



**Universitatea din Craiova**  
**Facultatea de Automatică, Calculatoare și Electronică**

**Rezumat al tezei de doctorat**

# **Aplicații ale modelării prin Bond Graph**

**Doctorand: Asist. ing. Monica Gabriela Roman**

**Conducător științific: Prof. dr. ing Vladimir Răsvan**

Craiova 2009

Modelarea sistemelor complexe a ridicat probleme deosebite și a necesitat dezvoltări teoretice bazate pe principii fundamentale din fizică. Modelul care permite reprezentarea unei realități fizice este, în general, obținut pe baza unor concepte teoretice fiind luate în calcul doar fenomenele principale ce caracterizează sistemul. În acest caz automatizii utilizează modele matematice care, deși sunt caracterizate de o bună flexibilitate, pierd semnificația fizică a sistemului limitând ulterioare reveniri în vederea îmbunătățirii lor. Datorită naturii multidisciplinare a sistemelor fizice supuse modelării, comunicarea între specialiștii din diverse domenii devine dificilă. Astfel, în cercetarea aferentă modelării sistemelor s-a urmărit găsirea unei metode generale care să fie comună tuturor tipurilor de sisteme și care să nu depindă de natura acestora.

O abordare ce răspunde acestor cerințe, utilizată pentru modelarea sistemelor de diferite naturi, este metodologia Bond Graph. Această metodă se bazează, în principal, pe transferul de putere între diferitele părți sau componente ale sistemului și pe transformările energetice ce au loc în interiorul acestor componente (disipare, stocare sau conversie a domeniului energetic). Aceste fenomene ce sunt analoge în toate domeniile fizice sunt reprezentate grafic, caracterul unificat al metodei Bond Graph constituind un limbaj universal pentru modelarea sistemelor din domenii diferite.

Obiectivul principal al acestei lucrări constă în ***îmbunătățirea aplicabilității metodologiei Bond Graph în modelarea sistemelor fizice de tip electromecanic și dezvoltarea acesteia pentru aplicarea în modelarea proceselor complexe de tip termochimic și biotehnologic***. Astfel, studiul abordat în cadrul acestei lucrări răspunde direcției de cercetare menționate mai sus prin rezolvarea într-o manieră unitară a problemelor legate de modelarea atât a sistemelor fizico-tehnice de tip electric, mecanic și electromecanic, cât și a proceselor de tip chimic și biologic, aparținând unor domenii diferite de aplicabilitate.

Procesele industriale sunt puternic neliniare în principal datorită gradului ridicat de interacțiune dintre fenomenele care le guvernează. Comportamentul unor sisteme de acest tip este descris în mod curent prin ecuații diferențiale neliniare, scrierea acestora prin metode clasice, în special prin ecuații de stare, fiind complexă. Modelarea, în acest caz, prin Bond Graph, poate păstra natura fizică a sistemului permițând localizarea directă a variabilelor de stare în model.

Lucrarea este structurată în cinci capitole abordând gradual, din punct de vedere al stadiului de dezvoltare a conceptului Bond Graph la nivel internațional, modelarea sistemelor electrice, mecanice, electromecanice, termochimice și biotehnologice.

**Primul capitol** este consacrat introducerii conceptelor de bază ale metodei Bond Graph. Pentru crearea cadrului necesar dezvoltării modelelor Bond Graph sunt prezentate noțiunile ce stau la baza elementelor constitutive, procedurile de construcție a modelelor, noțiunea de cauzalitate și modul în care se afectează cauzalitatea, acesta fiind unul dintre avantajele majore ale metodologiei. Bazându-se în principal pe transferul de putere între diferitele părți sau componente ale sistemului și pe transformările energetice ce au loc în interiorul acestora, modelarea prin această metodă constă în localizarea proprietăților unui

sistem fizic, reprezentarea lor prin elemente ideale de stocare, disipare sau transformare a energiei și exploatarea grafică a cuplajelor dintre aceste elemente. Utilizarea variabilelor energetice asigură o modelare unitară a sistemelor în care se vehiculează diferite forme de energie. Considerând unice conexiunile cauzale între elemente, din modelul Bond Graph se obțin modelele matematice liniare sau neliniare sub forma ecuațiilor de stare sau a funcțiilor de transfer, informații în ceea ce privește domeniile de variație a dinamicilor sistemului și variabilelor corespunzătoare, precum și schema bloc asociată modelului.

