НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»
ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА МАТЕМАТИЧНОГО АНАЛІЗУ ТА ТЕОРІЇ ЙМОВІРНОСТЕЙ

«На правах рукопису»
УДК 519.21

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

_____ _____
(підпис) (ініціали, прізвище)

“ 17 ” червня 2015 р.

Магістерська дисертація

на здобуття ступеня магістра

зі спеціальності 8.04020101 «Математика»
(код і назва спеціальності)

на тему: «Модель Колмогорова кристалізації»

Виконала: студентка VI курсу, групи ОМ-31м
(шифр групи)

Білоконь Катерина Григорівна _____
(прізвище, ім’я, по батькові) (підпис)

Науковий керівник д. ф.-м. н., проф. Клесов О. І. _____
(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали) (підпис)

Консультант з охорони праці та безпеки в надзвичайних ситуація
(назва розділу)

к. т.-н., доц. Мітюк Л. О. _____
(науковий ступінь, вчене звання, , прізвище, ініціали) (підпис)

Рецензент к. ф.-м. н., доц. Радченко О. М.
(посада, науковий ступінь, вчене звання, науковий ступінь, прізвище та ініціали) (підпис)

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації немає запозичень з праць інших авторів без відповідних посилань.
Студент _____
(підпис)

Київ – 2015 року

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут»

Факультет фізико-математичний
(повна назва)

Кафедра математичного аналізу та теорії ймовірностей
(повна назва)

Рівень вищої освіти – другий (магістерський)

Спеціальність 8.04020101 «Математика»
(код і назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри
_____ _____
(підпис) (ініціали, прізвище)
« 05 » лютого 2015 р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студентці

Білоконь Катерина Григорівна
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема дисертації «Модель Колмогорова кристалізації»

науковий керівник дисертації д. ф.-м. н., проф., Клесов Олег Іванович,

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від « 25 » березня 2015 р. № 797-с

2. Термін подання студентом дисертації « 16 » червня 2015 р.

3. Об'єкти дослідження: α-модель з інтенсивністю, що не залежить від часу, та β-модель з миттєвим зародженням центрів.

4. Предмет дослідження: середній час завершення процесу кристалізації для α- і β-моделей.

5. Перелік завдань, які потрібно розробити:

а) Основна частина:

1. Ознайомлення з літературою стосовно моделі Колмогорова кристалізації металу;

2. Отримання формули для моментів старших порядків для часу повної кристалізації в моделі Колмогорова;

3. Оцінка ймовірності відхилення часу повної кристалізації від його середнього значення;
4. Порівняння моментів для часу повної кристалізації для α- і β-моделей.
б) Охорона праці:
1. Ознайомлення з літературою стосовно охорони праці;
2.Оцінка напруженості праці під час написання магістерської дисертації;
3. Дослідження умов, при яких написання магістерської дисертації буде найефективнішим.

6. Орієнтовний перелік ілюстративного матеріалу не передбачено.

7. Орієнтовний перелік публікацій

Білоконь К. Г. Модель Колмогорова: матеріали четвертої між університетської наукової конференції з математики та фізики для студентів та молодих вчених, Київ, 23-25 квітня 2015 року: тези доповідей. –К.: НаУКМА, 2015. – с 12.

8. Консультанти розділів дисертації*

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
3	Мітюк Л. О., к. т.-н., доц..	04.02.2015	10.06.2015

9. Дата видачі завдання 4 лютого 2015 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1.	Ознайомлення з літературою	04.02.2015 – 04.03.2015	
2.	Отримання формули для моментів старших порядків для часу повної кристалізації	04.03.2015 – 04.04.2015	
3.	Отримання оцінки ймовірності відхилення для часу повної кристалізації в моделі Колмогорова	04.04.2015 – 01.05.2015	
4.	Порівняння моментів для часу повної кристалізації для α- і β-моделей	01.05.2015 – 20.05.2015	
5.	Оформлення роботи	20.05.2015 – 10.06.2015	

Студент _____ К. Г. Білоконь
(підпис) (ініціали, прізвище)

Науковий керівник дисертації _____ О. І. Клесов
(підпис) (ініціали, прізвище)

* Консультантом не може бути зазначено наукового керівника магістерської дисертації.

Реферат

Магістерська дисертація: 78 сторінки, 18 слайдів для проектора, 15 першоджерел.

З точки зору теорії ймовірностей досліджується модель Колмогорова кристалізації металів та модель Мейла – Джонсона, як частинний випадок моделі Колмогорова.

Мета роботи полягає в отриманні нових результатів для моментів старших порядків для часу повної кристалізації моделі Колмогорова та моделі Мейла – Джонсона, та порівняльному аналізі цих характеристик для α- та β-моделей.

Завданням роботи є отримання формул для моментів порядку $n \geq 2$ для часу повної кристалізації у моделі Колмогорова. Об'єктами дослідження є α-модель з інтенсивністю, що не залежить від часу, та β-модель з миттєвим зародженням центрів. Предметом дослідження є середній час завершення процесу кристалізації для цих моделей.

Для отримання вказаних результатів використано сучасні методи теорії кристалізації.

Вперше пропонується знаходження моментів порядку n для долі маточного середовища, зокрема, других моментів, які в подальшому використовуються у нерівності Чебишева та нерівності Маркова. Окремо вивчається модель миттєвого зародження центрів у моделі Мейла – Джонсона.

Результати дослідження опубліковані у збірнику тез на IV-й Міжуніверситетський науковій конференції з математики та фізики для студентів та молодих вчених (23-25 квітня 2015 р., м. Київ).

Ключові слова: *модель Колмогорова, модель Мейла – Джонсона, старші моменти, час повної кристалізації.*

Реферат

Магистерская диссертация: 78 страницы, 18 слайдов для проектора, 15 первоисточников.

С точки зрения теории вероятностей исследуется модель Колмогорова кристаллизации металлов и модель Мейла – Джонсона, как частный случай модели Колмогорова.

Цель работы состоит в получении новых результатов для моментов старших порядков для времени полной кристаллизации модели Колмогорова и модели Мейла – Джонсона, и в сравнительном анализе этих характеристик для α- та β-моделей.

Заданием работы является получение формул для моментов порядка $n \geq 2$ для времени полной кристаллизации модели Колмогорова. Объектом исследования является α-модель с интенсивностью, которая не зависит от времени, и β-модель с мгновенным зарождением центров. Предметом исследования является среднее время завершения процесса кристаллизации для этих моделей.

Для получения указанных результатов использованы современные методы теории кристаллизации.

Впервые предлагается нахождение моментов порядка n для доли маточной среды, в частности, вторых моментов, которые в дальнейшем используются в неравенстве Чебышева и неравенстве Маркова. Отдельно изучается модель мгновенного зарождения центров в модели Мейла–Джонсона.

Результаты исследования опубликованы в сборнике тезисов IV-й на Межуниверситетской научной конференции по математике и физике для студентов и молодых ученых (23-25 апреля 2015 г., г. Киев).

Ключевые слова: *модель Колмогорова, модель Мейла – Джонсона, старшие моменты, время полной кристаллизации.*

Summary

Master's degree thesis contains: 78 pages, 18 slides for projector, 15 primary sources.

From the point of view of the theory of probability Kolmogorov's crystallization model is investigated as well as the Mehl – Johnson's model as a special case of Kolmogorov's model.

The goal of the work is to obtain new results for higher moments for the complete crystallization time in the Kolmogorov model and Mahl - Johnson model, and to compare these characteristics for α- and β-models.

The task of the work is to establish formulas for the moments of order $n \geq 2$ for time of complete crystallization in the Kolmogorov model. The object of this research is the α-model with an intensity that does not depend on time, and β-model with instantaneous nucleation centers. The subject of the research is the average time of the complete crystallization for these models.

To obtain the results, modern methods of the theory of crystallization were used.

Formulas for the moments of order n for a fraction of the uterine environment are proposed for the first time, in particular, the second moments are found, which are then used in the inequality of Chebyshev and Markov's inequality. The Mehl - Johnson model with instantaneous nucleation model is studied separately. The results of the research are present at the IV Inter-University Scientific Conference in Mathematics and Physics for Students and Young Scientists (April 23-25, 2015, Kyiv).

Keyword: *Kolmogorov model, Mehl – Johnson model, higher orders, complete crystallization time*

Вступ

Опублікувавши у 1937 році в математичному журналі коротку статтю, в якій в строгій формі сформулював посилки геометрико–імовірністної моделі кристалізації металів і давши висновок її основної формули Андрій Миколайович Колмогоров заклав математичні основи ймовірнісно-феноменологічної (статистичної) теорії кристалізації.

В даній роботі досліджується доля маточного середовища з формули Колмогорова та середній час завершення процесу кристалізації для цієї долі. Також знаходяться моменти порядку n для двох основних моделей визначених Колмогоровим і, зокрема, другі моменти, які в подальшому використовуються у нерівності Чебишева та нерівності Маркова.

Окремо розглядається модель запропонована вченими Мейлом і Джонсоном у 1938 році на симпозіумі з проблем затвердіння в Детройті. Модель Мейла – Джонсона є частинним випадком моделі Колмогорова. Для цієї моделі знаходиться середній час повної кристалізації, а також другі та n–ті моменти, які в подальшому використовуються у нерівності Чебишева та нерівності Маркова.

Також розглядається випадок миттєвого зародження центрів для моделі Мейла – Джонсона. Сама модель з миттєвим зародженням центрів була запропонована Колмогоровим і одною з двох основних моделей.

Результатами роботи є встановлення нових параметрів до α- і β-моделі Колмогорова та моделі Мейла – Джонсона.

Результати дослідження опубліковані у збірнику тез на IV-й між університетський науковій конференції з математики та фізики для студентів та молодих вчених (23-25 квітня 2015 р., м. Київ).

1. Модель Колмогорова

Вступ

У 1938 р на симпозіумі з проблем затвердіння в Детройті (США) Р. Мейл зробив повідомлення про розрахунок моделі, в якій форма зародків сферична, а центри кристалізації виникають в маточному середовищі рівномірно з постійною інтенсивністю. Розроблена ним спільно з В. Джонсоном модель була опублікована в 1939 р в працях Американського інституту гірничої інженерії та металургії. Результати Мейла і Джонсона не всіма були зустрінуті з розумінням. Зокрема, М. Аврамі критикував їх посилки і стверджував, що ці результати навіть при прийнятих посилках невірні; одночасно Аврамі анонсував свої власні результати, що відносяться до більш загального випадку.

Але ще до робіт Мейла, Джонсона і Аврамі в 1937 році А. Н. Колмогоров опублікував в математичному журналі коротку замітку, в якій в строгій формі сформулював посилки геометрико–імовірністної моделі кристалізації металів і дав висновок її основної формули (ця робота не була відома згаданим вище американським авторам). Метод Колмогорова заклав математичні основи ймовірнісно-феноменологічної (статистичної) теорії кристалізації, і замітку безумовно можна віднести до розряду класичних робіт.

Сьогодні можна констатувати, що посилки і результати Мейла – Джонсона є частинним випадком теорії Колмогорова. Результати ж Аврамі, як показав аналіз, в багато чому невірні, а його позиція в згаданій вище дискусії – помилкова. Проте з нез'ясованих причин статистичну теорію кристалізації багато авторів пов'язують з іменами Колмогорова і Аврамі, часто переносячи при цьому в свої роботи помилки останнього. Ми будемо називати основну модель ймовірнісно-феноменологічної теорії моделлю Колмогорова або *К*-моделлю [3].

1.1. Опис *К*-моделі

Модель процесу кристалізації Колмогорова (*К*-модель) будується на чотирьох аксіомах:

1. Необмеженість об′єму: кристалізація відбувається в просторово-необмеженому маточному середовищі. Це означає, що впливом стінок реального фізичного об'єму можна знехтувати; інакше кажучи, середній об′єм утворюваних зерен нескінченно малий у порівнянні з об'ємом судини.

2. Пуассонівський закон зародження центрів: центри кристалізації виникають в маточному середовищі випадково і рівномірно з деякою інтенсивністю $\alpha(t)$ (на одиницю маточного об'єму в одиницю часу), залежної в загальному випадку від часу. Це означає, що якщо в деякий момент часу t виділити в маточному середовищі довільну область об'єму V, то ймовірність виникнення в ній одного зародка протягом малого проміжку dt дорівнює $\alpha(t)Vdt$ (а ймовірність виникнення більш ніж одного зародка є $o(dt)$).

