

# Статистическая интерпретация кинетической концепции разрушения

А. А. Самолетов\*

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина, 283048 Донецк, РФ

## Аннотация

Предложена динамическая модель кинетической концепции разрушения. Модель основана на предположениях статистического характера. Рост величины объема трещин связан с изменениями состояния окружающего трещины материала, находящегося в термостате. Получена система стохастических дифференциальных уравнений для их совместной динамики. Долговечность материала определяется временем достижения границы устойчивости.

## 1 Введение

В недавней работе [1], основываясь на предположениях статистического (вероятностного) характера, предложена динамическая модель кинетической концепции разрушения. Соответствующие стохастические уравнения движения имеют математические особенности, нуждающиеся в исследовании. Данная статья посвящена анализу этих особенностей.

Напомним мотивацию и основные предположения, лежащие в основе динамической модели кинетической концепции прочности материалов, представленной в докладе [1]. Кинетическая концепция [2, 3, 4], описывает разрушение как последовательный процесс, включающий несколько этапов. На первом этапе разрушение представляет собой случайный термоактивационный процесс образования микротрещин с некоррелированной или слабокоррелированной структурой, что позволяет предположить существование квазиравновесного состояния в распределении вероятностей величины объема, занимаемого трещинами. Затем следует стадия формирования переходного состояния, на которой происходит взаимодействие трещин. Финальная стадия характеризуется образованием критических трещин, приводящих к разрушению материала. На основе

---

\*Email: samolet@donfti.ru

анализа многочисленных экспериментальных данных С. Н. Журков предложил единую формулу для долговечности материалов, величина  $\tau$ , известную как формула Журкова:

$$\tau = \tau_0 \exp \left\{ \frac{U_0 - \gamma \sigma}{k_B T} \right\}, \quad (1)$$

где  $U_0$  — энергия активации процесса,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура,  $\gamma$  — активационный объем (структурный фактор),  $\sigma$  — внешнее приложенное напряжение (предполагается одноосное нагружение). Эта формула позволила С.Н. Журкову установить, что тепловое движение атомов непосредственно участвует в разрушении материала: тепловые флуктуации с ненулевой вероятностью приводят к резкому увеличению кинетической энергии атомов. Вот только, насколько долго в среднем надо ждать критически значимой флуктуации тепловой энергии? Вопрос, ответ на который дает формула (1). Таким образом, согласно кинетической концепции разрушения развитой С. Н. Журковым, прочность тела определяется наряду с силами межатомного взаимодействия, также и интенсивностью тепловых флуктуаций.

## 2 Основные предположения

Формула Журкова представляет усредненный результат. Сама по себе она ничего не говорит о характере процессов накопления и роста объема трещин предшествующих разрушению материала. А такие процессы, совместимые с формулой долговечности (1), могут быть весьма разнообразными, что не вызывает удивления. Действительно, разрушение материала — это комплексный процесс, в котором образование, накопление, взаимодействие и эволюция трещин зависят от сложного перемещения большого количества атомов. В этом процессе существует множество переходных состояний, являющихся лишь временными, короткоживущими, остающимися скрытыми за магистральными изменениями в материале, протекающими до его разрушения. Следить за перемещениями большого количества атомов на коротких временных интервалах представляется хоть и важной, интересной, но в практическом смысле избыточной задачей: за деталями можно не заметить магистральный процесс. Теория энергетического ландшафта огрубляет и упрощает ситуацию: кинетику разрушения можно представить с помощью одномерной или низкоразмерной координатной реакции. В таком случае, обращение к теории скоростей химических реакций [5] естественно, что было отмечено достаточно давно [6].

В докладе [1] анонсирована динамическая интерпретация кинетической концепции разрушения Журкова, основанная на допущениях статистического ха-

рактера. Базой для этой интерпретации послужили исследования в области статистической механики [7], использованные, в частности, для анализа динамических систем, встречающихся в математической биологии [8, 9].

