Articole

ANALIZA SENSIBILITĂȚII GLOBALE A SISTEMELOR DINAMICE. METODE DE ABORDARE.

'rof. dr. ing. ȘTEFAN UNGUREANU
\sistent ing. FLORINA UNGUREANU

'acultatea de Inginerie Chimică
Jniversitatea Tehnică "Gh. Asachi", IAȘI

Rezumat: Lucrarea constituie o prezentare a cercetărilor privind teoria i metodele analizei sensibilității globale,aplicate la sistemele dinamice. \rticolul urmărește doar să impună atenției inginerilor conceptul de ensibilitate globală și din această cauză nu tratează extensiv detalii ilgoritmice care, de altfel, sunt disponibile în bibliografia citată. \naliza de sensibilitate poate fi divizată în două domenii: analiza ocală și analiza globală. Tehnicile analizei sensibilității locale ırmăresc comportarea sistemelor dinamice în imediata vecinătate a ınui punct de funcționare în spațiul parametric. Analiza sensibilității globale ia în considerare zona de incertitudine sau proprietățile tatistice ale valorilor parametrilor intr-un domeniu larg al spațiului parametrilor. Tehnicile cu ajutorul cărora se tratează aceste probleme se află astăzi în diferite etape de dezvoltare. În lucrare se prezintă, ori le câte ori este necesar, direcțiile de dezvoltare ale acestor tehnici.
Cuvinte cheie: Sisteme dinamice, sensibilitate, modelare matematică, conducere automată, optimizare.

1. Introducere

Conceptul de "sensibilitate" a unui sistem se referă la gradul și sensul în care unele mărimi, Ω, considerate dependente, ale sistemului sunt influențate de modificările altor mărimi, α, considerate independente, de la valorile lor nominale. Astfel, dacă evoluția unui sistem, descrisă de traiectoria stării sale, suferă modificări semnificative la abaterile unui parametru, de pildă, de la valoarea sa nominală, se spune că sistemul este sensibil în raport cu acel parametru ([1],[2]). Pentru a preciza semnificația atributelor de "independent" și "dependent", folosite în analiza de sensibilitate, se pleacă de la modelul matematic al unui sistem determinist, dinamic, cu parametrii concentrați, invariant, uniform și continuu:

$$\begin{aligned} \dot{\bar{x}} &= \bar{f}(\bar{x},\bar{u},\bar{p},t) \\ \bar{y} &= \bar{g}(\bar{x},\bar{u},\bar{p},t) \end{aligned} \qquad (1)$$

Soluția modelului matematic (1), pentru o stare inițială $\bar{x}(t_0)=\bar{x}_0$ și mărimi de intrare $\bar{u}(t)$ date, este de forma:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \bar{\varphi}(\bar{x}_0,\bar{u},\bar{p},t_0,t) \\ \bar{y} &= \bar{\psi}(\bar{x}_0,\bar{u},\bar{p},t_0,t) \end{aligned} \qquad (2)$$

Dacă intrările $\bar{u}$ sunt invariante în timp, ele pot fi tratate ca parametri. Se va nota cu $\bar{q}$ vectorul format prin juxtapunerea vectorilor $\bar{x}_0$, $\bar{u}$ și $\bar{p}$ care va fi numit "vector al parametrilor generali". De asemenea, introducem vectorul $\bar{w}$ care, după caz, este $\bar{w} \equiv \bar{x}$ sau $\bar{w} \equiv \bar{y}$. Dintre acestea, interesează observabilele sistemului, notate $\mathcal{O}$. Cu aceste notații, soluțiile (2) devin:

$$\bar{w} = \bar{w}(\bar{q},t_0,t) \qquad (3)$$

În continuare, se ia în considerare mulțimea $M = \{\bar{w},\bar{q}\}$. În principiu, formal, din punct de vedere al analizei de sensibilitate, oricare dintre elementele mulțimii M poate fi mărime independentă sau mărime dependentă. Ținând cont de această împărțire, analiza generală de sensibilitate se împarte în analiza sensibilităților elementare, ASE, (mărimi independente $\bar{\alpha} \equiv \bar{q}$, mărimi dependente $\bar{\Omega} \equiv \bar{w}$) și analiza sensibilităților derivate, ASD, (mărimi dependente $\alpha_i = w_i$ sau q_j - unele elemente din $\bar{w}$ sau respectiv din $\bar{q}$, și mărimi dependente $\Omega = q_k$ sau W_l, celelalte elemente din $\bar{q}$, respectiv $\bar{w}$) [3].

Luând în considerare gradul de incertitudine cu care sunt cunoscute valorile variabilelor independente sau, echivalent, domeniul lor de variație, analiza de sensibilitate a unui sistem se clasifică în categoriile:

- analiza sensibilității locale, ASL;
- analiza sensibilității globale, ASG.

Analiza sensibilității locale (ASL), are drept scop determinarea gradului și sensului în care abateri relativ **mici** ale mărimilor independente α, în jurul unor valori constant cunoscute, influențează variația mărimilor dependente Ω. ASL este aplicată sistemelor cu modele matematice bine definite, cu mărimi independente având valori nominale cert cunoscute, cu un domeniu foarte redus de variație în jurul acestor valori. Expresia cantitativă a sensibilității locale este coeficientul (funcția) de sensibilitate S_{α}^{Ω}, definit ca un gradient:

$$S_{\alpha}^{\Omega} \triangleq \frac{\partial \Omega}{\partial \alpha} \qquad (4)$$

Pentru ierarhizarea mai multor mărimi independente α_i, $i=1,2,...$ după mărimea influenţei pe care o au asupra aceleiaşi variabile dependente Ω, se folosesc "funcţii de sensibilitate relativă (adimensională)", $S_{\alpha}^{*\Omega}$:

$$S_{\alpha_i}^{*\Omega} \triangleq \frac{\partial \ln \Omega}{\partial \ln \alpha_i} = S_{\alpha_i}^{\Omega} \frac{\alpha_i}{\Omega}, \quad i=1,2... \qquad (5)$$

Pentru calculul funcţiilor de sensibilitate locală au fost elaborate, dezvoltate şi aplicate, în ultimii ani, metode bine puse la punct: metoda diferenţială directă (Direct Differential Method, DDM) sau metoda ecuaţiilor de sensibilitate, metoda funcţiei Green (Green's Function Method, GFM) cu varianta AIM (The Analytically Integrated Magnus Method), ş.a. ([4],[5]). Majoritatea cercetărilor privind analiza sensibilităţii sistemelor chimice şi chimico-inginereşti se limitează la analiza sensibilităţii locale.

