

**Клапченко Василь Іванович**Кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри фізики, [orcid.org/0000-0002-4093-5500](https://orcid.org/0000-0002-4093-5500)

Київський національний університет будівництва і архітектури, Київ

**Краснянський Григорій Юхимович**Кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри фізики, [orcid.org/0000-0002-2421-1270](https://orcid.org/0000-0002-2421-1270)

Київський національний університет будівництва і архітектури, Київ

**Кузнецова Ірина Олександрівна**Асистент кафедри фізики, [orcid.org/0000-0003-1800-1733](https://orcid.org/0000-0003-1800-1733)

Київський національний університет будівництва і архітектури, Київ

**Гаць Катерина Ігорівна**

Студент БЦІ-18

Київський національний університет будівництва і архітектури, Київ

**ФРАКТАЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТОХАСТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ  
І РОЗВИТОК СТАТИСТИЧНИХ УЯВЛЕНЬ**

***Анотація.** Ефективність залучення фрактальних моделей до розгляду складних багатокомпонентних систем, особливо тих, функціонування яких ґрунтується на стохастичних процесах, загальновідома. Зокрема до них належать і молекулярні системи, вивчення яких вважалося винятковою прерогативою загальновідомих методів статистичної фізики. На перший погляд видається, що накладання фрактального моделювання на статистичну задачу є своєрідним подвійним спрощенням, що мало б звузити область застосовності такого підходу. Проте фрактальне моделювання лише посилило вимоги до більш чіткого і точного формулювання статистичних задач, уточнення базових понять, уявлень про розрізненість частинок і т. п. У роботі вперше показано, що статистика молекулярних систем має базуватися на двох статистичних множниках  $G_n$  та  $F_m$ . Основою для множника  $G_n$  є розрізненість характеру руху та взаємодії частинок, а множника  $F_m$  – розрізненість способів заповнення фазових комірок. Разом вони формують фізичну статистику, яка чутлива до зміни характеру взаємодій у системі. Водночас математичні методи статистики, нечутливі до нюансів взаємодій, описують максимальний хаос у системі, фактично, ідеальний газ. Одним із здобутків проведеного дослідження є встановлення того, що обидві квантові статистики ґрунтуються лише на статистичному множнику  $F_m$ , основаному на розрізненості способів заповнення фазових комірок.*

***Ключові слова:** фрактал; стохастичні процеси; розрізненість; математична ймовірність; термодинамічна ймовірність; ентропія; класична та квантові статистики*

**Постановка проблеми**

Запровадження фрактального підходу до моделювання молекулярних систем, здійснене в роботі [1], дає змогу значно спростити розгляд складних систем з великою кількістю частинок  $N$  і фазових комірок  $Z$ , аналізуючи лише її мінімальну частину (мікросистему), яка є генератором відповідного стохастичного фракталу. Фрактальна властивість самоподібності і малі значення кількості фазових комірок генератора  $m$ , в кожній з яких може розміститися частинок  $n$  не менше, ніж  $m$ , дає змогу оцінювати параметри всієї системи на основі розрахунків лише генератора. Зокрема просторову складову ентропії всього фракталу  $S$  легко

розрахувати як суму ентропій її складових  $S_g$  (ентропій генераторів фракталу)  $S = (N/n)S_g$ .

Слід відмітити, що фрактальний підхід вирішує розв'язує вузьке коло задач, обумовлених геометрією хаосу в молекулярних системах. Проте він наштовхнув нас на більш загальну проблему неоднозначності з визначенням статистичної ваги макростанів молекулярної системи. Для забезпечення стохастичності фрактальної моделі молекулярної системи виявилось недостатнім застосування одного статистичного множника  $G_N = N!/(N_1! \dots N_z!)$ , основаного на розрізненості мікрочастинок [2]. Виникла необхідність введення ще одного статистичного множника  $F_Z = Z!/(k_1! \dots k_z!)$  [3], де  $k_i$  – кількість однаково заповнених комірок, відповідального за розрізненість способів заповнення фазових комірок.

Разом із загальною проблемою обґрунтування  $Fz$ , фрактальна модель поставила перед нами і деякі специфічні проблеми, характерні лише для фрактальних задач. Зокрема проблему врахування впливу змін параметрів системи на спрощені статистичні моделі. Інакше кажучи, це спроба досягти того, щоб прості просторові моделі статистичних задач стали чутливими до переходів від ідеального до реального газів. Тому виникла необхідність у додатковому аналізі й уточненні наших уявлень при постановці статистичних задач, перевірці та узгодженні їх з математикою, а також обґрунтуванні введення нових величин.

### Мета статті

З метою подальшого використання фрактального підходу до описання молекулярних систем провести уточнення базових понять статистичної фізики – розрізненості тотожних частинок, макро- та мікростанів системи та обґрунтування статистичних множників, які визначають статистичну вагу макророзподілів у моделях систем. Мета – здійснити спробу адаптувати постановку статистичних задач для цілей фрактального моделювання молекулярних систем.

