SS_i}}\left[f_i^{\alpha}+\tau_{0_i}+D_i\sum_{j=1}^{N_M}\sum_{\beta=1}^{N_{SS_j}}C_{ij}^{\alpha\beta}x_i^{\alpha}x_j^{\beta}+b_i\sum_{j=1}^{N_M}\sum_{\beta=1}^{N_{SS_j}}Q_{ij}^{\alpha\beta}r_i^{\alpha}r_j^{\beta}\right]\dot{\lambda}_i^{\alpha}\geq 0. \quad (46)$$

Для выполнения неравенства (46) с учетом (19) достаточно потребовать *положительной определенности* матриц коэффициентов квадратичных форм $\hat{D}_{ij}^{\alpha\beta}=D_i C_{ij}^{\alpha\beta}$ и $\hat{b}_{ij}^{\alpha\beta}=b_i Q_{ij}^{\alpha\beta}$. Для проверки положительной определенности матриц $\hat{D}_{ij}^{\alpha\beta}$ и $\hat{b}_{ij}^{\alpha\beta}$ в каждом конкретном случае может быть использован метод Лагранжа приведения матриц к каноническому виду или критерий Сильвестра положительности угловых миноров. Как правило, обеспечением подобных условий является диагональное преобладание матриц $C_{ij}^{\alpha\beta}$ и $Q_{ij}^{\alpha\beta}$, которое, например, в случае $N_M=2$ и равенстве коэффициентов между системами скольжения в пределах одного механизма, имеет вид $C_{11}C_{22}>C_{12}C_{21}$. В случае неразличимости влияния несобственных СС $C_{ij}^{\alpha\beta}=C_{ij}\left[p+(1-p)\delta_{\alpha\beta}\right]$ и $Q_{ij}^{\alpha\beta}=Q_{ij}\left[q+(1-q)\delta_{\alpha\beta}\right]$ и $N_M=1$ и необходимо выполнить условия $C_{11}>0$, $Q_{11}>0$, $p<1$, $q<1$.

В случае рассмотрения многофазных моделей без учета взаимного влияния механизмов упрочнения (см. раздел 2.1) при принятии (31) и (32) условия положительной определенности $\hat{D}_{ij}^{\alpha\beta}$ и $\hat{b}_{ij}^{\alpha\beta}$ упрощаются до неравенств

$$D_i C\geq 0,\qquad b_i Q\geq 0. \quad (47)$$

3. Верификация модели для монокристаллических сплавов

Верификация многофазных моделей без учета взаимного влияния механизмов упрочнения выполнена на основе сравнения прогноза моделей (29)–(34) с экспериментальными данными для монокристаллических сплавов на никелевой основе AM1 при 950 °C [29] и PWA1480 при 1050 °C [30] с учетом наличия как кубических, так и октаэдрических систем скольжения. Идентификация параметров моделей производилась с использованием метода наименьших квадратов на основе кривых одноосного монотонного деформирования вдоль направлений [001] и [$\bar{1}$ 11], полученные значения параметров моделей (29)–(34) представлены в табл. 1. В качестве верификационного базиса рассматривались кривые деформирования для направлений [011] и [$\bar{1}$ 23] для сплава AM1, [011] и [$\bar{3}$ 6 10] для PWA1480. Из рис. 2 видно, что предложенные модели позволяют с хорошей точностью описать экспериментальные кривые деформирования (среднеквадратичное отклонение не превосходит 5 %).

Для единственной ориентации [011] для сплава PWA1480 наблюдается заметное отклонение результатов расчетов от экспериментальных данных. В данном случае в эксперименте наблюдается убывание кривой «напряжение – деформация», что, возможно, связано с релаксацией напряжений для данной ориентации при температуре 1050 °C.

Таблица 1

Результаты идентификации параметров упругопластической модели (29)–(34) для монокристаллических сплавов AM1 и PWA1480

Table 1

Results of Determining the Parameters of the Elastoplastic Model (29)–(34) for Single-Crystal AM1 and PWA1480 Alloys

Параметр	Размерность	Значение	
		AM1	PWA1480
$\tau_{0_{oct}}$	[МПа]	156.5	140.1
C_{oct}	[МПа]	261900	134817
D_{oct}	[-]	1886	1041
$\tau_{0_{cub}}$	[МПа]	174.3	191.2
C_{cub}	[МПа]	6080	6750
D_{cub}	[-]	160	123

