

# ANALIZA SENSIBILITĂȚII GLOBALE A UNUI REACTOR CHIMIC PRIN METODA FAST (THE FOURIER AMPLITUDE SENSITIVITY TEST)

Dr. ing. Ștefan Ungureanu  
Ing. Florina Ungureanu

Facultatea de Chimie Industrială  
Universitatea Tehnică "Gh. Asachi", IAȘI

**Rezumat:** Analiza sensibilității globale, ASG, a unui sistem are drept scop determinarea gradului în care abateri aleatoare ale mărimilor independente ale sistemului, într-un domeniu de incertitudine cunoscut, influențează observabilele sistemului. Spre deosebire de analiza sensibilității locale, ASG ia în considerare, atât domeniul de incertitudine, cât și proprietățile statistice ale mărimilor independente, calculând un tip de sensibilități medii [1]. În continuarea lucrării [1] în care se trec în revistă, se clasifică și se caracterizează metodele care sunt încercate pentru abordarea problemelor ASG, în lucrarea de față se dezvoltă metoda FAST (The Fourier Amplitude Sensitivity Test), metodă care a dat rezultate în studiul sistemelor pur chimice. După prezentarea ideii esențiale și a bazei teoretice ale metodei FAST, se detaliază algoritmul de calcul, aducând corecții necesare la informațiile din bibliografie. Se aplică apoi metoda FAST la ASG a unui sistem chimico-ingenieresc, în particular a unui reactor chimic multitubular pentru procese puternic izoterme. Calculele sunt particularizate pentru reactorul catalitic utilizat în hidrogenarea benzenului, pentru care se dispune, atât de un model matematic validat, cât și de analiza sensibilității locale, studiate în lucrările anterioare [2,3].

**Cuvinte cheie:** Sisteme dinamice, sensibilitate, modelare matematică, conducere automată, optimizare.

## 1. Introducere

După ce în [1] se definesc conceptele cu care se lucrează în studiul sensibilității sistemelor dinamice și se prezintă metodele de calcul cunoscute sau în curs de elaborare în analiza sensibilității globale, lucrarea de față se ocupă de metoda FAST (The Fourier Amplitude Sensitivity Test) care este, deocamdată, cea mai des utilizată. Analiza sensibilității globale, ASG, spre deosebire de analiza sensibilității locale, ASL, aplicabilă numai în cazul abaterilor relativ mici ale variabilelor independente ale sistemului studiat, ia în considerare domeniul de incertitudine sau proprietățile statistice ale acestora, calculând un tip de sensibilități medii, de forma  $\langle \partial \Omega / \partial \alpha \rangle$ , pe domeniul de incertitudine admis. Ea stabilește, astfel, care mărimi independente au cea mai mare influență asupra celor dependente, atât datorită sensibilității, cât și a incertitudinii. În același timp, ASG ține cont de efectul modificărilor simultane și în domenii largi ale mărimilor independente asupra sistemului. Metodele de calcul în ASG, se află, deocamdată, în faza de

căutare, cu puține precizări certe. Dintre tehnicile de abordare a ASG, metodele statice globale [1] joacă un rol aparte, ele urmărind să pună în evidență modul în care abaterile statistice ale variabilelor parametrilor generali  $\bar{Q}$  ai modelului matematic al sistemului se propagă în cursul regimului tranzitoriu și intervin în valorile observabilelor. Metoda FAST, prin originalitatea sa, se distinge în cadrul acestor metode, ceea ce explică aplicarea ei în studiul mai multor sisteme pur chimice, [4,5,6,7] deocamdată. În lucrare, după prezentarea ideii esențiale și a bazelor teoretice ale metodei FAST, se detaliază structura algoritmului de calcul. Se utilizează apoi metoda FAST la analiza sensibilității unui sistem chimico - ingineresc, în particular a unui reactor chimic multitubular pentru procese puternic exoterme. Ca aplicație, se ia în considerare reactorul catalitic pentru hidrogenarea benzenului, pentru care se dispune, atât de modelul matematic, cât și de analiza sensibilității locale, studiate în lucrări anterioare [2,3].

## 2. Bazele teoretice ale metodei FAST[4-7]

$$\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial t} = \bar{f}(\bar{\sigma}, \bar{q}) \quad (1)$$

$$\bar{\sigma}(t_0) = \bar{\sigma}_0$$

Se consideră modelul matematic al unui sistem, exprimat în termeni de observabile și parametri, sub forma sistemului de ecuații diferențiale:

în care vectorul observabilelor,  $\bar{\sigma}$ , are "n" elemente, iar cel al parametrilor generali,  $\bar{q}$ , "m" elemente. Problema care trebuie soluționată constă în determinarea sensibilității fiecărei observabile  $\sigma_i$ ,  $i=1,2, \dots, n$ , la variația simultană, într-un domeniu cunoscut, a tuturor parametrilor  $q_l$ ,  $l=1,2, \dots, m$ . Dacă  $q_i$  sunt variabile aleatoare, atunci soluțiile  $\sigma_i$  ale ecuației (1) sunt, de asemenea aleatoare. Pentru simplitate, se va lucra pentru exemplificare cu  $m=2$ :

$$\bar{q} = [q_1, q_2]^T$$

Dacă valorile nominale ale parametrilor sunt  $\underline{q}_1$  și  $\underline{q}_2$  și se cunosc limitele lor (inferioare și superioare) de variație, se definește un domeniu de incertitudine al parametrilor în planul  $q_1 - q_2$ , care

are drept rezultat un interval de incertitudine pentru orice observabilă  $O_i$  [1]. Pentru evaluarea sensibilității globale, valabile în întreg domeniul de incertitudine al parametrilor se pleacă de la cunoașterea distribuțiilor de probabilitate a celor

doi parametri,  $p_1(q_1)$  și  $p_2(q_2)$  pe baza cărora se poate calcula distribuția de probabilitate a observabilei  $O_i$ ,  $p(O_i)$ . Valoarea medie, de ansamblu, a observabilelor  $O_i$  în cazul general, este dată de ecuația:

$$\langle O_i(t) \rangle = \underbrace{\iint \dots \int O_i(t; q_1, q_2, \dots, q_m) p(q_1, q_2, \dots, q_m) dq_1 dq_2 \dots dq_m}_{m \text{ integrale}} \quad (2)$$

care în cazul particular,  $m=2$ , devine:

$$\langle O_i(t) \rangle = \int_{q_2^{\min}}^{q_2^{\max}} \int_{q_1^{\min}}^{q_1^{\max}} O_i(t; q_1, q_2) p_1(q_1) p_2(q_2) dq_1 dq_2 \quad (3)$$