### Виклад основного матеріалу

**Статистичні множники.** Будемо користуватись перевагами фрактальної моделі молекулярної системи, яка уможливило розгляд складних молекулярних ансамблів з великою кількістю тотожних частинок  $N$  і фазових комірок  $Z$  на основі аналізу мікросистеми – генератора фракталу [1]. Розглянемо це на прикладі одного з таких генераторів, який являє собою молекулярну мікросистему з невеликим значенням  $\gamma$  кількості частинок  $n$  та фазових комірок  $m$ :  $n = m = \gamma$ . Величину  $\gamma$  вибирають як найближче ціле число, що дорівнює відношенню густини конденсованого стану молекулярної системи до її густини в стані газу:  $\gamma = \rho / \rho_g$ . У табл. 1 наведено приклад розрахунків такого генератора для  $\gamma = 4$ .

Власне перевагою фрактальної моделі молекулярної системи є те, що всі параметри статистичної задачі можуть бути легко розраховані. Однак відмітимо, що фрактальний підхід має і деякі обмеження. Зокрема, фазові комірки в цьому підході були винятково просторовими комірками, тому що основна увага при фрактальному моделюванні приділяється просторовому хаосу.

Водночас фрактальне моделювання вимагало повноти аналізу можливих просторових розподілів, тому ми дуже уважно ставились до їх систематизації. Для цього використовували поняття «макророзподіл», яке допускало точне визначення їх кількості, конкретний тип та навіть нумерацію  $s$

(дві перші колонки у табл. 1). А відповідні формули для розрахунків статистичних множників генератора фракталу для кожного макророзподілу було легко застосовувати.

Множники мали такий вигляд. Запропонований Больцманом [2] множник  $G_n$ :

$$G_n = \frac{n!}{n_1! \cdots n_m!}, \quad (1)$$

де  $n_i$  – кількість частинок в окремій фазовій комірці. Запропонований в [3] перестановочний множник  $F_m$ :

$$F_m = \frac{m!}{k_1! \cdots k_m!}, \quad (2)$$

де  $k_i$  – кількість однаково заповнених комірок.

Крім того, був розрахований і добуток статистичних множників (1) і (2):

$$G_n \cdot F_m = \frac{n!}{n_1! \cdots n_m!} \cdot \frac{m!}{k_1! \cdots k_m!}, \quad (3)$$

який в роботі [1] використано як статистичні ваги станів системи. Розрахунки за (1) – (3) занесено у табл. 1.

Таблиця 1 – Розрахунки статистичних множників для генератора просторового фракталу  $n = m = 4$

Номер макророзподілу $s$	Тип макророзподілу	Статистичні множники		
		$G_n$ (1)	$F_m$ (2)	$G_n F_m$ (3)
1	4, 0, 0, 0	1	4	4
2	3, 1, 0, 0	4	12	48
3	2, 2, 0, 0	6	6	36
4	2, 1, 1, 0	12	12	144
5	1, 1, 1, 1	24	1	24

Звичайно, ми розуміли, що наведені в табл. 1 розрахунки притаманні моделі ідеального газу. А тоді кожен із статистичних множників у табл. 1 міг претендувати на роль статистичної ваги окремого макророзподілу. Для фрактальної моделі молекулярної системи [1], спираючись на результати модельних експериментів [2], які завжди збігалися з розподілом за формулою (3), ми визначились: статистичну вагу окремого макророзподілу необхідно визначати як добуток двох множників (остання колонка табл. 1).

**Математична ймовірність і статистична вага.** Остаточну перевірку правильності визначення статистичної ваги окремого макророзподілу (власне це перевірка «законності» появи множника  $F_m$ ) ми провели на основі розрахунків математичної ймовірності. Така постановка статистичної задачі для систем з  $N$  тотожних частинок і  $Z$  фазових комірок існує [4 – 7]. Проте її пряму перевірку здійснити важко, оскільки кількість частинок та комірок надзвичайно велика. Для вибраної для аналізу

мікросистеми у вигляді генератора фракталу  $n = m = 4$  такі розрахунки можна провести до кінця.

Математичну ймовірність макророзподілів для моделі ідеального газу розраховують при найменшій кількості припущень. По-перше, молекули, як і фазові комірки, слід вважати *нерозрізненими*, оскільки кількість тотожних елементів всієї молекулярної системи така велика, що стає технічно неможливим прослідкувати за переміщенням і параметрами окремої молекули. По-друге, молекулярна система є доволі динамічною, щоб допускати однакову ймовірність перебування кожної молекули в будь-якій фазовій комірці (в нашому випадку – просторовій комірці).

За означенням математичною ймовірністю макророзподілу молекул по фазових комірках є величина  $p_s$ , яка дорівнює відношенню кількості мікророзподілів  $\Omega_s$  (статистична вага), якими може бути реалізований даний макророзподіл, до повної кількості допустимих мікрореалізацій у системі  $\Sigma_n^m$ :

$$p_s = \frac{\Omega_s}{\Sigma_n^m}. \quad (4)$$

Важливо, що таке математичне формулювання статистичної задачі має внутрішню самоузгодженість: сумарна ймовірність реалізації всіх макророзподілів дорівнює 1:

$$\sum_{(s)} p_s = 1. \quad (5)$$

Повну кількість допустимих мікрореалізацій системи визначають за формулою з комбінаторики [8] так:

$$\Sigma_n^m = m^n. \quad (6)$$

Визначення величини  $p_s$  є винятково математичною задачею з теорії ймовірностей [9]. Спочатку знаходять математичну ймовірність окремої послідовності заповнення макророзподілу  $w_s$ . Кількість таких послідовностей заповнення  $K_s$  (коротко – сценаріїв) може бути різною. Легко впевнитись у тому, що математичні ймовірності  $w_s$  однакові для всіх сценаріїв заповнення даного макророзподілу, а тому математичну ймовірність  $p_s$  розраховують так:

$$p_s = w_s \cdot K_s. \quad (7)$$

Звідси статистичну вагу такого типу розподілу легко розрахувати на основі (4), (6) та (7):

$$\Omega_s = p_s \cdot \Sigma_n^m = w_s \cdot K_s \cdot \Sigma_n^m. \quad (8)$$

Покажемо розрахунки всіх множників на прикладі макророзподілу  $s = 2$ : 3, 1, 0, 0. Для зручності такі розрахунки супроводжують графічним відображенням послідовностей заповнення комірок

кожною молекулою – своєрідними графами можливих сценаріїв (рис. 1).

