

Ari-Pekka Kinnunen

SCR-KATALYSAATTORIN AMMONIAKKILATAUKSEN LQG-SÄÄTÖ

Diplomityö

Tekniikan ja luonnontieteiden tiedekunta

Tarkastajat: Prof. Matti Vilkkö

Veli-Pekka Pyrhönen

Toukokuu 2022

TIIVISTELMÄ

Ari-Pekka Kinnunen: SCR-katalysaattorin ammoniakkilatauksen LQG-säätö

Diplomityö

Tampereen yliopisto

Automaatiotekniikka

Toukokuu 2022

SCR-järjestelmä (engl. Selective Catalytic Reduction, selektiivinen katalyyttinen pelkistyminen) on dieselmootorin pakokaasun jälkikäsitelyjärjestelmä, jonka avulla dieselmootorin tuottamia typen oksidien (NOx) päästöjä voidaan vähentää. Tiukentuvien päästölainsäädännön asettamien rajojen vuoksi SCR-järjestelmältä vaaditaan tulevaisuudessa entistä parempaa tehokkuutta. Suunnitteilla olevassa työkonien Tier 5 -päästöstandardissa typen oksidien rajaksi ehdotetaan 0,04 g/kWh, joka on 90 % nykyistä 0,4 g/kWh rajaa pienempi. Käytännössä tiukentuva päästöraja tarkoittaa, että SCR-järjestelmältä vaaditaan lähes täydellistä NOx-konversiota järjestelmän ollessa toiminta-alueellaan.

Tässä työssä suunnitellaan SCR-järjestelmän urearuiskutuksen takaisinkytketty säätö. Urea hajoaa pakokaasussa ammoniakiksi, joka pelkistää typen oksidit SCR-katalysaattorissa. Järjestelmän NOx-konversiota hallitaan syötetyn urean ruiskutusmäärää ohjaamalla. Tavoitteena on ylläpitää mahdollisimman suuri NOx-konversio ilman liian suurta ammoniakkipäästöä. Tavoitteen saavuttamiseksi suunnitellaan katalysaattoriin varastoituneen ammoniakin eli ammoniakkilatauksen hallintaan perustuva, vahvistusskeduloitu LQG-säädin (engl. Linear Quadratic Gaussian). Katalysaattorin ammoniakkilatauksen estimoimiseksi suunnitellaan katalysaattorin keskelle sijoitetun ammoniakianturin mittausta hyödyntävä laajennettu Kalman-suodin.

Suunnittelun säätöjärjestelmän suorituskyky validoitiin moottoridynamometrillä suoritetuilla käytännön kokeilla. Järjestelmällä saavutettiin erittäin matala NOx-päästötaaso, NOx-konversion ollessa lähes täydellinen SCR-järjestelmän ollessa toiminta-alueella. Tyypinhyväksynnässä käytettävässä NRTC-testisyklissä NOx-päästökertoimeksi mitattiin 0,011 g/kWh kuumakäynnistyksenä ajetussa syklissä. Suurin mitattu katalysaattorin jälkeinen ammoniakkipitoisuus oli 8,61 ppm, joka syntyi moottorin kuormannostotilanteesta johtuvan katalysaattorin lämpötilan nopean nousun aikana.

Avainsanat: Selektiivinen katalyyttinen pelkistyminen, SCR, dieselmoottori, LQG, laajennettu Kalman-suodin

Tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck -ohjelmalla.

ABSTRACT

Ari-Pekka Kinnunen: LQG control of ammonia loading of a SCR-catalyst
Master of Science Thesis
Tampere University
Automation Technology
May 2022

SCR (Selective Catalytic Reduction) is an exhaust aftertreatment system used to reduce nitrogen oxide (NO_x) emissions produced by a diesel engine. Increasingly stringent emission regulations demand yet higher efficiency of the system. In the Tier 5 emission standards being developed the proposed limit for NO_x emissions is 0.04 g/kWh, which is 90 % of the current 0.4 g/kWh limit. In practice this new limit means that an almost perfect NO_x-conversion is required from the SCR system when in operating range.

In this thesis a feedback control system is designed for urea dosing of the SCR system. Urea is composed to ammonia in the exhaust, which acts as a reductant in the SCR reactions. The efficiency of the system is controlled with the amount of urea dosed. The objective is to maintain as high of a NO_x-conversion as possible, without excessive ammonia slip. To achieve this objective, a gain scheduled LQG-controller (Linear Quadratic Gaussian) is designed, which controls the amount of ammonia stored in the catalyst, or the ammonia loading. To estimate the ammonia loading of the catalyst, an extended Kalman filter utilizing the measurement of an ammonia sensor placed in the middle of the catalyst is designed.

The performance of the designed control system is validated with experiments performed on an engine dyno. An ultra low NO_x-emission level was achieved, with the mean NO_x-conversion being almost complete when the system was in operating range. An emission factor of 0.011 g/kWh for NO_x was measured for NO_x in the hot start NRTC test cycle used in type approval. Highest measured ammonia concentration downstream of the catalyst was 8.61 ppm, which was measured during a fast rise in the temperature of the catalyst during an engine acceleration.

Keywords: Selective catalytic reduction, SCR, diesel engine, LQG, extended Kalman filter

The originality of this thesis has been checked using the Turnitin OriginalityCheck service.

ALKUSANAT

Tämä diplomityö on tehty AGCO Power Oy:n tuotekehityksen Exhaust Aftertreatment -jaokselle. Haluan kiittää AGCO Power:in tuotekehitystä diplomityön mahdollistamisesta. Iso kiitos koko EAT-jaokselle työn mittausten suorittamiseen tarvittavien osien hankkimisesta sekä luomisesta. Erityisesti kiitos Juha Heikkilälle avusta työn mittauksissa ja tuesta koko diplomityöprosessin ajan.

Työn tarkastajina ja ohjaajina toimivat professori Matti Viikko ja Veli-Pekka Pyrhönen. Heitä kiitän saamastani palautteesta ja ohjauksesta diplomityön aikana, sekä yleisesti loistavasta automaatiotekniikan opetuksen toteuttamisesta.

Lopuksi kiitän opiskelutovereitani seurasta koulutöiden parissa sekä vähemmän koulutöihin liittyvässä toiminnassa. Vanhempiani ja siskoani kiitän tuesta ja kannustuksesta opiskeluun. Erityinen kiitos Vernalle tuesta diplomityön teon aikana kohdatuissa epätoivon hetkissä.

Tampereella, 22. toukokuuta 2022

Ari-Pekka Kinnunen

SISÄLLYSLUETTELO

1.	Johdanto	1
2.	SCR-järjestelmä	3
2.1	SCR-järjestelmän toimintaperiaate ja pakokaasun jälkikäsittelyjärjestelmä	3
2.2	SCR-järjestelmän hallintastrategiat	8
2.3	SCR-katalysaattorin dynaaminen malli	10
3.	Systeemin tilan estimointi ja vahvistusskeduloitu säätö	16
3.1	Lineaarinen neliöllinen optimisäätö	16
3.2	Kalman-suodin	18
3.3	Linear Quadratic Gaussian -säätö	20
3.4	Vahvistusskedulointi	21
3.5	Laajennettu Kalman-suodin	23
4.	SCR-katalysaattorin ammoniakkilatauksen estimaattoripohjainen säätö	25
4.1	Takaisinkytketyn säädön suunnittelumalli ja skedulointimuuttujien valinta	25
4.2	Ammoniakkilatauksen asetusarvon määrittäminen	29
4.3	Katalysaattorin ammoniakkilatauksen estimointi	33
4.4	Ammoniakkilatauksen säätimen suunnittelu	34
4.5	Suorituskyvyn arviointi	38
5.	Koejärjestelyt	41
5.1	Koelaitteisto	41
5.2	Testisyklit	43
6.	Tulokset	46
6.1	Ammoniakkilatauksen säädön suorituskyky	46
6.2	Tilaestimaattorin suorituskyky	49
6.3	NO _x - ja ammoniakkipäästö	52
7.	Yhteenveto	55
	Lähteet	58
	Liite A: Katalysaattorin linearisoidun tilamallin matriisit	63
	Liite B: Säätimen tilamalli	65

KUVALUETTELO

2.1	Ureaan perustuvan selektiivisen katalyyttisen pelkistymisen reaktioreitit.	7
2.2	Pakokaasun jälkikäsitelyjärjestelmän komponentit	7
2.3	Kaksiosaisen SCR-järjestelmän hallintastrategia. Mukailtu lähteestä [36].	10
2.4	SCR-katalyysaattorin mallinnus sarjaankytkettyinä CSTR-soluina	14
3.1	LQG-reguloidun järjestelmän rakenne	21
3.2	Vahvistuskeduloinnin sisältävän säätöpiirin lohkokkaavio. Mukailtu lähteestä [51].	21
4.1	SCR-katalyysaattorin ammoniakkilatauksen estimaattoripohjainen säätö	25
4.2	Moottorin toimintapisteiden kuvaantuminen SCR:n toimintapisteiksi ja pisteet säädön suunnittelulle.	29
4.3	SCR-katalyysaattoria edeltävät kaasujen moolisuhteet ja niihin sovitetut polynomimallit lämpötilan funktiona.	29
4.4	Tasapainotilan NO_x -konversio η_{NO_x} ja ammoniakkipäästö $X_{\text{NH}_3,ds}$ syöttösuhteen α funktiona toimintapisteissä 300 °C ja 400 °C	31
4.5	Optimoitu keskiarvoinen ammoniakkilataus ilman rajoitteita ja rajoitteilla $c_1 = 2,5$ ppm ja $c_2 = 10$ ppm. Kuormannostotilanteen NH_3 -rajoite rajoittaa ammoniakkilatausta matalilla lämpötiloilla ja tasapainotilan rajoite korkeilla lämpötiloilla.	32
4.6	Ammoniakkilatauksen jakauma SCR-katalyysaattorin pituussuunnassa eri toimintapisteissä.	32
4.7	Määritetyt säätimen vahvistukset painomatriiseilla $Q_x = 0,025I$, $Q_i = 0,025$ ja $R = 1$	37
4.8	Suunnitellun säätöjärjestelmän rakenne. Toteutettu säädin on ympäröity katkoviivalla, sen ulkopuolella olevien lohkojen ja signaalien kuvatessa fyysistä järjestelmää.	38
4.9	Järjestelmän taajuusvasteet eri toimintapisteissä linearisoitujen mallien perusteella määritettynä	39
4.10	Simuloitu säädetyin ammoniakkilatauksen vaste	40
4.11	Simuloitu ammoniakkipäästö kuormannostotilanteessa	40
5.1	Koelaitteisto moottorilaboratorion testisolussa	42
5.2	Käytettyjen testisykliin määrittelyt	44
6.1	Ammoniakkilatauksen säätö NRTC:n aikana	47

6.2	Ammoniakkilatauksen säätö RMC:n aikana	48
6.3	Ammoniakkilatauksen säätö kenttäsyklin aikana	49
6.4	Estimoitu ammoniakkilatauksen jakauma NRTC:n aikana	49
6.5	Estimoitu ja mitattu ammoniakkipitoisuus katalysaattorin keskellä	51
6.6	Hetkellinen ja kumulatiivinen NO _x -päästö kuumakäynnistyksenä ajettujen testisykliä aikana	52
6.7	Ammoniakkipäästö ajettujen testisykliä aikana	54

LYHENTEET JA MERKINNÄT

ASC	engl. Ammonia Slip Catalyst, ammoniakin hapetuskatalysaattori
CAN	engl. Control Area Network, ajoneuvoissa käytettävä tiedonsiirto-protokolla
CSTR	engl. Continuously Stirred Tank Reactor, sekoitussäiliöreaktori
DEF	engl. Diesel Exhaust Fluid, urean vesiliuos
DOC	engl. Diesel Oxidation Catalyst, hapetuskatalysaattori
DPF	engl. Diesel Particulate Filter, hiukkassuodatin
EKF	engl. Extended Kalman Filter, laajennettu Kalman-suodin
EPA	engl. Environmental Protection Agency, Yhdysvaltain ympäristön-suojeluvirasto
LQ	engl. Linear Quadratic, lineaarinen neliöllinen optimisäätö
LQG	engl. Linear Quadratic Gaussian, lineaarinen neliöllinen optimisäätö normaalijakautuneilla satunnaishäiriöillä
NO _x	Typen oksidit
NRTC	Non-Road Transient Cycle
RMC	Ramped Mode Cycle
SCR	engl. Selective Catalytic Reduction, selektiivinen katalyyttinen pelkistyminen
A	Jatkuva-aikaisen lineaarisen tilamallin tilamatriisi
α	Ammoniakin ja typen oksidien stoikiometrinen suhde [-]
B_u	Jatkuva-aikaisen lineaarisen tilamallin ohjausmatriisi
B_w	Jatkuva-aikaisen lineaarisen tilamallin häiriömatriisi
C	Lineaarisen tilamallin ulostulomatriisi
c_i	Aineen i konsentraatio [mol/m ³]
D	Lineaarisen tilamallin suoravaikutusmatriisi
d	Systeemin tunnettujen häiriöiden vektori
\mathbb{E}	Satunnaismuuttujan odotusarvo
η_{NO_x}	Typen oksidien konversio [%]

F	Pakokaasun tilavuusvirta [m^3/s]
$\mathbf{f}(\cdot)$	Jatkuva-aikaisen epälineaarisen tilamallin tilafunktio
$\mathbf{f}_d(\cdot)$	Diskreettiaikaisen epälineaarisen tilamallin tilafunktio
Γ	Diskreettiaikaisen lineaarisen tilamallin ohjausmatriisi
$\mathbf{h}(\cdot)$	Epälineaarisen tilamallin mittausfunktio
h	Näytteistys- ja säätöväli
K	Tilatakaisinkytkennän vahvistusmatriisi
EF_{NO_x}	Typen oksidien päästökerroin [g/kWh]
k_i	Integraattorin vahvistus
Q_c	Katalysaattorin lämpömäärä [J]
\dot{Q}	Lämpövirta [W]
\mathbf{m}	Systeemin mittaukset
\dot{m}_{DEF}	Syötettävän urealiuoksen massavirta [mg/s]
\dot{m}_{EG}	Pakokaasun massavirta [kg/h]
\dot{n}_i	Aineen i moolivirta [mol/s]
N	Katalysaattorin dynaamisen mallin CSTR-solujen lukumäärä
P	Estimointivirheen kovarianssimatriisi
Φ	Diskreettiaikaisen lineaarisen tilamallin tilamatriisi
Q	LQ-kustannusfunktion tilojen painomatriisi
R	LQ-kustannusfunktion ohjausten painomatriisi
r_i	Kemiallisen reaktion i reaktionopeus
R_w	Jatkuva-aikaisen prosessikohinan spektritiheys
Σ_v	Mittauskohinan kovarianssimatriisi
Σ_w	Prosessikohinan kovarianssimatriisi
T	Katalysaattorin lämpötila [K]
T_{EG}	Pakokaasun lämpötila [K]
Θ	Ammoniakin varastointikapasiteetti [mol/m^2]
θ	Ammoniakin peittosuhte, ammoniakkilataus [-]
\mathbf{u}	Systeemin ohjausvektori
\mathbf{v}	Satunnainen mittaushäiriö
v_{ij}	Kemiallisen reaktion i ainekomponentin j stoikiometrinen kerroin
V	Katalysaattorin tilavuus [m^3]

w	Satunnainen prosessihäiriö
X_i	Aineen i moolisuhde [ppm]
x	Systeemin tilavektori
\hat{x}	Tilaestimaatti

1. JOHDANTO

Dieselmoottori on ja tulee olemaan lähitulevaisuudessa energiatiheytensä vuoksi työko-
neiden tehonlähteenä itsenäisesti, tai osana sähköistettyä hybridijärjestelmää. Diesel-
moottori tuottaa pakokaasupäästöjä, ja palotapahtuman korkeissa lämpötiloissa syntyy
typen oksideja (NO_x). Typen oksidit ovat terveydelle ja ilmastolle haitallisia päästöjä, jotka
aiheuttavat hengitystiesairauksia ja ovat osallisena savusumun muodostumisessa. Tä-
män vuoksi lainsäädäntö asettaa rajat työkoneiden dieselmoottoreiden tuottamille pääs-
töille. Nykyisten päästörajoitusten saavuttamiseksi on käytettävä pakokaasun jälkikäsitte-
lyjärjestelmiä, joiden tehtävänä on poistaa tai muuttaa harmittomaan muotoon dieselmoot-
torin muodostamat säännellyt päästöt. Selektiivinen katalyyttinen pelkistyminen (SCR,
engl. Selective Catalytic Reduction) on pakokaasun jälkikäsitteilyn menetelmä, jolla die-
selmoottorin tuottamaa typen oksidien päästöä voidaan pienentää.

Lainsäädännön asettamat raja-arvot työkoneiden dieselmoottoreiden kaasui- ja hiukkas-
päästöille tiukentuvat jatkuvasti, mikä ajaa dieselmoottorin ja pakokaasun jälkikäsitte-
ilyn kehittymistä entistä puhtaammaksi ja tehokkaammaksi. Esimerkiksi Euroopan Union
asettamassa Stage-päästöstandardissa NO_x -päästöraja on pienentynyt Stage I:n vuon-
na 1999 voimaan astuneesta rajasta 9,2 g/kWh noin 95,7 % nykyään voimassa olevan
Stage V:n rajaan 0,4 g/kWh [1]. Yhdysvalloissa käytetään EPA:n (Environmental Protec-
tion Agency) asettamaa Tier-päästöstandardia, joka on päästörajoiltaan vastannut Stage-
standardin kehitystä. Nykyistä Tier 4 Final NO_x -päästörajaa ollaan suunnittelemassa pie-
nennettäväksi vielä nykyisestä 90 %:lla tulevaisuuden Tier 5 päästöstandardiin, jolloin
uudeksi ehdotetuksi päästörajaksi tulisi 0,04 g/kWh [2].

SCR-järjestelmän suorituskykyä hallitaan ennen katalyysaattoria pakokaasun sekaan syö-
tettävän urean vesiliuoksen ruiskutusmäärää ohjaamalla. Urean hajotessa muodostunut
ammoniakki pelkistää typen oksidit typeksi ja vedeksi SCR-reaktioissa. Hallinnan tavoit-
teena on ohjata urean ruiskutusmäärää halutun typen oksidien konversiotehokkuuden
saavuttamiseksi kuitenkin ilman liian suurta ammoniakkipäästöä. SCR-järjestelmän hal-
linnan kannalta päästötason tippuminen nykyisestä rajasta 90 %:lla arvosta 0,4 g/kWh
arvoon 0,04 g/kWh tarkoittaa vaaditun keskimääräisen NO_x -konversion kasvua noin 95
%:sta 99,5 %:iin. Käytännössä tämä tarkoittaa SCR-järjestelmältä vaadittavaa lähes täy-
dellistä konversiotehokkuutta silloin, kun pakokaasun lämpötila on riittävä ja järjestelmä
on toiminta-alueellaan.

Dieselmootorin SCR-järjestelmän hallinta on paljon tutkittu aihe, koska päästölainsäädännön vaatimukset kasvattavat järjestelmältä vaadittua suorituskykyä jatkuvasti. Lisäksi SCR-järjestelmä on varsinkin korkeaa NO_x -konversiota tavoiteltaessa haastava hallintaongelma [3]. Urean ruiskutusmäärän ohjaukseen on käytetty kehittyneitä mallipohjaisia menetelmiä, kuten malliprediktivistä säätöä [4]. Tutkimusta erittäin matalan NO_x -päästötason saavuttamisesta on tehty raskaan maantieliikenteen dieselmootorin soveluksessa [5]. Laajemmin kirjallisuudesta löytyviä SCR-järjestelmän hallintastrategioita on käsitelty työn luvussa 2.

Tämän työn tavoitteena on suunnitella työkoneen dieselmootorin SCR-järjestelmän takaisinkytketty säätö erittäin matalan NO_x -päästötason saavuttamiseksi. Säädön tavoitteena on ohjata urean ruiskutusmäärää siten, että saavutetaan mahdollisimman suuri NO_x -konversio, kuitenkin ilman liian suurta ammoniakkipäästöä. Tämän tavoitteen saavuttamiseksi tutkitaan katalysaattoriin varastoituneen ammoniakin määrän eli ammoniakkilatauksen hallintaan perustuvaa estimaattoripohjaista säätöä. SCR-katalysaattorin ammoniakkilatauksen säätöön suunnitellaan vahvistusskeduloitu LQG-säädin (engl. Linear Quadratic Gaussian). SCR-katalysaattorin ammoniakkilatausta ei voida suoraan mitata, joten ammoniakkilatauksen estimointiin suunnitellaan laajennettu Kalman-suodin. Työ rajataan käsittelemään ainoastaan SCR-järjestelmän urean ruiskutusmäärän ohjauksen kehittämistä, vaikka erittäin matalan NO_x -päästötason saavuttaminen tulee vaatimaan todennäköisesti muitakin hallintakeinoja, kuten esimerkiksi moottorin tuottaman NO_x -raakapäästön pienentämistä.

Kehitetyn säätöjärjestelmän suorituskyky validoidaan todellisella järjestelmällä suoritettavilla mittauksilla. Mittaukset suoritetaan moottoridynamometrissä työkonekäyttöön tarkoitettulla dieselmootorilla ja pakokaasun jälkikäsitelyjärjestelmällä. Typen oksidien päästökerroin ja syntynyt ammoniakkipäästö mitataan kolmessa eri testisyklissä.

Työn luvussa 2 esitellään ureaan perustuvan selektiivisen katalyyttisen pelkistymisen toimintaperiaate ja työssä tutkittavan pakokaasun jälkikäsitelyjärjestelmän osat, SCR-järjestelmän hallintastrategiat kirjallisuuskatsaukseen pohjautuen sekä SCR-katalysaattorin dynaaminen malli. Luvussa 3 käsitellään työssä käytettyjen säätö- ja estimointimenetelmien teoriaa, joihin perustuen urean ruiskutusmäärän ohjaukseen suunniteltu ammoniakkilatauksen estimaattoripohjainen säätö dokumentoidaan luvussa 4. Lisäksi suunnitellun säätöjärjestelmän suorituskykyä ja robustisuutta arvioidaan järjestelmän taajuusvasteen ja simulointien perusteella. Lopuksi työn luvussa 5 esitellään suorituskyvyn validoimiseksi todellisella järjestelmällä tehtävien mittausten käytännön koejärjestelyt ja luvussa 6 mittausten tulokset.

2. SCR-JÄRJESTELMÄ

Dieselmootorin pakokaasun jälkikäsitteilylaitteiston tehtävänä on poistaa tai muuttaa haittomaan muotoon moottorin tuottaman pakokaasun sisältämiä ympäristölle tai terveydelle haitallisia päästöjä. SCR-järjestelmä on pakokaasun jälkikäsitteilyjärjestelmä, joka vähentää dieselmootorin NO_x-päästöjä muuttamalla ne haitattomaksi typeksi ja vedeksi katalyyttisillä pelkistysreaktioilla. Tässä luvussa esitellään ureaan perustuvan selektiivisen katalyyttisen pelkistymisen toimintaperiaate, urean ruiskutusmäärän ohjaukseen kirjallisuudessa esitettyjä säätöstrategioita ja SCR-katalysaattorin dynaaminen malli.

2.1 SCR-järjestelmän toimintaperiaate ja pakokaasun jälkikäsitteilyjärjestelmä

Selektiivisessä katalyyttisessä pelkistymisessä typen oksidit pelkistyvät typeksi ja vedeksi katalysaattorin ja pelkistimen avulla. Liikkuvien koneiden SCR-järjestelmissä pelkistimenä toimii tyypillisesti ammoniakki (NH₃), joka syötetään pakokaasun sekaan tilavuusprosenttiltaan 32,5 % ureaa (CO(NH₂)₂) sisältävänä vesiliuoksena, joka tunnetaan yleisesti lyhenteellä DEF (engl. Diesel Exhaust Fluid) tai kauppanimellä AdBlue®.

Pakolinjaan ruiskutettu urean vesiliuos sekoittuu pakokaasun kanssa ja hajoaa ammoniakiksi. Ensin vesi haihtuu liuoksesta, minkä jälkeen urea hajoaa ammoniakiksi kahden reaktiovaiheen, termolyysiin (yhtälö 2.1) ja hydrolyysiin (yhtälö 2.2) kautta [6, s. 487]:



Termolyysissä urea hajoaa pakokaasun lämmön seurauksena ammoniakiksi ja isosyaanihapoksi (HNCO). Isosyaanihapo hajoaa edelleen ammoniakiksi ja hiilidioksidiksi hydrolyysireaktiossa.

Urean epätäydellinen hajoaminen voi johtaa kiinteiden depositioiden muodostumiseen pakolinjaan. Depositiot voivat koostua kiteytyneestä ureasta ja hajoamisreaktioiden välivaiheiden sivutuotteista [7]. Urea ei hajoa sen sulamispistettä (133 °C) matalammissa lämpötiloissa, jolloin sen syöttö pakolinjaan ei ole mahdollista. Käytännön sovelluksissa urean ruiskutusmäärää rajoitetaan pakokaasun lämpötilan ja massavirran funktiona, ja

ruiskutus katkaistaan kokonaan pakokaasun lämpötilan ollessa alle 180–225 °C depositioiden muodostumisriskin vähentämiseksi [8]. Urearuiskun jälkeen pakolinjaan sijoitetaan usein pakokaasua sekoittava laite, jonka tehtävänä on lisätä pakokaasun ja syötetyn urean sekoittumista urean hajoamisen tehostamiseksi ja tasaisen ammoniakkijakauman aikaansaamiseksi katalysaattorin sisään tulossa [6, s. 467]. Ammoniakin epätasainen jakautuminen SCR:n poikittaispinta-alalle heikentää katalysaattorin suorituskykyä [9].

Ammoniakin on ensin absorboitettava eli kiinnityttävä katalysaattorin pintaan toimiakseen pelkistimenä SCR-reaktioissa. Ammoniakin adsorboituminen ja desorboituminen eli molekyylin irtoaminen voidaan mallintaa kaksisuuntaisena reaktioyhtälönä:

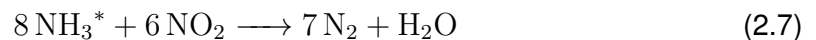
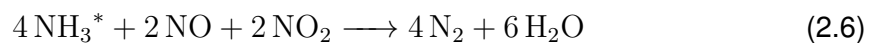
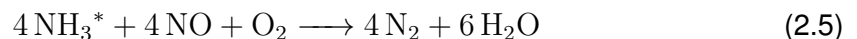


missä $(*)$ on vapaa adsorbtiokohta ja NH_3^* adsorboitunut ammoniakkimolekyyli. Katalyytin pintaan adsorboitunut ammoniakin määrä eli katalysaattorin ammoniakkilataus ilmaistaan suhteellisena peittoasteena

$$\theta = \frac{M_{\text{NH}_3^*}}{\Theta}, \theta \in [0, 1], \quad (2.4)$$

missä $M_{\text{NH}_3^*}$ on adsorboituneen ammoniakin ainemäärä ja Θ on katalysaattorin ammoniakin varastoimiskapasiteetti.

