

DOI: 10.32347/2412-9933.2020.44.175-181

УДК УДК 539.1+517.938

**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

**Закревська Анастасія Олегівна**

Студентка

Київський національний університет будівництва і архітектури, Київ

**ФРАКТАЛЬНА МОДЕЛЬ РОЗВИТКУ СКЛАДНИХ ПРОЦЕСІВ  
У МОЛЕКУЛЯРНИХ СИСТЕМАХ**

**Анотація.** Загальновідома складність в описанні та управлінні розвитком складних процесів у молекулярних системах, які на етапах трансформації проходять стадії: від конденсованого стану до стану газу. В роботі запропоновано фрактальну модель розвитку таких процесів, яка базується на обґрунтованому способі вибору стохастичного генератора фракталу, що забезпечує стохастичність самому фракталу, зберігає достатню самоподібність і гарантує варіабельність, тобто адаптивність до зовнішніх умов. Методика вибору генератора ґрунтується на особливостях фізичного експерименту дослідження критичних точок рідина – пара, поведінка молекулярних систем в яких становить одну з проблем статистичної фізики. Аналіз засвідчив, що формування фрактальних моделей процесів у молекулярних системах веде до уточнення та розширення уявлень про просторовий хаос у таких системах, а також допомагає виокремити ентропію просторового безладдя як окремий фактор в описанні та управлінні подібними процесами. Зокрема проведені розрахунки фрактальних моделей на основі генераторів фракталу  $n = m = 2$ ,  $n = m = 3$ ,  $n = m = 4$ , де  $n$  – кількість частинок, а  $m$  – кількість просторових комірок, показали, що тільки для моделі з генератором  $n = m = 3$  температурна залежність ентропії має характерну поведінку типу  $\lambda$ -точки у фазових переходах другого роду, до яких належать і критичні точки переходу рідина – пара. Це означає, що фрактальна модель процесів у молекулярних системах є чутливою до особливих точок і особливих станів молекулярних систем і може бути застосована до розв'язання інших складних задач у теорії і практиці використання молекулярних систем. Відмічено, що в розріджених газових системах стан рівнорозподілу молекул по просторових комітках не є найбільш імовірним. Аналізу цього факту може бути присвячене окреме дослідження.

**Ключові слова:** фрактал; стохастичний фрактал; генератор фракталу; розрізненість; термодинамічна ймовірність; ентропія; критичний стан; зрівноважений стан

**Постановка проблеми**

Складність аналізу молекулярних систем, що в своєму розвитку проходять етапи від конденсованого стану до стану газу, загальновідома. На цьому тлі окремою проблемою виступає описання процесів переходу молекулярної системи через особливі точки, наприклад, критичну точку рідина – пара. Статистична фізика виявилась нечутливою до особливих процесів у таких критичних точках [1].

З появою нового геометричного поняття – фрактал, введеного Б. Мандельбротом [2] для опису об'єктів та явищ, що не мають визначеного лінійного розміру, стає можливим залучення фрактальних уявлень до молекулярних систем для моделювання розвитку складних процесів, зокрема просторового хаосу. У широкому розумінні термін «фрактал» охоплює будь-які множини, які мають властивість самоподібності, тобто, коли множина в цілому подібна своїй частині чи найменшому її елементу (генератора фракталу). Подібні об'єкти мають

широке розповсюдження, а тому поняття фракталу швидко поширилось в різних науках і практичних застосуваннях – від геодезії і картографії, через математику, хімію, біологію до економіки та фінансів [3 – 6].

Випадковість у природі породила уявлення про *стохастичні* фрактали. Можна виокремити цілі групи фізичних явищ, яким притаманні фрактальні властивості: агрегація, випадкові блукання та дифузія, явища перколяції, динамічний хаос та інші [7 – 11]. При цьому фрактальний підхід до фізичних явищ стосувався здебільшого конденсованого стану речовин, тоді як газові середовища, характерні своїм динамічним хаосом, залишались осторонь.

### Мета статті

Метою статті є спроба залучення фрактального підходу для описання просторового хаосу в молекулярних середовищах, що дало б змогу зробити статистичну фізику чутливою як до просторового розподілу молекул, так і до особливих станів молекулярних систем, зокрема критичних точок переходу рідина – пара.

