ISSN 0280-5316
ISRN LUTFD2/TFRT--5836--SE

Reglering av en isoterm kalorimeter

Siavosh Amanatbari

Department of Automatic Control
Lund University
May 2009

Lund University
Department of Automatic Control
Box 118
SE-221 00 Lund Sweden

Document name
MASTER THESIS

Date of issue
May 2009

Document Number
ISRN LUTFD2/TFRT--5836--SE

Author(s)
Siavosh Amanatbari

Supervisor
Lars Wadsö Building Materials, Lund
Rolf Johansson Automatic Control, Lund (Examiner)

Sponsoring organization

Title and subtitle
Reglering av en isotherm calorimeter. (Control of an Isothermal Calorimeter)

Abstract
Within many scientific areas there is interest in finding out the amount of energy turning to heat within different processes. One of the most common examples are cement hydration, where the heat emission leads to information about cement qualities like reaction speed and strength increase. Other areas where there is need for information about heat emission is in biology, medicine and chemistry. To measure the heat emission from a reaction an isothermal calorimeter can be used.

In this project a suitable controller was created to control an isothermal calorimeter. First the calorimeter was studied and modeled. This gave a better understanding of the thermal dynamics of the system. Then system identification was done and a model based controller was implemented with a suitable program. LQG-control is a suitable control method in this case, and it was used on the isotherm calorimeter.

Keywords

Classification system and/or index terms (if any)

Supplementary bibliographical information

ISSN and key title
0280-5316

ISBN

Language
Swedish

Number of pages
33

Recipient's notes

Security classification

Innehåll

1. Sammanfattning 3

2. Introduktion 4

2.1 Isoterm kalorimeter 4
2.2 Värmeledningskalorimetern 4
2.3 Termostatering 5
2.4 Allmänna tillvägagångssätt för reglering 7

3. Problemformulering 8

3.1 Syfte och mål 8
3.2 Värmeflöde genom kalorimetern 8
3.3 Störningar 8

4. Metoder, experimentuppställning 9

4.1 Värmestrålningens inverkan 9
4.2 Modellering i Modelica 9
4.3 Simulink och dSPACE 9
4.4 Systemidentifiering i MATLAB/Simulink 9

5. Resultat 10

5.1 Värmestrålningens inverkan 10
5.2 Modellering i Modelica 12
5.3 Modelica-modell, simuleringsresultat 16
5.4 Systemidentifiering, försök 1 17
5.5 Systemidentifiering, försök 2 24

6. Slutsatser 28

6.1 Resultatsanalys 28
6.2 Fördelar med LQG-reglering 28

7. Referenslista 29

8. Bilagor 30

8.1 Bilaga 1, försök 1 30
8.2 Bilaga 2, försök 1 31
8.3 Bilaga 3, försök 2 32

1. Sammanfattning

Inom många vetenskapliga områden vill man ta reda på hur mycket energi som omvandlas till värme vid olika processer. Ett av de vanligaste exemplen är cementhydration, där bildandet av värme ger information om reaktionshastighet och styrketillväxt. Andra områden där man vill ha information om värmebildande är inom biologi, medicin och kemi. För att mäta värmeavgivningen hos en reaktion kan en isoterm kalorimeter användas.

I detta projekt togs en lämplig regulator fram för att reglera en isoterm kalorimeter. Först blev kalorimetern studerad och modellerad. Detta gav en bättre förståelse för hur systemet reagerar och hur pass snabbpåverkat det är i dess olika delar. Sedan gjordes en systemidentifiering och en modellbaserad regulator implementerades med hjälp av ett lämpligt program. LQG-reglering är en lämplig regleringsmetod i detta sammanhang, varför detta tillämpades på den istoterma kalorimetern.

2. Introduktion

2.1 Isoterm kalorimeter

En isoterm kalorimeter är ett vetenskapligt instrument som mäter värmeutvecklingen vid fysikaliska, kemiska och biologiska processer i små prover av olika slag. Exempel på områden där kalorimetri används är:

- läkemedelsindustrin, t.ex. för studier av läkemedelsformuleringars stabilitet och för att karakterisera interaktionen mellan läkemedelsmolekyler och andra molekyler (t.ex. receptorer och inhibitorer).
- cementforskning, t.ex. för att kvantifiera hur tillsatsmedel påverkar cementhydratationen.
- Mikrobiologi för att t.ex. studera hur olika mikroorganismer (jäst, bakterier) påverkas av olika ämnen (t.ex. näringsämnen och gifter).

Betydelsen av ordet ”isoterm” är ”vid konstant temperatur”. Termen används för processer där temperaturförloppet påverkar processen och där man vill ange att temperaturen varit konstant. I kalorimetri innebär detta att man vill hålla kalorimeterns temperatur så konstant som möjligt, speciellt i de delar av kalorimetern där själva mätningarna pågår. En isoterm kalorimeter kan se ut på många olika sätt, den kalorimeter som är av intresse i detta fall kallas för S-4.

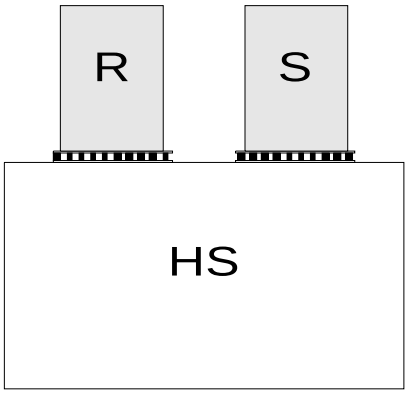
2.2 Värmeledningskalorimetern

Värmeledningskalorimetern är den vanligaste typen av isoterm kalorimeter. I princip fungerar de så att ett prov placeras på en värmeflödessensor, som i sin tur är i kontakt med en värmesänka med hög värmekapacitet. Denna sensor består av 100 halvledar-termoelement. Dessa ger en elektrisk spänning som är proportionell mot temperaturskillnaden mellan sensorns ovan- och undersida. Om temperaturen på sensorns ovansida ökar, ger detta en mätbar elektrisk spänning över sensorn. Värmen från provet leds bort genom sensorn och även genom andra vägar så att temperaturen hålls näst intill konstant i kalorimetern.

I en mikrokalorimeter – som kan mäta värmeeffekter under 1 μW – är temperaturändringarna hos provet normalt i storleksordningen 1-10 mK. Temperaturen i en isoterm kalorimeter skall dock vara så konstant att resultaten från de mätningar man gör inte påverkas av de små temperaturändringar som trots allt uppträder.

För att minska påverkan från störningar använder man sig av ett referensprov i kalorimetern. Se figur 2.1. Denna referens är optimal när dess värmekapacitet är lika stor som mätprovets värmekapacitet. Eftersom referensprovet och mätprovet är symmetriskt utplacerade i kalorimetern och har samma värmekapacitet påverkas dessa ungefär lika mycket av temperaturförändringar och genom att man mäter skillnaden i signal från prov och referens så försvinner de flesta störningar.

I detta arbete var målet att bygga ett bra reglersystem för en värmelednings-kalorimeter. Det kan vara fördelaktigt att testa kalorimetern vid obalans mellan prov och referens eftersom detta ger högt och lättmätt brus. Vid alla tester som är gjorda i detta arbete var ampullen fylld med vatten, medan referensampullen var tom. Detta ger ungefär en faktor 2 i värmekapacitet mellan prov och referens.



Figur 2.1 En schematisk värmeledningskalorimeter. Provet ('S') och referensen ('R') är placerade på värmeflödesensorer i kontakt med värmesänkan ('HS').

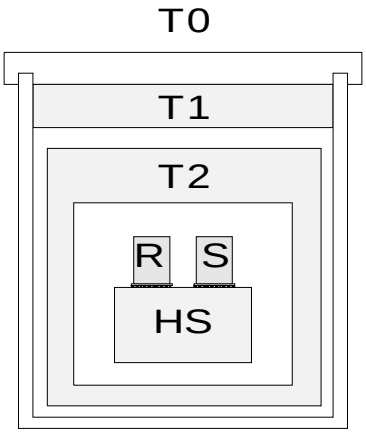
Det är viktigt att temperaturen är stabil i den inre delen av kalorimetern där mätningen sker. För detta krävs material med hög värmekapacitet som står emot störningarna och material med låg värmekonduktivitet som isolerar från störningar utifrån. Här används aluminium på grund av dess höga värmekapacitet och luft på grund av dess låga värmekonduktivitet.

2.3 Termostatering

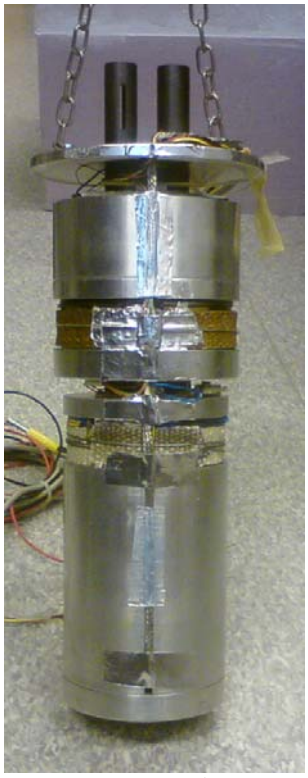
Ofta består den aktiva termostateringen av en kalorimeter (termostateringen) helt enkelt av en precisionstermostat som kalorimetern är placerad i. För att kunna mäta låga värmeeffekter måste termostatens temperaturstabilitet vara (jämfört med normala termostater) extremt god. Som exempel kan nämnas att Thermometric TAM som har en baslinjestabilitet på ca. 0.2 μW är placerad i en termostat som håller temperaturen inom ±0.1 mK över 24 h.

Aktiv termostatering bygger normalt på temperaturmätning med termistorer. Beroende på vilken utrustning man har kan man avläsa dessa med olika noggrannhet. Denna studie är gjord på S4-kalorimetern som består av termostater placerade i en termoflaska som har låga värmeförluster. Termostaten består av aluminium och kan ses I figur 2.2.

I detta examensarbete hålls temperaturen av T2-T1-T0 vid 25.0, 24.5 och 20.0°C. På så sätt kommer kylningen naturligt utifrån medan värmning även sker inuti kalorimetern för att hålla en konstant temperatur.