Предположения, лежащие в основе динамической модели кинетической концепции разрушения [1], следующие:

1. Для большого числа первоначально образовавшихся трещин, в отсутствии внешнего приложенного напряжения и структурных изменений материала, существует равновесное (в действительности, квазиравновесное, поскольку разрушение в конечном итоге происходит) распределение величины суммарного объёма трещин,  $x$ , являющееся результатом тепловых флуктуаций в перемещении атомов материала. Это распределение характеризуется энергетическим профилем  $U(x)$ , связанным с плотностью распределения вероятностей  $\omega(x)$  по формуле  $U(x) \propto -k_B T \ln \omega(x)$ .
2. Трещины находятся в динамическом взаимодействии с окружающим материалом, который можно охарактеризовать коллективной переменной,  $y$ , определяющей интенсивность тепловых флуктуаций;
3. В присутствии внешнего приложенного напряжения  $\sigma$  энергетический профиль  $U(x)$  величины объема трещин претерпевает изменение за счёт работы, выполняемой этим напряжением,  $\sigma : U(x) \rightarrow U(x, \sigma) = U(x) - \gamma \sigma x$ .
4. Процесс накопления трещин можно охарактеризовать динамикой роста величины объема трещин  $x$  (координата процесса), соответствующей профилю энергии  $U(x, \sigma)$  (профиль процесса). Как только величина  $x$  достигнет экстремума (переходного состояния), тогда начинается рост величины объема трещин с «неограниченно» возрастающей скоростью (Рис. 1).

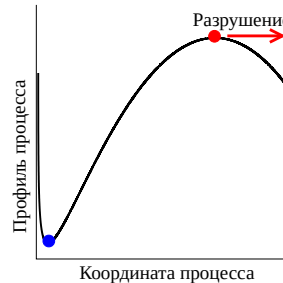


Рис. 1: Долговечность материала определяется математическим ожиданием времени выхода координаты процесса на локальный максимум профиля процесса с последующим преодолением энергетического барьера (разность между значениями энергетического профиля в состояниях локального максимума и минимума).

На основе предположений (1-4), следуя сформулированному в работе [7] теоретическому методу, развитому и численно тестированному в работах [8, 9, 10, 11, 12], предложена следующая система стохастических дифференциальных уравнений [1]:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \Gamma y x, \\ \dot{y} &= -\mu \Gamma \left[ x \frac{d}{dx} U(x; \sigma) - k_B T \right] - \lambda y + \sqrt{2\mu \lambda k_B T} \xi(t)\end{aligned}\quad (2)$$

где  $\xi(t)$  – стандартный гауссов процесс «белого шума»:  $\langle \xi(t) \rangle = 0$ ,  $\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \delta(t - t')$ ,  $\Gamma, \lambda, \mu$  – неотрицательные постоянные параметры. Существенно, что переменная объема трещин  $x$  – строго положительная величина,  $x > 0$ . Тепловые флуктуации среды описываются одной коллективной переменной  $y$ . Пара  $(x, y)$  – минимально возможный набор независимых переменных, учитывающий совместную динамику величины объема трещин и соответствующее изменение состояния окружающей среды.

Не представляет труда доказать, что совместная плотность распределения вероятностей  $\omega(x, y)$ , обусловленная сделанными предположениями, то есть, функция

$$\omega(x, y) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} U(x; \sigma) \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \frac{y^2}{2\mu} \right\}, \quad (3)$$

инвариантна для динамической системы (2). Первый фактор в выражении инвариантной плотности (3) имеет определяющее значение для сравнения с формулой (1). В отношении коллективной переменной среды  $y$  принято, что в равновесии она распределена по Гауссу. Это допущение хоть и естественно в свете предельных теорем теории вероятностей, но не обязательно для нашей модели, что будет обсуждено отдельно.

Доказательство свойства инвариантности плотности распределения 3 проводится непосредственной подстановкой выражения (3) в уравнение Фоккера–Планка,

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega = \mathcal{F}^* \omega,$$

соответствующее системе стохастических дифференциальных уравнений (2), где  $\mathcal{F}^*$  – оператор Фоккера–Планка, с последующей проверкой факта, что  $\omega(x, y)$  – его стационарное решение:

$$\mathcal{F}^* \omega(x, y) \equiv 0.$$

Данная процедура является рутинной.