### Виклад основного матеріалу

**Методика вибору генератора.** В роботі запропоновано спосіб вибору генератора фракталу, в основу якого покладено особливості фізичного експерименту, який проводять при дослідженні критичних точок переходу рідина – пара. Відомо, що переважна кількість рідин у критичній точці переходу рідина – пара зменшують свою густину  $\rho_{кр}$  порівняно з густиною  $\rho_0$  в нормальних умовах приблизно втричі ( $\rho_0/\rho_{кр} = \gamma \sim 3$ ). Зокрема так веде себе вода ( $\gamma = 3,12$ ). Далі наведено методику вибору генератора на прикладі води.

В реальному експерименті [12] за нормальних умов вибирають 1 моль води (об'єм води  $V_{\mu} = 18 \text{ см}^3$ ), заливають її в ампулу, з якої в подальшому відкачують молекули повітря та герметизують. Об'єм ампули має бути відповідно більшим за початковий об'єм води  $V = \gamma \cdot V_{\mu} = 56,1 \text{ см}^3$  (рис. 1, а, 1). Підготовлену таким чином ампулу в подальшому нагрівають у термостаті в необхідному інтервалі температур.

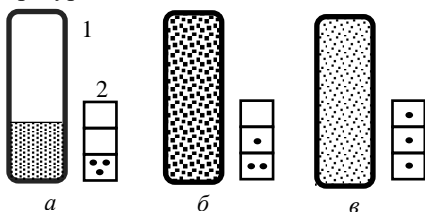


Рисунок 1 – Подібність молекулярної системи (ампула 1) з відповідним генератором фракталу 2 та варіабельність генератора при зміні температурних умов: а – низькі температури; б – область критичних температур; в – область високих температур

У початковому стані (область низьких температур  $T_n \sim 300 \text{ K}$ ) мінімальною мікросистемою, яка зберігає схожість з підготовленою в такий спосіб ампулою 1, є мікросистема 2, в якій розподіл молекул подібний до розподілу в реальній ампулі 1. Легко визначити мінімальний об'єм однієї просторової комірки такої мікросистеми-генератора. Він дорівнює об'єму, який вміщує три молекули ( $n = 3$ ) в конденсованому стані цієї молекулярної системи.

Отже, така методика вибору мікросистеми-генератора завжди приводить до генераторів, які являють собою молекулярні мікросистеми з кількістю просторових комірок  $m$ , що збігається з максимальною кількістю молекул  $n$ , які можна розмістити в межах однієї просторової комірки. Тобто, завжди  $m = n$ , де  $n$  визначають як найближче ціле число до величини відношення об'єму газу  $V$  до об'єму цього газу в конденсованому стані:  $n \approx V\rho_0 / m_r$ , де  $m_r$  – маса газу.

Із статистичної фізики відомо, що такі мікросистеми мають чітко визначену кількість типів розподілів (макростанів). Наприклад, для випадку рис. 1 існують всього три типи таких розподілів: 3,0,0; 2,1,0 та 1,1,1. З точки зору фізики ці стани вказують на адаптивність таких молекулярних генераторів до зовнішніх умов, їх варіабельність. Зокрема розподіл 3,0,0 притаманний молекулярній системі при низьких температурах (рис. 1, а), розподіл 2,1,0 притаманний області критичних температур  $T_{кр} \sim 647 \text{ K}$  (рис. 1, б), в той же час рівнорозподіл 1,1,1 (рис. 1, в) притаманний лише газовому стану молекулярної системи та характеризує діапазон високих температур  $T_b \geq 800 \text{ K}$ .

Слід зауважити, що запропонована методика вибору генераторів стохастичного фракталу молекулярних систем може виявитись занадто складною в застосуванні до розріджених газів ( $m = n > 10$ ) та зовсім непридатною, з огляду на громіздкість математичних обчислень, для аналізу ультрарозріджених газів ( $m = n > 1000$ ).

