

Lỗi thông dụng trong tính toán kỹ thuật Hóa học

Khi sử dụng các công cụ phần mềm toán học cho các tính toán trong kỹ thuật Hóa, làm thế nào để dò và ngăn ngừa được các lỗi thông thường ?



Việc đưa các gói phần mềm toán học như Excel, Matlab và Polymath vào lĩnh vực giải quyết các bài toán kỹ thuật đã đem lại nhiều lợi ích, chủ yếu là cho kết quả chính xác và nhanh chóng. Tuy nhiên, các kỹ thuật giải pháp số cũng đem đến các lỗi mà nó thường không dò được nếu người dùng không có kinh nghiệm trong việc sử dụng các công cụ tính toán mới này.

Các lỗi thường gặp nhất trong sự hội tụ của dữ liệu xuất phát từ việc dùng các mô hình hồi quy với rất nhiều hay rất ít thông số, ghép các hàm đa thức không có các tỷ lệ dữ liệu hợp lý, tương quan hóa dữ liệu khi mô hình toán học chưa đạt mức tuyến tính hợp lý, hoặc việc thiết kế một thí nghiệm chưa thỏa mãn để có dữ liệu.

Có nhiều ví dụ sẽ được trình bày tiếp theo để mô tả các nguy cơ tiềm ẩn liên quan đến hệ thống giải các phương trình phi tuyến đại số. Chúng bao gồm các việc xác định dự đoán

khởi đầu tốt và lên công thức bài toán đúng để cho phép sự hội tụ. Ngay cả nếu tìm ra giải pháp, nó cũng có thể không khả thi khi xét trong quan điểm vật lý (ví dụ, nồng độ chất là con số âm) hoặc có thể là một đáp án sai do biến số không đúng hay dùng sai hàm số.

Nguồn lỗi thông thường nhất trong việc giải các phương vi phân là dùng bừa bãi các dung sai mặc định của công cụ Solver trong giải phương trình vi phân. Không dùng được thuật algorithm tích phân hợp lý, làm tròn số cầu thả khi giải phương trình, sử dụng các giá trị tính ngoài vùng nội suy trong biểu diễn kết quả đã được nhắc tới như các nguồn lỗi thông dụng trong giải các bài toán kỹ thuật liên quan đến phép vi phân.

Biết các nguyên nhân gây lỗi tiềm ẩn trong giải các bài toán số là bước đầu tiên trong việc dò và ngăn ngừa lỗi. Bài viết này xin mạn phép giới thiệu ba lỗi dễ xảy ra và đề xuất các phương cách để ngăn ngừa chúng.

Không kiểm tra ngược dẫn đến vấn đề bất ổn định thông số

Sự quan trọng trong thực hiện bước phân tích độ nhạy để xác định các tác động của những thay đổi nhỏ trong các thông số khác nhau ở các giải pháp toán học đã được công nhận trong lĩnh vực tối ưu hóa. Các giá trị thông số thường chứa các lỗi và/ hoặc không chắc chắn cho nên thông tin về độ nhạy của điểm tối ưu cho các thay đổi hoặc các biến số trong một thông số là rất quan trọng đối với việc thiết kế một quá trình tối ưu trong hóa học. Tuy nhiên, phân tích độ nhạy hiếm khi được thực hiện trên một số vấn đề.

Thí dụ dưới đây mô tả sự quan trọng của phân tích độ nhạy trong giải phương trình đại số phi tuyến. Đáp số của nó thu được từ chương trình Mathcad.

Xét quá trình hydro hóa có xúc tác của một olefin (thành phần A) trong một lò phản ứng đẳng nhiệt có cánh khuấy liên tục. Cân bằng chất của thành phần A như sau:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_0 - C}{T} - r \quad (1)$$

Với C_0 là nồng độ đầu vào của chất A (mol/l), $T=V/v$ là khoảng thời gian (s), V là thể tích lò phản ứng (L), v là lưu lượng dòng vào (L/s), và r là tốc độ phản ứng cho một đơn vị thể tích lò phản ứng (mol/L.s):

