

SIMUSOL: SIMULACION DE DIAGRAMAS DE ENLACE O BOND-GRAPHS.

Diego Saravia
Facultad de Ciencias Exactas – Universidad Nacional de Salta (U.N.Sa.)
INENCO (U.N.Sa – CONICET)
Fax: 54-387-4255489, Av. Bolivia 5150. 4400 Salta, Argentina
email: Diego.Saravia@gmail.com, dsa@unsa.edu.ar,

Recibido 16/08/14, aceptado 28/09/14

RESUMEN: Se presenta un software que se usará en forma conjunta con Simusol, con una alternativa a la utilización de Sceptre. Está específicamente pensado para simular Diagramas de Enlace (Bond Graphs). Se ha programado en C y utiliza código del Psicro y la librería GSL. Se ha logrado simular correctamente circuitos de prueba comparando con resultados analíticos y con los resultados del actual Simusol.

Palabras clave: Simusol, Sceptre, Bond Graphs, Diagramas de Enlace, Psicro.

ANTECEDENTES, PROBLEMÁTICA

En el INENCO se desarrolla esta línea de programas informáticos para simular sistemas térmicos desde el 2000 (Saravia, Luis y Saravia, Diego. 2000). Y en especial Simusol, desde el 2002. (Alía de Saravia, D., Saravia, L., y Saravia, D., 2002). El Simusol actual simula sistemas complejos vinculados a las energías alternativas, en base a analogías de los sistemas con circuitos eléctricos. La simulación se consigue invocando al Sceptre (Kuo, Franklin F. 1971. Magnuson, H. G. Jr. 1982). Simusol fue mejorado en forma continua hasta la fecha. También fue mejorado Sceptre, desarrollando un paquete propio para facilitar su uso e instalación.

Se presentan los primeros avances en el desarrollo de un software que puede tratar directamente con componentes de diagramas de enlace multi-dominio, interconectados con otros componentes mediante fuerzas y flujos tratados en forma vectorial.

Hoy, Simusol, resuelve los sistemas en los que hay más de un dominio energético (eléctrico, térmico, mecánico, etc.) mediante un diagrama con circuitos separados para cada uno de ellos, con el agregado de las relaciones numéricas que indican las interconexiones entre los dominios.

Si bien Simusol está inspirado en las analogías de los diagramas de enlace o Bond Graphs (Paynter, Henry M. 1961), toma como dato de partida una representación de circuito eléctrico dado que es una representación más natural para muchas personas y porque se dispone de un programa (Sceptre) que resuelve circuitos.

Debido al esquema de trabajo de Sceptre, las propiedades de los sistemas se deben introducir mediante coeficientes que son funciones explícitas de las variables del problema, La idea es poder tener funciones implícitas de diversas propiedades con un esquema tipo Psicro (Saravia, D.; Lesino G; 1992; Saravia, Diego. 2008), incrementando la generalidad de la estructura de cálculo, para simplificar el tratamiento de problemas de termodinámica, especialmente en planteos de tiempos finitos (Chen, L. Wu, C. Sun, F. 1999), donde se discriminan los sistemas reversibles de los irreversibles y se adoptan estructuras que generalmente se encuadran en las relaciones de Onsager (Fronczak, Agata. Fronczak, Piotr. Hołyst, Janusz A. 2007).

También se pretende tener una alternativa a la simulación con Sceptre, que más allá de sus grandes prestaciones, tiene limitaciones concretas en cantidad de variables y para usarlo se debe disponer de compiladores en la computadora, lo que dificulta su instalación y uso; además tiene disponibles sólo algunos integradores, lo que en contadas excepciones, si no se tiene cuidado, puede dar lugar a errores (Hairer, Ernst. Lubich Christian. 2000). Por ello se avanza en una línea de integradores simplécticos partiendo del integrador de Euler—Cromer (Aoki, Keiko M. 2014, Markiewicz, Daniel W. 1999, Denker, John. 2012, Wikipedia. 2014, Lawrence C. Evans 2004).

Se comenzó a desarrollar un sistema que permite:

1. utilizar cantidades ilimitadas de variables y ecuaciones (sujetas a la memoria de la computadora y el tiempo disponible);
2. conservar la energía cuando corresponda y realizar una contabilidad adecuada de la misma, en largos periodos de tiempo;
3. resolver sistemas expresados tanto en forma de circuitos, como en forma de diagramas de enlace, con o sin

resolución previa de su causalidad;

4. utilizar ecuaciones implícitas para las propiedades de los subsistemas;
5. utilizar componentes multidominio, con flujos y fuerzas vectoriales;
6. plantear diagramas de enlace térmicos, con flujos puramente conservativos, utilizando la energía interna o la entalpía como flujo en vez de la entropía, que es el flujo habitualmente usado en los diagramas de enlace.