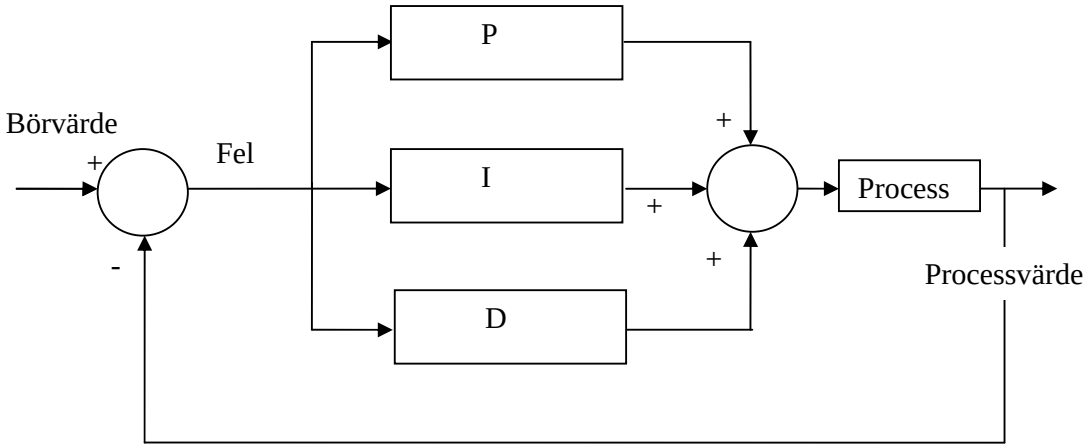
Figur 2.2 Schematisk beskrivning av S4-kalorimetern och dess termostat. De yttre delarna är termosflaskan som kalorimetern befinner sig i och ett isolerande lock av isolermaterial. T0 är den yttre luft-termostaten som håller temperaturen konstant (±0.01 K) i luften runt kalorimetern. T1 är en termostatdel med termistor och värmare i den övre delen av termosflaskan och T2 på samma sätt en termostatdel närmare själva kalorimetern.



Figur 2.3 Bild på en kalorimeter.

2.4 Allmänna tillvägagångssätt för reglering

Den ursprungliga tanken var att termostaten T1 skulle styras med en PID-reglering som använde termistorn i T1, och att T2 på samma sätt skulle styras med hjälp av termistorn i T2. Detta fungerade, men frågan som skulle besvaras i detta exjobb var om inte man skulle kunna göra en bättre mer skräddarsydd reglering.



Figur 2.4 Allmän schema för en PID-regulator kopplad till en process.

Om man har tillräckligt mycket information om en process kan man göra en modellbaserad reglering som kan ses i referens [2]. LQG-reglering, som är ett exempel på detta, är en slags linjärkvadratisk reglering där ett Kalman-filter används. För att använda LQG-reglering är det bra att ha sin processmodell i tillståndsform. Mer om LQG-reglering kan man läsa om i referens [1].

3. Problemformulering

3.1 Syfte och mål

Syftet med detta arbete är att kunna hålla temperaturen i kalorimetern så konstant som möjligt så att påverkan av störningar minskar. Eftersom proverna är ganska små i denna kalorimeter till skillnad från många andra kalorimetrar är noggrannheten kritisk. Att proverna är små kan bero på en mängd olika faktorer. En anledning kan vara att tillgången på material till prover eller den ekonomiska faktorn, tex att man vill göra många olika försök till så litet pris som möjligt men ändå få ett relativt noggrant resultat. För att motverka störningarna på ett bättre sätt ska i detta fall den ordinarie PID-regleringen ersättas av en modellbaserad sk LQG-reglering. För att kunna göra en modellbaserad reglering krävs det i sin tur att en systemidentifiering av processen utfördes. Det är även viktigt att få en mer grundläggande förståelse för kalorimern. Därför gjordes även en modell av denna i Modelica så att man kan se beteendet och snabbheten hos systemet och även förstå vilka störningsfrekvenser som är av intresse. Vid systemidentifiering kan en del nya problem uppstå, eftersom processen är utsatt för många olika slumpmässiga störningar medan mätdata tas fram. Dessa störningar kanske inte uppenbarar sig alls senare när processen regleras och modellen som togs fram kanske försöker kompensera för något som inte finns. Det är även svårt att göra tydliga och snabba förändringar i processen för att få bra mätdata, och därmed kan brus med stor amplitud påverka modellen mycket mer än den bör göra.

3.2 Värmeflöde genom kalorimetern

För att kunna hålla temperaturen i kalorimetern konstant, måste denna regleras på något sätt. För mätning finns värmetermistorer i övre delen av både det övre (T1) och det undre (T2) termostatblocket. Endast uppvärmning är dock inte alltid tillräckligt för att reglera en temperatur. Om rumstemperaturen är varmare än kalorimetertemperaturens börvärde måste kalorimetern även kunna kylas. För att kyla luften runt om själva kalorimetern använder man sig av en låda fylld med luft, vars temperatur regleras till en aningen lägre temperatur än kalorimetertemperaturens börvärde. Därmed kan ett värmeflöde gå igenom kalorimetern hela tiden, och på så vis kan temperaturen regleras inom kalorimetern med enbart värmare. Den yttre termostatens temperatur ingår inte i regleringen som har optimerats. Denna temperatur ses istället som omgivningstemperaturen.

3.3 Störningar

Även om kalorimetern är ett mycket stabilt instrument kan störningar ta sig igenom till provet på många olika sätt. T ex kommer prov som man laddar att ha en annan temperatur än kalorimetern och därmed skapa störningar när de sätts ner. I och med att provet måste ner i kalorimetern på något sätt kan inte detta undvikas helt och hållet. Däremot kan effekten minskas genom stegvis nedsänkning av mätprovet och isolerande skikt på nedsänkningsstaven. Ett annat sätt för störningar att ta sig igenom är genom värmestrålning eller värmeläckage från locket. Kompensation för alla dessa fel måste ske på något sätt.

4. Metoder, experimentuppställning

4.1 Värmestrålningens inverkan

För att försöka få en ungefärlig inblick i hur mycket värmestrålningens inverkan på kalorimetern är utfördes ett enkelt experiment. Termosen (där senare kalorimetern med termostater ska placeras) fylldes med varmvattenpåsar, täpptes igen med cellplast och tätmassa i locket. Temperaturmätningen skedde med två termometrar placerade på två olika ställen i termosen. Sedan fick den stå och svalna av.

För att se hur mycket värme som läckte ur termosen mer än beräknat gjordes även några enkla beräkningar som kan ses i resultatredovisningar. En figur togs fram i MATLAB för att visa storleksorningen på värmestrålning i jämförelse med värmestrålning vid förhållanden som råder i kalorimetern.

4.2 Modellering i Modelica

För att få en bra bild av hur kalorimeterns värmeflöde kan variera från del till del gjordes en modell av denna i Modelica. Modellen är relativt detaljerad på grund av dess syfte.

4.3 Simulink och dSPACE

För att kunna testa olika reglermodeller på kalorimetern på ett systematiskt sätt användes ett dSPACE-kort kopplat till förstärkta bryggor, vari kalorimeterns termistorer kopplades. Motstånden i bryggorna optimerades till att ge bäst upplösning vid användningsområden på runt 20-30 ˚C. dSPACE-kortet har bland annat digitala 16-bitars ingångar och en pulsbreddsmoduleringsutgång. dSPACE är kompatibelt med MATLAB Simulink. Simulink har ett grafiskt gränssnitt där man kan skapa reglermodeller och algoritmer som sedan används på den verkliga processen. Det som skapas i Simulink kompileras sedan med hjälp av dSPACE-mjukvaran till annan kod och exekveras. I dSPACE kan sedan mätdata från processen och regleringen avläsas och sparas. dSPACE skickar sedan ut en ganska låg pulsbreddsmodelerad spänning som behöver förstärkas. Även signalerna som går till dSPACE-kortet behöver förstärkas för att ge bästa möjliga upplösning. Dessa förstärktes med hjälp av en krets där det ingår en brygga. Denna krets löddes ihop och användes till de tre mätsignalerna som kom från kalorimetern och fungerade förvånansvärt bra. Den tog dock inte bort så mycket av bruset som var önskningsvärt.

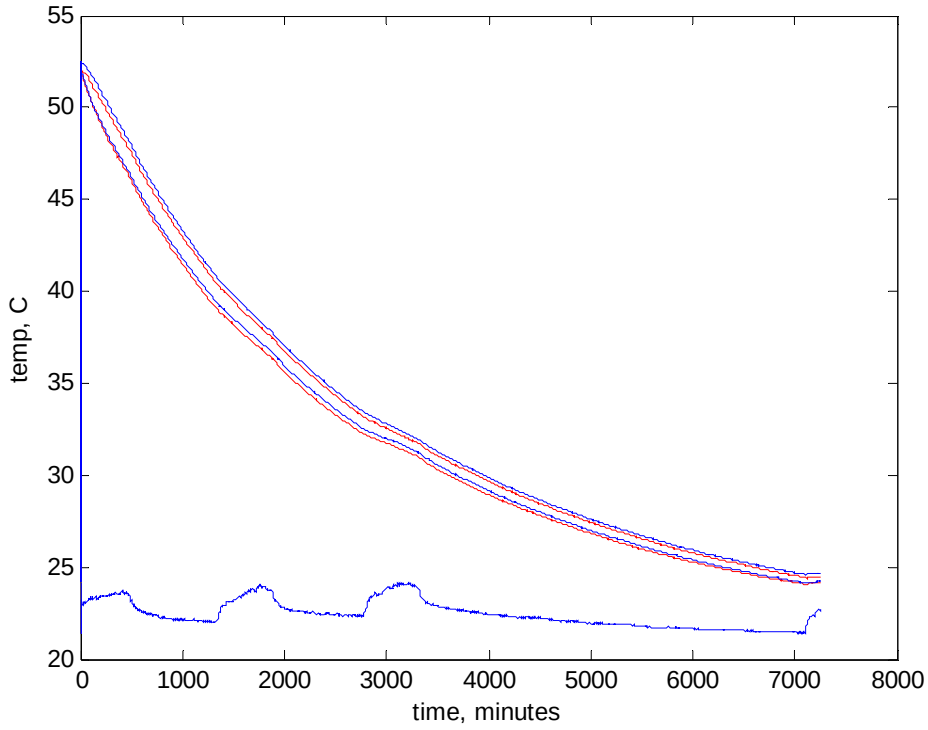
4.4 Systemidentifiering i MATLAB/Simulink

En processmodell togs fram i MATLAB System Identification Toolbox. Denna användes för att reglera processen med hjälp av en LQG-regulator. I MATLAB System Identification Toolbox finns det en metod som heter n4sid som är en underrumsidentifiering [2]. Denna användes på mätdata framtagen från den verkliga processen.