Оператор Фоккера–Планка для системы уравнений (2) имеет вид

$$\mathcal{F}^*\omega = -\Gamma y \frac{\partial}{\partial x} (x\omega) + \mu\Gamma \left[ x \frac{dU}{dx} - k_B T \right] \frac{\partial}{\partial y} \omega + \lambda \frac{\partial}{\partial y} (y\omega) + \mu\lambda k_B T \frac{\partial^2}{\partial y^2} \omega. \quad (4)$$

После подстановки  $\omega = \omega(x, y)$  в выражение (4) и последующего вычисления всех производных,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \omega(x, y) &= -\frac{1}{k_B T} \left( \frac{d}{dx} U(x; \sigma) \right) \omega(x, y), \\ \frac{\partial}{\partial x} \omega(x, y) &= -\frac{1}{k_B T} \frac{y}{\mu} \omega(x, y), \\ \frac{\partial}{\partial x} \omega(x, y) &= -\frac{1}{\mu k_B T} \omega(x, y) + -\left( \frac{y}{\mu k_B T} \right)^2 \omega(x, y), \end{aligned}$$

получаем

$$\mathcal{F}^*\omega(x, y) = 0 \cdot \omega(x, y) \equiv 0,$$

что и требовалось доказать.

Свойство эргодичности динамической системы (2) для распределения вероятностей с плотностью (3) требует дополнительного исследования, которое будет проведено отдельно. В работе [1], основываясь на результатах статей [8, 9], энергетический профиль  $U(x)$ , выбран из условия, что при  $x \rightarrow +0$  функция  $U(x)$  растет быстрее многочлена любой степени:

$$U(x) = -D [\ln(x) + u(x)], \quad (5)$$

где  $u(x)$  – некоторый многочлен такой, что  $u(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} +\infty$ , а  $D$  – постоянная, имеющая размерность энергии. Для такой функции энергетического профиля свойство эргодичности проверим численно.

Забегая вперед отметим, что выбор функции энергетического профиля нетривиален и имеет определяющее значение для предложенной модели.

### 3 Тестовые симуляции решения уравнений (2)

Следуя работе [1], выполним численное решение динамических уравнений (2) для скорости роста объема трещин с учетом тепловых флуктуаций в материале.

Прежде всего, запишем кинетические уравнения (2) в безразмерной форме. Определим безразмерное время в единицах времени релаксации возмущений окружающей среды:

$$\tau = \lambda t.$$

Величины, имеющие размерность энергии, определяем в единицах тепловой энергии  $k_B T$  так, что

$$\frac{1}{k_B T} U(x; \sigma) = \tilde{U}(x; \sigma), \quad \frac{1}{k_B T} \frac{y^2}{2\mu} = \frac{1}{2} \eta^2.$$

Определим новый безразмерный параметр,

$$\alpha = \sqrt{\mu k_B T} \frac{\Gamma}{\lambda}.$$

Напомним, что переменная объема трещин изначально является безразмерной величиной, так, что величина объема трещин измеряется в единицах величины активационного объема  $\gamma$ . Определим соответствующий безразмерный параметр

$$\beta = \frac{\gamma \sigma}{k_B T}$$

В результате приходим к системе динамических уравнений в безразмерном виде

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= \alpha \eta x, \\ \frac{d\eta}{d\tau} &= -\alpha \left[ x \frac{d}{dx} \tilde{U}(x; \beta) - 1 \right] - \eta + \sqrt{2} \xi(\tau). \end{aligned} \quad (6)$$

Отметим специфическое свойство динамических уравнений (2) и (6): изменение масштаба величины  $x : x \rightarrow ax$ , где  $a > 0$  – постоянный множитель, не изменяет форму уравнений движения. Меняется лишь энергетический профиль процесса,

$$\tilde{U}(x; \sigma) \xrightarrow{x \rightarrow ax} \tilde{U}(ax; \sigma) = \frac{1}{k_B T} U(ax; \sigma) = \tilde{U}_a(x; \sigma).$$

При этом высота барьера не меняется.

Для верификации предложенной кинетической модели процесса разрушения выполнено численное моделирование системы динамических уравнений (6). Расчёты проведены методом Рунге–Кутты четвёртого порядка со случайным вкладом, взятым один раз на всем интервале от  $t$  до  $t + dt$  с величиной шага  $dt = 0.005$ .