Analiza sensibilităţii globale (ASG)

Aşa cum s-a arătat mai sus, analiza sensibilităţii locale (ASL) furnizează informaţii asupra comportării sistemului numai în imediata vecinătate a unui punct de funcţionare, definit de valorile cunoscute ale mărimilor independente şi de soluţia corespunzătoare a modelului matematic, răspunzând la întrebarea "care mărimi independente sunt importante într-un sistem dat?". De asemenea, funcţiile de sensibilitate $S_{\alpha_i}^{\Omega}$, calculate prin procedurile ASL ca derivate parţiale ale lui Ω în raport cu fiecare α_i, separat, oglindesc influenţa **singulară** a fiecărei mărimi independente α_i asupra variabilei dependente Ω. În cazul sistemelor reale, însă, mărimile independente, fie ele parametrii sau condiţii iniţiale, sunt cunoscute cu un anumit grad de incertitudine, putând lua valori plasate într-un domeniu de dimensiuni finite, uneori destul de largi. În acelaşi timp, aceste mărimi se pot modifica simultan, astfel că influenţa fiecărei mărimi independente asupra mărimilor dependente este corelată cu influenţa celorlalte mărimi independente asupra aceloraşi mărimi dependente.

Analiza sensibilităţi globale (ASG) ia în considerare domeniul de incertitudine sau proprietăţile statistice ale mărimilor independente şi calculează un tip de sensibilităţi medii, de forma $\langle \partial \Omega / \partial \alpha \rangle$, pe domeniul de incertitudine admis, stabilind astfel care mărimi independente au ce mai mare influenţă asupra celor dependente, atât datorit sensibilităţii lor, cât şi a incertitudinii. De asemenea, ASC ţine cont de efectul modificărilor simultane şi în domen largi ale mărimilor independente asupra sistemului.

Alegerea tipului de analiză de sensibilitate pentru studiu unui sistem este dictată de caracteristicile sistemulu particular şi ale mărimilor independente ale acestuia. Î general, ASL implică un volum mai mic de calcul decâ ASG şi rezultatele merg până la un nivel înalt de detaliere ASG va fi utilizată în situaţiile în care mărimil independente suferă modificări într-un domeniu apreciabil Utilitatea analizei de sensibilitate în studiul aprofundat a sistemelor (chimico-inginereşti) este suficient de bin cunoscută ([4],[5]).

2. Metode de calcul în ASG

În timp ce pentru ASL sunt puse la punct tehnici de calcu bine conturate şi în continuă dezvoltare, studiul ASG s află încă într-o fază incipientă, cu metode de abordar insuficient precizate. O cale pe care s-a pornit deja const în a aplica, ori de câte ori este posibil, tehnici cunoscute î ASL în studiul ASG, cu dezvoltările necesare. De la bu început însă, toţi cercetătorii sunt de acord că problemele puse de ASG sunt inerent dificile şi vor rămâne astfel.

Cea mai simplă metodă de abordare a ASG constă î soluţionarea repetată a modelului matematic al sistemulu pentru diverse valori ale mărimilor independente $\bar{\alpha}$, î domeniile lor de incertitudine, pentru a construi suprafeţel soluţiilor în spaţiul mărimilor independente, adic $\bar{\Omega}(t,\bar{\alpha})$ ca funcţii de $\bar{\alpha}$, parametrizate prin **t**. Alegere mărimilor independente $\bar{\alpha}$ care să fie modificate şi valorilor acestora în domeniile de incertitudine date, poat fi făcută printr-o procedură sistematică, folosind fie tehni de programare a experienţelor şi metoda suprafeţelor d răspuns, fie metoda Monte Carlo tradiţională. Pe măsură c numărul de mărimi independente α şi dependente Ω creşte această procedură devine însă greu de aplicat şi mar consumatoare de timp şi de efort de calcul. În consecinţ obiectivul declarat al setului de metode de calcul, specific ASG, este reducerea acestui efort de calcul la un nive rezonabil, care să le facă utilizabile practic. Metodel acestea au fost conturate, deocamdată, numai pentr cazuri particulare de sensibilitate elementară şi anum pentru sensibilitatea parametrică, adică $\bar{\alpha} \equiv \bar{q}$ (î particular, $\overline{\alpha} \equiv \overline{p}$) şi $\overline{\Omega} = \overline{\mathcal{O}}$, unde $\overline{\mathcal{O}}$ - vectorul observabilelor sistemului. O clasificare dată în [7] a metodelor de abordare a ASG deosebeşte următoarele categorii şi tehnici:

A. Metode statistice globale:

A1. Analiza statistică a sensibilităţii

A2. Analiza valorii aşteptate (The Expected Value Analysis, EVA)

A3. Metoda FAST (Fourier Amplitude Sensitivity Test Method).

B. Cartografierea globală a spaţiului parametrilor:

B.1. Tehnici de dezvoltări succesive în serii

B.2. Scalarea globală pe baza analizei unor parametri compuşi specifici

B.3. Tehnici de cartografiere a funcţiilor obiectiv

B.4. Tehnici bazate pe utilizarea grupurilor Lie.

În lucrarea de faţă se vor prezenta, pe scurt, aceste metode.

A. Metode statistice globale

În general, aceste metode urmăresc să pună în evidenţă modul în care abaterile statistice ale valorilor parametrilor $\overline{q}$ ai modelului sistemului se propagă în cursul regimului tranzitoriu şi intervin în valorile observabilelor.