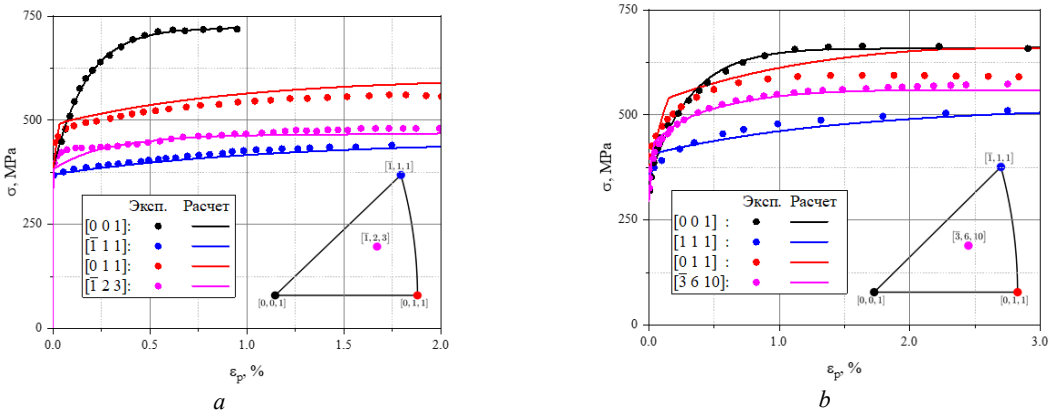


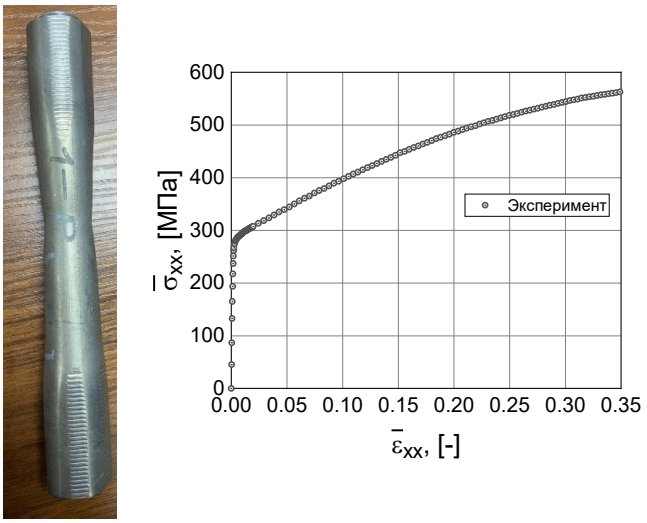
Рис. 2. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными для сплавов: *a* – AM1; *b* – PWA1440

Fig. 2. Comparison of modeling results with experimental data for alloys: *a* – AM1; *b* – PWA1440

4. Верификация модели для поликристалла

Идентификация параметров микроструктурной модели на основе кривых одноосного растяжения и кривых сжатия с последующим растяжением. Верификация модели мультимеханизмов неупругого деформирования производилась на основе результатов экспериментов на поликристаллических никелевых трубчатых образцах марки НП2. Идентификация параметров микроструктурной модели на основе данных макроопытов с микронеоднородными полями напряжений является нетривиальной задачей, так как поликристаллическая структура представляет собой совокупность входящих в нее ориентированных произвольным образом кристаллитов.

Эксперименты проводились в испытательном центре «Политехтест» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого на универсальной испытательной машине Instron 8850 при комнатной температуре. На рис. 3 показан образец после деформирования и кривая растяжения в осях истинных напряжений и деформаций.



a *b*

Рис. 3. Экспериментальные данные: *a* – образец после испытания; *b* – кривая растяжения в осях истинных напряжений и деформаций

Fig. 3. Experimental data: *a* – specimen after load; *b* – true stress-strain curve

Рассмотренная выше микроструктурная модель мультимеханизмов ограничена областью малых деформаций. В этом случае с достаточной степенью точности должен быть описан участок только до 5–10 % деформаций. Однако аппроксимационные возможности модели мультимеханизмов продемонстрировали достаточную степень точности и за пределами указанного интервала.

Идентификация параметров осуществляется методами нелинейной оптимизации на основе серии расчетов для представительного объема поликристаллического материала с использованием микроструктурной модели мультимеханизмов и методов конечно-элементной гомогенизации с использованием программного комплекса PANTOCRATOR [31]. Расчеты проводились с рассмотрением в модели 216 кристаллитов при разбиении представительного объема поликристалла $3\times3\times3$ элементов. Один конечный элемент содержит 8 гауссовых точек, каждая из которых интерпретируется как ориентированный случайным образом монокристалл. Для обеспечения устойчивости численного решения при приближении кривой деформирования к горизонтальной асимптоте рассматривается жесткое (кинематическое) нагружение с условиями периодичности на противоположных гранях

$$\begin{aligned} &u_x|_{\Gamma_1}=\frac{\varepsilon_{xx}l}{2}=\frac{u_0}{2},\ u_x|_{\Gamma_2}=-\frac{\varepsilon_{xx}l}{2}=-\frac{u_0}{2},\\ &u_y|_{\Gamma_1}=u_y|_{\Gamma_2},\ u_z|_{\Gamma_1}=u_z|_{\Gamma_2},\\ &u_x|_{\Gamma_3}=u_x|_{\Gamma_4},\ u_z|_{\Gamma_3}=u_z|_{\Gamma_4},\\ &u_x|_{\Gamma_5}=u_x|_{\Gamma_6},\ u_y|_{\Gamma_5}=u_y|_{\Gamma_6}, \end{aligned} \tag{48}$$

где u_x,u_y,u_z – компоненты вектора перемещений, $\Gamma_1-\Gamma_6$ – грани представительного объема в форме куба с направлением нормалей $+x,-x,+y,-y,+z,-z$ соответственно, ε_{xx} – заданное значение осевой деформации, l – размер ребра представительного объема.

Идентификация параметров проводится для многофазной модели без учета взаимного влияния механизмов упрочнения, описанной в разделе 2.1. Последовательно рассматриваются случаи учета одного, двух или трех механизмов деформирования и их аппроксимационные возможности описания неупругого отклика поликристалла. Учет каждого механизма ограничивается рассмотрением 12 октаэдрических систем скольжения. Для каждого механизма деформирования идентификации подлежат 5 констант неупругого деформирования $\tau_{0_i}^{oct},b_i^{oct},Q_i^{oct},C_i^{oct},D_i^{oct}$, где i – номер механизма. Также в силу анизотропии упругих свойств (в рамках предположения о кубической сингонии) идентификации подлежит значение модуля сдвига G, так как изменение упругих констант также влияет на неупругий отклик. В таком случае для описания кривой деформирования с учетом одного механизма необходимо определить 6 констант модели, учет двух механизмов потребует определения 11 констант, а трех – 16.