En el marco de los ítems 4, 5 y 6 se usan esquemas de variables extensivas conservativas y fuerzas intensivas relacionadas mediante ecuaciones de estado; junto a relaciones del tipo de Onsager para vincular dichas fuerzas, con los flujos de las variables extensivas. En dicho esquema los coeficientes terminan comportándose como elementos de un Jacobiano de una función pseudo Hamiltoniana generalizada (Golo, Goran. Schaft, van der Arjan J., Breedveld, Peter C. M. Maschke, Bernhard M. 2003).

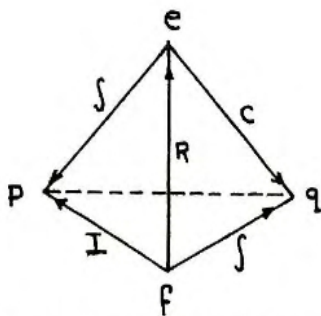
METODOLOGÍAS Y HERRAMIENTAS

Metodología Bond Graph. Fuerzas, estados y flujos. Relaciones.

En esta metodología se reemplazan las ecuaciones diferenciales de segundo orden con que suelen representarse los fenómenos físicos con dos ecuaciones diferenciales de primer orden, y se adopta una nomenclatura que generaliza las variables en diferentes dominios, planteando analogías, en el marco de este “espacio de fases”. En la Figura 1 y el Cuadro 1, representamos las variables que usamos para el dominio eléctrico en éste trabajo.

Desde el punto de vista teórico, el origen de esta metodología es la “Termodinámica de Redes” (Oster, George F. Perelson, Alan S. Katchalsky, Aharon. 1971; Oster, George F. Perelson, Alan S. 1973; Oster, George F. Perelson, Alan S. 1973; Redlich, Otto. 1968; Romero, Ignacio. 2010; Breedveld, Peter C. 1982; Birkett, S. H. Roe, Andy R. 2002; Salamon, Peter. Andersen, Bjarne. Nulton, James. Konopka, Andrzej. 2006). Las ideas de la termodinámica de redes, hoy en día, inspiran una metodología alternativa para la enseñanza de la física desde los niveles iniciales (Herrmann. Job. 2006; Herrmann, F. and Schmid, G. B. 1985). Se utiliza la energía y su conservación como núcleo unificador de la disciplina; y presentan una forma concreta de plantear los diferentes dominios análogamente.

Un dominio energético para los diagramas de enlace se puede representar por variables de flujo, estado, corriente y momento; las que mantienen relaciones integro-diferenciales entre sí por un lado; ecuaciones de estado por otro; y relaciones irreversibles del tipo Onsager. La figura 1, representa el conocido tetraedro de Paynter con las relaciones constitutivas de un dominio genérico. En el cuadro 1 se representan las ecuaciones y variables para el dominio eléctrico.



e: esfuerzo o fuerza generalizada, variable de estado intensiva, o co-variable, (voltaje: V).

q: variable de estado extensiva (carga: Q).

f: flujo, derivada temporal de la variable extensiva, (corriente: I).

P: integral del esfuerzo (flujo magnético: Phi)

I, L: inductancia, C: capacidad, R resistencia.

Las S entre f y q, y entre P y e son integrales. En sentido contrario la derivación.

Entre paréntesis se indican las variables eléctricas usadas en la tabla 1.

Figura 1: Tetraedro de Paynter (Zgorzelski, Maciej. Cameron, Timothy M. 1998).

Elemento	Propor. inst.	Variable extensiva, desplazamiento generalizado.	Variable intensiva, fuerza generalizada.	Flujo (derivada temporal del desplaz.)	Ecuación de Estado	Transporte Irreversible	Energía: U	Flujo de energía reversible: dU	Flujo de energía irreversible: dU
Condensador	$\frac{1}{C}$	Q	V		$V = \frac{Q}{C}$		$\frac{1}{2} \frac{Q^2}{C}$	V dQ	
Inductor	L	I	$\Phi = \int_0^I V dt$		$\Phi = LI$		$\frac{1}{2} LI^2$	ΦdI	
Resistencia	$\frac{1}{R}$			I		$I = \frac{\Delta V}{R}$, también $Q = \frac{\Delta \Phi}{R}$			$(\Delta V)dI = RI dI$

Cuadro 1: Variables de los diagramas de enlace para un dominio eléctrico.

