

Solutii numerice pentru modelarea statistica a procesului de cracare catalitica

Conf.dr.ing. Cristian PATRASCIOIU

Catedra Automatica si Calculatoare, Universitatea " Petrol-Gaze" Ploiesti

Sef lucr.dr.mat. Cristian MARINOIU

Catedra de Informatica, Universitatea "Petrol-Gaze" Ploiesti

Prezenta lucrare trateaza unele aspecte matematice ale modelarii statistice a procesului de cracare catalitica. Procesul de cracare catalitica este prezentat sistemic, fiind evidentiate variabilele de iesire, perturbatiile si comenzile. Expresia concreta a modelului matematic este dezvoltata cu ajutorul operatorului sweep. Pe baza aspectelor teoretice prezentate, a fost dezvoltat un sistem de programe ce permite determinarea numerica a modelelor matematice ale sistemelor chimice complexe, în vederea conducerii automate a acestora.

Cuvinte cheie: reglare, model matematic, regresie, operator sweep, algoritm Garside.

Reglarea evoluata a proceselor chimice nu poate fi realizata fara existenta modelelor matematice ale proceselor. Prin intermediu modelului matematic se exprima dependenta dintre marimile de iesire, marimile de comanda si perturbatiile procesului:

$$F(\mathbf{U}, \mathbf{P}, \mathbf{Y}) = 0 \quad (1)$$

în care $\mathbf{U}$ reprezinta vectorul marimilor de comanda; $\mathbf{P}$ - vectorul perturbatiilor; $\mathbf{Y}$ - vectorul marimilor de iesire.

Una din caile de realizare a unor modele matematice simple, dar care sa reflecte cu acuratete procesul chimic, o reprezinta metodele statistice.

Analiza de regresie, componenta a metodelor statistice, urmareste determinarea parametrilor unor modele matematice bazate pe relatii de aproximare propuse [4]. Gradul de aproximare al modelului matematic, model denumit în cele ce urmeaza *ecuatie de regresie*, nu depinde numai de datele experimentale ci si de structura ecuatiei de regresie. Procedeu folosit pentru determinarea coeficientilor din structura ecuatiei de regresie este metoda celor mai mici patrati

iar pentru verificarea adecvantei ecuatiei de regresie se utilizeaza criteriile statistice *dispersia* si *abaterea standard*.

1. Formularea problemei

Procesul de cracare catalitica este destinat în principal fabricarii de benzine si secundar obtinerii de olefine pentru industria petrochimica. Una din cele mai raspândite instalatii de cracare catalitica a fost dezvoltata de firma UOP a51. Perturbatiile procesului sunt asociate materiei prime:

- densitate d_{mp} ;
- temperatura medie volumetrica T_{mv} ;
- continutul de sulf C_{sulf}

Comenzile procesului, figura 1, sunt reprezentate prin [1]:

- debitul de materie prima G_{mp} ;
- temperatura materiei prime la iesirea din cuptor T_{mp} ;
- temperatura catalizatorului în regenerator T_{reg} ;
- raportul de contactare catalizator/materie prima, a .