Aici  $O_i(t; q_1, q_2, \dots, q_m)$  sunt soluții ale ecuației (1), iar  $p(q_1, q_2, \dots, q_m)$  este densitatea de probabilitate  $m$ -dimensională a parametrilor. Ideea principală care stă la baza metodei FAST este transformarea integralei  $m$ -dimensionale (2) într-o integrală unidimensională echivalentă. În acest scop se practică transformarea:

$$q_l = G_l(\sin(w_l s)), \quad l=1, 2, \dots, m \quad (4)$$

unde:  $G_l, l=1, 2, \dots, m$  este un set de funcții cunoscute;  $w_l, l=1, 2, \dots, m$  este un set de frecvențe;

$$\langle O_i \rangle = \underline{O}_i = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T O_i(t; q_1(s), q_2(s), \dots, q_m(s)) ds \quad (5)$$

Egalitatea (5) este esențială în metoda FAST și este valabilă numai dacă setul frecvențelor  $\{w_l\}$  este nemărginit. Funcțiile  $G_l$  se aleg astfel încât lungimea arcului  $ds$  să fie proporțională cu  $p(q_1, \dots, q_m) dq_1$  pentru orice  $l \in \mathbb{N}$ . Transformarea (4) are ca rezultat o curbă de căutare care eșantionează spațiul parametrilor într-o manieră corespunzătoare descrierii statistice de către probabilitatea  $p(q_1, \dots, q_m)$ . Curba parametrică definită de relația (4) este denumită curbă de căutare, iar  $s$  - variabilă de căutare. O dată cu variația lui  $s$ , curba generată trebuie să acopere tot spațiul parametrilor. Dacă setul de frecvențe este nemărginit, curba nu se va închide și va trece suficient de aproape de fiecare punct din spațiul parametrilor. Când se alege un

" $s$ " este o variabilă scalară. Prin această transformare, variațiile celor " $m$ " parametri sunt traduse în variațiile unei singure variabile scalare,  $s$ . S-a demonstrat [4] că, printr-o alegere adecvată a setului de funcții  $G_l, l=1, 2, \dots, m$ , care transformă densitatea de probabilitate  $p(\bar{Q})$  în spațiul  $s$ , valoarea medie de ansamblu  $\langle O_i \rangle$  este egală cu valoarea medie în timp  $\underline{O}_i$ :

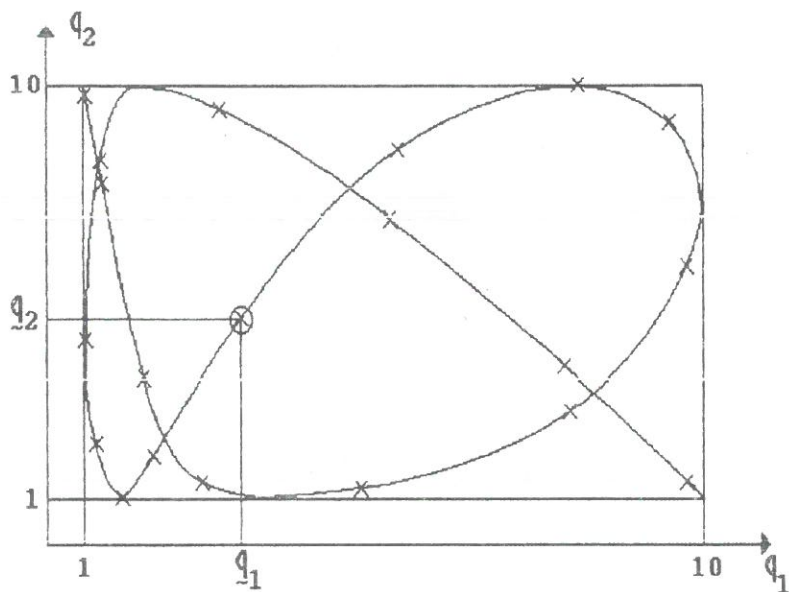
set finit de frecvențe întregi curbele de căutare sunt curbe Lissajous multidimensionale, ca în figura 1, trasate pentru cazul  $m=2$ .

Cu cât frecvențele  $w_l$  utilizate sunt mai mari, cu atât crește lungimea curbelor de căutare și densitatea punctelor de eșantionare. Pentru  $s$  luând valori în intervalul  $[-p, p]$  este parcursă toată curba de căutare. Datorită periodicității funcțiilor de căutare, orice observabilă  $O_i$  este periodică și, în plus, fiind integrabilă se poate dezvolta în serie Fourier. Utilizarea frecvențelor întregi în ecuația (4) face ca parametrii  $q_l, l=1, 2, \dots, m$  să fie funcții periodice de  $s$  pe intervalul finit  $[-p, p]$ , în care caz, ecuația (5) devine:

$$\langle O_i \rangle = \underline{O}_i = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} O_i(t; q_1(s), q_2(s), \dots, q_m(s)) ds \quad (6)$$

Varianța observabilei  $O_i$  este dată de:

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} O_i^2(t; q_1(s), q_2(s), \dots, q_m(s)) ds - \underline{O}_i^2 \quad (7)$$



$$\{\omega\} = \{3, 5\} \quad N_s = 21$$

Figura 1. Curbele de căutare în cazul variației simultane a doi parametri, în domeniile lor de incertitudine, pentru  $\{\omega\} = \{3, 5\}$  și  $N_s = 21$

Dar, ținând cont de egalitatea (6),

$$\sigma_i^2 = \langle O_i^2 \rangle - \langle O_i \rangle^2 \quad (8)$$

evaluarea lui  $\sigma_i^2$  se face utilizând dezvoltarea în serie Fourier a observabilelor  $O_i$ . Coeficienții Fourier corespunzători sunt:

$$A_{r\omega_1}^{(i)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} O_i(t; q_1(s), \dots, q_m(s)) \cos(r\omega_1 s) ds \quad r = 0, 1, \dots \quad (9)$$

$$B_{r\omega_1}^{(i)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} O_i(t; q_1(s), \dots, q_m(s)) \sin(r\omega_1 s) ds \quad r = 1, 2, \dots$$

de unde, din ecuația (6), rezultă:

$$\langle O_i \rangle = A_0^{(i)} \quad (10)$$

Teorema lui Parseval dă:

$$\begin{aligned} \langle O_i^2 \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} O_i^2(t; q_1(s), q_2(s), \dots, q_m(s)) ds = \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} \{A_j^{(i)^2} + B_j^{(i)^2}\} \end{aligned} \quad (11)$$

