

## On a New Class of Goodness-of-Fit Tests as a Type of Chi-Square

A new class of asymptotic tests is suggested for testing the hypothesis of distribution belonging to the one-parameter exponential family. Each criterion is based on a given set of parametric functions that allow an unbiased estimate. We compared the proposed criterion with the criterion based on the generalized method of moments on the example of testing the hypothesis of the Poisson distribution against the hypothesis of the geometric distribution.

**Keywords:** exponential family, unbiased estimator, goodness-of-fit test, power.

Получено 03.09.2014

УДК 51-72:531

С. А. Груздь, Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова

## ВЛИЯНИЕ СПОСОБОВ РОСТА КЛАСТЕРОВ НА СКОРОСТЬ КОНДЕНСАЦИИ

Предложена математическая модель, рассматривающая процесс образования кластера за счет столкновения групп молекул различных размеров. Варианты размеров, получаемых при образовании зародышей, представлены в виде рядов. Устанавливается зависимость термодинамических параметров системы от способов образования кластеров в насыщенных парах.

**Ключевые слова:** моделирование, гомогенная конденсация, числовые ряды, образование зародыша.

### Теория быстрой коагуляции для групповых столкновений

Согласно теории Смолуховского [1], если любое столкновение частиц приводит к их слипанию, говорят о быстрой коагуляции, что наблюдается при стремительном охлаждении. Скорость коагуляции является функцией счетной концентрации частиц и интенсивности броуновского движения, характеризуемого коэффициентом диффузии. Таким образом, при конденсации важно знать, какой набор агрегатов частиц будет присутствовать в системе.

Выражая скорость коагуляции критического кластера через уменьшение числа частиц в единице объема за единицу времени, записываем:

$$I_{\text{кр}} = kn_{i-2}n_{i-1}, \quad (1)$$

где  $I_{\text{кр}}$  – скорость образования критического кластера;  $n$  – частичная концентрация кластеров, из которых произошло образование критического кластера;  $k$  – постоянная скорости коагуляции, характеризующая вероятность сближения.

Термодинамические параметры системы, учитывающие скорость коагуляции (1) для потоков, движущихся по соплу, получены из численного эксперимента и представлены в [2].

### Процесс образования кластера

Классическая теория гомогенной конденсации, представленная работами Френкеля, Зельдовича, Майера и др. [3], предполагает, что рост кластера происходит за счет присоединения к нему мономолекулы:

$$g_i = g_{i-1} + 1, \quad (2)$$

где  $g_i$  – размер  $i$ -го кластера.

Построенная на этой основе модель расчетов параметров системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия, дает существенную погрешность относительно экспериментальных данных [4, 5].

Предположим, что групповые столкновения в процессе конденсации являются наиболее устойчивыми и химически уравновешенными. В связи с этим рост кластеров будет происходить за счет присоединения одних кластеров к другим, а не путем присоединения одиночных молекул. Описать данный процесс можно следующими рядами.

1. Ряд Фибоначчи, где  $g_i = g_{i-1} + g_{i-2}$ :

$$1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, \dots \quad (3)$$

2. Геометрическая прогрессия с шагом 2, где  $g_i = 2 \cdot g_{i-1}$ :

$$1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, \dots \quad (4)$$

Таким образом, в процессе конденсации в системе присутствуют кластеры, значение числа молекул в которых представлено в выбранном ряду.

### Анализ полученных данных

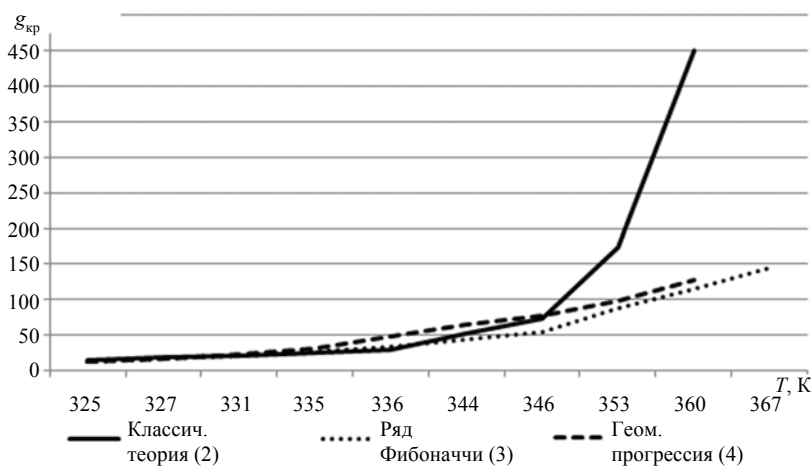
Значения параметров системы, движущейся в потоке и имеющей набор кластеров согласно ряду Фибоначчи, представлены в [5]. Результаты показывают, что температура и давление системы совпадают с экспериментальными данными [6]. Скорости образования кластеров паров воды по новому ряду, а также для классической теории представлены в таблице.