Для определения констант модели используется алгоритм, предложенный в [32]. В отличие от функции *fmincon* программного обеспечения MATLAB [33], применяемой ранее и основанной на методе градиентного спуска [34] для нахождения локального минимума функционала, в данном исследовании используется метод *particleswarm* (PSO, МРЧ – метод роя частиц). Этот метод не является генетическим, в отличие от *GA*-алгоритма, но допускает множественное задание начального приближения («роя частиц») и их взаимодействие

и коррекцию в процессе глобальной минимизации целевой функции.

Другим отличием в алгоритмизации процесса идентификации параметров является использование опции *'UseParallel'*, доступной для большинства встроенных функций MATLAB, активация которой позволяет параллельно запускать несколько расчетных случаев.

Также было проведено усложнение структуры минимизируемого функционала, рассмотрение которого не ограничивается среднеквадратическим отклонением, но и подразумевает сравнение расчетной и экспериментальной кривых на основе анализа линейного коэффициента корреляции Пирсона [35] и величины площади под кривой (энергетический субкритерий). Математическая формулировка критерия описывается соотношениями:

$$
\begin{gathered}
Y = Y_1 + Y_2 + Y_3 \to \min, \\
Y_1 = \frac{\sqrt{\Sigma(\sigma^{\exp} - \sigma^{calc})^2}}{\max|\sigma^{\exp}|}, \\
Y_2 = \frac{\Sigma(\sigma^{\exp} - \overline{\sigma}^{\exp})\Sigma(\sigma^{calc} - \overline{\sigma}^{calc})}{\sqrt{\Sigma(\sigma^{\exp} - \overline{\sigma}^{\exp})^2 \Sigma(\sigma^{calc} - \overline{\sigma}^{calc})^2}} - 1, \\
Y_3 = \frac{\int_0^{\varepsilon_{\max}} (\sigma^{\exp} - \sigma^{calc}) d\varepsilon}{\int_0^{\varepsilon_{\max}} \sigma^{\exp} d\varepsilon},
\end{gathered}
\tag{49}
$$

где Y_1, Y_2, Y_3 – субфункционалы исходно минимизируемого функционала Y. Стоит отметить, что при больших расхождениях кривых субфункционалы Y_1 и Y_3 становятся превалирующими, так как их значение может превышать 1.

В табл. 2 показаны значения параметров модели мультимеханизмов, полученные в результате идентификации.

Для идентификации параметров в случае учета 3 механизмов ($N_M = 3$) потребовалось меньшее количество итераций. Это связано с выбором более точного начального приближения.

На рис. 4 показано сравнение расчетных кривых для вариантов учета нескольких механизмов с экспериментальной диаграммой деформирования.

Подбор параметров осуществлялся в предположении смешанного (изотропно-кинематического) упрочнения. В результате расчетов было установлено, что при одном механизме доминирует линейное кинематическое упрочнение, при учете двух механизмов наряду с линейным кинематическим упрочнением проявляется нелинейное изотропное упрочнение, для трех механизмов наблюдается ярко выраженное линейное кинематическое и изотропное упрочнение. Величина $\tau_{0_i}^{oct}$ характеризует уровень напряжений, при достижении которого активируется тот или иной механизм.

Полученные результаты идентификации констант материала показали, что с ростом числа учитываемых механизмов микроструктурной модели повышается точность предсказания модели поликристалла в сравнении с экспериментом.

Таблица 2

Результаты идентификации параметров упругопластической модели (29)–(34) для поликристаллического никеля НП2

Table 2

Results of identification of parameters of the elastoplastic model (29)–(34) for polycrystalline nickel NP2

Параметр	$N_M = 1$	$N_M = 2$	$N_M = 3$
G, [МПа]	120 067	75 442	80 649
$\tau_{0_1}^{oct}$, [МПа]	93,53	93,46	95,02
b_1^{oct}, [-]	0,0	0,0	0,000
Q_1^{oct}, [МПа]	0,0	0,008	0,063
C_1^{oct}, [МПа]	383,78	620,8	684,7
D_1^{oct}, [-]	0,0	4,57	5,04
$\tau_{0_2}^{oct}$, [МПа]	-	110,78	82,3
b_2^{oct}, [-]	-	1129,75	294,2
Q_2^{oct}, [МПа]	-	2,82	46,7
C_2^{oct}, [МПа]	-	100 000	97 818
D_2^{oct}, [-]	-	0,0	0,0
$\tau_{0_3}^{oct}$, [МПа]	-	-	114,8
b_3^{oct}, [-]	-	-	0,009
Q_3^{oct}, [МПа]	-	-	1613,9
C_3^{oct}, [МПа]	-	-	24 873
D_3^{oct}, [-]	-	-	0,030
Количество итераций	5540	16 057	8101
Значение функционала	0,361	0,151	0,144