**Стохастичність генератора.** Описана методика вибору генератора гарантує його подібність макросистемі та варіабельність до зовнішніх умов, водночас стохастичність такого генератора не є очевидною. По-перше, існує статистичний множник, введений Больцманом:

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

який враховує хаос молекулярної системи в класичній статистиці [13]. Загальноприйнято на сьогодні, що поява його ґрунтується на уявленні про розрізненість мікрочастинок молекулярної системи, яка і приводить до цього перестановочного множника, який враховує почергову заміну кожної з

молекул на будь-яку іншу. Молекулярний фрактал, як геометричне відображення хаосу в молекулярній системі, буде зовсім нечутливим до таких перестановок молекул між собою. Саме тому молекулярний хаос, який описує формула (1), не призводить до прояву геометричного безладдя, а є лише причиною своєрідної прихованої стохастичності.

Проявлену стохастичність генератора можна побачити лише в перестановках іншого виду (рис. 2).

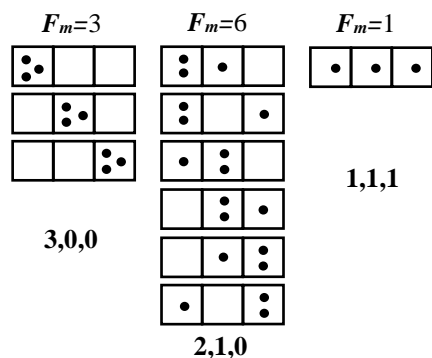


Рисунок 2 – Стохастичність генератора молекулярної системи (перестановочний множник  $F_m$ ) для різних типів розподілів у мікросистемі

Її можна оцінювати за величиною перестановочного множника  $F_m$ , оснований на розрізненості способу заповнення просторових комірок. Підґрунтям для визначення цього множника є уявлення про рівноймовірність просторово розрізнених способів заповнення. Вперше такий множник було введено нами в [14]. Там же була запропонована формула для його розрахунку:

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

( $k_i$  – кількість однаково заповнених просторових комірок) і було відмічено, що рівнорозподіл молекул по просторових комірках завжди приводить до  $F_m = 1$ , тобто проявлена стохастичність стає виродженою.

**Об’ємні рекурсії і стохастичність фракталу.**

При побудові фракталу молекулярної системи на основі відповідним чином підбраного генератора фракталу слід враховувати, що сам генератор являє собою об’ємну структуру, деяку мікросистему, за допомогою якої методом об’ємних рекурсій можна відтворити геометрію хаосу всієї молекулярної системи. Тоді слід відійти від спрощеного плоского представлення генератора (рис. 1 і 2) та перейти до відображення генератора, у якого є власний об’єм. З таким відображенням реального генератора на рис. 3 представлені перші дві рекурсії фракталу молекулярної системи.

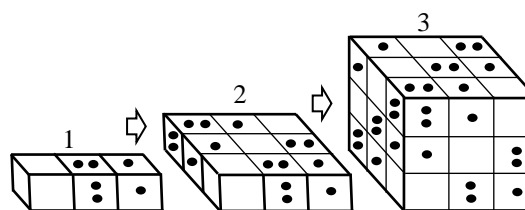


Рисунок 3 – Дві послідовності об’ємних рекурсій: 1→2 та 2→3 генератора 1, які формують геометрію стохастичного фракталу молекулярної системи

За такою схемою побудови фракталу є можливість ввести поняття стохастичності молекулярного фракталу та оцінити її. Мірою стохастичності фракталу будемо вважати ту кількість рівноймовірних просторових варіантів, якими може бути представлена система на першому кроці об’ємних рекурсій (рис. 3, перехід 1→2). З комбінаторики відомо [15], що  $F_m$  різнорідних елементів, які з однаковою ймовірністю заповнюють кожну з  $m$  комірок, дають  $P_{St}$  різних, але рівноймовірних способів заповнення:

$$P_{St} = (F_m)^m. \quad (3)$$

Тоді повну стохастичність фракталу можна оцінити, застосувавши той самий прийом комбінаторики на всіх подальших етапах об’ємних рекурсій, максимальне число яких  $j \leq \sqrt[m]{N/n}$  в молекулярних системах є надзвичайно великим. А стохастичність визначатиме формула

$$St_j = \underbrace{\left( \dots \left( \left( (F_m)^m \right)^m \right)^m \dots \right)}_{1 \leq j \leq \sqrt[m]{N/n}}, \quad (4)$$

яка, при значеннях  $F_m > 1$ , завжди приводить до великих чисел. Такою є міра просторового безладдя в молекулярних системах. Характерно, що сама формула (4) має специфічну фрактальну структуру.