În vederea demonstrării potențialului acestei metodologii este realizată o *analogie între sisteme de naturi diferite pentru care au fost deduse modelele matematice sub forma ecuațiilor de stare atât prin metode clasice de modelare, cât și utilizând Bond Graph-ul și au fost deduse schemele bloc pornind de la modelul Bond Graph*. Exemplele au reliefat caracterul unitar al limbajului de modelare și buna concordanță cu metodele clasice.

În **capitolul doi** sunt studiate proprietățile structurale ale modelelor Bond Graph necesare studiului mijloacelor de comandă ale sistemelor de diferite naturi. În acest sens, în prima parte este prezentată o comparație între abordarea structurală în cazul general și abordarea structurală în Bond Graph prin studiul rangului structural și a proprietăților de controlabilitate și observabilitate ale modelului de stare.

Pentru efectuarea analizei proprietăților structurale ale unui sistem necesare studiului mijloacelor de comandă aferente sistemelor de diferite naturi, s-a constatat că este suficientă reprezentarea legăturilor între variabilele Bond Graph și parametrii modelului Bond Graph, independent de forma sub care aceste legături sunt exprimate – valori numerice sau simbolice, relații analitice etc.

O altă abordare în studiul acestor proprietăți s-a realizat plecând de la structura de joncțiune a modelului Bond Graph ce conține informații asupra elementelor ce constituie sistemul și asupra modului în care sunt interconectate, independent de valorile lor numerice. Prin studiul *proprietăților structurale în cazul unor sisteme liniare de ordine diferite și având în componență, de asemenea, diferite elemente Bond Graph* s-a evidențiat faptul că modelul Bond Graph poate fi considerat o metodă adecvată rapidă și ușor utilizabilă pentru analiza și studiul legilor de comandă, iar analiza unui sistem dinamic este necesară la mai multe niveluri, de la faza de proiectare, la cea de sinteză a legii de comandă.

Ultima parte este dedicată structurii modelelor Bond Graph și proprietății de inversabilitate necesară studiului decuplabilității intrare-ieșire prin reacție după stare.

**Capitolul trei** este dedicat aplicării metodei Bond Graph în modelarea sistemelor electrice, mecanice și electromecanice. Implementarea metodei în modelarea sistemelor electromecanice a fost precedată de modelarea separată a sistemelor electrice și mecanice. Astfel, procedurile utilizate în modelarea acestor sisteme au condus la o metodologie de construcție unitară în cazul sistemelor electromecanice. Pentru aceste sisteme au fost construite modelele matematice asociate celor Bond Graph, s-au prezentat evoluțiile în timp ale principalelor mărimi caracteristice procesului, fiind, de asemenea, reprezentate și diagramele bloc corespunzătoare.

Implementarea metodologiei Bond Graph pentru modelarea sistemelor fizice a fost realizată începând cu sistemele electrice, urmată de sisteme mecanice și electromecanice. Astfel, s-au modelat două tipuri de filtre construite cu elemente de circuit R, L și C, un filtru trece-sus de ordinul unsprezece și un filtru trece-jos de ordinul cinci, urmate fiind de implementarea metodologiei pentru sistemele mecanice în mișcare de translație de tip corp-resort-amortizor, oscilant în plan vertical și orizontal, și pentru sistemele mecanice în mișcare de rotație.