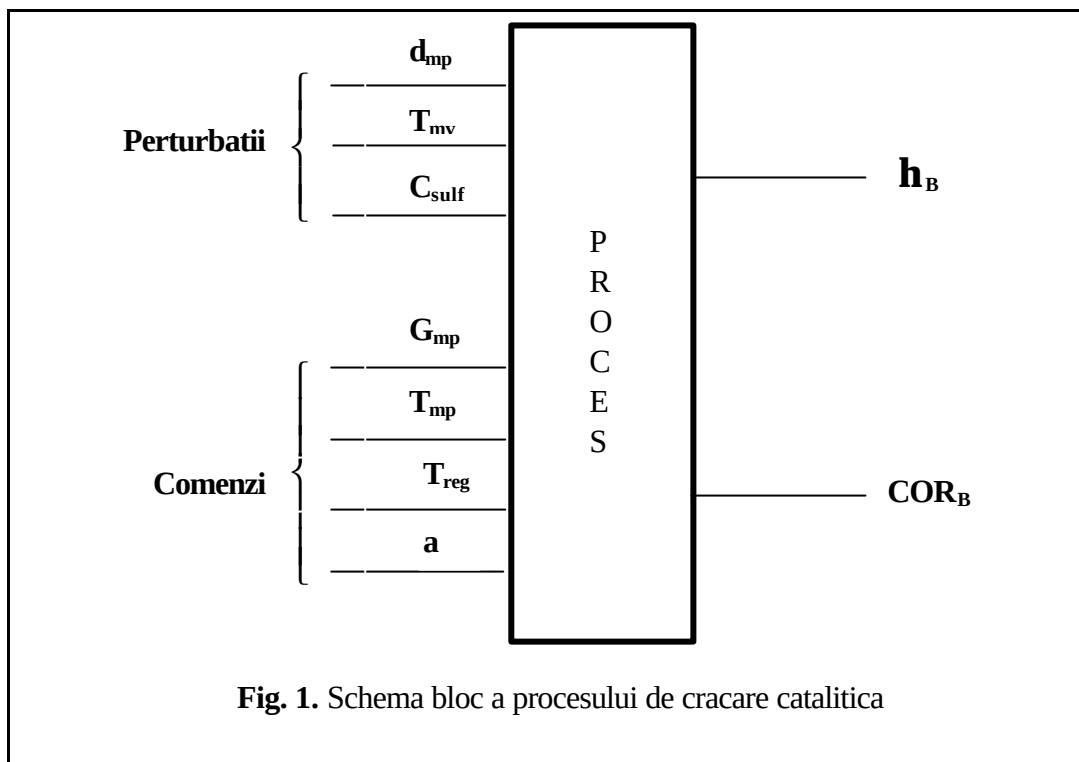


Fig. 1. Schema bloc a procesului de cracare catalitica

Procesul de cracare catalitica este un sistem cu parametri distribuiti, caracterizat printr-o complexitate deosebita, generata de:

- multitudinea de componente chimici din diferite clase de hidrocarburi;
- cinetica de reactie ce include reactii primare si secundare;
- mecanismul de reactie catalitic, în care activitatea si selectivitatea catalizatorului

se modifica rapid si continuu.

Aceste considerente au condus la elaborarea unor modele matematice dezvoltate, de complexitate sporita, care însa nu pot fi utilizate în conducerea procesului de cracare catalitica.

Modelul matematic simplificat al procesului de cracare catalitica, propus de autori, se bazeaza pe functii de aproximare pentru fiecare din variabilele de iesire:

$$\eta_B = f_1(G_{mp}, T_{mv}, d_{mp}, C_{sulf}, T_{mp}, T_{reg}, a); \quad (2)$$

$$COR = f_2(G_{mp}, T_{mv}, d_{mp}, C_{sulf}, T_{mp}, T_{reg}, a). \quad (3)$$

Pentru o instalatie de cracare catalitica, dintr-o perioada de 90 de zile de functionare a fost selectat un set de 17 zile, cuprinzând date de operare consistente (tabelul 1) [1]. Aceste date acopera domeniul de variatie a marimilor de intrare si iesire a procesului descris în figura 1.

2. Tratarea matematica

Pentru o tratare unitara a functiilor de aproximare (2) si (3) se propun structuri matematice neliniare, în raport cu variabilele tehnologice ce definesc marimile de intrare ale sistemului chimic. Introducând variabilele

$$\begin{cases} z_1 = G_{mp} \\ z_2 = T_{mv} \\ z_3 = d_{mp} \\ z_4 = C_{sulf} \\ z_5 = T_{mp} \\ z_6 = T_{reg} \\ z_7 = a \end{cases} \quad (4) \quad \text{si} \quad \begin{cases} y_1 = \eta_B \\ y_2 = COR \end{cases} \quad (5)$$

relatiile (2) si (3) se pot formula sub forma

$$y_j = f_j(z_1, z_2, z_3, z_4, z_5, z_6, z_7), \quad j = 1, 2. \quad (6)$$

Funcțiile f vor fi cautate în multimea funcțiilor liniare în parametri, dar neliniare în variabilele

de intrare (variabile tehnologice), având forma generala

$$y = \sum_{i=1}^p \beta_i z_i + \sum_{i=p+1}^n \beta_i g_i(z_1, z_2, \dots, z_p) + e \quad (7)$$