Зауважимо, що рівноважні стани фізичних систем мають  $F_m = 1$ , звідки  $P_{St} = 1$  та відповідно  $St_j = 1$ . Фрактальні моделі таких фізичних систем слід називати фракталами з виродженою стохастичністю. Можливо, виродженість стохастичності є лише наслідком недосконалості наших математичних методів розрахунку. Звернемо увагу на таке. Якщо  $F_m$  перевищує 1 хоч на одну десятимільйонну долю, значення стохастичності за (4) також набуватиме дуже великих значень.

**Ентропія просторового безладдя.**

Використовуючи описану методику побудови фрактальної моделі молекулярної системи, можна поставити цілу низку теоретичних і прикладних задач. У пропонованій роботі розглядаються процеси розвитку молекулярної системи в режимі

планомірного зростання температури при проходженні через критичну точку рідина – пара та в безпосередній близькості від неї. Щоб провести відповідний аналіз, слід пам'ятати, що стохастичний фрактал є лише геометричним відображенням хаосу в молекулярній системі.

Повну термодинамічну ймовірність  $\Omega_V$  просторового безладдя в межах стохастичного генератора будемо оцінювати як добуток обох множників  $G_n$  (1) і  $F_m$  (2):

$$\Omega_V = G_n \cdot F_m. \quad (5)$$

Тоді, за правилами статистичної фізики, ентропію просторового безладдя  $S_{Vr}$  в генераторі необхідно розраховувати за формулою Больцмана:

$$S_{Vr} = k \ln \Omega_V. \quad (6)$$

А ентропія всього фракталу дорівнює сумі ентропій її частин і для молекулярної системи масою 1 моль буде рівною:

$$S_V = \sum_{i=1}^{N_A/n} S_{Vr} = \frac{N_A}{n} k \ln \Omega_V. \quad (7)$$

Або у відносних одиницях:

$$S_V / R = \frac{\ln \Omega_V}{n}. \quad (8)$$

За цією схемою розраховано стохастичний фрактал, в основу якого покладено стохастичний генератор  $n = m = 3$  (табл. 1).

Таблиця 1 – Розрахунки на основі генератора  $n = m = 3$

Групи характеристик	Величини і параметри	Типи розподілів		
		3,0,0	2,1,0	1,1,1
Статистичні множники	$G_n$	1	3	6
	$F_m$	3	6	1
	$\Omega_V = G_n F_m$	3	18	6
Ймовірність фізичної реалізації	$T_n < T_{кр}$	1	0	0
	$T = T_{кр}$	0	1	0
	$T_v > T_{кр}$	0	0	1
Значення просторової ентропії	$S_V/R$	$T_n$	0,36	
		$T_{кр}$		0,96
		$T_v$		0,60

У табл. 1 розрахунки статистичних множників та інших величин проведені на основі формул (1), (2), (5) і (8). Крім того, запроваджено спрощену схему врахування фізичних обмежень на реалізацію тих чи інших типів розподілів молекул в межах генератора. Зокрема, механічних обмежень на спосіб заповнення просторових комірок, енергетичних (або силових) перепон на реалізацію цього типу розподілу та кінетичних обмежень на процедуру перестановок в реальній фізичній системі, яка моделюється. Варіабельність генератора, або його адаптивну

здатність до зміни зовнішніх умов, необхідно оцінювати додатково.

В межах цієї статті замість складних обчислень фізичних обмежень використані множники 0 або 1, які визначають імовірність фізичної реалізації такого типу розподілу. Значення «0» відповідає відсутності умов для реалізації такого типу розподілу, а «1» – максимально сприятливі умови для реалізації. Іноді множник «1» ділився на два множники по «0,5», якщо обидва типи розподілів допустимі. В цьому випадку термодинамічні ймовірності двох типів розподілів усереднювали (а не додавали), тому що реалізація одного типу просторового розподілу повністю виключає одночасне існування будь-якого іншого.