По классической теории момент «обрушения» системы в жидкую фазу происходит очень быстро, о чем нам говорят сравнительно большие значения по скоростям конденсации. Если исходить из экспериментальных данных [7] для паров воды на линии

насыщения, то момент конденсации при заданном давлении среды наступает при охлаждении системы до соответствующего значения температуры, однако, если предполагать, что рост кластеров происходит по ряду (2), то конденсация паров наступает при более высоких температурах, что приводит к завышенным значениям критических размеров зародышей (рисунок). Особенно подробно об этом говорил Жуховицкий [8], исследуя зависимость величины переохлаждения системы от способов кластерообразования.

#### Значения скоростей конденсации, $I_{кр}$ , для паров воды

Температура паров, К	Классическая теория (2)	Ряд Фибоначчи (3)	Геом. прогрессия (4)
325	3,978E+22	1,52E+14	6,06E+8
331	1,13E+21	6,21E+7	3,12E+7
336	1,724E+19	9,18E+5	1,931E+6
346	4,044E+12	22,5	0,42
353	62,4E+6	0	



Величина критического зародыша  $g_{кр}$  для паров воды

Способ роста кластера значительно влияет на параметры системы в целом. Получение зародыша по (3) или (4) наиболее вероятен и, как видно из графика и таблицы, не важно каким рядом описывать процесс его роста. Различия между рядом Фибоначчи и геометрической прогрессией не существенны, что нельзя сказать о классической теории. Однако, для описания роста кластеров по этому методу лучше брать ряды в которых рост значений не происходит очень стремительно, а так же желательно присутствие размеров малых кластеров таких как  $g_2$ ,  $g_3$ ,  $g_4$  и т. д.

#### Библиографические ссылки

1. Волков В. А. Коллоидная химия (Поверхностные явления и дисперсные системы). – [Электронный учебник]. – 2002.
2. Груздь С. А. Моделирование гомогенной конденсации в сопле с определением размера критического зародыша // Интеллектуальные системы в производстве. – 2014. – № 1(23). – С. 5–9.

дыша // Интеллектуальные системы в производстве. – 2014. – № 1(23). – С. 5–9.

3. Анисимов М. П. Нуклеация: теория и эксперимент // Успехи химии. – 2003. – № 72(7). – С. 664–705.

4. Груздь С. А., Корепанов М. А. Исследование процессов в энергоустановках с учетом неидеальности рабочего тела // Химическая физика и мезоскопия. – 2009. – Т. 11. – № 2. – С. 166–171.

5. Корепанов М. А., Груздь С. А. Моделирование гомогенной конденсации с учетом квазиравновесной концентрации малых агломератов // Химическая физика и мезоскопия. – 2014. – Т. 16. – № 1. – С. 63–67.

6. Модели образования наночастиц в потоках газа: учеб.-метод. комплекс / В. Ю. Гидаспов, У. Г. Пирумов, И. Э. Иванов, Н. С. Северина. – Калуга; М.: Эйдос, 2011. – 214 с.

7. Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. – М.: Наука, 1972. – 720 с.

8. Жуховицкий Д. И. Термодинамика малых кластеров // Журнал физической химии. – 1993. – Т. 67. – № 10. – С. 1962–1965.

S. A. Gruzdz, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

#### Cluster Growth in Different Ways and Its Influence on Condensation Speed

*This mathematical model describes the process of forming the cluster due to collision of groups of various size molecules. Different sizes obtained when forming the clusters are presented as the number sequence. The dependence is determined for thermodynamic parameters of the system on ways of forming the clusters in saturated steam.*

**Keywords:** modeling, homogeneous condensation, number sequence, formation of a cluster.

Получено 08.09.2014