în care p reprezinta numarul marimilor de intrare ale sistemului chimic (perturbatii si comenzi); n – numarul total de variabile ale modelului (6); $\beta^T = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)$ – vectorul parametrilor necunoscuti; $g_i(z_1, z_2, \dots, z_p)$ $i = p+1, \dots, n$ – functii neliniare în variabilele de intrare a sistemului chimic $z_1, z_2, \dots, z_p$; e – erorile aleatoare ale modelului. Pentru funcțiile g_i se pot alege combinatii ale variabilelor tehnologice observabile: functii produs, functii logaritmice, functii putere, functii cât.

Modelul matematic (7) este adus la forma generala $y = Z\beta + e$ (8),

unde $y(m \times 1)$ este vectorul observatiilor variabilei de iesire a sistemului chimic;

$Z(m \times n)$ este matricea observatiilor pentru variabilele independente, rang $(Z) = n$;

$\beta(n \times 1)$ este vectorul parametrilor necunoscuti;

$e(m \times 1)$ vectorul erorilor cu media $E(e) = 0$ si matricea de covarianta $\text{cov}(y, y^T) = \sigma^2 I_m$, σ^2 fiind dispersia necunoscuta a erorilor, iar matricea I_m reprezentând matricea unitate de ordin m .

În legatura cu modelul (8), principala problema care trebuie rezolvata este obtinerea unor estimatori pentru parametri necunoscuti β si σ .

Metoda clasica consta în a considera vectorul $\hat{\beta}$ ca estimator pentru β , vector obtinut ca solutie a problemei $\min_{\beta} S(y, \beta)$, unde

$$S(y, \beta) = \|Z\beta - y\|^2 \quad (9).$$

Aceasta problema de minim se reduce la rezolvarea sistemului de ecuatii normale

$$Z^T Z \beta = Z^T y \quad (10)$$

obtinut prin derivarea functiei $S(y, \beta)$ în raport cu fiecare componenta β_j a vectorului β [2].

În consecinta, se obtin urmasorii estimatori nedeplasati:

- pentru parametrul β , estimatorul nedeplasat are forma $\hat{\beta} = (Z^T Z)^{-1} Z^T y$; (11)

- pentru varianta σ^2 , estimatorul nedeplasat are expresia:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{S(y, \hat{\beta})}{m - n}; \quad (12)$$

- pentru matricea de covarianta $\text{cov}(\hat{\beta}, \hat{\beta}^T)$ a estimatorului $\hat{\beta}$, estimatorul nedeplasat este dat de expresia

$$\text{cov}(\hat{\beta}, \hat{\beta}^T) = \hat{\sigma}^2 (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1}. \quad (13)$$

Se observa ca rezolvarea modelului (8) se reduce la rezolvarea sistemului de ecuatii liniare (10). Una din metodele frecvent implementate în pachetele software statistice este metoda *operatorului sweep*. Aceasta

este o metoda relativ usor de implementat, asigurând în acelasi timp acurateea calculului si determinarea rapida a tuturor functiilor de aproximare asociate modelului matematic al unui sistem tehnic.

