


ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP. HỒ CHÍ MINH
TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA

MÔ HÌNH HÓA–MÔ PHỎNG–TỐI ƯU HÓA
TRONG CÔNG NGHỆ HÓA HỌC

CÁC BƯỚC
TIẾN HÀNH MÔ HÌNH HÓA TOÁN HỌC

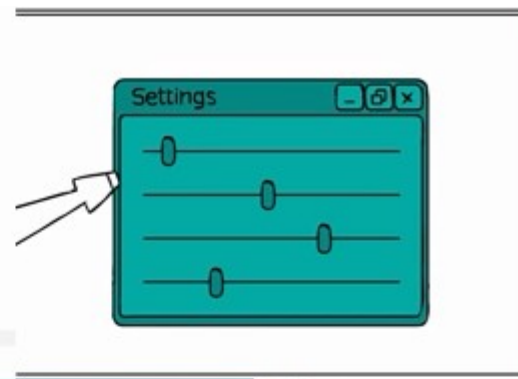
TS. Nguyễn Đình Thọ
Bộ môn: Quá trình và thiết bị CN Hóa – Sinh học – Thực phẩm



- 
- 1. Đặt bài toán**
 - 2. Phân tích cơ sở lý thuyết của quá trình**
 - 3. Thiết lập các mô hình toán học**
 - 4. Angorit hóa mô hình toán học**
 - 5. Đồng nhất hóa mô hình toán**
 - 6. Kiểm tra tính tương hợp của mô hình**
 - 7. Khảo sát mô hình trên máy tính**
 - 8. Phân tích thông tin thu được**
 - 9. Kết luận**

1) Đặt bài toán

- Cần xác định mục tiêu phải đạt được
- Tìm cách giải bài toán đã cho



- Đây là một trong những giai đoạn quan trọng nhất của việc mô hình hóa
- Không có một quy tắc chung để có thể dùng chung cho mọi trường hợp
- Trước khi biến đổi cách giải bài toán cần:

- + Làm sáng tỏ hoàn toàn, đầy đủ bản chất: vật lý
hóa học
sinh học

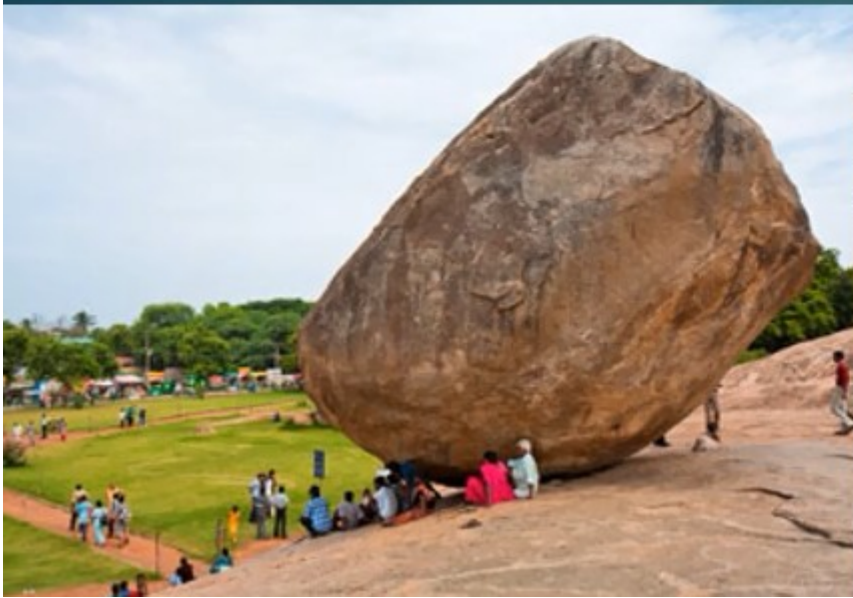


- + Bản chất vật lý, ... của quá trình càng được làm rõ bao nhiêu tốt bấy nhiêu
- + Thiết lập mô hình toán càng chính xác bấy nhiêu.



2) Phân tích cơ sở lý thuyết của quá trình

- Cần làm sáng tỏ quá trình xảy ra trên cơ sở định lý, định luật nào: định luật bảo toàn, định luật nhiệt động học (Henry, Raoul, ...) ...
- Cơ sở lý thuyết tìm ở đâu? tài liệu khác nhau đã được công bố
quan sát, khảo sát thực nghiệm
- Nếu chưa thể lựa chọn cơ sở lý thuyết thỏa đáng: cần đưa ra giả thiết phù hợp
- Tính đúng đắn của các giả thiết đánh giá thế nào? so sánh với số liệu thực nghiệm
- Để so sánh mô hình vật lý: sử dụng khéo léo phương pháp tương tự, hay thứ nguyên
sau đó kiểm tra bằng thực nghiệm.



3) Thiết lập mô hình toán học

- Thiết lập phương trình, hệ phương trình toán học (đại số, vi phân ...):
 - + Trên có sở mô hình vật lý phù hợp
 - + Mô tả hình thức hiện tượng nghiên cứu theo ngôn ngữ toán học
 - + Quan hệ hàm số của các thông số riêng biệt của mô hình
- Mô tả toán học có thể được viết dưới dạng một vài:
 - + Phương trình đại số không chứa các phép tính vi phân
 - + Phương trình vi phân (thậm chí đạo hàm riêng)
- Người ta chia mô hình thành ba dạng cơ bản:
 - + Mô hình giải tích: bản chất lý hóa, cơ chế của quá trình
 - + Mô hình thống kê (mô hình thực nghiệm): số liệu thực nghiệm
 - + Mô hình vật lý: phương trình chuẩn số từ thực nghiệm
- Mô hình giải tích lý hóa: Vạn năng hơn
 - Có khoảng tương hợp rộng hơn
- Mô hình giải tích: Phương trình cân bằng vật chất và năng lượng

3) Thiết lập mô hình toán học

- Mô hình giải tích:

a) Phương trình cân bằng vật chất và năng lượng, cho phép xác định dòng khối lượng, nhiệt lượng; những thay đổi tính chất lý của hệ (độ nhớt, nhiệt dung riêng ...) liên quan với sự thay đổi nhiệt độ nồng độ;

b) Phương trình trạng thái (cân bằng);

c) Phương trình động học, gồm các phương trình mô tả động học quá trình truyền nhiệt, truyền khối, động học phản ứng;

- Cần xem xét khả năng rút gọn: bỏ bớt một vài số hạng của chúng, ít ảnh hưởng đến cách giải và kết quả bài toán.