Diagramas

Existen diferentes formas de representar estos sistemas complejos, en particular los esquemas de circuito, tales como los que usa el Simusol, los propios Diagramas de Enlace (Bond Graph); o los Diagramas de Bloques, que, por ejemplo, usa el software Xcos, Scicos o Simulink (Wikipedia, 2014b).

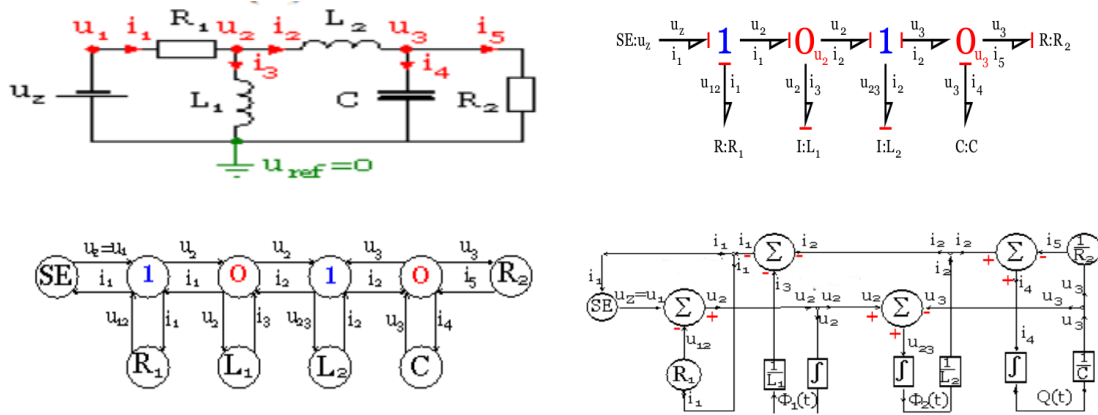


Figura 2: Representaciones del ejemplo de prueba como: circuito, diagrama de enlace, diagrama de enlace con flujos bilaterales y diagrama de bloques o de señales. (Hroncová, Darina, Gmiterko, Alexander. 2013)

Cálculo de las restricciones de conexionado

Un punto habitual de la metodología de los diagramas Bond Graph, del cual se han preocupado numerosos autores, es el estudio de la causalidad. Las relaciones de causalidad representan una secuencia de cálculos que permiten predecir el estado de un sistema a partir del estado actual. Cada sistema representado puede tener más de un esquema de causalidad. El esquema indica, en la simulación numérica, cómo ir calculando sucesivamente las variables necesarias. En muchos casos no existe una causalidad directa que permita llevar de un estado al siguiente y es necesario utilizar programas que numéricamente resuelvan ecuaciones implícitas.

En el programa desarrollado, no se debe proveer un esquema de causalidad: el programa no usa este concepto, como no lo usan los programas que resuelven circuitos. En su reemplazo se plantean ecuaciones “de enlaces”, y se resuelve un sistema de ecuaciones pseudo-lineales. No se usa una idea de causalidad (por otro lado arbitraria), sino de interdependencia (ecuaciones de Kirchoff), tal como plantea la realidad física del problema.

Integradores, resolución de las ecuaciones diferenciales

Se debe combinar los esquemas de resolución de ecuaciones descriptos con diferentes integradores que permitan resolver las ecuaciones diferenciales que representan el paso a paso.

Integración simpléctica

Es conocido que si no se toman recaudos especiales los integradores pueden producir resultados que no conservan la energía. Esto se resuelve utilizando integradores simplécticos, de los cuales el más sencillo es el de Euler-Cromer.

Sceptre, según hemos constatado, bajo circuitos específicamente contruidos, no habituales en el mundo físico real, por ejemplo circuitos oscilantes sin resistencias y luego de mucho tiempo, puede fallar en éste sentido, si no se toman medidas especiales para corregirlo. En la Figura 3, se le pide a Simusol simular un circuito de éste tipo. La corriente debiera ser sinusoidal de amplitud constante. A causa de los errores del método de integración, Sceptre, indica que la amplitud disminuye hasta llegar casi a 0 en los 12000 segundos.