Энергетический профиль процесса определялся на основе уравнения (5):

$$\tilde{U}(x; \beta) = -\tilde{D} [\ln(x) + ax(x - b)] - \beta x.$$

Здесь  $u(x) = ax(x - b)$ , где  $a$  и  $b$  – постоянные параметры. Значения параметров:  $\tilde{D} = 1$ ,  $a = 10$ ,  $b = 2$ , – оставались постоянными во всех расчетах. Эти параметры не связаны явным образом с величинами нагрузки и температуры. Параметры  $\alpha$  и  $\beta$ , которые сложным образом связаны с величинами температуры и приложенного напряжения, а также другими параметрами, варьировались. В численном эксперименте определялась зависимость долговечности материала от приложенной нагрузки. Значение температуры и соответствующего параметра  $\alpha$  оставались постоянными:  $\alpha = 0.005$ . Величина параметра  $\beta$ , прямо пропорциональна величине приложенного напряжения,  $\gamma\sigma \propto \beta$ , и однозначно его характеризует при неизменных остальных параметрах системы. Таким образом, величина нагрузки измерялась как величина параметра  $\beta$ . В выполненных численных экспериментах параметр  $\beta$  варьировался и принимал следующий ряд значений:  $\beta = 1, 2, 3, 4, 5$ . В качестве наблюдаемой величины была выбрана скорость изменения (роста) объема, занимаемого трещинами,  $v(\tau) = \dot{x}(\tau) = \alpha y(\tau) x(\tau)$ . Согласно сформулированным ранее представлениям, долговечности материала соответствует время, прошедшее с момента нагружения до момента начала неограниченного роста величины объема трещин. В нашей модели соответствующий момент времени является случайной величиной. Среднее значение времени долговечности не вычислялось. Вместо этого, была проведена серия численных экспериментов при полностью равных условиях и фиксировались типичные ситуации. Полученный типичный результат для наблюдаемой долговечности материала представлен на Рис. 2. Он качественно соответствует ожидаемому. По осям: «Скорость роста» – это  $v(\tau) = \alpha y(\tau) x(\tau)$ , «Безразмерное время» – это  $\tau$ .

## 4 Динамика в отсутствии флуктуаций

Кинетические уравнения (2) учитывают в явном виде как тепловые флуктуации в материале, так и изменение состояния самого материала в зависимости от величины объема, занимаемого трещинами. Соответствующие уравнения движения являются стохастическими. Специальный интерес представляет транс-