În ultima secțiune dedicată sistemelor fizice a fost modelat un echipament electromecanic, motorul de curent continuu cu magnet permanent, și două sisteme de tip Quanser rotative: cu braț flexibil și cu pendul invers. Pentru aceste sisteme au fost reprezentate evoluțiile în timp ale principalelor mărimi caracteristice procesului, fiind construite diagramele bloc și modelele matematice asociate celor Bond Graph mult mai ușor decât prin metodele clasice de modelare.

Abordarea separată a diferitelor tipuri de sisteme fizice a condus la ***posibilitatea creării unor module utilizabile în structura altor unități funcționale Quanser, dezvoltate sub metodologia Bond Graph, punând în evidență o altă caracteristică importantă a acestora - modularitatea.*** Astfel, devine posibilă introducerea sau eliminarea de elemente sau subsansamble fără a fi necesară reluarea întregului proces de modelare.

În urma acestui studiu a rezultat faptul că sistemele electrice și mecanice pot fi modelate relativ ușor utilizând Bond Graph-uri, prin transpunerea schemelor tehnice de principiu, rezultând modele simplificate condiționat de buna cunoaștere a fenomenelor fizice caracteristice sistemului, aceasta reprezentând dificultatea majoră în construcția modelelor.

În **capitolul patru** se realizează o extindere a metodei Bond Graph prin dezvoltarea unor modele asociate proceselor ce au la bază reacții chimice și prin introducerea componentei termice a proceselor guvernate de aceste reacții. O variantă adaptată particularităților sistemului fizic – pseudo Bond Graph-ul – a fost utilizată în modelarea proceselor termochimice cu largă aplicabilitate industrială. Astfel, au fost modelate procese specifice de combustie pe baza elementelor combustibile pure și a combustibililor clasici multicomponent în prezența oxigenului, respectiv aerului. Abordarea tipurilor de reacții din punct de vedere al complexității acestora a fost realizată gradual, începând cu procese definite printr-o singură reacție cu reactanți monocomponent și un singur produs de reacție, ajungând la procese definite prin mai multe reacții cu cinetici diferite și reactanți multicomponent, cu mai mulți produși de reacție.

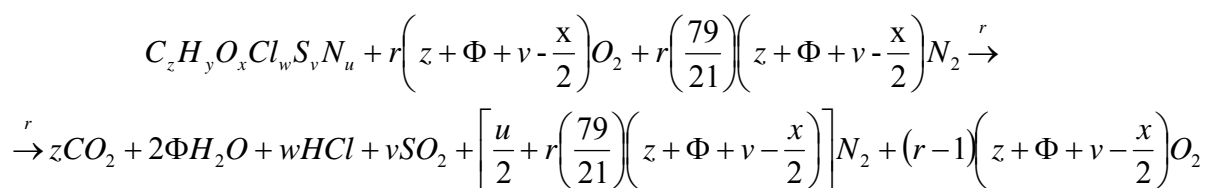
Prima categorie de procese studiate au constituit-o procesele termochimice puternic exoterme. Modelarea acestor procese a fost realizată într-o manieră originală, introducând un concept suplimentar în termenii Bond Graph față de sistemele studiate anterior – căldura de reacție degajată, aflată în strânsă legătură cu cinetica de reacție, respectiv bilanțul energetic al procesului – și a fost realizată utilizând pseudo Bond Graph-ul. Această variantă de Bond Graph utilizează ca variabile efort și flux concentrația, respectiv debitul molar / masic pentru stadiul chimic al modelului și temperatura, respectiv fluxul de căldură pentru cel termic. Astfel, atât modelul Bond Graph, cât și cel dinamic sunt structurate în două părți conectate între ele printr-un ***element modulat multiport rezistiv RS, particularizat fiecărui tip de proces, care oferă informații referitoare la cinetica de reacție și fluxul de căldură degajat.***

Modelarea Bond Graph a *proceselor termochimice de combustie, o contribuție proprie importantă în domeniu*, a fost abordată gradual din punct de vedere al complexității reacțiilor chimice, începând cu procese definite printr-o singură reacție cu reactanți monocomponent și un singur produs de reacție, ajungând la procese definite prin mai multe reacții cu cinetici diferite și reactanți multicomponent, cu mai mulți produși de reacție.