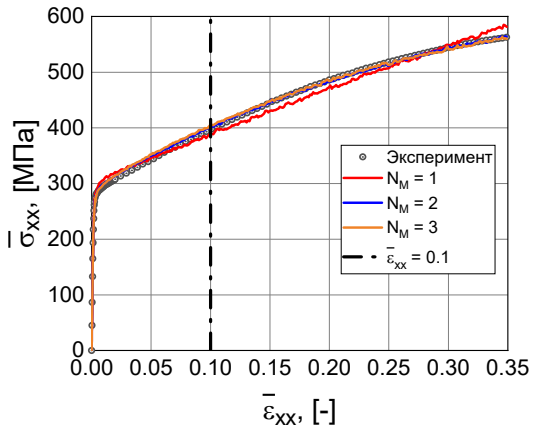


Рис. 4. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными для никеля НП2

Fig. 4. Comparison of modeling results with experimental data for NP2 nickel

Аналогичная процедура идентификации была использована для поиска констант однофазной модели

с учетом взаимного влияния механизмов упрочнения (35)–(38). В табл. 3 представлены значения параметров многофазной модели в случае учета двух механизмов деформирования и однофазной модели в случае учета двух механизмов упрочнения.

Таблица 3

Сравнение моделей

Table 3

Comparison of models

Параметр	$N_M=2$ (мультимеханизмы деформирования)	$N_M=2$ (мультимеханизмы упрочнения)
G, [МПа]	75 442	79 655
τ_0^{oct}, [МПа]	-	94,5
$\tau_{0_1}^{oct}$, [МПа]	93,5	-
b_1^{oct}, [-]	0,000	0,000
Q_1^{oct}, [МПа]	0,008	120,4
C_1^{oct}, [МПа]	620,9	100,0
D_1^{oct}, [-]	4,6	3,2
$\tau_{0_2}^{oct}$, [МПа]	110,8	-
b_2^{oct}, [-]	1129,8	0,0001
Q_2^{oct}, [МПа]	2,822	1092,4
C_2^{oct}, [МПа]	100 000	514,1
D_2^{oct}, [-]	0,0	3,97
Количество итераций	16 057	14 945
Значение функционала	0,151	0,134

На рис. 5 показано сравнение результатов расчетов с использованием многофазной и однофазной моделей с экспериментальными данными. Для проверки статистической стабильности расчеты проводились для случайно сгенерированных ориентаций монокристаллов в представительном объеме.

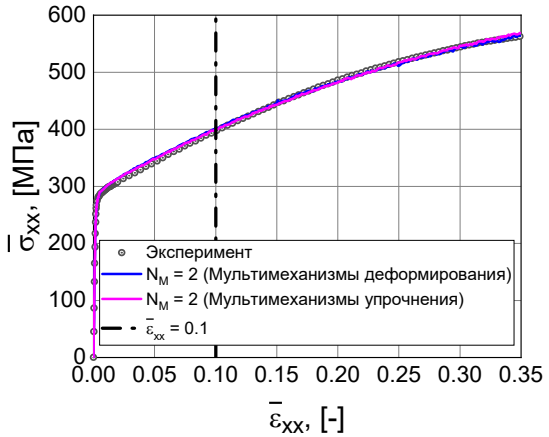


Рис. 5. Сравнение расчетных и экспериментальной кривых

Fig. 5. Comparison of calculated curves with experimental one

5. Смена доминирующего механизма неупругого деформирования

Важным аспектом микроструктурного моделирования неупругого деформирования монокристаллических материалов является учет взаимодействия различных семейств СС. Так, при наличии нескольких механизмов неупругого деформирования возникает вопрос о доминирующем механизме, условиях его реализации и погрешности при неучете недоминирующих (вторичных) механизмов.

В табл. 4 представлены результаты сравнения ориентационных зависимостей пластической деформации для октаэдрической СС ($N_{\text{M}} = 1$, $N_{\text{SS}} = 12$), кубической СС ($N_{\text{M}} = 1$, $N_{\text{SS}} = 6$) и смешанной СС ($N_{\text{M}} = 2$, $N_{\text{SS}_1} = 12$, $N_{\text{SS}_2} = 6$), описываемой уравнением (5), при мягком одноосном нагружении для различных уровней нагрузки. При напряжении 315 МПа доминирует вклад октаэдрической СС. Начиная с 350 МПа, одновременно сосуществуют вклады от обеих СС, при этом кубические системы скольжения имеют доминирующий вклад вблизи направления [111], октаэдрические системы доминируют в остальных областях. С ростом напряжений до 390 МПа происходит смена доминирующего механизма неупругого деформирования. Выше 400 МПа для всех ориентаций, за исключением близких к направлению [001] доминирует кубическая СС. Детали получения полей в пределах сферического треугольника описаны в работе [36].

Направление ориентаций максимальных в пределах сферического треугольника пластических деформаций меняется с ростом нагрузки. Как видно из табл. 4, при рассмотрении октаэдрической СС при небольшом уровне нагрузки (например, при напряжении 340 МПа) в угловом распределении в пределах полного телесного угла наблюдается 48 направлений максимумов. С ростом нагрузки максимумы становятся менее узконаправленными. При уровнях нагрузки от 360 до 440 МПа наблюдается 24 направления максимумов. Затем, до 587 МПа, доминирующими являются всего лишь 6 направлений $\langle 001 \rangle$ глобальных максимумов, однако в дальнейшем в силу нелинейного характера упрочнения максимальный уровень пластических деформаций наблюдается вблизи первичных 48 направлений.