5. Resultat

5.1 Värmestrålningens inverkan

Vid experimentet med vattenpåsar i termosen mättes temperaturen som funktion av tiden. Resultatet kan ses i figur 5.1. Experimentet visar på att halveringstiden för temperaturen är 31 timmar. Detta motsvarar en tidskonstant på 45 h.



Figur 5.1 Figuren visar temperaturminskningen i två olika termostater då 3 påsar med 500ml 52 gradigt vatten placerades i varje. Som lock användes 5 cm tjockt cellplast med tätmassa runt kanten. Kurvan längst ner på bilden motsvarar temperaturen i rummet. Halveringstiden av temperaturen beräknas till ca 31 timmar. Detta motsvarar en tidskonstant på 45 h.

Följande beräkningar gjordes för att se om resultatet från föregående experiment är rimligt. Den specifika värmekapaciteten för vatten är $c = 4.18$ J/(gK). Den vattenmassa som användes var $V = 1500$ g. Värmekapaciteten för vattnet blir då $C = c \cdot V = 6270$ J/K
Värmeledningsförmåga för cellplastlocket är $\lambda_1 = 0.04$ W/(mK) Cellplasten har arean $A = 0.05^2 \cdot \pi$ m^2 och höjden $H_1 = 0.005$ m. Cellplastens värmekonduktiviteten blir därmed

$$k_1 = \lambda_1 \frac{A}{H} = 0.0063 \text{ W/K.}$$

Termoskanten har omkretsen $O = 0.1 \cdot \pi$ m, höjden $H_2 = 0.04$ m och en tjocklek på $T = 0.0007$ m. Termosen består av stål, vilket har värmeledningsförmågan $\lambda_2 = 15$ W/(mK) .
Den beräknade värmekonduktiviteten genom stålväggen blir då

$$k_2 = \lambda_2 \frac{O \cdot T}{H_2} = 0.02356 \text{ W/K}$$

Beräknade värmeförluster genom värmestrålning görs på följande sätt:
Area där värmeförluster sker $A_3 = 0.3 \times 0.11 \times \pi + 0.055^2 \times \pi$ m^2.
Värmeförlusterna kan då beräknas med formel

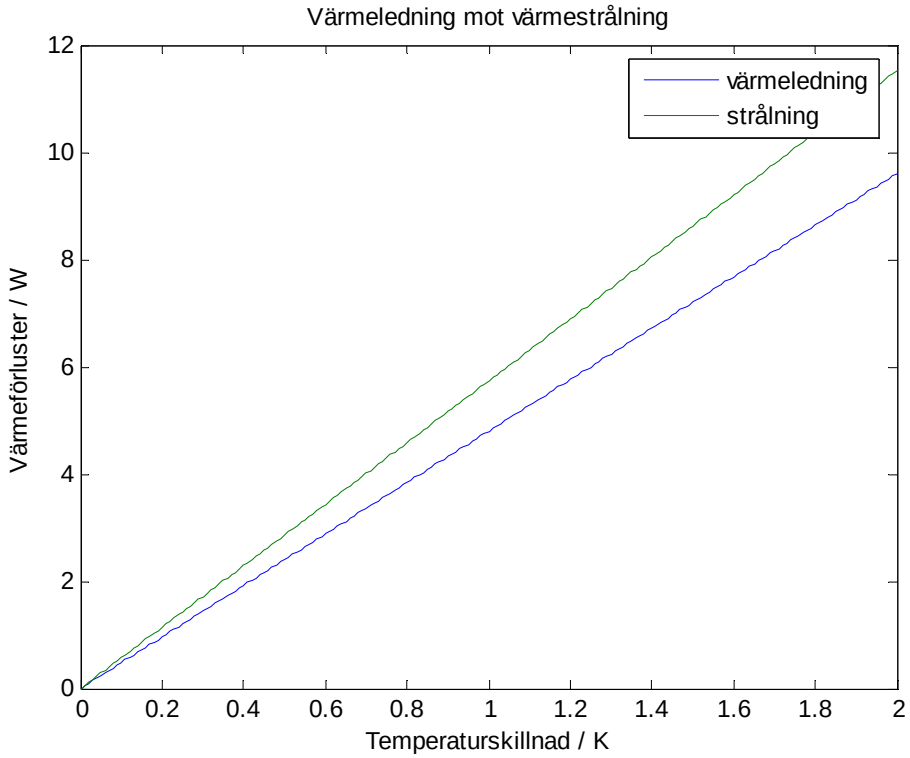
$$Q_{12} = \frac{A\sigma(T_1^4 - T_2^4)}{\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} - 1} \text{ W}$$

där emissiviteten för polerade rostfria ytor är $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.08$ och Boltzmanns konstant är $\sigma = 5.619 \cdot 10^{-8}$. W/(m^{2}K^4). Formeln integreras över alla temperaturskillnader ända tills halveringstiden och medelvärdet blir $Q_{12} = 0.2$ W. detta innebär att strålningens påverkan med avseende på temperaturändringen blir ca $k_3 = 0.0095$ W/K.
Slutligen slås alla värmekonduktiviteter ihop till $k_{total} = k_1 + k_2 + k_3 == 0.0395$ W/K
Halveringstiden blir då

$$t_{1/2} = \frac{C}{k_{total}} = 44 \text{ h}$$

Detta motsvaras av en tidskonstant på 64 h.
Beräkningarna verkade rimliga och enligt beräkningarna blev värmekonduktiviteten genom luft och värmestrålningen i samma storleksordning. Därför gjordes ännu en beräkning för att jämföra skillnaden mellan luftens värmekonduktivitet och värmestrålningen i kalorimetern.

Följande beräkning gjordes i MATLAB:
I figur 5.2 kan ses att värmestrålningen i princip kan ses som linjär med avseende på olika temperaturskillnader och är i storleksordningen av luftens värmekonduktivitet i spalter som är 5mm breda. Därför är värmestrålningens inverkan av stor betydelse i alla modeller som görs på kalorimetern.



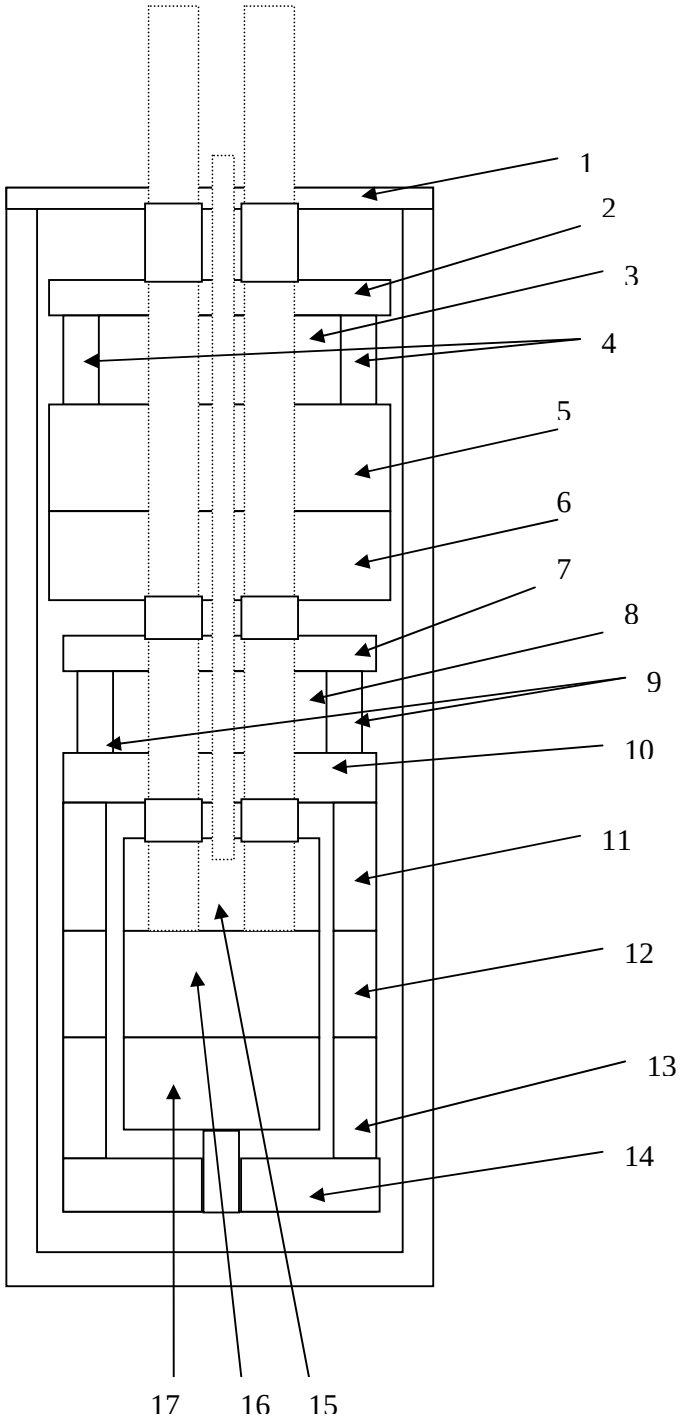
Figur 5.2 visar att man får ungefär lika stora bidrag från värmeledning och värmestrålning i en 5 mm luftspalt med stillastående luft. Resultatet gäller vid små temperaturskillnader och omkring 20 ℃. Detta betyder att man inte behöver räkna med T^4 vid beräkningar inne i en kalorimeter, utan kan (om spalten är 5 mm) helt enkelt dubbla värmelednings-konduktansen för att få den totala värmekonduktansen.

5.2 Modellering i Modelica

Vid modellering av kalorimetern delades den in i många olika delar så att modellen blev realistisk. Ju fler delar den delas upp i desto mer realistisk blir modellen och ju mer pålitliga resultat kan fås utav simuleringarna som görs på den. Huvudtermostatblocket som är det största delades in i 8 delar som var ungefärligen lika stora. Det övre termostatblocket som är aningen mindre modellerades som 5 olika delar. Eftersom aluminium har stor värmeledningsförmåga i förhållande till luft kunde aluminiums värmeledningsförmåga bortses från där aluminium hade kontakt med luft i kalorimetern. På samma sätt kunde värmekapaciteten hos all luft bortses från i hela kalorimetern, då denna är försumbar i jämförelse med aluminiumets värmekapacitet. I figur 5.3 kan indelningen av kalorimeterns olika delar ses. I tabell 5.1 kan aluminiumkomponenternas värmekapaciteter avläsas.