Pentru a preciza baza de calcul a metodelor statistice globale se consideră modelul matematic al unui sistem, exprimat în termeni de observabile şi parametri, sub forma sistemului de ecuaţii diferenţiale:

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{O}}}{\partial t} = \overline{f}(\overline{\mathcal{O}}, \overline{q}) \qquad (6)$$

$$\overline{\mathcal{O}}(t_0) = \overline{\mathcal{O}}_0$$

unde vectorul observabilelor, $\overline{\mathcal{O}}$, are "**n**" elemente, iar cel al parametrilor generali, $\overline{q}$, "**m**" elemente. Pentru simplificare, fie **m = 2**,

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

Dacă valorile nominale ale parametrilor sunt $\underset{\sim}{q_1}$ şi $\underset{\sim}{q_2}$ şi se cunosc limitele (inferioare şi superioare) lor de variaţie, se defineşte un domeniu de incertitudine al parametrilor în planul $q_1 - q_2$, care are drept rezultat un interval de incertitudine pentru orice observabilă $\mathcal{O}_i$ (Figura 1) [8].

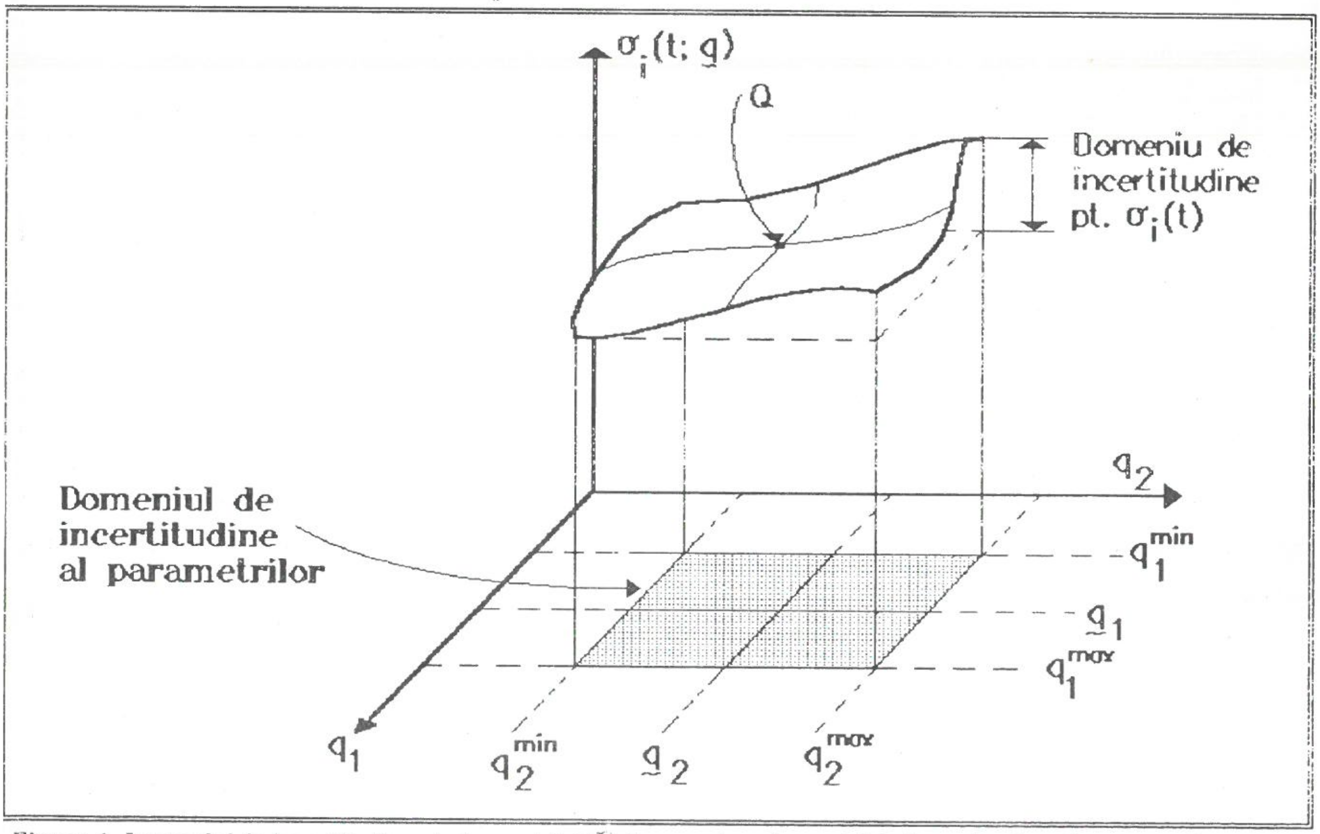

Figura 1. Intervalul de incertitudine al observabilei $\mathcal{O}_i$ în raport cu domeniul de incertitudine al parametrilor q_1 şi q_2.

Pentru fiecare valoare a timpului **t**, o componentă $\mathscr{O}_i$ a soluției sistemului de ecuații (6) este reprezentată în Figura 1 printr-o suprafață în spațiul $\{\mathscr{O}_i, q_1, q_2\}$. Punctul Q de pe această suprafață este mărimea soluției $\mathscr{O}_i$ la timpul **t** și $q_1 = \underset{\sim}{q}_1, q_2 = \underset{\sim}{q}_2$ (valori nominale). Coeficienții de sensibilitate locală, $\partial\mathscr{O}_i / \partial q_1$ și $\partial\mathscr{O}_i / \partial q_2$, evaluate la $\underset{\sim}{q}_1$ și $\underset{\sim}{q}_2$ sunt reprezentați prin pantele tangentelor la suprafața-soluție pe cele două coordonate **(q_1, q_2)** în punctul **Q** și conțin numai informații valabile pentru variații mici ale parametrilor în jurul valorilor lor nominale. Pentru evaluarea sensibilității globale, valabilă 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 $\mathscr{O}_i, p(\mathscr{O}_i)$ (Figura 2).