Si se le agrega a Simusol indicaciones para calcular la frecuencia (diagrama de la figura 4) resulta que la simulación da valores practricamente correctos tanto para la amplitud como para la frecuencia hasta 120000 segundos.

Con el programa desarrollado se logra también generar el mismo tipo de problemas cuando se usa un integrador tipo Euler, los que se corrigen al usar uno de Euler-Cromer (Figura 5). Es para destacar que con el programa desarrollado el período del ciclo se calcula con un error muy bajo, proporcional al delta de tiempo de integración.

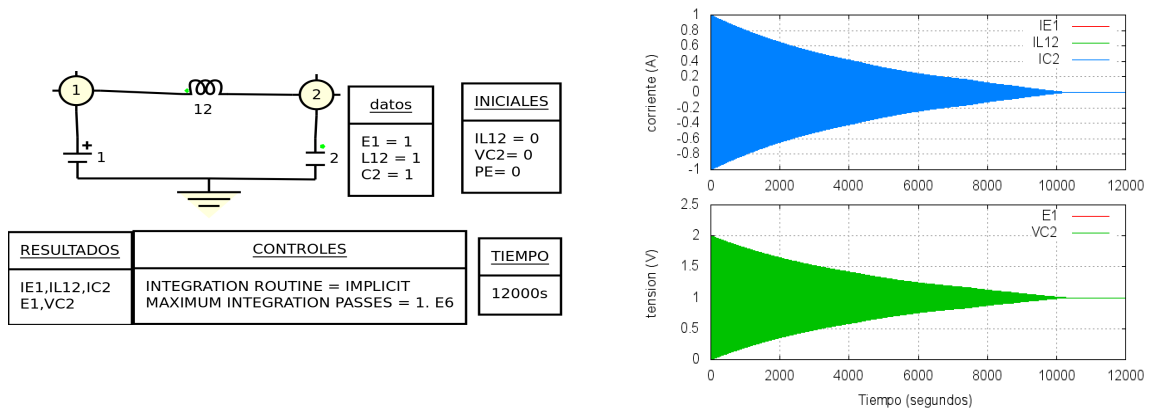


Figura 3. Falla del integrador de Sceptre en condiciones no habituales (pérdida paulatina de energía en circuitos oscilantes sin resistencia).

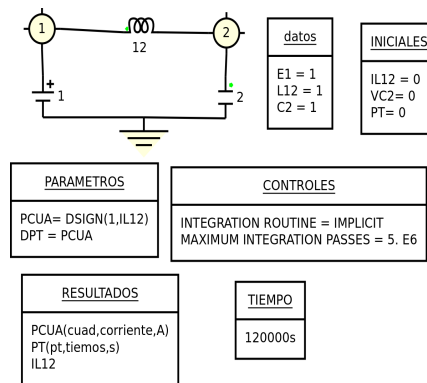


Figura 4. Diagrama que calcula la frecuencia y produce simulaciones correctas.

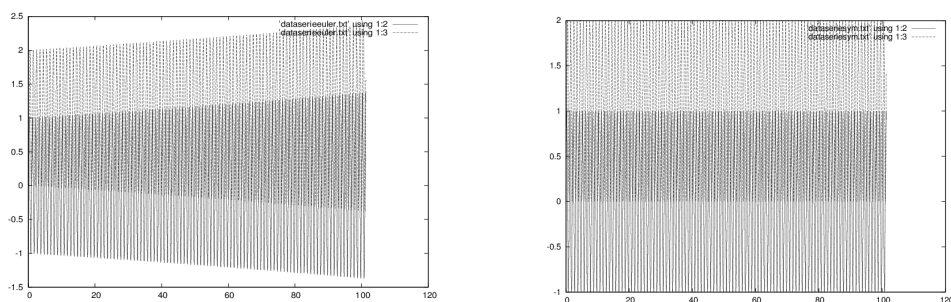


Figura 5. Falla del integrador de Euler (izquierda) e integración correcta con Euler-Cromer (derecha) del mismo sistema.

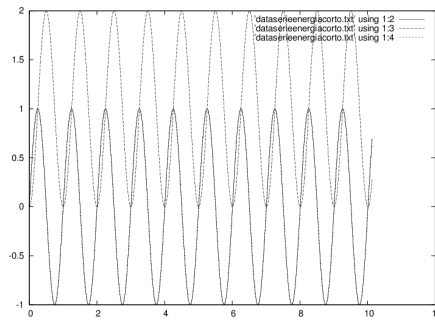


Figura 6. Integrador de Euler-Cromer superpuesta con solución analítica.