Nummer	Värmekapacitet J/K
1	157
2	182
3	172
4	200
5	549
6	457
7	147
8	153
9	214
10	220
11	272
12	215
13	229
14	229
15	131
16	118
17	150

Tabell 5.1 Numreringen refererar till numren i figur 5.3.



Figur 5.3 Kalorimetern uppdelad i komponenter. Endast aluminiumkomponenter är numrerade på bilden. (bilden är inte helt skalenlig).

Konduktivitet mellan del:	**Luft** [W·K^{-1}]:	**PEEK** [W·K^{-1}]:	**Al** [W·K^{-1}]:	**Stål** [W·K^{-1}]:
1 och 2	0.01	0.0025		0.36
2 och 3			36.0	
3 och 4			25.3	
2 och 4			21.7	
3 och 5			23.5	
4 och 5			14.2	
5 och 6			37.7	
6 och 7	0.0195			
7 och 8			26.9	
7 och 9			19.3	
8 och 9			24.0	
8 och 10			24.2	
9 och 10			17.3	
10 och 11			11.2	
11 och 12			10.2	
12 och 13			11.2	
13 och 14			17.0	
10 och 15	0.0074			
11 och 15	0.022			
12 och 16	0.026			
13 och 17	0.022			
14 och 17	0.0072	0.0007		
15 och 16			8.0	
16 och 17			8.0	

Tabell 5.2 Konduktiviteterna mellan de olika aluminiumkomponenterna som kalorimetern består av kan utläsas i tabellen.

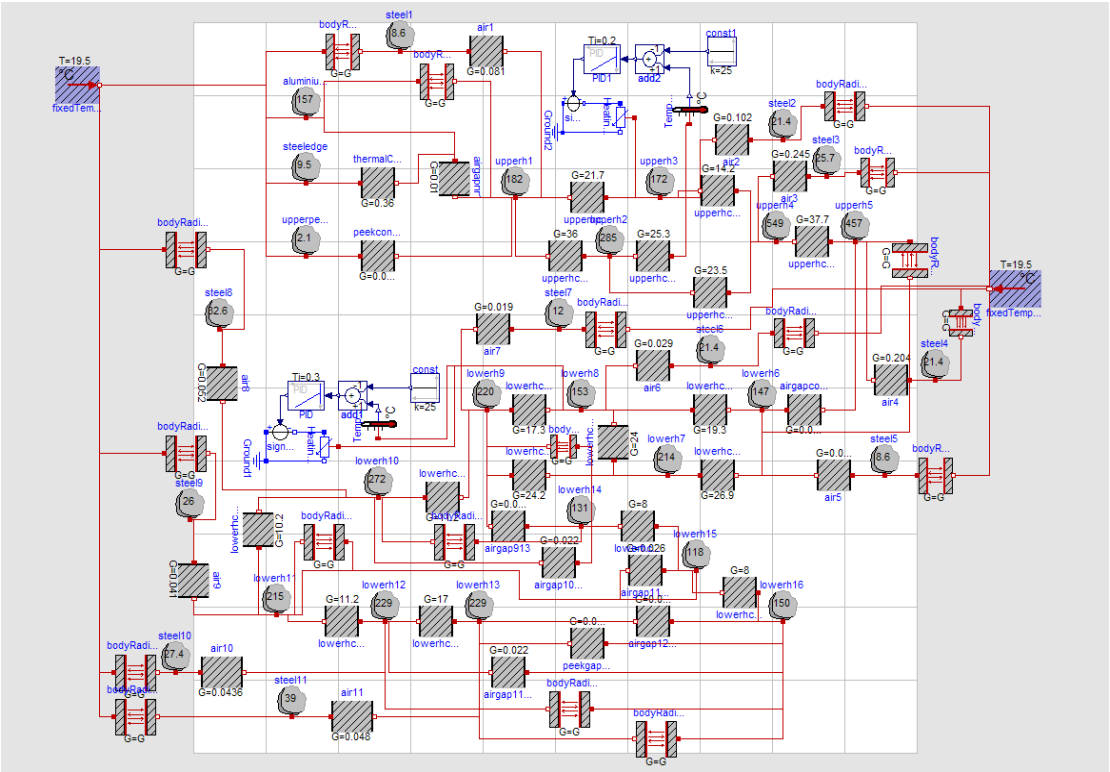
Aluminiumyta:	Avgränsar till luft som har värmekonduktiviteten [W·K^{-1}]:	Avgränsar till stål som har värmekapaciteten [J·K^{-1}]:
2	0.0817	8.5765
4	0.1021	21.4414
5	0.2450	25.7296
6	0.2042	21.4414
7	0.0136	8.5765
9	0.0292	21.4414
10	0.0191	12.0072
11	0.0517	32.5909
12	0.0408	25.7296
13	0.0436	27.4450
14	0.0476	38.5945

Tabell 5.3. Aluminiumytorna gränsar även till luftkonduktanser som gränsar till termosens insida bestående av stål. Dessa konduktiviteter och kapaciteter kan utläsas i tabellen.

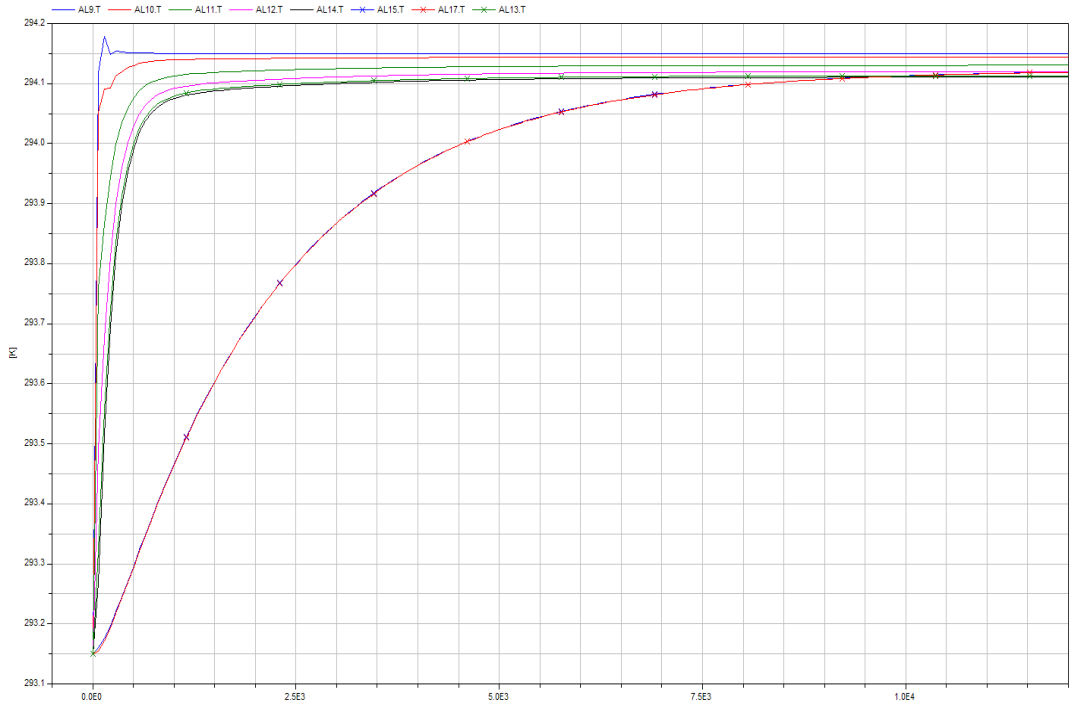
Mellan termosens insida och utsida sker en värmeöverföring i form av värmestrålning. I Modelica anges arean av ytorna där värmestrålning avges.

5.3 Modelica-modell, simuleringsresultat

Den fungerande Modelica-modellen av kalorimetern såg till slut ut enligt figur 5.4. Där implementerades två enkla PID-regulatorer som värmde upp kalorimetern till ett referensvärde som skiljer sig från rumstemperaturen. Resultatet blev rimligt och uppvärmningstiderna överensstämmer bra med den verkliga kalorimetern. Detta kan ses i figur 5.5 då den isolerade delen av kalorimetern får en beräknad halveringstid av mer än tio timmar medan de mindre isolerade delarna värmdes upp eller kyldes ner relativt snabbt.



Figur 5.4 Modell av kalorimetern i Modelica.Uppdelning av värmekapaciteter och värmekonduktiviteter har skett enligt tabell 5.1 till 5.3 och figur 5.3.



Figur 5.5 Simulering av kalorimetern i figur 5.4.

5.4 Systemidentifiering, försök 1

För att systemidentifiera processen matades den nedre värmaren i kalorimetern med en PRBS-signal (Pseudo Random Binary Sequence). Signalens amplitud beräknades till syfte att hålla medeltemperaturen i kalorimeterns undre heatsink till ca 25 °C. Inga filter användes för avläsning av data vid detta försök. Antalet mätningar per sekund var 2 st och bredden på varje steg i PRBS signalen var ca 100 s. Data som sparats i ca 48 timmar användes i MATLAB System Identification Toolbox. För enkelhets skull gjordes en tillståndsbeskrivning då denna gav informationen i den form som passar en LQG-reglering.

Efter många försök och många olika typer av identifiering av tillståndsmodell från andra ordningens till fjärde ordningens modell, med prediktion och med simuleringsmetoden gavs ett resultat som fungerade till en rimlig grad. Den fungerande modellens resultat kan ses i figur 5.13. Resultat från samma modell med annan förstärkningsmatris till referensvärdet kan ses i figur 5.14. I bilagorna kan beräkningarna av L-matrisen och K-matrisen ses. Resultatet fungerade utmärkt på en modell med motsvarande A, B och C matris. Därmed kunde det utgås från att LQG-regulatorn var fungerande. Däremot hade processmodellen inte riktigt samma förstärkning som den verkliga processen i den första identifieringen. Detta var lätt att se efter så lång tids arbete med den verkliga processen. Med bara några procents ändring av den beräknade matrisen Lr blev resultatet bra även på den verkliga processen. Resultatet kan ses i figur 5.15.