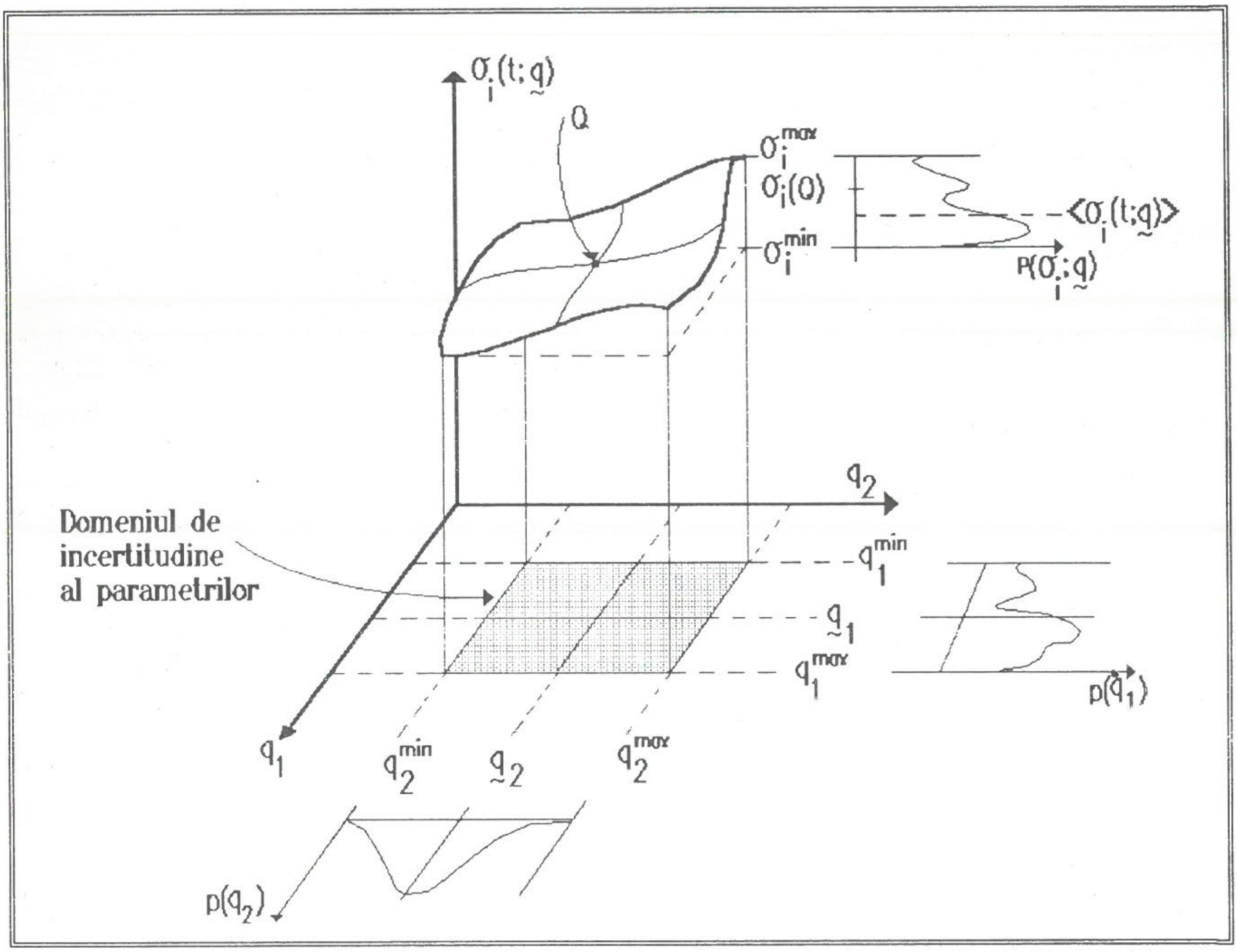

Figura 2. Distribuția de probabilitate a observabilei $\mathscr{O}_i$ corespunzătoare distribuțiilor de probabilitate ale parametrilor q_1 și q_2

În continuare, pot fi calculate proprietățile statistice:

- valoarea așteptată (medie)

$$\langle\mathscr{O}_i(t)\rangle = \int_{q_2^{min}}^{q_2^{max}} \int_{q_1^{min}}^{q_1^{max}} \mathscr{O}_i(t; q_1, q_2) p_1(q_1) p_2(q_2) dq_1 dq_2 \tag{7}$$

- varianța

$$\sigma_i^2(t) = \langle\mathscr{O}_i^2(t)\rangle - \langle\mathscr{O}_i(t)\rangle^2 \tag{8}$$

unde

$$\langle\mathscr{O}_i^2(t)\rangle = \int_{q_2^{min}}^{q_2^{max}} \int_{q_1^{min}}^{q_1^{max}} \mathscr{O}_i^2(t; q_1, q_2) p_1(q_1) p_2(q_2) dq_1 dq_2 \tag{9}$$

are rezolvă problema ASG.

)acă nu cunoaştem distribuţiile de probabilitate pentru q_1 i q_2 suprafaţa soluţiei $\mathcal{O}_i$ poate fi determinată prin calcule epetate, selectând puncte în domeniul de incertitudine l parametrilor q_1 şi q_2 şi soluţionând, de fiecare dată, modelul matematic (ec.6), pentru a determina $\mathcal{O}_i(t;q_1,q_2)$. Alegerea valorilor pentru q_1 şi q_2 se poate face aleator (metoda Monte Carlo), aşa cum prezentăm în Figura 3. Valorile lui $\mathcal{O}_i(t;\bar{q})$ astfel calculate sunt analizate apoi prin metode statistice obişnuite.