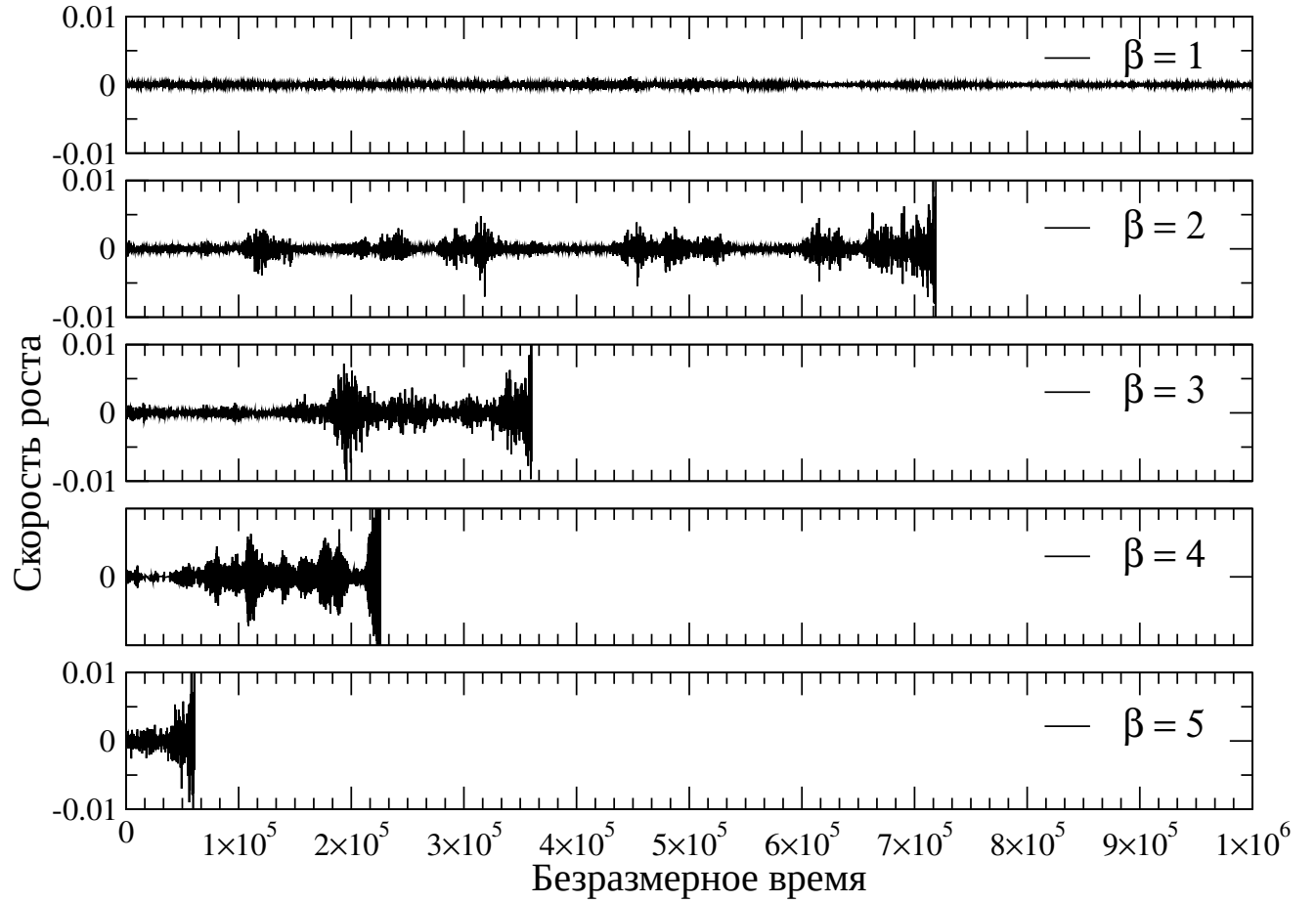


Рис. 2: Типичная зависимость скорости роста величины объема трещин  $v(\tau) = \alpha x(\tau)y(\tau)$  от безразмерного времени  $\tau$  для серии из пяти последовательно возрастающих величин нагрузки  $\beta$  при постоянной температуре:  $T = const$ ,  $\alpha = const = 0.005$ . Значения параметров функции профиля процесса остаются постоянными:  $\tilde{D} = 1$ ,  $a = 10$ ,  $b = 2$ .

формация вида стохастических кинетических уравнений (2) в предельном случае, когда тепловые флуктуации в материале считаются пренебрежимо малыми так, что динамические уравнения становятся детерминированными. Для ответа на этот вопрос, положим в кинетических уравнениях температуру  $T = 0$ . В таком случае уравнения движения приобретают вид системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \Gamma y x, \\ \dot{y} &= -\mu \Gamma x \frac{d}{dx} U(x; \sigma) - \lambda y.\end{aligned}$$

Коллективную переменную среды  $y$  из этой системы динамических уравнений можно исключить. Рассмотрим предельный случай: коллективная переменная  $y$ , характеризующая состояние материала, быстро подстраивается к изменениям

величины объема трещин  $x$  так, что допустимо пренебречь инерцией. В таком случае,

$$y = -\frac{\Gamma\mu}{\lambda}x\frac{d}{dx}U(x;\sigma)$$

в каждый момент времени  $t$ ,  $\lambda t \gg 1$ . Тогда уравнение для скорости изменения величины объема трещин приобретает вид:

$$\dot{x} = -\frac{\Gamma^2\mu}{\lambda}x^2\frac{d}{dx}U(x;\sigma).$$

Для этого уравнения функция энергетического профиля  $U(x;\sigma)$  является функцией Ляпунова. Действительно, непосредственно убеждаемся в том факте, что справедливо неравенство:

$$\frac{d}{dt}U(x;\sigma) = -\frac{\Gamma^2\mu}{\lambda}x^2\left(\frac{d}{dx}U(x;\sigma)\right)^2 \leq 0.$$

Поскольку значение  $x = 0$  никогда не достигается, знак равенства имеет место только в том случае, если

$$\frac{d}{dx}U(x;\sigma) = 0.$$

Такое поведение решения характерно для градиентных динамических систем.