Tabelul 1 - Datele experimentale asociate instalatiei de cracare catalitica

Nr. crt.	Marimi de iesire		Perturbatii (materia prima)			Comenzi			
	Randament benzina [% masa]	Cifra octanica COR	Densitate	Temperatura medie volumetrica	Continut sulf [% masa]	Debit alimentare [t/h]	Temperatura alimentare [° C]	Temperatura catalizator regenerat	Raport de contactare
1	52,3	91,2	0,9007	442,0	0,38	183,4	316	732,0	4,6
2	52,8	90,8	0,9029	441,5	0,25	183,1	311	730,0	4,5
3	52,8	90,6	0,9028	434,4	0,25	184,3	310	732,0	4,7
4	51,4	90,4	0,9043	448,6	0,29	189,7	310	725,0	4,6
5	52,4	90,6	0,9009	442,5	0,38	183,8	320	731,0	4,7
6	52,1	90,6	0,9039	440,0	0,25	182,4	310	734,0	4,5
7	52,8	91,0	0,9042	445,8	0,38	182,6	312	728,5	4,6
8	52,2	90,7	0,9050	445,0	0,32	183,7	319	733,0	4,5
9	52,8	90,5	0,9007	436,8	0,39	182,8	315	732,0	4,6
10	51,8	91,0	0,9014	440,2	0,28	182,7	316	733,0	4,5
11	52,3	91,0	0,9004	443,2	0,49	187,9	316	726,0	4,5
12	52,0	91,0	0,9020	436,0	0,23	191,1	324	734,0	4,4
13	53,0	90,5	0,9030	441,5	0,25	184,6	311	733,0	4,9
14	51,3	91,0	0,9068	449,6	0,43	182,2	314	727,0	4,6
15	52,7	92,0	0,9033	442,4	0,36	182,7	312	732,0	4,5
16	43,7	91,9	0,9217	438,2	2,14	173,6	314	727,5	4,8
17	45,4	92,5	0,9247	438,4	2,19	188,7	319	727,0	5,0

3. Metoda operatorului sweep

Pentru o matrice $\mathbf{A}(n \times n)$ nesingulara, operatorul *sweep* de pivot $A_{kk} \neq 0$ este definit ca o suita de operatii elementare de tipul:

$$\tilde{A}_{kk} = 1/A_{kk}, \quad (14)$$

$$\tilde{A}_{kj} = A_{kj}/A_{kk}, \quad (15)$$

$$\tilde{A}_{ik} = -A_{ik}/A_{kk}, \quad (16)$$

$$\tilde{A}_{ij} = A_{ij} - A_{ik} \cdot A_{kj}/A_{kk}, \quad i \neq k, j \neq k, \quad (17)$$

în urma carora se obtine matricea $\tilde{\mathbf{A}} = (\tilde{A}_{ij})$, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq n$ [3].

Operatia va fi simbolizata prin $\mathbf{A} \xrightarrow{k} \tilde{\mathbf{A}}$.

Daca matricea patrata $\mathbf{A}(n \times n)$ este partitionata astfel $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix}$, unde $\mathbf{A}_{11}$ este matrice nesingulara de ordinul k , aplicarea succesiva a operatorului *sweep* pentru elementele diagonale ale lui $\mathbf{A}_{11}$ produce transformarea [6]

$$\mathbf{A} \xrightarrow{S(1 \dots k)} \tilde{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \\ -\mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Utilizarea operatorului *sweep* în rezolva-rea regresiei liniare presupune formarea matricei extinse:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z}^T \mathbf{Z} & \mathbf{Z}^T \mathbf{y} \\ \mathbf{y}^T \mathbf{Z} & \mathbf{y}^T \mathbf{y} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

$$\tilde{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1} & (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{Z}^T \mathbf{y} \\ -\mathbf{y}^T \mathbf{Z} (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1} & \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \mathbf{Z} (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{Z}^T \mathbf{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1} & \hat{\beta} \\ -\hat{\beta} & (m-n)\hat{\sigma}^2 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Prin forma (20) sunt disponibile următoarele rezultate:

- estimatorul $\hat{\beta}$ pentru β ;
- estimatorul $\hat{\sigma}^2$ pentru σ^2 ;
- estimatorul $\hat{\sigma}^2 (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1}$ pentru matricea de covarianța a estimatorului $\hat{\beta}$.

Algoritmul sweep cuprinde calculele de pivotare sweep asupra unei matrici $\mathbf{A}(p \times p)$, structura algoritmului fiind următoarea:

1. Atribuie $k = 1, r = 0$.
2. Atribuie $d = a_{kk}$.
3. Dacă $|d| < \epsilon$ atunci

$$a_{kj} = 0, \quad j = 1, \dots, p;$$

$$a_{ik} = 0, \quad i = 1, \dots, p;$$

→ pasul 7.