Selektiivisessä katalyyttisessä pelkistymisessä adsorboitunut ammoniakki pelkistää typen oksidit typeksi ja vedeksi. Pelkistymisreaktiot voidaan mallintaa Eley-Rideal mekanismin avulla, missä pelkistävä NO_x -molekyyli reagoi kaasufaasista adsorboituneen ammoniakkimolekyylin kanssa. Typen oksidit pelkistyvät kolmen eri pääreaktion kautta [6, s. 358]:



joista reaktiota 2.5 kutsutaan normaaliksi SCR-reaktioksi, reaktiota 2.6 nopeaksi SCR-reaktioksi ja reaktiota 2.7 hitaaksi SCR-reaktioksi.

SCR-reaktioilla on eri reaktionopeudet, jotka riippuvat typen oksidien NO_2 : NO suhteesta. Dieselmoottorin NO_x -päästöt ovat tyypillisesti 85–95 % NO :ta, jolloin normaali SCR-reaktio on hallitseva. Nopea SCR-reaktio vaatii myös NO_2 :n läsnäoloa pakokaasussa. Nopean SCR-reaktion reaktionopeutta voidaan kasvattaa lisäämällä typen oksidien NO_2 -osuutta SCR:ää edeltävällä hapetus-katalysaattorilla, mikä parantaa SCR-katalysaattorin suorituskykyä matalissa lämpötiloissa [10]. Toisaalta liian suuri NO_2 -osuus aiheuttaa hitaan SCR-reaktion aktivoitumisen, joka heikentää katalysaattorin suorituskykyä. Tämän

vuoksi optimaalinen NO₂:NO suhde on noin 50:50 [11].

Katalysaattorin hetkellisen suorituskyvyn mittarina käytetään yleisesti NO_x-konversiota η_{NO_x} , joka on pelkistyneiden ja sisäänmenevien typen oksidien suhde

$$\eta_{NO_x} = \frac{X_{NO_x,us} - X_{NO_x,ds}}{X_{NO_x,us}} \cdot 100\%, \quad (2.8)$$

missä $X_{NO_x,us}$ on typen oksidien mooliosuus ennen SCR-katalysaattoria (us, engl. upstream) ja $X_{NO_x,ds}$ on typen oksidien mooliosuus SCR:n jälkeen (ds, engl. downstream).

SCR-katalysaattorin NO_x-konversiotehokkuutta hallitaan urean syöttömäärää ohjaamalla. Tavallisissa olosuhteissa hallitsevista SCR-reaktioista 2.5 ja 2.6 nähdään, että ammoniakkin ja typen oksidien stoikiometriset kertoimet ovat samat, jolloin yksi ammoniakkimolekyyli pelkistää yhden NO_x-molekyylin. Tämän vuoksi SCR:n hallinnassa yleisesti käytetty ohjausmuuttuja on syötetyn ammoniakkin ja typen oksidien stoikiometrinen suhde

$$\alpha = \frac{X_{NH_3,us}}{X_{NO_x,us}}, \quad (2.9)$$

missä $X_{NH_3,us}$ on syötetyn ammoniakkin moolisuhde.

Pelkistymisreaktioiden stoikiometriasta seuraa, että ideaalisessa tapauksessa täydellinen NO_x-konversio saavutetaan syöttämällä ureaa siten, että ammoniakkia ja typen oksideja on stoikiometrisesti sama määrä, eli syöttösuhde $\alpha = 1$. Käytännössä urearuiskutuksen staattisella stoikiometrisellä ohjauksella ei kuitenkaan voida saavuttaa jatkuvaa korkeaa NO_x-konversiotehokkuutta työkoneen dieselmoottorin dynaamisen käyttöprofiiliin, ja siitä seuraavien katalysaattorin nopeasti ja laajalla toiminta-alueella tapahtuvien toimintapisteiden muutoksien takia. [12]

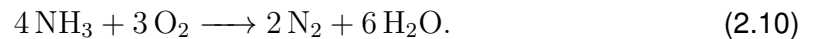
Ammoniakin varastoituminen katalysaattoriin on SCR-järjestelmän dominoiva dynamiikka. Varsinkin nykyään yleisesti käytetyillä zeoliittipohjaisilla katalyyteillä pinnoitetuilla katalysaattoreilla on suuri ammoniakkin varastointikapasiteetti, mikä on otettava huomioon järjestelmän hallintastrategiaa suunniteltaessa [13]. NO_x-konversiotehokkuus on verrannollinen varastoituneen ammoniakkin määrään. Ammoniakin varastoitumisilmiö aiheuttaa järjestelmään hitautta.

Urean liiallinen syöttö voi aiheuttaa ylimääräisen reagoimatta jääneen ammoniakkin kulkeutumisen katalysaattorin läpi, jolloin syntyy ammoniakkipäästö. Englanninkielisissä lähteissä usein käytetty termi ammoniakkipäästölle on NH₃-slip. Tämä aiheuttaa haasteen urean ruiskutusmäärän ohjaukselle, sillä suuri katalysaattorin ammoniakkilataus vaaditaan korkean NO_x-konversion saavuttamiseksi, mutta se samalla kasvattaa ammoniakkipäästön riskiä. Katalysaattorin ammoniakkin varastoimiskapasiteetti on suuri katalyytin lämpötilan ollessa matala, mutta kapasiteetti pienenee merkittävästi lämpötilan kasvaessa. Tästä johtuen transienttiolosuhteissa katalysaattoriin varastoitunut ammoniakki voi

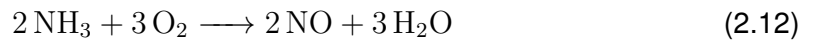
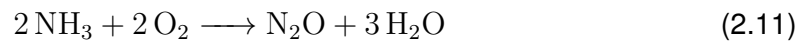
desorbtoitua nopean pakokaasun lämpötilan ja massavirran kasvun seurauksena, aiheuttaen äkillisen ammoniakkipäästön muodostumisen [14].

Ammoniakki on suurissa pitoisuuksissa terveydelle haitallinen, pistävän hajuisen kaasu ja sen suurin sallittu pitoisuus työkoneen pakokaasussa on rajoitettu lainsäädännöllä. Euroopan Unionin asettamien Stage III/IV päästöstandardien mukaan suurin sallittu ammoniakkipitoisuus on 25 ppm käytetyn testisyklin yli keskiarvona laskettuna [1]. Yhdysvaltojen EPA:n (engl. Environmental Protection Agency) Tier 4 päästöstandardeissa ammoniakkipitoisuudelle ei ole asetettu rajaa, mutta sen suositellaan olevan keskiarvoltaan alle 10 ppm testisyklin yli [15]. Tässä työssä ammoniakkipitoisuuden hetkellisen arvon ylärajaksi asetetaan 10 ppm.

Ammoniakkipäästön hallitsemiseksi voidaan SCR-katalysaattorin loppupäähän sijoittaa jalometalleja sisältävä osio ASC (engl. Ammonia Slip Catalyst), joka hapettaa reagoimatta jäänyttä ammoniakkiä [6, s. 11]. Ammoniakin hapettuminen noudattaa reaktioyhtälöä:

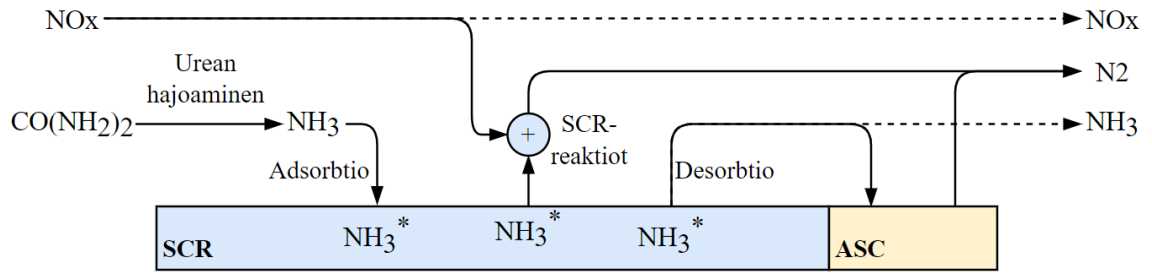


Käytännössä ammoniakin hapettuminen hapetuskatalysaattorissa ei ole täysin selektiivinen typeksi, vaan varsinkin korkeissa lämpötiloissa ammoniakki reagoi sivureaktioissa muodostaen ilokaasua (N_2O) ja typen oksideja [16]:



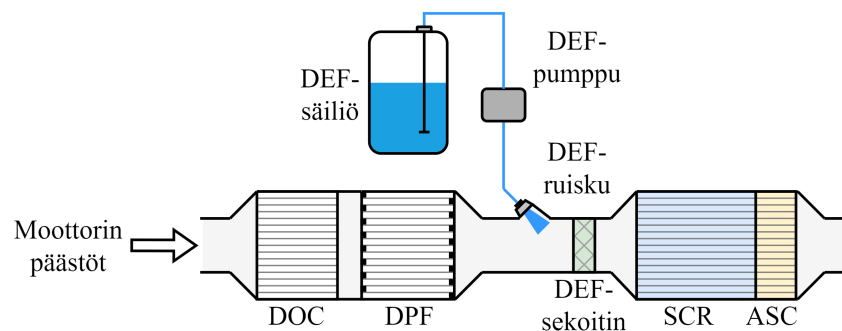
Ammoniakin hapetuskatalysaattorin N_2 -selektiivisyyden parantamiseksi on kehitetty rakenteeltaan kaksikerroksisella pinnoitteella varustettu ASC, jossa hapettavan jalometallikerroksen päällä on kerros SCR-pinnoitetta [16]. Jalometallikerroksen mahdollisesti tuottamat typen oksidit kulkevat SCR-kerroksen läpi, joka pelkistää niitä typeksi. Kaksikerroksisen rakenteen on todettu parantavan ASC:n N_2 -selektiivisyyttä pelkkään jalometallilla pinnoitettuun ASC:hen verrattuna ilman merkittävää ammoniakin hapetuskyvyn alentumista [17].

Ureaan perustuvan selektiivisen katalyyttisen pelkistymisen toimintaperiaate on tiivistetty kuvassa 2.1. Halutut reaktioreitit on piirretty jatkuvilla viivoilla ja epähalutut reaktioreitit katkoviivoilla. Urea hajoaa ammoniakiksi, joka adsorboiduttuaan katalyytin pintaan toimii pelkistimenä SCR-reaktioissa. Tavoitteena on mahdollisimman korkea NO_x -konversio ilman liian suurta ammoniakkipäästöä. Ammoniakkipäästö syntyy reagoimattoman ammoniakin desorbtoituessa katalyytin pinnasta. Katalysaattorin loppupäässä sijaitseva hapettava osio vähentää ammoniakkipäästöä.



Kuva 2.1. Ureaan perustuvan selektiivisen katalyyttisen pelkistymisen reaktioreitit.

Tässä työssä tutkittavan pakokaasun jälkikäsittelyjärjestelmän komponentit ovat esitettyinä kuvassa 2.2. Järjestelmä sisältää SCR:n lisäksi hapetuskatalysaattorin (DOC, engl. Diesel Oxidation Catalyst) ja hiukkassuodattimen (DPF, engl. Diesel Particle Filter). Hapetuskatalysaattorin tehtävänä on hapettaa palamattomat hiilivedyt (HC) ja häkä (CO) hiilidioksidiksi (CO_2). Sillä on myös muita pakokaasun jälkikäsittelyjärjestelmää avustavia toimintoja. DOC hapettaa NO:ta NO_2 :ksi ja polttaa jälkiruiskutuksella pakolinjaan syötettyjä hiilivetyjä pakolinjan lämpötilan nostamiseksi. Hiukkassuodattimen tehtävänä on poistaa moottorin tuottamia noesta ja tuhkasta koostuvia pienhiukkaspäästöjä. Itse katalysaattoreiden lisäksi pakokaasun jälkikäsittelyjärjestelmään kuuluvat myös pakolinjan anturit, joita käytetään järjestelmän hallintaan ja monitorointiin. Järjestelmästä riippuen siihen kuuluu eri määrä lämpötila-, paine- ja NO_x -antureita.



Kuva 2.2. Pakokaasun jälkikäsittelyjärjestelmän komponentit

SCR-järjestelmä koostuu urean syöttölaitteistosta ja katalysaattorista. Urean vesiliuos on säilytettyinä ajoneuvoon sijoitetussa säiliössä. DEF-pumppu paineistaa järjestelmän, ja syötettävän urean ruiskutusmäärää ohjataan DEF-ruiskun venttiilin aukioloajan pulssinleveysmodulaatiolla. Pakolinjaan on DEF-ruiskun jälkeen sijoitettuna pakokaasua sekoittava laite urean hajoamisen tehostamiseksi ja tasaisen ammoniakijakauman saavuttamiseksi. SCR-katalysaattori koostuu katalyyttisellä aineella pinnoitetusta keraamisesta kenosta, jonka loppuosio on pinnoitettu kaksikerroksisella ammoniakkia hapettavalla pinnoitteella.

2.2 SCR-järjestelmän hallintastrategiat

SCR-järjestelmän NO_x-konversiota ja ammoniakkipäästöä hallitaan urean ruiskutusmäärää ohjaamalla. Yksinkertaisimmissa SCR-järjestelmissä ohjaus muodostetaan katalysaattoria ennen mitattujen tai estimoitujen arvojen perusteella käyttämällä eri toimintapisteeissä ennalta kalibroituja hakutaulukoita. Myötäkytketty ohjaus ei pysty kompensoimaan prosessi- tai mittaushäiriöitä ja on herkkä mallinnusvirheille. Lisäksi ruiskutusmäärien toimintapistekohtainen määrittäminen vaatii merkittävää kalibroituvuutta. Myötäkytketyllä ohjauksella on Willems et. al. [18] mukaan mahdollista saavuttaa 70–80 % keskimääräinen NO_x-konversiotehokkuus.

Takaisinkytketty säätöpiiri on epäherkkä mallinnusvirheille ja se pystyy vaimentamaan ulkoisten häiriöiden vaikutusta säädettäviin suureisiin. SCR-järjestelmässä häiriön voi aiheuttaa esimerkiksi urean ruiskutusmäärän virhe tai urean epätäydellinen hajoaminen. SCR-järjestelmän on myös kyettävä täyttämään päästövaatimukset koko elinkaarensa ajan. Järjestelmän suorituskyky voi heikentyä katalysaattorin hydrotermisen ikääntymisen [19] tai myrkyttymisen [20] seurauksena.

Takaisinkytkettyyn säätöön voidaan käyttää katalysaattorin jälkeen sijoitetun NO_x-anturin mittaamaa arvoa, jonka perusteella urean ruiskutusmäärää säädetään tavoitellun NO_x-konversiotehokkuuden ja NO_x-päästötason saavuttamiseksi [12]. Myös ammoniakkipitoisuuden mittaamiseen on kehitetty anturi, jota voidaan käyttää takaisinkytketyssä säädössä [21]. Järjestelmän hitaus rajoittaa takaisinkytketyn säädön suorituskykyä toimintapisteen muuttuessa nopeasti. Hitauden takia takaisinkytkennän rinnalle yhdistetään usein myötäkytketty ohjaus [22].

NO_x-anturin käytön haasteena takaisinkytketyssä säädössä on sen ristiherkkyys ammoniakille. Anturin ristiherkkyys voidaan mallintaa yhtälöllä [23]

$$c_{NO_x, sensor} = c_{NO_x} + K_{cs} c_{NH_3}, \quad (2.14)$$

missä $c_{NO_x, sensor}$ on NO_x-anturin ulostulo, K_{cs} ristiherkkyyskerroin, c_{NO_x} todellinen NO_x-konsentraatio ja c_{NH_3} todellinen ammoniakikonsentraatio. Frobert et. al. saivat empiirisen tutkimuksensa [24] perusteella ristiherkkyyskerroimeksi 0,67, kun taas Pla et. al. esittävät artikkelissaan [25] ristiherkkyyskerroimelle lämpötilariippuvaista mallia. Ristiherkkyysden vuoksi anturin mitaama signaali on monitulkintainen pakokaasun sisältäessä ammoniakia, mikä aiheuttaa systeemin tilan havaittavuuden menettämisen saman mittauksen kuvaantuessa kahteen eri systeemin tilaan [26].

Ammoniakin varastoitumisen ollessa SCR-järjestelmän merkittävin dynamiikka, perustuvat monet SCR:n hallintastrategiat katalysaattorin ammoniakkilatauksen hallintaan. Ammoniakkilatauksen mittaukseen on kehitetty menetelmiä, kuten katalyytin sähköjohtavuuteen perustuva mittaus [27]. Ne eivät kuitenkaan nykyisellään ole sovellettavissa liik-

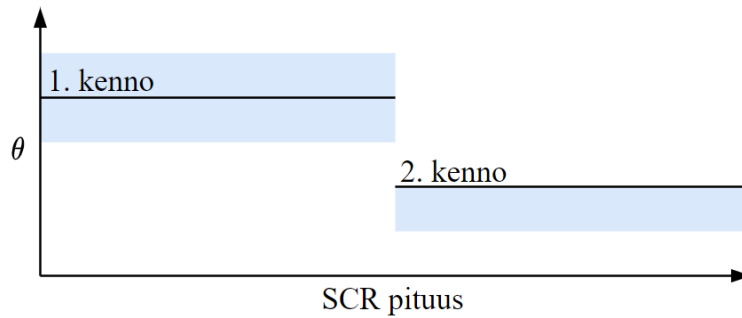
kuvan työkoneen SCR-järjestelmään. Siksi ammoniakkilatausta hallitaan mallipohjaisesti, jonka mahdollistamiseksi on kehitetty katalyysaattoria edeltäviä ja jälkeisiä mittauksia hyödyntäviä tilaestimaattoreita. Kirjallisuudessa katalyysaattorin tilan estimointiin on suunniteltu epälineaarisia tilahavaintsijoita [28, 29], laajennettuja Kalman-suotimia [30, 31, 32] ja partikkelisuodin [33].

Surenhalli et. al. tutkivat teknisessä julkaisussaan [32] eri anturikonfiguraatioiden vaikutusta laajennetun Kalman-suotimen estimointivirheeseen. Dieselmoottorilla suoritettujen mittausten perusteella pienin estimointivirhe saatiin käyttämällä NO_x - ja ammoniakkianturia. Pelkästään ammoniakkianturia käytettäessä saavutettiin toiseksi pienin estimointivirhe, kun taas pelkkä NO_x -anturi tuotti huomattavasti suuremman virheen varsinkin estimoituun ammoniakkipitoisuuteen, virheen ollessa 9-kertainen kumpaakin mittausta käyttävään estimaattoriin verrattuna. Tutkimuksen mukaan ammoniakkimittauksesta on merkittävää hyötyä ammoniakkilatauksen estimoinnissa.

Ammoniakkianturin käyttöä takaisinkytketyssä säädössä käsitellään Herman et. al. artikkelissa [34]. Heidän esittämässä mallipohjaisessa säätöjärjestelmässä ammoniakkianturia käytetään mallinnetun ammoniakkilatauksen asetusarvon adaptointiin, ammoniakkipäästön hallintaan ja järjestelmän vikadiagnostiikkaan. Ammoniakkianturi on sijoitettu pituussuunnassa SCR-katalyysaattorin keskelle. Keskelle sijoitetun anturin mittaama ammoniakkipitoisuus on absoluuttiselta tasoltaan suurempi ja herkempi ruiskutusmäärän muutoksille katalyysaattorin jälkeen sijoitettuun anturiin verrattuna, johtuen pienemmästä anturin edessä olevasta ammoniakin varastointikapasiteetista. Artikkelissa tutkittu järjestelmä ei sisältänyt ammoniakin hapetuskatalyysaattoria. Jos järjestelmä sisältää lisäksi ammoniakin hapetuskatalyysaattorin, vähenee katalyysaattorin jälkeisen ammoniakkimittauksen hyödyllisyys takaisinkytkennässä entisestään ammoniakkipitoisuuden ollessa suuren osan ajasta lähellä nollatasoa.

Hsieh ja Wang ovat kehittäneet artikkeleissaan [35, 36] säätöstrategian kaksiosaiselle SCR-katalyysaattorille. Ideana on hallita katalyysaattorin ammoniakkilatauksen profiilia porrasmaisen muodon säilyttämiseksi. Hallintastrategian toteuttamiseksi on suunniteltu epälineaarinen säätölaki backstepping-metodia käyttäen. Hallintastrategian periaate on esitetty kuvassa 2.3. Ensimmäisen SCR-kennon ammoniakkilataus pyritään pitämään korkean asetusarvon lähellä korkean NO_x -konversion saavuttamiseksi, kun taas taempana olevan kennon ammoniakkilataus pyritään pitämään matalan ylärajan alapuolella ammoniakkipäästön välttämiseksi.

SwRI:ssä (engl. Southwest Research Institution) suoritetussa tutkimuksessa [5] tutkittiin typen oksidipäästöjen hallintatapoja erittäin matalan NO_x -päästötason saavuttamiseksi. Tutkimus keskittyi maanteillä käytettävän raskaan liikenteen dieselmoottorien sovellukseen, mutta tulokset ovat sovellettavissa myös työkoneiden SCR-järjestelmään. Rao et. al. artikkelissa [37] käsitellään tarkemmin tutkimuksessa käytetyn SCR-järjestelmän hallin-



Kuva 2.3. Kaksiosaisen SCR-järjestelmän hallintastrategia. Mukailtu lähteestä [36].

taa. Järjestelmän konfiguraatio on samankaltainen Herman et. al. [34] käyttämän kanssa, missä ammoniakkianturi on sijoitettu SCR-katalysaattorin keskelle. Ammoniakkianturia käytetään mallinnetun ammoniakkilatauksen korjaamiseen. Korjaukseen käytettyä menetelmää ei käsitellä artikkelissa. Suunnittelun säätimen periaate on sama kuin Hsieh ja Wang artikkelissa [35], mutta on toteutettu yksinkertaisemmin. Urean ruiskutusmäärää säädetään toimintapisteestä riippuvan halutun ammoniakkilatauksen keskiarvon saavuttamiseksi, minkä lisäksi ohjaus sisältää korjaustermin halutun ammoniakkilatauksen profiiliin ylläpitämiseksi. Artikkelin SCR-järjestelmällä saavutettiin 98,2–99,7 % keskimääräinen NO_x -konversio käytetyissä testisykleissä.

Kirjallisuuskatsauksen perusteella tehdyt havainnot voidaan tiivistää seuraavasti. Säättöjärjestelmän tulisi sisältää takaisinkytkentä järjestelmän suorituskyvyn ylläpitämiseksi häiriöstä huolimatta. Erittäin matalaa päästötasoa tavoiteltaessa NO_x -anturiin perustuvan takaisinkytketyn säädön haasteeksi tulee käytännössä nollassa oleva NO_x -pitoisuus SCR:n jälkeen, minkä lisäksi NO_x -anturin ongelmana on sen ristiherkkyys ammoniakille. Mallipohjaisella estimoidun ammoniakkilatauksen hallintaan perustuvalla säätöjärjestelmällä on tehtyjen tutkimuksien perusteella saavutettavissa korkea NO_x -konversiotehokkuus. Ammoniakkilatauksen hallintaan perustuvassa säätöjärjestelmässä voidaan myös ottaa huomioon ammoniakkipäästön hallinta sen ollessa verrannollinen katalysaattorin ammoniakkilataukseen. Takaisinkytketyssä säädössä voidaan käyttää ammoniakkianturia, josta on hyötyä varsinkin ammoniakkilatauksen estimoinnissa. Sijoittamalla ammoniakkianturi pituussuunnassa SCR-katalysaattorin keskelle saadaan hyödyllisempi signaali takaisinkytkentää varten ammoniakkipitoisuuden vasteen ollessa nopeampi ja absoluuttiselta tasoltaan suurempi, varsinkin jos järjestelmä sisältää ammoniakkin hapetus-katalysaattorin.

2.3 SCR-katalysaattorin dynaaminen malli

SCR-katalysaattorin kaltaista läpivirtausreaktoria voidaan mallintaa tulppavirtausreaktorina (PFR, engl. Plug Flow Reactor), jossa virtaus etenee katalysaattorin läpi sekoittumatta aksiaalisesti. Tällöin reaktorin kaasukomponenttien konsentraatiot ovat paikkariip-

puvaisia, ja niitä kuvaavat mallit ovat osittaisdifferentiaaliyhtälöitä. Äärellisulotteisen tilamallin muodostamiseksi osittaisdifferentiaaliyhtälöt voidaan redusoida tavallisiksi differentiaaliyhtälöiksi jakamalla malli osiin spatiaalisesti, jolloin tilamallin tilojen arvot vastaavat tietyn osan keskiarvoa [38, s. 100–104]. Alan kirjallisuudessa [31, 39, 40, 41] tilamalli muodostetaan tyypillisesti approksimoimalla tulppavirtaus sarjaankytketyillä sekoitussäiliöreaktoreilla (CSTR, engl. Continuously Stirred Tank Reactor).