3. Принцип геометричної подібності: кожен зародок незалежно від місця і моменту «народження» зростає у вигляді кристаліта певної, єдиної для всіх зародків випуклої форми і орієнтації, що зберігається в часі. Це означає, що всі зародки геометрично подібні один до одного і однаково орієнтовані в просторі, тому розмір зародка можна характеризувати його радіусом R, виміряним від центру в деякому фіксованому напрямку. В зв'язку з цим має сенс ввести поняття еталонного зародка одиничного радіуса. Згідно умови (3) еталонний зародок може бути довільним опуклим тілом. Підкреслимо, що мова йде про зародки, що зростають вільно (ізольовано) в маточному середовищі. Якщо в процесі росту зародок наштовхується на масу, що вже є закристалізованою (тобто на який-небудь інший зародок), то зростання у відповідних напрямках припиняється, а за

напрямками, що ведуть всередину маточної середовища, триває звичайним чином, тобто відповідно до принципу геометричної подібності.

Зауважимо далі, що принцип геометричної подібності дозволяє також ввести поняття лінійної швидкості зростання зародка $\dot{R}$, причому він не накладає ніяких обмежень на швидкості росту різних зародків: кожен зародок міг би зростати «як йому заманеться». Однак в *К*-модель це неприпустимо.

4. Єдиність швидкості росту: у кожен момент часу швидкості росту однакові для всіх наявних в цей момент зародків.

В силу цієї аксіоми $\dot{R}$ не залежить від обраного зародка і є функцією тільки поточного часу t, тобто $\dot{R} = v(t)$. Цю функцію $v(t)$ назвемо швидкістю кристалізації. Таким чином, радіус зародка, народженого в момент ξ, досягне до моменту t $(t > \xi)$ величини

$$R(\xi, t) = \int_{\xi}^{t} v(\tau) d\tau .$$

Функція $R(\xi, t)$ – закон росту зародків. Зазначимо, що згідно умови (4) радіус будь-якого зародка зростає за проміжок часу (ξ, t) також на величину $R(\xi, t)$, інакше кажучи, має місце властивість адитивності функції $R(\xi, t)$: для будь-яких $\tau \le \xi \le t$

$$R(\tau, \xi) + R(\xi, t) = R(\tau, t).$$

Поклавши $\tau = 0$, отримаємо

$$R(\xi, t) = R(0, t) - R(0, \xi).$$

З властивості адитивності будемо іноді використовувати функцію $R(t)$ одного аргументу t, маючи на увазі під цим значення $R(0, t)$. Цю функцію будемо називати приведеним законом росту. Вона пов'язана зі швидкістю кристалізації $v(t)$ співвідношенням

$$R(t) = \int_{0}^{t} v(\tau) d\tau .$$

Виходячи з аксіом (1) – (4), Колмогоров отримує наступну формулу для частки $q(t)$ маточного об'єму в момент t:

$$q(t) = \exp\left\{ -\int_0^t \alpha(\xi) V(R(\xi,\tau)) d\xi \right\}.$$

де $V(R)$ – об'єм ізольованого зародка радіуса R. Це основна формула ймовірнісно-феноменологічної теорії, вона дозволяє по заданих функціям $\alpha(t)$ і $v(t)$, що описують закони виникнення і зростання зародків, розрахувати кінетичну криву кристалізації як функцію часу, оскільки, очевидно, частка фази, що вже закристалізована яку позначимо $\theta(t)$, є додатковою величиною [3].

1.2. Модель Мейла – Джонсона, як частинний випадок моделі Колмогорова

Передумови моделі Мейла – Джонсона [2]:

1. Об'єм ізложниці V_0 значно більше об'єму утворюваних зародків твердого металу.

2. Центри кристалізації виникають в частині об'єму, що незатверділа рівномірно і випадково з постійною інтенсивністю α.

3. Всі зародки мають однакову сферичну форму і ростуть з постійною лінійною швидкістю v.

Отже, можна переконатися, що модель Мейла – Джонсона є частинним випадком моделі Колмогорова. Дійсно, при $\alpha(t) = \alpha = const$, $v(t) = v = const$ і сферичній формі тривимірних зародків, тобто при $V(R) = \frac{4}{3}\pi R^3$ маємо

$$R(\xi, t) = v(t - \xi),$$

$$\int_0^t \frac{4}{3}\pi\alpha v^3 (\tau - \xi)^3 d\xi = \frac{\pi}{3}\alpha v^3 t^4 .$$

В результаті, формула Колмогорова для частки $q(t)$ маточного об'єму в момент t переходить у формулу, яку отримали Р. Мейл і В. Джонсон:

$$q(t) = \exp(-\frac{\pi\alpha v^3}{3} t^4) .$$

1.3. Доведення формули Колмогорова

Частка маточного об'єму $q(t)$ може інтерпретуватися як ймовірність того, що навмання взята в момент t точка з загального реакційного об'єму V_0 виявиться всередині маточної середовища. В силу передумов *К*-моделі процес кристалізації просторово однорідний, і тому зазначена ймовірність дорівнює ймовірності того, що довільно обрана фіксована точка $A \in V_0$ буде в момент t знаходитися поза межами маси, що вже закристалізована, тобто не буде захоплена до моменту t жодним зі зростаючих зародків кристалічної фази.

Для подальшого доведення формули Колмогорова знадобиться наступна лема.

<u>Лема 1.</u> Нехай B - довільна точка простору, яка є центром зародку. Через $B(R)$ позначимо область простору, яку займе зародок еталонної форми з центром в точці B і радіусом R. Нехай C – також довільна точка простору. Якщо $C \in B(R)$, то для будь-якого $r \geq 0$ $C(r) \subset B(R+r)$.

<u>Доведення леми 1.</u> Достатньо довести лему для випадку, коли точка C лежить на межі області $B(R)$. Але тоді з рис. 1,а видно, що точка O, що є загальною граничною точкою зародків $C(r)$ і $B(R+r)$, є їх центром подібності, тобто в будь-якому напрямі OMN

$$\frac{OM}{ON} = \frac{OC}{OB} = \frac{r}{R+r} = k = const, \qquad k < 1.$$

Звідси випливає, що M – внутрішня точка відрізку ON, кінці якого належать межі області $B(R+r)$. Оскільки, згідно передумові 3 ця область опукла, то $M \in B(R+r)$. Таким чином будь-яка гранична точка M зародку $C(r)$ належить зародку $B(R+r)$. З цього випливає, що весь зародок $C(r)$ знаходиться всередині $B(R+r)$, що і стверджується в лемі.

Рис. 1,б ілюструє істотність умови опуклості еталонного зародка, накладеного посилкою 3: при його порушенні, як це має місце на даному малюнку (форма зародка заштрихована), твердження леми 1 втрачає силу, тобто нащадок вилізає з тіла батька.

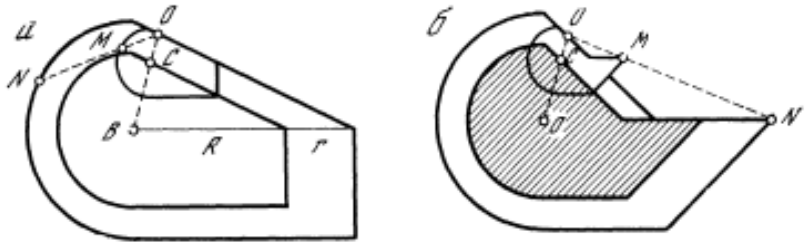


Рис. 1

Введемо в просторі метрику $dist$ (distance), пов'язану з формою еталонного зародка. Назвемо відстань $dist(B,A)$ від точки B до точки A найменший радіус R, такий, що $A \in B(R)$, тобто $dist(B,A)$ – це радіус, якого повинен досягти зародок, вільно зростаючий з центру B, щоб «захопити» точку A. Легко бачити, що в термінах метрики $dist$ твердження леми 1 є не що інше, як «нерівність трикутника »: для будь-яких точок A, B, C

$$dist(B,A) \le dist(B,C) + dist(C,A).$$

Дійсно, якщо A деяка точка $C(r)$, то $dist(C,A) \le r$; за умовою леми 1 $dist(B,C) \le r$, висновок же леми 1 полягає в тому, що в цьому випадку $dist(B,A) \le R + r$.

У термінах метрики $dist$ сам зародок $B(R)$ є не що інше, як множина точок A, віддалених від B не далі ніж на R:

$$B(R) = \{A : dist(B,A) \le R\},$$

а еталонний зародок в цій метриці являє собою «кулю» одиничного радіуса.

В даному випадку точка B фіксована, а A – змінна. Якщо ж, навпаки, ми зафіксуємо точку A і розглянемо множину точок B, відстань від яких до A не перевищує R, то таку множину назвемо R-окілом точки A. Ясно, що R-окіл являє собою область центрально-симетричну відносно точки A зародку

$A(R)$, і тому будемо позначати її $A^*(R)$: Якщо еталонний зародок має центральну симетрію, то $A^*(R) = A(R)$. В цьому випадку $dist(B, A) = dist(A, B)$, в загальному ж випадку ця рівність не виконується. Умовно кажучи, тіло $A^*(R)$ можна назвати уявним зародком радіуса R. Радіус уявного зародка вимірюється в напрямку, протилежному прийнятому в реальному зародку. Очевидно, об′єми реального і уявного зародків радіуса R співпадають – вони дорівнюють $V(R)$. Зазначимо, що три форми запису

$$A \in B(R), \qquad B \in A^*(R), \qquad dist(B, A) \le R$$

еквівалентні. ■

Ясно, що захоплення точки A до моменту t може відбутися тільки в тому випадку, якщо в якийсь момент ξ $(\xi < t)$ народиться зародок-агресор, тобто такий зародок, який буде потенційно здатний дорости до точки A до моменту t. Формально зародок B, що народжується в момент ξ, назвемо агресором, якщо $dist(B, A) \le R(\xi, t)$, де $R(\xi, t)$ – закон росту зародків. Поява агресора – необхідна умова для захоплення точки A; в K-моделі вона є і достатньою. Має місце

<u>Твердження 1.</u> Народження агресора «катастрофічно» для точки A, та з неминучістю призводить до її захопленню до моменту t

Дійсно, якщо народиться агресор B, то точку A міг би «врятувати» тільки якийсь інший зародок, який екранує агресора, тобто своїм тілом перекриє шлях від B до A. Виявляється, однак, що перешкодити агресору B може тільки інший агресор.

Переконаємося в цьому. Нехай агресор B зміг дорости в напрямі BA тільки до точки C, де він натрапив на другий зародок D; якщо τ – момент зіткнення і ξ' – момент народження зародка D то $dist(B, C) = R(\xi, \tau)$, $dist(D, C) = R(\xi', \tau)$. Оскільки точки B, C, A лежать на одній прямій, то

$$dist(C, A) = dist(B, A) - dist(B, C) \le R(\xi, t) - R(\xi, \tau),$$

і в сил нерівності трикутника

$$dist(D, A) \le dist(D, C) + dist(C, A) \le R(\xi', \tau) + R(\xi, t) - R(\xi, \tau) = R(\xi', t)$$

(остання рівність має місце на підставі властивості адитивності). Це означає, що D є агресором. Таким чином, поява агресора з неминучістю призводить до захоплення точки A, і тому ймовірність незахоплення цієї точки, що нас цікавить, є ймовірність того, що до моменту t не відбудеться «катастрофи», якщо розуміти під «катастрофою» появу агресора. Обчислимо цю ймовірність, використовуючи лему 3. Для цього треба обчислити умовну ймовірність появи агресора в момент ξ при умові, що до моменту ξ агресорів не було. За означенням центр народжуваного агресора повинен знаходитися в околі $Z = A^*(R_1)$, $R_1 = R(\xi, t)$.

Для подальшого доведення формули Колмогорова знадобиться наступні леми.

<u>Лема 2.</u> Якщо $dist(B, A) \le R$, то області $A^*(R_1)$ та $B(R_2)$ не перетинаються.

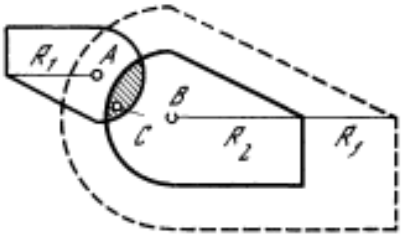


Рис. 2

<u>Доведення леми 2.</u> В іншому випадку існувала б точка C (будь-яка точка всередині заштрихованої області рис. 2), така, що $dist(C, A) \le R_1$, $dist(B, C) \le R_2$. Тоді в силу того, що $dist(B, A) \le dist(B, C) + dist(C, A)$ було б $dist(B, A) \le R_1 + R_2$, що суперечить умові леми. ■

<u>Лема 3.</u> (про катастрофи). Розглянемо потік деяких подій - «катастроф». Нехай $\mu(\xi)d\xi + o(d\xi)$ – умовна ймовірність того, що в інтервалі часу $(\xi, d\xi)$ катастрофа відбудеться, якщо до моменту ξ їх (катастроф) не було. Тоді ймовірність того, що до моменту t катастроф не буде, задається формулою

$$q(t) = \exp\left\{-\int_0^t \mu(\xi)d\xi\right\}.$$

Доведення леми 3. Відсутність катастроф до моменту $t+\Delta t$ є добуток подій a (катастрофи не було до моменту t) і b (катастрофи не буде в інтервалі $(t,\Delta t)$). За формулою

$$P\{ab\} = P\{a\}P\{b\,|\,a\}$$

маємо

$$q(t+dt) = q(t)(1-\mu(t)dt) + o(dt)$$

звідки $\dot{q}(t) = -q\mu$. Проінтегруємо це рівняння

$$q(t) = -\int_0^t q(\tau)\mu(\tau)d\tau + C\,,$$

де C довільна стала. З того, що початкова умова $q(0)=1$, отримаємо $C=0$. Приходимо до $q(t) = \exp\left\{-\int_0^t \mu(\xi)d\xi\right\}$. Лема доведена. ■

Лема про катастрофи дозволяє звести обчислення повної (остаточної) ймовірності $q(t)$ відсутності катастроф до «контрольного» моменту t до обчислення умовної ймовірності $\mu(\xi)d\xi$ для $\xi < t$.