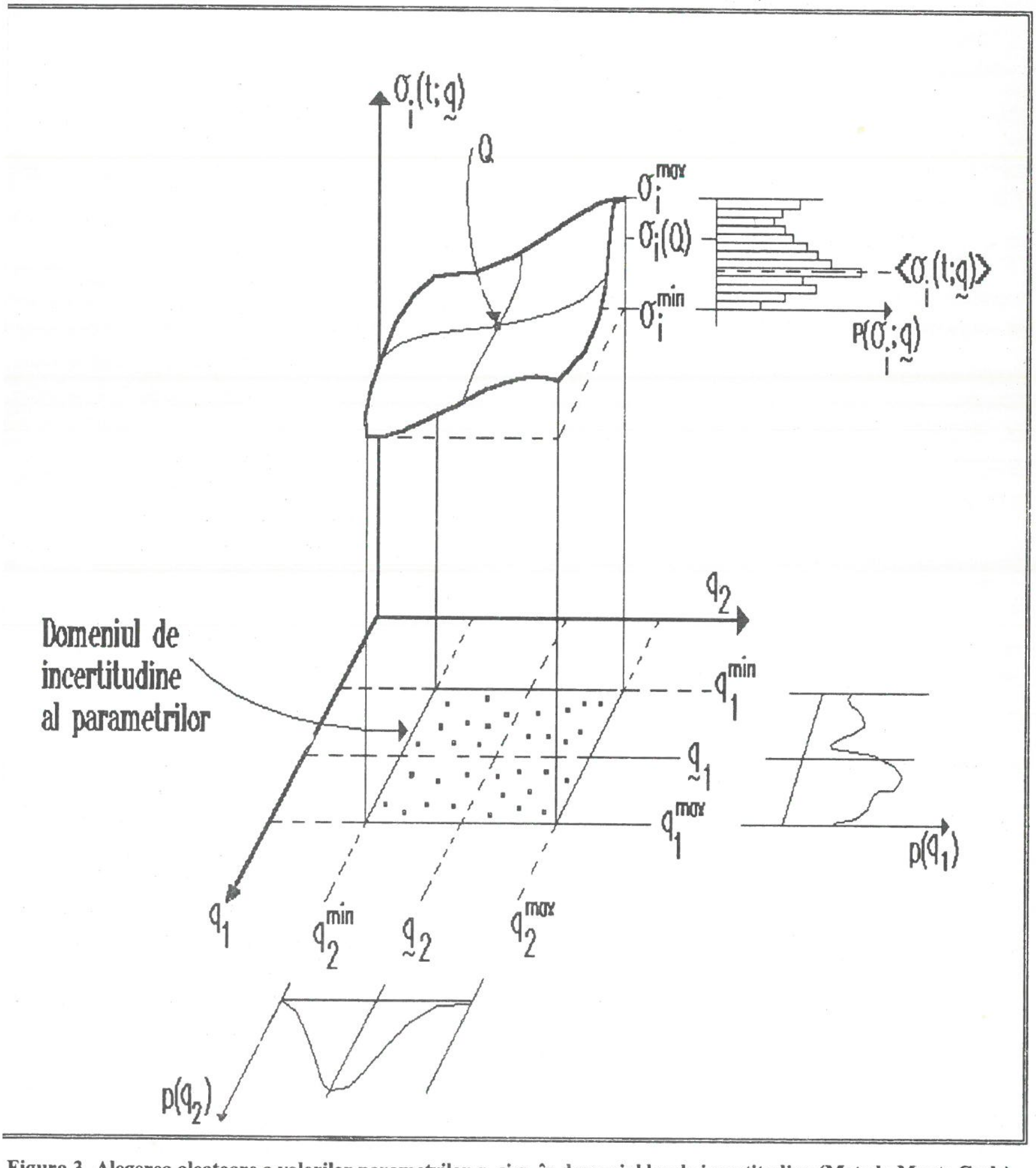

Figura 3. Alegerea aleatoare a valorilor parametrilor q_1 şi q_2 în domeniul lor de incertitudine (Metoda Monte Carlo).

A.1. Analiza statistică a sensibilităţii, ca procedură a ASG, constituie soluţionarea unei probleme tipice din analiza statistică, enunţată astfel: "cunoscută fiind funcţia de distribuţie a probabilităţilor observabilelor şi parametrilor la momentul iniţial, $\mathbf{p}(0, \overline{\mathcal{O}}, \overline{q})$, să se calculeze funcţia de distribuţie a probabilităţilor $\mathbf{p}(t, \overline{\mathcal{O}}, \overline{q})$ ca funcţie de timp." [9] Funcţia de distribuţie a probabilităţilor este soluţia sistemului de ecuaţii:

$$\frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{f} \cdot \overline{p}) = \overline{0} \tag{10}$$

unde operatorul gradient ∇ are componentele $\nabla_i = \dfrac{\partial}{\partial \mathcal{O}_i}$. Utilizând relaţia de calcul a mediei oricărei funcţii de observabile şi parametrii $\mathbf{g}(\overline{\mathcal{O}}, \overline{q})$, particularizată în ecuaţia (7)

$$\langle g(t) \rangle = \iint \overline{p}(t, \overline{\mathcal{O}}, \overline{q})\ g(\overline{\mathcal{O}}, \overline{q}) d\overline{\mathcal{O}}\, d\overline{q} \tag{11}$$

se calculează matricea de covarianţă observabile-observabile $\overline{C}^{\mathcal{O}\mathcal{O}}$ şi matricea de covarianţă observabile-parametri $\overline{C}^{\mathcal{O}q}$:

$$\overline{C}^{\mathcal{O}\mathcal{O}} = \langle \left(\overline{\mathcal{O}} - \langle \overline{\mathcal{O}} \rangle\right) \left(\overline{\mathcal{O}} - \langle \overline{\mathcal{O}} \rangle\right) \rangle \tag{12}$$

$$\overline{C}^{\mathcal{O}q} = \langle \left(\overline{\mathcal{O}} - \langle \overline{\mathcal{O}} \rangle\right) \left(\overline{q} - \langle \overline{q} \rangle\right) \rangle \tag{13}$$

care conţin toate informaţiile căutate. Sunt cunoscute puţine aplicaţii ale acestei metode, una dintre ele referindu-se la o problemă de combustie (Rabitz H. Sensitivity Analysis of Combustion System, Com. pers., 1986).