Заключение

Предложена микроструктурная модель мультимеханизмов неупругого деформирования для описания поведения монокристаллических материалов и отдельных кристаллитов в поликристаллических материалах. Общая формулировка, учитывающая всевозможное взаимное влияние различных механизмов деформирования и упрочнения, требует значительного объема экспериментальных данных, поэтому рассмотрены два упрощенных варианта теории: (i) многофазные модели без учета взаимного влияния механизмов упрочнения и (ii)

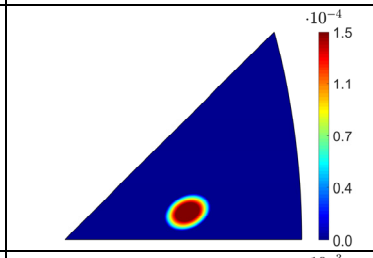
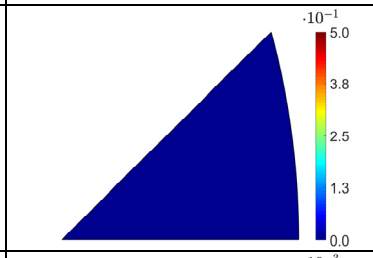
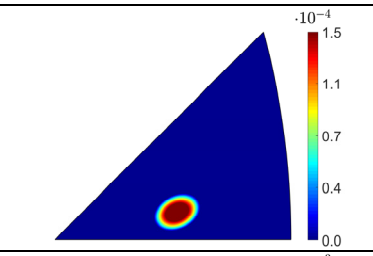
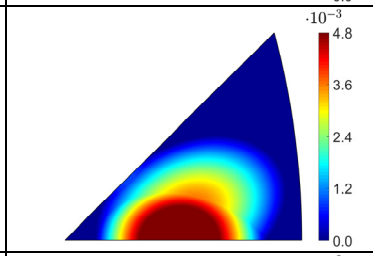
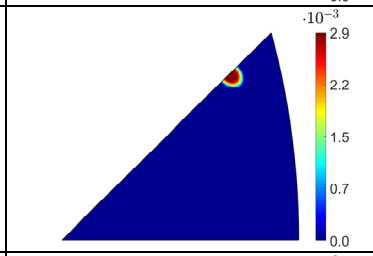
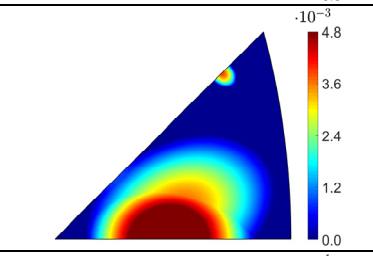
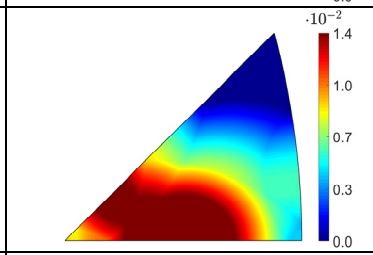
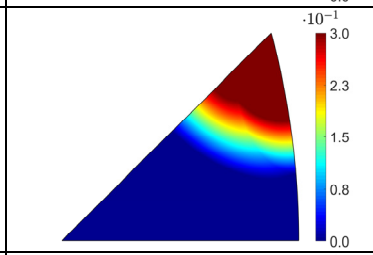
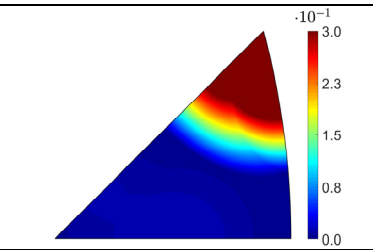
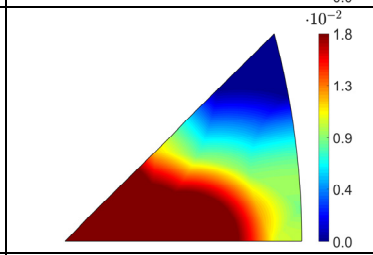
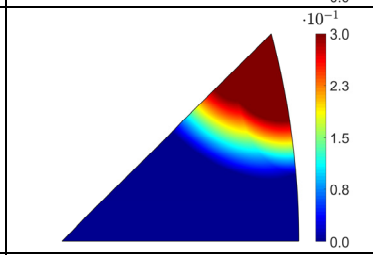
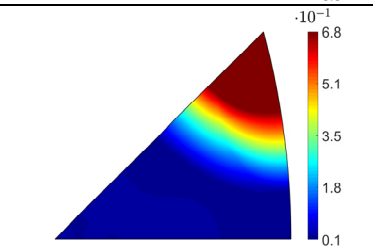
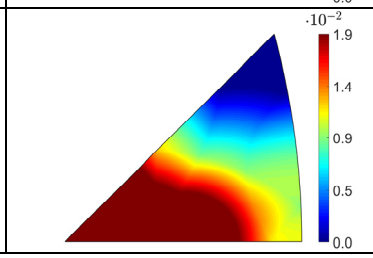
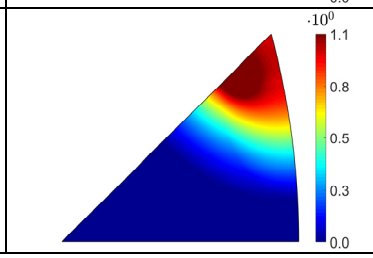
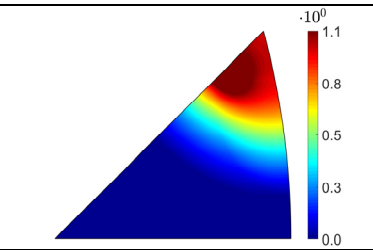
однофазные модели с учетом взаимного влияния механизмов упрочнения. Для более точного описания кривой «напряжение – деформация» рассматриваются как двучленные, так и трехчленные законы эволюции внутренних переменных, обеспечивающие наличие как горизонтальной асимптоты на диаграмме деформирования, так и наклонной, соответствующей асимптотическому линейному упрочнению. Исследована термодинамическая состоятельность рассматриваемых моделей материала. Условием выпуклости свободной энергии является положительная определенность тензора упругих модулей $^4\mathbf{C}$ и матриц перекрестного влияния $C_{ij}^{\alpha\beta}$ и $Q_{ij}^{\alpha\beta}$. Неотрицательность диссипации обеспечивается положительной определенностью матриц $\hat{D}_{ij}^{\alpha\beta} = D_i C_{ij}^{\alpha\beta}$ и $\hat{b}_{ij}^{\alpha\beta} = b_i Q_{ij}^{\alpha\beta}$. Результаты идентификации параметров микроструктурной модели и последующей верификации предложенной модели показали работоспособность предложенных алгоритмов и высокую точность результирующих прогнозов как для монокристаллов, так и для поликристаллов.