- Về nguyên tắc đôi khi có thể loại bỏ cả một phương trình khỏi hệ thống phương trình đang khảo sát.

- Trước hết cần đưa vào phương trình của mô hình toán tất cả các thông số, sau đó đánh giá ảnh hưởng của các biến đưa vào lên kết quả cuối cùng của bài toán và tùy theo mức độ ảnh hưởng lớn hay nhỏ để thay thế bằng giá trị trung bình của các đại lượng này.

4) Angorit hóa mô hình toán học

Giai đoạn tiếp theo của mô hình hóa là angorit hóa mô hình toán đang nghiên cứu và tìm cách giải nó.

Nếu quá trình được mô tả khá đơn giản thì hệ phương trình của chúng có thể được giải bằng phương pháp giải tích.

Khi mô hình là hệ phương trình vi phân phức tạp, việc lựa chọn thuật toán để giải một cách hiệu quả mang lại ý nghĩa to lớn.

Khi lựa chọn phương pháp giải cần tính đến nhiều yếu tố:

- Dạng của phương trình vi phân đưa vào mô tả toán học của mô hình (phương trình vi phân thường, phương trình vi phân đạo hàm riêng);
- Thứ nguyên của bài toán;

4) Angorit hóa mô hình toán học

Angorit hóa mô hình toán đang nghiên cứu và tìm cách giải:

Quá trình được mô tả khá đơn giản: có thể được giải bằng giải tích.

Mô hình là hệ phương trình vi phân phức tạp: chọn thuật toán để giải

Khi lựa chọn phương pháp giải cần tính đến nhiều yếu tố:

- Dạng của phương trình vi phân đưa vào mô tả toán học của mô hình (phương trình vi phân thường, phương trình vi phân đạo hàm riêng);
- Thứ nguyên của bài toán;

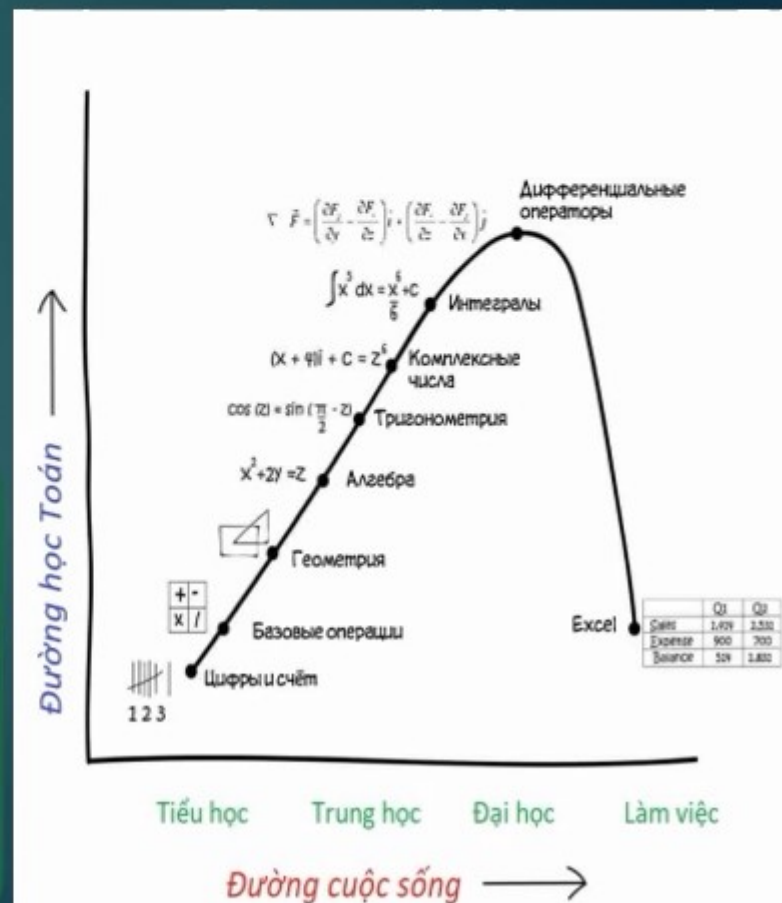
100

Xác định tiêu chuẩn mà mô hình cần thoả mãn (đánh giá tính tương hợp)

Phương pháp giải: khả dĩ nhất

viết dưới dạng thuật toán

trình bày dưới dạng một ngôn ngữ lập trình giải nó trên máy tính.



5) Đồng nhất hóa mô hình toán

- Các thông số của mô hình toán:
- Hệ số tính đến ảnh hưởng của các đại lượng lên quá trình
- Đặc trưng cho các tính chất của hệ thống: khác với quá trình cùng loại
- Số thông số đưa vào mô hình càng nhiều:
 - + quá trình được mô tả càng tỷ mỉ và đầy đủ
 - + đặc trưng cho quá trình càng chính xác
 - + càng khó giải những mô hình lập được
 - + tăng tính nhạy cảm cao trong thực nghiệm.