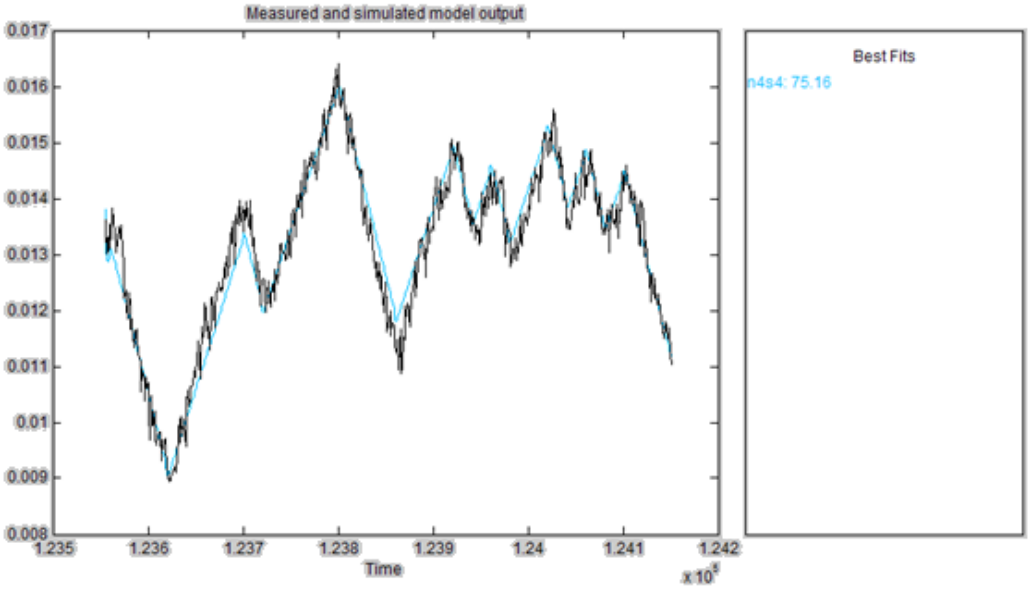
I MATLAB System Identification Toolbox finns det en metod som heter n4sid som är en underrumsidentifiering [2]. Denna användes på mätdatan. Följande fjärde ordningens processmodell blev framtagen:

$$A = \begin{pmatrix} 0.99963 & 0.0000636 & 0.0032715 & 0.0000341 \\ 0.0000119 & 0.9993 & 0.0005861 & -0.011861 \\ -0.01297 & -0.0005533 & 0.92794 & -0.0086171 \\ 0.0001087 & 0.002453 & -0.000668 & 0.34667 \end{pmatrix}$$

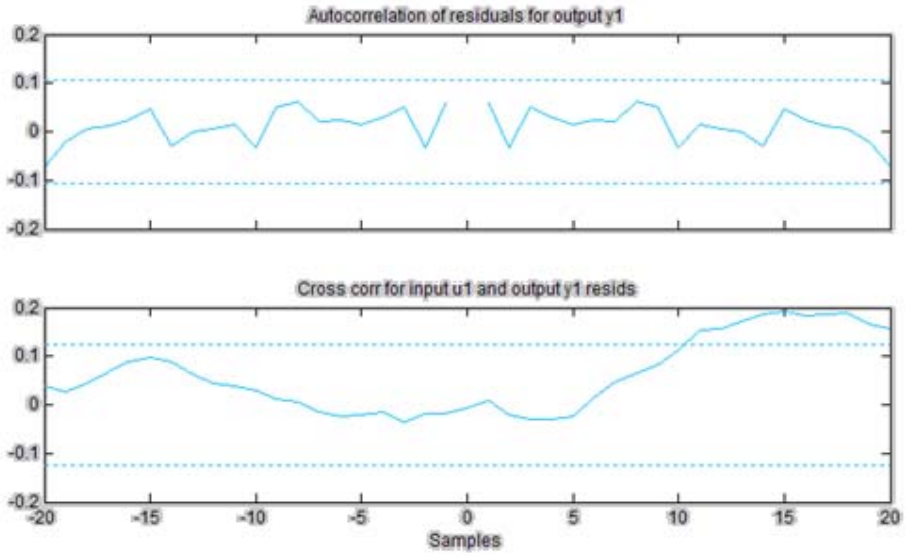
$$B = \begin{pmatrix} -0.0000042 & -0.0001027 \\ -0.0001645 & -0.0000509 \\ 0.0005722 & -0.0043385 \\ 0.076656 & -0.0010291 \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} 0.27688 & -1.1874 & 0.0007034 & -0.027796 \\ -6.4823 & -0.012037 & 0.029515 & 0.0004884 \end{pmatrix}$$

I figur 5.6 kan man se hur modellen passar mot valideringsdata. Och i figur 5.7 kan man se residualerna. Dessa mätdata är bara en liten del av de mätdata, som fanns tillhanda. Men det var svårt att få fram en modell som passade bra mot valideringsdata för stora datamängder.



Figur 5.6. Ovan ser man att den framtagna modellen passar till 75% mot valideringsdata.



Figur 5.7. Ovan ses residualkorrelationer för de framtagna modellparametrarna.

Scilab användes för att ta fram K och L matriser tillhörande LQG-regulatorn. Algoritmen kan ses i appendix A. Resultaten kan ses nedan:

$$K = \begin{pmatrix} -0.0030003 & 0.1506032 \\ 0.5619062 & 0.0237411 \\ -0.0017952 & 0.0006471 \\ -0.2340222 & -0.0096016 \end{pmatrix}$$

$$Ltot = \begin{pmatrix} -2.0797567 & 22.653789 & 0.0510623 & -0.3890183 & -0.3107364 & -0.0121120 \\ 131.34902 & -0.8043234 & 4.6670206 & -0.0394623 & 0.0123486 & -0.3107053 \end{pmatrix}$$

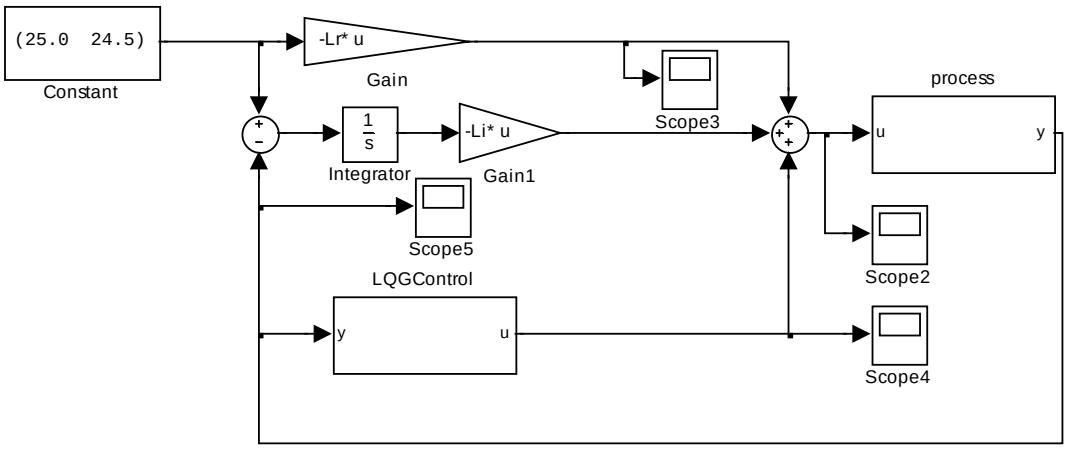
$$Li = \begin{pmatrix} -0.3107364 & -0.0121120 \\ 0.0123486 & -0.3107053 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} -2.0797567 & 22.653789 & 0.0510623 & -0.3890183 \\ 131.34902 & -0.8043234 & 4.6670206 & -0.0394623 \end{pmatrix}$$

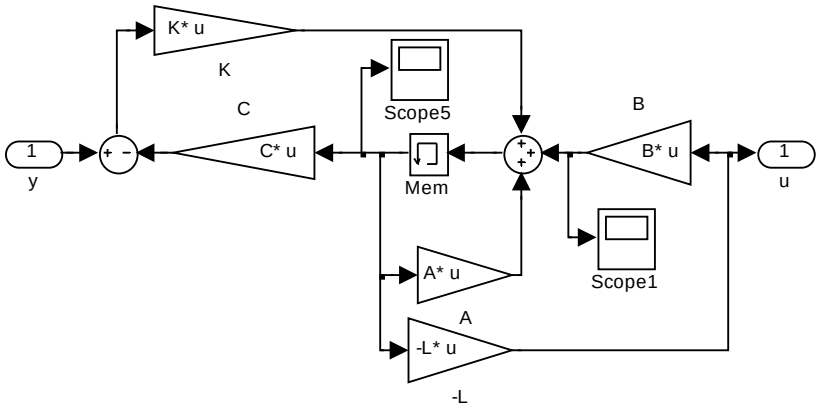
$$Lr_{modell} = \begin{pmatrix} -19.5249 & -0.4993 \\ 1.0845 & -20.7217 \end{pmatrix}$$

Där Lr för modellen löses ut enligt appendix B.

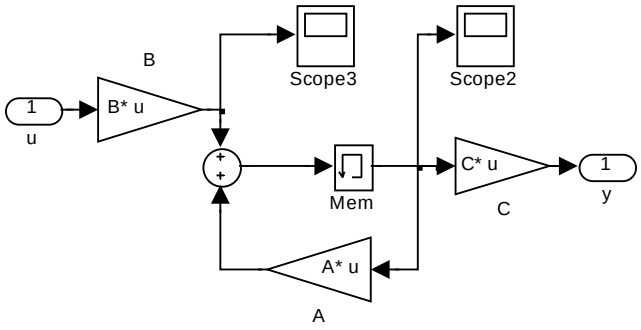
Först testas LQG-regulatorn på en processmodell med angivna A, B och C matriser. Figur 5.8 till 5.10 visar funktionsblocksdiagrammet som gjordes i simulink.



Figur 5.8 Funktionsblocksdiagram för reglering av framtagen modell.