Yhden sekoitussäiliöreaktorin k ainekomponentin i ainemäärä n_i toteuttaa ainetaseen [42]

$$\dot{n}_i = \dot{n}_{i,in} - \dot{n}_{i,out} + \dot{n}_{i,r}, \quad (2.15)$$

jossa $\dot{n}_{i,in}$ ja $\dot{n}_{i,out}$ ovat sisään- ja ulosmenevä moolivirtaus ja $\dot{n}_{i,r}$ reaktorissa tapahtuvista kemiallisista reaktioista syntyvä moolivirtaus. Kemialliset reaktiot tapahtuvat katalysaattorin pinnassa, jolloin reaktioista aiheutuva moolivirtaus on verrannollinen katalysaattorin kokonaispinta-alaan A_r . Tällöin kemiallisten reaktioiden synnyttämä moolivirtaus saadaan yhtälöstä

$$\dot{n}_{i,r} = A_r \sum_j v_{ij} r_j, \quad (2.16)$$

missä r_j on reaktion j reaktionopeus ja v_{ij} on aineen i stoikiometrinen kerroin reaktiossa j . Ainemäärä n_i voidaan esittää konsentraation avulla yhtälöllä

$$n_i = \frac{V}{N} c_i, \quad (2.17)$$

missä c_i on aineen konsentraatio ja $\frac{V}{N}$ yhden CSTR-solun kaasutilavuus, kun katalysaattori mallinetaan N kappaleella CSTR-soluja. Moolivirtaus \dot{n}_i toteuttaa yhtälön

$$\dot{n}_i = F c_i, \quad (2.18)$$

missä F on pakokaasun tilavuusvirta. Sijoittamalla yhtälöt 2.16, 2.17 ja 2.18 differentiaaliyhtälöön 2.15, saadaan

$$\frac{V}{N} \dot{c}_i = F_{in} c_{i,in} - F_{out} c_{i,out} + A_r \sum_j v_{ij} r_j. \quad (2.19)$$

Jos sekoitussäiliöreaktori oletetaan ideaaliseksi, konsentraatio yhdessä mallin solussa on homogeeninen, jolloin ulostulevan virtauksen konsentraatio on $c_{i,out} = c_i$. Lisäksi jos oletetaan pakokaasun tilavuusvirran olevan vakio katalysaattorin läpi, niin $F_{in} = F_{out} = F$, jolloin ainekomponentin i konsentraatiota voidaan mallintaa differentiaaliyhtälöllä

$$\dot{c}_i = \frac{F}{V/N} (c_{i,in} - c_i) + \frac{A_r}{V/N} \sum_j v_{ij} r_j. \quad (2.20)$$

Ammoniakkilatauksen θ muutosnopeus riippuu ainoastaan katalyytin pinnalla tapahtuvien

reaktioiden moolivirtauksesta, jolloin sen ainetase on

$$\dot{\theta} = \frac{1}{\Theta} \sum_j v_j r_j. \quad (2.21)$$

Katalysaattorin kemiallisessa mallissa otetaan huomioon alaluvussa 2.1 esitetyt kemialliset reaktiot, eli ammoniakkin adsorboituminen ja desorboituminen, SCR-reaktiot sekä ammoniakkin hapettuminen. Reaktioiden nopeusvakioiden k_j lämpötilariippuvuutta mallinnetaan Arrheniuksen yhtälöllä

$$k_j(T) = A_j e^{-\frac{E_j}{T}}, \quad (2.22)$$

missä A_j on reaktion j taajuustekijä, E_j on reaktion j aktivoitumisenergia ja T on katalysaattorin lämpötila. Ammoniakkin adsorboitumisen reaktionopeus on

$$r_{ad} = k_{ad} c_{NH_3} (1 - \theta), \quad (2.23)$$

missä k_{ad} on adsorboitumisen nopeusvakio. Ammoniakkin adsorboituminen ei vaadi aktivoitumisenergiaa, jolloin $E_{ad} = 0$ eikä reaktionopeus ole lämpötilariippuvainen [43]. Desorboitumisen reaktionopeus on

$$r_{des} = k_{des}(T)\theta, \quad (2.24)$$

missä k_{des} on desorboitumisen nopeusvakio. Desorboitumisen aktivoitumisenergia on lämpötilan lisäksi riippuvainen ammoniakkilatauksesta ja mallinnetaan yhtälöllä [44]

$$E_{des} = E_{des,0}(1 - \epsilon\theta), \quad (2.25)$$

missä ϵ on empiirisesti määritetty vakio. SCR-reaktioiden reaktionopeudet ovat:

$$r_{std} = k_{std}(T) c_{NO} \theta_{std}^* (1 - e^{-\frac{\theta}{\theta_{std}^*}}) \quad (2.26)$$

$$r_{fst} = k_{fst}(T) c_{NO} c_{NO_2} \theta_{fst}^* (1 - e^{-\frac{\theta}{\theta_{fst}^*}}) \quad (2.27)$$

$$r_{slw} = k_{slw}(T) c_{NO_2} \theta_{slw}^* (1 - e^{-\frac{\theta}{\theta_{slw}^*}}) \quad (2.28)$$

missä k_{std} , k_{fst} , ja k_{slw} , ovat normaalin, nopean ja hitaan SCR-reaktion nopeusvakiot sekä θ_{std}^* , θ_{fst}^* ja θ_{slw}^* ovat normaalin, nopean ja hitaan SCR-reaktion kriittiset ammoniakkilataukset. SCR-reaktioiden on havaittu olevan lähes riippumattomia ammoniakkilatauksesta θ sen ollessa yli kriittisen latauksen θ^* , mikä on mallinnettu reaktionopeusyhtälöiden epälineaarisilla ammoniakkilatauksesta riippuvilla termeillä [43]. Ammoniakkin hapettumisen reaktionopeus on

$$r_{ox} = k_{ox}(T) c_{O_2} \theta, \quad (2.29)$$

missä k_{ox} on hapettumisen nopeusvakio ja c_{O_2} on hapen konsentraatio. Hapettumisen no-

peusvakion parametrien arvot ovat erisuuret katalysaattorin SCR- ja ASC-osioiden mal-
leissa. Lisäksi SCR-osiossa hapettumisen oletetaan tapahtuvan kokonaan typeksi, kun
taas ASC-osiossa merkittävä osa ammoniakista voi hapettua typen oksideiksi epätäydellisen N_2 -selektiivisyyden vuoksi. Ammoniakin hapettumista NO_x :ksi mallinnetaan yhtälöllä

$$f_{NO_x} = \frac{1}{1 + k_f e^{-\frac{E_f}{T}}}, \quad (2.30)$$

missä f_{NO_x} on NO_x :ksi hapettuneen ammoniakin osuus ja k_f sekä E_f empiirisesti mää-
ritettyjä vakioita.

Katalysaattorin lämpötila mallinnetaan lämpötaseella. Katalysaattorin ulkopinta on läm-
pöeristetty, jolloin lämmön johtumisesta ympäröivään ilmaan syntyvän lämpöhäviön ole-
tetaan olevan häviävän pieni. Tällöin katalysaattorimallin yhden solun lämpötase on

$$\dot{Q}_c = \dot{Q}_{EG,in} - \dot{Q}_{EG,out}, \quad (2.31)$$

missä Q_c on katalysaattorin lämpömäärä, \dot{Q}_{in} sisäänvirtaavan pakokaasun lämpövirtaus
ja \dot{Q}_{out} ulosvirtaavan pakokaasun lämpövirtaus. Katalysaattorin lämpömäärä saadaan
yhtälöstä

$$Q_c = c \frac{m}{N} T, \quad (2.32)$$

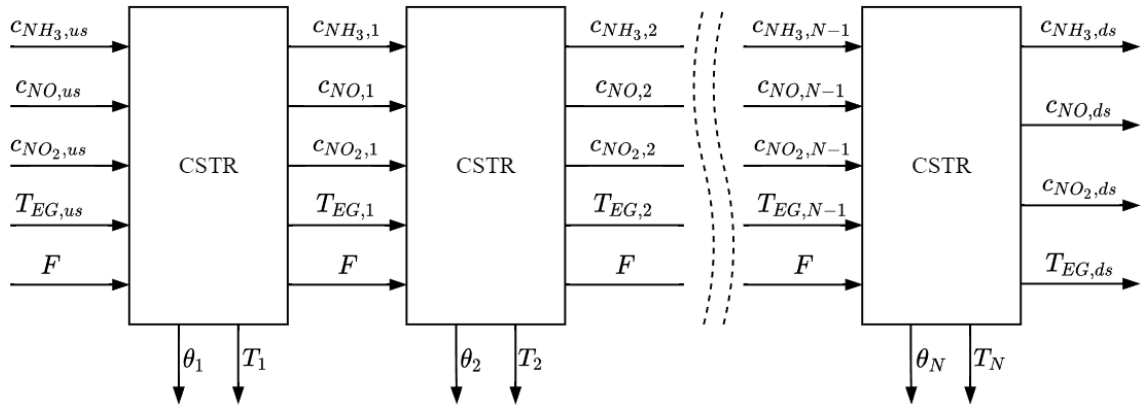
jossa c on katalysaattorin ominaislämpökapasiteetti, m on katalysaattorin massa ja T
katalysaattorin lämpötila. Pakokaasun lämpömäärä saadaan yhtälöstä

$$\dot{Q}_{EG} = c_{EG} \dot{m}_{EG} T_{EG}, \quad (2.33)$$

missä c_{EG} on pakokaasun ominaislämpökapasiteetti, \dot{m}_{EG} on pakokaasun massavirta ja
 T_{EG} pakokaasun lämpötila. Kun oletetaan katalysaattorin toimivan täydellisenä lämmön-
johtimena ja lämmön siirtymisen olevan välitöntä pakokaasun ja katalysaattorin välillä,
ovat poistuvan pakokaasun ja katalysaattorin lämpötilat yhtäsuuret $T_{EG,out} = T$, jolloin
katalysaattorin yhden solun lämpötilan malliksi saadaan

$$\dot{T} = \frac{c_{EG} \dot{m}_{EG}}{cm/N} (T_{EG,in} - T). \quad (2.34)$$

Mallin parametrit on määritetty tässä työssä käytettävälle katalysaattorille synteettisen
kaasun testipenkissä tehtyjen kokeiden perusteella. Testipenkissä katalysaattoriin voi-
daan syöttää pitoisuuksiltaan tunnettuja kaasuseoksia eri olosuhteissa. Kokeiden perus-
teella yksittäisten kemiallisten reaktioiden reaktionopeudet pystytään identifioimaan syöt-
tämällä katalysaattoriin vain tiettyjä kaasukomponentteja sisältävää kaasua ja mittaamalla
ulostulevan kaasun pitoisuudet.



Kuva 2.4. SCR-katalysaattorin mallinnus sarjaankytkettyinä CSTR-soluina

Sijoittamalla eri reaktioiden reaktionopeudet ja reaktioiden stoikiometriset kertoimet differentiaaliyhtälöön 2.20, sekä kokoamalla kaasukonsentraatioiden ja lämpötilan differentiaaliyhtälöt yhteen, saadaan katalysaattorin yhden CSTR-solun malliksi ensimmäisen kertaluvun epälineaarinen differentiaaliyhtälöryhmä:

$$\dot{c}_{NO,n} = \frac{F}{V/N}(c_{NO,n-1} - c_{NO,n}) + \frac{A_r}{V/N}(-4r_{std} - 2r_{fst}) \quad (2.35)$$

$$\dot{c}_{NO_2,n} = \frac{F}{V/N}(c_{NO_2,n-1} - c_{NO_2,n}) + \frac{A_r}{V/N}(-2r_{fst} - 6r_{slw}) \quad (2.36)$$

$$\dot{c}_{NH_3,n} = \frac{F}{V/N}(c_{NH_3,n-1} - c_{NH_3,n}) + \frac{A_r}{V/N}(r_{de} - r_{ad}) \quad (2.37)$$

$$\dot{\theta}_n = \frac{1}{\Theta}(r_{ad} - r_{de} - 4r_{std} - 8r_{slw} - 4r_{fst} - 4r_{ox}) \quad (2.38)$$

$$\dot{T}_n = \frac{c_{EG}\dot{m}_{EG}}{cm/N}(T_{n-1} - T_n) \quad (2.39)$$

Mallissa solun n sisääntulona on edeltävän solun $n - 1$ ulostulot, poislukien ensimmäinen mallisolu, jonka sisääntulona käytetään SCR-katalysaattoria ennen mitattuja ja/tai estimoituja arvoja.

Jos systeemi sisältää nopeudeltaan merkittävästi eroavia dynamiikoita, voidaan systeemin dynaamisessa mallissa ottaa huomioon ainoastaan hitaimpien eli dominoivien dynamiikoiden vaikutus. Katalysaattorin dominoiva dynamiikka koostuu ammoniakkin ja lämmön varastoitumisesta, jolloin kaasufaasin sekoittumisen dynamiikka voidaan jättää huomioimatta ja kaasukonsentraatiot mallintaa staattisesti [12]. Tällöin kaasukonsentraatiot saadaan tasapainotilan $\dot{c}_i = 0$ ratkaisuina ja solun kaasukonsentraatiot ratkaistaan al-

gebrällisesti yhtälöistä:

$$0 = \frac{F}{V/N}(c_{NO,n-1} - c_{NO,n}) + \frac{A_r}{V}(-4r_{std} - 2r_{fst}) \quad (2.40)$$

$$0 = \frac{F}{V/N}(c_{NO_2,n-1} - c_{NO_2,n}) + \frac{A_r}{V}(-2r_{fst} - 6r_{lw}) \quad (2.41)$$

$$0 = \frac{F}{V/N}(c_{NH_3,n-1} - c_{NH_3,n}) + \frac{A_r}{V}(r_{de} - r_{ad}) \quad (2.42)$$

Koko katalysaattorin mallin lohkokaavio on esitetty kuvassa 2.4. Mallin sisäänmenoina ovat katalysaattoria edeltävät kaasukonsentraatiot, pakokaasun lämpötila ja tilavuusvirta. Mallin dynaamisina tiloina ovat katalysaattorin ammoniakkilataus ja lämpötila pituussuunnassa diskretoiduissa mallin soluissa. Ulostuloina ovat kaasukonsentraatiot ja pakokaasun lämpötila katalysaattorin jälkeen.

Tässä aluvussa esiteltyä SCR-katalysaattorin dynaamista mallia käytetään järjestelmän simulointiin ja säädön suunnitteluun. Mallista käytetään redusoitua muotoa, jossa kaasukonsentraatiot mallinnetaan staattisesti.

3. SYSTEEMIN TILAN ESTIMOINTI JA VAHVISTUSSKEDULOITU SÄÄTÖ

Tässä luvussa esitellään työssä käytettävien menetelmien teoria. Ensin käsitellään lineaarisen optimisäädön teoriaa. Työssä suunnitellaan LQG-säätö (engl. Linear Quadratic Gaussian), joka on neliöllisen kustannusfunktion minimoiva optimisäätöstrategia lineaariselle systeemille, johon vaikuttaa normaalijakautuneet häiriöt. LQG-säädin koostuu optimaalisesta säätölaista ja optimaalisesta tilaestimaattorista, Kalman-suotimesta. Lineaarista säätöteoriaa käytetään tässä työssä systeemin epälineaarisen mallin linearisointiin perustuvien menetelmien avulla. Luvun lopussa esitellään linearisointiin perustuvan vahvistusskeduloinnin ja laajennetun Kalman-suotimen teoria.

3.1 Lineaarinen neliöllinen optimisäätö

Optimisäädön suunnittelun tavoitteena on määrittää tutkittavalle systeemille säätölaki, joka minimoi ennalta määritetyn kustannusfunktion arvon. Lineaarisen neliöllisen (engl. linear quadratic, LQ) optimisäädön tapauksessa säädettävä systeemi on lineaarinen ja tavoitteena on määrittää ohjaus joka minimoi painotetun neliöllisen kustannusfunktion. Reguloitio Ongelmassa tavoitteena on ajaa systeemin tilat nolnaan tilan alkuarvosta ja pitää tilat lähellä nolaa ulkoisten häiriöiden vaikuttaessa systeemiin.

Lineaarinen aikainvariantti jatkuva-aikainen systeemi, johon vaikuttaa ulkoinen satunnainen häiriö voidaan esittää tiladifferentiaaliyhtälönä

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = A\mathbf{x}(t) + B_u\mathbf{u}(t) + B_w\mathbf{w}(t), \quad (3.1)$$

missä $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ on tilamatriisi, $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ on tilavektori, $B_u \in \mathbb{R}^{n \times p}$ on ohjausmatriisi, $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^p$ on ohjausvektori, $B_w \in \mathbb{R}^{n \times d}$ on häiriömatriisi ja $\mathbf{w}(t) \in \mathbb{R}^d$ on prosessihäiriö. Prosessihäiriön oletetaan olevan jatkuva-aikaista 0-keskiarvoista normaalijakautunut valkoista kohinaa, jonka spektritiheys on R_w . Spektritiheys kuvaa signaalin tehon jakautumista eri taajuuksille. Valkoisen kohinan spektritiheys on vakio kaikilla taajuuksilla. Spektritiheys voidaan käytännössä määrittää arvioimalla prosessihäiriöiden suuruutta tai mittauksiin perustuvalla spektrianalyysillä.

Tässä työssä säädin toteutetaan digitaalisesti siten, että säätimen suunnittelussa käyte-

tään diskreettiaikaista mallia. Aikadiskreetti malli saa näytteistettyjä arvoja diskreeteillä ajanhetkillä kh , jossa h on näytteistysväli. Yhtälöiden esittämisen yksinkertaistamiseksi notaatiossa käytetään näytteistysväliä $h = 1$. Aikadiskreetti malli esitetään tiladifferenssiyhtälönä

$$\mathbf{x}_{k+1} = \Phi \mathbf{x}_k + \Gamma \mathbf{u}_k + \mathbf{w}_k, \quad (3.2)$$

missä $\Phi \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ja $\Gamma \in \mathbb{R}^{n \times p}$ ovat diskreettiaikaisen mallin tila- ja ohjausmatriisit. Käytettäessä samaa säätöväliä kuin näytteistysväli, jonka aikana ohjaus \mathbf{u} on vakio, saadaan aikadiskretoidun tilamallin matriisit yhtälöistä [45, s. 85]

$$\Phi = e^{Ah} \quad (3.3)$$

$$\Gamma = \int_0^h e^{As} ds B_u \quad (3.4)$$

Jatkuva-aikaisen tilamatriisin A ollessa kääntyvä on integraalin 3.4 ratkaisu

$$\Gamma = A^{-1}(\Phi - I)B_u, \quad (3.5)$$

missä I on sopivan kokoinen identiteettimatriisi. Diskreettiaikaisen mallin prosessihäiriö on nyt näytteistettyä diskreettiaikaista normaalijakautunutta valkoista kohinaa, jonka todennäköisyysjakauma on

$$\mathbf{w}_k \in \mathcal{N}(0, \Sigma_w), \quad (3.6)$$

missä Σ_w on prosessikohinan kovarianssimatriisi. Näytteistetyn prosessikohinan kovarianssi ratkaistaan integraalista [46, s. 397]

$$\Sigma_w = \int_0^h e^{As} B_w R_w B_w^T e^{A^T s} ds. \quad (3.7)$$

Tässä työssä diskreettiaikaiselle äärettömän horisontin stokastiselle LQ-regulointiongel-malle käytetään kustannusfunktiota:

$$J = \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{\infty} (\mathbf{x}_k^T Q \mathbf{x}_k + \mathbf{u}_k^T R \mathbf{u}_k) \right], \quad (3.8)$$

missä $Q > 0$ on tilojen painomatriisi ja $R \geq 0$ on ohjausten painomatriisi. Kustannus-funktio voidaan tulkita tilojen ja ohjausten painotettuna keskimääräisenä varianssina. Jos systeemi on stabiloitavissa ja systeemin tilavektori \mathbf{x}_k on mitattu tarkasti, niin kustannus-funktion 3.8 minimoiva säätölaki on [47, s. 423]

$$\mathbf{u}_k = -K \mathbf{x}_k, \quad (3.9)$$

missä $K \in \mathbb{R}^{p \times n}$ on tilatakaisinkytkennän vahvistusmatriisi, joka saadaan kaavalla

$$K = (R + \Gamma^T S \Gamma)^{-1} (\Gamma^T S \Phi), \quad (3.10)$$

missä $S > 0$ on diskreettiaikaisen algebrallisen Riccatin yhtälön ratkaisu:

$$S = \Phi S \Phi^T - \Phi^T S \Gamma (R + \Gamma^T S \Gamma)^{-1} \Gamma S \Phi + Q. \quad (3.11)$$

Käytännössä systeemin suorituskykyvaatimuksia ei yleensä voida suoraan esittää painotettuna neliöllisenä kustannusfunktiona. Tällöin kustannusfunktion matrisit toimivat suunnitteluparametreinä, joiden valinnalla säädetyn systeemin vastetta voidaan muokata. Asettamalla tilan painomatriisi Q suhteessa ohjausten painomatriisia R suuremmaksi, saavutetaan parempi tilan reguloitukyky suurempien ohjausten kustannuksella. Toisaalta jos ohjausten amplitudia halutaan rajoittaa esimerkiksi toimilaitteiden ohjausrajoitusten vuoksi, voidaan matriisia R kasvattaa suhteessa matriisiin Q . Usein painomatriisit valitaan diagonaalimatriiseiksi, jolloin diagonaalialkiot ovat painokertoimina niitä vastaaville tiloille ja ohjauksille. Käytännössä kustannusfunktion painomatriisien haku on iteratiivinen prosessi, jossa niiden vaikutusta säädetyn systeemin vasteeseen tutkitaan esimerkiksi simuloimalla.

Äärettömän horisontin LQ-ongelman ratkaisuna saatu säätölaki 3.10 on rakenteeltaan yhtenevä täyden tilan tilatakaisinkytkennän kanssa. LQ-metodia voidaankin pitää automatisoituna tapana ratkaista hyväksyttävät stabiiliusvarat tuottava tilatakaisinkytkennän vahvistusmatriisi K . Jatkuva-aikaisessa tapauksessa LQ-reguloidulle yhden ohjausmuuttujan ja yhden ulostulon systeemille voidaan taata ääretön vahvistusvara ja vähintään 60° vaihevara [45, s. 259]. Diskreettiaikaisen LQ-optimaalisen ohjauksen takaamat stabiiliusvarat voivat olla jatkuva-aikaista tapausta pienemmät [48].

3.2 Kalman-suodin

Edellisessä alaluvussa esitetty LQ-optimisäätö olettaa systeemin kaikkien tilojen olevan mitattu tarkasti. Käytännön säätöjärjestelmissä systeemin koko tilavektorista ei useinkaan ole mittauksia, minkä lisäksi mittaukset ovat mittauskohinan korruptoimia. Tilavektorin muodostamiseksi tarvitaan tilaestimaattori, joka tuottaa estimaatin $\hat{\mathbf{x}}$ systeemin todellisesta tilasta \mathbf{x} mittausten \mathbf{m} ja ohjausten \mathbf{u} perusteella.

Lisäämällä tiladifferenssiyhtälöön 3.2 mittausyhtälö, saadaan tilamalli

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+1} &= \Phi \mathbf{x}_k + \Gamma \mathbf{u}_k + \mathbf{w}_k \\ \mathbf{m}_k &= C_m \mathbf{x}_k + D_m \mathbf{u}_k + \mathbf{v}_k \end{aligned} \quad (3.12)$$

missä $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^q$ on mittausvektori, $C_m \in \mathbb{R}^{q \times n}$ on mittausmatriisi, $D_m \in \mathbb{R}^{q \times p}$ on suora-

vaikutusmatriisi ja $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^q$ mittaushäiriö. Mittaushäiriön oletetaan olevan prosessihäiriön tavoin 0-keskiarvoista normaalijakautunutta valkoista kohinaa. Lisäksi prosessi- ja mitauskohinat oletetaan olevan korreloimattomia ja täten toisistaan riippumattomia. Mittaus- ja prosessikohinan todennäköisyysjakauma on tällöin:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{w}_k \\ \mathbf{v}_k \end{bmatrix} \in \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Sigma_w & 0 \\ 0 & \Sigma_v \end{bmatrix} \right) \quad (3.13)$$

missä Σ_v on mitauskohinan kovarianssimatriisi.

Kalman-suodin on optimaalinen tilaestimaattori lineaariselle systeemille prosessi- ja mitauskohinoita koskevien oletusten ollessa voimassa [47, s. 429–433]. Kalman-suodin minimoi estimointivirheen $\tilde{\mathbf{x}}_k = \mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k$ varianssin

$$P_k = \mathbb{E}[(\tilde{\mathbf{x}}_k - \mathbb{E}\tilde{\mathbf{x}}_k)^T (\tilde{\mathbf{x}}_k - \mathbb{E}\tilde{\mathbf{x}}_k)]. \quad (3.14)$$

Kalman-suodin on kaksivaiheinen rekursiivinen algoritmi, joka koostuu jokaisella aika-askeleella suoritettavasta prediktointi- ja päivitysvaiheesta. Ennen ensimmäistä aika-askelta suotimen estimaatille asetetaan alkuarvo

$$(\hat{\mathbf{x}}_0, P_0), \quad (3.15)$$

missä $\hat{\mathbf{x}}_0$ on tilaestimaatin alkuarvo ja P_0 on estimointivirheen kovarianssin alkuarvo. Ensimmäisestä aika-askeleesta eteenpäin suotimen ensimmäisessä vaiheessa systeemin tila prediktoidaan käyttäen systeemin dynaamista mallia

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} = \Phi \mathbf{x}_{k-1|k-1} + \Gamma \mathbf{u}_{k-1}, \quad (3.16)$$

missä $\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}$ tarkoittaa estimaatin arvoa ajan hetkellä k , kun mittauksia on saatavilla ajan hetkeen $k - 1$ asti. Estimointivirheen kovarianssi prediktoinnin jälkeen on

$$P_{k|k-1} = \Phi P_{k-1|k-1} \Phi^T + \Sigma_w. \quad (3.17)$$

Prediktoinnin jälkeen tilaestimaatti päivitetään mitatun ja prediktoidun systeemin ulostulon erotuksen sisältävän korjaustermin avulla. Päivityksen jälkeen tilaestimaatti on

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}_{k|k} &= \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + L_k (\mathbf{m}_k - \hat{\mathbf{y}}_{k|k-1}) \\ &= \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + L_k (\mathbf{m}_k - [C_m \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + D_m \mathbf{u}_{k-1}]), \end{aligned} \quad (3.18)$$

missä L_k on optimaalinen Kalman-vahvistus, joka saadaan yhtälöstä

$$L_k = P_{k|k-1} C_m^T (C_m P_{k|k-1} C_m^T + \Sigma_v)^{-1}. \quad (3.19)$$

Estimointivirheen kovarianssi mittauspäivityksen jälkeen on

$$P_{k|k} = (I - L_k C_m) P_{k|k-1}. \quad (3.20)$$

Jos systeemin malli on aikainvariantti, niin tilamallin matriisit ovat vakiomatriiseja. Tällöin estimointivirheen kovarianssi saavuttaa tasapainotilan arvon P_∞ , kun $k \rightarrow \infty$. Käyttämällä tasapainotilan kovarianssia Kalman-vahvistuksen laskennassa, voidaan Kalman-suodin toteuttaa aikainvariantissa muodossa

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k} = \Phi \hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1} + \Gamma \mathbf{u}_{k-1} + L_\infty (\mathbf{m}_k - [C_m \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + D_m \mathbf{u}_{k-1}]), \quad (3.21)$$

missä tasapainotilan Kalman-vahvistus on

$$L_\infty = P_\infty C_m^T (C_m P_\infty C_m^T + \Sigma_v)^{-1}. \quad (3.22)$$

Tasapainotilan kovarianssi P_∞ on diskreettiaikaisen algebrallisen Riccatin yhtälön ratkaisu:

$$P_\infty = \Phi P_\infty \Phi^T - \Phi P_\infty C_m^T (C_m P_\infty C_m^T + \Sigma_v)^{-1} C_m P_\infty \Phi^T + \Sigma_w. \quad (3.23)$$

Aikainvariantin muodon tilaesitystä käytetään tässä työssä estimaattorin dynamiikan lineaarisessa analyysissä.