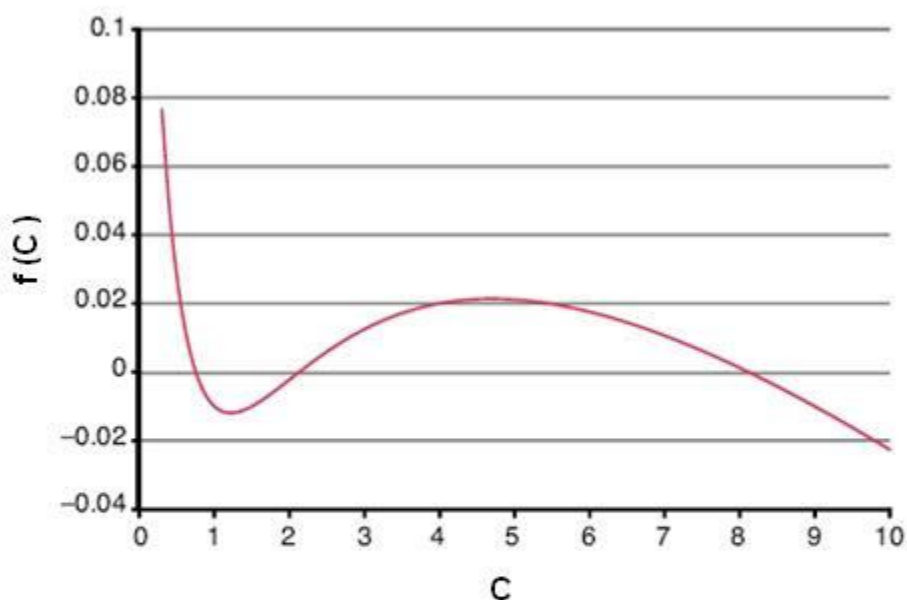
$$r = \frac{C}{(1 + C)^2} \quad (2)$$

Nồng độ chất A ở trạng thái tĩnh được yêu cầu cho điều kiện vận hành là $C_0=13$ mol/L, $V=10$ L và $v= 0.2$ L/s. Đáp án trạng thái tĩnh cần phải giải phương trình phi tuyến đại số $f(C) = 0$ với:

$$f(C) = \frac{C_0 - C}{T} - r \quad (3)$$

Trong đồ thị hình 1, $f(C)$ được vẽ theo C cho vùng $0 \leq C \leq 10$ có chứa 3 đáp số thực. Các đáp số này nhận được từ chương trình Polymath 6.1 như sau: $C_1=0.7515358$, $C_2=2.130933$ và $C_3=8.117532$.

Chương trình Polymath hiển thị kết quả với 7 chữ số. Mathcad hiển thị kết quả với 20 chữ số. Sự khác biệt giữa số chữ số của thông số lò phản ứng khuấy liên tục CSTR (một hoặc hai) và số các chữ số trong đáp án tính toán (lên đến 20) không thể được cường điệu.



Hình 1: Đồ thị của $f(C)$ theo nồng độ C cho vận tốc dòng $v=0.2$ L/s. cho thấy phản ứng có 3 trạng thái bền (ứng với đường đồ thị cắt trục hoành x) tại : $C_1= 0.75$, $C_2 = 2.13$ và $C_3 = 8.12$

Trong trường hợp này, số các chữ số cần được dựa vào sự không chắc chắn liên quan đến các giá trị thông số.

Bảng 1 biểu diễn các giá trị của nồng độ C ở các mức không ổn định của lưu lượng v . Giả sử mức không ổn định là 10^{-4} L/s và lưu lượng tương ứng là 0.2001 L/s thay vì 0.2 L/s, chỉ có hai chữ số đầu tiên của giá trị tính C khớp với những giá trị nền. Với trường hợp bất ổn định 10^{-3} L/s ($v= 0.201$ L/s), hai chữ số thập phân đầu tiên cho giá trị đúng. Với trường hợp bất ổn định 10^{-2} L/s, chỉ có một chữ số thập phân sau dấu phẩy là cho giá trị đúng. Vì vậy, việc xem xét bất kỳ sự ước tính thực tế cho sự bất ổn của tốc độ dòng chảy sẽ dẫn đến kết luận rằng các đáp số nồng độ C sẽ được làm tròn đến hai chữ số, vì tất cả các chữ số thêm vào đều không cho giá trị tin cậy.

1. Số chữ số hợp lý (trong phần đậm) phụ thuộc vào độ không chắc chắn thông số đầu vào						
	Tốc độ nạp liệu, v (L/s)					
	0.2	0.2001	0.201	0.21	0.24	
đồng nhân		10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}	
thứ 1	0.751536	0.7533915	0.7707207	1.162332	—	0.3
thứ 2	2.130933	2.124481	2.066326	1.311824	—	
thứ 3	8.117532	8.122128	8.162953	8.525843	9.369219	

Điều quan trọng cần hiểu là phân tích này áp dụng không chỉ cho số lượng mang tính thực tế như các kết quả của tính toán. Trong các trường hợp khác, việc làm tròn số có thể dẫn đến sai số rõ rệt. Điều này sẽ được chứng minh trong một ví dụ tiếp theo.

Giá trị tốc độ dòng chảy có thể được đặc trưng bởi một chữ số vì tốc độ dòng chảy được đo lường ở mức chính xác đó. Như vậy, giá trị của nó có thể thay đổi từ 0.15 L/s đến 0.24 L/s. Hai cột cuối của bảng 1 cho giá trị tính C với hai giá trị đỉnh của v. Khi $v = 0.24$ L/s, chỉ có một chữ số thập phân là có ý nghĩa ở $C = 9.36922$ mol/L trong khi ở $v = 0.15$ L/s thì có một chữ số thập phân có ý nghĩa ở $C = 0.3419$ mol/L. Như vậy, ở mức độ không chắc chắn cao hơn, chỉ có một chữ số thập phân có ý nghĩa thay vì ba chữ số thập phân như trong trường hợp nền $v = 0.2$ L/s, và số chữ số thập phân có nghĩa thay đổi tùy theo giá trị v được dùng là gì.

Châu Thành Nhân

Nguồn Cyberchemvn.com

Tài liệu tham khảo

1- Polymath 6.1- Manual User Guide

2- Matlab 7.0 - Help

3- Excel 2003 - Help

4-Parulekar S. J. " Numerical Problem Solving Using Mathcad in undergraduate Reaction Engineering" Chem. Engr. Education, Vol 40 , Issue 1, p.14 -2006

5-Shachem M et al., " Potential pitfalls in Using general purpose software for Interactive solution of Ordinary Different Equations", Acta Chimica Slovenica, Vol 42, Issue 1, p 119-124, 1995