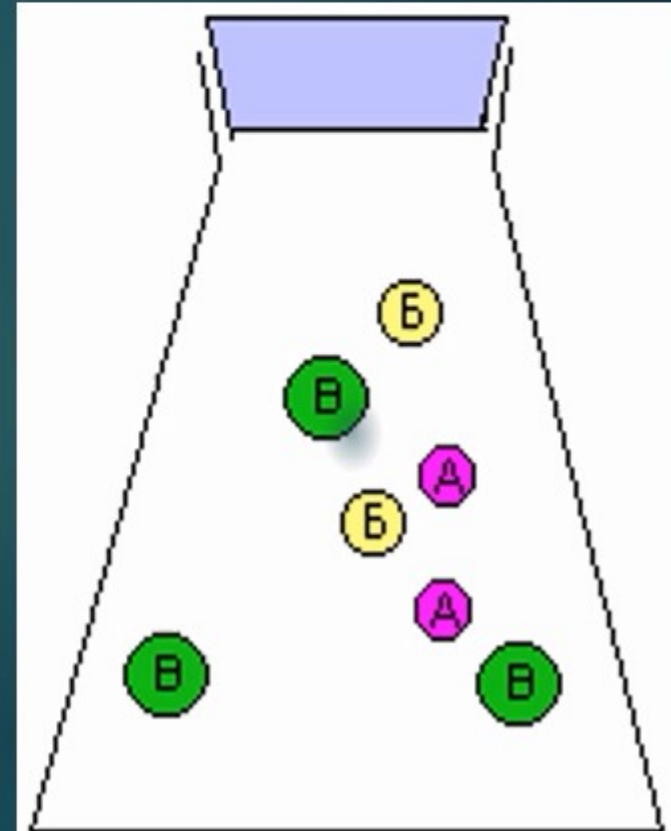
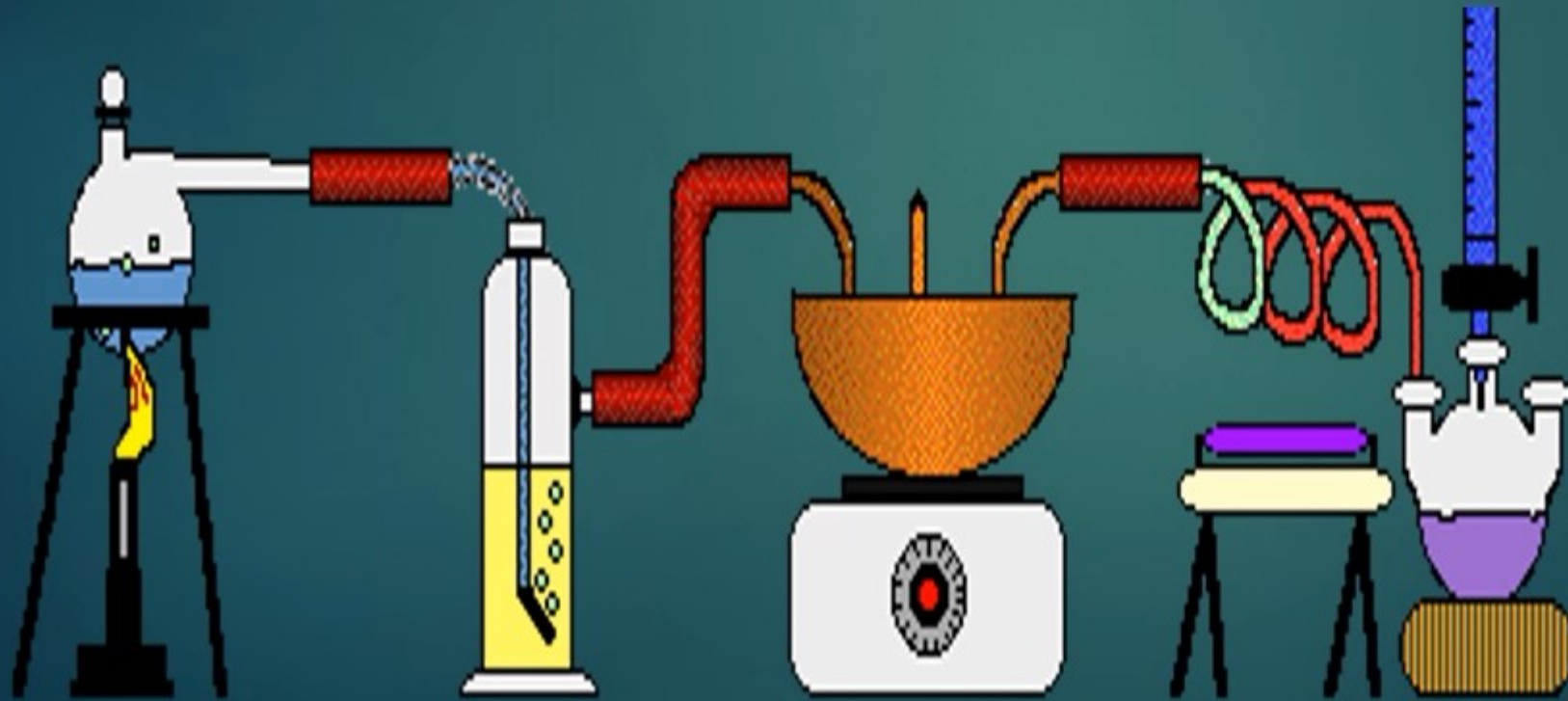
6) Kiểm tra tính tương hợp của mô hình

Chỉ tiêu khách quan nhất đánh giá mô hình: số liệu thực nghiệm

Mô hình cần có sự tương hợp với số liệu thực nghiệm

Kiểm tra tính tương hợp: so sánh với giá trị thực nghiệm
giá trị dự báo theo mô hình

Ngoài ra: Thực hiện bằng cách kiểm tra một vài giả thiết thống kê



6) Kiểm tra tính tương hợp của mô hình

Có thể xuất hiện khả năng:

- Độ chính xác không đủ của thực nghiệm, làm mất ý nghĩa vật lý
- Mặc dù nó khá phù hợp với số liệu thực nghiệm.
- Do sai số của các thông số khác nhau có tương tác triệt tiêu lẫn nhau
- Khi đó để mô tả định lượng quá trình:
 - + Trong khoảng xác định của các thông số vẫn còn ý nghĩa
 - + Còn ý nghĩa vật lý của quá trình bị sai lệch
 - + Các thông số chỉ mang tính chất dự đoán
 - + Đưa ra mô hình rút gọn phù hợp với thực nghiệm
- Thường một vài thông số của mô hình: chưa biết
 - giá trị theo thí nghiệm bổ sung
- Cần tiến hành đồng nhất hóa các thông số của mô hình thông qua thực nghiệm



7) Khảo sát mô hình trên máy tính

Giải mô hình trên máy tính:

Thay đổi các thông số của mô hình trong khoảng nghiên cứu

Xác định các thông số trong mô hình theo số liệu thực nghiệm

Mở rộng khoảng biến thiên các đại lượng để khảo sát



Download from
Dreamstime.com

This watermarked comp image is for previewing purposes only.