Твердження 2. З умови відсутності агресорів до моменту ξ випливає, що окіл Z цілком знаходиться в маточному середовищі.

Дійсно, якщо в якій-небудь момент τ $(\tau < \xi)$ в деякій точці B народжується зародок, то $dist(B,A) > R(\tau,t)$, інакше він був би агресором. До моменту ξ цей зародок займе область $B(R_2)$, $R_2 = R(\tau,\xi)$, яка не може перетнутися з $Z = A^*(R_1)$ в силу леми 2, бо за властивістю адитивності

$$dist(B,A) > R(\tau,t) = R(\tau,\xi) + R(\xi,t) = R_2 + R_1\,.$$

Це і означає, що в околі Z немає закристалізованої фази. Отже, якщо до моменту ξ агресорів не було, то окіл Z цілком знаходиться в маточному середовищі і в будь-якій її точці потенційно можлива поява агресора. На підставі передумови 2 ймовірність його появи в цих умовах є

$$\mu(\xi)d\xi = \alpha(\xi)mesZd\xi = \alpha(\xi)V(R(\xi,t))d\xi\,.$$

Остаточно ймовірність відсутності агресорів в силу леми 3 дається формулою

$$q(t) = \exp\left\{ -\int_0^t \alpha(\xi) V(R(\xi,\tau)) d\xi \right\},$$

що й було потрібно довести.

1.4. Про розмірності реакційного простору

Ні передумови *К*-моделі, ні вивід формули частки $q(t)$ не пов'язані з конкретним значенням розмірності простору, в якому відбувається кристалізація. Історично дана теорія з'явилася у зв'язку з задачами об'ємної кристалізації металів, і сам термін «об′єм», відповідає в звичайному розумінні тривимірному об′єму. Ніщо не заважає, однак, вважати цей «об′єм» плоским (двовимірним), лінійним (одновимірним) і взагалі n-мірним. У загальному випадку n-мірної кристалізації

$$V(R) = cR^n$$

де c – константа форми [1].

1.5. Випадок миттєвого зародження центрів

Згідно умови (2) інтенсивність зародження центрів $\alpha(t)$ може бути довільною функцією часу. Як граничний випадок можлива і така ситуація, коли всі центри кристалізації виникають на самому початку процесу, практично миттєво. Формально це записується наступним чином [1]:

$$\alpha(t) = \beta\delta(t),$$

де δ - це функція Дірака

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty, x = 0; \\ 0, x \neq 0. \end{cases}$$

β - густина центрів на одиницю об'єму. В цьому випадку формула Колмогорова приймає вигляд

$$q(t) = \exp(-\int_0^t \beta\delta(\tau) c R^k(\tau) d\tau) = \exp(-c\beta R^k(t) \int_0^t \delta(\tau) d\tau) = \exp(-c\beta R^k(t)).$$

1.6. α- і β-моделі

Далі Колмогоровим розглядається два основних варіанта моделі [1].

1. α-модель. Нехай $\alpha=const$ та $v=const$, тоді

$$q(t)=\exp(-\int_0^t \alpha c R^k(\tau)d\tau)=\{R(t)=vt\}=\exp(-\alpha c v^k t^{k+1}/(k+1)),$$

де α – інтенсивність зародження центрів, v – швидкість кристалізації, k – розмірність моделі, c – константа форми.

2. β-модель – модель, в якій всі центри кристалізації виникають на самому початку процесу, майже миттєво. Нехай $v=const$, тоді

$$q(t)=\exp(-c\beta R^k(t))=\{R(t)=vt\}=\exp(-c\beta v^k t^k),$$

де β – інтенсивність зародження центрів, v – швидкість кристалізації, k – розмірність моделі, c – константа форми.

Для цих моделей знаходиться середній час T завершення процесу кристалізації, який рахується за такою формулою:

$$T:=\int_0^\infty q(t)dt.$$

Для α-моделі середній час T завершення процесу кристалізації дорівнює:

$$T:=(c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right);$$

Для β-моделі середній час T завершення процесу кристалізації дорівнює:

$$T:=(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right);$$

де Γ – функція Ейлера

$$\Gamma(z)=\int_0^\infty \chi^{z-1}e^{-\chi}d\chi.$$

Висновки

Базуючись на чотирьох аксіомах, таких як необмеженість об’єму кристалізації, пуассонівський закон зародження центрів, принцип геометричної подібності зародків та єдиність швидкості росту всіх зародків, Колмогоровим була запропонована формула для знаходження долі маточного середовища для кристалізації металів і середній час кристалізації. Також подані означення двох основних моделей, для яких інтенсивність є константою, а отже не залежить від часу.

Мейл та Джонсон, в свою чергу, запропонували більш спрощену моделі кристалізації металів. Інтенсивність появи зародків та швидкість росту одразу були визначені, як константи, а форма зародків була обрана сферична.

2. Дослідження моделі Колмогорова та моделі Мейла – Джонсона

Вступ

Колмогоровим була запропонована формула для знаходження долі маточного середовища для кристалізації металів і середній час кристалізації. Також подані означення двох основних моделей, для яких інтенсивність є константою, а отже не залежить від часу.

Оскільки доля маточного середовища дорівнює ймовірності того, що навмання обрана точка з реакційного об’єму не потрапить у закристалізовану масу, а середній час дорівнює часу існування випадкової точки, тобто є математичним сподіванням від долі маточного середовища, то однією з цікавих задач є знаходження моментів 2-го та n-го порядку.

Мейл та Джонсон, в свою чергу, запропонували більш спрощену моделі кристалізації металів. Інтенсивність появи зародків та швидкість росту ними були визначені, як константи, а форма зародків була обрана сферична.

У моделі Мейла – Джонсона середній час кристалізації не наведений. А отже крім старших моментів необхідно знайти її математичне сподівання. На прикладі моделі Мейла – Джонсона розглянемо другу з основних спрощених моделей, запропонованих Колмогоровим, а саме модель з миттєвим зародженням центрів.

2.1. Моменти вищих порядків для α- і β-моделей

<u>Теорема.</u> Нехай T_α^n – це момент порядку n для α-моделі, а T_β^m – момент порядку m для β-моделі. Тоді

$$T_\alpha^n := n(c\alpha v^k)^{-\frac{n}{k+1}}(k+1)^{\frac{n-k-1}{k+1}}\Gamma\left(\frac{n}{k+1}\right),$$

$$T_\beta^m := \frac{m}{k}(c\beta v^k)^{-\frac{m}{k}}\Gamma\left(\frac{m}{k}\right),$$

де $\Gamma(z)$ – функція Ейлера

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty \chi^{z-1}e^{-\chi}d\chi.$$

Зокрема, можна знайти другі моменти для цих моделей:

$$T_\alpha^2 := 2(c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{1+k}}\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right),$$

$$T_\beta^2 := \frac{2}{k}(c\beta v^k)^{-\frac{2}{k}}\Gamma\left(\frac{2}{k}\right).$$

<u>Доведення.</u>

1. Спочатку доведемо теорему для α-моделі.

Нехай $n = 1$.

$$T_\alpha := \int_0^\infty \exp\left(-\frac{c\alpha v^k t^{k+1}}{k+1}\right)dt = (c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}} \int_0^\infty e^{-\frac{t^{k+1}}{k+1}} dt = \begin{bmatrix} a = \dfrac{t^{k+1}}{k+1}, \\ da = t^k dt. \end{bmatrix} =$$

$$= (c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}} \int_0^\infty t^{-k} e^{-a} da = \begin{bmatrix} t = (a(k+1))^{\frac{1}{k+1}}, \\ t^{-k} = a^{-\frac{k}{k+1}} (k+1)^{-\frac{k}{k+1}}. \end{bmatrix} =$$

$$= (c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}} (k+1)^{-\frac{k}{k+1}} \int_0^\infty a^{-\frac{k}{k+1}} e^{-a} da =$$

$$= (c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}} (k+1)^{-\frac{k}{k+1}} \Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right),$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right) = \int_0^\infty a^{-\frac{k}{k+1}} e^{-a} da.$$

Нехай $n = 2$.

$$T_\alpha^2 := 2\int_0^\infty t \exp\left(-\frac{c\alpha v^k t^{k+1}}{k+1}\right)dt = \begin{bmatrix} a = \dfrac{c\alpha v^k t^{k+1}}{k+1}, \\ da = c\alpha v^k t^k dt. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{2}{c\alpha v^k} \int_0^\infty t^{1-k} e^{-a} da = \begin{bmatrix} t = \left(\dfrac{a(k+1)}{c\alpha v^k}\right)^{\frac{1}{k+1}}, \\ t^{1-k} = a^{\frac{1-k}{k+1}} \left(\dfrac{k+1}{c\alpha v^k}\right)^{\frac{1-k}{k+1}}. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{2}{c\alpha v^k} \cdot \left(\frac{k+1}{c\alpha v^k}\right)^{\frac{1-k}{k+1}} \int_0^\infty a^{\frac{1-k}{1+k}} e^{-a} da =$$

$$= 2(c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}} (k+1)^{\frac{1-k}{1+k}} \Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right),$$

$$\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right) = \int_0^\infty a^{\frac{1-k}{k+1}} e^{-a} da.$$

Знайдемо момент T порядку n для α-моделі.

$$T_\alpha^n := n\int_0^\infty t^{n-1}\exp\left(-\frac{c\alpha v^k t^{k+1}}{k+1}\right)dt = \begin{bmatrix} a = \dfrac{c\alpha v^k t^{k+1}}{k+1}, \\ da = c\alpha v^k t^k dt. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{n}{c\alpha v^k}\int_0^\infty t^{n-k-1}e^{-a}da = \begin{bmatrix} t = \left(\dfrac{a(k+1)}{c\alpha v^k}\right)^{\frac{1}{k+1}}, \\ t^{n-k1} = a^{\frac{n-k-1}{k+1}}\left(\dfrac{k+1}{c\alpha v^k}\right)^{\frac{n-k-1}{k+1}}. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{n}{c\alpha v^k}\cdot\left(\frac{k+1}{c\alpha v^k}\right)^{\frac{n-k-1}{k+1}}\int_0^\infty a^{\frac{n-k-1}{1+k}}e^{-a}da =$$

$$= n(c\alpha v^k)^{-\frac{n}{k+1}}(k+1)^{\frac{n-k-1}{1+k}}\Gamma\left(\frac{n}{k+1}\right),$$

$$\Gamma\left(\frac{n}{k+1}\right) = \int_0^\infty a^{\frac{n-k-1}{k+1}}e^{-a}da.$$

2. Доведемо теорему для β-моделі.