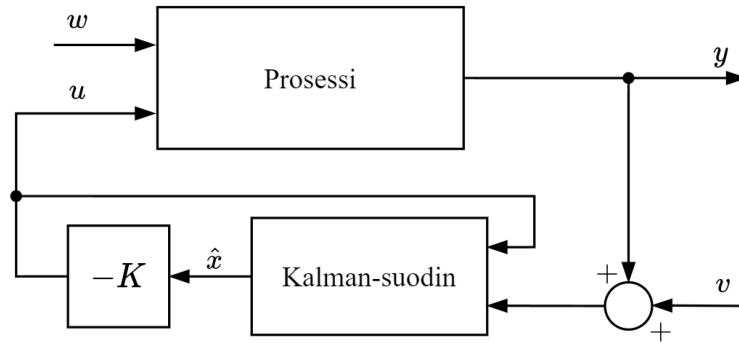
3.3 Linear Quadratic Gaussian -säätö

LQG-ongelmassa (engl. Linear Quadratic Gaussian) säädettävä systeemi on tilamallin 3.12 mukainen, jossa systeemin tiloihin ja mittauksiin vaikuttaa normaalijakautunut stokastinen häiriö. Ilmeinen valinta on käyttää alaluvussa 3.1 esitettyä optimaalista säätölakia, jonka sisäänmenona on alaluvussa 3.2 esitetyn Kalman-suotimen tuottama tilaestimaatti. Tällöin LQG-regulaattorin säätölaki on:

$$\mathbf{u}_k = -K \hat{\mathbf{x}}_{k|k}. \quad (3.24)$$

LQG-reguloidun järjestelmän rakenne on kuvassa 3.1.

Estimoitua tilaa käyttävän säätölain 3.24 voidaan osoittaa minimoivan neliöllisen kustannusfunktion 3.8 arvon. Tulos perustuu stokastiseen separaatioteoreemaan, jonka mukaan neliöllisen kustannusfunktion minimoiva optimaalinen säätöstrategia koostuu kahdesta osasta: optimaalisesta tilaestimaattorista eli Kalman-suotimesta ja optimaalisesta LQ-säätölaista [49]. Separoituvuuden seurauksena tilaestimaattori ja säätölaki voidaan suunnitella riippumattomasti. Kalman-suotimen suunnitteluun vaikuttavat systeemin häiriöiden ja dynamiikan mallit, mutta se on riippumaton käytetyistä kustannusfunktion painoarvoista.

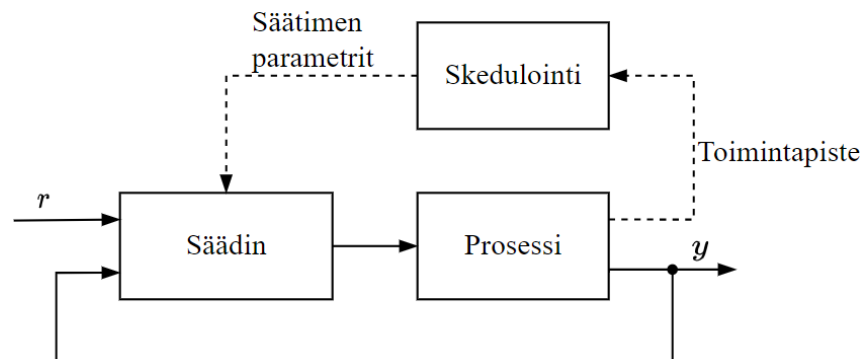


Kuva 3.1. LQG-reguloidun järjestelmän rakenne

Täydellisen tilatiedon LQ-regulaattorille taatut eivät päde LQG-regulaattorin tapauksessa, jossa systeemin tila estimoidaan Kalman-suotimella. Vaikka LQG-metodi tuottaa suorituskyvyltään kustannusfunktion 3.8 minimoivan optimaalisen regulaattorin, se ei takaa säädetyn systeemin robustisuutta. Itse asiassa on osoitettu, ettei LQG-regulaattori takaa yleisesti minkäänlaisia robustisuusominaisuuksia, ja että tietyissä tapauksissa LQG-metodi tuottaa mielivaltaisen pienet stabiiliusmarginaalit [50]. Tämän vuoksi säädetyn systeemin robustisuus mallinnusvirheille tulee tutkia LQG-regulaattorin suunnittelun jälkeen.

3.4 Vahvistusskedulointi

Vahvistusskeduloinnissa säätimen parametrejä muutetaan säädettävän prosessin toimintapisteen tai mittausten mukaan. Vahvistusskeduloinnilla voidaan kompensoida prosessin toimintapistestä riippuvan dynamiikan muutoksien vaikutusta säädetyn systeemin suorituskykyyn suunnittelemalla säädin joukolle eri toimintapisteitä. Suunniteltujen säädinten välillä siirrytään mitatun tai estimoidun prosessin toimintapisteen mukaan. Vahvistusskeduloitun säätöpiirin lohkokaavio on esitetty kuvassa 3.2. Säätimen parametrejä muutetaan prosessin toimintapisteen mukaan ennalta määritetyn skeduloinnin perusteella. [51]



Kuva 3.2. Vahvistusskeduloinnin sisältävän säätöpiirin lohkokaavio. Mukailtu lähteestä [51].

Epälineaarisen systeemin vahvistusskedulointi perustuu systeemin epälineaarisen mallin esittämiseen lineaarisena parametrivarianttina mallina (engl. LPV, linear parameter-varying) tai joukkona lineaarisia aikainvariantteja malleja [52]. Tässä työssä käytetään epälineaarisen mallin linearisointiin perustuvaa vahvistusskedulointia. Epälineaarisen jatkuva-aikaisen systeemin tilamalli on muotoa

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}}(t) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \\ \mathbf{y}(t) &= \mathbf{h}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\end{aligned}\quad (3.25)$$

missä funktiot $\mathbf{f}(\cdot)$ ja $\mathbf{h}(\cdot)$ ovat systeemin tilojen ja ohjausten epälineaarisia funktioita. Linearisointi tehdään systeemin tasapainotilassa, jolloin

$$\begin{aligned}0 &= \mathbf{f}(\mathbf{x}_e, \mathbf{u}_e) \\ \mathbf{y}_e &= \mathbf{h}(\mathbf{x}_e, \mathbf{u}_e)\end{aligned}\quad (3.26)$$

missä \mathbf{x}_e , \mathbf{u}_e ja \mathbf{y}_e ovat tilojen, ohjauksien ja ulostulojen tasapainoarvot mainitussa järjestyksessä. Muodostamalla epälineaarisen tilamallin 3.25 1. asteen Taylorin sarjakehitelmä saadaan

$$\begin{aligned}\mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) &\approx \mathbf{f}(\mathbf{x}_e, \mathbf{u}_e) + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_e) + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_e) \\ \mathbf{h}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) &\approx \mathbf{h}(\mathbf{x}_e, \mathbf{u}_e) + \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_e) + \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_e)\end{aligned}\quad (3.27)$$

Koska linearisointipisteeksi valitaan tasapainotilan piste $\mathbf{f}(\mathbf{x}_e, \mathbf{u}_e) = 0$ voidaan 3.27 esittää epälineaarista tilamallia approksimoivana lineaarisena tilamallina

$$\begin{aligned}\delta \dot{\mathbf{x}}(t) &= A \delta \mathbf{x}(t) + B \delta \mathbf{u}(t) \\ \delta \mathbf{y}(t) &= C \delta \mathbf{x}(t) + D \delta \mathbf{u}(t)\end{aligned}\quad (3.28)$$

missä tilamallin matriisit ovat tasapainotilan arvoilla lasketut Jacobin matriisit

$$\begin{aligned}A &= \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{(\mathbf{x}_e, \mathbf{u}_e)} & B &= \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} \right|_{(\mathbf{x}_e, \mathbf{u}_e)} \\ C &= \left. \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{(\mathbf{x}_e, \mathbf{u}_e)} & D &= \left. \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{u}} \right|_{(\mathbf{x}_e, \mathbf{u}_e)}\end{aligned}\quad (3.29)$$

Linearisoidun mallin tila, ohjaukset ja ulostulot ovat poikkeamamuuttujia tasapainotilan arvoista

$$\delta \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_e, \quad \delta \mathbf{u}(t) = \mathbf{u}(t) - \mathbf{u}_e, \quad \delta \mathbf{y}(t) = \mathbf{y} - \mathbf{y}_e. \quad (3.30)$$

Linearisointiin perustuvassa vahvistusskeduloinnissa epälineaarinen malli linearisoidaan joukossa tasapainopisteitä. Tasapainopisteet parametrisoidaan skedulointimuuttujilla σ , jotka voivat olla tunnettuja systeemin sisäisiä tai ulkoisia signaaleja. Skedulointimuuttujat tulisi valita siten, että ne kuvaavat systeemin toimintapisteestä riippuvan dynamiikan mah-

dollisimman hyvin. Lokaaliin linearisointiin perustuvan vahvistusskeduloinnin oletuksena on, että skedulointimuuttujien muutosnopeudet ovat hitaita systeemin dynamiikkaan verrattuna, jolloin lokaalin mallin voidaan olettaa kuvaavan systeemin dynamiikkaa riittävällä tarkkuudella.

Seuraavaksi linearisoinnilla saadun mallijoukon jokaiselle lineaariselle mallille suunnitellaan suunnitteluvaatimukset täyttävä lineaarinen säädin. Lopputuloksena saadaan joukko lineaarisia malleja vastaavia lineaarisia säätimiä skedulointimuuttujan σ mukaan parametrisoituna. Lineaaristen säädinten parametreille implementoidaan skedulointi, jolla säätimen parametrejä muutetaan skedulointimuuttujien σ reaaliaikaisen arvon perusteella. Yksinkertaisin menetelmä on jakaa toiminta-alue eri linearisointipisteitä ympäröiviin alueisiin, jolloin säätimen vahvistukset valitaan sen hetkisen alueen mukaan. Tämän lähestymistavan haittapuolena on säätimen vahvistuksiin muodostuvat epäjatkuvuuskohdat siirryttäessä alueiden välillä. Jatkuvien vahvistuksien saavuttamiseksi säätimen parametrit voidaan esittää skedulointimuuttujien suhteen jatkuvina funktioina $K(\sigma)$, jolloin säätimen parametrit interpoloidaan linearisointipisteiden välillä. Skedulointi tekee lineaarisesta säätimestä epälineaarisen.

Lopuksi vahvistusskeduloidun säädetyt systeemin suorituskyky arvoidaan. Linearisointiin perustuvan skeduloinnin stabiilius ja suorituskyky voidaan yleisesti varmentaa ainoastaan lokaalisti linearisointipisteiden ympäristössä. Lineaarisen mallin voidaan olettaa vastaavan epälineaarista mallia linearisointipisteen läheisyydessä olettaen, että skedulointimuuttujat ottavat huomioon merkittävimmät epälineaarisuudet ja että niiden muutosnopeudet ovat verrattain hitaita systeemin dynamiikkaan verrattuna. Globaalien suorituskykyyn tutkimiseen joudutaan usein turvautumaan heurestisiin menetelmiin kuten simulointiin. Skeduloidun säädön toiminnan varmistamiseksi koko systeemin toiminta-alueella tulee skeduloitua säädettyä järjestelmää simuloida systeemin epälineaarisen mallin kanssa. Jos skeduloidun säädön suorituskyky ei ole tyydyttävä, voidaan prosessia iteroida esimerkiksi tasapainopisteiden määrää kasvattamalla tai skedulointimuuttujia lisäämällä.

3.5 Laajennettu Kalman-suodin

Kalman-suotimen suunnittelun oletuksiin sisältyy oletus systeemin lineaarisuudesta. Epälineaarisen systeemin estimointiin voidaan käyttää laajennettua Kalman-suodinta (engl. Extended Kalman Filter, EKF), joka perustuu systeemin mallin lokaaliin linearisointiin sen hetkisen estimoidun tilan ympäristössä [53, s. 69-72].

Epälineaarisen diskreettiaikaisen systeemin tilamalli on:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{f}_d(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k) + \mathbf{w}_k \\ \mathbf{m}_k &= \mathbf{h}(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k) + \mathbf{v}_k \end{aligned} \quad (3.31)$$

missä $f_d(\cdot)$ on diskreettiaikaisen tilamallin tilayhtälö. Kuten lineaarisessa tapauksessa, oletetaan prosessi- ja mittaushäiriöiden olevan 0-keskiarvoista normaalijakautunutta valkoista kohinaa.

Laajennetun Kalman-suotimen estimaatin predikointi suoritetaan systeemin epälineaarista tilayhtälöä käyttämällä

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} = \mathbf{f}_d(\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}, \mathbf{u}_{k-1}). \quad (3.32)$$

Estimointivirheen varianssi predikoinnin jälkeen on

$$P_{k|k-1} = \Phi_k P_{k-1|k-1} \Phi_k^T + \Sigma_w, \quad (3.33)$$

missä tilamatriisi Φ_k saadaan linearisoimalla tilayhtälö nykyisen tilaestimaatin $\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}$ ympäristössä

$$\Phi_k = \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{(\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}, \mathbf{u}_{k-1})}. \quad (3.34)$$

Mittauspäivitys suoritetaan mitatun ja predikoidun ulostulon erotuksen perusteella. Prediktoitu ulostulo saadaan epälineaarista mittausyhtälöä käyttämällä, jolloin tilaestimaatti mittauspäivityksen jälkeen on

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k} = \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + L_k(\mathbf{m}_k - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}, \mathbf{u}_{k-1})). \quad (3.35)$$

Kalman-vahvistuksen ja mittauspäivityksen jälkeisen estimointivirheen kovarianssin yhtälöt vastaavat lineaarisen Kalman-suotimen yhtälöitä:

$$L_k = P_{k|k-1} C_{m,k}^T (C_{m,k} P_{k|k-1} C_{m,k}^T + \Sigma_v)^{-1} \quad (3.36)$$

$$P_{k|k} = (I - L_k C_{m,k}) P_{k|k-1} \quad (3.37)$$

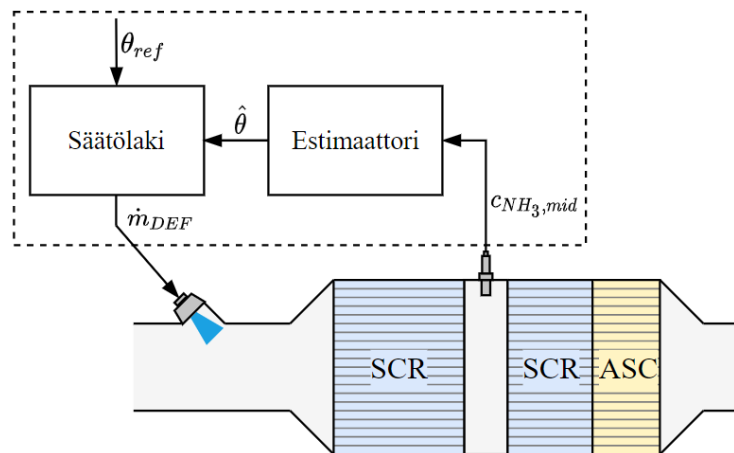
Mittausmatriisi $C_{m,k}$ saadaan linearisoimalla mittausfunktio estimoidun tilan ympäristössä

$$C_{m,k} = \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{h}} \right|_{(\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}, \mathbf{u}_{k-1})}. \quad (3.38)$$

Laajennettu Kalman-suodin ei ole lineaarisen Kalman-suotimen tapaan optimaalinen tilaestimaattori linearisoinnissa tapahtuvasta approksimaatiosta johtuen. Kalman-suotimen optimaalisuus perustuu estimointivirheen normaalijakaumaan. Epälinearisessa tapauksessa estimointivirhe ei todellisuudessa ole normaalijakautunut, vaikka systeemiin vaikuttavat häiriöt olisivatkin normaalijakautuneita.

4. SCR-KATALYSAATTORIN AMMONIAKKILATAUKSEN ESTIMAATTORIPOHJAINEN SÄÄTÖ

Tässä työssä suunniteltavan säätöjärjestelmän tavoitteena on ohjata urean ruiskutusmäärää siten, että saavutetaan mahdollisimman pieni NO_x -päästö ilman liian suurta ammoniakkipäästöä. Tavoitteen saavuttamiseksi suunnitellaan katalysaattorin ammoniakkilatauksen estimaattoripohjainen säätö, jota havainnollistetaan kuvassa 4.1. Säätöjärjestelmä perustuu SCR-katalysaattorin ammoniakkilatauksen θ hallintaan. Ammoniakkilataukselle määritetään toimintapistekohtaisesti asetusarvo θ_{ref} , jolla saavutetaan ammoniakkipäästörajoitteen täyttävä maksimaalinen NO_x -konversio. Ammoniakkilataus estimoidaan laajennetulla Kalman-suotimella, joka hyödyntää kahdesta kennosta koostuvan katalysaattorin keskelle sijoitetun ammoniakianturin mittausta.



Kuva 4.1. SCR-katalysaattorin ammoniakkilatauksen estimaattoripohjainen säätö

4.1 Takaisinkytketyn säädön suunnittelumalli ja skedulointimuuttujien valinta

Säädön suunnittelua varten alaluvun 2.3 SCR-katalysaattorin dynaamiselle mallille muodostetaan tilaesitys. Koko katalysaattorin epälineaarinen tilamalli muodostetaan sarjaankytkemällä yksittäisten CSTR-solujen tilamallit. Sijoittamalla CSTR-solun sisäänmenoksi

edellisen solun ulostulo $u_n(t) = y_{n-1}(t)$ saadaan koko katalysaattorin tilamalliksi

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), u(t), w(t)) = \begin{bmatrix} f_1(x_1(t), u(t)) \\ f_2(x_2(t), u_2(t)) \\ \vdots \\ f_N(x_N(t), u_N(t)) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(x_1(t), u(t), w(t)) \\ f_2(x_2(t), y_1(t)) \\ \vdots \\ f_N(x_N(t), y_{N-1}(t)) \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

$$m(t) = \mathbf{h}(\mathbf{x}, u(t)) + v(t) = h_N(x_N(t), y_{N-1}(t)) + v(t)$$

missä tilavektori \mathbf{x} on ammoniakkilataus mallin eri soluissa

$$\mathbf{x} = [x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_N]^T = [\theta_1 \quad \theta_2 \quad \dots \quad \theta_N]^T \quad (4.2)$$

ja mittaus m on ammoniakianturin mittaama ammoniakikonsentraatio ensimmäisen SCR-kennon jälkeen

$$m(t) = c_{NH_3, mid}(t). \quad (4.3)$$

Ohjausmuuttujaksi u valitaan typen oksidien ja ammoniakkin stoikiometrinen suhde

$$u(t) = \alpha(t) = \frac{c_{NH_3, us}(t)}{c_{NO, us} + c_{NO_2, us}}. \quad (4.4)$$

Prosessihäiriö $w(t)$ mallinnetaan oletetun syötetyn ammoniakkipitoisuuden summaantuneena satunnaishäiriönä. Tällöin ensimmäisen CSTR-solun sisäänmeneväksi ammoniakikonsentraatioksi saadaan

$$c_{NH_3, us}(t) + w(t) = u(t)(c_{NO, us} + c_{NO_2, us}) + w(t). \quad (4.5)$$

CSTR-solun n epälineaarisen tilamallin tilayhtälö on:

$$\begin{aligned} f_n(x_n(t), u_n(t)) = & \frac{1}{\Theta} (k_{ad}h_n(x_n(t), u_n(t)) - A_{des}e^{-\frac{E_{des,0}(1-\epsilon x_n(t))}{T}} x_n(t) \\ & - 4k_{std}(T)c_{NO}\theta_{std}^*(1 - e^{\frac{-x_n(t)}{\theta_{std}^*}}) \\ & - 4k_{fst}(T)c_{NO}c_{NO_2}\theta_{fst}^*(1 - e^{\frac{-x_n(t)}{\theta_{fst}^*}}) \\ & - 8k_{slw}(T)c_{NO_2}\theta_{slw}^*(1 - e^{\frac{-x_n(t)}{\theta_{slw}^*}}) - 4k_{ox}(T)c_{O_2}x_n(t) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Mittausyhtälö saadaan ratkaisemalla ulostulevan ammoniakkipitoisuuden tasapainotilan arvo yhtälöstä 2.42. Mittausyhtälöksi saadaan:

$$h_n(x_n(t), u_n(t)) = \frac{\frac{u_n(t)F}{V} + \frac{A_r}{V} A_{des}e^{-\frac{E_{des,0}(1-\epsilon x_n(t))}{T}} x_n(t)}{\frac{F}{V} + \frac{A_r}{V} k_{ad}(1 - x_n(t))}. \quad (4.7)$$

Katalysaattorin lämpötila, pakokaasun tilavuusvirta ja muiden kuin ammoniakkin kaasukonsentraatiot ovat suunnittelumallissa niiden tasapaino-tilan arvoja vastaavia vakioita.

Linearisointiin perustuvan vahvistusskeduloinnin sekä laajennetun Kalman-suotimen toteuttamiseksi epälineaarinen tilamalli linearisoidaan alaluvussa 3.4 esitetyllä metodilla. Linearisoimalla tilayhtälö f_n ja mittausyhtälö h_n , saadaan yhden CSTR-solun linearisoiduksi tilamalliksi

$$\begin{aligned}\delta \dot{x}_n(t) &= a_n \cdot \delta x_n(t) + b_n \cdot \delta u_n(t) \\ \delta y_n(t) &= c_n \cdot \delta x_n(t) + d_n \cdot \delta u_n(t)\end{aligned}\quad (4.8)$$

missä

$$\begin{aligned}a_n &= \left. \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \right|_{(x_{n,e}, u_{n,e})} & b_n &= \left. \frac{\partial f_n}{\partial u_n} \right|_{(x_{n,e}, u_{n,e})} \\ c_n &= \left. \frac{\partial h_n}{\partial x_n} \right|_{(x_{n,e}, u_{n,e})} & d_n &= \left. \frac{\partial h_n}{\partial u_n} \right|_{(x_{n,e}, u_{n,e})}\end{aligned}\quad (4.9)$$

Koko katalysaattorin linearisoitu malli saadaan epälineaarisen mallin tapaan linearisoitujen CSTR-solujen tilamallien 4.8 sarjaankytkennällä. Suunnittelumallissa prosessihäiriöllä ei oleteta olevan suoravaikutustermiä mittaukseen. Koko katalysaattorin jatkuva-aikaiseksi linearisoiduksi malliksi saadaan

$$\begin{aligned}\delta \dot{\mathbf{x}}(t) &= A \delta \mathbf{x}(t) + B_u \delta u(t) + B_w w(t) \\ \delta m(t) &= C_m \delta \mathbf{x}(t) + D_m \delta u(t)\end{aligned}\quad (4.10)$$

Koko katalysaattorin linearisoidun tilamallin matriisit ovat esitetty tilan säästämiseksi liitteessä A. Digitaalisen säätimen suunnittelemiseksi jatkuva-aikainen malli aikadiskretisoidaan. Säättöväliksi h valitaan 0,1 sekuntia, joka on tarpeeksi pitkä aika säätö- ja estimointialgoritmien laskennalle säättövälän aikana. Säättöväli on myös lyhyt systeemin dynamiikan nopeuteen verrattuna, joten säättövälän valinnan ei tulisi heikentää säädetyn systeemin suorituskykyä merkittävästi. Aikadiskreetiksi tilamalliksi saadaan

$$\begin{aligned}\delta \dot{\mathbf{x}}_{k+1} &= \Phi \delta \mathbf{x}_k + \Gamma \delta u_k + \mathbf{w}_k \\ \delta m_k &= C_m \delta \mathbf{x}_k + D_m \delta u_k + v_k\end{aligned}\quad (4.11)$$

Diskreettiaikaisen mallin tiladifferenssiyhtälön matriisit ja diskreettiaikaisen prosessikohinan kovarianssimatriisi saadaan jatkuva-aikaisen mallin matriiseista alaluvussa 3.1 esitetyillä yhtälöillä.

CSTR-solujen lukumäärän N valinta on kompromissi tilamallin tarkkuuden ja kertaluvun välillä. Tilojen lukumäärä vaikuttaa myös säätimen ja tilaestimaattorin kertalukuun, sillä tilatakaisinkytkennässä on määritettävä N eri vahvistusta ja tilaestimaattori sisältää sys-

teemin tavoin N tilaa. Tässä työssä CSTR-solujen lukumääräksi valitaan

$$N = 6. \quad (4.12)$$

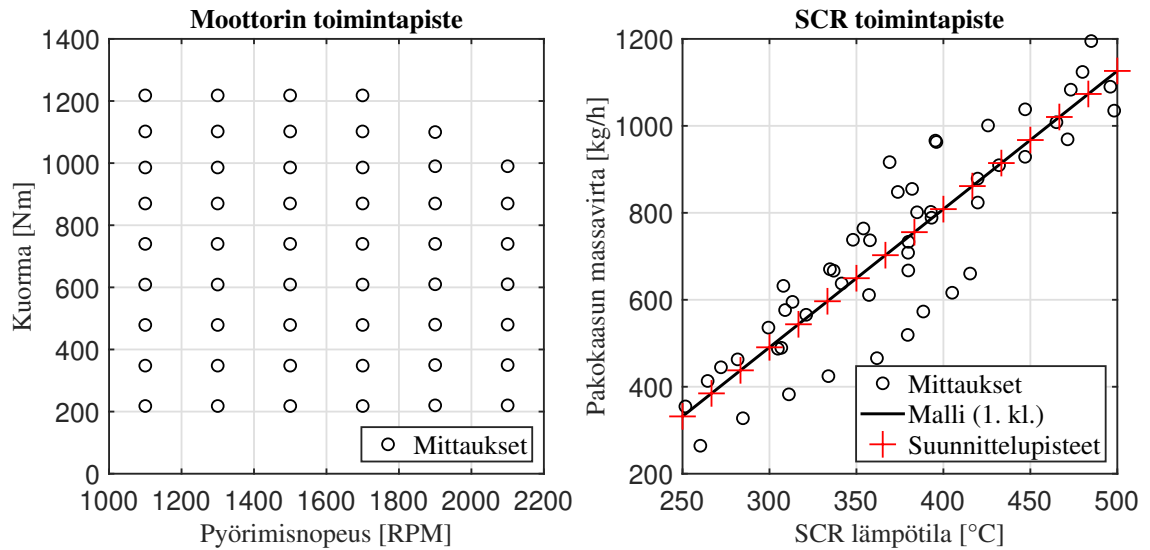
Valitulla määrällä kyetään mallintamaan ammoniakkilatauksen jakautumista katalysaattorin pitkittäissuunnassa kertaluvun kasvamatta liian suureksi.