ID 119532179

Blackboard373 | Dreamstime.com

8) Phân tích thông tin thu được

Khi nghiệm thu được không thỏa mãn các giả thiết đã đưa ra:

- Tìm nguyên nhân và giải thích thỏa đáng
- Đảm bảo không (ít) xuất hiện sai số khi tính toán

Lưu ý trong mỗi quá trình thực:

- Thông số không phải là hằng số
- Chỉ sử dụng trong khoảng có giới hạn đủ lớn nào đó

8) Phân tích thông tin thu được

Cần phải tiến hành phân tích các thông tin:

- Trong khoảng thông số khác nhau**
- Phân tích như vậy nhằm ba mục tiêu:**
 - a) Khảo sát dáng điệu của mô hình toán khi thay đổi các thông số;**
 - b) Xác định sự biến đổi của mô hình toán đã cho ứng với khoảng giới hạn có thể có của mô hình;**
 - c) Rút gọn mô hình nhằm mở rộng miền ứng dụng của nó và làm tăng đặc tính thực nghiệm của nó.**

9) Kết luận

Trên cơ sở các phân tích đã được tiến hành, ta đưa ra những khuyến cáo để hiện thực hóa nó trong thực tế và trong những nghiên cứu tiếp theo.

Những khuyến cáo dạng:

- Áp dụng hay không mô hình vào thực tế: nghiên cứu, sản xuất, thực nghiệm
- Cần nghiên cứu tiếp: Hay không?

Tiếp theo như thế nào?



Ví dụ ứng dụng

$$A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons P$$

- 1) Khảo sát động học phản ứng
- 2) Tính cân bằng vật chất – năng lượng



Xét phản ứng: $A \rightarrow B \rightarrow P$ (a) có 2 phản ứng với 2 hằng số tốc độ phản ứng k_1, k_2

Hay phản ứng: $A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons P$ (b) có 4 phản ứng với 4 hằng số tốc độ phản ứng k_1, k_{-1}, k_2, k_{-2}

Bước 1: Mô hình hóa động học phản ứng, gồm 2 dạng

- Bài toán thuận: Tìm các hằng số động học phản ứng

- Bài toán ngược: khảo sát nồng độ các chất thay đổi theo thời gian khi biết bằng số tốc độ

Bước 2: Động học phản ứng tuân theo cơ chế phản ứng đơn giản

Bước 3: Mô hình toán mô tả động học phản ứng theo động học phản ứng đơn giản có dạng

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{d\tau} = -k_1 C_A + k_{-1} C_B \\ \frac{dC_B}{d\tau} = k_1 C_A - k_{-1} C_B - k_2 C_B + k_{-2} C_P \\ \frac{dC_P}{d\tau} = k_2 C_B - k_{-2} C_P \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{d\tau} = -k_1 C_A \\ \frac{dC_B}{d\tau} = k_1 C_A - k_2 C_B \\ \frac{dC_P}{d\tau} = k_2 C_B \end{cases} \quad (2)$$

Rõ ràng khi cho $k_{-1} = k_{-2} = 0$ thì động học phản ứng (b) trở thành phản ứng (a)

Cho nên chỉ cần giải mô hình (2)

Xét phản ứng: $A \rightarrow B \rightarrow P$ có 2 phản ứng với 2 hằng số tốc độ phản ứng k_1, k_2

Hay phản ứng: $A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons P$, có 4 phản ứng với 4 hằng số tốc độ phản ứng k_1, k_{-1}, k_2, k_{-2}

Bước 1:

Bước 2:

Bước 3: Mô hình toán mô tả động học phản ứng theo động học phản ứng đơn giản có dạng

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{d\tau} = -k_1 C_A + k_{-1} C_B \\ \frac{dC_B}{d\tau} = k_1 C_A - k_{-1} C_B - k_2 C_B + k_{-2} C_P \\ \frac{dC_P}{d\tau} = k_2 C_B - k_{-2} C_P \end{cases} \quad \text{với điều kiện đầu } \tau = 0: C_{A0} = 100, C_{B0} = C_{P0} = 0$$

Bước 4: Đây là hệ phương trình vi phân thường với điều kiện giới hạn dạng bài toán Cosi, có thể giải:

Phương pháp giải tích: dùng phép biến đổi Laplace (xem bài các phương pháp giải)

Phương pháp số: Dùng phương pháp Runge – Kutta (xem bài các phương pháp giải)

Bước 5: Xác định tham số của mô hình, là các hằng số tốc độ, cần: có số liệu thực nghiệm dùng phương pháp bình phương cực tiểu