În caz contrar → 4.

4. Calculeaza

$$a_{kj} = a_{kj} / d, \quad j = 1, \dots, p;$$

$$r = r + 1.$$

5. Calculeaza iterativ, pentru $i = 1, \dots, p, i \neq k$

$$c = a_{ik};$$

$$a_{ij} = a_{ij} - c * a_{kj}, \quad j = 1, \dots, p;$$

$$j \neq k;$$

$$a_{ik} = 1/d.$$

6. Atribuie $a_{kk} = 1/d$.

7. Atribuie $k = k + 1$.

Dacă $k \leq p \rightarrow$ etapa 2.

În caz contrar iteratiile sunt încheiate.

4. Constructia modelului de regresie

Fie sistemul chimic prezentat în figura 1, al carui model matematic este exprimat prin dependentă liniară în parametri (7). Deoarece structura modelului matematic conține p

Având în vedere relațiile (11), (12), (18) și faptul că $\mathbf{S}(\mathbf{y}, \hat{\beta}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \mathbf{Z} (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{Z}^T \mathbf{y}$, pivotând matricea $\mathbf{B}$ după primele n linii se obține:

variabile tehnologice independente și maxim $n-p$ funcții neliniare în raport cu variabilele tehnologice, este necesară selecția unei submulțimi din totalul ecuațiilor de regresie. Determinarea submulțimii re-prezintă un compromis între două tendințe opuse:

- mărirea numărului total de variabile independente selectate n , în scopul unei aproximări cât mai bune a dependenței dintre variabila de ieșire y și cele p variabilele tehnologice;

- micșorarea numărului total de variabile independente selectate n , în scopul reducerii efortului de calcul după utilizarea modelului matematic.

Selecția celei mai bune submulțimi implică un criteriu de comparație și proceduri de alegere adecvate. Un criteriu de comparație utilizat frecvent are la bază mărirea sumei patratelor erorilor (SPE), iar metodele de selecție uzuale sunt: generarea tuturor re-gresiilor posibile, metoda selecției înapoi, metoda selecției înainte, metoda regresiei în pași, metoda branch and bound etc. Dintre aceste metode de selecție, autorii au optat pentru algoritmul Garside, destinat generării tuturor regresiilor posibile.

Algoritmul Garside este aplicat unui sistem cu p variabile independente, generând $2^p - 1$ modele de regresie în $2^p - 1$ pași. La fiecare pas se introduce sau se scoate din model o singură variabilă. Pentru a urmări influența intrării sau ieșirii unei variabile din model asupra valorii SPE, se aplică tehnica sweep asupra unei matrici extinse. Fie modelul

general $y = Z\beta + \varepsilon$, cu variabilele centrate $y(m \times 1)$, $Z(m \times n)$. Se presupune ca la un moment dat în model sunt incluse primele k variabile, iar matricea Z este partitionata sub forma $Z = (Z_1, Z_2)$, dimensiunile matricilor fiind $Z_1(m \times k)$, $Z_2(m \times (n - k))$. Se formeaza matricea extinsa

$$\begin{pmatrix} Z_1^T Z_1 & Z_1^T Z_2 & Z_1^T y \\ Z_2^T Z_1 & Z_2^T Z_2 & Z_2^T y \\ y^T Z_1 & y^T Z_2 & y^T y \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Aplicând tehnica sweep primelor k linii, se obtine matricea

$$X = \begin{pmatrix} (Z_1^T Z_1)^{-1} & A & \hat{\beta} \\ -A^T & C & b \\ -\hat{\beta}^T & b^T & y^T y - \hat{\beta}^T Z_1^T y \end{pmatrix} \quad (22)$$

unde $\hat{\beta}$ reprezinta solutia pentru modelul liniar care contine numai primele k variabile, iar matricele A , C si b au dimensiunile $A(k \times (n - k))$, $C((n - k) \times (n - k))$, $b((n - k) \times 1)$.