SCR-katalysaattorin toimintapiste muuttuu dynaamisesti dieselmoottorin pyörimisnopeuden ja kuorman mukaan. Katalysaattorin toimintapisteen määrittävät pakokaasun massavirta ja katalysaattorin lämpötila. Pakokaasun massavirta vaikuttaa kaasujen viipymäaikaan ja katalysaattorin lämpötila kemiallisten reaktioiden reaktionopeuksiin. SCR:n dynamiikka on voimakkaasti riippuvainen varsinkin katalysaattorin lämpötilasta, mikä johtuu Arrheniuksen yhtälöllä mallinnetuista reaktionopeuksien eksponentiaalisesta lämpötilariippuvuudesta. Vahvistusskeduloitun säädön skedulointimuuttujaksi valitaan katalysaattorin keskimääräinen lämpötila

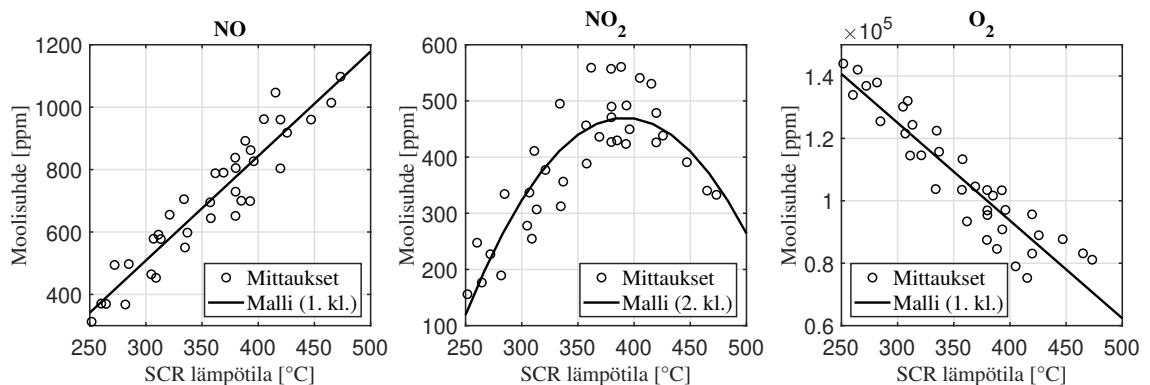
$$\sigma = \bar{T}. \quad (4.13)$$

Skedulointimuuttujaksi voitaisiin valita myös pakokaasun massavirta \dot{m}_{EG} . Pakokaasun massavirran muutosnopeus on kuitenkin SCR:n dynamiikkaan verrattuna selkeästi nopeampaa ja täten se ei täytä oletusta skedulointimuuttujan hitaasta muutosnopeudesta. Tämän lisäksi toisen skedulointimuuttujan käyttäminen tekee vahvistusskeduloinnista kaksiulotteisen ongelman, minkä takia yhdessä skedulointimuuttujassa pidättäytymällä ongelma on selkeämmin hahmotettavissa ja säädin yksinkertaisempi toteuttaa.

Kuvassa 4.2 on esitetty moottorin toimintapisteen kuvautuminen SCR:n toimintapisteiksi staattisissa mittauspisteissä. Transienttitilanteessa SCR:n toimintapiste voi käydä tasapainotilojen määrittämän alueen ulkopuolella. Pakokaasun massavirta otetaan huomioon skeduloidun säädön suunnittelussa esittämällä se SCR:n lämpötilan funktiona. Pakokaasun massavirran pisteisiin on sovitettu lineaarinen sovite SCR:n lämpötilan funktiona, joka kuvaa keskimääräistä pakokaasun massavirtaa tietyssä SCR:n lämpötilassa. Kuvasta nähdään, että vaikka massavirran hajonta on suurta, on lämpötilan ja massavirran välillä korrelaatiota, jonka lineaarinen sovite kykenee mallintamaan. Säätimen suunnittelu tehdään kuvaajaan merkityissä suunnittelupisteissä linearisoitujen mallien perusteella. Myös toimintapistestä riippuvilla kaasukonsentraatiolla on pieni vaikutus systeemin dynamiikkaan, minkä takia niiden vaikutus otetaan huomioon esittämällä ne niin ikään lämpötilan funktiona. Kaasukonsentraatiot ja niihin sovitetut polynomimallit ovat kuvassa 4.3. Typpioksidin ja hapen konsentraatiot mallinnetaan lineaarisella sovitteella, kun taas typpidioksidin riippuvuus lämpötilasta mallinnetaan 2. asteen polynomilla.



Kuva 4.2. Moottorin toimintapisteiden kuvaantuminen SCR:n toimintapisteiksi ja pisteet säädön suunnittelulle.



Kuva 4.3. SCR-katalysaattoria edeltävät kaasujen moolisuhteet ja niihin sovitetut polynomimallit lämpötilan funktiona.

4.2 Ammoniakkilatauksen asetusarvon määrittäminen

Katalysaattorin NO_x -konversiotehokkuus ja syntyvä ammoniakkipäästö ovat suoraan verrannollisia katalyytin pintaan varastoituneen ammoniakin määrään. Siksi molempien hallinnan kannalta on määritettävä asianmukainen ammoniakkilataus, jota käytetään ammoniakkilatauksen säätimen asetusarvona. Asetusarvo määritetään toimintapistekohtaisesti suorituskykytavoitteiden täyttämiseksi koko toiminta-alueella.

Tavoitteena on määrittää SCR-katalysaattorin ammoniakkilataus, jolla saavutetaan maksimaalinen NO_x -konversiotehokkuus tai vastaavasti pienin mahdollinen ammoniakin hapetuskatalysaattorin jälkeinen NO_x -pitoisuus, kuitenkin ilman liian suurta ammoniakki-

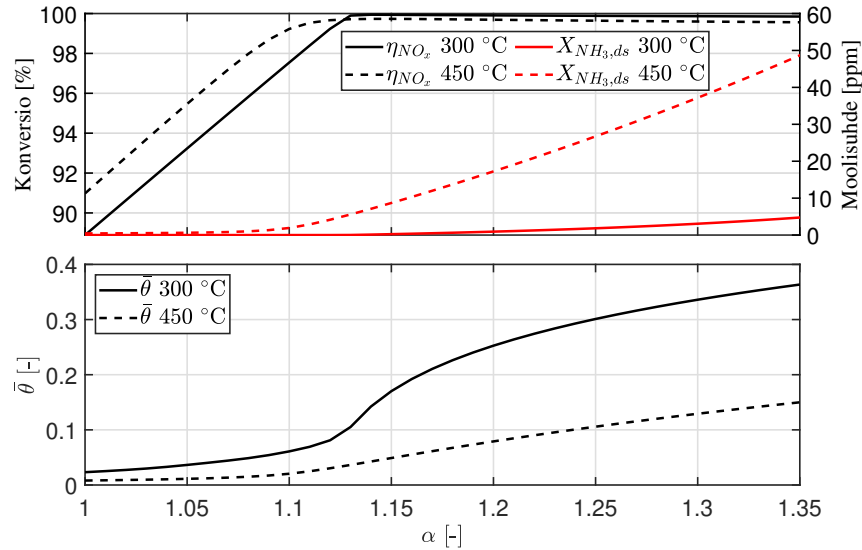
päästöä. Koska ammoniakki voi hapettua hapetuskatalysaattorissa typen oksideiksi, ei konversiotehokkuus kasva rajatta ammoniakkilatauksen kasvaessa, vaan liian suuri ammoniakkilataus johtaa konversiotehokkuuden alenemiseen. Tasapainotilassa hapetuskatalysaattorin jälkeiset kaasupitoisuudet sekä ammoniakkilataus määräytyvät ammoniakin syöttösuhteen α mukaan, joten optimaalinen ammoniakkilataus saadaan etsimällä optimaalinen syöttösuhde α^* , joka saadaan ratkaisemalla optimointiongelma

$$\begin{aligned} \min_{\alpha} \quad & \bar{X}_{NO,ds} + \bar{X}_{NO_2,ds} \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{f}(\mathbf{x}_e, \alpha) = 0 \\ & \mathbf{y}_e = \mathbf{h}(\mathbf{x}_e, \alpha) \\ & \bar{X}_{NH_3,ds} \leq c_1 \end{aligned} \quad , \quad (4.14)$$

missä $\bar{X}_{NO,ds}$, $\bar{X}_{NO_2,ds}$ ja $\bar{X}_{NH_3,ds}$ ovat kaasujen moolisuhteiden tasapainotilan arvot SCR- ja hapetuskatalysaattorin jälkeen. Minimoitavana funktiona on typen oksidien moolisuhteiden summa. Rajoite c_1 on suurin sallittu tasapainotilan ammoniakin moolisuhteiden summa katalysaattorin jälkeen, minkä lisäksi moolisuhteiden on oltava systeemin tasapainotilan ratkaisuja. Optimointiongelman ratkaisuun käytetään MATLAB-ohjelmiston `fmincon`-funktiota [54].

SCR:n NO_x -konversio, ammoniakin hapetuskatalysaattorin jälkeinen ammoniakkipäästö ja SCR:n keskimääräinen ammoniakkilataus tasapainotilassa syöttösuhteen α funktiona on esitetty kuvassa 4.4. Tasapainotilan arvot on esitetty 300:n ja 450:n °C toimintapisteissä. Korkeamman lämpötilan toimintapisteessä NO_x -konversio saavuttaa maksimiarvon pienemmällä syöttösuhteella, mutta suurin saavutettavissa oleva NO_x -konversio on pienempi. Toisaalta lämpötilaltaan korkeammassa toimintapisteessä myös ammoniakkipäästö kasvaa merkittävästi jyrkemmin syöttösuhteen kasvaessa matalamman lämpötilan toimintapisteeseen verrattuna. Suurempi ammoniakkipäästö johtuu toimintapisteen suuremmasta pakokaasun massavirrasta ja lämpötilan kasvaessa pienenevästä ammoniakin varastointikapasiteetista.

Tasapainotilan ammoniakkipitoisuuden rajoituksen lisäksi tulee ammoniakkilatauksen asetusarvon määrittämisessä ottaa huomioon mahdollisesta moottorin kuormannostosta aiheutuvan pakokaasun massavirran ja lämpötilan nopea kasvaminen. Tällöin katalysaattorin jälkeinen ammoniakinpitoisuus voi äkillisesti kasvaa varastoituneen NH_3 :n desorbtion takia. Tämän takia ammoniakkilatauksen asetusarvolle asetetaan toinen rajoite, joka ottaa huomioon mahdollisen kuormannoston aiheuttaman ammoniakkipäästön. Rajoite toteutetaan simuloimalla kuormannostotilanne, jonka aikaisen ammoniakkipitoisuuden maksimiarvon on oltava alle määritetyn tason c_2 .



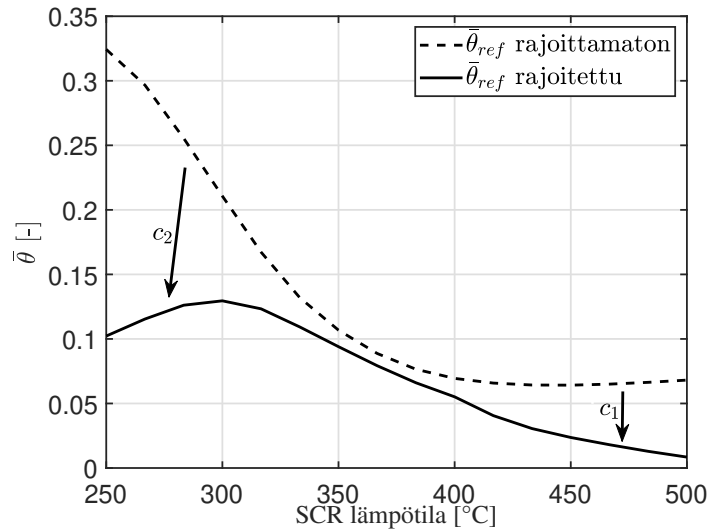
Kuva 4.4. Tasapainotilan NO_x -konversio η_{NO_x} ja ammoniakkipäästö $X_{NH_3,ds}$ syöttösuhteen α funktiona toimintapisteissä 300 °C ja 400 °C

Kuormannostilanteen simuloinnissa katalysaattorin ammoniakkilatauksen alkutilaksi asetetaan optimointiongelman 4.14 ratkaisuna saatu ammoniakkilataus, minkä jälkeen pakokaasun lämpötila ja massavirta sekä katalysaattoria edeltävät kaasujen moolisuhteet asetetaan korkeimman lämpötilan toimintapisteiden arvoihin. Pakokaasun massavirta ja kaasujen moolisuhteet vaihtuvat askelmaisesti, kun taas pakokaasun lämpötila kasvaa ramppimaisesti muutosnopeudella $2 \frac{^{\circ}C}{s}$. Simuloidusta kuormannostilanteesta tallennetaan korkein ammoniakkipitoisuus. Jos maksimipitoisuus ylittää asetetun rajan c_2 , alennetaan kyseisen toimintapisteiden ammoniakkilatausta kunnes rajoitteen ehto täyttyy.

Keskimääräisen ammoniakkilatauksen asetusarvo määritetään SCR:n koko toiminta-alueella kuvassa 4.2 esitetyissä suunnittelupisteissä, jolloin keskimääräinen ammoniakkilataus voidaan esittää SCR:n lämpötilan funktiona

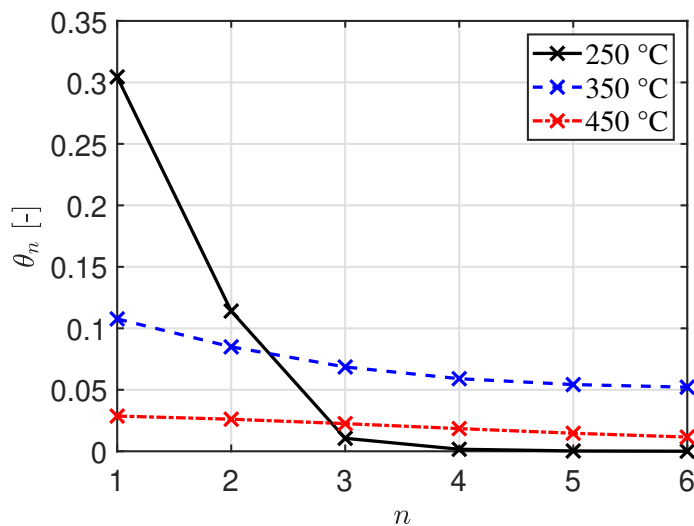
$$\bar{\theta}_{ref} = f(\bar{T}). \quad (4.15)$$

Tasapainotilan rajoitteen c_1 arvolla 2,5 ppm ja kuormannostilanteen rajoitteen c_2 arvolla 10 ppm saatu ammoniakkilatauksen asetusarvokäyrä lämpötilan funktiona on esitetty kuvassa 4.5. Kuvaajaan on piirretty rajoitteita muuttamalla havaitut rajoitteiden vaikutussuunnat. Kuvaajasta nähdään, että korkean lämpötilan ja pakokaasun massavirran toimintapisteissä ammoniakkilatausta rajoittaa tasapainotilan rajoite c_1 katalysaattorin viipymääjan ja ammoniakkin varastointikapasiteetin ollessa pieniä. Kuormannostilanteen rajoite c_2 rajoittaa ammoniakkilatausta merkittävästi matalan lämpötilan toimintapisteissä, joissa optimaalisen konversion saavuttamiseksi vaaditaan suuri ammoniakkilataus.



Kuva 4.5. Optimoitu keskiarvoinen ammoniakkilataus ilman rajoitteita ja rajoitteilla $c_1 = 2,5$ ppm ja $c_2 = 10$ ppm. Kuormannostilanteen NH_3 -rajoite rajoittaa ammoniakkilatausta matalilla lämpötiloilla ja tasapainotilan rajoite korkeilla lämpötiloilla.

Ammoniakkilatauksen jakautuminen SCR:n pitkittäissuunnassa eri toimintapisteissä on esitetty kuvassa 4.6. Ammoniakki on matalan lämpötilan toimintapisteissä varastoitunut katalysaattorin etureunaan takareunan ollessa lähes tyhjä. Lämpötilan ja pakokaasun massavirran kasvaessa ammoniakkilataus leviää myös katalysaattorin takaosaan, jakauksen ollessa lähes tasainen suuren lämpötilan toiminta-alueella. Ammoniakkilatauksen jakaumaa käytetään asetusarvona ammoniakkilataukselle SCR:n eri soluissa.



Kuva 4.6. Ammoniakkilatauksen jakauma SCR-katalysaattorin pituussuunnassa eri toimintapisteissä.

4.3 Katalysaattorin ammoniakkilatauksen estimointi

SCR-katalysaattorin ammoniakkilatauksen estimointiin käytetään SCR-katalysaattoria edeltäviä kaasukonsentraatioita, mitattua pakokaasun lämpötilaa ennen katalysaattoria ja katalysaattorin keskelle sijoitetun ammoniakianturin mittausta. Katalysaattoria edeltävä NO_x -konsentraatio mitataan anturilla, kun taas $\text{NO}:\text{NO}_2$ suhde ja O_2 -pitoisuus ovat estimoituja arvoja. Katalysaattoria edeltävä NO_x -anturi sijaitsee ennen DEF-ruiskua, joten ristiherkkyttä ammoniakille ei tarvitse ottaa huomioon. Kaasukonsentraatioiden lisäksi käytettävissä ovat estimoitu pakokaasun massavirta ja mitattu pakokaasun lämpötila ennen SCR-katalysaattoria. Merkitään tunnettuja häiriösignaaleja

$$\mathbf{d} = \left[c_{\text{NO},us} \quad c_{\text{NO}_2,us} \quad c_{\text{O}_2} \quad \dot{m}_{EG} \quad T_{EG,us} \right]^T. \quad (4.16)$$

Tunnettujen häiriöiden vaikutus ammoniakkilataukseen huomioidaan käyttämällä niitä sisäänmenoina laajennetun Kalman-suotimen sisältämässä SCR-katalysaattorin epälineaarissa mallissa. NO - ja NO_2 -pitoisuuksien vaikutus otetaan huomioon ratkaisemalla niiden pitoisuudet mallin eri soluissa yhtälöistä 2.40 ja 2.41. Mallin parametreinä ovat happikonsentraatio ja pakokaasun massavirta päivitetään reaaliaikaisesti niiden estimoitujen arvojen mukaan. Katalysaattorin lämpötila mallin eri soluissa mallinnetaan yhtälön 2.34 lämpötaseella.

Syötetyn ammoniakkin todellinen pitoisuus voi erota oletetusta urean ruiskutusmäärän virheestä johtuen. Ruiskutusmäärän virhe voi syntyä pakokaasun massavirran estimointivirheestä, SCR:ää edeltävän NO_x -pitoisuuden mittausrvirheestä tai urearuiskun epäideaalisuuksista. Katalysaattoriin sisäänmenevään ammoniakkipitoisuuteen vaikuttavia häiriöitä voi syntyä myös epäideaalisesta urean sekoittumisesta johtuvista urean epätäydellisestä hajoamisesta ja epätasaisesta ammoniakkipitoisuudesta ennen katalysaattoria. Prosessihäiriö mallinnetaan syötetyn ammoniakkipitoisuuteen additiivisesti vaikuttavana tuntemattomana satunnaishäiriönä. Mittaushäiriö mallinnetaan ammoniakianturin mittaukseen vaikuttavana mittauskohinana. Prosessi- ja mittaushäiriöiden oletetaan olevan 0-keskiarvoista normaalijakautunutta valkoista kohinaa.

Prosessihäiriön todellisesta spektritiheydestä ei ole käytettävissä mitattua tietoa. Prosessikohinan spektritiheyttä käytetään estimaattorin viritysparametrina, jonka avulla voidaan vaikuttaa estimaattorin estimointivirheen dynamiikkaan ja suuruuteen. Kasvattamalla prosessikohinan varianssia Kalman-vahvistus saa suurempia arvoja, jolloin estimointivirheen suppenemisen tulisi olla nopeampaa. Mittauskohinan varianssi voidaan arvioida anturivalmistajan toimittamien teknisten tietojen perusteella.

SCR-katalysaattorin tilamallin epälineaarinen tiladifferentiaaliyhtälö on aikadiskretoitava EKF-algoritmin prediktointimallin toteuttamiseksi. Differentiaaliyhtälön epälineaarisuuden

vuoksi sitä ei voida diskretoida analyttisesti, mutta diskretointi voidaan suorittaa numeerisella integroinnilla. Aikadiskretointi toteutetaan Eulerin eksplisiittisellä menetelmällä, jolloin tilan prediktointidifferenssiyhtälöksi saadaan

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} &= \mathbf{f}_d(\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}, u_{k-1}, \mathbf{d}_{k-1}) \\ &= \hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1} + h \cdot \mathbf{f}(\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}, u_{k-1}, \mathbf{d}_{k-1})\end{aligned}\quad (4.17)$$

Diskreettiaikaisen prosessikohinan kovarianssin tarkka arvo saadaan diskretoimalla jatkuva-aikainen prosessikohina kaavan 3.7 avulla. Estimointialgoritmin reaaliaikaisessa implementaatiossa prosessikohinan kovarianssi approksimoidaan kaavalla [55, s. 90]:

$$\Sigma_{w,k} \approx B_{w,k} R_w B_{w,k}^T h, \quad (4.18)$$

missä $B_{w,k}$ on nykyisen tilaestimaatin ympäristössä linearisoidun jatkuva-aikaisen tilamallin häiriömatriisi.

SCR-katalysaattorin ammoniakkilataus estimoidaan laajennetulla Kalman-suotimella. Toteutettu ammoniakkilatauksen estimointialgoritmi on:

$$\begin{aligned}A, B_w, C_m &= \text{scrLinearized}(\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}, u_{k-1}, \mathbf{d}_{k-1}) \\ \Phi &= e^{Ah} \\ \Sigma_w &= B_w S_w B_w^T h \\ \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} &= \hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1} + h \cdot \mathbf{f}(\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}, u_{k-1}, \mathbf{d}_{k-1}) \\ P_{k|k-1} &= \Phi P \Phi^T + \Sigma_w \\ L &= P C_m^T (C_m P C_m^T + \Sigma_v)^{-1} \\ \hat{\mathbf{x}}_{k|k} &= \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + L(m_k - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}, u_{k-1}, \mathbf{d}_{k-1})) \\ P_{k|k} &= (I - L C_m) P\end{aligned}$$

Funktio `scrLinearized` palauttaa SCR-katalysaattorin jatkuva-aikaisen linearisoidun tilamallin matriisit, minkä jälkeen diskreettiaikainen tilamatriisi ja prosessikohinan kovarianssimatriisi lasketaan diskretoimalla. Tila predikoidaan Eulerin menetelmällä diskretoidulla epälineaarilla tilayhtälöllä. Prediktoitu tila päivitetään ammoniakkianturilla mitatun ja prediktoitun ammoniakkipitoisuuden erotuksen perusteella. Kalman-vahvistus sekä estimointivirheen kovarianssi prediktointi- ja päivitysvaiheen jälkeen lasketaan alaluvussa 3.5 esitettyjen yhtälöiden mukaan.