Varianța  $s_i^2$ , folosind (11) și (10) în ecuația (8), devine:

$$\sigma_i^2 = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \{A_j^{(i)^2} + B_j^{(i)^2}\} - A_0^{(i)} = 2 \sum_{j=1}^{\infty} \{A_j^{(i)^2} + B_j^{(i)^2}\} \quad (12)$$

Când coeficienții Fourier (9) sunt evaluați pentru frecvențele fundamentale ale transformării (4) sau pentru armonicile ei, atunci  $j=r\omega_1$ ,  $r=1,2,\dots$  și varianța (12) capătă forma:

$$\sigma_{\omega_1}^{(i)^2} = 2 \sum_{r=1}^{\infty} [A_{r\omega_1}^{(i)^2} + B_{r\omega_1}^{(i)^2}] \quad (13)$$

Varianța  $\sigma_{\omega_1}^{(i)^2}$  este o parte din varianța totală  $s_i^2$ , a observabilei  $O_i$ , și anume acea parte care desemnează efectul incertitudinii parametrului  $q_i$ .

Sensibilitatea observabilei  $O_i$  în raport cu parametrul  $q_i$ , în condițiile variației tuturor parametrilor, este dată, cantitativ, de raportul:

$$S_{\omega_1}^{(i)} = \frac{\sigma_{\omega_1}^2}{\sigma_i^2} \quad (14)$$

numită varianță parțială.

De remarcă că varianța parțială  $S_{\omega_1}^{(i)}$  are forma unei sensibilități normalizate astfel încât poate fi luată drept criteriu pentru a ierarhiza parametrii după influența pe care o au asupra fiecărei observabile. Legătura dintre expresia sensibilității globale (14) și cea a funcțiilor de sensibilitate locală este discutată în [6]. Se pot acum rezuma elementele esențiale ale metodei FAST. Evaluarea sensibilității globale se face cu varianța parțială, ecuația (14), pentru  $i=1,2,\dots,n$  și  $l=1,2,\dots,m$ . Mărimile relative ale celor " $m$ " variante parțiale pentru fiecare observabilă reflectă influența relativă a fiecăruia dintre cei " $m$ " parametri asupra observabilei respective. Variantele parțiale sunt calculate cu relația (14), ca raportul celor două variante  $s_{w_i}^2$  și  $s_i^2$ , determinate cu ecuațiile (12) și (13). Acest calcul implică, mai întâi, evaluarea coeficienților Fourier, relațiile (9) care, la rândul lor cer soluționarea sistemului de ecuații (1) al modelului matematic, în care s-a înlocuit  $q_i$

cu relația (4) pentru un număr suficient de mare de valori ale lui  $s$ , astfel încât integralele (9) să fie obținute cu o precizie acceptabilă. Un element esențial în metoda FAST este deci, alegerea numărului de valori  $N$ , pentru variabila scalară  $s$ .

### 3. Algoritmul de calcul al metodei FAST

Etapa I. Alegerea setului de frecvențe  $W_j$ ,  $l=1,2,\dots,m$  și atribuirea unei frecvențe  $w_l$  fiecărui parametru  $q_l$ . Teoretic, setul de frecvențe trebuie să fie nemărginit, astfel încât curbele de căutare să acopere în întregime domeniile de incertitudine ale parametrilor, cerință care, evident, nu poate fi realizată practic.

Mai mult, sunt introduse noi restricții din considerente de evitare a interferențelor armonicilor. Cukier și colaboratorii [6,7] au elaborat următoarea tehnică recursivă de alegere a setului de frecvențe, în funcție de numărul de parametri ce variază,  $m$ :

$$\begin{aligned} w_1 &= W_m \\ w_i &= w_{i-1} + d_{m+1-i}, \quad i = 2,3,\dots,m \end{aligned} \quad (15)$$

Valorile  $W_m$  și  $d_m$  sunt tabelate în Tabelul 1, la care se adaugă două corecții: pentru cazul a doi parametri,  $m=2$ ,  $W_m=2$ , deci  $\{w_i\} = \{3,5\}$ , iar pentru cazul a șase parametri,  $W_m$  se ia egal cu 13, deci  $\{w_i\} = \{13, \dots\}$ . Pentru cazul a doi parametri rezultă curbele de căutare prezentate în figura 1. Din tabelul 1, se observă că setul de frecvențe a fost limitat la valori impare, astfel încât se reduce intervalul de variație a lui  $s$  la  $[-\pi/2, \pi/2]$  și ecuațiile curbelor de căutare devin simetrice, în raport cu originea, în intervalul de valori al lui  $s$ . În acest caz, pentru orice observabilă  $O_i$ , se pot scrie proprietățile de simetrie:

$$\begin{aligned}
 O_i(\pi - s) &= O_i(s); & O_i(-\pi + s) &= O_i(-s) \\
 O_i\left(\frac{\pi}{2} + s\right) &= O_i\left(\frac{\pi}{2} - s\right); & O_i\left(-\frac{\pi}{2} + s\right) &= O_i\left(-\frac{\pi}{2} - s\right)
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

Tabelul 1

m	$\Omega_m$	$d_m$	m	$\Omega_m$	$d_m$
1	0	2(sau 4)	26	385	416
2	3	8	27	157	106
3	1	6	28	215	208
4	5	10	29	449	328
5	11	20	30	163	198
6	1	22	31	337	382
7	17	32	32	253	88
8	23	40	33	375	348
9	19	38	34	441	186
10	25	26	35	673	140
11	41	56	36	773	170
12	31	62	37	875	284
13	23	46	38	873	568
14	87	76	39	587	302
15	67	96	40	849	438
16	73	60	41	623	410
17	85	86	42	637	248
18	143	126	43	891	448
19	149	134	44	943	388
20	99	112	45	1171	596
21	119	92	46	1225	216
22	237	128	47	1335	100
23	267	154	48	1725	488
24	283	196	49	1663	166
25	151	34	50	2019	0

Prin urmare, coeficienții Fourier au expresii mai simple:

$$A_j^{(i)} = \begin{cases} 0 & j - \text{impar} \\ \frac{1}{p} \int_0^{\frac{p}{2}} [(O_i(s) + O_i(-s))] \cos(js) ds & j - \text{par} \end{cases}
 \tag{17}$$

$$B_j^{(i)} = \begin{cases} 0 & j - \text{par} \\ \frac{1}{p} \int_0^{\frac{p}{2}} [(O_i(s) - O_i(-s))] \sin(js) ds & j - \text{impar} \end{cases}$$

**Etapa aIII-a.** Alegerea expresiei curbelor de căutare  $G_1(\sin(w_1s))$ , astfel încât să fie îndeplinite condițiile de precizie a calculului sensibilității. Pe baza distribuțiilor de probabilitate ale parametrilor, cele mai des întâlnite, Cukier [7] propune patru zone din care se extrag expresiile din Tabelul 2.