RESULTADOS

Se ha desarrollado un programa en lenguaje C, basado en las librerías GSL (Galassi, M. Davies, J. Theiler, J. Gough, B. Jungman, G. Booth, M. Rossi, F. 1996)) en combinación con Psicro, que simula circuitos a partir de su descripción como diagramas de enlace. Dicho programa, en la función que se le provee al integrador, calcula las derivadas de las variables de estado, por un mecanismo simpléctico. Partiendo del estado en un instante, se modifica ese estado resolviendo el circuito completamente tomando los inductores como fuentes de corriente, y los capacitores como fuentes de tensión (aquí no es necesario integrar). Se adoptan los valores de corriente y tensión del momento como estado provisorio compatible con las restricciones de enlace (circuito). Se integra para calcular los cambios producidos en los inductores y se resuelve nuevamente el circuito. Se integra para calcular los cambios producidos en los condensadores y se obtiene el estado para el instante siguiente. Se repite el ciclo bajo el comando del integrador.

Si bien se usó un ejemplo de coeficientes constantes para poder contrastar el funcionamiento, nada impide ir variando los coeficientes, o calcularlos con métodos implícitos. Se puede iterar la resolución del circuito hasta conseguir un estado compatible.

Por el momento sólo resuelve circuitos del dominio eléctrico, quedando para luego su adaptación para componentes multipuerto.

Se ha logrado simular correctamente el “circuito de prueba” de la figura 2, colocando valores de 1 en todo componente y estados iniciales de 0. Lo que se determinó comparando los resultados del programa con los resultados del Sceptre.

Para este ejemplo se usó un programa con variables en memoria estática. Próximas versiones se realizarán con variables dinámicas, lectura de datos de archivos, en particular tomados del Simusol, y con librerías de funciones del Psicro.

El programa toma como datos de partida la resistencia, inductancia, capacitancia, tensión de una fuente, y corriente de una fuente (no todas simultáneamente) asociadas a cada nodo (con relación a tierra, diagrama de enlace: tipo 0) y a cada rama (diagrama de enlace: tipo 1). Para los nodos, las variables de estado son la tensión absoluta del nodo, la corriente del condensador y de la inductancia. Para las ramas son la corriente de la rama, y las tensiones de las inductancias y el condensador. Ambos: ramas y nodos, son elementos del diagrama de enlace. En este esquema son tantas las variables independientes y ecuaciones como los elementos. El programa, teniendo en cuenta el esquema de conexionado (una matriz simétrica de unos y ceros) y los componentes presentes, elige para cada elemento cual variable actuará como independiente y resuelve según el caso.

Para nuestro ejemplo hay 4 elementos, dos del tipo rama y dos nodos. De las doce variables de estado, 4 son independientes.

Se representa en la figura 7, tres de ellas (u_2 , i_2 , i_4 según figura 2). tanto para los datos obtenidos con el programa que presentamos, como para la simulación realizada con el Simusol. Se nota que coinciden casi perfectamente .