4.4 Ammoniakkilatauksen säätimen suunnittelu

SCR-katalysaattorin ammoniakkilatauksen säädölle suunnitellaan vahvistusskeduloitu integroiva tilasäädin alaluvussa 3.1 esitetyn lineaarisen neliöllisen optimisäädön metodilla. Luvussa esitetystä regulointiongelmasta poiketen ammoniakkilataus halutaan säätää nollasta poikkeavaan asetusarvoon. Asetusarvon seuranta voidaan toteuttaa käyttämäl-

lä säätölaissa tilan asetusarvon ja tilan erotusta [47, s. 151]. Vakioasetusarvon tarkan seuraamisen saavuttamiseksi säätölakiin suunnitellaan integroiva säätö. Implementoitava säätölaki on:

$$u_k = K(\mathbf{x}_{ref} - \mathbf{x}) + k_i z_k, \quad (4.19)$$

missä \mathbf{x}_{ref} on tilan asetusarvo, k_i on integraattorin vahvistus ja z integraattorin tila, joka toteuttaa differenssiyhtälön

$$z_{k+1} = z_k + r_k - y_{c,k} = z_k + r_k - C_y \mathbf{x}, \quad (4.20)$$

missä r_k on säädettävän suureen asetusarvo ja $y_{c,k}$ säädettävä suure, joka määritellään matriisin C_y valinnalla. Säädettäväksi suureksi valitaan keskiarvoinen ammoniakkilataus $\bar{\theta}_k$, jolloin matriisiksi C_y valitaan

$$C_y = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (4.21)$$

Tilan asetusarvona käytetään alaluvussa 4.2 määritettyä ammoniakkilatauksen asetusarvoa SCR:n eri soluille

$$\mathbf{x}_{ref} = \begin{bmatrix} \theta_{ref,1} & \theta_{ref,2} & \theta_{ref,3} & \theta_{ref,4} & \theta_{ref,5} & \theta_{ref,6} \end{bmatrix}^T \quad (4.22)$$

Ohjauksen saturoituminen voi aiheuttaa säätimen integraattorin wind-up ilmiön [56]. Ohjauksen ollessa saturoituneessa tilassa takaisinkytkentä katkeaa ja jos erosuure on nolasta poikkeava, jatkaa integraattori arvonsa kerryttämistä. Tämä voi johtaa integraattorin arvon liialliseen kasvamiseen, jolloin integraattorin arvon on ensin purkauduttava takaisinkytkennän palautumiseksi. Wind-up ilmiö voidaan välttää suunnittelemalla integraattoriin antiwind-up toiminnallisuus. Back-calculation metodissa saturoituneen ohjauksen ja säätimen tuottaman ohjauksen erotuksesta luodaan takaisinkytkentä, joka ajaa integraattorin pois saturoituneesta tilasta dynaamisesti. Lisäämällä back-calculation termi integraattorin tilan differenssiyhtälöön saadaan se muotoon

$$z_{k+1} = z_k + r_k - C_y \mathbf{x}_k + \frac{1}{\tau_{bc}} (u_{k,sat} - u_k), \quad (4.23)$$

missä τ_{bc} on antiwind-up termin aikavakio, jonka valinnalla voidaan määrittää saturoitumisen purkaantumisen nopeus. Stoikiometrisen suhteen α ylärajan u_{max} määrittää toimintatapistekohtainen suurin sallittu DEF-ruiskutusmäärä ilman depositioiden muodostumisriskiä. Sen lisäksi stoikiometrinen suhde ei voi olla negatiivinen siitä seuraavan negatiivisen

ruiskutusmäärän takia, jolloin rajoitettu ohjaus voidaan mallintaa epälineaarisuutena

$$u_{k,sat} = \begin{cases} u_{max}, & u_k > u_{max} \\ u_k, & 0 \leq u_k \leq u_{max} \\ 0, & u_k < 0 \end{cases} \quad (4.24)$$

Integraattorin vahvistuksen k_i määrittäminen voidaan yhdistää tilatakaisinkytkennän vahvistuksien määrittämisen kanssa augmentoimalla systeemin malli erosuureen integraalin sisältävällä tilalla [46, s. 323–324]. Integraattorilla augmentoitu tilamalli on

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ z \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \Phi & 0 \\ -C_y & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ z \end{bmatrix}_k + \begin{bmatrix} B_u \\ 0 \end{bmatrix} u_k + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} r_k + \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{w}_k \quad (4.25)$$

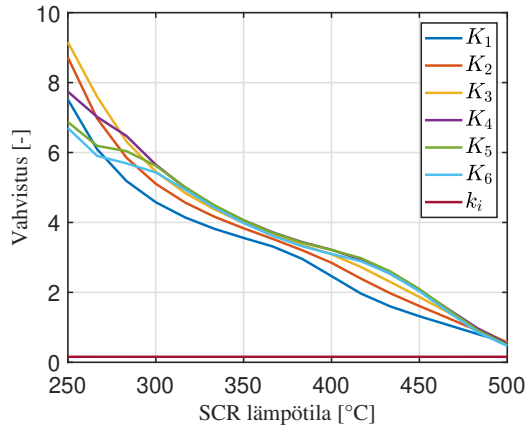
Käyttämällä augmentoitua tilamallia säätimen vahvistukset määritetään alaluvussa 3.1 esitetyn LQ-optimisäädön menetelmällä. LQ-kustannusfunktio sisältää nyt myös erosuureen integraalin, jonka vuoksi painomatriisiin Q lisätään diagonaalialkio Q_i , jolla painotetaan erosuureen integraalin vaikutusta kustannusfunktion arvoon, jolloin

$$Q = \text{diag}(Q_x, Q_i), \quad (4.26)$$

missä Q_x on tilojen painomatriisi ja Q_i on integraalin painokerroin. Kustannusfunktion painomatriisit Q ja R määritetään simulointien perusteella siten, että ammoniakkilatauksen vaste on nopea ilman ohjauksen liiallista saturoitumista. Lopullisia painomatriiseja voidaan vielä hienosäätää todellisella järjestelmällä tehtyjen kokeiden perusteella. Tilan painomatriisin Q_x diagonaalialkioiden eri suuruisilla painokertoimilla voitaisiin painottaa ammoniakkilatauksen reguloitukykyä katalysaattorin eri osissa. Esimerkiksi takaosan ammoniakkilatauksen reguloitukykyä voidaan painottaa etureunaa enemmän. Käytännössä kuitenkin havaittiin, että käytetyllä säätölain rakenteella tilojen eri suuruinen painotus ei tuottanut hyvää säätötulosta erisuuruisten painoarvojen luodessa ristiriitaisen tilanteen ammoniakkilatauksen keskiarvoa säätävän integraattorin ja tilatakaisinkytkennän välille. Tämän vuoksi tilan painomatriisiksi valittiin positiivisella kertoimella kerrottu identiteettimatriisi.

Toteutetussa muodossa säätölaki on verrattavissa keskiarvoisen estimoidun ammoniakkilatauksen PI-säätöön. Jos katalysaattorin mallina käytettäisiin vain yhtä CSTR-solua eli $N = 1$, olisi säätölaki täysin yhtenevä PI-säätimen kanssa käyttämällä tilatakaisinkytkennän vahvistusta P-osan vahvistuksena ja integraattorin vahvistusta I-osan vahvistuksena.

Määritetyt vahvistukset SCR-katalysaattorin lämpötilan funktiona on esitetty kuvassa 4.7. Vahvistusskeduloidun säätimen toteuttamiseksi suunnittelupisteissä määritetyt vahvistuk-



Kuva 4.7. Määritetyt säätimen vahvistukset painomatriiseilla $Q_x = 0,025I$, $Q_i = 0,025$ ja $R = 1$

set tallennetaan hakutaulukkoon. Vahvistukset interpoloidaan lineaarisesti suunnittelupisteiden välillä. Vahvistusten kuvaajasta nähdään, että integraattorin vahvistus k_i on lähes vakio toimintapisteestä riippumatta, minkä vuoksi se toteutetaan vakiovahvistuksena. Kuvassa 4.7 käytetyillä kustannusfunktion painokertoimilla integraattorin vahvistukseksi saatiin 0,157.

Ajosyklin alussa katalysaattorin lämpötila on usein alhainen, jolloin ammoniakkilatauksen asetusarvo on suuri, kun taas katalysaattorin ammoniakkilataus voi olla pieni edellisen ajosyklin jäljiltä. Alhaisessa lämpötilassa myös ruiskutusmäärä on merkittävästi rajoitettua. Jotta ammoniakkilataus saavuttaisi asetusarvonsa mahdollisimman nopeasti, asetetaan ruiskutusmääräksi suurin sallittu määrä kunnes estimoitu ammoniakkilataus saavuttaa asetusarvonsa määritetyn toleranssin ϵ_θ sisällä.

Estimaattoripohjaisen säätimen toteuttamiseksi säätölain 4.19 tilan \mathbf{x}_k tilalle sijoitetaan alaluvussa 4.3 suunnitellun laajennetun Kalman-suotimen tuottama tilaestimaatti $\hat{\mathbf{x}}_{k|k}$. Koska säädetty suure ei ole mitattavissa, on integroivaan säätöön käytettävä säädettävän suureen estimoitua arvoa. Lopulliseksi säätölaiksi saadaan

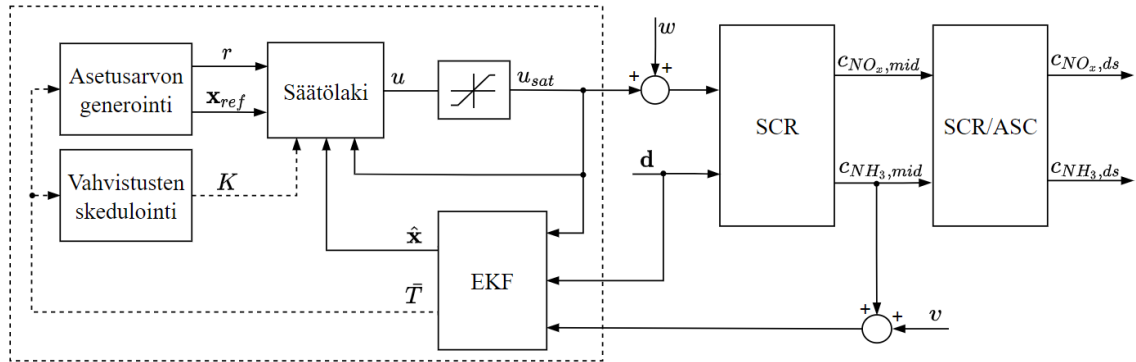
$$u_k = K(\bar{T})(\mathbf{x}_{ref,k} - \hat{\mathbf{x}}_{k|k}) + k_i z_k, \quad (4.27)$$

missä integraattorin tila z toteuttaa differenssiyhtälön

$$z_{k+1} = z_k + r_k - C_y \hat{\mathbf{x}}_{k|k} + \frac{1}{\tau_{aw}}(u_k - u_{k,sat}). \quad (4.28)$$

Toteutetun säätöjärjestelmän rakenne on esitetty kuvan 4.8 lohkokaaviossa. Laajennettu Kalman-suodin (EKF) tuottaa estimaatin SCR-katalysaattorin ammoniakkilatauksesta ja keskiarvoisesta lämpötilasta katalysaattoria ennen mitattujen tai estimoitujen arvojen ja katalysaattorin jälkeen sijoitetun ammoniakianturin mittauksen perusteella. Estimoitua

ammoniakkilatausta käytetään tilatakaisinkytkennässä ja integroivassa säädössä, jonka tavoitteena on säätää estimoitu ammoniakkilataus toimintapistekohtaisesti määritettyyn asetusarvoon. Asetusarvo ja tilatakaisinkytkennän vahvistukset skeduloidaan katalysaattorin mallinnetun keskilämpötilan perusteella. Urean ruiskutusmäärä on rajattu deposi-
tioiden muodostumisriskin takia, minkä vuoksi ohjaus on rajattu. Integraattorin wind-up ilmiön kompensoimiseksi säädin sisältää antiwind-up toiminnallisuuden.



Kuva 4.8. Suunnitellun säätöjärjestelmän rakenne. Toteutettu säädin on ympäröity katkoviivalla, sen ulkopuolella olevien lohkojen ja signaalien kuvatessa fyysistä järjestelmää.

4.5 Suorituskyvyn arviointi

Säädetyin systeemin suorituskykyä ja robustisuutta voidaan analysoida lokaalisti tietys-
sä toimintapisteesä linearisoidun mallin ja toimintapistettä vastaavan lineaarisen sää-
timen taajuusvastetta tutkimalla. Laajennetun Kalman-suotimen voidaan olettaa vastaa-
van aikainvarianttia lineaarista Kalman-suodinta tasapainotilassa. Stabiiliusvarat määrite-
tään avoimen järjestelmän, eli säätimen ja prosessin sarjaankytkennän, taajuusvasteesta.
Avoimen järjestelmän tilamalli säätövirheestä e mittaukseen m on muotoa

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}_c \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \Phi_c & 0 \\ \Gamma C_c & \Phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_c \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}_k + \begin{bmatrix} \Gamma_c \\ \Gamma D_c \end{bmatrix} e_k + \mathbf{w}_k \quad (4.29)$$

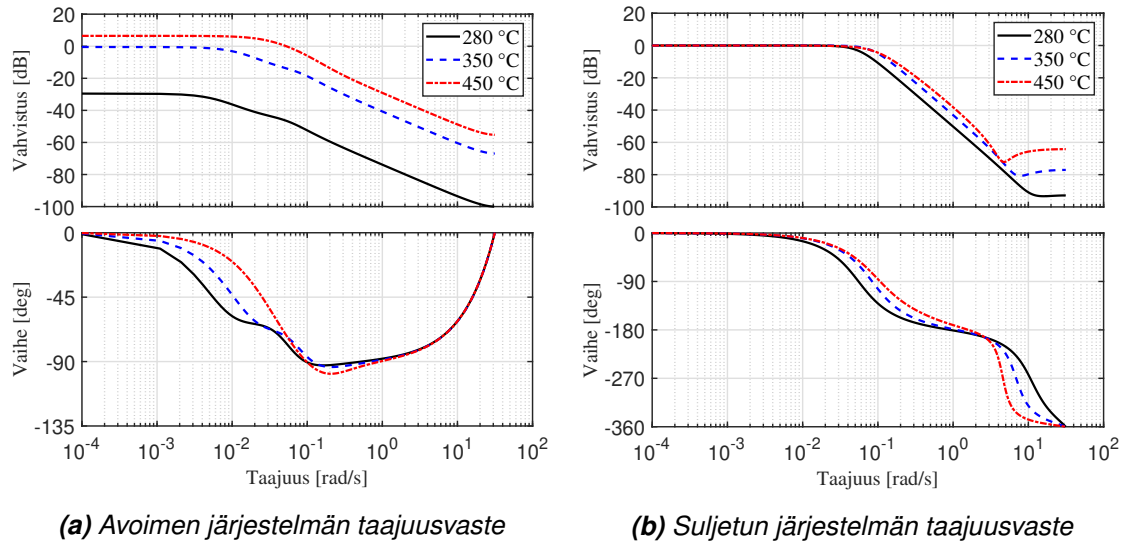
$$m_k = \begin{bmatrix} D_m C_c & C_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_c \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}_k + \begin{bmatrix} D_m D_c \end{bmatrix} e_k + v_k$$

missä \mathbf{x}_c on säätimen tila, joka koostuu Kalman-suotimen tilaestimaatista ja integraattorin tilasta. Säätimen tilamallin johto on esitetty liitteessä B.

Systeemin siirtofunktio $G(z)$ saadaan tilamallista kaavalla

$$G(z) = \Gamma(zI - \Phi)^{-1}C + D \quad (4.30)$$

missä z on kompleksimuuttuja. Diskreetti aikaisen systeemin taajuusvaste saadaan sijoit-



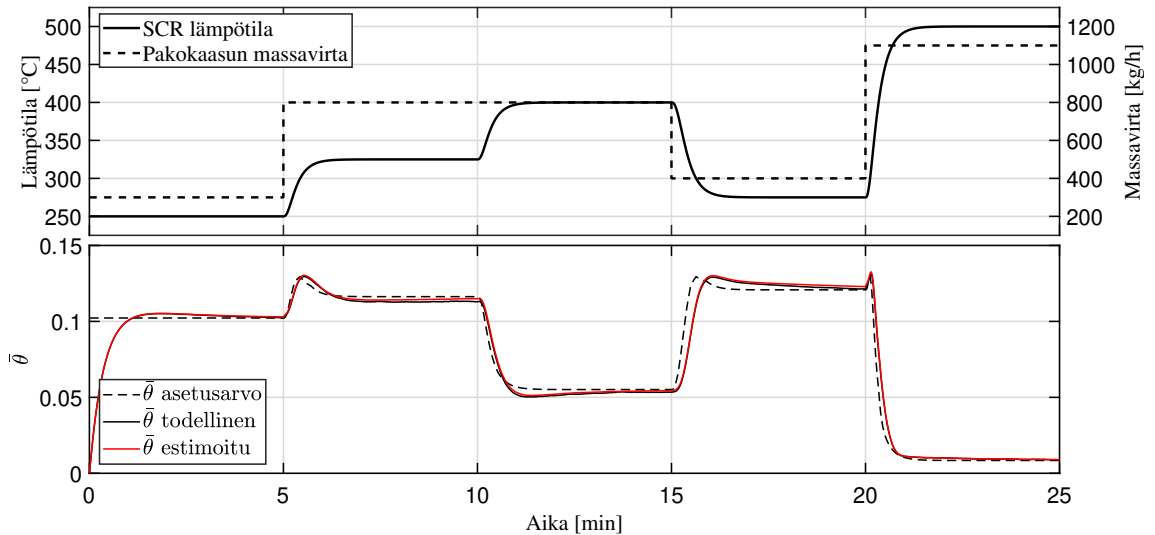
Kuva 4.9. Järjestelmän taajuusvasteet eri toimintapisteissä linearisoitujen mallien perusteella määritettynä

tamalla siirtofunktion kompleksimuuttujan arvoksi $z = e^{j\omega h}$, missä j on imaginääriyksikkö ja ω kulmataajuus [46, s. 236].

Avoimen järjestelmän taajuusvasteet 280 °C, 350 °C ja 450 °C toimintapisteissä ovat esitetty kuvassa 4.9a. Avoimen taajuusvasteen mukaan säädetyn systeemin vahvistusvara on teoriassa ääretön jokaisessa toimintapisteessä, koska avoimella järjestelmällä ei ole vaiheen ylimenotaajuutta. Vaihevara on teoriassa ääretön 280 °C ja 250 °C toimintapisteissä avoimen järjestelmän vahvistuksen ollessa alle 0 dB kaikilla taajuuksilla, mutta 450 °C toimintapisteessä avoimella järjestelmällä on vahvistuksen ylimenotaajuus ja vaihevara toimintapisteessä on 108 astetta, eli vaihevara on suuri. Hyvät vahvistus- ja vaihevarat takaavat säädetyn systeemin robustin stabiiliuden mallinnusvirheistä tai esimerkiksi ikääntymisestä johtuvista parametrimuutoksista huolimatta.

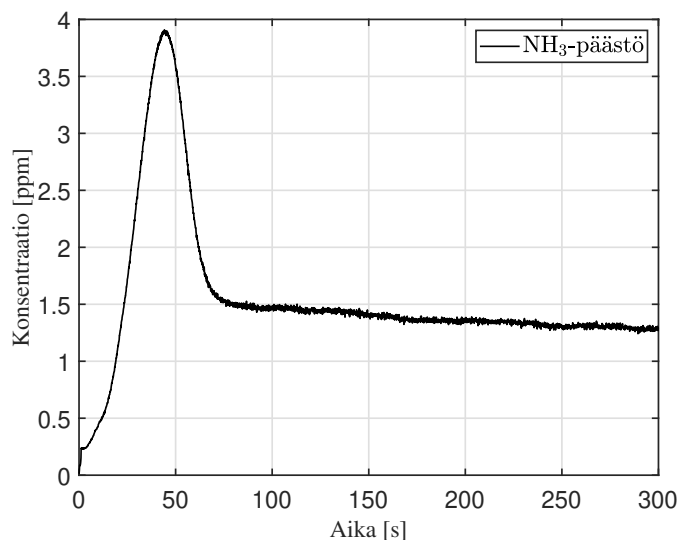
Suljetun järjestelmän taajuusvasteet ovat esitetty kuvassa 4.9b. Siirtofunktion vahvistuksesta nähdään sen olevan 0 dB, kun $\omega \rightarrow 0$, jonka mukaan keskimääräinen ammoniakkilataus suppenee tarkasti vakioasetusarvoon. Tarkka vakioasetusarvon seuranta saavutetaan säätimen integroivalla termillä. Avoimen järjestelmän vahvistuksesta kuitenkin nähdään, että sen asymptootti on vakio pienillä vahvistuksilla, joka kertoo ettei avoin järjestelmä sisällä integraattoria. Tämä johtuu estimoidun tilan käytöstä integroivassa säädössä, josta seuraa ettei säätöpiiri sisällä aitoa integroivaa ominaisuutta. Seurauksena todellinen ammoniakkilataus ei suppene asymptoottisesti asetuservoonsa keskiarvoltaan nollasta poikkeavien häiriöiden vaikuttaessa järjestelmään. Säätvirheen suuruus on kääntäen verrannollinen avoimen järjestelmän vahvistukseen pienillä taajuuksilla [46, s. 259], minkä takia säätövirhe voi olla suuri varsinkin matalan lämpötilan toimintapisteissä, joissa avoimen järjestelmän vahvistus on pieni.

Säätimen suorituskyky muuttuvassa toimintapisteessä validoidaan simuloinneilla, joissa käytetään SCR-katalysaattorin epälineaarista mallia. Muuttuvalla pakokaasun massavirralla ja lämpötilalla toteutetun simulaation tulokset on esitetty kuvassa 4.10. Tuloksista nähdään, että ammoniakkilataus seuraa asetuservoa kaikissa simulaation toimintapisteissä. EKF:n tuottama ammoniakkilatauksen estimaatti seuraa katalysaattorin todellista ammoniakkilatausta.



Kuva 4.10. Simuloitu säädetyn ammoniakkilatauksen vaste

Kuvan 4.10 simuloinnissa ajanhetkellä 20 min tapahtuvassa pakokaasun massavirran ja lämpötilan nopeassa kasvussa syntyvä ammoniakkipäästö on esitetty kuvassa 4.11. Simuloitu ammoniakkipäästö pysyy transienttitalanteessa selkeästi asetetun 10 ppm rajan alapuolella, sen maksimiarvon ollessa hieman alle 4 ppm. Myös tasapainotilan rajoite 2,5 ppm täyttyy päästön tasaantuessa noin 1,5 ppm arvoon 500 °C toimintapisteessä.



Kuva 4.11. Simuloitu ammoniakkipäästö kuormannostilanteessa

5. KOEJÄRJESTELYT

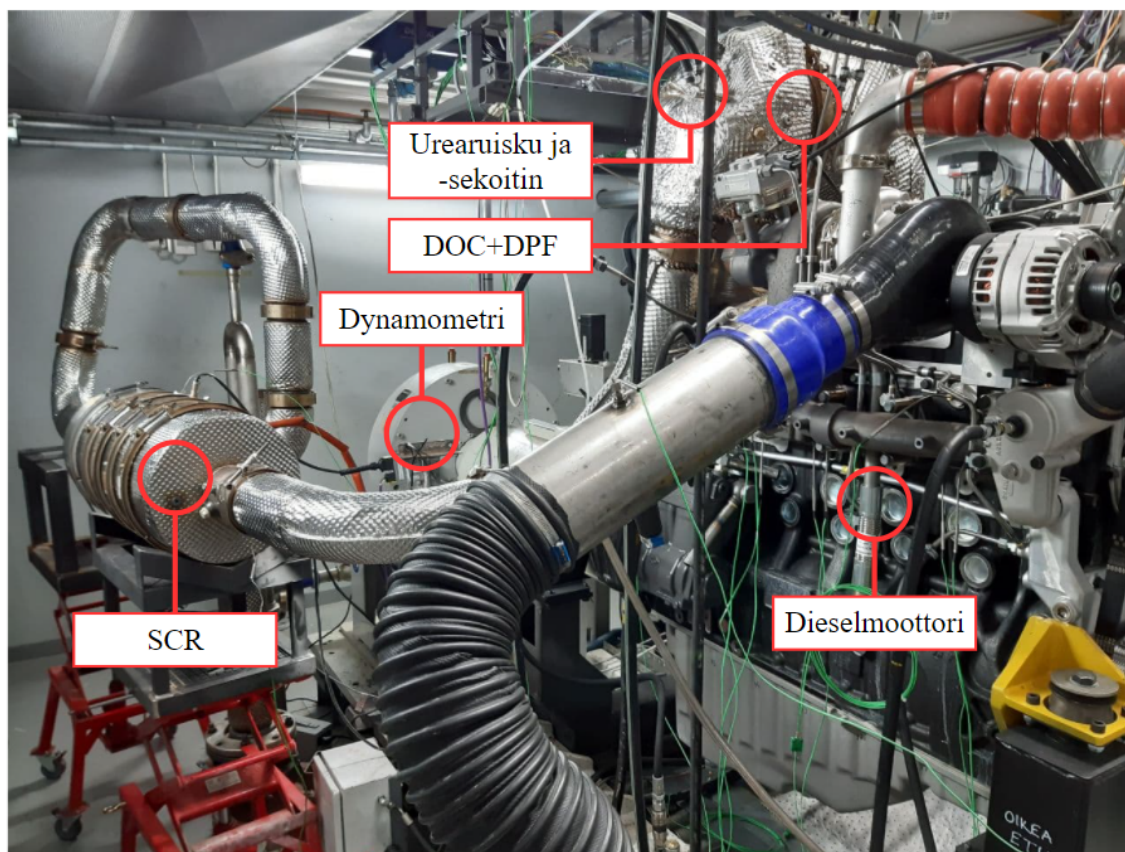
Tässä luvussa esitellään käytännön kokeissa käytetty koelaitteisto, mittausjärjestelyt ja testisyklit, joilla suunnitellun säätöjärjestelmän suorituskyky validoidaan. Kokeet suoritetaan moottorilaboratorioympäristössä todellisella järjestelmällä.

5.1 Koelaitteisto

Käytännön kokeet suoritettiin AGCO Power Oy:n tuotekehityksen moottorilaboratoriossa Nokian Linnavuorella. Kokeet suoritettiin dynamometriin kiinnitetyllä työkonekäyttöön suunnitellulla dieselmoottorilla. Kokeissa käytetyn dieselmoottorin tekniset tiedot on esitetty taulukossa 5.1. Moottorin nimellisvääntömomentti on rajoitettu 1200 Newtonmetriin käytetyn dynamometrin asettaman rajoitteen takia. Käytetty dieselmoottori ja pakokaasun jälkikäsitelyjärjestelmä vastaavat komponenteiltaan ja kalibroinniltaan nykyisen Stage V -päästöluokituksen täyttävää järjestelmää, kaksiosaista SCR-katalysaattoria ja tässä työssä suunniteltua SCR:n säätöjärjestelmää lukuunottamatta. Käytetty SCR-katalysaattori on pinnoitteeltaan ja kokonaistilavuudeltaan Stage V -järjestelmää vastaava. SCR-katalysaattori on pinnoitettu kupari-zeoliittipinnoitteella. SCR-järjestelmän lisäksi testimoottorin jälkikäsitelyjärjestelmä sisältää hapetuskatalysaattorin (DOC) ja hiukkassuodattimen (DPF), jotka sijaitsevat pakolinjassa ennen SCR-katalysaattoria.

Taulukko 5.1. Testimoottorin tiedot

Iskutilavuus	7,5 l
Sylinterikonfiguraatio	Rivi-6
Nimellisvääntömomentti	1200 Nm
Nimellisyörimisnopeus	2100 rpm
Polttoainejärjestelmä	Yhteispaine
Päästöluokitus	Stage V
Jälkikäsitelyjärjestelmä	DOC+DPF+SCR



Kuva 5.1. Koelaitteisto moottorilaboratorion testisolussa

Moottorilaboratorion testisoluun asennettu koelaitteisto on esitetty kuvassa 5.1. Dieselmoottori on kuvan oikeassa reunassa etualalla ja se on yhdistetty dynamometriin kardaniakselilla. Pakolinjassa turboahtimen jälkeen moottorin päälle sijoitettuna ovat hapeuskatalysaattori ja hiukkassuodatin. Urearuisku- ja sekoitin sijaitsevat hiukkassuodattimen perässä. Kahdesta kennosta koostuva SCR-katalysaattori on ureasekoittimen jälkeen väliputkella yhdistettynä. Säättöjärjestelmässä käytettävä ammoniakianturi on sijoitettu SCR-kennojen välissä olevaan laippaan.