Аналогічно були розраховані інші типи генераторів, зокрема ті, що відповідають фрактальним моделям молекулярних систем, які в процесі трансформації безпосередньо не проходять через критичну точку рідина – пара, а обходять її за густиною «зверху» та «знизу» (табл. 2 та 3). Це найближчі до розглянутої нами моделі  $n = m = 3$  в табл. 1. Зокрема генератор  $n = m = 2$  (табл. 2) відповідає молекулярній системі із середнім значенням густини, яка більша за  $\rho_{кр}$ , а генератор  $n = m = 4$  (табл. 3) – молекулярній системі, у якій середнє значення густини менше за  $\rho_{кр}$  для цієї речовини.

Таблиця 2 – Розрахунки на основі генератора  $n = m = 2$

Групи характеристик	Величини і параметри	Типи розподілів		
		2,0	1,1	
Статистичні множники	$G_n$	1	2	
	$F_m$	2	1	
	$\Omega_V = G_n F_m$	2	2	
Ймовірність фізичної реалізації	$T_n < T_{кр}$	1	0	
	$T = T_{кр}$	0,5	0,5	
	$T_v > T_{кр}$	0	1	
Значення просторової ентропії	$S_V/R$	$T_n$	0,34	
		$T_{кр}$		0,34
		$T_v$		0,34

Звертаємо увагу на те, що всі табл. 1 – 3 ідентичні за структурою, незважаючи на відсутність у табл. 3 колонки «групи характеристик», скорочення якої обумовлено ростом кількості типів розподілів. Як і в табл. 1 та 2, у табл. 3 представлені всі три групи вказаних характеристик. І найважливішою серед них є група, представлена трьома останніми рядками таблиць. Це величина приведеної ентропії просторового безладдя в системі  $S_V/R$ , оцінка якої стала можливою лише в межах фрактальної моделі процесів у молекулярних системах. Точніше, вона є прямим наслідком стохастичності фрактальної моделі молекулярної системи.

Таблиця 3 – Розрахунки на основі генератора  
 $n = m = 4$ 

Величини і параметри	Типи розподілів				
	4,0, 0,0	3,1, 0,0	2,2, 0,0	2,1, 1,0	1,1, 1,1
$G_n$	1	4	6	12	24
$F_m$	4	12	6	12	1
$\Omega_V = G_n F_m$	4	48	36	144	24
$T_n < T_{кр}$	1	0	0	0	0
$T = T_{кр}$	0	0,5	0,5	0	0
$T_b > T_{кр}$	0	0	0	0,5	0,5
$S_V/R$	$T_n$	0,35			
	$T_{кр}$		0,93		
	$T_b$				1,11

У наведених в табл. 1 – 3 розрахунках привертають увагу дві обставини. По-перше, незвична поведінка термодинамічної ймовірності різних станів розглянутих молекулярних систем  $\Omega_V$ . По-друге, особливості температурної залежності складової ентропії  $S_V/R$ , обумовленої просторовим хаосом у молекулярних системах за температурних змін.

**Обговорення результатів.** Проаналізовані (табл. 1–3) моделі генераторів молекулярних систем описують газові середовища з практично максимальними густинами, які дозволені запропонованою в роботі методикою вибору генератора фракталу. Для аналізу проходження молекулярною системою критичної точки рідина – пара розглядалися три найменші з усіх можливих моделей генераторів ( $n = m = 2$ ;  $n = m = 3$ ;  $n = m = 4$ ) подібних систем, оскільки в розрахункових моделях з цілими числами моделі генераторів з  $n = m < 2$  не мають фізичного змісту.

Незалежність від температури ентропії просторового хаосу (табл. 2, три останні рядки) для систем, які описує генератор фракталу  $n = m = 2$ , може бути обумовлена тим, що така молекулярна система перебуває в максимально стиснених умовах і можливостей для зростання просторового безладдя не має. Натомість системи з вдвічі меншою густиною (табл. 3, три нижніх рядки), які описує генератор фракталу  $n = m = 4$ , демонструють планомірне та фізично обґрунтоване зростання хаосу з ростом температури. Більше того, попередній аналіз систем з генераторами  $n = m > 4$  показує, що в таких розріджених системах з'являється ціла низка близьких до рівноважного розподілів,

термодинамічна ймовірність яких значно вища, ніж рівноважного. Цей факт може стати предметом окремого дослідження.