În cadrul primei categorii de reacții, a fost modelată combustia carbonului în prezența oxigenului și au fost simulate variațiile în timp ale concentrațiilor reactanților și produsului de reacție, precum și temperatura procesului. În modelarea proceselor de ardere cu reactanți multicomponent s-au folosit două reacții utilizând drept combustibil oxigenul, respectiv aerul. Prima reacție, de ardere a metanului, prezintă caracteristici de combustie teoretice cu doi reactanți și doi produși de reacție.

Cea de-a doua reacție a fost aleasă pentru a reprezenta un proces de ardere real, la nivel industrial aerul reprezentând oxidantul cel mai utilizat. Compoziția elementară a substanțelor arse împreună cu tipul procesului și caracteristicile reactorului au condiționat mecanismele de formare a produșilor de reacție. Astfel, prin utilizarea unei cantități de aer suplimentare față de cantitatea necesară stoechiometric, precum și a unui combustibil format din șase elemente, s-a modelat un proces complex de ardere, urmărindu-se evoluțiile în timp ale concentrațiilor produșilor de reacție, ale reactanților, corelat cu temperatura dezvoltată.

Pentru exemplificare, este prezentat modelul Bond Graph (Fig. 1) asociat reacției chimice generale de combustie de mai jos:



unde:  $z, y, x, w, v, u$  reprezintă fracțiile molare ale carbonului, hidrogenului, oxigenului, clorului, sulfurii și, respectiv, azotului într-un mol de substanță combustibilă;  $r$  reprezintă excesul de aer, iar  $\phi = (y - w) / 4$  dacă  $y > w$  și  $\phi = 0$  dacă fracția molară de clor în compoziția combustibilului este mai mare decât fracția molară de hidrogen.

Modelele pseudo Bond Graph ale proceselor termochimice sunt construite pornind de la schemele de reacție, luându-se în calcul transferurile de masă și de căldură ce au loc în interiorul reactorului. În etapa de construcție a modelelor, o sarcină dificilă a reprezentat-o modelarea cineticilor de reacție complexe și neliniare ce influențează puternic partea energetică a procesului dezvoltată în secțiunea a doua a modelului, aceasta fiind rezolvată prin introducerea elementului modulat multiport RS.

Modelul Bond Graph din Fig. 1 este format dintr-o parte ce corespunde bilanțurilor chimice și o parte ce corespunde bilanțului energetic. Legătura între cele două părți, chimică și termică, este realizată prin intermediul elementului rezistiv diport RS<sub>36,37</sub>. Primul port corespunde cineticilor de reacție prin viteza de reacție:

$$f_{36} = k_0 e^{-E/RT} C_{C_z H_y O_x Cl_w S_v N_u} C_{O_2} C_{N_2} V$$

unde  $k_0$  este factorul pre-exponențial,  $E$  este energia de activare,  $R$  - constanta gazelor perfecte,  $T$  - temperatura procesului,  $V$  este volumul reactorului, iar  $C_{C_z H_y O_x Cl_w S_v N_u}, C_{O_2}$  și

$C_{N_2}$  sunt concentrațiile elementelor  $C_zH_yO_xCl_wS_vN_u$ ,  $O_2$  și  $N_2$ , iar viteza de reacție are forma:

$$r = k_0 e^{-E/RT} C_{C_zH_yO_xCl_wS_vN_u} C_{O_2} C_{N_2}$$

Neliniaritatea termenului  $f_{36}$  este dată de dependența atât de temperatura  $T$  ( $e_{37}$ ) conform ecuației lui Arrhenius, cât și de concentrațiile reactanților ( $e_2$  concentrația combustibilului,  $e_7$  concentrația oxigenului și  $e_{12}$  concentrația azotului).