Tabelul 2

Variația	q (s)	val. medie $\underline{q}$	valoarea nominală $\underline{v}$
aditivă	$q(s) = \underline{q}[1 + \underline{v} \sin(\omega s)]$	$\frac{q^{\max} + q^{\min}}{2}$	$\frac{q^{\max} - q^{\min}}{q^{\max} + q^{\min}}$
exponențială	$q(s) = \underline{q} \exp[\underline{v} \sin(\omega s)]$	$\sqrt{q^{\max} q^{\min}}$	$\frac{1}{2} \ln \left( \frac{q^{\max}}{q^{\min}} \right)$

Prima expresie a curbei de căutare ("variație aditivă") este recomandată pentru parametrării cu variații reduse, iar cealaltă expresie ("variație exponențială") corespunde parametrilor având domenii largi de incertitudine. Din cele patru tipuri de expresii publicate de Cukier ș.a. [7], două (a doua și a treia) sunt în realitate identice.

**Etapa aIII-a. Stabilirea numărului de puncte  $N_s$  de eșantionare a parametrilor spațiului.** Din considerente de precizie în calculul numeric al integralelor și exploatând proprietățile de simetrie ale observabilelor în [5] se recomandă:

$$N_s = N * w_{\max} + 1,$$

N întreg, par (18) unde  $w_{\max}$  este frecvența maximă din setul de frecvențe. Cu cât N este mai mare cu atât se îmbunătățește aproximarea numerică a valorilor coeficienților Fourier dar, în același timp, crește efortul de calcul. Aplicațiile publicate utilizează N

= 2 sau N = 4. Odată determinat  $N_s$  (impar), repartizarea uniformă a punctelor de eșantionare pe intervalul  $\pm p/2$  conduce la relația de calcul pentru valorile lui  $s_j$ :

$$s_j = \frac{\pi}{2} \left[ \frac{2j - N_s - 1}{N_s - 1} \right] \quad j = 1, 2, \dots, N_s \quad (19)$$

care diferă de cea dată în [4,5].

**Etapa aIV-a. Se soluționează sistemul de ecuații diferențiale (1), care reprezintă modelul matematic în care s-a înlocuit  $q_i = G_i(\sin w)$  pentru fiecare combinație  $s_j$  de parametri  $j = 1, 2, \dots, N_s$ , adică de  $N_s$  ori, obținând un număr de  $n * N_s$  funcții  $O_i(t, s)$ ,  $i=1, 2, \dots, n$ .**

**Etapa aV-a. Se calculează coeficienții dezvoltării în serie Fourier a observabilelor cu relațiile (20), derivate din relațiile (17), prin simple formule de cvadratură:**

$$A_{r\omega_1}^{(i)}(t) = \begin{cases} 0 & r\omega_1 - \text{impar} \\ \frac{1}{N_s} \left\{ O_i(t; N_0) + \sum_{h=1}^{N_h} [O_i(t; N_0 + h) + O_i(t; N_0 - h)] \cos \frac{r\omega_1 h\pi}{N_s} \right\}, & r\omega_1 - \text{par} \end{cases} \quad (20)$$

$$B_{r\omega_1}^{(i)}(t) = \begin{cases} 0 & r\omega_1 - \text{par} \\ \frac{1}{N_s} \left\{ \sum_{h=1}^{N_h} [O_i(t; N_0 + h) - O_i(t; N_0 - h)] \sin \frac{r\omega_1 h\pi}{N_s} \right\}, & r\omega_1 - \text{impar} \end{cases}$$

unde:

$$N_h = \frac{N_s - 1}{2} ; \quad N_0 = N_h + 1$$

În ceea ce privește numărul de coeficienți Fourier, r, se constată că, pentru  $r > 2$ , amplitudinile  $A_{r\omega_1}^{(i)}$  și  $B_{r\omega_1}^{(i)}$  scad rapid către zero astfel că, în calculele practice ne vom rezuma la utilizarea coeficienților  $B_{r\omega_1}^{(i)}$  (pentru  $r=1$ ) și  $A_{r\omega_1}^{(i)}$  (pentru  $r=2$ ) care sunt diferiți de zero [4].

Etapa aVI-a. Cu relațiile (21)-(23) se

calculează valoarea medie  $\langle O_i(t) \rangle$ , varianța  $s^2(t)$

și, în fine, varianța parțială care dă măsura sensibilității globale:

$$\langle O_i(t) \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} O_i(t; s_j) \quad (21)$$

$$S_{\omega_1}^{(i)}(t) = \frac{2 \left[ |A_{2\omega_1}^{(i)}(t)|^2 + |B_{1\omega_1}^{(i)}(t)|^2 \right]}{\sigma_i^2(t)} \quad (23)$$

$$\alpha^2(t) = \frac{1}{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} \left\{ O_i(t; s_j) - \langle O_i(t) \rangle \right\}^2 \quad (22)$$

Rezumăm aceste etape de calcul în schema logică din figura 2.