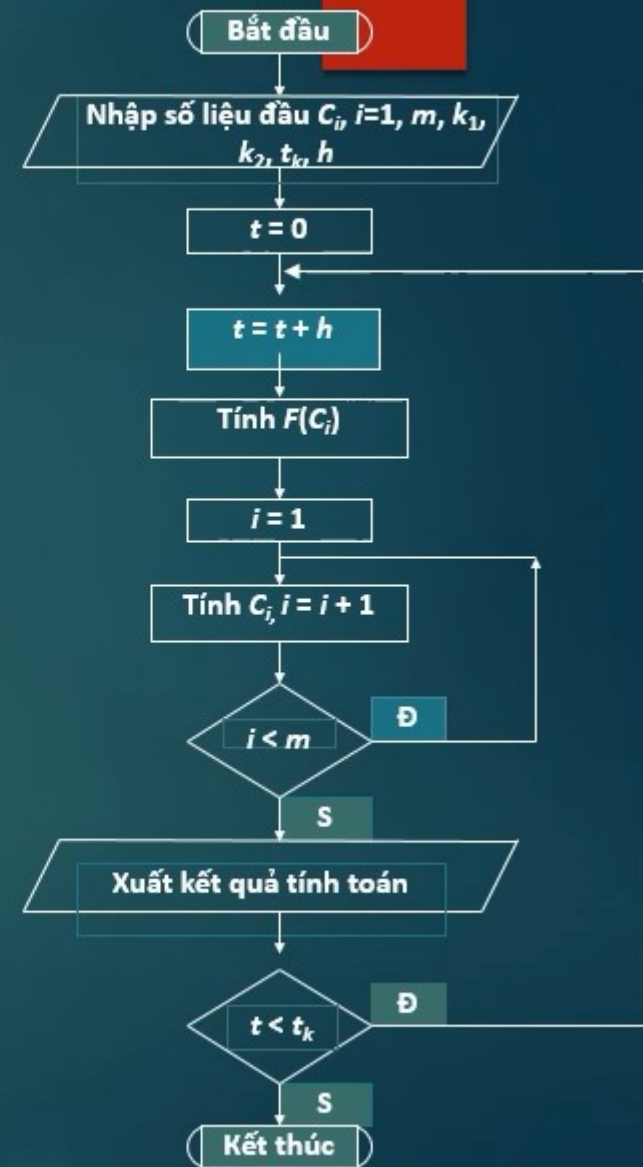
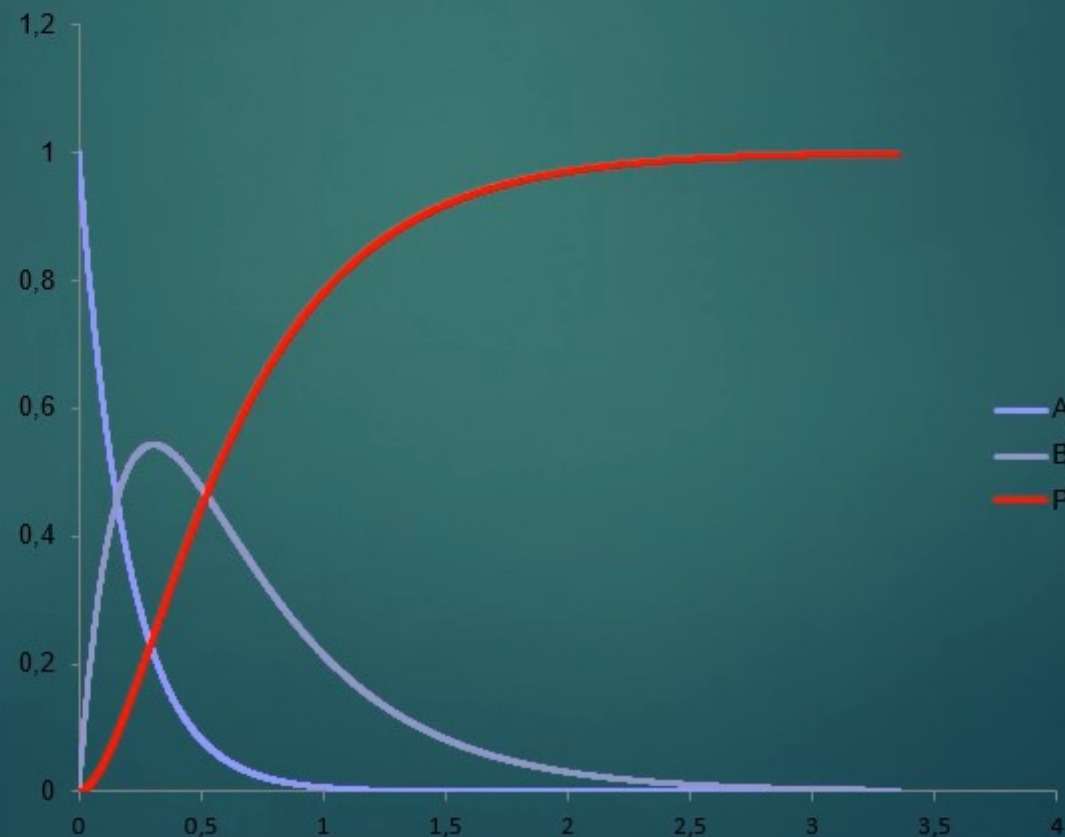
Bước 4: Thuật toán Runge – Kutta bậc 4 giải hệ phương trình vi phân thường dạng bài toán Cusi có dạng (xem thêm bài phương pháp giải)

Bước 5: Xác định tham số của mô hình (phương pháp giải)

Khi cho $k_1 = k_2 = 0$ hệ (2) trở thành hệ (1)

Nghiệm có dạng:

| τ | A | B | P |
|--------|-------|--------|--------|
| 0 | 1 | 0 | 0 |
| 0.002 | 0.993 | 0.0007 | 1E-05 |
| 0.003 | 0.985 | 0.0015 | 4E-05 |
| 0.005 | 0.978 | 0.0022 | 1E-04 |
| 0.006 | 0.97 | 0.0029 | 2E-04 |
| 0.008 | 0.963 | 0.0037 | 3E-04 |
| 0.009 | 0.956 | 0.0044 | 4E-04 |
| 0.011 | 0.949 | 0.0051 | 5E-04 |
| 0.012 | 0.942 | 0.0058 | 7E-04 |
| 0.014 | 0.935 | 0.0064 | 9E-04 |
| 0.015 | 0.928 | 0.0071 | 0.0001 |
| 0.017 | 0.921 | 0.0078 | 0.0001 |
| 0.018 | 0.914 | 0.0085 | 0.0002 |
| 0.02 | 0.907 | 0.0091 | 0.0002 |
| 0.021 | 0.9 | 0.0098 | 0.0002 |
| 0.023 | 0.894 | 0.0104 | 0.0002 |
| 0.024 | 0.887 | 0.11 | 0.0003 |
| 0.026 | 0.88 | 0.117 | 0.0003 |
| 0.027 | 0.874 | 0.123 | 0.0003 |
| 0.029 | 0.867 | 0.129 | 0.0004 |
| 0.03 | 0.861 | 0.135 | 0.0004 |
| 0.032 | 0.854 | 0.141 | 0.0005 |
| 0.033 | 0.848 | 0.147 | 0.0005 |
| 0.035 | 0.842 | 0.153 | 0.0005 |
| 0.036 | 0.835 | 0.159 | 0.0006 |