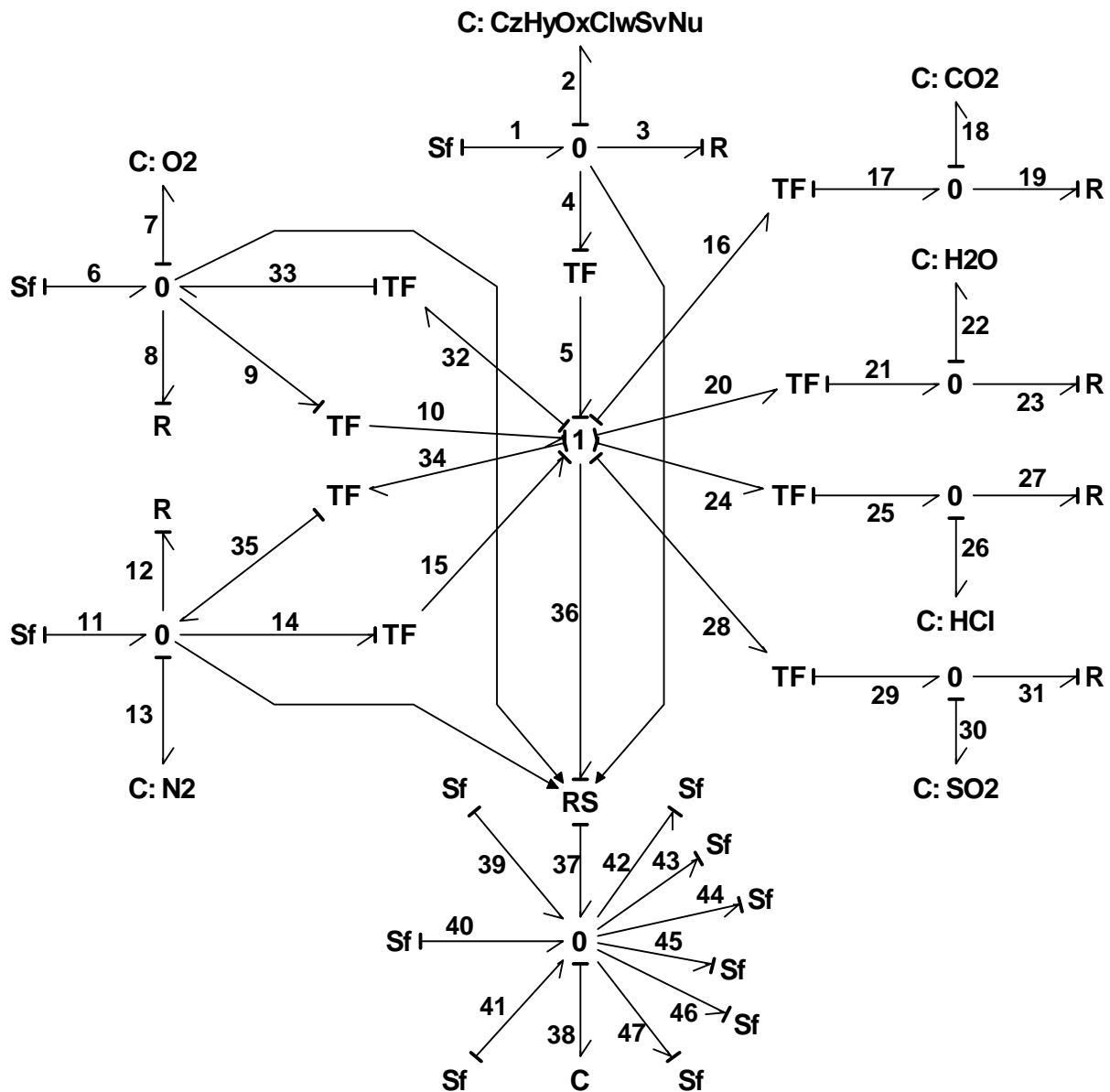


Fig. 1 Modelul pseudo Bond Graph al procesului

Cel de-al doilea port al elementului RS modelează fluxul de căldură pe baza căldurii de reacție și a cineticilor de reacție:

$$f_{37} = (\Delta H)k_0 e^{-E/RT} C_{C_zH_yO_xCl_wS_vN_u} C_{O_2} C_{N_2} V$$

unde  $\Delta H$  este căldura de reacție.