Työssä kehitetty säättöjärjestelmä implementoitiin Rapid Prototyping -järjestelmällä, joka mahdollisti SCR:n säättöjärjestelmän kehittämisen itsenäisesti moottorin ohjausyksikön (ECU, engl. Engine Control Unit) hallitsemien säättö- ja ohjausjärjestelmien rinnalla. Säättö- ja estimointialgoritmit toteutettiin MATLAB:n Simulink -lohkokaaviomalleina, joista generoitiin ohjelmakoodi reaaliaikaista suorittamista varten. Ohjelmakoodi suoritettiin ETAS:in ES910.3 moduulissa, johon yhdistettiin tarvittavat anturien ja ECU:n signaalit. SCR-katalysaattoria edeltävän NO_x - ja lämpötila-anturin signaalit sekä ammoniakianturin arvot luettiin ja urean ruiskutusmääräpyynti lähetettiin CAN-protokollaa (engl. Control Area Network) käyttäen.

SCR:n jälkeinen NO_x - ja ammoniakkipäästö mitattiin virallisten päästömittausten vaatimukset täyttävillä moottorilaboratorion mittalaitteilla. Pakokaasun NO_x -pitoisuus mita-

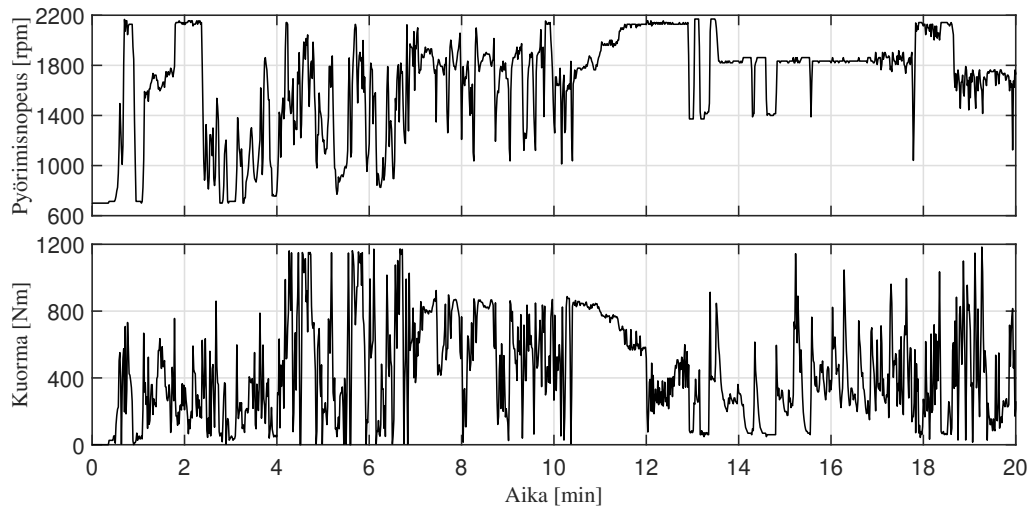
taan Horiba MEXA 7170DEGR kaasuanalysointilaitteella. Kemiluminenssiin perustuva NO_x -analysointilaitteeseen ei ole ristiherkkää ammoniakille ja sen mittaustulos on 0–1500 ppm. SCR:n jälkeinen ammoniakkipitoisuus mitataan optiseen mittaukseen perustuvalla LaserGasNH₃-mittalaitteella, jonka mittaustulos on 0–100 ppm.

5.2 Testisyklit

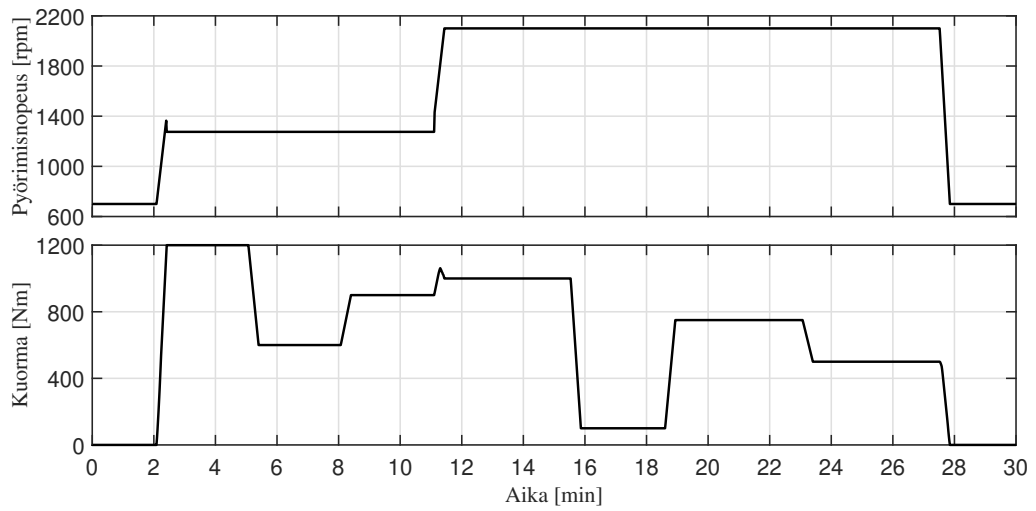
Polttomoottorin tuottamien päästöjen mittaamiseksi käytetään määriteltyjä testisyklejä, joiden tarkoituksena on tuottaa toistettavissa olevat päästöjen mittaolosuhteet ja samalla simuloida ajoneuvon todellisen käytön luonnetta. Testisykli on määritelty sekvenssi moottorin nopeuden ja kuorman pisteitä, jotka voidaan suorittaa moottoridynamometrissä. Testisykli voi olla luonteeltaan transienttiajoo tai stationääristä. Transienttisykleissä päästöt mitataan jatkuvasti syklin yli, kun taas stationäärisessä syklissä päästöt mitataan diskreeteissä toimintapisteissä, joista päästötulos lasketaan painotettuna keskiarvona. [57] Tässä työssä käytettävien testisykliä nopeus- ja kuormasekvenssit on esitetty kuvassa 5.2.

NRTC (engl. Non-road Transient Cycle) on EPA:n EU:n viranomaisten kanssa yhteistyössä kehittämä kestoaltaan 20 minuuttia oleva transienttisykli, jota käytetään kansainvälisesti työkoneiden dieselmootoreiden tyyppihyväksynnässä. NRTC suoritetaan kahteen kertaan, kylmä- ja kuumakäynnistyksenä. Kylmäkäynnistyksessä moottorin ja pakolinjan lämpötila vastaa ympäristön lämpötilaa eli on noin huoneenlämpöinen. Kuumakäynnistyksenä suoritettava sykli suoritetaan kylmäkäynnistyksestä lähteneen syklin jälkeen siten, että syklien välissä on 20 minuutin ajanjakso, jolloin moottori on sammutettuna. Lopullinen päästötulos lasketaan kylmä- ja kuumasykliä painotettuna keskiarvona. Painotuskerroin kylmäsyklille on EPA:n päästöstandardeissa 5 % ja EU:n päästöstandardeissa 10 %. [58]

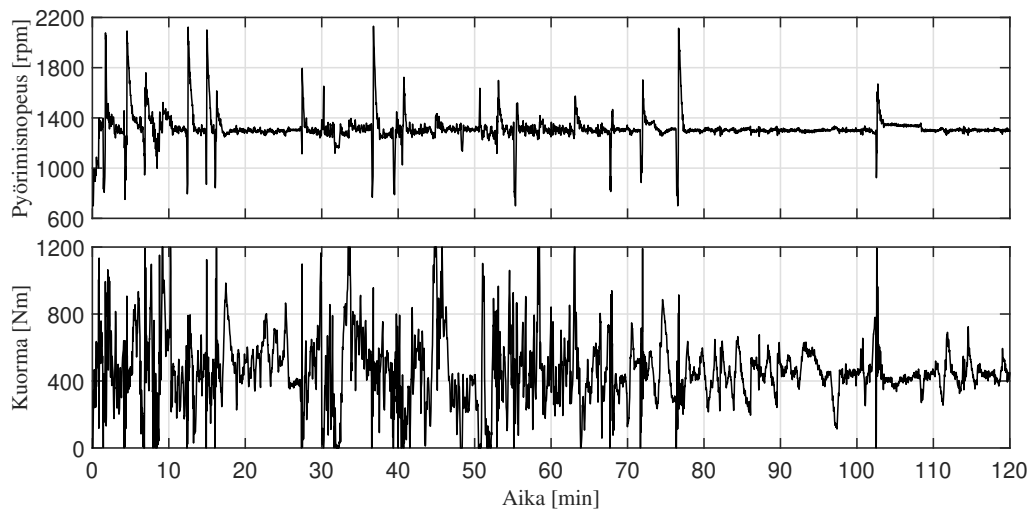
Toiseksi sykliksi valittiin RMC (engl. Ramped Mode Cycle), joka on kestoaltaan 30 minuuttia oleva sykli ja koostuu diskreeteistä moottorin pyörimisnopeuden ja kuorman pisteistä, joiden välillä siirryttään ramppimaisesti. Vaikka sykli koostuu diskreeteistä toimintapisteistä, mitataan sykli jatkuvana. Sykli valittiin tyyppihyväksynnässä käytetyn stationäärisen NRSC (engl. Non-road Steady Cycle) sijaan sen jatkuvan mittaustavan vuoksi, jolloin sykli soveltuu paremmin säätöjärjestelmän toiminnan tutkimiseen. Lisäksi syklin toimintapisteiden järjestyksen vuoksi se sisältää voimakkaita kuormannostotilanteita, jotka luovat haasteen ammoniakkipäästön hallinnan kannalta pakokaasun massavirran ja SCR:n lämpötilan kasvaessa nopeasti.



(a) Non-Road Transient Cycle



(b) Ramped Mode Cycle



(c) Kenttäsykli

Kuva 5.2. Käytettyjen testisykliä määrittelyt

Viimeinen valittu sykli ei ole standardisoitu testisykli, vaan työkoneen todellisesta käytöstä nauhoitettu kenttäsykli. Kenttäsykli, lempinimeltään "Äetsä-sykli", on 120 minuuttia pitkä nauhoite traktorin moottorin pyörimisnopeudesta ja kuormasta sen siirtyessä maantieajoa Nokian Linnavuoresta Sastamalan Äetsään. Sykli valittiin testisuunnitelmaan säätöjärjestelmän suorituskyvyn todentamiseksi virallisten testisykliä ulkopuolisessa syklissä, koska moottorin on täytettävä lainsäädännön asettamat päästövaatimukset myös työkoneen todellisen käytön aikana tyyppihyväksynnän päästömittauksissa käytettyjen syklien lisäksi.

6. TULOKSET

Tässä luvussa esitetään tulokset edellisessä luvussa esitetyillä testisykleillä tehdyistä mittauksista. Tuloksissa esitetään estimaattoripohjaisen ammoniakkilatauksen säädön toimintaa eri testisykleissä. Kehitetyn säätöjärjestelmän suorituskyky validoidaan tutkimalla syklien aikana mitattua NO_x - ja ammoniakkipäästöä.

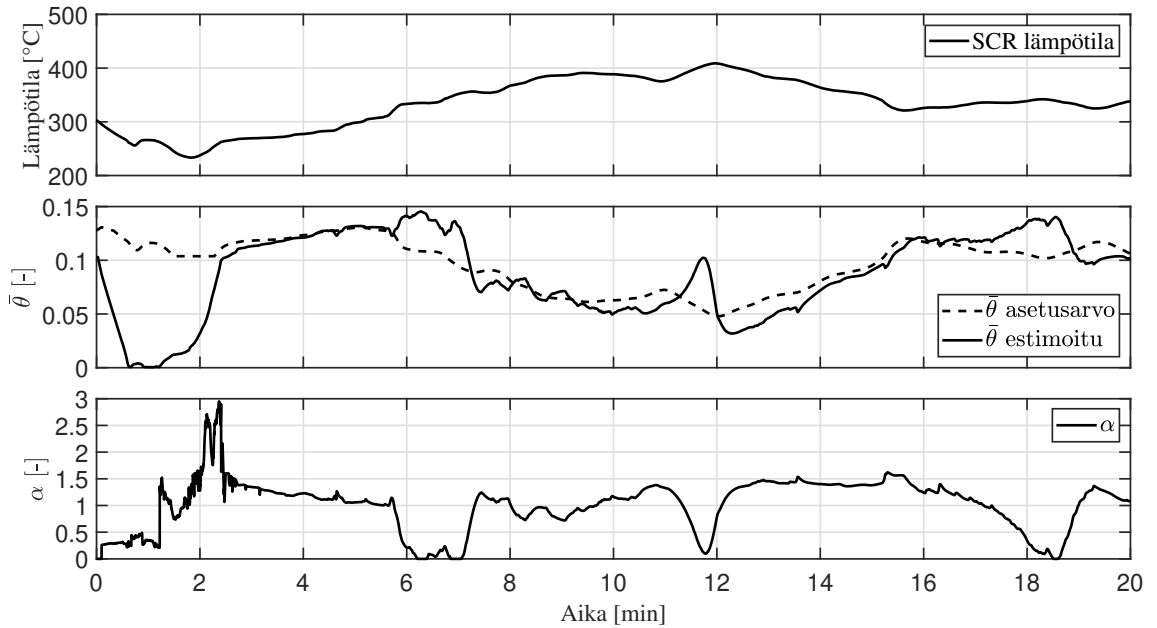
Lopulliset tulosten mittauksissa käytetyt säätimen suunnittelun parametrit on esitetty taulukossa 6.1. Parametrit määritettiin simuloimalla ja varsinaisella järjestelmällä tehtyjen kokeiden perusteella. Kokeissa testattiin säädön toimintaa mittauksissa käytetyissä testisykleissä. Parametrejä ei kuitenkaan optimoitu syklikohtaisesti, vaan samaa parametrikoeilmaa käytettiin jokaisen syklin mittauksessa.

Taulukko 6.1. Lopulliset säätimen suunnittelussa käytetyt parametrit

Parametri	Selite	Arvo
Q_x	Tilojen painomatriisi	0,025I
Q_i	Integraattorin painokerroin	0,025
R	Ohjauksen painokerroin	1
τ_{aw}	Anti-windup aikavakio	10 s
R_w	Prosessikohinan spektritiheys	80 ppm ² /s
Σ_v	Mittauskohinan varianssi	2,5 ppm ²
P_0	Estimointivirheen kovarianssin alkuarvo	$10^{-3}I$
c_1	NH ₃ -päästön tasapainotilan rajoite	2,5 ppm
c_2	NH ₃ -päästön kuormannostotilanteen rajoite	10 ppm

6.1 Ammoniakkilatauksen säädön suorituskyky

Estimoidun ammoniakkilatauksen säätö kuumakäynnistyksenä ajetun NRTC:n aikana on esitetty kuvassa 6.1. Kuvaajissa on esitetty mallinnettu SCR-katalysaattorin keskilämpötila, keskimääräisen ammoniakkilatauksen asetusarvo ja estimaatti sekä ohjausmuuttujana toimiva stoikiometrinen syöttösuhde α . Syklin alussa katalysaattoriin on varastoituneena kylmäkäynnistyksenä ajetun NRTC:n lopussa ollut ammoniakkilataus, jonka keskiarvoiseen arvoon estimoidun tilan alkuarvo alustettiin. On huomioitavaa, että asetetussa esti-



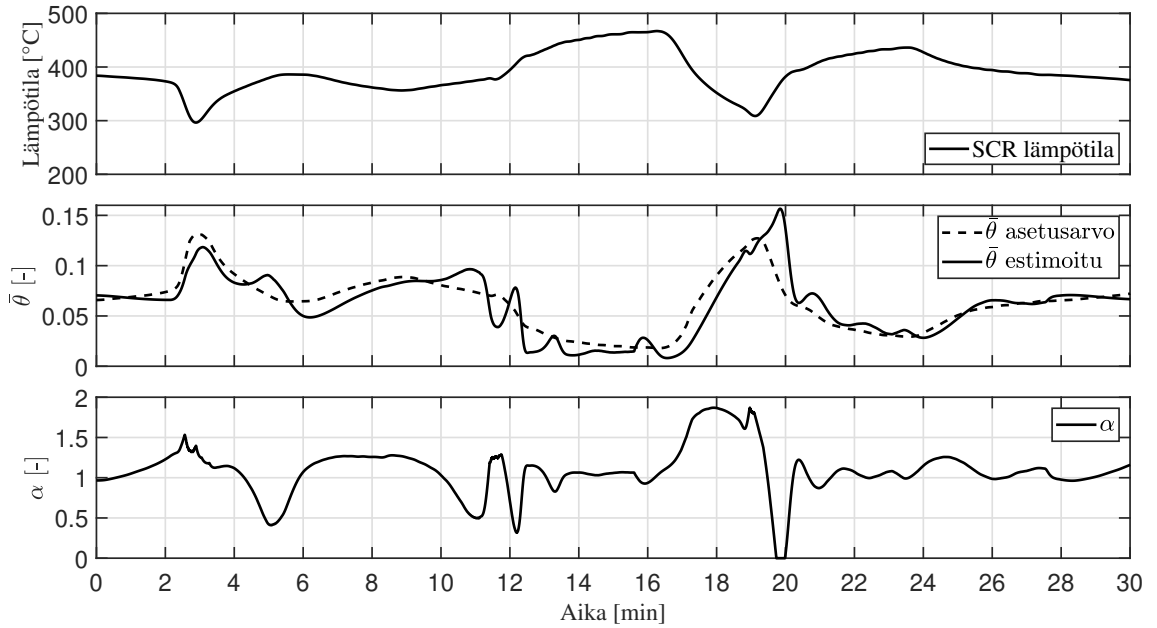
Kuva 6.1. Ammoniakkilatauksen säätö NRTC:n aikana

maatin alkuarvossa ammoniakkilataus on tasaisesti jakautunut, kun taas todellinen ammoniakkilataus saattaa olla jakautunut eri tavalla.

Urean ruiskutusmäärä on merkittävästi rajoitettua syklin alussa, mistä johtuen ammoniakkilatausta ei saada ylläpidettyä syklin alussa. Takaisinkytketty säätö kytkeytyy päälle noin 2,5 minuutin kuluttua syklin alusta ammoniakkilatauksen saavuttaessa asetusrvon asetun marginaalin sisällä. Estimoitu ammoniakkilataus seuraa SCR:n lämpötilan mukaan muuttuvaa asetusrvoa hyvin muutamaa tilannetta lukuunottamatta, joissa estimoitu ammoniakkilataus nousee merkittävästi asetusrvon yläpuolelle. Tilanteet ovat havaittavissa ajanhetkillä 6, 11 ja 17 minuuttia. Nousseen estimoidun ammoniakkilatauksen seurauksena syöttösuhde α kuitenkin pienenee merkittävästi ja urean ruiskutusmäärä käy hetkelisesti hyvin pienenä, palauttaen estimoidun ammoniakkilatauksen asetusrvon lähelle.

RMC:ssä ammoniakkilatauksen asetusrvossa tapahtuu suuria muutoksia kuormannosto- ja laskutilanteissa nopeasti ja suurella vaihteluvälillä muuttuvasta SCR:n lämpötilasta johtuen. Ammoniakkilatauksen säädön toiminta RMC:n aikana on esitetty kuvassa 6.2. RMC:n aikana on havaittavissa NRTC:n tapaan ilmiö, jossa estimoitu ammoniakkilataus karkaa asetusrvon yläpuolelle. Kaikissa tilanteissa yhtenevää on SCR:n nouseva lämpötila.

RMC:n korkean lämpötilan toimintapisteissä kuormannostotilanteissa on nähtävissä ammoniakkilatauksen säädön värähtelyä, joka voi olla merkki säädetyin järjestelmän pienistä stabiiliusvaroista korkeilla lämpötiloilla. Värähtely kuitenkin vaimenee toimintapisteen taasaantuessa eikä johda järjestelmän epästabiiliuteen. Värähtely voi johtua CAN-väylän yli viestitettyjen urean ruiskutusmääräpyynnin ja/tai ammoniakkianturin mittauksen viiveestä. Toinen mahdollinen oletettuja stabiiliusmarginaaleja pienentävä tekijä voi olla mallin-

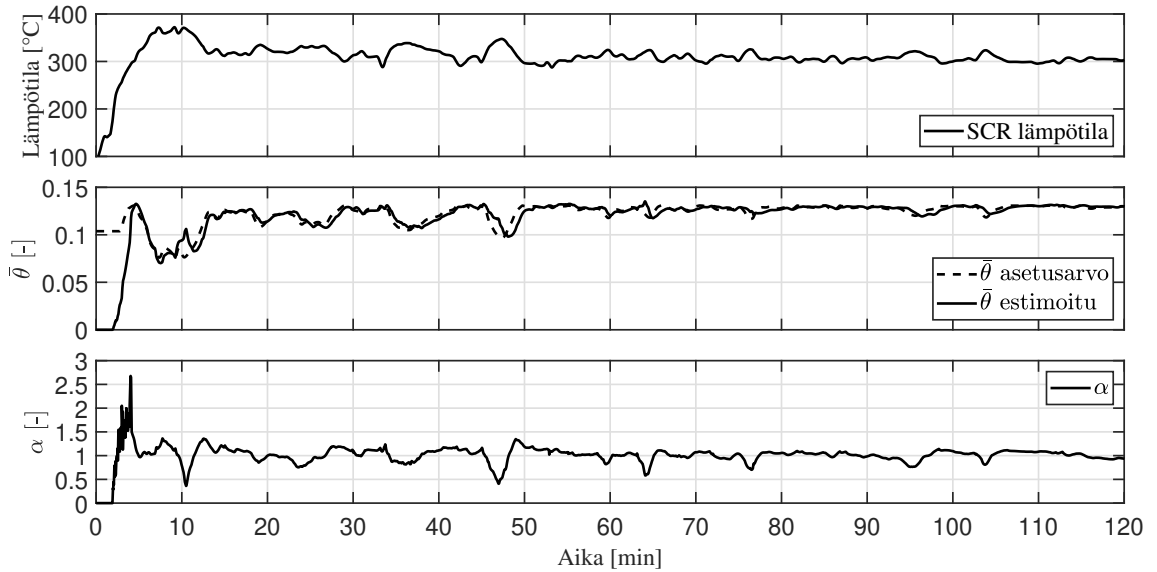


Kuva 6.2. Ammoniakkilatauksen säätö RMC:n aikana

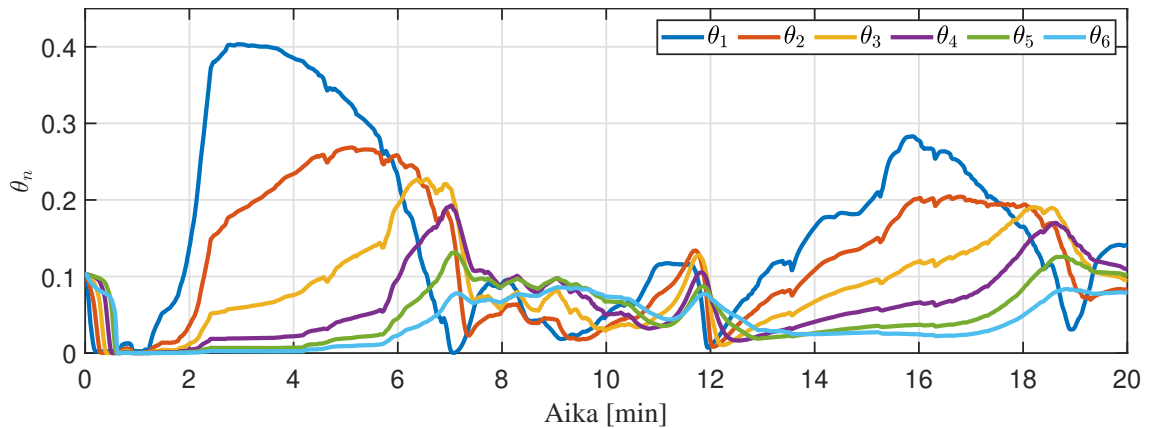
nusvirheet, jos katalysaattorin todellinen dynamiikka eroaa säätimen ja tilaestimaattorin suunnittelussa käytetyn mallin dynamiikasta merkittävästi. RMC:n aikana havaitun värähtelyn takia säätimen suunnittelussa käytetyn LQ-kustannusfunktion tilan ja integraattorin painokertoimia pienennettiin stabiiliusvarojen kasvattamiseksi, mutta tälläkään toimenpiteellä värähtelyä ei saatu kokonaan poistettua.

Kuvan 6.3 kenttäsyklissä SCR-katalysaattorin lämpötila vaihtelee muihin testisykleihin verrattuna pienemmällä alueella, mistä seuraa myös ammoniakkilatauksen asetusrvon pysyminen tasaisempänä. Ennen kenttäsyklin mittaamista katalysaattori tyhjennettiin varastoituneesta ammoniakista ajamalla katalysaattoria kuumana ilman urean ruiskutusta, kunnes ammoniakkianturilla mitattu ammoniakkipitoisuus putosi nolleen. Kenttäsyklissä ammoniakkilataus saavuttaa asetusrvonsa 4 minuuttia syklin alusta. Ammoniakkilatauksen säädin kykenee reguloimaan estimoidun ammoniakkilatauksen tarkasti sen asetusrvoon koko syklin ajan.

Estimoitu ammoniakkilatauksen jakauma SCR-katalysaattorin pitkittäissuunnassa NRTC-syklin aikana on esitetty kuvassa 6.4. Syklin alussa ammoniakki on varastoituneena katalysaattorin etureunaan. Lämpötilan kasvaessa ammoniakin varastointikapasiteetti pienenee ja täten ammoniakkijakauma tasaantuu sen levitessä myös katalysaattorin takareunaan.