1) Bước 6: Kiểm tra tính tương hợp của mô hình

- 2)- Biết số liệu thực nghiệm kiểm tra nghiệm của mô hình
- 3)- So sánh nghiệm của phương pháp số với nghiệm giải tích
- 4)- Dùng số liệu thực nghiệm tìm hằng số tốc độ phản ứng

1) So sánh nghiệm giải tích và phương pháp số:

$$C_A = C_{A0} \exp(-k_1 \tau)$$

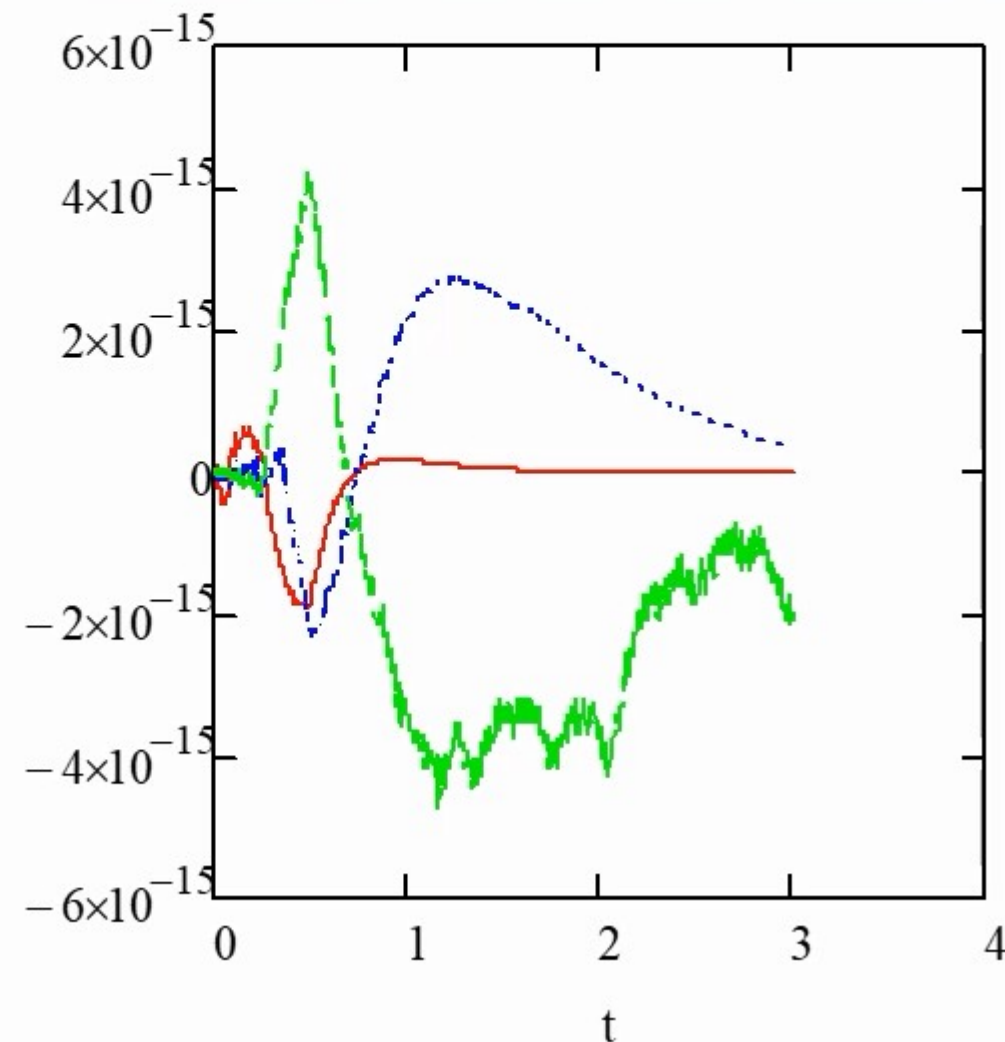
$$C_B = \frac{C_{A0} k_1}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 \tau) + \exp(-k_2 \tau)]$$

$$C_C = \frac{C_{A0}}{k_2 - k_1} \{k_2 [1 - \exp(-k_1 \tau)] - k_1 [1 - \exp(-k_2 \tau)]\}$$

A-Aex(t)

B-Bex(t)

P-Pex(t)