Pivotarea dupa linia i înseamna:

- iesirea variabilei z_i din model, $1 \leq i \leq k$;
- intrarea variabilei z_i în model, $k + 1 \leq i \leq n$.

Cuplarea algoritmului Garside cu tehnica pivotarii sweep, permite generarea, la fie-care pas, a unei submultimi din multimiea ecuatiilor de regresie si obtinerea, pentru fiecare ecuatie de regresie, a urmatoarelor valori:

- suma patratelor erorilor SPE, în pozitia $X_{n+1, n+1}$;
- coeficientii de regresie asociati variabilelor selectate $z_1, z_2, \dots, z_k$ în pozitile $X_{i_1, n+1}, X_{i_2, n+1}, \dots, X_{i_k, n+1}$.

Etapele algoritmului Garside sunt:

1. Initializeaza $M = \emptyset$.
2. În vectorul a , de lungime n , genereaza $a_i = 2^{i-1}$, $i = 1, 2, \dots, n$.
3. Pentru j s $1, 2, \dots, 2^n - 1$ executa

Se determina m , pozitia elementului minim din vectorul a ;

Se genereaza o noua submultime M

$$M = \begin{cases} M - \{m\}, & m \in M \\ M + \{m\}, & m \notin M \end{cases}$$

Se determina noua valoare $a_m = a_m + 2^m$.

4. Stop.

5. Programul de calcul

Pentru determinarea, pe baze statistice, a modelului matematic al procesului de cracare catalitica a fost dezvoltat un sistem de programe de prelucrare a datelor experimentale, denumit în cele ce urmeaza *Programul Cracal*. Structura sistemului de programe este urmatoarea:

RegMul.pas - fisier PASCAL ce contine algoritmul de regresie multipla;

fis_reg1.dat - fisier de date continând datele primare din fisierul implicit de date;

reg_dat1.dat - fisier de date de iesire continând lista ordonata dupa abaterea standard a structurilor ecuatiilor de regresie care apartin structurii alese;

reg_dat2.dat - fisier de date de iesire continând coeficientii si abaterea standard a ecuatiei de regresie selectate, valorile experimentale si calculate ale variabilei de iesire precum si abaterile acestora în raport cu valorile primare.

Sistemul de programe **Cracal** este un mediu interactiv, fiind caracterizat printr-un meniu principal de comenzi, în cadrul fiecarui grup de comenzi fiind disponibile o serie de functii specifice. Semnificatia comenzilor din meniul principal este urmatoarea:

F2- vizualizarea si modificarea numelui fisierului de date primare.

F3- definirea structurii ecuatiei de regresie.

F4- executia programului RegMul, program care implementeaza *algoritmul Gar-side* de selectie a unei ecuatiei de regresie dintr-o multime de regresii posibile si *algoritmul de*

pivotare sweep destinat determinarii parametrilor ecuatiei de regresie si a dispersiei acesteia.

F10- abandonarea executiei programului pentru analiza de regresie multipla liniara.

Comanda F3 permite accesul la urmatoarele functii:

- vizualizarea structurii bazei de date primare caracterizata prin cele p variabile tehnologice;

- selectarea numarului total de variabile de intrare n asociate ecuatiei de regresie;

- definirea structurii functiilor $g_i(z_{k1}, z_{k2}), i = p + 1 \dots n$, precum si a perechii de variabile tehnologice z_{k1}, z_{k2} care o compun. Pentru definirea structurii functiilor g_i si a variabilei (variabilelor) tehnologice care o compun se utilizeaza codurile din tabelul 2.