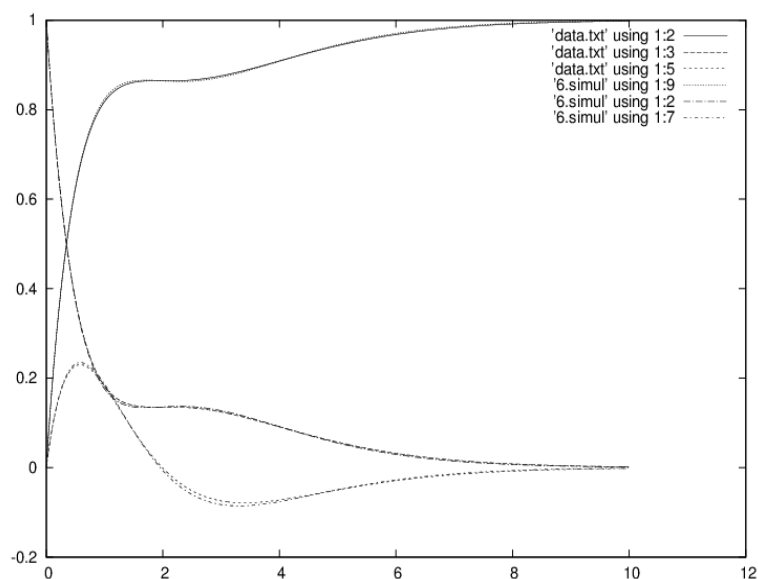


Figura 7. Resultados comparativos de 3 variables, entre la solución desarrollada (data.txt) y Sceptre (6.simul) para el circuito de prueba.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece a Dolores Alía la preparación de modelos con el Simusol/Sceptre para contrastar con los resultados de los desarrollos presentados. Se agradece a los integrantes de la lista de educación en física conocida como Phys-L “Forum for Physics Educators”, por su ayuda con diferentes cuestiones vinculadas a este trabajo.

CONCLUSIONES

Se ha obtenido una primera versión de un software capaz de simular sistemas a partir de sus Diagramas de Enlace, que representa una alternativa al Sceptre y que reproduce correctamente sus resultados al menos para los ejemplos probados.

REFERENCIAS

- Alía, Dolores. Saravia, Luis. Saravia, Diego. (2002). Avances introducidos en la capacidad del simulador de sistemas solares térmicos SIMUTERM (SIMUSOL) . AVERMA., Vol6 N2 8.31—8.36.
<http://www.asades.org.ar/modulos/averma/trabajos/2002/2002-t008-a006.pdf>
- Alía de Saravia, Dolores and Saravia, Luis R. and Saravia, Diego. (2012). Simusol: Simulating thermal systems using Sceptre and Dia. Journal of Free Software and Free Knowledge. Vol 1, No 1, pp30—34.
<http://www.icfoss.org/ojs/index.php/foss/article/view/14>
- Aoki, Keiko M. (2014). Entropy and Heat Capacity Calculations by Thermodynamic Approach . Proceedings of the 12th Asia Pacific Physics Conference . JPS Conf. Proc. 1 , 016009.
- Biegler, L. T. (2011). Differential-Algebraic Equations. DAEs. Chemical Engineering Department . Carnegie Mellon University
<http://numero.cheme.cmu.edu/uploads/DAEs.pdf>
- Birkett, S. H. Roe, Andy R. (2002). The Mathematical Foundations of Bond Graphs. I. Algebraic Theory II. Duality III Matroid Theory. IV Matrix Representation and Causality. V. Orientation and Orthogonality for Directed Bondgraphs. The Franklin Institute. 0016—0032/89
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/001600328990015X>
- Breedveld, Peter C. (1982). Thermodynamic Bond Graphs and the Problem of Thermal Inertance. Journal of the Franklin Institute. Vol. 314. No. I, pp. 15-40.
- Chen, L. Wu, C. Sun, F. (1999). Finite Time Thermodynamics Optimization or Entropy Generation Minimization of Energy Systems, J. Non-Equilib. Thermodyn. 24, 327.
- Clement, Alex. Clement, Amy. Fenchel, Greg. Fenchel, Jeff. Lynch, Jayson. (2008). Comparing Numerical Integration