1) Bước 6: Kiểm tra tính tương hợp của mô hình

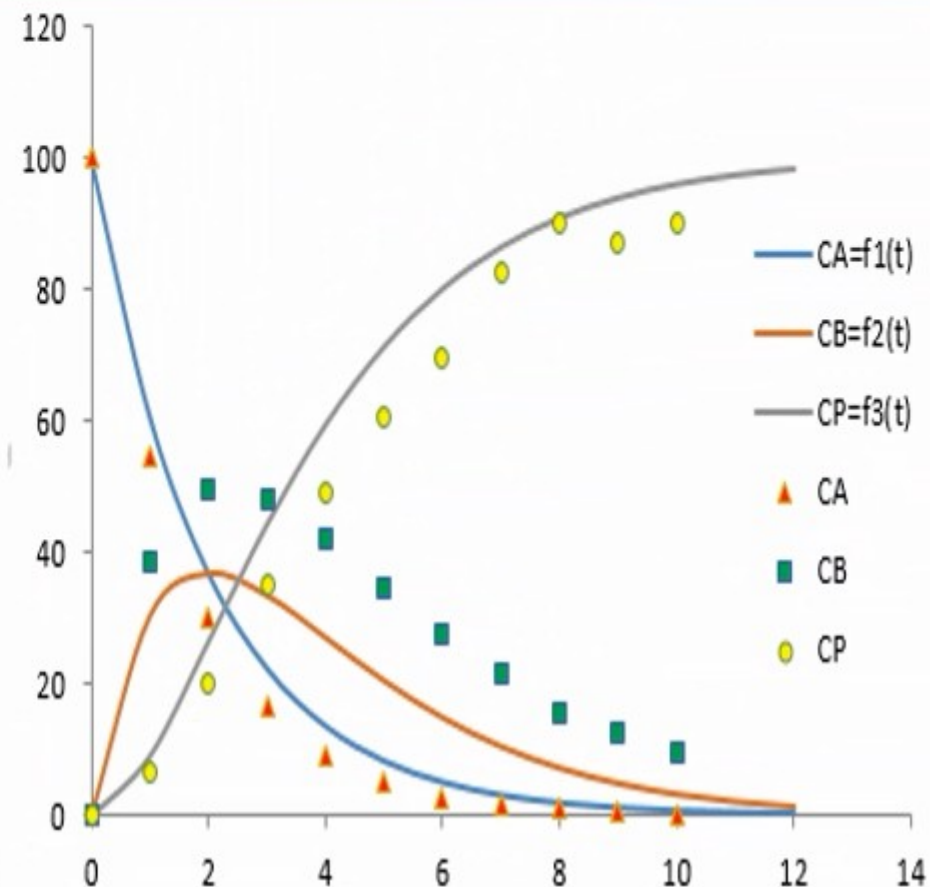
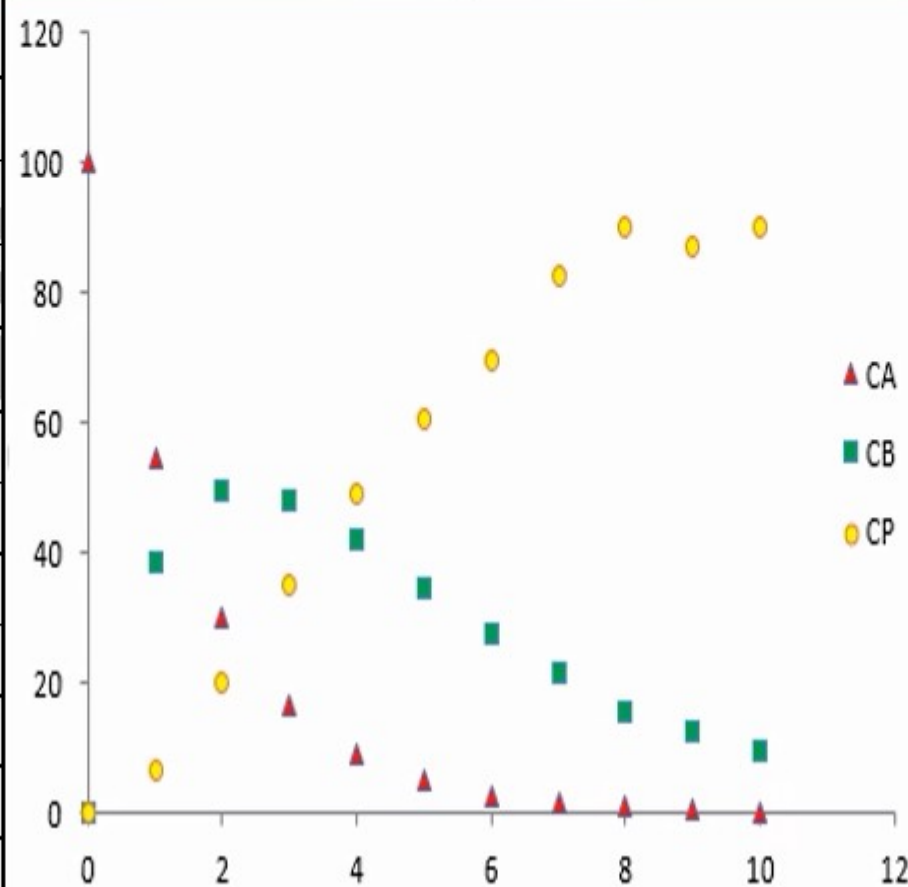
- 2)- Biết số liệu thực nghiệm kiểm tra nghiệm của mô hình
- 3)- So sánh nghiệm của phương pháp số với nghiệm giải tích
- 4)- Dùng số liệu thực nghiệm tìm hằng số tốc độ phản ứng

1) So sánh nghiệm giải tích và phương pháp số

2) Dùng số liệu thực nghiệm tìm k

$$k_1 = 0,5 \quad k_2 = 0,5$$

| τ | C_A | C_B | C_P |
|--------|-------|-------|-------|
| 0 | 100 | 0 | 0 |
| 1 | 54,8 | 38,5 | 6,7 |
| 2 | 30,00 | 49,6 | 20,3 |
| 3 | 16,4 | 48,3 | 35,2 |
| 4 | 9,00 | 42,1 | 48,9 |
| 5 | 4,9 | 34,7 | 60,4 |
| 6 | 2,7 | 27,6 | 69,7 |
| 7 | 1,5 | 21,4 | 82,7 |
| 8 | 0,8 | 15,5 | 90,0 |
| 9 | 0,44 | 12,5 | 87,0 |
| 10 | 0,24 | 9,4 | 90,3 |