Tabelul 2 - Codurile de selectie a functiilor g

Codul de formare a functiei g	Descrierea codului
$i - i1 * i2$	variabila $i =$ variabila $i1 * \text{variabila } i2$
$i \ln i1$	variabila $i = \ln(\text{variabila } i1)$
$i sq i1$	variabila $i = \sqrt{\text{variabila } i1}$
$i / i1$	variabila $i = 1 / \text{variabila } i1$

Comanda F4 cuprinde functiile:

- executia programului de regresie multipla pentru structura ecuatiei de regresie, aleasa de utilizator;
- vizualizarea fisierului de date *reg_dat1.dat*, fisier ce contine lista ordonata dupa abaterea standard a structurilor ecuatiilor de regresie care apartin structurii alese;
- vizualizarea fisierului de date *reg_dat2.dat* continând coeficientii si abaterea standard a ecuatiei de regresie selectate, valorile experimentale si calculate ale variabilei de iesire precum si abaterile acesteia în raport cu valorile primare.

generate peste 1000 de variante. Nota comuna a acestor ecuatii de regresie consta în utilizarea obligatorie a celor 7 variabile care descriu procesul tehnologic, fig. 1. Deosebirile între cele 1000 de ecuatii de regresie sunt date de numarul si structura functiilor neliniare în variabilele tehnologice g . În tabelul 3 sunt prezentate comparativ cele mai performante ecuatii de regresie destinate *randamentului în benzi-na* (2) iar tabelul 4 contine functiile de regresie asociate *cifrei octanice COR a benzinei* (3).

Spre exemplificare, în tabelul 5 sunt prezentati coeficientii ecuatiilor de regresie selectate de autori ca fiind cele mai adecvate scopului propus.

6. Rezultate numerice

Pentru determinarea parametrilor ecuatiilor de regresie asociate modelelor (2) si (3) au fost

Tabelul 3 - Rezultate numerice obtinute pentru variabila de iesire *randament benzina*

Cod variabila	Ecuatia 1		Ecuatia 2		Ecuatia 3		Ecuatia 4	
	Structura variabilei		Structura variabilei		Structura variabilei		Structura variabilei	
1	G_{mp}		G_{mp}		G_{mp}		G_{mp}	
2	T_{mv}		T_{mv}		T_{mv}		T_{mv}	

3	d_{mp}	0.002	d_{mp}	0.004	d_{mp}	0.005	d_{mp}	0.006
4	C_{sulf}		C_{sulf}		C_{sulf}		C_{sulf}	
5	T_{mp}		T_{mp}		T_{mp}		T_{mp}	
6	T_{reg}		T_{reg}		T_{reg}		T_{reg}	
7	a		a		a		a	
8	$4*1$		$6*2$		$1*5$		$3*3$	
9	$7*2$		$/7$		$1*6$		$\ln 1$	
10	$3*4$		$6*5$		$2*6$		$/4$	
11	$6*5$		$4*4$		$1*3$		$5*5$	
12	$sq\ 2$		$/6$		$1*1$		$sq\ 2$	
13	$/6$		$/2$		$4*4$		$4*4$	
14	$\ln 5$		$\ln 3$		$4*5$		$5*6$	

Tabelul 4 - Rezultate numerice obtinute pentru variabila
de iesire *cifra octanica COR a benzinei*

Cod varia bila	Ecuatia 1		Ecuatia 2		Ecuatia 3		Ecuatia 4	
	Structura variabilei		Structura variabilei		Structura variabilei		Structura variabilei	
1	G_{mp}	0.0003	G_{mp}	0.0006	G_{mp}	0.0007	G_{mp}	0.0009
2	T_{mv}		T_{mv}		T_{mv}		T_{mv}	
3	d_{mp}		d_{mp}		d_{mp}		d_{mp}	
4	C_{sulf}		C_{sulf}		C_{sulf}		C_{sulf}	
5	T_{mp}		T_{mp}		T_{mp}		T_{mp}	
6	T_{reg}		T_{reg}		T_{reg}		T_{reg}	
7	a		a		a		a	
8	$3*1$		$3*3$		$1*5$		$6*5$	
9	$4*7$		$\ln 1$		$3*5$		$/7$	
10	$\ln 7$		$/4$		$/4$		$/3$	
11	$/7$		$5*5$		$4*5$		$/5$	
12	$2*1$		$sq\ 2$		$6*2$		$\ln 7$	
13	$\ln 4$		$4*4$		$sq\ 6$		$sq\ 2$	
14	$1*5$		$5*6$		$1*2$		$4*5$	