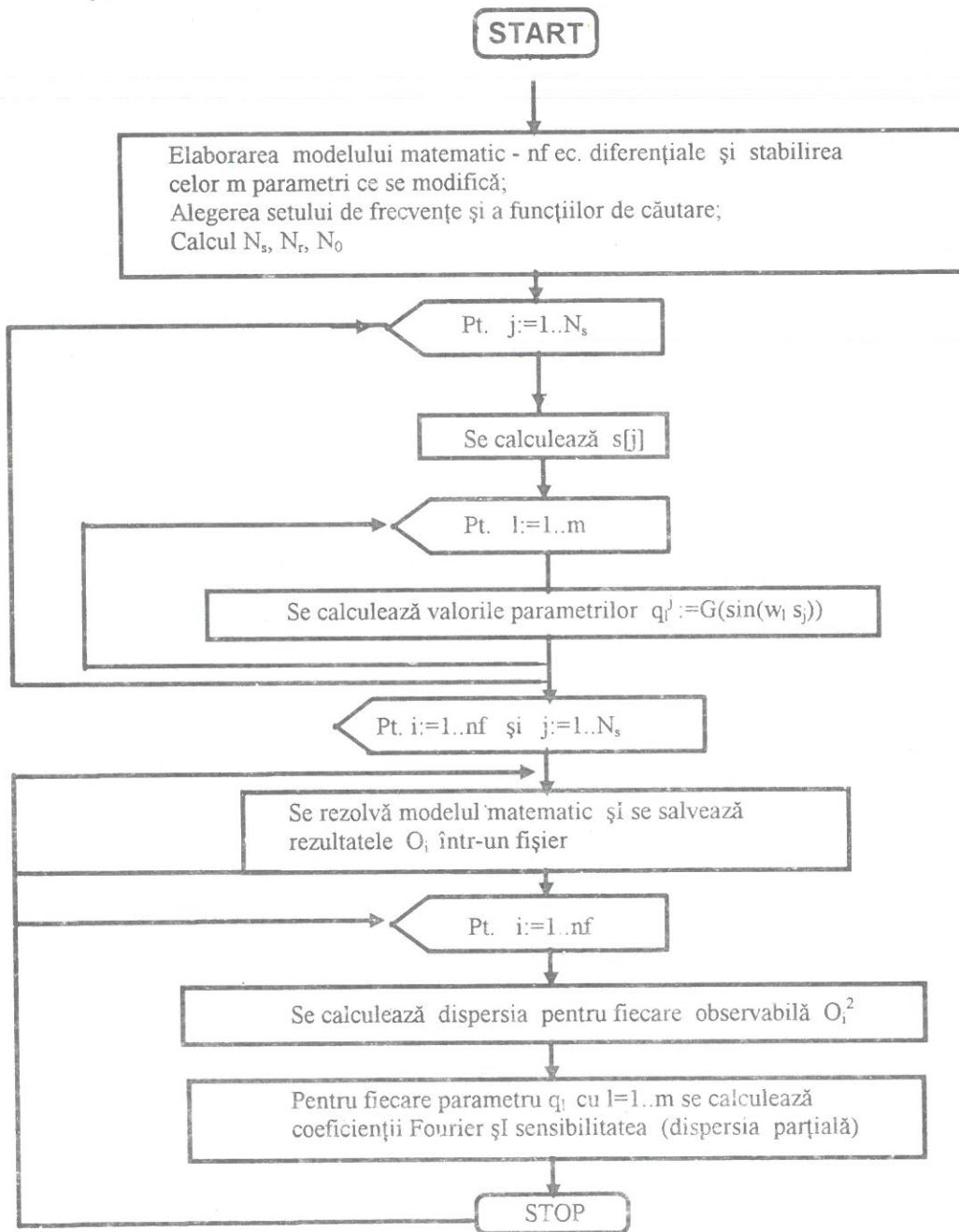


Figura 2. Organigrama algoritmului FAST

Metoda FAST de calcul a sensibilității globale implică două categorii de aproximări care

afectează precizia rezultatelor. Prima constă în faptul că seturile de frecvențe  $\{w_l\}$  alese sunt

mărginite, ceea ce are ca rezultat acoperirea doar parțială a spațiului parametrilor de către curbele de căutare (Figura 1). A doua categorie este introdusă de utilizarea unui număr finit de puncte în cvadratura numerică. Ambele categorii sunt examinate cantitativ și comentate în [7].

#### 4. Analiza sensibilității globale a unui reactor chimic

În literatură, metoda FAST este întâlnită numai pentru analiza sensibilității globale a unor sisteme chimice - studiul mecanismelor cinetice [4,5]. În lucrarea de față ne propunem să abordăm analiza sensibilității globale a unui reactor chimic multitubular pentru procese puternic exoterme, în modelul căruia intervin, atât transferuri de masă, cât și de căldură. Ca aplicație practică ne vom referi la reactorul catalitic pentru hidrogenarea benzenului, al cărui model matematic a fost elaborat în [2] și a cărei analiză a sensibilității locale este prezentată în [3].

##### 4.1. Modelul matematic al reactorului

Modelul matematic monodimensional al reactorului catalitic pentru hidrogenarea benzenului la ciclohexan este reprezentat de următorul sistem de ecuații [2,3]:

$$\begin{cases} \frac{dx_A}{dz} = \frac{0,785k(1-x_A)d^2}{F_A/N(1+1,11b-3x_A)} \\ \frac{dT}{dz} = \frac{k(1-x_A)(-\Delta_R H)}{G C_{pa}(1+1,11b-3x_A) - \frac{4K}{d} G C_{pa}} (T - T_0) \end{cases} \quad (24)$$

cu condițiile inițiale:

$$\begin{cases} X_A(0)=0 \\ T(0)=T_0=393,16 \text{ }^\circ\text{K} \end{cases} \quad (25)$$

În modelul (24), notațiile folosite au semnificațiile:

$x_A$  - conversia benzenului la ciclohexan, iar  $T$  temperatura masei de reacție;

$z$  - coordonata axială a reactorului; lungimea reactorului este de 6 m;

în care:

$k$  - constanta de viteză de reacție, a cărei dependență de temperatură a fost considerată de forma:

$$k = 10^3 \exp\left(e' + \frac{e''}{T}\right) \quad (26)$$

$d$  - diametrul țevilor (0,03m);

$F_A/N$  - încărcarea pe o țevă, parametru a cărui valoare se poate modifica aproximativ cu  $\pm 10\%$  pe parcursul desfășurării reacției ( $N=7$ );

$b$  - raport molar hidrogen/benzen în amestecul de alimentare a reactorului care poate lua valori în intervalul 4,15-11. Modelul (24) a fost validat pentru  $b=4,15$ ;

$T_a$  - temperatura mediului de răcire din spațiul intratubular;

$G$  - debit masic și are expresia:

$$G = \frac{99,427 + 6,4841b}{d^2} (F_A / N) \quad (27)$$

capacitatea calorică  $C_{pa}$  are expresia:

$$C_{pa} = \frac{\sum_1^4 y_i c_{p_i}}{\sum_1^4 y_i M_i}, \quad i = 1,2,3,4 \quad (28)$$