La nivel micro, procesele termochimice ce utilizează reactanți multicomponent sau în amestecuri sunt caracterizate de mai multe reacții chimice ce se desfășoară cvasi-simultan cu viteze ușor diferite care se intercondiționează reciproc. Astfel, un produs al unei reacții devine reactant al unei alte reacții, viteza de desfășurare a acesteia din urmă fiind condiționată atât de cinetica reacției anterioare, cât și de concentrațiile și presiunile parțiale ale tuturor participanților prezenți în proces. Astfel, în ultima secțiune a capitolului s-a modelat un ansamblu format din trei reacții interdependente corespunzătoare arderii unui amestec de combustibili gazoși.

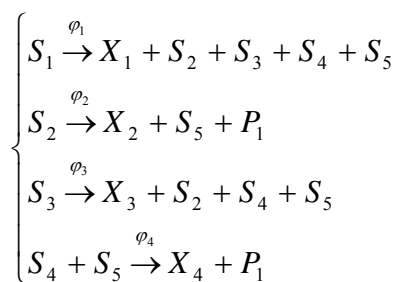
Rezultatele obținute în urma simulărilor au evidențiat o bună corelare între cele două părți constituente ale procesului, chimică / energetică, respectiv evoluțiile concentrațiilor speciilor chimice și temperatura procesului.

**Ultimul capitol** al lucrării este dedicat studiului aplicabilității metodologiei Bond Graph în modelarea proceselor biotehnologice desfășurate în principalele tipuri de bioreactoare *reprezentând o contribuție originală și necesară întrucât modelarea bioprocесelor nu a fost abordată în termeni Bond Graph până în prezent.*

Datorită prezenței în procesele studiate a reacțiilor chimice, în procesul de modelare a fost utilizată aceeași variantă a metodei Bond Graph din capitolul anterior, adaptată particularităților reacțiilor biochimice, păstrându-se atât caracteristica unitară de modelare, cât și avantajele metodologiei de bază. În biotehnologie factorii determinanți ai procesului sunt legați organic între ei, iar modificarea unuia provoacă indirect și modificarea celorlalți, caracteristică observabilă în majoritatea proceselor biotehnologice.

Modelările Bond Graph au fost realizate pornind de la schemele de reacție ale proceselor - ce nu reprezintă relații stoechiometrice ca în cazul reacțiilor chimice, ci relații calitative - și utilizând atât elementele de bază ale metodologiei Bond Graph cât și pseudo legături ale căror variabile de efort și flux au semnificațiile de concentrații și debite masice. Au fost obținute modelele dinamice corespunzătoare principalelor procese biotehnologice - de creștere microbiană pe un strat limitativ, creștere microbiană aerobă asociată cu o reacție de cataliză enzimatică și fermentație anaerobă reprezentând un proces de tratare a resturilor organice.