Водночас молекулярні системи з проміжною по відношенню до розглянутих випадків густиною ( $n = m = 3$ ) показують особливу,  $\lambda$ -подібну залежність ентропії (табл.1, три останні рядки), яка характерна для критичних точок фазових переходів другого роду, до яких належить і критична точка переходу рідина – пара [12]. Фізичного обґрунтування такої особливої залежності не існує – статистична фізика до подібних точок нечутлива. Водночас фрактальна модель процесів у молекулярних системах дала змогу отримати чутливе до критичних точок описання. Проведені дослідження вказують на те, що критичні точки переходу рідина – пара є наслідком особливої геометрії безладдя, яка виникає в критичних точках молекулярних систем, що описуються генератором фракталу  $n = m = 3$ .

## Висновки

Встановлено, що формування фрактальних моделей розвитку процесів у молекулярних системах веде до уточнення та розширення уявлень про просторовий хаос в таких системах. Крім того, воно дає змогу виокремити ентропію просторового безладдя як особливий фактор в описанні та управлінні подібними процесами. Конкретним результатом такого виокремлення ентропії просторового безладдя стали проведені розрахунки фрактальних моделей на основі генераторів фракталу  $n = m = 2$ ,  $n = m = 3$  та  $n = m = 4$ , які показали, що тільки для моделі з генератором  $n = m = 3$  температурна залежність ентропії має характерну поведінку типу  $\lambda$ -точки у фазових переходах другого роду, до яких належать і критичні точки переходу рідина – пара.

Отже, фрактальна модель процесів у молекулярних системах є чутливою до особливих точок і особливих станів молекулярних систем і може бути застосована до розв'язання інших складних задач в теорії і практиці використання молекулярних систем. Відмічено, що в розріджених газових системах стан рівнорозподілу молекул по просторових комірках не є найбільш імовірним. Аналізу цього факту може бути присвячене окреме дослідження.

## Список літератури

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Москва: Наука, 1964. 568 с.
2. Mandelbrot B. Les Objets Fractals: Forme, Hasard et Dimension. Paris: Flammarion, 1975. 190 p.
3. Turcotte D. I. Fractals and chaos in geology and geophysics. Cambridge Univ. Press, 1992. 221 p.
4. Mandelbrot B. B. Fractals and Scaling in Finance: Discontinuity, Concentration, Risk. Selecta volume E. New York: Springer-Verlag, 1997. 541 p.

5. Birdi K. S. Fractals in Chemistry, Geochemistry, and Biophysics: An Introduction. New York: Springer Science, 1993. 264 p.
6. Klages R. Microscopic Chaos, Fractals and Transport in Nonequilibrium Statistical Mechanics. New Jersey, London et al.: World Scientific Publ., 2007. 441 p.
7. Фракталы в физике. Труды 6-го международного симпозиума по фракталам в физике, 1985. Москва: Мир, 1988.
8. Takayasu H. Fractals in the physical sciences. Manchester Univ. Press, 1990. 170 p.
9. Олемской А. И., Флат А. Я. Использование концепции фрактала в физике конденсированной среды. *Успехи физических наук*. 1993. Том 163. № 12. С. 1–50.
10. Потапов А. А. Фракталы в радиофизике и радиолокации. Москва: Логос, 2002. 664 с.
11. Горобець Ю. І., Кучко А. М., Вавилова І. Б. Фрактальна геометрія у природознавстві: навч. посіб. Київ: Наукова думка, 2008. 232 с.
12. Шиманская Е. Т., Шиманский Ю. И. Критическое состояние чистых веществ. Киев: Изд-во Киевского университета, 1961. 40 с.
13. Толпыго К. Б. Термодинамика и статистическая физика. Киев: Изд-во Киевского университета, 1966. 364 с.
14. Клапченко В. И. Перколяционный квантовый релятивистский мир. Киев: ВИПОЛ, 1999. 121 с.
15. Математический энциклопедический словарь / гл. ред. Ю.В. Прохоров. Москва: Сов. энциклопедия, 1988. 847 с.