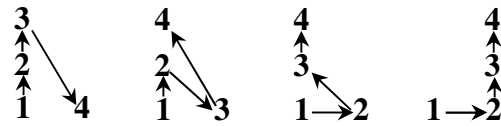


Рисунок 1 – Графи всіх можливих сценаріїв ( $K_s=4$ ) реалізації розподілу 3, 1, 0, 0

Підкреслимо, що числа на рис. 1 не є номерами молекул, а лише позначають номер її в послідовності заповнення фазових комірок. Таких комірок, що заповнюються, – лише дві з чотирьох. Тоді ймовірність однієї послідовності (наприклад, першої зліва на рис. 1) визначатиметься так:

$$w_s = 1 \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{3}{4} = 3/4^3, \quad (9)$$

де перший множник «1» – це ймовірність того, що перша в послідовності молекула потрапляє в будь-яку з чотирьох фазових комірок. Відповідно дві наступні повинні попасти в цю ж комірку, тому ймовірності дорівнюють «1/4», а четверта потрапляє в будь-яку з трьох, що залишалися вільними, тобто ймовірність дорівнює «3/4».

Визначені таким чином значення множників  $w_s$ ,  $K_s$ ,  $p_s$  занесені у табл. 2.

Таблиця 2 – Розрахунки множників математичної ймовірності та статистичних ваг для мікросистеми  $n = m = 4$

Номер макро розподілу $s$	Тип макро розподілу	Множники математичної ймовірності та статистична вага $\Omega_s$			
		$w_s$ (9)	$K_s$	$p_s$ (7)	$\Omega_s$ (8)
1	4, 0, 0, 0	$1/4^3$	1	$1/4^3$	4
2	3, 1, 0, 0	$3/4^3$	4	$12/4^3$	48
3	2, 2, 0, 0	$3/4^3$	3	$9/4^3$	36
4	2, 1, 1, 0	$6/4^3$	6	$36/4^3$	144
5	1, 1, 1, 1	$6/4^3$	1	$6/4^3$	24
$\sum_{(s)}$				=1	=256

Для вибраної мікросистеми додатково визначають величину  $\Sigma_n^m = 4^4 = 256$ , перевіряють співвідношення (5) (передостання колонка табл. 2) та визначають статистичні ваги  $\Omega_s$  всіх типів розподілів. Ці дані також наведені в табл. 2. Найважливішим є результат, який впливає з порівняння останніх колонок табл. 1 і табл. 2: статистична вага

макророзподілу, визначена як добуток двох статистичних множників  $G_n$  і  $F_m$  (табл.1), завжди збігалася із статистичною вагою  $\Omega_s$ , визначеною для даного макророзподілу через математичну ймовірність (табл. 2).

У плані подальшого використання фрактальної моделі молекулярної системи це надзвичайно позитивний результат, тим більше, що його правильність підтверджена модельними експериментами [3]. Тобто

$$\Omega_s = G_{n_s} \cdot F_{m_s} \quad (10)$$

А це означає, що визначення статистичних ваг макророзподілів через добуток двох статистичних множників (1) та (2) завжди дає правильний результат. Крім того, проведення розрахунків за формулою (10) незрівнянно простіше, ніж розрахунки за математичною ймовірністю.

**Фізичне і математичне моделювання статистичних задач.** Попередній аналіз отриманих результатів наводить на думку, що розрахунки, наведені в останніх колонках табл. 1 і табл. 2, фіналізують два різні способи математичного обчислення статистичних ваг макророзподілів ідентичних молекулярних систем – ідеальних газів. Проте, як зауважує М. Клайн [10; 11], збіг результатів кількох математичних теорій ще не означає, що хоч одна з цих теорій повною мірою описує фізичну реальність.

Зокрема, ми дійшли висновку, що спосіб розрахунків, який відображає табл. 2, може бути названим *математичним моделюванням* статистичних задач. При такому моделюванні весь спектр випадковостей для кожної молекули (в часі, в звичайному просторі, в просторі імпульсів чи енергій) закладено в одноактну процедуру заповнення нею фазової комірки в окремо взятій послідовності. По закінченні послідовності отриманий розподіл залишається незмінним необмежений час, тобто надалі система стає *статичною*, що зовсім не збігається з реальністю.

Реальна молекулярна система є надзвичайно динамічною, тому що кожна її молекула піддається не одноразовим статистичним випробуванням, аналогічним методу послідовностей при математичному моделюванні, а проходить їх тисячі і мільйони разів на секунду. Причому в кожному такому статистичному випробуванні молекулі «надається» не весь спектр випадковостей, а лише той набір, що є характерним для даного стану системи в даних умовах. Такий мультиплікативний ефект приводить до сепарації макророзподілів, так що деякі з них не відтворюються зовсім.