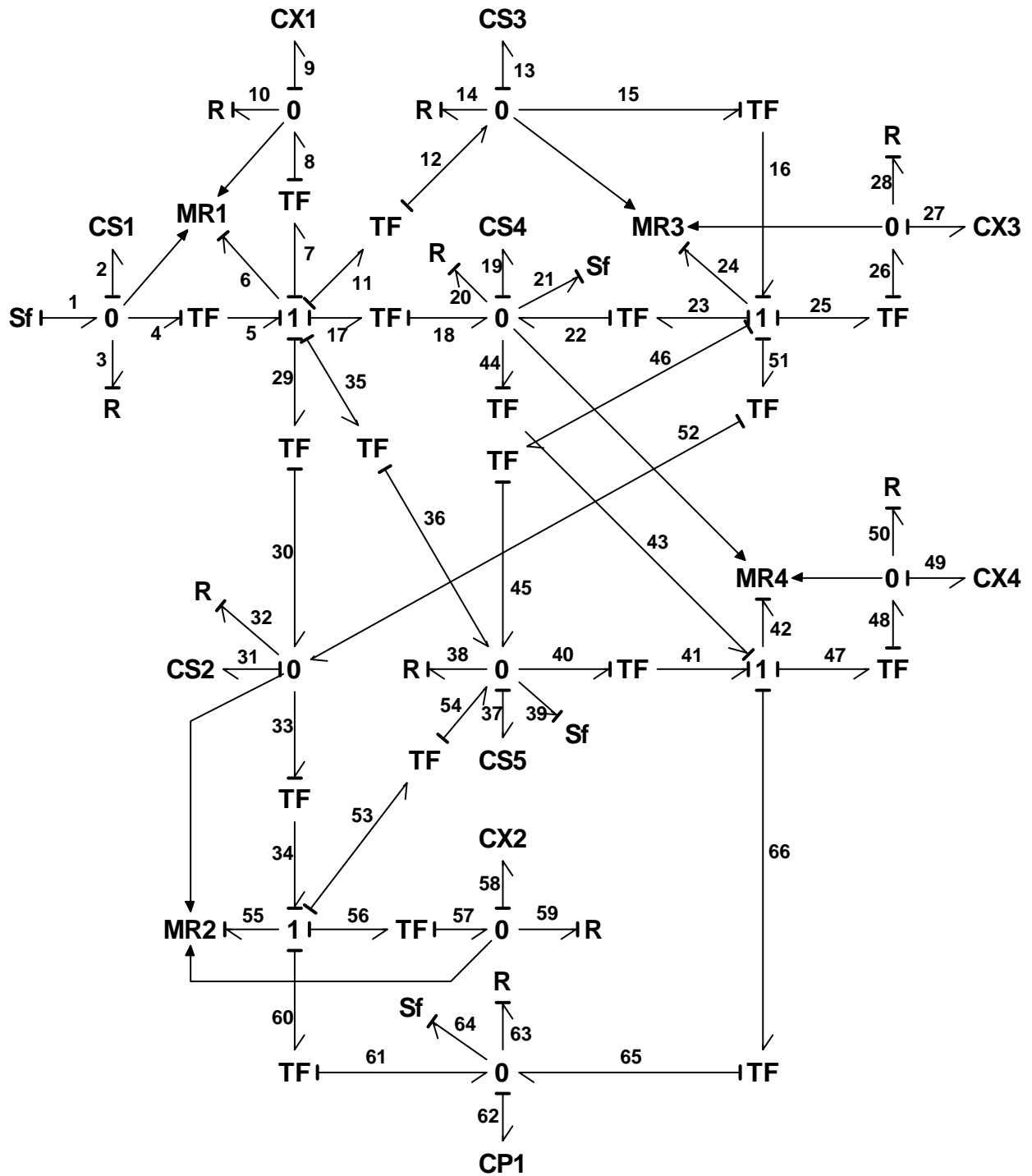
Pentru exemplificare, este prezentat modelul Bond Graph (Fig. 2) asociat procesului de tratare a resturilor organice din apele reziduale a cărei schemă de reacție este complexă și cuprinde 4 reacții și 10 componente:



În această schemă de reacție  $S_i$ ,  $i=1 \dots 4$  reprezintă substraturile:  $S_1$  reprezintă glucoza,  $S_2$  acetatul,  $S_3$  acidul propionic,  $S_4$  hidrogenul, iar  $S_5$  carbonul anorganic.  $X_1$  reprezintă

bacteriile acidogene,  $X_2$  sunt bacteriile metanogene acetoclastice,  $X_3$  reprezintă hidrogenul ionizat,  $X_4$  sunt bacteriile metanogene hidrogenofile, iar  $P_1$  reprezintă produsul obținut, adică gazul metan  $CH_4$ .