în care

$$c_{p_i} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3 + e_i T^4, \quad i = 1,2,3,4$$

$$y_1 = \frac{1-x_A}{1+1,11b-3x_A} \quad y_3 = \frac{x_A}{1+1,11b-3x_A}$$

$$y_2 = \frac{b-3x_A}{1+1,11b-3x_A} \quad y_4 = \frac{0,11b}{1+1,11b-3x_A}$$

$D_R H$  - energia de reacție și se calculează cu relația:

$$\Delta_R H = a_5 + b_5 T + c_5 T^2 + d_5 T^3 + e_5 T^4 \quad (29)$$

Coefficientul global de transfer de căldură  $K$  este dat de expresia:

$$K = \frac{9,30112 \lambda_r \alpha_w}{8 \lambda_r + d \alpha_w} \quad (30)$$



$$\lambda_r = \lambda_r^0 + \frac{d_p G 10^{-2}}{4 + 184(d_p/d)^2} \frac{1}{\mu_a}; \quad \alpha_w = \frac{8,4 \lambda_r^0}{d^{1,33}} + 0,001152 \frac{dG}{\mu_a}$$

$$\mu_a = \frac{\sum_{i=1}^4 y_i M_i}{\sum_{i=1}^4 \frac{y_i M_i}{\mu_i}}, \quad i = 1, 2, 3, 4$$

În tabelul 3 se dau valorile numerice ale mărimilor de mai sus.

Tabelul 3

Mărimea	Valoarea	Mărimea	Valoarea
e'	-10,2209	b <sub>4</sub>	7,61342
e''	209,351	c <sub>4</sub>	-14,4400'10 <sup>-4</sup>
F <sub>A</sub> /N	6,88'10 <sup>-5</sup>	d <sub>4</sub>	0
b	4,15	a <sub>5</sub>	-18,1875'10 <sup>7</sup>
l <sub>r</sub> <sup>0</sup>	0,311	b <sub>5</sub>	-98,4430'10 <sup>3</sup>
a <sub>1</sub>	-36,2046'10 <sup>3</sup>	c <sub>5</sub>	49,4977
b <sub>1</sub>	484,681	d <sub>5</sub>	31,4512'10 <sup>-3</sup>
c <sub>1</sub>	-31,5587'10 <sup>-2</sup>	e <sub>5</sub>	-19,3998'10 <sup>-6</sup>
d <sub>1</sub>	77,5992'10 <sup>-6</sup>	M <sub>1</sub>	78,05
a <sub>2</sub>	28,7962'10 <sup>3</sup>	M <sub>2</sub>	2
b <sub>2</sub>	27,6243'10 <sup>-2</sup>	M <sub>3</sub>	84,09
c <sub>2</sub>	11,6357'10 <sup>-4</sup>	M <sub>4</sub>	28,02
d <sub>2</sub>	0	d <sub>p</sub>	0,005
a <sub>3</sub>	-48,2588'10 <sup>3</sup>	T <sub>a</sub>	406,06
b <sub>3</sub>	584,505	m <sub>1</sub>	110,7'10 <sup>-7</sup>
c <sub>3</sub>	-21,7730'10 <sup>-2</sup>	m <sub>2</sub>	113,9'10 <sup>-7</sup>
d <sub>3</sub>	0	m <sub>3</sub>	100,76'10 <sup>-7</sup>
a <sub>4</sub>	26,3687'10 <sup>3</sup>	m <sub>4</sub>	191,6'10 <sup>-7</sup>

#### 4.2. Analiza sensibilității globale a reactorului

Vectorul observabilelor are două elemente:

$$\bar{O}(z) = \begin{bmatrix} O_1 \\ O_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_A \\ T \end{bmatrix} \quad (31)$$

iar vectorul parametrilor luați în considerare pentru analiza de sensibilitate globală este format din trei elemente:

$$\bar{q} = [q_1 \quad q_2 \quad q_3]^T = [T_a \quad F_A/N \quad b]^T \quad (32)$$

Din rezolvarea modelului matematic [2] și din variațiile sensibilităților locale prezentate în

graficele din [3] rezultă că pentru coordonata axială, z, mai mare de 2,5 m reacția este practic terminată iar pentru z mai mare de 1 m sensibilitățile locale sunt nule. Din aceste motive, dar și datorită instabilității numerice în rezolvarea modelului pentru variații simultane și în domeniul largi ale parametrilor pentru z > 3,5 m, în cazul analizei de sensibilitate globală se consideră z ∈ [0;3,5]. Tot datorită instabilității numerice se va considera variația parametrului b într-un interval mai mic decât [4,15;11].

a) Se consideră variația simultană doar a parametrilor b și F<sub>A</sub>/N. Domeniul de variație a lui b s-a considerat intervalul [4,15; 5,45]; valoarea sa nominală este 4.95 iar w=3. Variația parametrului F<sub>A</sub>/N este de ±10% în jurul valorii nominale de 98.28\*10<sup>-7</sup> iar w=5. Pentru ambii parametri s-au considerat variații de tip aditiv. Sensibilitățile globale ale celor două observabile sunt prezentate în figura 3.