Нехай $m = 1$.

$$T_\beta := \int_0^\infty \exp\left(-c\beta v^k t^k\right)dt = (c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\int_0^\infty e^{-t^k}dt = \begin{bmatrix} a = t^k, \\ da = kt^{k-1}dt. \end{bmatrix} =$$

$$= (c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\int_0^\infty t^{1-k}e^{-a}da = \begin{bmatrix} t = a^{\frac{1}{k}}, \\ t^{1-k} = a^{\frac{1-k}{k}}. \end{bmatrix} =$$

$$= (c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\int_0^\infty a^{\frac{1-k}{k}}e^{-a}da =$$

$$= (c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right),$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{k}\right) = \int_0^\infty a^{\frac{1-k}{k}}e^{-a}da.$$

Нехай $m = 2$.

$$T_\beta^2 := 2\int_0^\infty t\exp\left(-c\beta v^k t^k\right)dt = \begin{bmatrix} a = c\beta v^k t^k, \\ da = kc\beta v^k t^{k-1}dt. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{2}{kc\beta v^k}\int_0^\infty t^{2-k}e^{-a}da = \begin{bmatrix} t = \left(\dfrac{a}{c\beta v^k}\right)^{\frac{1}{k}}, \\ t^{2-k} = \left(\dfrac{a}{c\beta v^k}\right)^{\frac{2-k}{k}} \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{2}{kc\beta v^k}\cdot\left(\frac{1}{c\beta v^k}\right)^{\frac{2-k}{k}}\int_0^\infty a^{\frac{2-k}{k}}e^{-a}da =$$

$$= \frac{2}{k}(c\beta v^k)^{-\frac{2}{k}}\Gamma\left(\frac{2}{k}\right),$$

$$\Gamma\left(\frac{2}{k}\right) = \int_0^\infty a^{\frac{2-k}{k}}e^{-a}da.$$

Знайдемо момент T порядку m для β-моделі.

$$T_\beta^m := m\int_0^\infty t^{m-1}\exp\left(-c\beta v^k t^k\right)dt = \begin{bmatrix} a = c\beta v^k t^k, \\ da = kc\beta v^k t^{k-1}dt. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{m}{kc\beta v^k}\int_0^\infty t^{m-k}e^{-a}da = \begin{bmatrix} t = \left(\dfrac{a}{c\beta v^k}\right)^{\frac{1}{k}}, \\ t^{m-k} = \left(\dfrac{a}{c\beta v^k}\right)^{\frac{m-k}{k}} \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{m}{kc\beta v^k}\cdot\left(\frac{1}{c\beta v^k}\right)^{\frac{m-k}{k}}\int_0^\infty a^{\frac{m-k}{k}}e^{-a}da =$$

$$= \frac{m}{k}(c\beta v^k)^{-\frac{m}{k}}\Gamma\left(\frac{m}{k}\right),$$

$$\Gamma\left(\frac{m}{k}\right) = \int_0^\infty a^{\frac{m-k}{k}}e^{-a}da.$$

3. Доведемо, що моменти T_α^n і T_β^m знаходяться саме за такими формулами.

Нехай $t \geq 0$ – момент часу, при якому кристалізація не завершилась, а ξ – момент часу повної кристалізації, тобто $0 \leq t \leq \xi$. Тоді ми можемо скористуватися формулою з додатку 1.

$$\mathrm{E}\xi^r = r\int_0^\infty u^{r-1}\mathrm{P}(\xi \geq u)du.$$

Отже, момент T порядку n знаходиться за такою формулою:

$$T^n = n\int_0^\infty t^{n-1}\mathrm{P}(\xi \geq t)dt = n\int_0^\infty t^{n-1}q(t)dt.$$

<u>Теорема доведена.</u>

2.2. Середній час завершення процесу кристалізації для моделі Мейла - Джонсона

<u>Теорема.</u> Нехай T_{MJ} – це середній час завершення процесу кристалізації для моделі Мейла – Джонсона, який дорівнює «тривалості життя» випадкової точки. Тоді

$$T_{MJ} := \frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right),$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) = \sqrt{\frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{AGM(\sqrt{2},1)}},$$

де AGM – функція арифметико-геометричного середнього.

<u>Доведення.</u>

Доля маточного середовища для моделі Мейла – Джонсона дорівнює:

$$q(t) = \exp\left(-\frac{\pi\alpha v^3}{3}t^4\right).$$

Знаходимо функцію T_{MJ} за такою формулою:

$$T_{MJ} := \int_0^\infty q(t)dt.$$

$$T_{MJ} := \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\pi\alpha v^3 t^4}{3}\right)dt = \begin{bmatrix} a = \dfrac{\pi\alpha v^3 t^4}{3}, \\ da = \dfrac{4}{3}\pi\alpha v^3 t^3 dt, dt = \dfrac{3}{4\pi\alpha v^3}t^{-3}da. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{3}{4\pi\alpha v^3}\int_0^\infty t^{-3}e^{-a}da = \begin{bmatrix} t = \left(\dfrac{3a}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}, \\ t^{-3} = \left(\dfrac{3a}{\pi\alpha v^3}\right)^{-\frac{3}{4}}. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{3}{4\pi\alpha v^3} \cdot \left(\frac{3}{\pi\alpha v^3} \right)^{-\frac{3}{4}} \int_0^\infty a^{-\frac{3}{4}} e^{-a} da =$$

$$= \frac{1}{4} \left(\frac{3}{\pi\alpha v^3} \right)^{\frac{1}{4}} \Gamma\left(\frac{1}{4} \right).$$

Теорема доведена.

2.3. Момент вищого порядку для моделі Мейла – Джонсона

<u>Теорема.</u> Нехай T_{MJ}^{n} – це момент порядку n для моделі Мейла – Джонсона. Тоді

$$T_{MJ}^{n} := \frac{n}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{n}{4}}\Gamma\left(\frac{n}{4}\right).$$

Зокрема, можна знайти другий момент для цієї моделі:

$$T_{MJ}^{2} := \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\alpha v^{3}}}.$$

<u>Доведення.</u>

Нехай $n = 2$.

$$T_{MJ}^{2} := 2\int_{0}^{\infty} t\exp\left(-\frac{\pi\alpha v^{3}t^{4}}{3}\right)dt = \begin{bmatrix} a = \dfrac{\pi\alpha v^{3}t^{4}}{3}, \\ da = \dfrac{4\pi\alpha v^{3}}{3}t^{3}dt, dt = \dfrac{3}{4\pi\alpha v^{3}}t^{-3}da. \end{bmatrix} =$$

$$= 2\cdot\frac{3}{4\pi\alpha v^{3}}\int_{0}^{\infty} t^{-2}e^{-a}da = \begin{bmatrix} t = \left(\dfrac{3a}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{1}{4}}, \\ t^{-2} = \left(\dfrac{3a}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{-\frac{1}{2}}. \end{bmatrix} = 2\cdot\frac{3}{4\pi\alpha v^{3}}\cdot\left(\frac{3}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{-\frac{1}{2}}\int_{0}^{\infty} a^{-\frac{1}{2}}e^{-a}da =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{1}{2}}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{\pi} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\alpha v^{3}}}.$$

Знайдемо момент T порядку n для моделі Мейла – Джонсона.

$$T_{MJ}^{n} := n\int_{0}^{\infty} t^{n-1}\exp\left(-\frac{\pi\alpha v^{3}t^{4}}{3}\right)dt = \begin{bmatrix} a = \dfrac{\pi\alpha v^{3}t^{4}}{3}, \\ da = \dfrac{4\pi\alpha v^{3}}{3}t^{3}dt, dt = \dfrac{3}{4\pi\alpha v^{3}}t^{-3}da. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{3n}{4\pi\alpha v^{3}}\int_{0}^{\infty} t^{n-4}e^{-a}da = \begin{bmatrix} t = \left(\dfrac{3a}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{1}{4}}, \\ t^{n-4} = \left(\dfrac{3a}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{n-4}{4}}. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{3n}{4\pi\alpha v^{3}}\cdot\left(\frac{3}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{n-4}{4}}\int_{0}^{\infty} a^{\frac{n-4}{4}}e^{-a}da =$$

$$= \frac{n}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{n}{4}}\Gamma\left(\frac{n}{4}\right).$$

Доведемо, що момент T_{MJ}^{n} знаходяться саме за такою формулою.

Нехай $t \geq 0$ – момент часу, при якому кристалізація не завершилась, а ξ – момент часу повної кристалізації, тобто $0 \leq t \leq \xi$. Тоді ми можемо скористуватися формулою з додатку 1.

$$\mathrm{E}\xi^{r} = r\int_{0}^{\infty} u^{r-1}\mathrm{P}(\xi \geq u)du.$$

Отже, момент *T* порядку *n* для моделі Мейла – Джонсона знаходиться за такою формулою:

$$T^{n} = n\int_{0}^{\infty} t^{n-1}\mathrm{P}(\xi \geq t)dt = n\int_{0}^{\infty} t^{n-1}q(t)dt.$$

<u>Теорема доведена.</u>

2.4. Випадок миттєвого зародження центрів для моделі Мейла – Джонсона

Формула Колмогорова для випадку миттєвого зародження центрів має вигляд [1]:

$$q(t) = \exp(-c\beta R^k(t)).$$

Оскільки у моделі Мейла – Джонсона форма зародку – це сфера, тоді

$$cR^k(t) = \frac{4}{3}\pi R^3,$$

$$R(t) = vt,$$

де v – швидкість кристалізації, k – розмірність моделі, c – константа форми, R – радіус форми.

Остаточно, формула Колмогорова миттєвого зародження центрів для моделі Мейла – Джонсона приймає вигляд:

$$q(t) = \exp\left(-\frac{4\pi\beta v^3}{3}t^3\right).$$

2.5. Середній час завершення процесу кристалізації для моделі Мейла – Джонсона у випадку миттєвого зародження центрів

<u>Теорема.</u> Нехай T_{MJ_β} – це середній час завершення процесу кристалізації для моделі Мейла – Джонсона у випадку миттєвого зародження центрів, який дорівнює «тривалості життя» випадкової точки. Тоді

$$T_{MJ_\beta} := \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right).$$

<u>Доведення.</u>

Доля маточного середовища для моделі Мейла – Джонсона у випадку миттєвого зародження центрів дорівнює:

$$q(t) = \exp\left(-\frac{4\pi\beta v^3}{3} t^3\right).$$

Знаходимо функцію T_{MJ_β} за такою формулою:

$$T_{MJ_\beta} := \int_0^\infty q(t)dt.$$

$$T_{MJ_\beta} := \int_0^\infty \exp\left(-\frac{4\pi\beta v^3}{3} t^3\right) dt = \left[\begin{array}{l} a = \dfrac{4\pi\beta v^3}{3} t^3, \\ \\ da = 4\pi\beta v^3 t^2 dt, dt = \dfrac{1}{4\pi\beta v^3} t^{-2} da. \end{array}\right] =$$

$$= \frac{1}{4\pi\beta v^3}\int_0^\infty t^{-2}e^{-a}da = \begin{bmatrix} t = \left(\dfrac{3a}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}}, \\ \\ t^{-2} = \left(\dfrac{3a}{4\pi\beta v^3}\right)^{-\frac{2}{3}}; \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{1}{4\pi\beta v^3}\cdot\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{-\frac{2}{3}}\int_0^\infty a^{-\frac{2}{3}}e^{-a}da = \frac{1}{4\pi\beta v^3}\cdot\left(\frac{4\pi\beta v^3}{3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) =$$

$$= \frac{1}{3^{\frac{2}{3}}}\left(\frac{1}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) = \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right).$$

Теорема доведена.

2.6. Момент вищого порядку для моделі Мейла – Джонсона у випадку миттєвого зародження центрів

<u>Теорема.</u> Нехай $T^n_{MJ_\beta}$ – це момент порядку n для моделі Мейла – Джонсона у випадку миттєвого зародження центрів. Тоді

$$T^n_{MJ_\beta} := \frac{n}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{n}{3}}\Gamma\left(\frac{n}{3}\right).$$

Зокрема, можна знайти другий момент для цієї моделі:

$$T^2_{MJ_\beta} := \frac{2}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right).$$

<u>Доведення.</u>

Нехай $n = 2$.

$$T^2_{MJ_\beta} := 2\int_0^\infty t\exp\left(-\frac{4\pi\beta v^3}{3}t^3\right)dt = \left[\begin{array}{l} a = \dfrac{4\pi\beta v^3}{3}t^3, \\ da = 4\pi\beta v^3 t^2 dt, dt = \dfrac{1}{4\pi\beta v^3}t^{-2}da. \end{array}\right] =$$

$$= \frac{2}{4\pi\beta v^3}\int_0^\infty t^{-1}e^{-a}da = \left[\begin{array}{l} t = \left(\dfrac{3a}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}}, \\ t^{-1} = \left(\dfrac{3a}{4\pi\beta v^3}\right)^{-\frac{1}{3}}; \end{array}\right] =$$

$$= \frac{2}{4\pi\beta v^3}\cdot\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{-\frac{1}{3}}\int_0^\infty a^{-\frac{1}{3}}e^{-a}da = \frac{2}{4\pi\beta v^3}\cdot\left(\frac{4\pi\beta v^3}{3}\right)^{\frac{1}{3}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) =$$

$$= \frac{2}{3^{\frac{1}{3}}}\left(\frac{1}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) = \frac{2}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right).$$

Знайдемо момент T порядку n для моделі Мейла – Джонсона.

$$T_{MJ_\beta}^n := n\int_0^\infty t^{n-1}\exp\left(-\frac{4\pi\beta v^3}{3}t^3\right)dt = \begin{bmatrix} a = \dfrac{4\pi\beta v^3}{3}t^3, \\ \\ da = 4\pi\beta v^3 t^2 dt, dt = \dfrac{1}{4\pi\beta v^3}t^{-2}da. \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{n}{4\pi\beta v^3}\int_0^\infty t^{n-3}e^{-a}da = \begin{bmatrix} t = \left(\dfrac{3a}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}}, \\ \\ t^{n-3} = \left(\dfrac{3a}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{n-3}{3}}; \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{n}{4\pi\beta v^3}\cdot\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{n-3}{3}}\int_0^\infty a^{\frac{n-3}{3}}e^{-a}da = \frac{n}{4\pi\beta v^3}\cdot\left(\frac{4\pi\beta v^3}{3}\right)^{\frac{3-n}{3}}\Gamma\left(\frac{n}{3}\right) =$$

$$= \frac{n}{3^{\frac{3-n}{3}}}\left(\frac{1}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{n}{3}}\Gamma\left(\frac{n}{3}\right) = \frac{n}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{n}{3}}\Gamma\left(\frac{n}{3}\right).$$

Доведемо, що момент $T_{MJ_\beta}^n$ знаходяться саме за такою формулою.

