

TÍNH TOÁN HỆ SỐ VIRIAL BẬC HAI CỦA CÁC KHÍ Cl_2 , N_2 , CO VÀ Ar KẾT HỢP PHƯƠNG TRÌNH TRẠNG THÁI VIRIAL VÀ MÔ HÌNH ĐA BIẾN

Nguyễn Thành Đương^{1,4}, Trần Dương², Phạm Văn Tất^{3,*}

¹Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế

²Khoa Hóa học, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

³Bộ môn Kỹ thuật Môi trường, trường Đại học Hoa Sen, TP. Hồ Chí Minh

⁴Khoa Khoa học Tự nhiên, Đại học Thủ Dầu Một

*Email: vantat@gmail.com

Ngày nhận bài: 02/10/2018; ngày hoàn thành phản biện: 5/11/2018; ngày duyệt đăng: 10/12/2018

TÓM TẮT

Thành phần chất khí trong công nghiệp hóa học thường chứa các khí argon, nito, cacbon monoxit và clo. Sự phát thải trực tiếp các khí này vào khí quyển cần phải được hạn chế do tác động của chúng với môi trường. Để tách và lưu trữ chúng, chúng ta cần phải biết đầy đủ tính chất tương tác giữa các phân tử. Hệ số virial bậc hai đặc trưng cho tính chất tương tác phân tử. Bài báo sử dụng mô hình mạng thần kinh kết hợp phân tích thành phần chính ANN-PCA I(5)-HL(6)-O(3) với giá trị sai số MSE là 0,0069695 để dự đoán các hệ số a, b và c trong phương trình trạng thái virial dựa vào các tính chất tới hạn của các chất khí. Hệ số virial bậc hai được xác định một cách chính xác sử dụng các hệ số a, b và c được dự đoán. Hệ số virial tính toán cũng rất gần với các hệ số virial dự đoán từ của phương trình trạng thái Deiters và phù hợp với dữ liệu thực nghiệm.

Từ khóa: Mạng thần kinh ANN, hệ số virial, phương trình trạng thái virial, phân tích thành phần chính.

CALCULATION OF SECOND VIRIAL COEFFICIENTS OF GASES Cl₂, N₂, CO AND Ar COMBINING VIRIAL STATE EQUATION AND MULTIVARIATE MODEL

Nguyen Thanh Duoc^{1,4}, Tran Duong², Pham Van Tat^{3,*}

¹ Faculty of Chemistry, University of Sciences, Hue University

² Faculty of Chemistry, University of Education, Hue University

³ Hoa Sen University

⁴ Thu Dau Mot University

*Email: vantat@gmail.com

ABSTRACT

The gaseous components in the chemical industry usually contain of mainly gases such as argon, nitrogen, carbon monoxide and chlorine. The direct emission of these gases into the atmosphere should be limited by their impact on the environment. For its storage and separation, we should sufficiently know the intermolecular interaction and the second virial coefficients that characterize the interaction of molecules. The paper uses the neural network model combining the principal component analysis ANN-PCA I(5)-HL(6)-O(3) with the MSE error value of 0.0069695 to predict the coefficients a, b and c in the virial state equation based on the critical properties of gases. Second virial coefficients are correctly determined using the predicted coefficients a, b, and c. The computed virial coefficients are very close to the predicted virial coefficients of the Deiter equation and appropriate to the experimental data.

Keywords: ANN neural network, virial coefficients, virial state equation; principal component analysis.



Nguyễn Thành Được sinh ngày 10/10/1976 tại An Giang. Năm 2000, ông tốt nghiệp cử nhân Sư phạm ngành Hóa học tại Trường Đại học Cần Thơ. Năm 2008, ông tốt nghiệp thạc sĩ chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại Đại học Cần Thơ. Từ năm 2011 đến nay, ông giảng dạy tại Trường Đại học Thủ Dầu Một, Tỉnh Bình Dương. Từ năm 2012 đến nay, ông là nghiên cứu sinh chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế.



Trần Dương sinh ngày 01/01/1960 tại Quảng Ngãi. Năm 1981 ông tốt nghiệp ngành Hóa học tại trường Đại học Sư phạm Huế; tốt nghiệp thạc sỹ chuyên ngành Hóa vô cơ năm 1989 tại trường Đại học Sư phạm Hà Nội. Năm 2005 ông bảo vệ luận án tiến sĩ chuyên ngành Hóa vô cơ tại trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội. Năm 2016 ông được công nhận chức danh phó giáo sư chuyên ngành hóa vô cơ. Từ năm 1982 đến nay ông là giảng viên tại Khoa Hóa học, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế.

Lĩnh vực nghiên cứu: vật liệu vô cơ, hóa tính toán.



Phạm Văn Tất sinh ngày 30/11/1966 tại Nam Định. Năm 1989 ông tốt nghiệp ngành Hóa học tại trường đại học Tổng hợp Hà Nội; tốt nghiệp Thạc sỹ ngành Hóa học Phân tích năm 2001 tại trường đại học Đà Lạt. Năm 2006 ông bảo vệ thành công luận án Tiến sĩ tại Viện Hóa lý và Hóa lý thuyết, trường đại học Cologne, Cộng hòa Liên bang Đức. Năm 2010 ông được nhà nước công nhận chức danh phó Giáo sư chuyên ngành Hóa lý và Hóa lý thuyết. Hiện nay là trưởng Bộ môn ngành Công nghệ Kỹ thuật Môi trường, trường đại học Hoa Sen.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa học tính toán lượng tử và Mô phỏng Monte Carlo các trạng thái cân bằng, Hóa học Phân tích, Hóa học Môi trường và Quản lý và Đánh giá chất lượng Môi trường bằng GIS, Viễn thám và Hệ thống Trí tuệ Nhân tạo.