A.2. Analiza valorii aşteptate (EVA), este o metodă asemănătoare celei precedente, deosebirea dintre ele constând în faptul că EVA calculează observabilele medii şi matricele lor de covarianţă, fără a determina, mai întâi, funcţiile de distribuţie a probabilităţilor totale. Acest avantaj se obţine însă cu preţul introducerii unor aproximări. Astfel, pentru vectorii $\overline{q}$ şi $\overline{\mathcal{O}}$ vom lua formele:

$$\overline{q} = \langle \overline{q} \rangle + \Delta \overline{q}$$
$$\overline{\mathcal{O}} = \langle \overline{\mathcal{O}} \rangle + \Delta \overline{\mathcal{O}}$$

unde $\langle \overline{q} \rangle$ şi $\langle \overline{\mathcal{O}} \rangle$ reprezintă valori nominale ale vectorului parametrilor, respectiv observabilelor şi vom dezvolta membrul drept al ecuaţiei (6) în serie Taylor, obţinând:

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{O}}}{\partial t} = \overline{f}\left(\langle \overline{\mathcal{O}} \rangle + \Delta \overline{\mathcal{O}}, \langle \overline{q} \rangle + \Delta \overline{q}\right) \cong \overline{f}\left(\langle \overline{\mathcal{O}} \rangle, \langle \overline{q} \rangle\right) + \frac{\partial \overline{f}}{\partial \overline{\mathcal{O}}} \Delta \overline{\mathcal{O}} + \frac{\partial \overline{f}}{\partial \overline{q}} \Delta \overline{q} + \frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 \overline{f}}{\partial \overline{\mathcal{O}} \partial \overline{\mathcal{O}}} \Delta \overline{\mathcal{O}} \Delta \overline{\mathcal{O}} + \frac{\partial^2 \overline{f}}{\partial \overline{\mathcal{O}} \partial \overline{q}} \Delta \overline{\mathcal{O}} \Delta \overline{q} + \frac{\partial^2 \overline{f}}{\partial \overline{q} \partial \overline{q}} \Delta \overline{q} \Delta \overline{q} \right] + \ldots$$

În practică, ne oprim la termenul de ordine al doilea. Luâ în considerare valoarea de aşteptare a ecuaţiei (14) vo elimina termenii liniari din membrul drept şi vom constı astfel o ecuaţie diferenţială în raport cu traiectoı observabilelor medii, cuplată cu traiectoriile matricelor covarianţă, ecuaţiile (12),(13). Ecuaţiile diferenţiale derivate ordinare pentru a obţine observabilele medii covarianţele acestora vor forma un set de ecuaţii cupla împreună cu cele ale parametrilor. Tocmai această cupla dintre ecuaţii reprezintă trăsătura caracteristică a metod discutate şi este cea care ne furnizează informa suplimentare asupra sensibilităţii sistemului. compensaţie însă, creşte numărul de ecuaţii diferenţial dar acest număr nu ajunge la valori prohibitive.

A.3. Metoda FAST ([10],[11]). Ideea esenţială care stă baza acestei metode constă în înlocuirea fiecărui paramet printr-o funcţie de o nouă variabilă, **s**:

$$q_i \rightarrow G_i(\sin(\omega_i \cdot s)) \tag{1:}$$

unde $\omega_1, \omega_2, \ldots$, ar trebui să fie, în mod ideal, un s nemărginit de frecvenţe. Funcţiile $\mathbf{G_i}$ sunt alese traiectorii de acoperire a acestui spaţiu astfel încât atur când **s** variază, parametrii $\mathbf{q_i}$ să ia valori în toate regiuni spaţiului parametrilor. Se poate determina o ecuaţ diferenţială pentru funcţiile G_i pe baza cunoaşte funcţiilor de distribuţie a probabilităţilor parametril nominali ai sistemului. Rezultatul înlocuirii parametrilor cu expresia (15) constă în introducerea unei noi variabile în observabile, $\mathcal{O}_i(t) \rightarrow \mathcal{O}_i(t, s)$. Informaţiile căuta despre sensibilitate, din punct de vedere statistic, se obţ apoi dezvoltând în serii Fourier noile observabile, în rapo cu variabila **s**. Calculele cerute de aplicarea acestei meto pot deveni consumatoare apreciabile de timp şi de efort calcul, deoarece sistemul original de ecuaţii trebuie să integrat de un număr de ori, corespunzător numărului puncte de discretizare a variabilei **s**, necesar calculării coeficienților seriei Fourier. Cu toate acestea, cele mai multe aplicații ale ASG, îndeosebi cele referitoare la sisteme chimice, utilizează **metoda FAST.** ([12],[13])

B. Cartografierea globală a spațiului parametrilor

Metoda cea mai simplă de cartografiere, dar și cea mai greoaie și banală, constă în simpla repetare a calculelor, dar este evident că ea nu poate fi luată în considerare din motive arătate mai sus. Alături de această tehnică sunt indicate în [7] alte câteva, pe care le trecem în revistă.

B.1. Tehnici bazate pe dezvoltări succesive în serii

Plecând de la ASL, tehnica globală cea mai directă ar trebui să folosească avantajul disponibilității gradienților de sensibilitate, obținuți, de exemplu, prin dezvoltare în serie Taylor a soluției modelului matematic.

$$\overline{\mathcal{O}}(\bar{q}+\Delta\bar{q}) \cong \overline{\mathcal{O}}(\bar{q}) + \frac{\partial\overline{\mathcal{O}}}{\partial\bar{q}}\Delta\bar{q} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\overline{\mathcal{O}}}{\partial\bar{q}\partial\bar{q}}\Delta\bar{q}\Delta\bar{q}+\ldots \quad (16)$$

Pentru variații $\Delta\bar{q}$ suficient de mici această metodă ar putea da rezultate, dar, pentru variații ale parametrilor $\bar{q}$ în domenii largi, nu avem nici o garanție că seriile de forma (16) converg. O posibilă abordare a cartografierii globale luând, ca punct de plecare ecuația (16) ar implica reexprimarea seriilor ca un polinom rațional în variația incrementală a parametrului

$$\mathcal{O}_i(\bar{q}+\Delta\bar{q}) \cong \frac{P_N{}^i(\overline{\Delta q})}{Q_M{}^i(\overline{\Delta q})} \quad (17)$$

unde numărătorul și numitorul sunt polinoame de ordinul N, respectiv M. Au fost aplicați în acest scop, aproximanți Padé, într-o gamă largă de probleme de cinetică chimică. Dificultatea principală, legată de utilizarea acestor aproximanți, constă în calculul gradienților de sensibilitate locali, de ordin mai înalt decât unu.