Нехай $t \geq 0$ – момент часу, при якому кристалізація не завершилась, а ξ – момент часу повної кристалізації, тобто $0 \leq t \leq \xi$. Тоді ми можемо скористуватися формулою з додатку 1.

$$\mathrm{E}\xi^r = r\int_0^\infty u^{r-1}\mathrm{P}(\xi \geq u)du.$$

Отже, момент *T* порядку *n* для моделі Мейла – Джонсона знаходиться за такою формулою:

$$T^n = n\int_0^\infty t^{n-1}\mathrm{P}(\xi \geq t)dt = n\int_0^\infty t^{n-1}q(t)dt.$$

<u>Теорема доведена.</u>

2.7. Дисперсія для α- і β-моделей та моделі Мейла-Джонсона

Дисперсія являє собою різницю математичного очікування $E\xi^2$ квадрата випадкової величини і квадрата середнього значення $E\xi$ цієї величини:

$$D\xi = E\xi^2 - (E\xi)^2.$$

1. α-модель:

$$E\xi^2 := 2(c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{1+k}}\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right),$$

$$(E\xi)^2 := (c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{-\frac{2k}{k+1}}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right).$$

$$D\xi = 2(c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{1+k}}\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right) - (c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{-\frac{2k}{k+1}}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right) =$$

$$= (c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{1+k}}\left(2\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right) - \frac{1}{k+1}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right)\right).$$

2. β-модель:

$$E\xi^2 := \frac{2}{k}(c\beta v^k)^{-\frac{2}{k}}\Gamma\left(\frac{2}{k}\right),$$

$$(E\xi)^2 := \frac{1}{k^2}(c\beta v^k)^{-\frac{2}{k}}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right).$$

$$D\xi = \frac{2}{k}(c\beta v^k)^{-\frac{2}{k}}\Gamma\left(\frac{2}{k}\right) - \frac{1}{k^2}(c\beta v^k)^{-\frac{2}{k}}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right) =$$

$$= \frac{1}{k}(c\beta v^k)^{-\frac{2}{k}}\left(2\Gamma\left(\frac{2}{k}\right) - \frac{1}{k}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right)\right).$$

3. Модель Мейла – Джонсона:

$$E\xi^2 := \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\alpha v^3}},$$

$$(E\xi)^2 := \frac{1}{16}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{2}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right).$$

$$D\xi = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{16}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{2}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1 - \frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)\right).$$

4. Модель Мейла – Джонсона для випадку миттєвого зародження центрів:

$$E\xi^2 := \frac{2}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right),$$

$$(E\xi)^2 := \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right).$$

$$D\xi = \frac{2}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right) = \frac{2}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \frac{1}{9}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right) =$$

$$= \frac{1}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}}\left(6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)\right).$$

Отримавши дисперсію для α- і β-моделей та для моделі Мейла – Джонсона можемо скористатися нерівністю Чебишова.

2.8. Оцінки ймовірності відхилення часу повної кристалізації від його середнього значення з використанням нерівності Чебишова

Нехай ξ є випадковою величиною із математичним сподіванням $E\xi$ і дисперсією $D\xi$. Тоді для будь-якого $a > 0$ виконується нерівність Чебишова:

$$P\left(|\xi - E\xi| \geq a\right) \leq \frac{D\xi}{a^2}.$$

Перепишемо цю нерівність наступним чином:

$$P\left(|\xi - E\xi| \leq a\right) \geq 1 - \frac{D\xi}{a^2}.$$

Та розкриємо модуль:

$$P\left(-a + E\xi \leq \xi \leq a + E\xi\right) \geq 1 - \frac{D\xi}{a^2}.$$

Нерівність Чебишова стверджує, що, яке б не було додатне число *a*, ймовірність того, що момент часу повної кристалізації ξ відхилиться від середнього часу завершення процесу кристалізації $E\xi$ не менше ніж на *a*, обмежена зверху величиною $\frac{D\xi}{a^2}$.

Скористаємося останньою нерівністю для α- і β-моделей та моделі Мейла – Джонсона.

1. α-модель:

$$E\xi := (c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}} (k+1)^{-\frac{k}{k+1}} \Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right),$$

$$D\xi := (c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}} (k+1)^{\frac{1-k}{1+k}} \left(2\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right) - \frac{1}{k+1}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right)\right).$$

Нерівність Чебишова:

$$P\left(-a+(c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)\le\xi\le a+(c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)\right)\ge$$

$$\ge 1-\frac{(c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{1+k}}\left(2\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right)-\frac{1}{k+1}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right)\right)}{a^2}.$$

2. β-модель:

$$E\xi := (c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right),$$

$$D\xi := \frac{1}{k}(c\beta v^k)^{-\frac{2}{k}}\left(2\Gamma\left(\frac{2}{k}\right)-\frac{1}{k}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right)\right).$$

Нерівність Чебишова:

$$P\left(-a+(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)\le\xi\le a+(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)\right)\ge$$

$$\ge 1-\frac{(c\beta v^k)^{-\frac{2}{k}}\left(2\Gamma\left(\frac{2}{k}\right)-\frac{1}{k}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right)\right)}{ka^2}.$$

3. Модель Мейла – Джонсона:

$$E\xi := \frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right),$$

$$D\xi := \frac{1}{2}\left(\frac{3}{\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)\right).$$

Нерівність Чебишова:

$$P\left(-a+\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\le\xi\le a+\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\right)\ge$$

$$\ge 1-\frac{\left(\frac{3}{\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)\right)}{2a^2}.$$

4. Модель Мейла – Джонсона для випадку миттєвого зародження центрів:

$$E\xi := \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right),$$

$$D\xi = \frac{1}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}} \left(6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)\right).$$

Нерівність Чебишова:

$$P\left(-a + \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \le \xi \le a + \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right)\right) \ge$$

$$\ge 1 - \frac{\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{2}{3}} \left(6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)\right)}{3a^2}.$$

2.9. Приклади: нерівність Чебишова

<u>Приклад 1.</u> Нехай інтенсивність зародження центрів α (β) і швидкість кристалізації v є константами та дорівнюють одиницям, тоді

1. α-модель:

$$E\xi := c^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right),$$

$$D\xi := c^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{1+k}}\left(2\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right)-\frac{1}{k+1}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right)\right).$$

Нерівність Чебишова:

$$P\left(-a+^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)\le\xi\le a+c^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)\right)\ge$$

$$\ge 1-\frac{c^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{1+k}}\left(2\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right)-\frac{1}{k+1}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right)\right)}{a^2}.$$

2. β-модель:

$$E\xi := c^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right),$$

$$D\xi := \frac{c^{-\frac{2}{k}}}{k}\left(2\Gamma\left(\frac{2}{k}\right)-\frac{1}{k}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right)\right).$$

Нерівність Чебишова:

$$P\left(-a+\le\xi\le a+c^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)\right)\ge$$

$$\ge 1-\frac{\left(2\Gamma\left(\frac{2}{k}\right)-\frac{1}{k}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right)\right)}{c^{\frac{2}{k}}ka^2}.$$

3. Модель Мейла – Джонсона:

$$E\xi := \frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right),$$

$$D\xi := \frac{\sqrt{3}}{2}\left(1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)\right).$$

Нерівність Чебишова:

$$P\left(-a+\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\le\xi\le a+\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\right)\ge$$

$$\ge 1-\frac{\sqrt{3}\left(1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)\right)}{2a^2}.$$

4. Модель Мейла – Джонсона для випадку миттєвого зародження центрів:

$$E\xi := \left(\frac{1}{36\pi}\right)^{\frac{1}{3}}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right),$$

$$D\xi = \frac{1}{3}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\left(6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)-\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)\right).$$

Нерівність Чебишова:

$$P\left(-a+\left(\frac{1}{36\pi}\right)^{\frac{1}{3}}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)\le\xi\le a+\left(\frac{1}{36\pi}\right)^{\frac{1}{3}}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)\right)\ge$$

$$\ge 1-\frac{\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\left(6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)-\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)\right)}{3a^2}.$$

<u>Приклад 2.</u> Нехай імовірність того, що $|\xi - E\xi|$ не перевищує a буде більше 0.96, тоді

$$P\left(|\xi - E\xi| \le a\right) \ge 1 - \frac{D\xi}{a^2} = 0.96,$$

$$\frac{D\xi}{a^2} = 0.04,$$

звідси $a_1 = \dfrac{\sqrt{D\xi}}{0.2} = 5\sqrt{D\xi}, a_2 = -5\sqrt{D\xi},$

оскільки $a > 0,$ то $a = 5\sqrt{D\xi},$

1. α-модель:

$$a := 5(c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{2(1+k)}}\sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right) - \frac{1}{k+1}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right)};$$

Нехай розмірність моделі k = 1, тоді

$$a := 5(c_1\alpha v)^{-\frac{1}{2}}2^0\sqrt{2\Gamma(1) - \frac{1}{2}\Gamma^2\left(\frac{1}{2}\right)} = 5\sqrt{\frac{4-\pi}{2c\alpha v}}.$$

k = 2.

$$a := 5\cdot 3^{-\frac{1}{6}}(c_2\alpha v^2)^{-\frac{1}{3}}\sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \frac{1}{3}\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)};$$

k = 3.

$$a := 5\cdot 4^{-\frac{1}{4}}(c_3\alpha v^3)^{-\frac{1}{4}}\sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{4}\right) - \frac{1}{4}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)} =$$

$$= 5\cdot 4^{-\frac{1}{4}}(c_3\alpha v^3)^{-\frac{1}{4}}\sqrt{2\sqrt{\pi} - \frac{1}{4}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)};$$

Порівняємо a при k = 1 та k = 2 та з'ясуємо в якому випадку a буде менше:

$$\frac{a_1}{a_2}=\frac{5(c_1\alpha v)^{-\frac{1}{2}}\sqrt{2-\frac{\pi}{2}}}{5\cdot 3^{-\frac{1}{6}}(c_2\alpha v^2)^{-\frac{1}{3}}\sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)-\frac{1}{3}\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}}=\left(\frac{3v}{\alpha}\right)^{\frac{1}{6}}\cdot\frac{\sqrt[3]{c_2}}{\sqrt{c_1}}\sqrt{\frac{2-\frac{\pi}{2}}{2\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)-\frac{1}{3}\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}}.$$

$$\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)=1,3541;$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)=2,6784;$$

$$\sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)-\frac{1}{3}\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}=0.56296;$$

$$\sqrt{2-\frac{\pi}{2}}=0.65514;$$

$$\frac{3^{\frac{1}{6}}\sqrt{2-\frac{\pi}{2}}}{\sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)-\frac{1}{3}\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}}=1.39757$$

Чим менше *a*, тим швидше буде відбуватися процес кристалізації металу. Тобто, якщо $a_1 \geq a_2$, то процес кристалізації на площині, в середньому, займе менше часу, ніж на прямій. І навпаки, якщо $a_1 \leq a_2$, то процес кристалізації на прямій відбуватиметься швидше за кристалізацію на площині.

Нехай $a_1 \geq a_2$

$$1.39757\cdot\left(\frac{v}{\alpha}\right)^{\frac{1}{6}}\cdot\frac{\sqrt[3]{c_2}}{\sqrt{c_1}}\geq 1;$$

Отже, якщо $v \geq 0.13\cdot\frac{c_1^3}{c_2^2}\alpha$ – процес кристалізації на площині, в середньому, відбувається швидше, ніж на прямій. Аналогічно доводиться, що процес кристалізації в просторі відбувається швидше, ніж на площині за таких умов і т.д.

Якщо $v < 0.13 \cdot \frac{c_1^3}{c_2^2}\alpha$ – процес кристалізації, в середньому, займе менше часу на прямій, ніж на площині. Аналогічно доводиться, що процес кристалізації займе менше часу на площині, ніж у просторі і т.д.