Таблица 4

Сравнение ориентационных зависимостей пластической деформации для вкладов октаэдрической, кубической и смешанной систем скольжения при различных уровнях нагрузки

Table 4

Comparison of orientation dependences of plastic strain for contributions from octahedral, cubic, and mixed slip systems at different load levels

σ, [МПа]	ε_{oct}^{p}, %	ε_{cube}^{p}, %	ε_{sum}^{p}, %
315			
350			
400			
420			
425			

Библиографический список

1. Cailletaud, G. Study of plastic/viscoplastic models with various inelastic mechanisms / G. Cailletaud, K. Saï // Int. J. Plast. – 1995. – Vol. 11. – P. 991–1005.

2. Taleb, L. Numerical simulation of complex ratcheting tests with a multi-mechanism model type / L. Taleb, G. Cailletaud, L. Blaj // Int. J. Plast. – 2006. – Vol. 22. – P. 724–753.

3. Saï, K. Multi-mechanism models for the description of ratcheting: effect of the scale transition rule and of the coupling between hardening variables / K. Saï, G. Cailletaud // Int. J. Plast. – 2007. – Vol. 23. – P. 1589–1617. DOI: 10.1016/j.ijplas.2007.01.011

4. Wolff, M. Consistency for two multi-mechanism models in isothermal plasticity / M. Wolff, L. Taleb // Int. J. Plast. – 2008. – Vol. 24. – P. 2059–2083.

5. Taleb, L. An updated version of the multimechanism model for cyclic plasticity / L. Taleb, G. Cailletaud // Int. J. Plast. – 2010. – Vol. 26, no 6. – P. 859–874.

6. Saï, K. Multi-mechanism models: present state and future trends / K. Saï // Int. J. Plast. – 2011. – Vol. 27. – P. 250–28. DOI: 10.1016/j.ijplas. 2010.05.003 34

7. Temperature-dependent, multi-mechanism crystal plasticity reveals the deformation and failure behaviour of multi-principal element alloys / Y. Xu, X. Lu, X. Yang, W. Li [et al.] // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2024. – Vol. 185. – 105549.

8. Asaro, R.J. Crystal plasticity / R.J. Asaro // Journal of Applied Mechanics. – 1983. – Vol. 50, no. 4b. – P. 921–934.

9. Cailletaud, G. A micromechanical approach to inelastic behavior of metals / G. Cailletaud // International Journal of Plasticity. – 1992. – Vol. 8, no. 1. – P. 55–73.

10. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры / П.В. Трусов, А.И. Швейкин, Е.С. Нечаева, П.С. Волегов // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15, № 1. – С. 33–56.

11. 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.

12. Грищенко, А.И. Моделирование процессов упругопластического деформирования монокристаллических сплавов / А.И. Грищенко, А.С. Семенов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. –2022. – Т. 2. – P. 58–71.

13. Нелинейная механика материалов / Ж. Бессон, Ж. Кахето, Ж.Л. Шабош, С. Форест; пер. с франц. А.С. Кравчука. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. – 397 с. [Non-linear mechanics of materials / J. Besson [et al.]. – Springer Science & Business Media, 2009.]

14. Конечно-элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин Ч. 1. Модели материала, критерии разрушения, идентификация параметров / А.С. Семенов, А.И. Грищенко, М.Е. Колотников, Л.Б. Гецов // Вестник УГАТУ. – 2019. – Т. 23, № 1 (83). – С. 70–81.

15. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов / Р.Е. Шалин, И.Л. Светлов, Е.Б. Качанов, В.Н. Толораия, О.С. Гаврилин. – М: Машиностроение, 1997. – 333 с.

16. Иноземцев, А.А. Двигатель ПД-14 – будущее российского авиапрома / А.А. Иноземцев // Инновации. Открытое акционерное общество «Трансфер-Инновации». – 2013. – Т. 12, № 182. – С. 77–80.