- Methods.
<http://www.challenge.nm.org/archive/07-08/finalreports/82.pdf>
- Denker, John. (2012). Basic Properties of a Symplectic Integrator.
<http://www.av8n.com/physics/symplectic-integrator.htm>
- Fronczak, Agata. Fronczak, Piotr. Hołyst, Janusz (2007). Thermodynamic forces, flows, and Onsager coefficients in complex networks . Physical Review E 76, 061106.
- Galassi, M. Davies, J. Theiler, J. Gough, B. Jungman, G. Booth, M. Rossi, F. (1996). Gnu Scientific Library.
<http://www.gnu.org/software/gsl/>
- Golo, Goran. Schaft, van der Arjan J.. Breedveld, Peter C. M. Maschke, Bernhard M. (2003). Hamiltonian formulation of bond graphs. In: Nonlinear and Hybrid Systems in Automotive Control. Springer, London, UK, pp. 351-372. ISBN 9781852336523
- Hairer, Ernst. Lubich Christian. (2000). Long -Time Energy conservation of numerical methods for oscillatory differential equations. Siam J. Numer. Anal. Vol. 38 No. 2, pp. 414-441.
- Herrmann. Job. (2006). The Karlsruhe Physics Course. Vol 1: Eney, Momentum, Entropy.
http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/kpk/spanisch/kpk_estud.pdf
- Herrmann, F. and Schmid, G. B. (1985). Analogy between mechanics and electricity. Eur.J. Phys 6 16-21.
- Hroncová, Darina. Gmitterko, Alexander. (2013). Bond Graphs of the Electrical RLC Circuit. American Journal of Mechanical Engineering. Vol. 1, No. 7, 318-323
- Kuo, Franklin F. (1971). Sceptre: Computer program for circuit analysis. Prentice Hall.
- Lawrence C. Evans (2004). Entropy and Partial Differential Equations. Similar to: A survey of entropy methods for partial differential equations, Bulletin of the American Math Society (2004), 409—438
<http://math.berkeley.edu/~evans/entropy.and.PDE.pdf>
- Magnuson, W. G.(1982). Electronic Circuit Analysis Using Computer Programs. Computer Program Newsletter. No.7.
- Markiewicz, Daniel W. (1999). Survey of symplectic Integrators.
- Oster, George F. Perelson, Alan S. Katchalsky, Aharon. (1971). Network Thermodynamics. Nature. Vol 234. pp. 393.
- Oster, George F. Perelson, Alan S. (1973). Systems, Circuits and Thermodynamics. Israel Journal of Chemistry Vol 11. Ns. 2-3 pp445-478
- Paynter, Henry M. (1961). Analysis and design of engineering systems, The M.I.T. Press, Boston, ISBN 0-262-16004-8.
- Redlich, Otto. (1968). Fundamental Thermodynamics since Carathéodory. Review of Modern Physics. Vol. 40, Num 3. 556--563
- Romero, Ignacio. (2010). Algorithms for coupled problems that preserve symmetries and the laws of thermodynamics. Part I: Monolithic integrators and their application to finite strain thermoelasticity. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 199 1841–1858
- Salamon, Peter. Andersen, Bjarne. Nulton, James. Konopka, Andrzej. (2006). The mathematical structure of thermodynamics. Systems Biology. CRC, New York.
<http://www.sci.sdsu.edu/~salamon/MathThermoStates.pdf>
- Saravia, D.; Lesino G; (1992). Desarrollo de una Calculadora Científica. Actas, 15 Reunión Nacional de Energía Solar y Fuentes Alternativas. ASADES, Tomo II, pp 447 - 453.
- Saravia, Diego. (2008). Avances en Psicro, la calculadora psicométrica. Presentación de Puyuspa y Calcula. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente. Vol. 12. ISSN 0329-5184
<http://www.asades.org.ar/modulos/averma/trabajos/2008/2008-t008-a011.pdf>
- Saravia. Luis y Saravia, Diego. (2000). Simulación de sistemas solares térmicos con un Programa de calculo de circuitos eléctricos de libre disponibilidad. Asades, AVERMA Vol4 Num 4 pp8.17-8.22.
<http://www.asades.org.ar/modulos/averma/trabajos/2000/2000-t008-a004.pdf>
- Saravia, Diego. Alía, Dolores. (2010). Mejoras al Sceptre. El paquete Sceptre Inenco. AVERMA. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente. Vol. 14 pp8.77
<http://www.asades.org.ar/modulos/averma/trabajos/2010/2010-t008-a010.pdf>

Saravia, Diego. Alía, Dolores. (2012). Esándar de documentos empaquetados de Simusol, repositorio CSSAN y otros avances. AVERMA. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente. 0329-5184. Vol. 16 pp. 87

Thoma, J. and Mocellin, G. (2006). Simulation with Entropy in Engineering Thermodynamics. Understanding Matter and Systems with Bondgraphs. Springer.

Wikipedia. (2014). Euler-Cromer Algorithm.
http://en.wikipedia.org/wiki/Euler-Cromer_algorithm

Wikipedia. (2014b) Xcos, Scicos o Simulink.
<http://es.wikipedia.org/wiki/Scilab>
<http://es.wikipedia.org/wiki/Simulink>

Zgorzelski, Maciej. Cameron, Timothy M.(1998). Causality and Conjugate Variables in System Dynamics Modeling: Enhancements or Impediments
<http://www.systemdynamics.org/conferences/1998/PROCEED/00012.PDF>

ABSTRACT

Software is presented for use in conjunction with SIMUSOL (as an alternative to the use of Sceptre), specifically designed to simulate Bond Graphs. Software uses Psicro code and GSL library. Is programmed in C. It simulates correctly test circuits, comparing analytical results and the results of the current SIMUSOL.

Keywords: Simusol, Sceptre, Bond Graphs, Psicro.