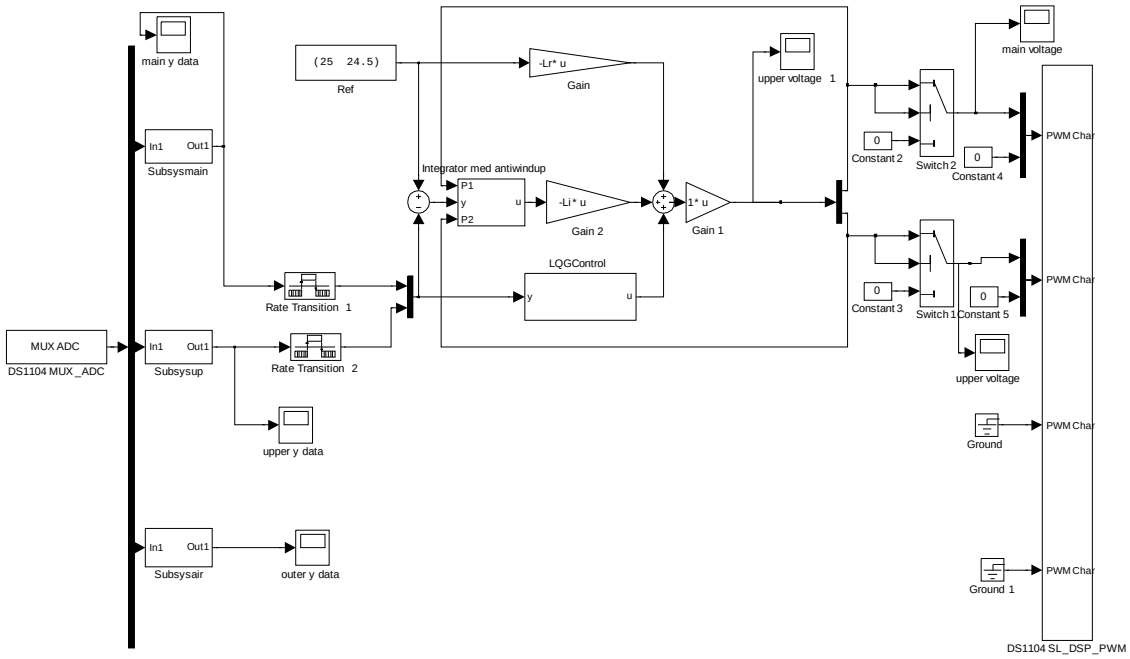
Figur 5.9 Subblock, "LQGcontrol" från figur 4.6.



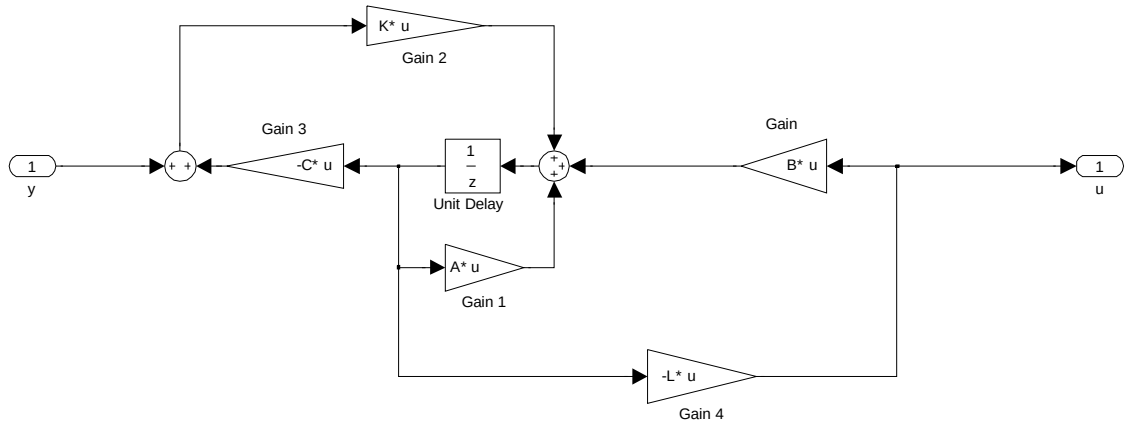
Figur 5.10 Subblock, "Process" från figur 5.8.

Därefter användes samma LQG-regulator på den verkliga processen.
Den verkliga processen har begränsad utsignal som kan ställa till med problem för integratorn. En antiwindupfunktion implementerades, den använde sig av reglerfelet och gradienten av processvärdet

och håller tillbaka integratorn då styrsignalen låg för högt. På detta sätt samlade integratorn inte på sig onödigt stora termer då ett stort fel uppstår. I figur 5.11 till 5.12 kan funktionsblocksdiagrammen för LQG-regulatorn tillhörande den verkliga processen ses.

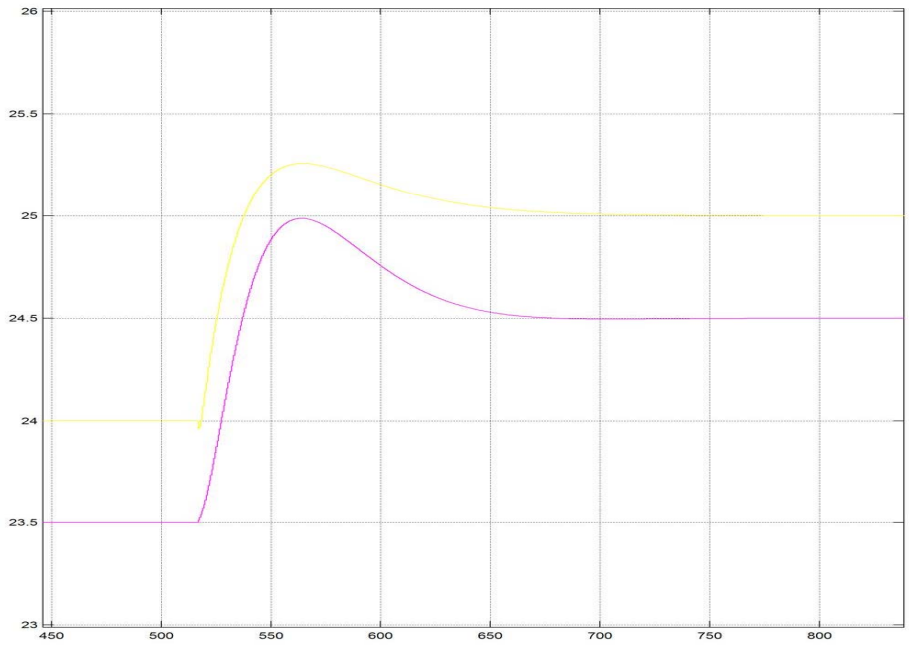


Figur 5.11Funktionsblocksdiagram för reglering av verklig process.

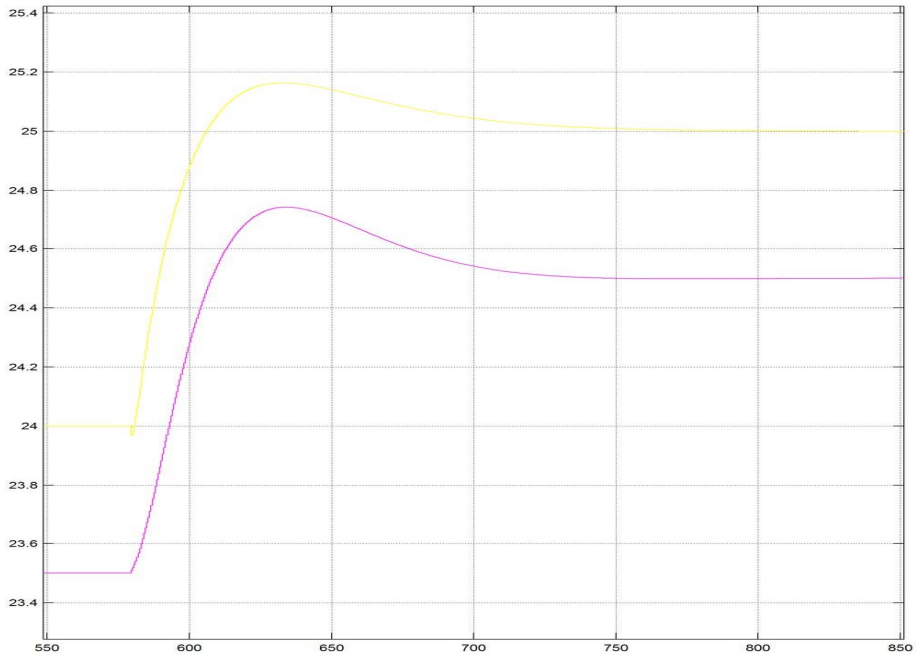


Figur 5.12 Subblock, "LQGcontrol" från figur 5.11

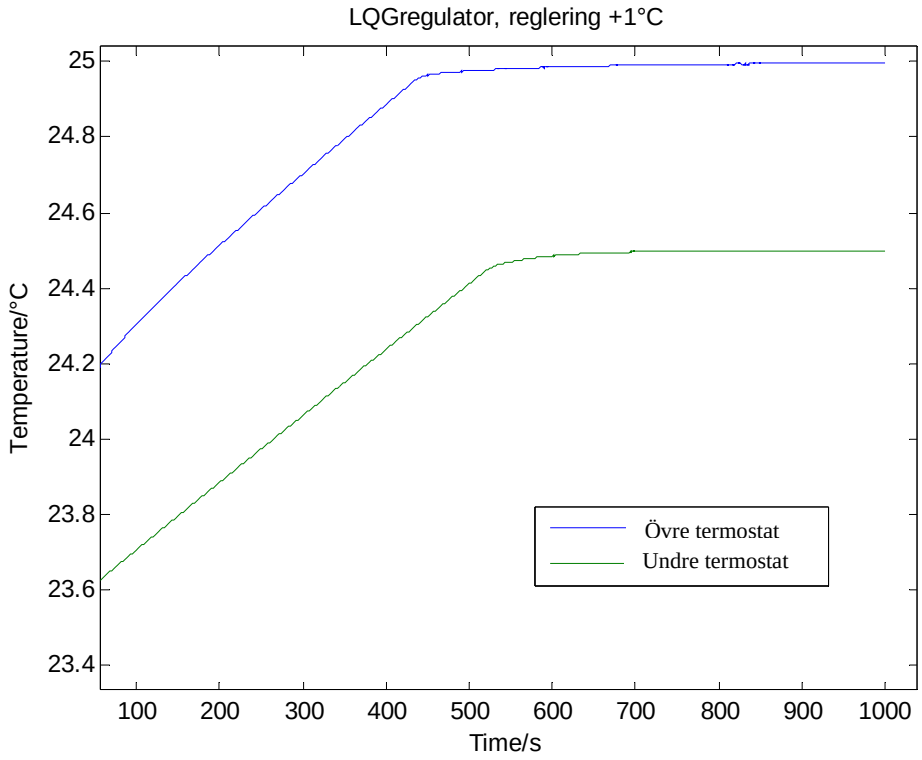
Därefter trimmades Lr mot den riktiga processen till:



Figur 5.13. Höjningen av temperaturen med 1°C. Här är gradienten inte begränsad och ingen antiwindupfunktion används heller. Den gula och den rosa linjen visar temperaturen i den nedre respektive den övre termostaten.