Согласно принятым в модели допущениям, в отсутствие внешней нагрузки энергетический профиль процесса разрушения как функция объёма трещин демонстрирует характерную структуру: равновесный минимум при  $x = x_{eq}$  соответствует устойчивому состоянию, а неравновесный максимум при  $x = x_{ne} > x_e$  – пороговому состоянию, предшествующему развитию разрушения. Разница между значениями профиля в этих двух состояниях равна энергетическому барьеру отделяющему равновесное состояние трещин от критического, характеризующего начало процесса разрушения. Под нагрузкой  $\sigma > 0$  высота энергетического барьера уменьшается и при определенном значении  $\sigma = \sigma_{cr}$  становится нулевой. С этого момента скорость роста величины занимаемого трещинами объема начинает неограниченно возрастать, что характеризует начало процесса разрушения. В результате, приходим к описанию процесса разрушения как критического явления.

## 5 Обсуждение

В настоящей работе на основе статистических предположений построена динамическая модель кинетической концепции разрушения, описываемая системой

стохастических дифференциальных уравнений (2). Динамика изменений величины объема трещин связана с изменениями состояния окружающего материала, находящегося в термостате. Соответствующее динамическое поведение верифицировано в численном эксперименте. Долговечность материала является случайной величиной, характеристики которой требуют дальнейшего рассмотрения. Изучения, более тщательного, чем проведенное в данной работе, требуют дополнительные, но важные вопросы: об общем виде функции энергетического профиля; об эргодичности уравнений движения для предполагаемой функции плотности распределения вероятностей; не в последнюю очередь, вопрос о виде уравнений движения (2), их уникальности и возможных обобщениях. Ответам на эти вопросы будет посвящена следующая следующая часть данной работы.

## Список литературы

- [1] А. А. Самолетов. Статистическая Интерпретация Кинетической Концепции разрушения. In *III Всероссийская Научная Конференция «Физика и Техника Конденсированных Сред» ФТКС-2026*, page 101. ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», г. Донецк, 2026.
- [2] С. Н. Журков and Б.Н. Нарзуллаев. Временная зависимость прочности твердых тел. *Журнал технической физики*, 23(10):1677–1689, 1953.
- [3] С. Н. Журков. Проблемы прочности твердого тела. *Вестник АН СССР*, (11):32–35, 1957.
- [4] В. Р. Регель, А. И. Слуцкер, and Э. Е. Томашевский. *Кинетическая природа прочности твёрдых тел*. Наука, Москва, 1974.
- [5] Н. А. Kramers. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, 7(4):284–304, 1940.
- [6] W. Kauzmann. Flow of solid metals from the standpoint of the chemical-rate theory. *Trans. AIME*, 143:57–83, 1941.
- [7] A Samoletov and B Vasiev. Dynamic principle for ensemble control tools. *J Chem Phys*, 147(20):204106, 2017.
- [8] A Samoletov and B Vasiev. A mathematical framework for the statistical interpretation of biological growth models. *BioSystems*, 246:105342, 2024.
- [9] А.А. Самолетов. Индуцированные давлением переходы. Градиентные системы. *ФТВД*, 35(1):22–43, 2025.

- [10] A. Samoletov and B. Vasiev. Statistical approach to the gompertz growth model and the underlying timescales. In *Mathematical Modeling in Physical Sciences*, volume 446 of *Springer Proceedings in Mathematics and Statistics*, pages 67–77, Cham, 2024. Springer Nature Switzerland.
- [11] A.A. Samoletov and B.N. Vasiev. Some notes on dynamic principle for ensemble control tools. *Physics and high pressure technology (PHPT)*, 30(4):49–57, 2020.
- [12] A Samoletov and B Vasiev. Stochastic thermostats and temperature expressions. *J Phys : Conf Ser*, 1730(1):012125, 2021.