Modelul Bond Graph din Fig. 2 este realizat pornind de la schema de reacție și luând în calcul fenomenele ce au loc în cadrul tipului de bioreactor în care se desfășoară procesul studiat.



**Fig. 2** Modelul Bond Graph al schemei complete de reacție corespunzătoare procesului de tratare a resturilor organice



Direcția semisăgeților în modelul Bond Graph corespunde sensului reacției, plecând de la componenta  $S_1$  către componentele  $X_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$ ,  $S_4$  și  $S_5$  pentru prima reacție, de la componenta  $S_2$  către componentele  $X_2$ ,  $S_5$  și  $P_1$  pentru cea de-a doua reacție, de la  $S_3$  către componentele  $X_3$ ,  $S_2$ ,  $S_4$  și  $S_5$  pentru cea de-a treia reacție și respectiv de la  $S_4$  și  $S_5$  către  $X_4$  și  $P_1$  în cazul ultimei reacții.

În etapa de construcție a modelului dinamic o sarcină dificilă a reprezentat-o ***modelarea cineticilor de reacție, forma complexă și neliniară a acestora fiind rezolvată prin introducerea elementelor modulate rezistive uniport sau multiport MR.***

Pentru fiecare tip de proces s-a realizat modelarea analitică și prin Bond Graph atât pentru varianta extinsă cât și pentru varianta simplificată a procesului, iar în realizarea modelului Bond Graph s-a ținut cont de schema de reacție și de fenomenele biochimice specifice fiecărui proces considerat. Plecând de la acest model, pe baza ecuațiilor caracteristice atât elementelor cât și structurii de joncțiune, a fost obținut sistemul de ecuații ce reprezintă însuși sistemul de ecuații de bilanț masic, iar prin introducerea proprietăților constructive și de proces ale sistemului sub formă matematică, s-a obținut modelul dinamic ce a fost validat prin comparație cu modelul obținut utilizând metodele clasice de modelare. Și în acest caz, rezultatele simulărilor modelelor elaborate în cadrul acestei secțiuni a lucrării prezintă evoluții ale parametrilor de proces identice cu cele obținute în literatura de specialitate.

Modelarea Bond Graph a proceselor biotehnologice este mai rapidă decât modelarea clasică, permițând cu ajutorul mediului de modelare și simulare 20sim (produs al Controllab Products B.V. Enschede, Netherlands) obținerea evoluției în timp a variabilelor de stare. De asemenea, plecând de la modelul Bond Graph pot fi stabilite proprietățile structurale în mod natural, lucru dificil de realizat utilizând metode clasice.

Prezenta lucrare răspunde tendințelor actuale în domeniul modelării prin Bond Graph aducând o contribuție necesară în modelarea proceselor termochimice și biotehnologice prin dezvoltarea metodologiei de bază.

Studiul elaborat în cadrul acestei lucrări a evidențiat importanța modelării utilizând metodologia Bond Graph a proceselor tehnologice, în special datorită coexistenței fenomenelor mecanice, electrice, termice și chimice. În plus față de modelarea clasică, în funcție de gradul de complexitate al sistemului modelat și de modificările aduse acestuia, prin prezentul studiu s-a evidențiat posibilitatea de a adăuga sau elimina elemente din structura Bond Graph corespunzătoare modificării sistemului fizic fără a fi necesară reluarea întregului algoritm de modelare. Aceasta are o aplicabilitate importantă în modelarea proceselor termochimice și biotehnologice datorită caracterului lor nestăionar dat de variații în timp ale unor mărimi de proces. Elementele, conceptele și structurile dezvoltate și verificate în cadrul acestei lucrări stau la baza versatilității și extinderii aplicabilității Bond Graph în modelarea sistemelor tehnologice, oferind un instrument utilizabil atât la nivel didactic și de cercetare cât și la nivel industrial.