Врахувати ці аспекти можна лише при послідовно *фізичному моделюванні* статистичних задач, який ми вбачаємо в тому способі обчислень,

що приводить до результатів табл. 1. У його основу покладені статистичні множники (1) та (2), обґрунтування яких базується на уявленнях про фізичну розрізненість тотожних частинок за певними ознаками. На сьогодні прийнято, що множник  $G_n$  ґрунтується на розрізненості самих тотожних частинок. Зокрема і ми, деякий час, вважали запропонований нами в [3] статистичний множник  $F_m$  таким, який ґрунтується на розрізненості фазових комірок.

Проте ці уявлення хибні. По-перше, послідовне фізичне моделювання має спиратись на базову установку статистичної фізики: вона починається там, де ми втрачаємо можливість за допомогою законів динаміки прослідкувати за переміщенням і параметрами кожної молекули. Тому самі молекули, так само як і фазові комірки, в які вони потрапляють, *нерозрізнені*. По-друге, математичне моделювання, проведене до кінця в межах запропонованої роботи (табл. 2), ґрунтувалося винятково на нерозрізненості частинок і фазових комірок. По-третє, ці уявлення не покращують моделювання статистичних задач порівняно з математичним моделюванням. Іноді ці два різні способи моделювання навіть не розрізняють.

Отже, виникла необхідність уточнення фізичного моделювання статистичних задач і адаптації їх до завдань, що виникають при фрактальному моделюванні молекулярних систем. Ми виходили з того, що математичне моделювання статистичних задач враховувало випадковості як такі, в той час як фізичне моделювання має враховувати закономірності випадковостей. Висхідною ідеєю стала така: якщо елементи статистичних систем – частинки і фазові комірки – нерозрізнені, то слід шукати розрізненість серед *процесів*, які відбуваються в реальній фізичній системі взаємодіючих частинок. При цьому обидва статистичні множники (1) і (2) мають обумовлюватись цими реальними процесами.

**Адаптування статистичних задач для застосування їх у фрактальних моделях.** На основі аналізу можливих процесів у молекулярній системі ми сформували її спрощену схему – як в ідеальних, так і в реальних газах. Вона включає дві групи процесів: рух і локальні міжмолекулярні взаємодії в системі (А) та рух системи в цілому у фазовому просторі (В).

**А1.** Процеси парних молекулярних взаємодій (зіткнень) зі зміною величини і напрямку імпульсів молекул. У Больцмана [2] вони називались «більярдами» зіткненнями. Завжди приводять до вибивання молекули з її фазової комірки будь-якою іншою молекулою. Відбуваються за найкоротший для даної конкретної системи час  $\tau_0$ . Кожен локальний акт такої взаємодії позначається на стані системи

в цілому. Допустимим є таке узагальнення: в  $A_1$  йдеться про процеси взаємодії, які виводять молекули за межі своїх фазових комірок (або за межі підсистеми).

$A_{2id}$  (в ідеальних газах). Процеси взаємодій двох або більше молекул, які за характерний час  $\tau_0$  не залишають своїх фазових комірок. Їх також можна іменувати зіткненнями, але з малими змінами імпульсів. Не вносять змін у стан системи в цілому.

$A_{2p}$  (в реальних газах). Процеси взаємодій двох або більше молекул з утворенням довготривалих молекулярних комплексів (асоціатів, мікрокластерів), повна енергія яких (в системі центра мас молекулярного комплексу) менше нуля. Час  $\tau$  їх існування залежить від виду молекул, їх концентрації та температури [12], і за певних умов може значно переважати час  $\tau_0$ . У фазовому просторі (як в звичайному, так і в імпульсному чи енергетичному) такі кластери займають одну й ту саму фазову комірку і рухаються як одне ціле. Протягом часу свого існування не вносять ніяких змін у стан системи. Допустимим є таке узагальнення:  $A_{2id}$  чи  $A_{2p}$  описують процеси взаємодії, які не виводять частинки за межі однієї фазової комірки (або однієї підсистеми).

$B_1$ . Процеси переміщення всієї молекулярної системи у фазовому просторі. Коротко можна називати це процесами перемішування. Термін «перемішування» запропоновано в [13] за аналогією з перемішуванням фарб – як необхідну умову ергодичності системи. Простими словами це означає швидке та густе покриття фазовими траєкторіями елементів системи всієї області фазового простору. У [13] відзначено, що в газових системах ефекти перемішування завжди розвинуті в достатній мірі. Інтенсивне перемішування зводиться до випадкового перебору допустимих варіантів заповнення кожної фазової комірки.

Відповідно до наведеної схеми процесів введено два типи *розрізненості в системах тотожних частинок* за ознаками, не пов'язаними з розрізненістю частинок чи фазових комірок. Цими ознаками у фізичній системі є рух та взаємодія між собою окремих частинок, а також рух всієї системи частинок у фазовому просторі. А статистичні множники мають враховувати лише ті процеси, які впливають на стан системи. За такими ознаками розраховано два статистичних множники (1) та (2), проведено уточнення окремих понять і запропоновано спосіб використання для цілей фрактальної моделі.