17. Иноземцев, А.А. О программе создания авиационных газотурбинных двигателей пятого поколения для семейства самолетов МС-21 / А.А. Иноземцев // Вестник Пермского федерального исследовательского центра. – 2010. – № 4. – С. 28–46.

18. Каблов, Е.Н. Монокристаллические никелевые рений содержащие сплавы для турбинных лопаток ГТД / Е.Н. Каблов, В.Н. Толорайя, Н.Г. Орехов // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2002. – № 7. – С. 7–11.

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

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

21. Семенов, А.С. Моделирование процесса возникновения овальности поперечного сечения образцов из монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов при растяжении / А.С. Семенов, М.О. Беляев, А.И. Грищенко // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2015. – № 2.– С. 153–177.

22. Температурно-ориентационная зависимость характеристик кратковременной прочности, модуля Юнга и коэффициента линейного расширения монокристаллов сплава ЖС6Ф / И.Л. Светлов [и др.] // Проблемы прочности. – 1987. – № 1. – С. 51–56.

23. Упругие свойства монокристаллов никелевых сплавов / А.И. Кривко, А.И. Епишин, И.Л. Светлов, А.И. Самойлов // Проблемы прочности. – 1988. – № 2. – С. 68–75.

24. Светлов, И.Л. Анизотропия коэффициента Пуассона монокристаллов никелевого сплава / И.Л. Светлов, А.И. Епишин, А.И. Кривко // Доклады АН СССР. – 1988. – № 2. – С. 1372–1375.

25. Luo, C. Anisotropic thermomechanical fatigue of a nickel-base single-crystal superalloy Part I: Effects of crystal orientations and damage mechanisms / C. Luo, H. Yuan // International Journal of Fatigue. – 2023. – Vol. 168. – P. 107438.

26. Luo, C. Life assessment of anisotropic low cycle fatigue of nickel-base single crystal superalloy / C. Luo, H. Yuan // International Journal of Fatigue. – 2023. – Vol. 167. – P. 107310.

27. Бондарь, В.С. Неупругость. Варианты теории / В.С. Бондарь. – Физматлит, 2004. – 144 с.

28. Пальмов, В.А. Нелинейная механика деформируемых тел / В.А. Пальмов. – СПб: Изд-во СПбГПУ, 2014. – 792 с.

29. Meric, L. Single crystal modelling for structural calculations: Part I – Model presentation / L. Meric, P. Poubanne, G. Cailletaud // Journal of Mechanical Design. – 1991. – Vol. 113. – P. 162–170.

30. Reed, R.C. The Superalloys: Fundamentals and Applications / R.C. Reed. – Cambridge: Cambridge University Press, 2008. – 372 p.

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

32. Murtazin, I.R. Simulation of inelastic response of polycrystalline nickel based on micromechanical model homogenization / I.R. Murtazin, B.E. Melnikov, A.S. Semenov // Advanced Problem in Mechanics III: Proceedings of the XLIX International Summer SchoolConference "Advanced Problems in Mechanics". – 2023. – P. 427–444. DOI: 10.1007/978-3-031-37246-9

33. MATLAB Documentation. 2025. – URL: https://www.mathworks.com/help/matlab (accessed: 2025-09-09).

34. Gasnikov, A.V. Modern numerical optimization methods. The universal gradient descent method: a tutorial / A.V. Gasnikov. – Moscow: MIPT, 2018. – 291 p.

35. Pearson, K. Notes on regression and inheritance in the case of two parents / K. Pearson // Proceedings of the Royal Society of London. – 1895. – P. 240–242.

36. Семенова, А.А. Влияние кристаллографической ориентации ГЦК-монокристаллов на уровень пластических деформаций при одноосном монотонном и циклическом термомеханическом воздействиях / А.А. Семенова, А.И. Грищенко, А.С. Семенов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2023. – № 5. – С. 81–98. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.5.08

References

1. Cailletaud G., Saï K. Study of plastic/viscoplastic models with various inelastic mechanisms. *Int. J. Plast*. 1995. Vol. 11, pp. 991–1005.

2. Taleb L., Cailletaud G., Blaj L. Numerical simulation of complex ratcheting tests with a multi-mechanism model type. *Int. J. Plast*. 2006. Vol. 22, pp. 724–753.

3. Saï K., Cailletaud G. Multi-mechanism models for the description of ratcheting: effect of the scale transition rule and of the coupling between hardening variables. *Int. J. Plast*. 2007. Vol. 23, pp. 1589–1617. doi:10.1016/j.ijplas.2007.01.011

4. Wolff M., Taleb L. Consistency for two multi-mechanism models in isothermal plasticity. *Int. J. Plast*. 2008. Vol. 24, pp. 2059–2083.

5. Taleb L., Cailletaud G. An updated version of the multi-mechanism model for cyclic plasticity. *Int. J. Plast*. 2010. Vol. 26. no 6, pp. 859–874.

6. Saï, K. Multi-mechanism models: present state and future trends. *Int. J. Plast*. 2011. Vol. 27, pp. 250–28. doi: 10.1016/j.ijplas. 2010.05.003 34.

7. Xu Y., Lu X., Yang X., Li W. et al. Temperature-dependent, multi-mechanism crystal plasticity reveals the deformation and failure behaviour of multi-principal element alloys. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2024. Vol. 185. 105549.

8. Asaro R.J. Crystal plasticity. *Journal of Applied Mechanics*, 1983, Vol. 50, no. 4b, pp. 921-934.

9. Cailletaud G. A micromechanical approach to inelastic behavior of metals. International *Journal of Plasticity*, 1992, Vol. 8, №. 1, pp. 55–73.