2. β-модель:

$$a := \frac{5}{\sqrt{k}}(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{k}\right)-\frac{1}{k}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right)};$$

3. Модель Мейла – Джонсона:

$$a := \frac{5}{\sqrt{2}}\left(\frac{3}{\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)};$$

4. Модель Мейла – Джонсона для випадку миттєвого зародження центрів:

$$a = \frac{5}{\sqrt{3}}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}}\sqrt{6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)-\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}.$$

2.10. Правило θ-сигм для α- і β-моделей та моделі Мейла – Джонсона

Якщо випадкова величина ξ має нормальний закон розподілу з математичним сподіванням $E\xi$ і дисперсією $D\xi$, практично вірогідно, що її значення знаходиться в інтервалі $\left(E\xi-\theta\sqrt{D\xi}, E\xi+\theta\sqrt{D\xi}\right)$.

Якщо $\theta = 3$, правило θ-сигм набуває більш відомого випадку, відомого як ***правило трьох сигм***: ймовірність того, що випадкова величина відхилиться від свого математичного сподівання на величину, більшу ніж потрійне середньоквадратичне відхилення, практично дорівнює нулю.

1. α-модель:

$$E\xi := (c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right),$$

$$\sqrt{D\xi} := (c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{2(1+k)}}\sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right)-\frac{1}{k+1}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right)} =$$

$$= (c\alpha v^k)^{-\frac{1}{(k+1)}}(k+1)^{\frac{1-k}{2+2k}}G_\alpha,$$

$$G_\alpha = \sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right)-\frac{1}{k+1}\Gamma^2\left(\frac{1}{k+1}\right)}.$$

Правило θ-сигм:

$$P\Big((c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)-\theta(c\alpha v^k)^{-\frac{1}{(k+1)}}(k+1)^{\frac{1-k}{2+2k}}G_\alpha \le \xi \le$$

$$\le (c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)+\theta(c\alpha v^k)^{-\frac{1}{(k+1)}}(k+1)^{\frac{1-k}{2+2k}}G_\alpha\Big) \ge 1-\frac{1}{\theta^2}.$$

$$P\Big((c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\left(\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)-\theta\sqrt{k+1}G_\alpha\right)\le\xi\le$$

$$\le(c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\left(\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)+\theta\sqrt{k+1}G_\alpha\right)\Big)\ge 1-\frac{1}{\theta^2}.$$

Отже, з імовірністю не менше, ніж $1-\frac{1}{\theta^2}$ момент часу завершення кристалізації ξ буде знаходитись у такому інтервалі

$$\Big((c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\left(\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)-\theta\sqrt{k+1}G_\alpha\right),$$

$$c\alpha v^k)^{-\frac{1}{k+1}}(k+1)^{-\frac{k}{k+1}}\left(\Gamma\left(\frac{1}{k+1}\right)+\theta\sqrt{k+1}G_\alpha\right)\Big).$$

При $\theta\to\infty$ ця ймовірність буде прямувати до 1.

2. β-модель:

$$E\xi := (c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right),$$

$$\sqrt{D\xi} := \frac{1}{\sqrt{k}}(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{k}\right)-\frac{1}{k}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right)} = \frac{1}{\sqrt{k}}(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}G_\beta,$$

$$G_\beta = \sqrt{2\Gamma\left(\frac{2}{k}\right)-\frac{1}{k}\Gamma^2\left(\frac{1}{k}\right)}.$$

Правило $\boldsymbol{\theta}$-сигм:

$$P\Big((c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)-\theta\frac{1}{\sqrt{k}}(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}G_\beta\le\xi\le$$

$$\le(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)+\theta\frac{1}{\sqrt{k}}(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}G_\beta\Big)\ge 1-\frac{1}{\theta^2}.$$

$$P\Big((c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\left(\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)-\theta kG_\beta\right)\le\xi\le$$

$$\le(c\beta v^k)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\left(\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)+\theta kG_\beta\right)\Big)\ge 1-\frac{1}{\theta^2}.$$

Отже, з імовірністю не менше, ніж $1-\frac{1}{\theta^2}$ момент часу завершення кристалізації ξ буде знаходитись у такому інтервалі

$$\left(\left(c\beta v^k\right)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\left(\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)-\theta k G_\beta\right),\left(c\beta v^k\right)^{-\frac{1}{k}}\frac{1}{k}\left(\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)+\theta k G_\beta\right)\right).$$

При $\theta\to\infty$ ця ймовірність буде прямувати до 1.

3. Модель Мейла – Джонсона:

$$E\xi := \frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right),$$

$$\sqrt{D\xi} := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{3}{\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}.$$

Правило θ-сигм:

$$P\left(\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)-\frac{\theta}{\sqrt{2}}\left(\frac{3}{\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}\le\xi\le\right.$$

$$\left.\le\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)+\frac{\theta}{\sqrt{2}}\left(\frac{3}{\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}\right)\ge 1-\frac{1}{\theta^2}.$$

$$P\left(\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)-2\sqrt{2}\pi^{\frac{1}{4}}\theta\sqrt{1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}\right)\le\xi\le\right.$$

$$\left.\le\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)+2\sqrt{2}\pi^{\frac{1}{4}}\theta\sqrt{1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}\right)\right)\ge 1-\frac{1}{\theta^2}.$$

Отже, з імовірністю не менше, ніж $1-\frac{1}{\theta^2}$ момент часу завершення кристалізації ξ буде знаходитись у такому інтервалі

$$\left(\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)-2\sqrt{2}\pi^{\frac{1}{4}}\theta\sqrt{1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}\right),\right.$$

$$\left.\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)+2\sqrt{2}\pi^{\frac{1}{4}}\theta\sqrt{1-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}\right)\right).$$

При $\theta \to \infty$ ця ймовірність буде прямувати до 1.

4. Модель Мейла – Джонсона для випадку миттєвого зародження центрів:

$$E\xi := \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right).$$

$$\sqrt{D\xi} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}.$$

Правило $\boldsymbol{\theta}$-сигм:

$$P\left(\left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) - \frac{\theta}{\sqrt{3}}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)} \le \xi \le \right.$$

$$\left. \le \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) + \frac{\theta}{\sqrt{3}}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}\right) \ge 1 - \frac{1}{\theta^2}.$$

$$P\left(\left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) - \theta\sqrt{3}\sqrt{6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}\right) \le \xi \le \right.$$

$$\left. \le \left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) + \theta\sqrt{3}\sqrt{6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}\right)\right) \ge 1 - \frac{1}{\theta^2}.$$

Отже, з імовірністю не менше, ніж $1 - \frac{1}{\theta^2}$ момент часу завершення кристалізації ξ буде знаходитись у такому інтервалі

$$\left(\left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) - \theta\sqrt{3}\sqrt{6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}\right),\right.$$

$$\left.\left(\frac{1}{36\pi\beta v^3}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) + \theta\sqrt{3}\sqrt{6\Gamma\left(\frac{2}{3}\right) - \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right)}\right)\right)$$

При $\theta \to \infty$ ця ймовірність буде прямувати до 1.

2.11. Оцінки ймовірності відхилення часу повної кристалізації від його середнього значення з використанням нерівності Маркова

Нехай випадкова величина $\xi:\Omega\to R$ визначена на ймовірнісному просторі (Ω,F,P), і її математичне сподівання $E\xi$ скінченне. Тоді для

$$P(\xi\ge a)\le\frac{E\xi^n}{a^n},$$

де $a>0$.

Скористаємося нерівністю Маркова для α- і β-моделей та моделі Мейла – Джонсона.

1. α–модель.

$$E\xi^n:=n(c\alpha v^k)^{-\frac{n}{k+1}}(k+1)^{\frac{n-k-1}{k+1}}\Gamma\left(\frac{n}{k+1}\right),$$

$$P\left(\xi\ge a\right)\le\frac{n(c\alpha v^k)^{-\frac{n}{k+1}}(k+1)^{\frac{n-k-1}{k+1}}\Gamma\left(\frac{n}{k+1}\right)}{a^n}.$$

2. β–модель.

$$E\xi^m:=\frac{m}{k}(c\beta v^k)^{-\frac{m}{k}}\Gamma\left(\frac{m}{k}\right),$$

$$P\left(\xi\ge a\right)\le\frac{m(c\beta v^k)^{-\frac{m}{k}}\Gamma\left(\frac{m}{k}\right)}{ka^n}.$$

3. Модель Мейла – Джонсона:

$$E\xi^n:=\frac{n}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{n}{4}}\Gamma\left(\frac{n}{4}\right),$$

$$P(\xi \geq a) \leq \frac{n\left(\frac{3}{\pi\alpha v^3}\right)^{\frac{n}{4}}\Gamma\left(\frac{n}{4}\right)}{4a^n}.$$

4. Модель Мейла – Джонсона для випадку миттєвого зародження центрів:

$$E\xi^n := \frac{n}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{n}{3}}\Gamma\left(\frac{n}{3}\right),$$

$$P(\xi \geq a) \leq \frac{3^{\frac{n-3}{4}}\left(\frac{1}{4\pi\beta v^3}\right)^{\frac{n+1}{4}}\Gamma\left(\frac{n+1}{4}\right)}{a^n}.$$

Розглянемо нерівність Маркова для α–моделі більш детально, а саме порахуємо цю ймовірність при $n = 2$ та $n = 4$:

$n = 2$.

$$A_2 = \frac{2(c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right)}{a^2}.$$

$n = 4$.

$$A_4 = \frac{4(c\alpha v^k)^{-\frac{4}{k+1}}(k+1)^{\frac{3-k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{4}{k+1}\right)}{a^4}.$$

Порівняємо A_2 та A_4:

$$\frac{A_2}{A_4} = \frac{a^4 2(c\alpha v^k)^{-\frac{2}{k+1}}(k+1)^{\frac{1-k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right)}{a^2 4(c\alpha v^k)^{-\frac{4}{k+1}}(k+1)^{\frac{3-k}{k+1}}\Gamma\left(\frac{4}{k+1}\right)} = \frac{a^2(c\alpha v^k)^{\frac{2}{k+1}}\Gamma\left(\frac{2}{k+1}\right)}{2(k+1)^{\frac{2}{k+1}}\Gamma\left(\frac{4}{k+1}\right)}$$

Нехай $k = 3$.

$$\frac{A_2}{A_4} = \frac{a^2(c\alpha v^3)^{\frac{2}{4}}\Gamma\left(\frac{2}{4}\right)}{2\cdot 4^{\frac{2}{4}}\Gamma\left(\frac{4}{4}\right)} = \frac{a^2\sqrt{c\alpha v^3}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{4\Gamma(1)} = \frac{a^2}{4}\sqrt{c\alpha\pi v^3}.$$

Якщо $0.25a^2\sqrt{c\alpha\pi v^3} \geq 1$, то нерівність Маркова є точнішою за нерівність Чебишева для α–моделі, тобто при $a \geq 2\left(c\alpha\pi v^3\right)^{\frac{1}{4}}$.

Якщо $0.25a^2\sqrt{c\alpha\pi v^3} < 1$, то нерівність Чебишева є точнішою за нерівність Маркова для α–моделі, тобто при $a < 2\left(c\alpha\pi v^3\right)^{\frac{1}{4}}$.

2.12. Порівняння моментів для часу повної кристалізації для α- і β-моделей на прикладі моделі Мейла – Джонсона

Розглянемо співвідношення моментів порядку n моделі Мейла – Джонсона для α і β випадку:

$$T_{MJ}^{n} := \frac{n}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{n}{4}}\Gamma\left(\frac{n}{4}\right),$$

$$T_{MJ_{\beta}}^{n} := \frac{n}{3}\left(\frac{3}{4\pi\beta v^{3}}\right)^{\frac{n}{3}}\Gamma\left(\frac{n}{3}\right).$$

Нехай α = β.

$$\frac{T_{MJ_{\alpha}}^{n}}{T_{MJ_{\beta}}^{n}} = \frac{\frac{n}{4}\left(\frac{3}{\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{n}{4}}\Gamma\left(\frac{n}{4}\right)}{\frac{n}{3}\left(\frac{3}{4\pi\alpha v^{3}}\right)^{\frac{n}{3}}\Gamma\left(\frac{n}{3}\right)} = \frac{3\cdot 4^{\frac{n}{3}}\left(\pi\alpha v^{3}\right)^{\frac{n}{12}}\Gamma\left(\frac{n}{4}\right)}{4\cdot 3^{\frac{n}{12}}\Gamma\left(\frac{n}{3}\right)} =$$

$$= \frac{4^{\frac{n-3}{3}}\left(\pi\alpha v^{3}\right)^{\frac{n}{12}}\Gamma\left(\frac{n}{4}\right)}{3^{\frac{n-12}{12}}\Gamma\left(\frac{n}{3}\right)}.$$

Нехай $n = 12m,$ тоді

$$\frac{\Gamma(3m)}{\Gamma(4m)} = \frac{(3m-1)!}{(4m-1)!} = \frac{1}{3m(3m+1)\ldots(4m-1)} \le \frac{1}{m^{m}};$$

Тобто

$$\frac{\Gamma\left(\frac{n}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{3}\right)} \le \frac{1}{\left(n/12\right)^{n/12}} \to 0,$$

коли $n \to \infty.$

Отже, кристалізація швидше відбувається у β-моделі, тобто у випадку миттєвого зародження центрів.