Стаття надійшла до редколегії 12.10.2020

#### **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

#### **Zakrevska Anastasia**

Student BZI-18

Kyiv National University of Construction and Architecture, Kyiv

### **FRACTAL MODEL OF THE DEVELOPMENT OF COMPLEX PROCESSES IN MOLECULAR SYSTEMS**

**Abstract.** *The complexity of describing and managing the development of complex processes in molecular systems, which at the stages of transformation go through stages from a condensed state to a gas state, is well known. The paper proposes a fractal model for the development of such processes, based on a reasonable method for choosing a stochastic fractal generator, which ensures the stochastic character of the fractal itself keeps sufficient self-similarity and guarantees variability, which is adaptability to external conditions. The method of choosing a generator is based on the features of a physical experiment in the study of critical points of liquid-vapor, the behavior of molecular systems in which is one of the problems of statistical physics. The analysis showed that the formation of fractal models of processes in molecular systems leads to the refinement and expansion of ideas about spatial chaos in such systems, and also allows us to single out the entropy of spatial disorder as a separate factor in the description and control of such processes. In particular, the calculations of fractal models based on fractal generators  $n = m = 2$ ,  $n = m = 3$  and  $n = m = 4$ , where  $n$  is the number of particles, and  $m$  is the number of spatial cells, showed that only for a model with a generator  $n = m = 3$ , the temperature dependence of the entropy has a characteristic behavior of the  $\lambda$ -point type in second-order phase transitions, which also include the critical points of the liquid-vapor transition. This means that the fractal model of processes in molecular systems is sensitive to singular points and special states of molecular systems, and can be applied to solving other complex problems in the theory and practice of using molecular systems. It is noted that in rarefied gas systems, the state of uniform distribution of molecules over spatial cells is not the most probable. A separate study can be devoted to the analysis of this.*

**Keywords:** *fractal; stochastic fractal; fractal generator; fragmentation; thermodynamic probability; entropy; critical situation; equilibrium state*

#### **References**

1. Landau, L. D. & Lifshitz, E. M., (1964). Statistical Physics. Moscow: Nauka, 568.
2. Mandelbrot, B., (1975). Les Objets Fractals: Forme, Hasard et Dimension. Paris: Flammarion, 190.
3. Turcotte, D. I., (1992). Fractals and Chaos in Geology and Geophysics. Cambridge Univ. Press, 221.

4. Mandelbrot, B. B., (1997). *Fractals and Scaling in Finance: Discontinuity, Concentration, Risk*. Selecta volume E. New York: Springer-Verlag, 541.
5. Birdi, K. S., (1993). *Fractals in Chemistry, Geochemistry, and Biophysics: An Introduction*. New York: Springer Science, 264.
6. Klages, R., (2007). *Microscopic Chaos, Fractals and Transport in Nonequilibrium Statistical Mechanics*. New Jersey, London et al.: World Scientific Publ., 441.
7. *Fractals in Physics*. Proceedings of the 6th International Symposium on Fractals in Physics. (1988). Moscow: Mir.
8. Takayasu, H., (1990). *Fractals in the Physical Sciences*. Manchester Univ. Press, 170.
9. Olemskoy, A. I., & Flat, A. Ya., (1993). Using the Concept of a Fractal in Condensed Matter Physics. *Advances in Physical Sciences*, 163, 12, 1–50.
10. Potapov, A. A. (2002). *Fractals in Radio Physics and Radar*. Moscow: Logos, 664.
11. Gorobets, Y. I., Kuchko, A. M., & Vavilova, I. B., (2008). *Fractal Geometry in Science*. Kyiv: Naukova Dumka, 232.
12. Shimanskaya, E. T., & Shimanskiy, Yu. I., (1961). *The Critical State of Pure Substances*. Kyiv: Publishing house of Kyiv University, 40.
13. Толпыго, К. В., (1966). *Thermodynamics and Statistical Physics*. Kyiv: Publishing house of Kyiv University, 364.
14. Klapchenko, V. I., (1999). *Percolation Quantum Relativistic World*. Kyiv: VIPOL, 121.
15. *Mathematical Encyclopedic Dictionary*. (1988). Moscow: Sov. encyclopedia, 847.

---

#### Посилання на публікацію

- APA 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.
- ДСТУ 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.