10. 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.

11. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevyye modeli mono- i polikristallicheskikh materialov: teoriya, algoritmy, primery primeneniya / [Multilevel models of single- and polycrystalline materials: theory, algorithms, examples of application]. Novosibirsk: Publishing House of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2019. 605 p.

12. Grishchenko A.I., Semenov A.S. Modeling of the elastoplastic deformation process of single crystal superalloys. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2022, no. 2, pp. 58-72. DOI: 10.15593/perm.mech/2022.2.06

13. Besson J., Cailletaud G., Chaboche J-L., Forest S. Nonlinear mechanics of materials, Springer Science & Business Media, 2009. 433 p.

14. 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, identifikatciia parametrov / [Finite-element analysis of thermal fatigue of gas turbine blades. Part 1. Material models, fracture criteria, parameter identification]. *Vestneyk Ufimskogo gosudarstvennogo aviatcionnogo tekhnicheskogo universiteta*, 2019, Vol. 23, no. 1, pp. 70–81.

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

16. Inozemtsev A.A. Dvigatel' PD-14 - budushcheye rossiyskogo aviaproma [Engine PD-14 - the future of the Russian aviation industry]. Innovations. JSC "Transfer-Innovations", 2013, V. 12, №. 182, pp. 77–80.

17. Inozemtsev A.A. O programme sozdaniya aviatsionnykh gazoturbinnykh dvigateley pyatogo pokoleniya dlya semeystva samoletov MS-21 [On the program for the creation of fifth-generation aircraft gas turbine engines for the MS-21 aircraft family]. Bulletin of the Perm Federal Research Center. 2010, №. 4, pp. 28–46.

18. Kablov E.N., Toloraiya V.N., Orekhov N.G. Monokristallicheskie nikelevye renii` soderzhashchie splavy dlia turbinnykh lopatok GTD [Single crystal rhenium-containing nickel alloys for turbine engine blades]. Metallovedenie i termicheskaia obrabotka metallov. 2002, no. 7, pp. 7–11.

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

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

21. Semenov A.S., Beliaev M.O., Grishchenko A.I. Modelirovanie protcessa vozniknoveniia oval`nosti poperechnogo secheniia obraztcov iz monokristallicheskikh zharoprochnykh nikelevykh 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

22. Svetlov I.L. et al. Temperature-orientation dependences of the characteristics of short-term strength, Young's modulus, and the coefficient of linear expansion of single crystals of ZhS6F alloy. *Strength of Materials*. 1987, Vol. 1, pp. 51-55.

23. Krivko A.I. et al. Elastic properties of single crystals of nickel alloys. *Strength of Materials*. 1988, Vol. 20, no. 2, pp. 214-223.

24. Svetlov I.L. et al. Anisotropy of Poisson's ratio of single crystals of nickel alloy. Soviet Physics Doklady, 1988, Vol. 33, pp. 771.

25. Luo C., Yuan H. Anisotropic thermomechanical fatigue of a nickel-base single-crystal superalloy Part I: Effects of crystal orientations and damage mechanisms. *International Journal of Fatigue*. 2023. Vol. 168. pp. 107438.

26. Luo C., Yuan H. Life assessment of anisotropic low cycle fatigue of nickel-base single crystal superalloy. *International Journal of Fatigue*. 2023. Vol. 167. pp. 107310.

27. Bondar V.S. Inelasticity. Theory Variants. Fizmatlit, 2004, 144 p.

28. Palmov V.A. Nonlinear Mechanics of deformable solid bodies. St. Petersburg: SPbSPU Publishing House, 2014, 792 p.

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

30. Reed R. C. The Superalloys*: Fundamentals and Applications*. – Cambridge: Cambridge University Press, 2008. – 372 p.

31. 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.

32. Murtazin I.R., Melnikov B.E., Semenov A.S. Simulation of inelastic response of polycrystalline nickel based on micromechanical model homogenization // Advanced Problem in Mechanics III: Proc. of the XLIX Int. Summer School Conference "Advanced Problems in Mechanics". 2023. P. 427–444. DOI: 10.1007/978-3- 031-37246-9.

33. MATLAB Documentation. 2025. URL: https://www.mathworks.com/help/matlab (online; accessed: 2025-09-09).

34. Gasnikov A.V. Modern numerical optimization methods. The universal gradient descent method: a tutorial. Moscow: MIPT, 2018. 291 p. ISBN: 978-5-7417-0667-1.

35. Pearson K. Notes on regression and inheritance in the case of two parents. *Proceedings of the Royal Society of London*. 1895. P. 240–242.

36. Semenova A.A., Grishchenko A.I., Semenov A.S. Influence of the crystallographic orientation of FCC single crystals on plastic strain under uniaxial monotonic and cyclic thermomechanical loading. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2023, no. 5, pp. 81-98. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.5.08

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ № 25-19-00921 «Многоуровневые микроструктурные модели неупругого деформирования и разрушения моно- и поли-кристаллических жаропрочных сплавов при сложном термомеханическом нагружении».

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов равноценен.

Financing. The research is funded by the Russian Scientific Foundation № 25-19-00921 «Multilevel microstructural models of inelastic deformation and fracture for monocrystalline and polycrystalline superalloys under complex thermo-mechanical loading».

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

The authors' contributions are equal.