**Множник  $G_n$ .** Статистичний множник, що базується на *розрізненості способів локальних міжчастинкових взаємодій* (за величиною або характером взаємодії) у системі тотожних частинок. Характеризує лише системи, в яких рух і взаємодія

тотожних частинок ґрунтуються на законах класичної механіки. Пропорційний загальному перестановочному множнику  $n!$ , що відповідає врахуванню процесів  $A_1$ , та обернено пропорційний перестановочним множникам  $n_1!$ ,  $n_2!$ , ... для вилучення із загальної кількості перестановок таких, що відповідають процесам  $A_{2id}$  або  $A_{2p}$ . Має вигляд формули (1).

**Множник  $F_m$ .** Статистичний множник, що базується на *розрізненості способу заповнення фазових комірок*. Фактично визначає для кожного макророзподілу кількість розрізнених варіантів заповнення фазових комірок. Отже, якщо поміняти місцями між собою дві однаково заповнені комірки, то це не змінює стан системи в цілому, а такі перестановки слід вилучати із загальної кількості перестановок фазових комірок  $m!$ . Збігається з формулою (2).

**Макророзподіл.** Термін, який в роботі [1] ми використовували замість терміна «макростан». Причина – простота і зручність, а головне – однозначність. Макророзподіл показує, яка кількість фазових комірок (не вказуючи конкретно яких) заповнена певною кількістю частинок (знову ж таки, не конкретизуючи цих частинок). Повністю визначається записом типу макророзподілу (друга колонка табл. 1 та 2). Допускає легке перебирання всіх можливих макророзподілів та їх нумерацію. У запису типу макророзподілу закладена вся необхідна інформація. Як приклад нижче у вигляді формули-схеми (11) представлено тип макророзподілу  $s = 2 - (3, 1, 0, 0)$  – його параметри і розрахунок множника  $F_m$ :

$$\underbrace{\underbrace{3}_{k_1=1} \quad \underbrace{1}_{k_2=1} \quad \underbrace{0 \quad 0}_{k_3=2}}_m \rightarrow F_m = \frac{4!}{1! \cdot 1! \cdot 2!}. \quad (11)$$

Неоднозначність поняття «макростан» можна відчутти за фразою: враховані процеси  $A_1$ , які приводять до зміни стану системи, але не змінюють макростан (малось на увазі, «не змінюють макророзподіл»). Стан всієї системи і макростан – часто це одне й те саме.

**Статистична вага  $\Omega_s$ .** Однозначна характеристика макророзподілу. Визначається тільки типом макророзподілу як добуток відповідних множників (1) та (2). Означає кількість *розрізнених мікророзподілів*, якими може бути реалізований даний макророзподіл. Підкреслимо, що статистична вага  $\Omega_s$  характеризує лише даний макророзподіл в системі, в той час як термодинамічна ймовірність  $\Omega$  здебільшого характеризує стан системи в цілому. Звужений термін – термодинамічна ймовірність макророзподілу – може бути застосований, але в такому тлумаченні він просто дублює поняття статистичної ваги даного макророзподілу  $\Omega_s$ .

Термодинамічна ймовірність стану системи  $\Omega$ . Комплексний статистичний показник, який враховує статистичні ваги всіх допустимих у системі макророзподілів. Для тих статистичних задач, в яких фазові комірки – суть звичайні просторові комірки – ми впевнені, що термодинамічну ймовірність стану системи  $\Omega$  слід визначати як середнє зважене [9]:

$$\Omega = \sum_{s_{\text{доп}}} \Omega_s \cdot \theta_s, \quad (12)$$

де  $\Omega_s$  – статистичні ваги допустимих макророзподілів, а  $\theta_s$  – ймовірності реалізації даних макророзподілів. При цьому точно виконується умова:

$$\sum_{s_{\text{доп}}} \theta_s \equiv 1. \quad (13)$$

Ця умова означає, що будь-яка просторова реалізація розподілу частинок у системі повністю виключає будь-яку іншу її просторову реалізацію.

Ми допускаємо, що співвідношення (12) та (13) справедливі і в більш широкому трактуванні поняття фазових комірок.

**Приклад застосування.** Скористаємося для цього однією з трьох молекулярних систем, які ми розглянули в роботі [1]. Якраз для генератора фракталу цієї системи ( $n = m = 4$ ) в табл. 1 та 2 наведені розрахунки статистичних ваг макророзподілів у припущенні ідеального газу. Не дивлячись на високу концентрацію молекул, така система в умовах високих температур  $T > T_{\text{кр}}$ , дійсно може вважатися такою, що задовольняє умови ідеального газу. Тоді всі макророзподіли, які наведені в табл. 1 та 2, є допустимими. А термодинамічну ймовірність стану цієї системи в даних температурних умовах слід розраховувати так:

$$\Omega_{T \gg T_{\text{кр}}} = \frac{\sum_{s_{\text{доп}}=1, \dots, 5} \Omega_s^2}{\sum_{s_{\text{доп}}=1, \dots, 5} \Omega_s} \approx 97. \quad (14)$$

Формула (14) завжди застосовна у випадку ідеального газу. Тому що ймовірності реалізації окремих макророзподілів  $\theta_s$  визначають за формулою:

$$\theta_s = \frac{\Omega_s}{\sum_{s_{\text{доп}}} \Omega_s}, \quad (15)$$

яка ґрунтується на доведеній в статистичній фізиці [4-6] теоремі про те, що середнє в часі дорівнює середньому по сукупності. Фактично, формула (15) визначає частину того часу, коли система реалізована даним типом макророзподілу. Підставивши (15) в (12), отримаємо формулу (14).