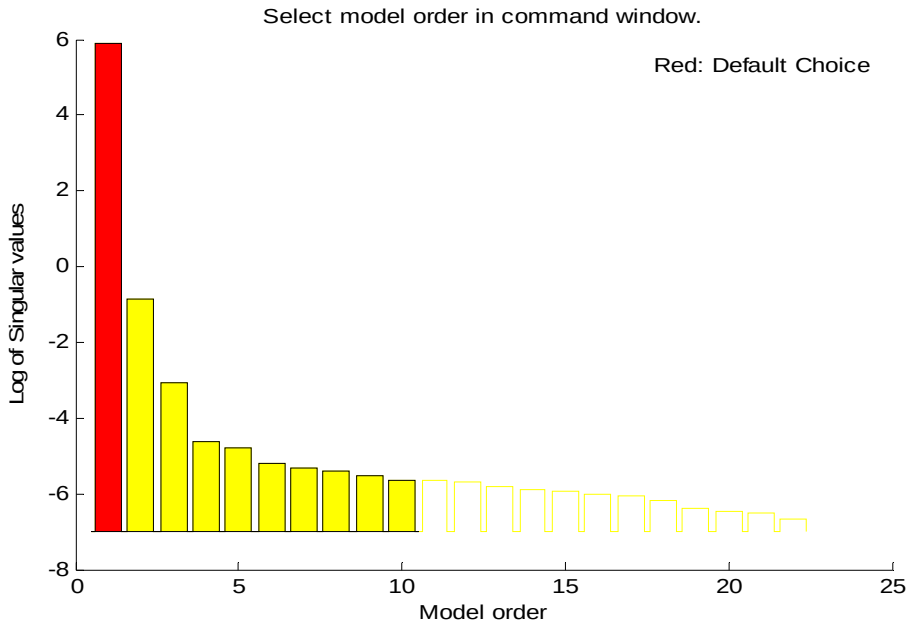
Figur 5.14 Detta är en simulering precis som i figur 5.3 med endast en skillnad. Förstärkningsmatrisen Lr är beräknad på ett annat sätt med hänsyn till referensvärdena som ska uppnås. Resultatet blir därmed optimerat för just dessa referensvärden (25 och 24.5°C). Den gula och den rosa linjen visar temperaturen i den nedre respektive den övretermostaten.



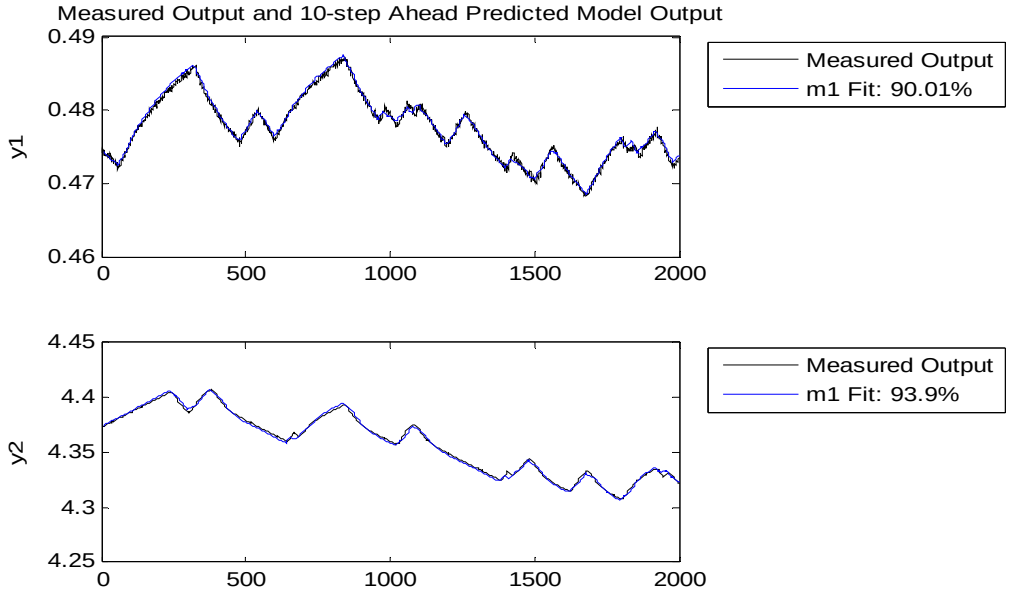
Figur 5.15 Höjning av kalorimeterns temperatur med 1°C. Temperaturen av den undre termostaten höjdes från 24 till 25°C och temperaturen av den övre termostaten från 23.5 till 24.5°C. Gradienten är maximal nästan genom hela temperaturhöjningen på grund av begränsningen av spänningsmatning till resistanserna som värmer den. Störningarna är ytterst små och regleringen är robust och har minimal svängning. Antiwindupfunktionen förhindrar integraldelen att skjuta i höjden vid gradientbegränsningen.

5.5 Systemidentifiering, försök 2

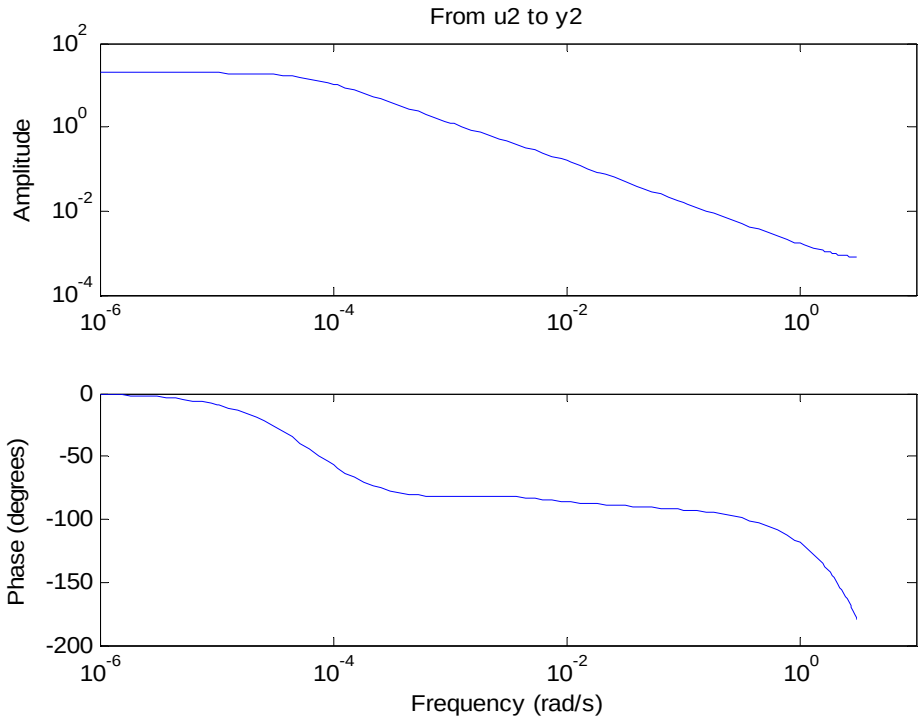
En fullständig systemidentifiering med bättre avtrendning gjordes. Detta gav bättre resultat vid simuleringar. Första ordningens modell är i princip tillräckligt, detta kan ses i figur 5.16. En andra ordningens modell togs fram med passning enligt figur 5.17. Bodediagram och impulssvar kan ses i figur 5.18 respektive 5.19. Simuleringsresultaten kan ses i figur 5.20. Där ses en höjning av temperaturen med 0.5°C på den undre termostaten och en höjning med 4.5°C för den övre termostaten. I figur 5.21 kan styrsignalerna för respektive termostat ses. Dessa är i rimlig skala och fungerar med stor sannolikhet väldigt bra på kalorimetern i praktiken, även om den här regleringen inte testades i det här fallet. För olika straff på styrsignalen blev resultatet ganska olika. I Bilaga 3 kan de inställningar som denna modell och regulator togs fram med ses.



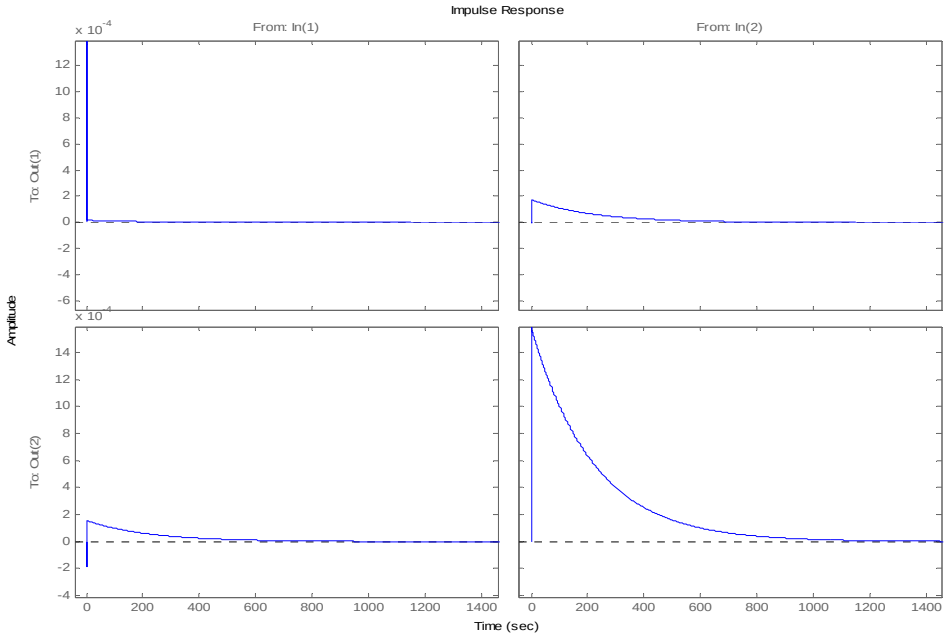
Figur 5.16 Singulärvärdesanalys anvisar en första ordningens modell som modellbeskrivning, men andra och tredje ordningens modell ser också ut som bra kandidater.