Висновки

У цьому розділі були отримані формули для моментів старших порядків для часу повної кристалізації в моделі Колмогорова та моделі Мейла – Джонсона та знайдений середній час повної кристалізації для останньої моделі.

Окремо досліджена модель Мейла – Джонсона у випадку миттєвого зародження центрів, а також отримані формули середнього часу повної кристалізації та моменти старших порядків.

Розглянуті оцінки ймовірності відхилення часу повної кристалізації від його середнього значення з використанням нерівності Чебишова та нерівності Маркова, та умови при яких одна нерівність спрацьовує краще за іншу.

При порівнянні моментів для часу повної кристалізації для α- та β-моделей, доведено, що кристалізація металу відбувається швидше у випадку миттєвого зародження центрів.

3. Охорона праці

Вступ

Магістерська дисертація є кваліфікаційною роботою на здобуття освітньо-кваліфікаційного рівня «магістр», яка містить сукупність результатів наукових досліджень, має внутрішню єдність, і свідчить про те, що автор володіє сучасними методами і здатний самостійно проводити наукові дослідження на підставі отриманих знань, умінь і досвіду.

Написання магістерської дисертації відноситься до розумової праці, а отже є доцільним визначення ступеню напруженості для магістрантів за основними показниками, такими як, інтелектуальне навантаження, сенсорне навантаження, емоційне навантаження, монотонність праці та режим роботи. Для знаходження ступеню напруженості доцільно скористатись таблицею «Класи умов праці за показниками напруженості трудового процесу».

Потрібно проаналізувати психологічні аспекти умови праці та встановити норми праці, визначити оптимальний режим роботи та відпочинку під час написання магістерської дисертації.

Оскільки основна робота проходить з використанням комп’ютеру, необхідно зазначити шкідливі та небезпечні фактори, що можуть впливати на організм під час роботи з ПК та периферійними пристроями. Окремо слід зазначити правила, що запобігають несприятливим наслідкам для здоров’я.

3.1. Оцінка напруженості праці

У цьому розділі проведена оцінка напруженості праці під час написання магістерської дисертації за основними показниками з використанням таблиці «Класи умов праці за показниками напруженості трудового процесу».

Оцінка напруженості трудового процесу здійснюється на підставі обліку факторів, що характеризують напруженість праці, а саме, інтелектуальні, сенсорні, емоційні навантаження, ступінь монотонності праці, режим роботи.

1. Інтелектуальне навантаження полягає у необхідності прийняття рішень: вирішувались складні завдання з вибором за відомими алгоритмами;

   а) сприймання сигналів: сприймалися сигнали з наступним порівнянням фактичних значень параметрів з їх номінальним значенням. Давалася заключна оцінка параметрів з їх номінальним значенням;

   б) розподіл функцій за ступенем складності сприйняття: здійснювалась обробка, перевірка і контроль за виконанням завдання;

   в) характер виконуваної роботи: робота виконувалась за встановленим графіком з можливим його коректуванням у ході діяльності.

2. Сенсорні навантаження були наступні:

   а) навантаження на зоровий аналізатор: більше чотирьох годин на день роботи з комп’ютером;

   б) навантаження на голосовий апарат: до 16 годин на тиждень – спілкування с науковим керівником, підготовка до виступу на конференції.

3. Емоційне навантаження полягає у ступені відповідальності за результат діяльності та значущість помилки: несу відповідальність за функціональну якість основної роботи., науковий керівник вимагає виправлень за рахунок зусиль магістранта.

4. Монотонність навантажень полягає у кількості та тривалості операцій за одиницю часу: час активних дій складав близько 1 години, монотонність виробничої обстановки складала близько 8 годин.

5. Режим праці: фактична тривалість робочого дня складала 8 годин.

На підставі обліку всіх наявних значущих показників, згідно з таблицею отримаємо кінцеву оцінку напруженості праці під час написання магістерської дисертації – шкідливий клас умов I ступеню.

3.2. Аналіз психологічних аспектів умов праці

На відміну від фізичної, розумова праця супроводжується меншими витратами енергетичних запасів, але це не свідчить про її легкість. Основним працюючим органом під час такого виду праці виступає мозок. При інтенсивній інтелектуальній діяльності потреба мозку в енергії підвищується і становить 15-20% від загального об'єму енергії, яка витрачається в організмі. При читанні вголос витрати енергії підвищуються на 48%; при публічному виступі – на 94%; при роботі операторів обчислювальних машин – на 60-100%.

Для розумової праці, зокрема написання магістерської дисертації, характерні: велика кількість стресів, мала рухливість, вимушена статична поза. Наслідок, такої роботи застійні явища у м'язах ніг, органах черевної порожнини і малого тазу, погіршення постачання мозку киснем, зростання потреби в глюкозі.

Під час написання магістерської дисертації, що є розумовою працею, можуть виникнути наступні проблеми, що призведуть до перевтоми магістранта:

1. інформаційне перевантаження мозку в умовах дефіциту часу;
2. тривожне очікування інформації чи результатів, особливо тих, що викликає необхідність прийняття рішення;
3. велике зорове та нервово-емоційне напруження, бо основна частина роботи пов’язана з використанням комп’ютера;
4. гіподинаміка, пов’язана з малорухливістю та вимушеною статичною позою;
5. тривала ізоляція у спілкуванні, зумовлена індивідуальним характером праці.

Для профілактики перевтоми великого значення набуває правильний розпорядок робочого дня, який передбачає раціональне розділення

навантаження та відпочинку, при чому, як розумового, так і фізичного.

3.3. Нормування праці. Вибір оптимального режиму праці та відпочинку

Серед факторів підвищення ефективності написання магістерської дисертації особливе місце належить раціональному режиму праці і відпочинку. Від його структури залежить динаміка втоми, відновлюваність функцій організму, працездатність і здоров'я, надійність і продуктивність праці.

Під режимом праці і відпочинку розуміють загальну тривалість трудової діяльності протягом доби, тижня, місяця, частоту і тривалість періодів трудової активності і перерв у процесі цієї активності, співвідношення і чергування цих періодів.

Щоб зробити написання магістерської дисертації ефективним необхідно дотримуватись раціонального режиму праці та відпочинку. Я досягла оптимального режиму, наступним шляхом: до 4 годин на тиждень на обговорення дипломної роботи з науковим керівником, включно з перевіркою набутих результатів та отриманням нових завдань; до 15 годин на тиждень на самостійну роботу; до 5 годин на тиждень на роботу за комп'ютером.

Незалежно від виду праці функціональний стан магістранта змінюється внаслідок втоми, що призводить до зниження рівня оперативних резервів. Тому важливо розпланувати свій час згідно раціонального режиму праці та відпочинку, та зміною виду діяльності, якщо таке передбачено.

3.4. Санітарія та гігієна робочого місця

Під час написання магістерської дисертації важливо дотримуватись санітарно-гігієнічні вимог до робочого місця, що регулюються Законом України "Про охорону праці" (поточна редакція від 16.09.2008);

1. Вимоги до приміщення: згідно з чинними нормативними документами з розрахунку на одне робоче місце, обладнане ПК, площа приміщення має становити не менше 6,0 кв. м; обсяг – не менше 20,0 куб. м. Робоче місце повинно бути розташоване на відстані не менше ніж 1 м від стіни з вікном

У приміщеннях з персональними комп'ютерами слід щоденно проводити вологе прибирання.

2. Вимоги до організації робочого місця: оскільки комп'ютер є основним видом діяльності, то ПК і його периферійні пристрої (в моєму випадку це принтер) слід розміщувати на робочому столі, як правило, з лівого боку.

Монітор та клавіатура мають розташовуватися на оптимальній відстані від очей користувача, але не ближче 600 мм, з урахуванням розміру алфавітно-цифрових знаків та символів.

Відстань від екрана до ока магістранта повинна складати: при розмірі екрану по діагоналі 43 см (17") – відстань від екрана до ока становить 700 – 800 мм.

Розташування монітору має забезпечувати зручність зорового спостереження у вертикальній площині під кутом ±30° від лінії зору працівника.

Клавіатуру слід розміщувати на поверхні столу або на спеціальній, врегульованій за висотою, робочій поверхні окремо від столу на відстані 100-300 мм від краю, ближчого до працівника. Кут нахилу клавіатури має бути в межах 5°-15°.

3. Вимоги до освітлення: відносно вікон робоче місце повинно бути розміщено так, щоб природне світло було збоку, краще з лівого, та забезпечувався коефіцієнт природної освітленості не нижче 1,5%. Робоче місце, обладнане ПК повинно бути розташоване так, щоб уникнути потрапляння прямого світла в очі.

Джерела штучного світла рекомендується розташувати з обох сторін від екрану паралельно напрямку зору. Щоб уникнути відблисків від екрану, клавіатури, освітлювальних пристроїв, сонця в напрямку очей необхідно застосовувати антиблискові сітки, спеціальні фільтри для екрану, захисні козирки, жалюзі на вікнах. Вікна приміщень повинні мати регулювальні пристрої для відкривання.

4. Вимоги до вентиляції, опалення, кондиціювання, мікроклімату: робоче місце повинно дотримуватися оптимальні умови мікроклімату: тепле сухе приміщення, з вентиляцією. Температура повітря 22-24 ºС, відносна вологість 60-40%, швидкість руху повітря не більш 0,1 м/сек. Показники температури повітря в робочій зоні не повинна виходити більш ніж на 2 ºС за межі оптимальних величин температури повітря.

5. Вимоги електробезпеки: персональний комп’ютер та периферійні пристрої повинні підключатися до електромережі тільки за допомогою справних штепсельних з’єднань і електророзеток заводського виготовлення.

Для підключення переносної електроапаратури застосовують гнучкі проводи в надійній ізоляції. Тимчасова електропроводка від переносних приладів до джерел живлення виконується найкоротшим шляхом без заплутування проводів у конструкціях машин, приладів та меблях.

3.5. Охорона праці при використанні технічних засобів

Основні шкідливі та небезпечні фактори, що можуть впливати на організм під час роботи з персональним комп'ютером, такі [11]:

1. підвищений рівень електромагнітних випромінювань;
2. підвищений рівень іонізуючих випромінювань;
3. підвищена яскравість світла;
4. підвищене значення напруги в електромережі, замикання якої може статися крізь тіло людини;
5. статичні перевантаження кістково-м'язового апарату та динамічні локальні перевантаження м'язів кистей рук;
6. перенапруження зорового аналізатора;
7. розумове перенапруження;
8. емоційні перевантаження;
9. монотонність праці.

Аби запобігти несприятливим наслідкам для здоров'я, у приміщенні, в якому проводиться написання магістерської дисертації та де застосовується комп'ютерна техніка, потрібно:

1. провести раціоналізацію робочого місця згідно з вимог санітарії та гігієни робочого місця освітлення, опалення, вентиляції, організації робочого місця, тощо;
2. налагодити комфортні умови праці;
3. запобігти розумовому та емоційному перенавантаженню, шляхом оптимізації режиму праці та відпочинку;
4. зменшити статичні навантаження;
5. для більшої ефективності роботи, запобігти монотонності праці.

Якщо заходи безпеки під час роботи на ПЕОМ регламентуються

нормативними документами, то стосовно решти офісного обладнання належної уваги нема. Скажімо, щодо принтера, вся робота з яким зводиться до вмикання та вимикання, додавання паперу та вилучення відбитків. Проте принтер є складним електроприладом, тому, працюючи з ним, належить виконувати стандартні вимоги пожежо- та електробезпеки. Також існує загроза термоопіків, оскільки під час роботи окремі елементи можуть нагріватися до високої температури.

Висновки

Зробивши оцінку напруженості праці під час написання магістерської дисертації можна стверджувати, що ступінь навантаження є найвищим. А отже, щоб не досягти перевтоми магістранта слід дотримуватись простих правил нормування праці та санітарії і гігієни робочого місця. Одразу потрібно скласти оптимальний графік праці та відпочинку, запобігти зоровому та нервово-емоційному напруженню, бо основна частина роботи пов’язана з використанням комп’ютера, а також гіподинаміці, пов’язаної з малорухливістю та вимушеною статичною позою.

Магістрант, що дотримується цих правил, зможе досягти рівня високої продуктивності, достатньої для успішного написання магістерської дисертації.