А в помірних температурних умовах наша молекулярна система стає реальним газом і всі

розрахунки будуть складніші. Це і є область творчого застосування фізичного моделювання статистичних задач. І ситуація тут багато в чому залежить від вибору конкретного сорту молекул газу. Саме тому в [1] ми вибрали систему з молекулами  $\text{H}_2\text{O}$ , інформацію про яку знайти найлегше [12; 14].

Зокрема при температурах, трохи вищих за критичну  $T > T_{\text{кр}}$ , в середньому 25% молекул  $\text{H}_2\text{O}$  перебувають в стані димерів [12], інші майже 75% – є мономерами. Це означає, що переважну частину часу в системі закономірно наявні лише два макророзподіли ( $s = 4$  і  $s = 5$ ), нав'язані характером взаємодії в системі, а випадковості існують лише в межах даної закономірності. Тому відповідно до (12) термодинамічна ймовірність стану системи за таких умов:

$$\Omega_{T > T_{\text{кр}}} \approx \sum_{s_{\text{доп}}=4,5} \Omega_s \cdot 0,5 = 84. \quad (16)$$

В умовах, коли температура є порівняною з критичною  $T = T_{\text{кр}}$ , в реальній газовій системі переважають молекулярні комплекси – димери, тримери – так що стан системи може бути реалізований лише двома макророзподілами ( $s = 2$  і  $s = 3$ ) в приблизному співвідношенні 50% на 50%. А тому термодинамічна ймовірність стану системи за цих умов:

$$\Omega_{T = T_{\text{кр}}} \approx \sum_{s_{\text{доп}}=2,3} \Omega_s \cdot 0,5 = 42. \quad (17)$$

Відповідно, при низьких температурах  $T < T_{\text{кр}}$  системи з високою концентрацією молекул (як наша) перебувають на межі конденсації [14], а тому єдиним макророзподілом, здатним реалізуватись, є найбільш нерівноважний ( $s = 1$ ). Термодинамічну ймовірність системи в цих умовах визначає статистична вага макророзподілу  $s = 1$ :

$$\Omega_{T < T_{\text{кр}}} \approx \sum_{s_{\text{доп}}=1} \Omega_s \cdot 1 = \Omega_1 = 4. \quad (18)$$

Отже, фізичне моделювання статистичних задач дійсно дає змогу зробити їх чутливими до змін зовнішніх умов і розширити сферу їх застосування.

## Обговорення результатів

У запропонованій роботі ми розглянули задачу приведення (адаптування) простих статистичних моделей до стану, зручного для використання в іншому способі спрощеного моделювання молекулярних систем – фрактального. Видається, що таке подвійне спрощення дуже звучує саму задачу і робить її застосовною лише до обмеженого кола проблем. Однак у процесі розгляду з'явився додатковий статистичний множник  $F_m$ , який, на нашу думку, має значення не тільки у вузьких межах розглянутої нами задачі, а й для статистичної фізики загалом. Тому відразу проглядається дуже широке поле для творчої діяльності і подальших застосувань.

Власне тому в обговоренні ми вирішили обмежитись лише прикладом, який додатково підкреслює важливість статистичного множника  $F_m$ .

**Квантові статистики.** Покажемо, що обидві квантові статистики – Фермі – Дірака та Бозе – Ейнштейна [5; 6] – ґрунтуються виключно на статистичному множнику  $F_m$ . Дійсно, для квантових ансамблів тождесних частинок відсутня можливість появи статистичного множника  $G_n$ , оскільки до елементів ансамблів не застосовне динамічне описання руху, а розподіл їх за квантовими станами визначається розв’язком стаціонарного рівняння Шредінґера [15]. Це зрозуміло і з модельних уявлень – хвильове представлення частинок не сумісне з існуванням локальних взаємодій. Тобто відповідно до спрощеної схеми процесів у квантових системах відсутні ефекти  $A_1$  та  $A_2$ , які формують  $G_n$ , але залишаються процеси  $B_1$ , які формують  $F_m$ .

До речі, відсутність динамічного описання впливає і на математичне моделювання статистичної задачі – зникає можливість застосування методу послідовностей для прямого визначення математичної ймовірності окремого макророзподілу. Ми цього і не будемо робити, тому що впевнені – статистичну вагу макророзподілу визначатиме тільки один статистичний множник  $F_m$ . Проте перевірку справедливості такого введення статистичної ваги (перевірку на самоузгодженість (5)) будемо проводити кожен раз.

*Статистика Фермі – Дірака.* Принцип Паулі [15] обмежує для ферміонів вибір можливих макророзподілів – він всього один (табл. 3). У табл. 3 ми розглянули приклад мікросистеми з кількістю частинок  $n = 4$ , які розподілені по  $m = 6$  квантових станах, що задовольняє обов’язкову умову  $n < m$ .