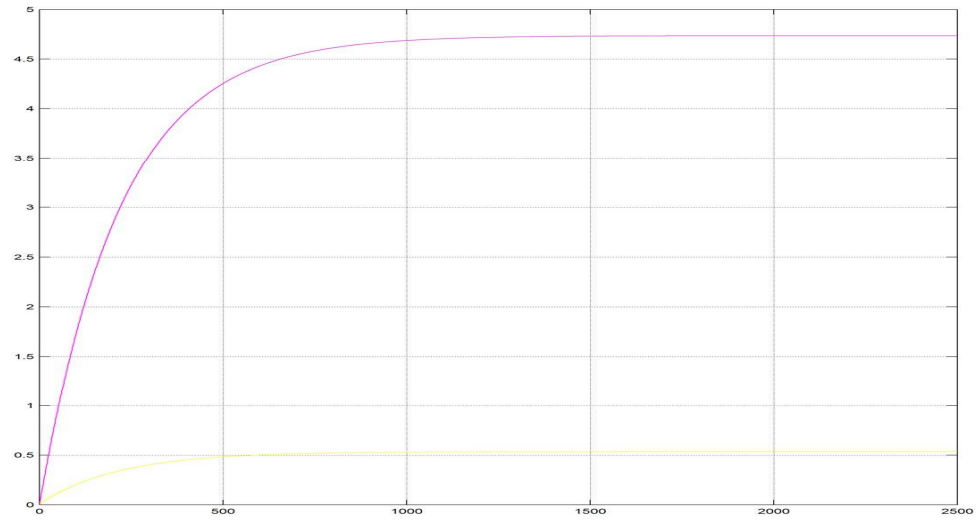
Figur 5.17. Passningen på valideringsdata var mycket bra 10 steg i förväg.



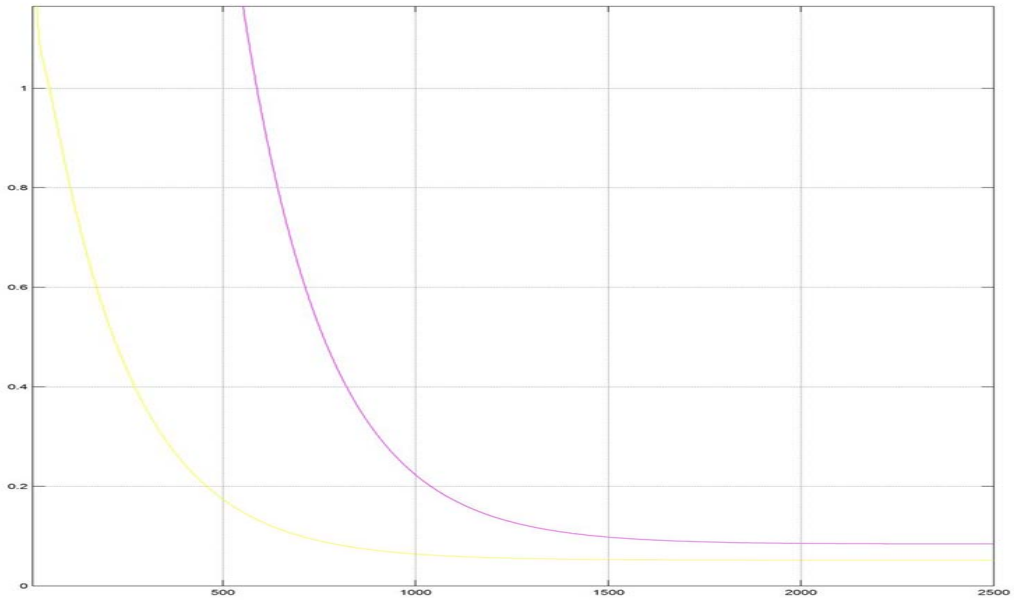
Figur 5.18. Bodediagrammet för den framtagna modellen ser bra ut. Amplituden för små frekvenser är rimlig också.



Figur 5.19. Impulssvaret är inte helt orimligt. Kanske skulle tidskonstanten för kurvan varit mindre. Det är dock inget man kan säga med stor säkerhet.



Figur 5.20. Denna graf visar en höjning av temperaturen för nedre termostaten med 0.5°C och en höjning för övre termostaten med 4.5°C. Resultatet är så pass bra att det knappt behövs någon integraldel.



Figur 5.21. Styrsignalen är precis som den bör vara och ligger på rätt värden vid stationäritet för temperaturhöjningarna i figur 5.20.

6. Slutsatser

6.1 Resultatsanalys

Systemidentifieringen gav olika resultat för olika mätdata. Identifieringarna beskrev inte heller kalorimetern särskilt bra till en början. Vid simulering fungerade dock de flesta av dessa modeller bra. Se till exempel figur 5.13. En testad modell fungerade bra att reglera kalorimetern med i praktiken. En bra avtrendning och identifiering som ses i slutet av avsnitt 5 gav bättre resultat utan att behöva manipulera referenseförstärkningen. En passande modell för denna process var med stor sannolikhet en andra ordningens modell även om en första ordningens modell räckte enligt n4sid.

6.2 Fördelar med LQG-reglering

Under normala förhållanden och med en bra systemidentifiering behöver referensförstärkningen inte trimmas och allt bör fungera relativt bra med framtagna matriser. Även om systemidentifieringen inte är optimal blir det slutna systemet stabilare då man flyttar polerna med hjälp av en observerare. Detta kan förenkla regleringen då svårigheter uppstår med vanligare metoder som tex PID-reglering.

7. Referenslista

Böcker:
[1] Karl J. Åström, Björn Wittenmark, ***Computer-controlled Systems***, Prentice Hall Inc, Upper Saddle River, 1997

[2] Rolf Johansson, ***System Modeling and Identification***, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1993.

[3] Ingemar Wadsö, (1994) ***Microcalorimetry of Aqueous and Biological Systems*** in ***Solution Calorimetry***, Edited by K.N. Marsh and P.A.G.O´Hare, Blackwell Scientific Publications, Oxford.

Manual:
[4] Ingemar Wadsö, Lars Wadsö, Peter Wikegard, ***S4, Isothermal Titration Calorimeter***, Lund University, Lund, 2007

8. Bilagor

8.1 Bilaga 1, försök 1

```
nx=4;ne=4;ny=1;
G=eye(nx,ne);

A=[0.99963 6.3602e-005 0.0032715 3.4071e-005 ;1.1906e-005 0.9993 0.00058608 -
0.011861 ; -0.01297 -0.00055327 0.92794 -0.0086171 ; 0.00010866     0.002453    -0.000668
0.34667];
C=[0.27688 -1.1874 0.00070337 -0.027796 ; -6.4823 -0.012037 0.029515 0.00048836];
B=[-4.1537e-006 -0.00010269 ; -0.00016448 -5.0883e-005 ; 0.00057215 -0.0043385 ;
0.076656   -0.0010291];

Q_e=eye(nx,ne); R=10*diag(1:ny); N=zeros(ne,ny);
bigR =[G*Q_e*G' G*N;N'*G' R];
[W,Wt]=fullrf(bigR);
B1=W(1:size(G,1),:);
D21=W(($+1-size(C,1)):$,:);
C2=C;
P21=syslin('d',A,B1,C2,D21);
[K,X]=lqe(P21);

AK=[A zeros(4,2);C eye(2,2)];
BK=[B;zeros(2,2)];
Q=[C'*C zeros(4,2);zeros(2,4) 0.1*eye(2,2)];RK=eye(2,2);     //Usual notations x'Qx + u'Ru
Big=sysdiag(Q,RK);    //Now we calculate C1 and D12
[w,wp]=fullrf(Big);C1K=wp(:,1:6);D12K=wp(:,7:$);   //[C1,D12]'*[C1,D12]=Big
P=syslin('d',AK,BK,C1K,D12K);    //The plant (continuous-time)
[L,XK]=lqr(P);
spec(AK+BK*L);    //check stability
norm(AK'*XK+XK*AK-XK*BK*inv(RK)*BK'*XK+Q,1);  //Riccati check
A
B
C
K
L
```

Detta är kod skriven i scilab för framtagning av K och L. I L är Li inkluderat.

8.2 **Bilaga 2, försök 1**

A =[0.99963 0.0000636 0.0032715 0.0000341
0.0000119 0.9993 0.0005861 -0.011861
-0.01297 -0.0005533 0.92794 -0.0086171
0.0001087 0.002453 -0.000668 0.34667]

B =[-0.0000042 -0.0001027
-0.0001645 -0.0000509
0.0005722 -0.0043385
0.076656 -0.0010291]

C =[0.27688 -1.1874 0.0007034 -0.027796
-6.4823 -0.012037 0.029515 0.0004884]

K=-[-0.0030003 0.1506032
0.5619062 0.0237411
-0.0017952 0.0006471
-0.2340222 -0.0096016]

Li=[-0.3107364 -0.0121120
0.0123486 -0.3107053]

L=-[-2.0797567 22.653789 0.0510623 -0.3890183
131.34902 -0.8043234 4.6670206 -0.0394623]

Detta är resultatet från koden i scilab.

8.3 Bilaga 3, försök 2

```
load filterident2hz.mat
u(1,:)=filterident2hz.Y(1).Data;
u(2,:)=filterident2hz.Y(2).Data;
y(1,:)=filterident2hz.Y(3).Data-24.5*ones(1,length(u));
y(2,:)=filterident2hz.Y(5).Data-20*ones(1,length(u));
figure,
subplot(411), plot(u(1,:)); ylabel('u1'), subplot(412), plot(u(2,:)); ylabel('u2'),
subplot(413), plot(y(1,:)); ylabel('y1'), subplot(414), plot(y(2,:)); ylabel('y2'),
d1=iddata(y',u');
N=2000;
d1=iddata((y(:,1:N))',(u(:,1:N))');
d2=iddata((y(:,(N+1):(2*N)))',(u(:,(N+1):(2*N)))');
m1=n4sid(d1,1:10)
%Choose model order n=5 for accurate; n=1 for simplistic model; n=3 for simple control-
oriented model
% Model fit
figure, compare(m1,d1)
% Cross validation
figure, compare(m1,d2)
% 10-step Prediction
figure, compare(m1,d2,10)
% Bode plot
figure, bode(m1)
[A,B,C,D,K]=ssdata(m1)
n=2; Q=100*eye(n); R=0.001*eye(2); N=zeros(n,2); [L,S,E]=dlqr(A,B,Q,R,N)
eig(A-B*L)
eig(A-K*C)
% Closed-loop impulse repsonse
figure, impulse(ss(A-B*L,B,C,D,1))
```

Detta är kod för en full systemidentifiering I MATLAB, samt framtagning av K och L.