B.2. Scalarea globală pe baza analizei unor parametri compuși specifici

Considerăm cazul general în care observabilele $\overline{\mathcal{O}}$ sunt funcții, atât de timp, **t** cât și de poziție, prin vectorul de poziție $\bar{r}$, și bineînțeles, de parametrii generali $\bar{q}$, $\overline{\mathcal{O}}(\bar{r},t,\bar{q})$. Examinând dependența observabilelor $\mathcal{O}$ de $\bar{r}$, și **t**, se identifică un set de parametri compuși, specifici $\bar{\beta}(\bar{q})$ și o formă funcțională explicită $\tilde{\mathcal{O}}(\bar{r},t,\bar{\beta})$ astfel să se realizeze echivalența:

$$\overline{\mathcal{O}}(\bar{r},t,\bar{q}) \equiv \tilde{\mathcal{O}}(\bar{r},t,\bar{\beta}(\bar{q})) \quad (18)$$

Pentru $\bar{q} \to \bar{q} + \Delta\bar{q}$, identitatea (18) devine:

$$\overline{\mathcal{O}}(\bar{r},t,\bar{q}+\overline{\Delta q}) \cong \;\; (\bar{r},t,\bar{\beta}(\bar{q}+\Delta\bar{q})) \quad (19)$$

Dezvoltăm parametrul compus $\bar{\beta}$

$$\bar{\beta}(\bar{q}+\Delta\bar{q}) \cong \bar{\beta}(\bar{q}) + \frac{\partial\bar{\beta}}{\partial q}\Delta q \quad (20)$$

și introducem ecuația (20) în (19) pentru a obține, în final, o expresie neliniară de scalare în raport cu parametrii $\bar{q}$, deosebită de cea din ecuația (16) utilizând aceleași informații de ordinul întâi.

O astfel de metodă a fost utilizată, cu bune rezultate în studiul sensibilității flamelor oscilante, unde parametrii influențează puternic frecvența procesului.

B.3. Tehnici de cartografiere a funcțiilor obiectiv.

Și aceste tehnici își au rădăcina în metode aplicate în ASL. Deși în cazul general se operează cu funcționale, pentru simplitate se consideră o funcție obiectiv de observabile $\overline{\mathcal{O}}$:

$$F \equiv F[\overline{\mathcal{O}}(\bar{q},t)] \quad (21)$$

în care numai doi parametri q_i și q_j sunt variați, ceilalți rămânând la valori constante. Scopul modificării acestor doi parametri este determinarea unei relații $q_i = q_i(q_j)$ astfel încât să fie păstrat optimul funcției obiectiv. Optimul funcției obiectiv (21) implică:

$$dF = \sum_{l}\left[\frac{\partial F}{\partial\mathcal{O}_l}\frac{\partial\mathcal{O}_l}{\partial q_i}dq_i + \frac{\partial F}{\partial\mathcal{O}_l}\frac{\partial\mathcal{O}_l}{\partial q_j}dq_j\right] = 0 \quad (22)$$

de unde se obține ecuația de legătură între q_i și q_j:

$$\frac{dq_i}{dq_j} = -\frac{\left(\sum_l \frac{\partial F}{\partial\mathcal{O}_l}\frac{\partial\mathcal{O}_l}{\partial q_i}\right)}{\left(\sum_l \frac{\partial F}{\partial\mathcal{O}_l}\frac{\partial\mathcal{O}_l}{\partial q_j}\right)} \quad (23)$$

Vom observa că relațiile de tipul $\mathbf{dq_i/dq_j}$ sunt caracteristice funcțiilor de sensibilitate derivată [3]. Cartografierea globală se obține soluționând ecuația (23) simultan cu ecuațiile de sensibilitate locală în raport cu $\mathbf{q_i}$ și $\mathbf{q_j}$ și cu ecuațiile modelului matematic. Rezultatul este o traiectorie în spațiul $\mathbf{q_i}$ și $\mathbf{q_j}$ cu respectarea restricției (21).

B.4. Tehnici bazate pe utilizarea grupurilor Lie ([14],[15])

Utilizarea teoriei grupurilor Lie pentru cartografierea globală a spațiului parametrilor este cea mai recentă abordare a acestei probleme și cu gradul de generalitate cel mai înalt [14]. Se reamintește că se urmărește trasarea hărții soluțiilor modelului matematic într-o regiune finită a spațiului parametrilor. Se va extinde spațiul la care se face referire, incluzând în el toți parametrii, coordonatele spațiale și temporale și observabilele sistemului. În continuare, se ia în considerare numai modelul pur temporal. Punctul de plecare este sistemul de ecuații diferențiale (6). Se caută transformări care realizează trecerea:

$$(\bar{q},\bar{\mathcal{O}},t) \rightarrow (\bar{q}',\bar{\mathcal{O}}',t') \tag{24}$$

și astfel, în termenii noilor variabile, se păstrează forma ecuației (6):

$$\frac{\partial \bar{\mathcal{O}}'}{\partial t'} = \bar{f}'(\bar{\mathcal{O}}',\bar{q}') \tag{25}$$

Pentru a îndeplini această sarcină se definește un operator diferențial

$$U = \sum_j \psi_j(\bar{q})\frac{\partial}{\partial q_j} + \sum_i \xi_i(\bar{q},\bar{\mathcal{O}},t)\frac{\partial}{\partial \mathcal{O}_i} + \rho(\bar{q},\bar{\mathcal{O}},t)\frac{\partial}{\partial t} \tag{26}$$

cu acțiune asupra întregului spațiu al tuturor variabilelor. Acest operator va realiza o transformare infinitezimală, corespunzătoare ecuației (24):

$$\begin{aligned} \bar{q}' &= (1 + daU)\bar{q} \\ \bar{\mathcal{O}}' &= (1 + daU)\bar{\mathcal{O}} \\ t' &= (1 + daU)t \end{aligned} \tag{27}$$

unde "a" are semnificația introducerii parametrilor de grup. Se remarcă faptul că operatorul **T = exp(aU)** va realiza aceeași sarcină ca operatorul **U**. Urmează determinarea funcțiilor-coeficienți ψ,ξ,ρ ce intră în ecuația (27) punând condiția prezervării formei ecuației (6). Se obține ([7]):

$$\frac{\partial \xi_i}{\partial t} - \sum_i \frac{\partial f_j}{\partial \mathcal{O}_i}\xi_i - \sum_l \psi_l \frac{\partial f_i}{\partial q_l} = 0 \tag{28}$$

Legătura ecuației (28) cu analiza de sensibilitate poate fi pusă în evidență operând asupra ecuației (6) cu $v = \sum_l \psi_l \frac{\partial}{\partial q_l}$ și introducând relația $\xi_j \rightarrow v\mathcal{O}_j$.