Загальні висновки

1. Знайдені формули для моментів вищого порядку для двох основних моделей Колмогорова.
2. Знайдена формула для середнього часу кристалізації для моделі Мейла – Джонсона, а також формула момент вищого порядку для цієї моделі.
3. Виведена формула Колмогорова миттєвого зародження центрів для моделі Мейла – Джонсона. Знайдена формула середнього часу цієї моделі, а також момент вищого порядку.
4. За допомогою других моментів знайдені дисперсії для двох моделей Колмогорова та двох моделей Мейла – Джонсона, які в подальшому були використані у нерівності Чебишова.
5. Розглянуті оцінки ймовірності відхилення часу повної кристалізації від його середнього значення з використанням нерівності Чебишова та нерівності Маркова.
6. У прикладі з нерівністю Чебишова знайдені умови, при яких процес кристалізації металів відбувається швидше на прямій, ніж на площині, або швидше на площині, ніж у просторі.
7. За допомогою узагальненого правила θ-сигм (відомого, як правило трьох сигм, при $\theta = 3$) знайдені інтервали для моменту повної кристалізації.
8. Розглянута нерівність Маркова для двох моделей Колмогорова та двох моделей Мейла – Джонсона, та знайдені умови при яких нерівність Маркова дає більш точну оцінку за нерівність Чебишова.
9. Доведено на прикладі моделі Мейла – Джонсона, що кристалізація металу відбувається швидше у випадку миттєвого зародження центрів, ніж у загальному випадку.
10. Визначений ступінь напруженості праці під час написання магістерської дисертації. Складений перелік правил, яких слід дотримуватися

магістранту, щоб не досягти перевтоми. Виявлені основні шкідливі та небезпечні фактори, що можуть впливати на організм під час роботи з персональним комп’ютером, та правила, що запобігають несприятливим наслідкам для здоров’я

Список використаної літератури

1. Колмогоров А. Н. К статистической теории кристаллизации металлов/А. Н. Колмогоров// Известия академии наук СССР. — № 3 — М., 1937, с. 355 – 358.
2. Johnson W., Mehl R. — Trans. Amer. Inst. Min. Met., 1939, 135. с. 416.
3. Беленький В. З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. Феноменологический подход./В. З. Беленький — М.: Наука, 1980, с.88.
4. Уитаккер Э. Т., Ватсон Дж. Н.. Курс современного анализа. Часть вторая. Трансцендентные функции./Э.Т. Уитаккер, Дж. Н. Ватсон — Государственное издательство физико-математической литературы, М., 1963, с. 500.
5. Колмогоров А. Н., Фомин, С. В. Элементы теории функций и функционального анализа./А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин — изд. четвёртое, переработанное. — М.: Наука, 1976, 544 с.
6. Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей. М.: Наука, 1965. 400 с.
7. Кендалл М., Моран П. Геометрические вероятности. М.: Наука, 1972. 192 с.
8. Беккенбах Э., Беллман Р. Неравенства. Мир, 1965. с. 21-22.
9. Ткачук К. Н., Халімовський М. О., Зацарний В. В. та ін. Основи охорони праці: Підручник. — 3-те вид., допов. та перероб. — К.: Основа, 2011. — 480 с.
10. Основи охорони праці: Підручник / За ред. проф. В.В. Березуцького — Х.: Факт, 2005. — 480 с.
11. Охорона праці. Методичні вказівки до виконання розділу «Охорона праці та безпека в надзвичайних ситуаціях» в дипломних роботах спеціалістів та магістерських дисертаціях студентів гуманітарного напрямку

підготовки за освітньо-кваліфіційними рівнями «спеціаліст» та «магістр». — К.: КПІ, 2014. – 33 с.

12. ДСТУ 2293-99 «Охорона праці. Терміни та визначення основних понять».

13. ДБН В.2.5-28-2006 «Природне і штучне освітлення».

14. НПАОП 0.00-1.28-10 Правила охорони праці під час експлуатації електронно-обчислювальних машин. Наказ Держгірпромнагляду від 26.03.2010 р. № 65.

15. Білоконь К. Г. Модель Колмогорова: матеріали четвертої між університетської наукової конференції з математики та фізики для студентів та молодих вчених, Київ, 23-25 квітня 2015 року: тези доповідей. — К.: КПІ, 2015. – с 12.

Додаток 1.
Формула для обчислення старшого порядку невід’ємної випадкової величини

Нехай ξ – невід'ємна випадкова величина. Оскільки

$$\xi = \int_0^\infty 1_{\{\xi \geq u\}} du$$

для будь-якого $\omega \in \Omega$, то за теоремою Фубіні

$$\mathrm{E}\xi = \int_0^\infty \mathrm{E}\left(1_{\{\xi \geq u\}}\right) du = \int_0^\infty \mathrm{P}(\xi \geq u) du,$$

якщо один з інтегралів існує.

Нехай $r > 0$. Застосуємо доведену формулу до випадкової величини ξ^r, а потім зробимо заміну змінних:

$$\mathrm{E}\xi^r = \int_0^\infty \mathrm{P}(\xi^r \geq u) du = \int_0^\infty \mathrm{P}(\xi^r \geq u^{1/r}) dt = r\int_0^\infty u^{r-1}\mathrm{P}(\xi \geq u) du.$$

Додаток 2.

Арифметико-геометричне середнє

Арифметико-геометричне середнє величин a і b – границя послідовності $\{a_N\}$, $\{b_N\}$ де:

$$a_0 = a, b_0 = b;$$

$$a_1 = \frac{a_0 + b_0}{2}, b_1 = \sqrt{a_0 b_0};$$

$$a_2 = \frac{a_1 + b_1}{2}, b_2 = \sqrt{a_1 b_1};$$

...

$$a_N = \frac{a_{N-1} + b_{N-1}}{2}, b_N = \sqrt{a_{N-1} b_{N-1}}.$$

мають при $N \to +\infty$ однакову границю:

$$\lim_{N\to\infty} a_N = \lim_{N\to\infty} b_N = AMG(a,b).$$

Додаток 3.

Обчислення функції Г $\left(\frac{1}{4}\right)$

Розв'язуючи задачу про момент вищого порядку для моделі Мейла – Джонсона, виявилося, що гамма-функція від 1/4 не задана в явному вигляді:

$$\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)=\sqrt{\frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{AGM(\sqrt{2},1)}},$$

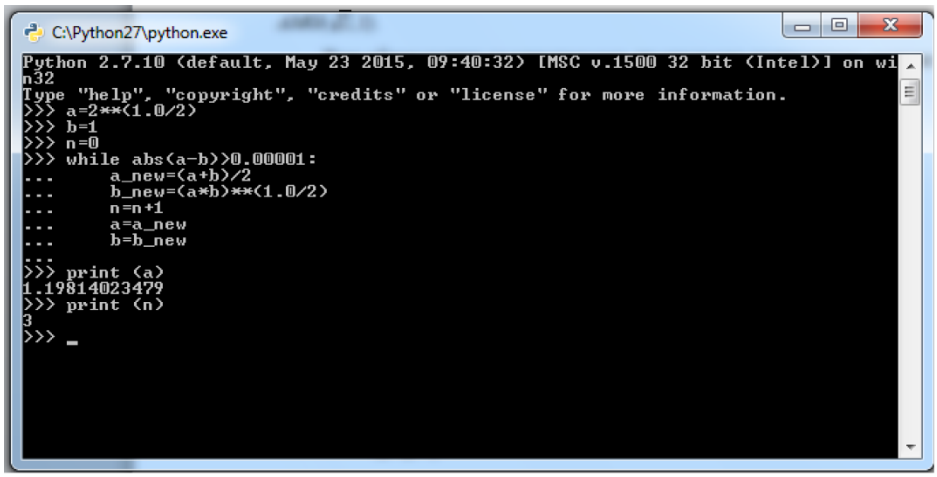
де AGM – функція арифметико-геометричного середнього (додаток 2).

Отже, для знаходження гамма-функції від 1/4, необхідно обчислити $AMG(\sqrt{2},1)$.

Для обчислення скористаємось програмою написаною мовою Python.

<u>Код програми:</u>

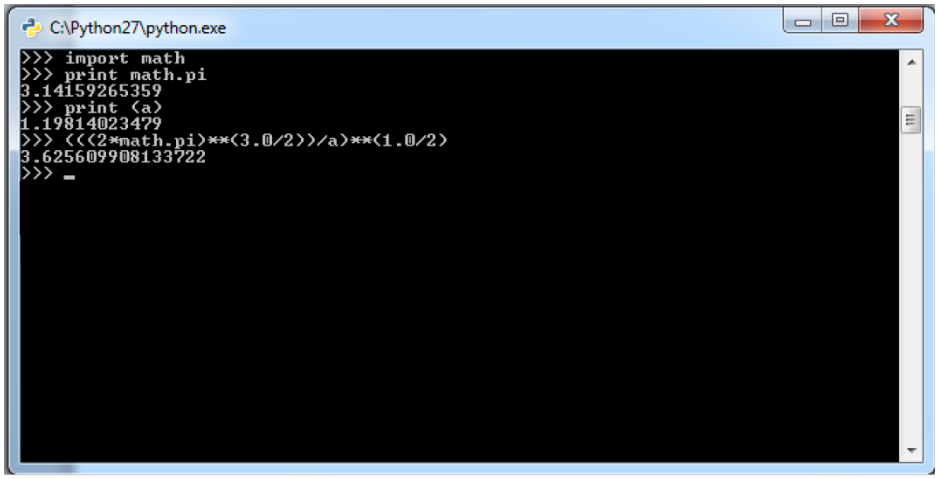
```
a=2**(1.0/2)
b=1
n=0
while abs(a-b)>0.00001:
    a_new=(a+b)/2
    b_new=(a*b)**(1.0/2)
    n=n+1
    a=a_new
    b=b_new
print (a)
print (b)
print (n)
```



Тобто на третьому кроці значення *a* і *b* співпадають і дорівнюють:

$AMG(\sqrt{2},1) = 1.19814023479.$

Також за допомогою програми Python порахуємо гамма-функцію від 1/4.



$$\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \approx 3.6257$$

Додаток 4.

Обчислення функції Г $\left(\frac{1}{3}\right)$

Розв'язуючи задачу про момент вищого порядку для моделі Мейла – Джонсона у випадку миттєвого зародження центрів, виявилося, що гамма-функція від 1/3 не задана в явному вигляді:

$$\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)=\frac{2^{\frac{10}{9}}\cdot 3^{-\frac{1}{12}}\pi^{\frac{2}{3}}}{\sqrt[3]{AGM(4-\sqrt{6}+\sqrt{2},4-\sqrt{2}+\sqrt{6})}},$$

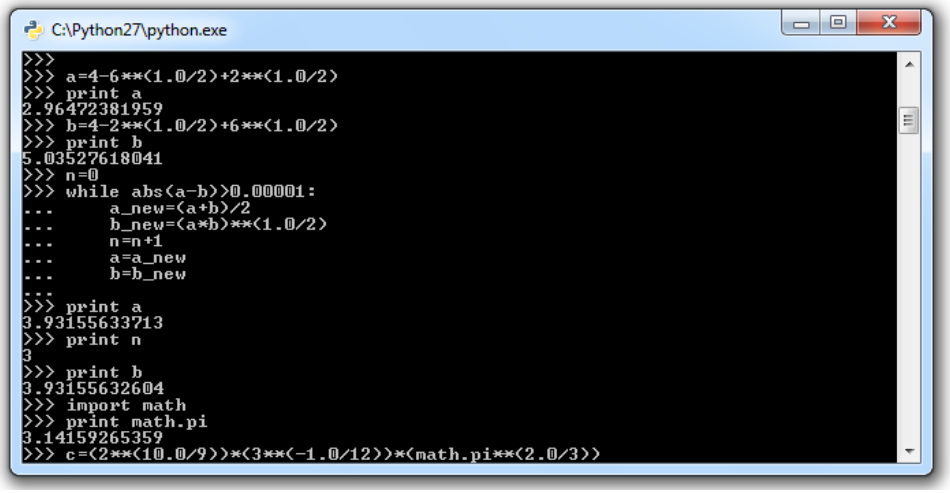
де AGM – функція арифметико-геометричного середнього (додаток 2).

Отже, для знаходження гамма-функції від 1/3, необхідно обчислити $AMG(4-\sqrt{6}+\sqrt{2},4-\sqrt{2}+\sqrt{6})$.

Для обчислення скористаємось програмою написаною мовою Python.

<u>Код програми:</u>

```
a=4-6**(1.0/2)+2**(1.0/2)
b=4-2**(1.0/2)+6**(1.0/2)
n=0
while abs(a-b)>0.00001:
    a_new=(a+b)/2
    b_new=(a*b)**(1.0/2)
    n=n+1
    a=a_new
    b=b_new
print (a)
print (b)
print (n)
```



Тобто на третьому кроці значення a і b співпадають і дорівнюють:

$$AMG(4-\sqrt{6}+\sqrt{2}, 4-\sqrt{2}+\sqrt{6}) = 3.93155633713.$$

Також за допомогою програми Python порахуємо гамма-функцію від 1/3.

$$\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \approx 2.6789$$