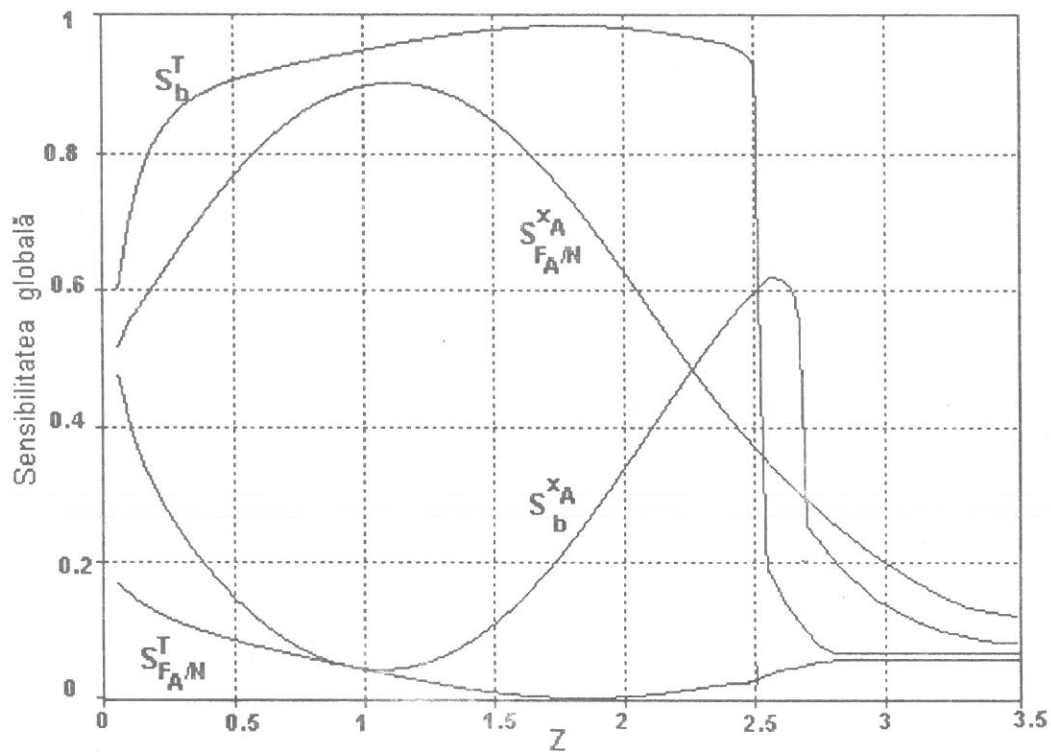


Figura 3. Sensibilitatea globală a conversiei ( $x_A$ ) și temperaturii ( $T$ ) în raport cu raportul molar,  $b$  și cu încărcarea pe o țevă  $F_A/N$

b) Se consideră variația simultană a parametrilor  $b$  și  $T_a$ ,  $F_A/N$  fiind constant și având valoarea nominală. Primul parametru a fost considerat  $b$  a cărui valoare se modifică aditiv în intervalul  $[4,15; 5,45]$ , având valoarea nominală 4.80 și căruia i s-a asignat frecvența  $w=3$ . Al

doilea parametru a fost considerat  $T_a$  a cărui valoare se modifică aditiv cu  $\pm 5\%$  în jurul valorii nominale 406,06 iar frecvența atribuită este 5. Pentru sensibilitățile globale rezultă graficul din figura 4.

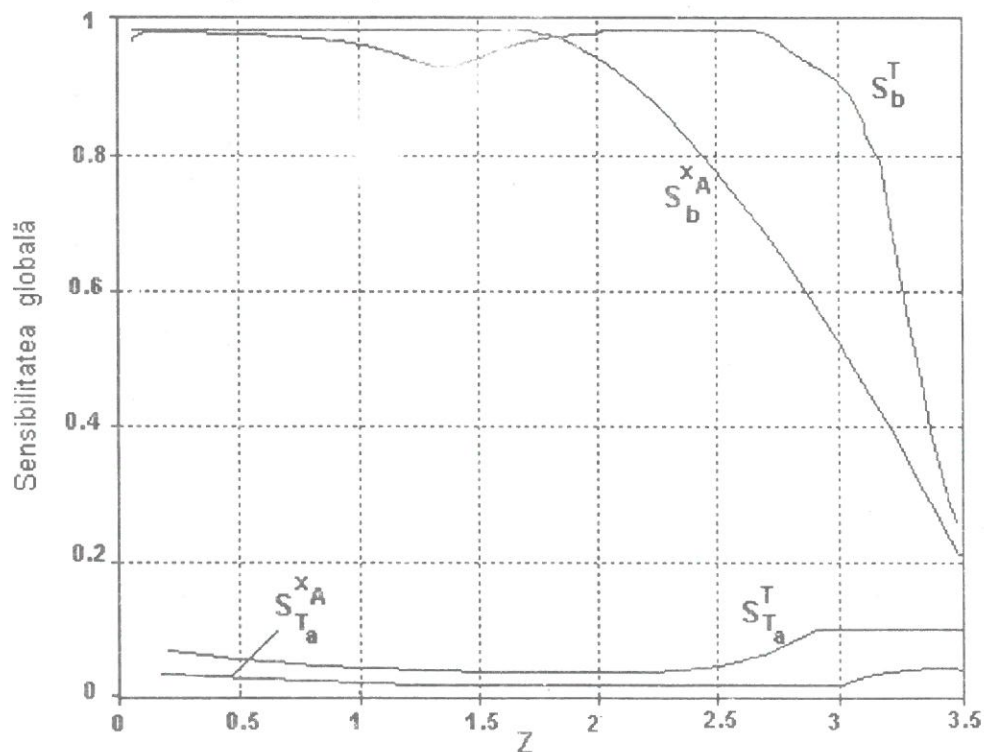


Figura 4. Sensibilitatea globală a conversiei ( $x_A$ ) și temperaturii ( $T$ ) în raport cu raportul molar,  $b$  și cu temperatura mediului de răcire din spațiul intertubular,  $T_a$

c) Se consideră variația simultană a celor trei parametri în felul următor:

- $T_a$  variază exponențial cu  $\pm 5\%$  în jurul valorii nominale 406,06 și  $w=1$ ;

- $F_A/N$  variază aditiv cu  $\pm 10\%$  în jurul valorii de  $98.28 \cdot 10^{-7}$  iar  $w=9$ ;

- $b$  se modifică aditiv în intervalul  $[4,15; 5,45]$ , având valoarea nominală 4.80 și  $i$  s-a asignat frecvența  $w=9$ . În figura 5 sunt reprezentate numai sensibilitățile globale ale celor două observabile în raport cu parametrii  $b$  și  $F_A/N$ , sensibilitățile în raport cu  $T_a$  fiind mai mici de 0,1.