Таблиця 3 – Розрахунки статистичної ваги та математичної ймовірності для мікросистеми ферміонів  $n=4, m=6$

Номер макророзподілу $s$	Тип макророзподілу	Статистичні множники	
		$\Omega_F = F_m$	$p_s$
1	1, 1, 1, 1, 0, 0	15	1

Статистичну вагу макророзподілу для ферміонів  $\Omega_F = F_m$ , за аналогією з формулою-схемою (11), ми визначали так:

$$F_m = \frac{m!}{k_1! \cdot k_1!} = \frac{m!}{n! \cdot (m-n)!}, \quad (19)$$

а повну кількість розрізненних реалізацій у системі ферміонів – за формулою [4]:

$$\sum_n^m = \frac{m!}{n! \cdot (m-n)!}. \quad (20)$$

Тобто, вони збіглися, а отже, математична ймовірність єдиного макророзподілу  $p_s$  точно дорівнює одиниці, що і має бути відповідно до (5).

*Статистика Бозе–Ейнштейна.* На розподіл бозонів за квантовими станами квантова механіка ніяких обмежень не накладає [15]. А тому, якщо для прикладу вибрати мікросистему бозонів  $n = m = 4$  (аналогічну системам, розглянутим в табл. 1 і 2), то кількість макророзподілів, типи макророзподілів та розраховані величини  $F_m$  будуть ті ж самі, що й у табл.1. Тоді для цього прикладу сформуємо табл. 4 для бозонів, використавши частину даних з табл. 1.

Таблиця 4 – Розрахунки статистичних ваг та математичних ймовірностей для мікросистеми бозонів  $n = m = 4$

Номер макророзподілу $s$	Тип макророзподілу	Статистичні множники	
		$\Omega_{Bs} = F_{ms}$	$p_s$
1	4, 0, 0, 0	4	4/35
2	3, 1, 0, 0	12	12/35
3	2, 2, 0, 0	6	6/35
4	2, 1, 1, 0	12	12/35
5	1, 1, 1, 1	1	1/35
$\sum_{(s)}$		=35	=1

Загальну кількість можливих реалізацій (всіх розподілів) визначали за формулою [4]:

$$\sum_n^m = \frac{(n+m-1)!}{n! \cdot (m-1)!}. \quad (21)$$

Тоді ймовірність кожного макророзподілу визначали за формулою (4) і також записували її в табл. 4 (остання колонка). Перевірка співвідношення самоузгодженості (5) проведена в останньому рядку цієї колонки. Сума математичних ймовірностей всіх макророзподілів точно дорівнює одиниці, а отже, буде справедливим запис:

$$\sum_{(s)} F_{m_s} = \frac{(n+m-1)!}{n! \cdot (m-1)!}. \quad (22)$$

Це співвідношення ми перевіряли на багатьох варіантах мікросистем і воно завжди залишалось справедливим. Це один з найважливіших результатів, який виходить за межі розглянутих у пропонованій роботі проблем. Він важливий для фізики в цілому, тому що здатність представляти загальну суму реалізацій (21) через суму статистичних ваг окремих макророзподілів (22) є додатковим інструментом для покращення розуміння багатьох квантових проблем, зокрема бозе-конденсації.

## Висновки

Головним новим результатом проведеного дослідження є встановлення того факту, що термодинамічну ймовірність макророзподілів у стохастичних системах, які описуються законами класичної фізики, визначає добуток двох статистичних множників  $G_n$  та  $F_m$ . Причому множник  $G_n$  ґрунтується на розрізненості *характеру руху та взаємодії* частинок, в той час як множник  $F_m$  – на розрізненості *способів заповнення фазових комірок*.

Це формує своєрідний базис *фізичної*

*статистики*, яка чутлива до змін у характері взаємодії частинок. Нечутливі до таких змін математичні методи статистики завжди описують у системах максимальний хаос.

Зокрема стає очевидним (і це підтверджено в роботі), що обидві квантові статистики базуються лише на статистичному множнику  $F_m$ , оскільки квантово-механічний опис руху частинок приводить до нерозрізненості характеру цього руху і взаємодії. А поява окремого способу розрахунку статистичних ваг макророзподілів системи особливо важлива для статистики Бозе – Ейнштейна.

## Список літератури

1. Клапченко В. І., Краснянський Г. Ю., Кузнецова І. О., Закревська А. О. Фрактальна модель розвитку складних процесів у молекулярних системах. *Управління розвитком складних систем*. Київ, 2020. № 44. С. 175 – 181, dx.doi.org/10.32347/2412-9933.2020.44.175-181.
2. Больцман Л. Лекции по теории газов. Москва: Госиздат. технико-теоретической литературы, 1953. 556 с.
3. Клапченко В. І. Перколяционный квантовый релятивистский мир. Киев: ВИПОЛ, 1999. 121 с.
4. Толпыго К. Б. Термодинамика и статистическая физика. Киев: Изд-во Киевского университета, 1966. 364 с.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Москва: Наука, 1964. 568 с.
6. Фейнман Р. Статистическая механика. Москва: Мир, 1975. 407 с.
7. Сивухин Д. В. Общий курс физики. Термодинамика и молекулярная физика. Москва: Наука, 1979. 552 с.
8. Математический энциклопедический словарь /Гл. ред. Ю. В. Прохоров. Москва: Сов. энциклопедия, 1988. 847 с.
9. Пугачёв В. С. Теория вероятностей и математическая статистика. Москва: Физматлит, 2002. 496 с.
10. Клайн М. Математика. Утрата определенности. Москва: Мир, 1984. 446 с.
11. Клайн М. Математика. Поиск истины. Москва: Мир, 1988. 295 с.
12. Каплан И. Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. Москва: Наука, 1982. 312 с.
13. Крылов Н. С. Работы по обоснованию статистической физики. Москва-Ленинград: Изд. АН СССР, 1950. 207 с.
14. Ривкин С. Л., Александров А. А. Термодинамические свойства воды и водяного пара. Москва: Энергоатомиздат, 1984. 80 с.
15. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Москва: Наука, 1989. 768 с.