Tabelul 5 - Coeficientii ecuatiilor de regresie

Parametrul regresiei	Randament benzina ecuatia 3 tabelul 3	Cifra octanica COR ecuatia 1 tabelul 4
b0	3.8391949 E4	-2.8352896 E5
b1	-7.4131440 E1	-6.8237214 E1
b2	-6.2429621 E1	7.3353231 E0
b3	-7.4082113 E3	-1.9644050 E4
b4	-2.4828890 E1	3.2147125 E2
b5	-0.3843103 E0	5.6594348 E0
b6	-3.9067300 E1	1.2228639 E-1
b7	3.2053702 E0	-2.0519021 E4
b8	1.6290275 E-3	1.0552669 E2
b9	6.5153481 E-3	-6.1440429 E1
b10	8.5253485 E-2	1.9204158 E5
b11	4.1146167 E1	4.4876115 E5
b12	8.5496321 E-2	-3.8936281 E-2
b13	-7.1139516 E0	-1.0754985 E1
b14	1.0199931 E-1	-3.1543851 E-2

7. Concluzii

Pornind de la necesitatea reglării automate evaluate a procesului de cracare, autorii au dezvoltat unele aspecte ale modelării matematice a proceselor caracterizate printr-un grad ridicat de complexitate. Pentru expresia concretă a modelului matematic al procesului de cracare au fost propuse funcții matematice neliniare în raport cu variabilele tehnologice ce definesc marimile de intrare ale sistemului chimic dar liniare în parametri.

În scopul determinării parametrilor funcțiilor de aproximare autorii au propus utilizarea operatorului sweep, tehnica ce asigură acuratețea calculelor și determinarea rapidă a tuturor funcțiilor de aproximare asociate modelului matematic al unui sistem tehnic. Deoarece structura funcțiilor ce definesc modelului matematic conține p variabile tehnologice independente, care apar nemijlocit în funcțiile de regresie și maxim $n-p$ funcții neliniare în raport cu variabilele tehnologice, este necesară selecția unei submulțimi din totalul ecuațiilor de regresie. Dintre metodele de selecție bazate pe mărirea sumei patratelor erorilor, autorii au optat pentru algoritmul Garside.

Pentru determinarea, pe baze statistice, a modelului matematic al procesului de cracare catalitică autorii au dezvoltat un sistem de programe destinat prelucrării datelor experimentale. Gradul ridicat de interactivitate permite utilizatorului selecția numărului total de variabile de intrare n asociate ecuației de regresie și definirea structurii funcțiilor și a perechii de variabile tehnologice care o compun.

Rezultatele numerice sunt concretizate prin determinarea parametrilor pentru 1000 de variante de ecuații de regresie. Dintre acestea, în lucrare sunt prezentate selectiv opt ecuații de regresie.

Metoda propusă de autorii prezentei lucrări se remarcă prin noutate, o precizie deosebită a calculelor și un grad ridicat de interactivitate a sistemului de programe, fapt ce recomandă utilizarea metodei și a sistemului de programe ca un puternic instrument matematic atât pentru inginerul chimist cât și pentru inginerul automatist.

Bibliografie

1. M. Belitzianis, *Conducerea evoluată a sistemului reactor-regenerator din instalația de cracare catalitică*, Teza de doctorat, Universitatea Petrol-gaze Ploiești 1992.
2. Cr. Marinoiu, *Modele de regresie liniară și aplicații*, Teza de doctorat, Universitatea din București 1997.
3. Cr. Marinoiu, *Utilizarea operatorului sweep în construcția algoritmilor de regresie*, Sesiunea de comunicări științifice, Ploiești 14-15 mai 1992.
4. V. Marinoiu, Cr. Patrascioiu, *Metode numerice aplicate în ingineria chimică*, Editura Tehnica, București 1986.
5. G.C. Suciu, C. Ionescu, P. Rosca, *Ingineria prelucrării hidrocarburilor*, vol 4, Editura Tehnica, București 1993.
6. W.J. Kennedy, J.E. Gentle, *Statistical Computing*, Marcel Dekker Inc., New York & Basel, 1980.