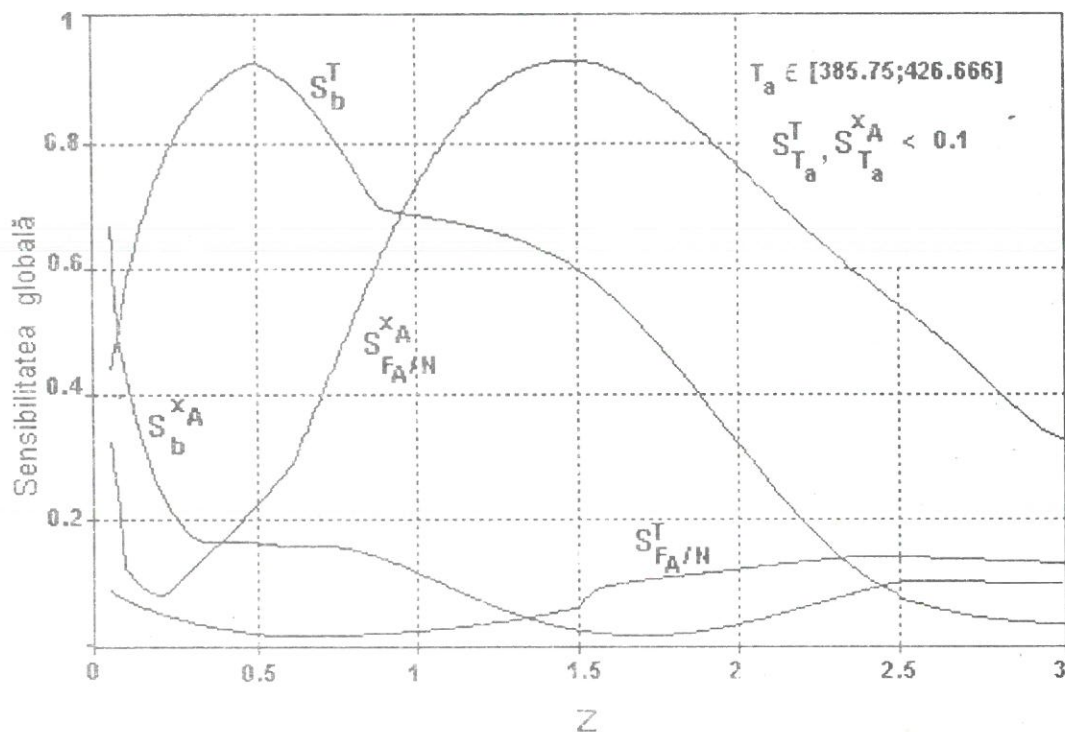


Figura 5. Sensibilitatea globală a conversiei ( $x_A$ ) și temperaturii ( $T$ ) în raport cu raportul molar,  $b$  și cu încărcarea pe o țevă,  $F_A/N$ , în cazul variației simultane a celor trei parametri.

Din reprezentările figurilor 4 și 5 rezultă că, în condițiile variațiilor simultane și în limite largi ale mai multor parametri, parametrul  $T_a$  influențează foarte puțin cele două observabile; sensibilitățile globale în raport cu  $T_a$  au valori sub 0,1.

Indiferent de modul sau de numărul în care s-au grupat parametrii care se modifică simultan, observabila  $T$  este puternic influențată de parametrul  $b$ . În schimb, sensibilitatea globală a observabilei  $x_A$  în raport cu parametrul  $b$  depinde mult de modul în care au fost aleși cei doi parametri care se modifică simultan.

În cazul în care toți cei trei parametri considerați variază simultan, sensibilitățile globale ale temperaturii și conversiei datorate raportului molar, respectiv încărcării pe o țevă, au valori maxime în puncte deferite ale axei  $z$ .

## 5. Concluzii

FAST este o metodă statistică pentru evaluarea sensibilităților globale ale observabilelor unui sistem la variația simultană și în limite largi,

dar cunoscute ale parametrilor sistemului. Exemplul prezentat în lucrare se referă la un reactor chimic, dar metoda FAST se poate aplica la orice sistem, inclusiv la sistemele de reglare automată, ceea ce va face obiectul unor lucrări ulterioare.

## Lista de simboluri

- cu excepția celor definite în text -

$A_{r\omega_1}, B_{r\omega_1}$  - coeficienți Fourier

$C_p$  - căldură specifică

$d_m$  - parametru întreg, par (tabelul 1)

$d_p$  - diametrul particulelor (rel. 30 și tabelul 3)

$G_1$  - set de funcții cunoscute

$N_0, N_h, N_s$  - numere întregi

$N_s$  - valoare întreagă (nr. maxim de valori ale variabilei  $s$ )

$\mathbf{O}$  - vectorul observabilelor

$\mathbf{Q}$  - vectorul parametrilor generali

$p_i(q_i)$  - distribuția de probabilitate a parametrului  $q_i$

$s$  - variabilă scalară

$S_{\omega_1}^{\mathbf{O}_i}$  - sensibilitatea globală a observabilei  $O_i$  în raport cu parametrul  $q_i$

$t$  - variabila timp

$T$  - perioadă de timp

$y_i$  - fracții molare (rel. 29)

$a$  - mărimi independente;

$a_w$  - coeficient de transfer de căldură (rel. 30)

$l_r$  - conductivitate termică radială (rel. 30)

$m_a$  - vâscozitatea dinamică (rel. 30)

$W$  - mărimi dependente

## Bibliografie

1. UNGUREANU ȘT., UNGUREANU FL., *Analiza sensibilității globale a sistemelor dinamice. Metode de abordare*, în: Rev. Rom. de Informatică și Automatică, Buc., Nr. 3-4, 1994, pp.5-14.

2. CURIEVICI I., MATAACHE S., NICU V., UNGUREANU ȘT., PETRILĂ C., *Mathematical Modelling of a Catalytic Reactor for Benzene Hydrogeneration (I)*, în: Buletinul I. P.Iași, Tom XXIX, Fasc.1-4, 1983, p. 51.

3. UNGUREANU ȘT., CURIEVICI I., PETRILĂ C., *Sensibilitatea unui reactor catalitic multitubular pentru procese puternic exoterme*, în: Rev. de Chimie, vol. 33, Nr. 3, 1982, p. 255.

4. KODA M, McRAE G.J. and SEINFELD J.H., *Automatic Sensitivity Analysis of Kinetic Mechanisms*, În: Int. J. of Chem. Kin., Vol. XI, 1979, pp. 427-444.

5. McRAE G. J., TILDEN J.W. and SEINFELD J., *Global Sensitivity Analysis -A Computational Implementation of the Fourier Amplitude Sensitivity Test (FAST)*, În: Computers & Chem. Eng., Vol. 6, No 1, 1982, pp. 15-25.

6. CUKIER R.I., LEVINE H.B. and SHULER K.E., *Nonlinear Sensitivity Analysis of Multiparameter Model Systems*, În: J.Comp. Phys., Vol. 26, No 1, 1978, pp. 1-42.

7. CUKIER R.I., SCHAIBLY I.H. and SHULER K.E., *Study of the Sensitivity of Coupled Reaction Systems to Uncertainties in Rate Coefficients. III. Analysis of the Approximations*, În: J. Comp. Phys., Vol. 63, 1975, p. 1140.