Стаття надійшла до редколегії 04.05.2022

### Klapchenko Vasily

PhD (Eng.), Associate Professor, Associate Professor of the Department of Physics, [orcid.org/0000-0002-4093-5500](https://orcid.org/0000-0002-4093-5500)  
Kyiv National University of Construction and Architecture, Kyiv

### Krasnianskyi Grygorii

PhD (Eng.), Associate Professor, Associate Professor of the Department of Physics, [orcid.org/0000-0002-2421-1270](https://orcid.org/0000-0002-2421-1270)  
Kyiv National University of Construction and Architecture, Kyiv

### Kuznetsova Irina

Assistant of the Department of Physics, [orcid.org/0000-0003-1800-1733](https://orcid.org/0000-0003-1800-1733)  
Kyiv National University of Construction and Architecture, Kyiv

### Hats Kateryna

Student BZI-18  
Kyiv National University of Construction and Architecture, Kyiv

## FRactal Modeling of Stochastic Processes and Development of Statistical Representations

**Abstract.** The effectiveness of using fractal models to consider complex multicomponent systems, especially those whose functioning is based on stochastic processes, is well known. In particular, they also include molecular systems, the study of which was considered the exclusive prerogative of the well-known methods of statistical physics. At first glance, it seems that the imposition of fractal modeling on a statistical problem is a kind of double simplification, which should narrow the area of applicability of such an approach. However, fractal modeling only tightened the requirements for a clearer and more precise formulation of statistical problems, refinement of basic concepts, ideas about distinguishing particles, etc. The paper shows for the first time that the statistics of molecular systems should be based on two statistical factors  $G_n$  and  $F_m$ . The basis for the



factor  $G_n$  is the difference in the nature of the motion and interaction of particles, and the factor  $F_m$  is the difference in the ways of filling the phase cells. They together form physical statistics that are sensitive to changes in the nature of interactions in the system. At the same time, mathematical methods of statistics, insensitive to the nuances of interactions, describe the maximum chaos in the system, in fact, an ideal gas. One of the achievements of the study is the establishment of the fact that both quantum statistics are based only on the statistical factor  $F_m$ , based on the difference in the ways of filling the phase cells.

**Keywords:** fractal; stochastic processes; fragmentation; mathematical probability; thermodynamic probability; entropy; classical and quantum statistics

#### References

1. Klapchenko, Vasily, Krasnianskyi, Grygorii, Kuznetsova, Irina & Zakrevska, Anastasia. (2020). Fractal Model of Development of Complex Processes in Molecular Systems. *Management of Development of Complex Systems*, 44, 175–181, dx.doi.org/10.32347/2412-9933.2020.44.175-181.
2. Boltzmann, L. (1953). Lectures on the theory of gases. Moscow: Gosizdat. of technical and theoretical literature, 556.
3. Klapchenko, V. I. (1999). Percolation quantum relativistic world. Kyiv: VIPOL, 121.
4. Tolpygo, K. B. (1966). Thermodynamics and Statistical Physics. Kyiv: Kyiv University Press, 364.
5. Landau, L. D., Lifshits, E. M. (1964). Statistical Physics. Moscow: Nauka, 568.
6. Feynman, R. (1975). Statistical mechanics. Moscow: Mir, 407.
7. Sivukhin, D. V. (1979). General course of physics. Thermodynamics and molecular physics. Moscow: Nauka, 552.
8. Mathematical Encyclopedic Dictionary. (1988). Ch. ed. Yu.V. Prokhorov. Moscow: Sov. Encyclopedia, 847.
9. Pugachev, V. S. (2002). Probability Theory and Mathematical Statistics. Moscow: Fizmatlit, 496.
10. Kline, M. (1984). Mathematics. Loss of certainty. Moscow: Mir, 446.
11. Kline, M. (1988). Mathematics. The search for truth. Moscow: Mir, 295.
12. Kaplan, I. G. (1982). Introduction to the theory of intermolecular interactions. Moscow: Nauka, 312.
13. Krylov, N. S. (1950). Works on substantiation of statistical physics. Moscow-Leningrad: Ed. AN SSSR, 207.
14. Rivkin, S. L., Alexandrov, A. A. (1984). Thermodynamic properties of water and steam. Moscow: Energoatomizdat, 80.
15. Landau, L. D., Lifshits, E. M. (1989). Quantum mechanics. Nonrelativistic theory. Moscow: Nauka, 768.

#### Посилання на публікацію

- APA Klapchenko, Vasily, Krasnianskyi, Grygorii, Kuznetsova, Irina & Hats, Kateryna, (2022). Fractal Modeling of Stochastic Processes and Development of Statistical Representations. *Management of Development of Complex Systems*, 49. 132–140, dx.doi.org/10.32347/2412-9933.2022.49.132-140.
- ДСТУ Клапченко В. І., Краснянський Г. Ю., Кузнецова І. О., Гаць К. І. Фрактальне моделювання стохастичних процесів і розвиток статистичних уявлень. *Управління розвитком складних систем*. Київ, 2022. № 49. С. 132 – 140, dx.doi.org/10.32347/2412-9933.2022.49.132-140.