Elemente de detaliu privind utilizarea grupurilor Lie în ASG a sistemelor descrise prin ecuații diferențiale cu derivate ordinare sunt date în ([13],[15]).

3. Concluzii

Metodele de abordare a problemelor analizei sensibilității globale a sistemelor dinamice se află, încă, într-un stadiu incipient de conturare și precizare, dată fiind noutatea domeniului.

Aplicațiile funcțiilor de sensibilitate globală, puține deocamdată, nu pot diferi, însă, de cele deja destul de bine cunoscute ale funcțiilor de sensibilitate locală ([4],[5]): estimarea erorilor și a programării lor în cercetările experimentale și planificarea cercetărilor experimentale [16], aprecierea fidelității și preciziei modelelor matematice ale proceselor, alegerea adecvată a mărimilor de comandă ([3],[17]), diagnosticarea tehnică a sistemelor dinamice ([1],[18]), îmbunătățirea conducerii proceselor după criterii de optimalitate și sensibilitate. Tehnica utilizării grupurilor Lie în analiza sensibilității globale este aplicabilă în determinarea în spațiul de reglare a unui proces, a regiunii în care se prezervă stabilitatea procesului.

Bibliografie

1. **UNGUREANU , ŞT:** Sensibilitatea sistemelor dinamice, Editura Tehnică, Bucureşti, 1988.
2. **UNGUREANU, ŞT.** (coautor): Handbook of Heat and Mass Transfer, Volume 3, Catalysis, Kinetics and Reactor Engineering, (Cap. 27. Sensitivity Analysis of Chemical Reactors: General Concepts

and Applications, Cap. 28. Direct Sensitivity Analysis of Chemical Reactors, Cap. 29. The Inverse Sensitivity Analysis of Chemical Reactors), P. Cheremisino ff. Editor, GULF Publishing Co., Huston, London, Paris, Tokio, 1989.

UNGUREANU, ŞT., PETRILĂ , C., MAREŞ, A. and RABITZ , H.: Elementary Sensitivity of a Chemical Reactor Described by a Quasihomogeneous Bidimensional Model. În: Chem. Eng. Sci., Vol. 49, No. 7, 1994, pp. 1015-1024.

UNGUREANU, ŞT., CURTEANU, S.: Analiza de sensibilitate a sistemelor dinamice. I. Aplicaţii şi perspective. În: Rev. Chim. (Bucureşti), Vol. 43, Nr. 9, 1992, pp. 571-575.

UNGUREANU, ŞT., CURTEANU, S.: Analiza de sensibilitate a sistemelor dinamice. II. Metoda funcţiei Green. Comparaţie cu metoda directă. În: Rev. Chim. (Bucureşti), Vol. 44, Nr. 9, 1993, pp. 742-749.

UNGUREANU , ŞT.: Aplicaţii ale metodelor cibernetice în analiza sensibilităţii sistemelor chimico-inginereşti. În: Cibernetica. Consonantica în relaţie cu ştiinţa contemporană, Acad. de Cibernetică Generală "Ştefan Odobleja", Ed. NAGARD, Milano, 1989, pp. 248-255.

RABITZ, H.: Local and Global Parametric Analysis of Reacting Flows. În: Physica D (Amsterdam) 20D, (1), 1986, pp. 67-81.

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

CONSTANZA , V. and SEINFELD , J.H. Stochastic Sensitivity Analysis in Chemical Kinetics. În: J. Chem. Phys., Vol. 74, 1981, pp. 3852.

10. **CUKIER, R.I., LEVINE, H.B., SHULER, K.E.:** Nonlinear Sensitivity Analysis of Multiparameter Model Systems. In: J. Comp. Phys., Vol. 26, No. 1, 1978, pp. 1-42.
11. **CUKIER, R.I., SCHAIBLY, I.H., SHULER, K.E:** Study of the Sensitivity of Coupled Reaction Systems to Uncertainities in Rate Coefficients. III. Analysis of the Approximations. In: J. Comp. Phys., Vol. 63, 1975, pp. 1140.
12. **KODA M., McRAE, G.J., SEINFELD, J.H.:** Automatic Sensitivity Analysis of Kinetic Mechanisms. In: Int. J. of Chem. Kin., Vol. XI, 1979, pp. 427-444.
13. **FALLS, A. H., McRAE, G.J., SEINFELD, J.H.:** Sensitivity and Uncertainty of Reaction Mechanisms for Photochemical Air Pollution. In: Int. J. of Chem. Kin., Vol. XI, 1979, pp. 1137-62.
14. **WULFMAN, C., RABITZ, H.:** A Lie Approach to Global Sensitivity Analysis of Systems Described by Ordinary Differential Equations. In: J. Phys. Chem., Vol. 90, No. 10, 1986, pp. 2264-72.
15. **RABITZ, H., KRAMER, M., DACOL, D. :** Sensitivity Analysis in Chemical Kinetics.In: Ann. Rev. Phys. Chem, Vol. 34, 1983, pp. 419-61.
16. **ENO, L., BEUMEE, I., RABITZ,H.** : Sensitivity Analysis of Experimental Data. In: Appl. Math. Comput., Vol. 16, 1985, pp.153-163.
17. **UNGUREANU, ŞT., PETRILĂ, C.:** Sensitivity Analysis of a Chemical Reactor with Respect to the Control Inputs. În: Int. Chem. Engineering, American Inst. of Chem. Engineers, Vol. 25, No.4, 1985, pp. 693-702.
18. **UNGUREANU, ŞT.:** Diagnosticarea tehnică a unui reactor chimic prin analiza sensibilităţii inverse. În: Rev. Chim. (Bucureşti), Vol. 35, Nr. 12, 1984, pp. 1097-1103.