1) Bước 6: Kiểm tra tính tương hợp của mô hình

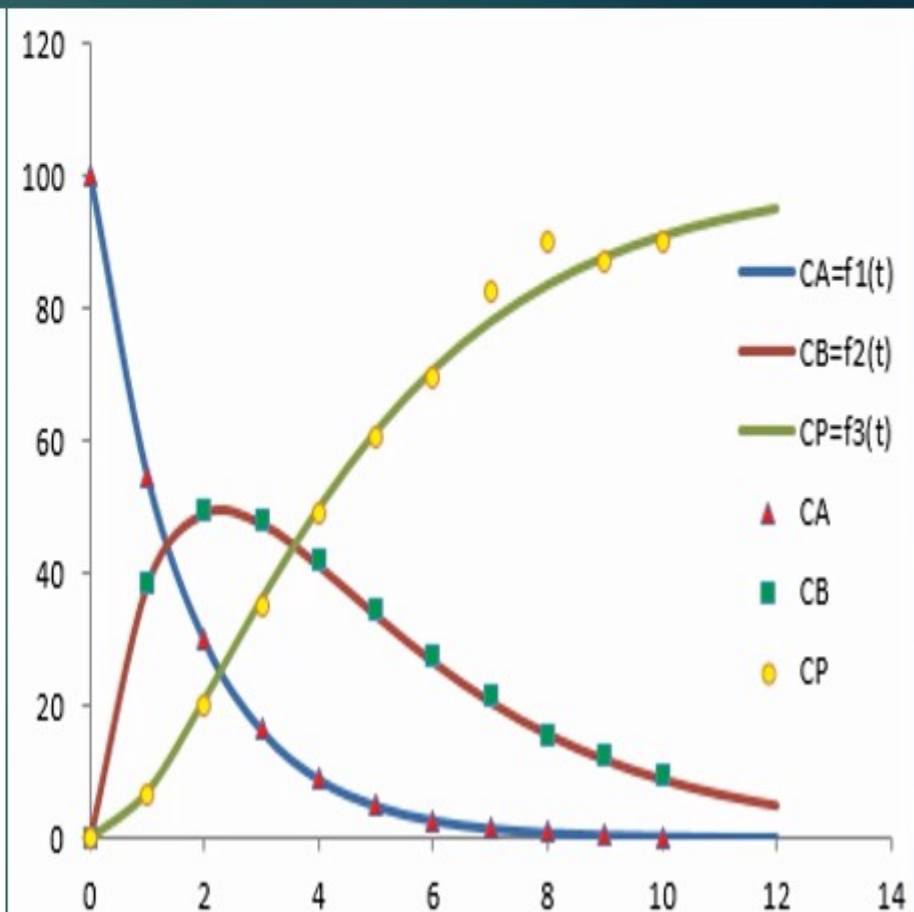
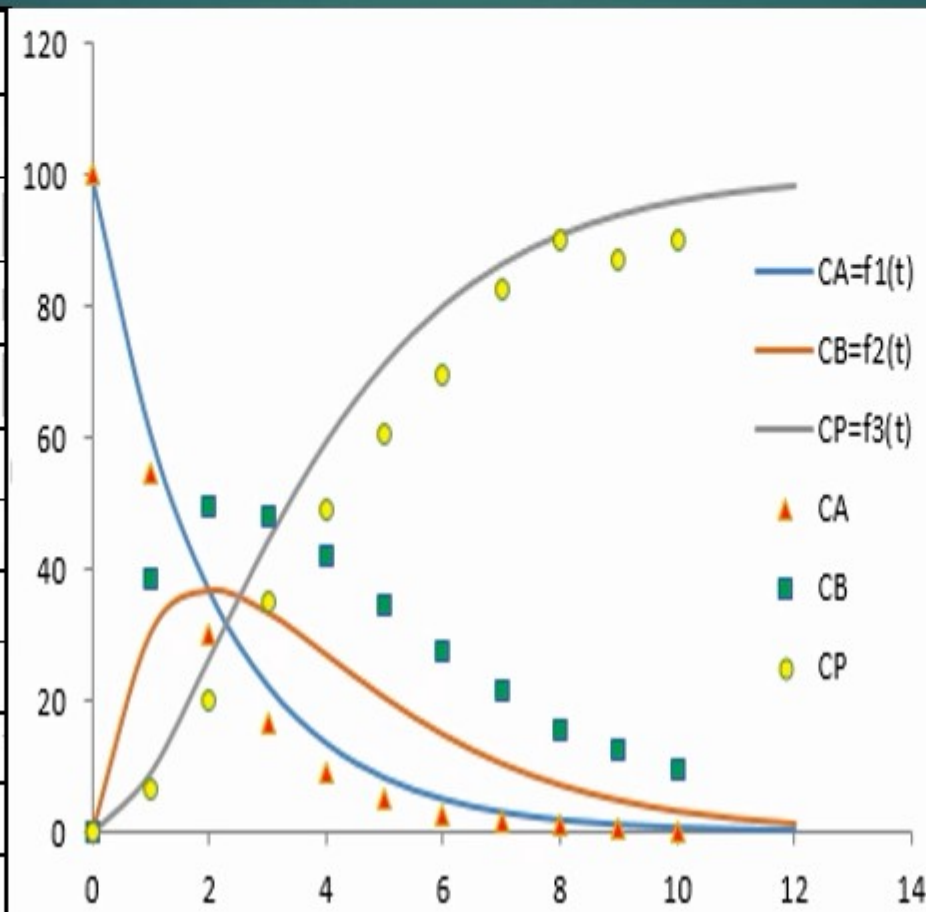
- 2)- Biết số liệu thực nghiệm kiểm tra nghiệm của mô hình
- 3)- So sánh nghiệm của phương pháp số với nghiệm giải tích
- 4)- Dùng số liệu thực nghiệm tìm hằng số tốc độ phản ứng

1) So sánh nghiệm giải tích và phương pháp số

2) Dùng số liệu thực nghiệm tìm k $k_1 = 0,5$ $k_2 = 0,5$



| τ | C_A | C_B | C_P |
|--------|-------|-------|-------|
| 0 | 100 | 0 | 0 |
| 1 | 54,8 | 38,5 | 6,7 |
| 2 | 30,00 | 49,6 | 20,3 |
| 3 | 16,4 | 48,3 | 35,2 |
| 4 | 9,00 | 42,1 | 48,9 |
| 5 | 4,9 | 34,7 | 60,4 |
| 6 | 2,7 | 27,6 | 69,7 |
| 7 | 1,5 | 21,4 | 82,7 |
| 8 | 0,8 | 15,5 | 90,0 |
| 9 | 0,44 | 12,5 | 87,0 |
| 10 | 0,24 | 9,4 | 90,3 |



$k_1 = 0,61$ $k_2 = 0,31$