Kuva 6.3. Ammoniakkilatauksen säätö kenttäsyklin aikana



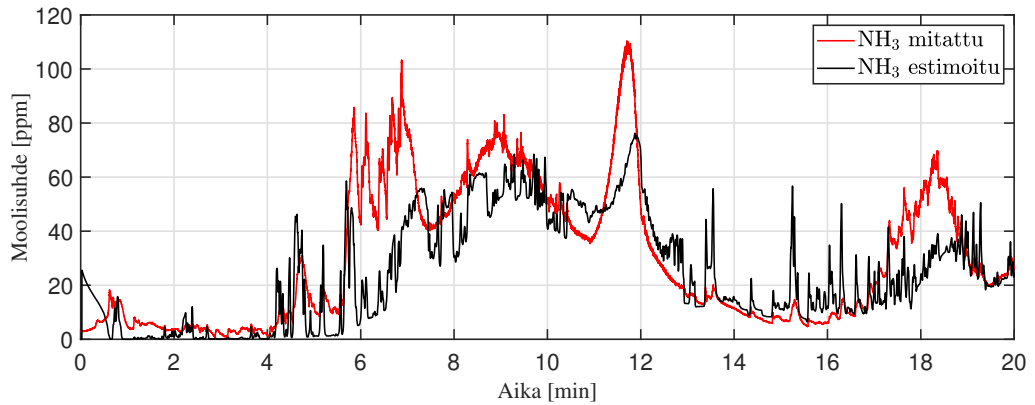
Kuva 6.4. Estimoitu ammoniakkilatauksen jakauma NRTC:n aikana

6.2 Tilaestimaattorin suorituskyky

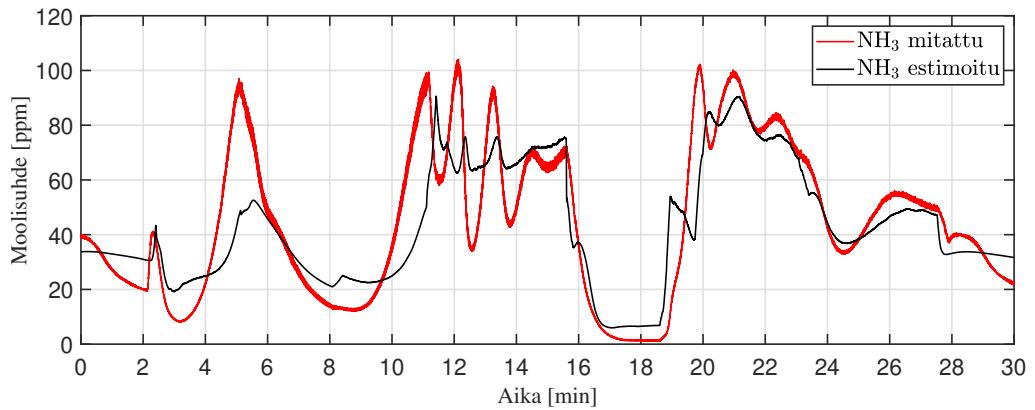
Estimoitu ja SCR:n keskellä sijaitsevan ammoniakkianturin mittaama ammoniakkipitoisuus testisykliä aikana on esitetty kuvassa 6.5. Koska todellisesta ammoniakkilatauksesta ei ole mittaustietoa, tutkitaan estimaattorin toimintaa prediktointivirheen $m_k - \hat{y}_k$ avulla, missä \hat{y}_k on EKF:n prediktointivaiheen estimoima ammoniakkipitoisuus. Prediktointivirheen keskiarvo kaikkien testisykliä yli on 9,51 ppm, mikä tarkoittaa estimoidun ammoniakkipitoisuuden olevan keskimäärin mitattua pitoisuutta pienempi. Olettaen että ammoniakkilataus on verrannollinen ammoniakkipitoisuuteen katalysaattorin jälkeen, tarkoittaa se myös estimoidun ammoniakkilatauksen olevan keskimäärin todellista pienempi. Estimoitu ammoniakkipitoisuus on mitattua pienempi varsinkin kenttäsyklin aikana, jossa SCR:n lämpötila on keskimäärin muita syklejä matalampi. Suuri virhe voi johtua avoimen järjestelmän pienestä vahvistuksesta matalan lämpötilan toimintapisteissä, mikä todettiin alaluvussa 4.5 tehdyllä lineaarisella analyysillä.

Prediktointivirhe on suurimmillaan SCR:n lämpötilan kasvaessa nopeasti matalan lämpötilan toimintapisteen jälkeen, jolloin mitattu ammoniakkipitoisuus kasvaa merkittävästi estimoitua suuremmaksi. Tämä voi kertoa estimoitun ammoniakkilatauksen aliarvioimisesta lämpötilan ollessa matala. Lämpötilan noustessa estimoitua suurempi todellinen ammoniakkilataus aiheuttaa prediktoitua suuremman ammoniakkipitoisuuden, joka johtaa ammoniakkilatauksen estimaatin korjaantumiseen ylöspäin. Takaisinkytkennän takia ammoniakkilatauksen säädin kykenee kompensoimaan tilanteen urean syöttömäärää pienentämällä ja täten ylimääräisen ammoniakkilatauksen purkamisella.

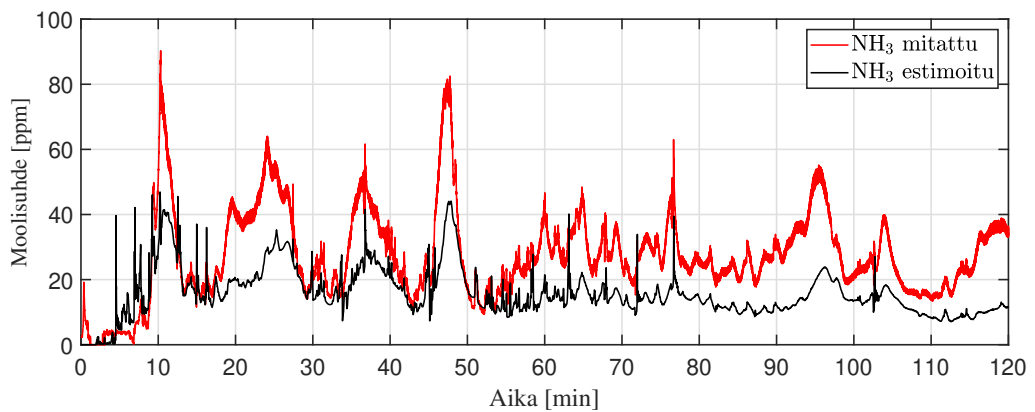
Mitattu ammoniakkipitoisuus katalysaattorin keskellä on keskimäärin 31 ppm kaikkien testisykliä aikana. Pienimmillään ammoniakkipitoisuus on NRTC:n ja kenttäsyklin alussa, joissa SCR:n lämpötila on matala ja täten ammoniakkin varastointikapasiteetti on suuri. Ammoniakkianturin mittauksen hajonnan havaittiin olevan pienillä pitoisuuksilla suurta ennen varsinaisia testisyklejä suoritetuissa validointitesteissä, joissa anturin lukemaa verrattiin laboratorion LaserGasNH₃-mittalaitteen lukemaan. Tästä johtuen mitattu ammoniakkipitoisuus voi olla epäluotettava pienillä pitoisuuksilla. Yli 10 ppm pitoisuuksilla anturin todettiin seuraavan referenssimittalaitteen lukemaa hyvin, joten anturin mittausta voidaan pitää luotettavana muissa tilanteissa.



(a) NRTC



(b) RMC



(c) Kenttäsykli

Kuva 6.5. Estimoitu ja mitattu ammoniakkipitoisuus katalysaattorin keskellä

6.3 NO_x - ja ammoniakkipäästö

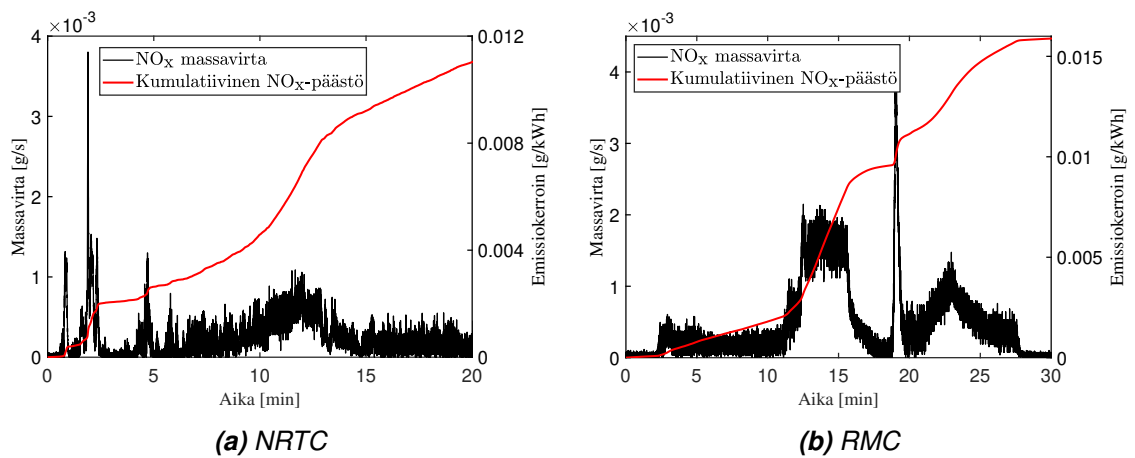
Testisyklin aikana syntynyt NO_x-päästö ilmoitetaan päästökertoimena, joka lasketaan NO_x-päästön ja moottorin testisyklin aikana tekemän työn suhteena

$$EF_{NO_x} = \frac{\int_0^{t_{sykli}} \dot{m}_{NO_x}(t) dt}{\int_0^{t_{sykli}} P_{moottori}(t) dt}, \quad (6.1)$$

missä t_{sykli} on syklin kesto [s], $\dot{m}_{NO_x}(t)$ on typen oksidien hetkellinen massavirta [g/s] ja $P_{moottori}(t)$ moottorin hetkellinen teho [kW].

Hetkellinen ja kumulatiivinen NO_x-päästö kuumakäynnistyksinä ajetuista testisykleistä on esitetty kuvassa 6.6. NRTC:n aikana NO_x-päästöä kertyy syklin alussa SCR:n lämpötilan ollessa matala ja korkeatehoisen jakson aikana syklin puolessa välissä. Osa syklin puolessa välissä syntyvästä päästöstä voi aiheutua ammoniakkin hapettumisesta hapeuskatalysaattorissa typen oksideiksi. Kokonaisuudessaan päästö NRTC:n yli on erittäin matala syklille lasketun NO_x-päästökertoimen ollessa 0,011 g/kWh. RMC:n aikana päästö syntyy NRTC:n tapaan suurimmilta osin syklin korkeatehoisissa ajopisteissä. RMC:n viidennessä ajopisteessä noin 12 minuuttia syklin alusta moottori toimii nimellistehollansa, mistä johtuen pakokaasun massavirta ja moottorin tuottama NO_x-päästö ovat suuria. Tällöin ollaan saavutettavissa olevan NO_x-konversiotehokkuuden ylärajalla katalysaattorin viipymäajan ollessa pieni. Siitä huolimatta RMC:n yli laskettu päästö on NRTC:n tulosta vain hieman suurempi päästökertoimena laskettuna tuloksen ollessa 0,016 g/kWh.

Kylmäkäynnistyksinä alkaneiden syklien kuvaajia ei esitetä, koska niissä syntyvä NO_x-päästö syntyy lähes kokonaan syklien alun aikana, jolloin pakokaasun lämpötila on liian matala urean ruiskutusta varten. Kylmäkäynnistyksenä ajettujen NRTC:n mitatusta kumula-

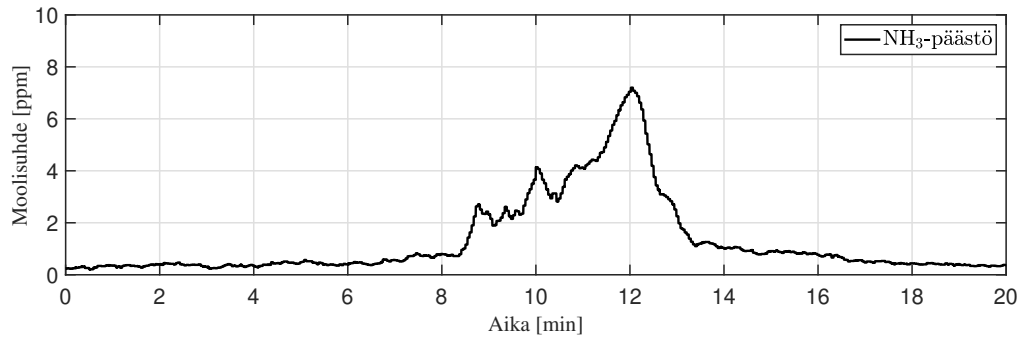


Kuva 6.6. Hetkellinen ja kumulatiivinen NO_x-päästö kuumakäynnistyksenä ajettujen testisykliä aikana

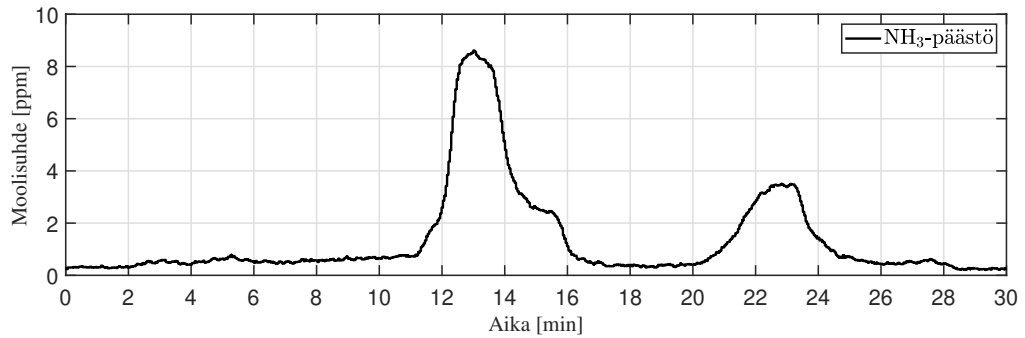
tiivisesta NO_x-päästöstä 0,59 g/kWh aiheutuu syklin alussa ennen urean syötön alkua ja urean syötön alettua päästöä kertyy 0,039 g/kWh. Kenttäsyklissä päästöä syntyy syklin ensimmäisen 4,5 minuutin aikana 0,144 g/kWh, kun taas loppu syklin aikana SCR:n ollessa toiminta-alueellaan päästöä syntyy vain 0,007 g/kWh. Tulos osoittaa kenttäsyklin olevan NO_x-päästön hallinnan kannalta suotuisa testisykli sen keskimääräisen tehon ollessa muihin sykleihin verrattuna pienempi. SCR:n lämpötila pysyy kuitenkin yli 300 °C asteen suurimman osan syklistä, mikä on riittävä lämpötila katalysaattorin konversiotehokkuuden ylläpitämiseksi.

SCR:n ja ammoniakkin hapetuskatalysaattorin jälkeinen ammoniakkipäästö testisykliä aikana on esitetty kuvassa 6.7. Yleisesti mittauksista on nähtävissä, että ammoniakkipitoisuus on suuren osan ajasta hyvin pieni sykliä aikana, sen keskiarvon ollessa alle 1,5 ppm jokaisen testisyklin osalta. Ammoniakkipäästöä syntyy testisykliä kohdissa, joissa SCR:n lämpötila on suurimmillaan. Tällöin katalysaattorin ammoniakkin varastointikapasiteetti on pieni ja ammoniakkia on varastoitunut myös katalysaattorin takaosaan. Varsinkin siirtyessä alhaisen lämpötilan toimintapisteestä korkean lämpötilan toimintapisteeseen katalysaattoriin varastoitunut suuri ammoniakkilataus desorboituu aiheuttaen ammoniakkipäästön siitä huolimatta, että ammoniakkin syöttösuhde on samanaikaisesti pieni. Ammoniakkipäästö ei kuitenkaan ylitä säädön suunnittelussa käytettyä ja tämän työn tavoitteeksi asetettua 10 ppm rajaa. Suurin mitattu hetkellinen ammoniakkipäästö on 8,61 ppm, joka syntyy RMC:n kuormannostotilanteen aikana. Kenttäsyklissä ammoniakkipäästöä ei synny juuri lainkaan katalysaattorin tasaisen ja muihin sykleihin verrattuna alemman lämpötilan johdosta.

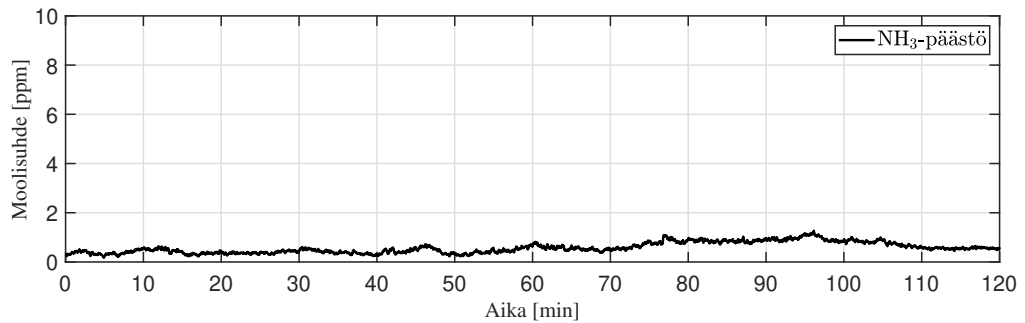
Kuormannostotilanteissa todellisella järjestelmällä mitattu ammoniakkipäästö on simuloititilanteeseen verrattuna suurempi. RMC:n 12 minuutin kohdalla tapahtuva kuormannosto vastaa kuvan 4.11 simuloitua tilannetta, vaikkakin RMC:ssä lopullinen lämpötila jää simulointia pienemmäksi kuormannoston päätteeksi. Siitä huolimatta mitatun ammoniakkipäästön suurin arvo on simuloitua suurempi. Tämä voi johtua joko katalysaattorin estimoitua suuremmasta ammoniakkilatauksesta tai simuloinnissa käytetyn ammoniakkin hapetuskatalysaattorin mallin epätarkkuudesta.



(a) NRTC



(b) RMC



(c) Kenttäsykli

Kuva 6.7. Ammoniakkipäästö ajettujen testisykliä aikana

NO_x-päästön mittaustuloksia tarkasteltaessa on otettava huomioon mitattavien pitoisuuksien todella matala taso. Käytetty NO_x-analysaattori kalibroitiin 0–1500 ppm mitta-alueelle, joten mittaus lähes nollatason pitoisuuksissa voi olla epäluotettava. Kuvan 6.6 mittaustuloksissa on nähtävissä merkittävää mittauskohinaa. Koska päästön absoluuttinen taso on pieni, saattavat mittauksen epävarmuudet vaikuttaa kumulatiivisesti laskettavaan päästökertoimeen merkittävästi.

7. YHTEENVETO

Tämän työn tavoitteena oli suunnitella säätöjärjestelmä työkoneen dieselmootorin SCR-järjestelmän urean ruiskutusmäärän ohjaamiseen erittäin matalan NO_x-päästötason saavuttamiseksi. NO_x-konversio ja ammoniakkipäästö ovat verrannollisia katalysaattoriin varastoituneen ammoniakin määrään eli ammoniakkilataukseen, joten se on järjestelmän hallinnan kannalta luonnollinen valinta säädettäväksi suureeksi. Hallinnan tavoitteet pyrittiin saavuttamaan esittämällä ammoniakkilatauksen asetusarvon määrittäminen optimointiongelmana, jolla etsittiin NO_x-konversion suhteen optimaalinen ammoniakkilataus. Myös suurin sallittu ammoniakkipäästö voitiin optimointiongelmassa ottaa huomioon eksplisiittisesti. Ammoniakkilatauksen hallintaan suunniteltiin vahvistusskeduloitu LQG-säädin. Ammoniakkilataus estimoitiin laajennetulla Kalman-suotimella, joka hyödynsi katalysaattorin keskelle sijoitetun ammoniakianturin mittausta takaisinkytkennässä.

Kehitetyn säätöjärjestelmän suorituskyky todennettiin moottorilaboratorioympäristössä tehdyillä mittauksilla. Yhteenveto testisykliä mittaustuloksista on esitetty taulukossa 7.1. Kuumakäynnistyksenä ajetuissa testisykleissä saavutetaan merkittävästi ehdotettua tulevaa päästörajaa 0,04 g/kWh matalampi päästökerroin. Kylmäkäynnistyksinä ajatun NRTC:n ja kenttäsyklin päästökerroin on merkittävästi suurempi. Niiden osalta on kuitenkin huomioitava, että merkittävä osa NO_x-päästöstä syntyy syklien alussa ennen kuin pakokaasun lämpötila on riittävän kuuma urean syöttämiselle. NRTC:n yhdistetty tulos on EPA:n painokertoimilla laskettuna pyörästettynä alaspäin tasan ehdotetun päästörajan suuruinen, kun taas EU:n painokertoimilla, jotka painottavat kylmäsykliä enemmän, tulos jää ehdotetun päästörajan yläpuolelle.

Taulukko 7.1. Yhteenveto mittaustuloksista

Sykli	EF _{NO_x} [g/kWh]	$\bar{\eta}_{NO_x}$ [%]	\bar{X}_{NH_3} [ppm]	$X_{NH_3,max}$ [ppm]
NRTC	0,011	99,87	1,26	7,20
NRTC (kylmäkäynnistys)	0,593	93,56	1,16	8,18
NRTC yhdistetty (EU)	0,069	-	-	-
NRTC yhdistetty (EPA)	0,040	-	-	-
RMC	0,016	99,86	1,33	8,61
Kenttäsykli	0,144	98,38	0,57	1,27

Mittaustulosten perusteella voidaan todeta suunnitellun säätöjärjestelmän täyttävän sille tässä työssä asetetut tavoitteet. NO_x -konversio kyetään ylläpitämään testisykliä aikana lähes täydellisenä katalysaattorin ollessa toiminta-alueellaan ilman liian suurta ammoniakkipäästöä. Ammoniakkipäästöä syntyy SCR:n lämpötilan ja pakokaasun massavirran ollessa suuria, hetkellisen ammoniakkipäästön ollessa suurin kuormannostotilanteissa. Ammoniakkipäästö kuitenkin pysyy kaikissa tilanteissa mitattujen testisykliä aikana tavoitteeksi asetetun 10 ppm rajan alapuolella, minkä lisäksi keskiarvoinen ammoniakkipäästö on hyvin pieni.

Kokonaisuudessaan SCR:n jälkeinen NO_x -pitoisuus on suurimman osan ajasta erittäin pieni, mitatun NO_x -pitoisuuden mediaanin kaikkien syklien aikana ollessa 0,6 ppm. Tämän perusteella voidaan tehdä johtopäätös, ettei katalysaattorin jälkeen sijoitettuun NO_x -anturiin perustuvan takaisinkytkennän käyttäminen säätöjärjestelmässä ole mahdollista. Järjestelmä todennäköisesti tulisi silti sisältämään katalysaattorin jälkeisen NO_x -anturin päästön monitorointia varten. Päästön monitoroinnissa tulisi ottaa huomioon ja mahdollisesti kompensoida anturin ristiherkkyys ammoniakille, koska ammoniakkipäästö aiheuttaisi suhteellisesti suuren virheen anturilla mitattuun NO_x -päästöön. Pienet mitattavat kaasupitoisuudet myös luovat uusia vaatimuksia käytetyille mittalaitteille järjestelmän kalibrointia ja päästömittauksia tehdessä. Koska mitattavat pitoisuudet ovat absoluuttiselta tasoltaan hyvin pieniä, voi mittalaitteen mittausvirhe aiheuttaa kumulatiivisesti suuren virheen laskettuun päästöön.

Katalysaattorin keskelle sijoitetun ammoniakianturi osoittautui potentiaalisesti ratkaisuksi SCR-järjestelmän takaisinkytkettyyn säätöön. Ammoniakkianturin tuomaa lisäarvoa säätöjärjestelmälle on haastavaa määrittää kvantitatiivisesti työssä tehtyjen mittausten tulosten perusteella. Takaisinkytkennällä on kuitenkin vahvoja kvalitatiivisesti määritettäviä hyötyjä. Takaisinkytkennällä saavutetaan järjestelmän suorituskyvyn robustisuus häiriöitä ja mallinnusvirheitä vastaan. Säätöjärjestelmä voitaisiin toteuttaa myös ilman ammoniakianturia estimoimalla katalysaattorin ammoniakkilataus ainoastaan katalysaattorin dynaamisen mallin avulla. Tällöin säätöjärjestelmä kuitenkin perustuisi täysin myötäkytkettyyn ohjaukseen, joka ei välttämättä ole tarpeeksi robusti suorituskyvyn takaamiseksi. Ammoniakkianturin hyötyä voitaisiin tarkastella teoreettisesti vertailemalla säädetyn suureen tasapainotilan variansseja myötäkytketyn ja suljetun säätöpiirin ohjauksen tapauksissa. Käytännön kokeissa vertailua voitaisiin tehdä tutkimalla järjestelmän häiriöiden vaimennuskykyä luomalla järjestelmään keinotekoinen häiriö.

Tässä työssä ammoniakianturin paikka katalysaattorin keskellä määräytyi saatavilla olleiden katalysaattorin kennojen mittojen mukaan. Ammoniakkianturin sijainnilla voitaisiin vaikuttaa sen vasteeseen anturin edessä olevan ammoniakkin varastointikapasiteetin muuttuessa sijainnin mukaan. Koska ammoniakki on varastoitunut katalysaattorin etureunaan sen lämpötilan ollessa alhainen, voitaisiin anturin sijoittamisella lähemmäs etureunaa varmistaa riittävä ammoniakkipitoisuustaso anturilla kaikissa toimintapisteissä.

SCR-järjestelmän komponentit olivat ammoniakianturia lukuunottamatta nykyistä Stage V -järjestelmää vastaavia. Mittaustulosten perusteella voidaan nykyisen urean syöttöjärjestelmän, katalysaattoriteknologian ja katalysaattoreiden mitoituksen olevan riittävä ehdotetun tulevaisuuden NO_x-päästörajan saavuttamiseksi SCR-järjestelmän ollessa toiminta-alueellaan, eli silloin kun pakokaasun lämpötila on riittävä. Katalysaattorin tilavuuden kasvattamisella olisi mahdollisesti saavutettavissa vielä parempi NO_x-konversio suurimpien pakokaasun massavirran toimintapisteissä, sekä pienempi ammoniakkipäästö suuremman ammoniakin varastointikapasiteetin ollessa käytettävissä.

Päästörajojen täyttämiseksi kylmäkäynnistykset ja matalan tehon ajosykli huomioon ottaessa täytyy päästöjen hallintaan käyttää myös muita, tämän työn rajauksen ulkopuolelle jätettyjä menetelmiä. EU:n painokertoimilla lasketun yhdistetyn NRTC päästökertoimen saamiseksi alle ehdotetun 0,04 g/kWh rajan tulisi kylmäsyklin päästön pienentyä noin 50 %. Mahdollisia keinoja kylmäkäynnistyksessä syntyvän päästön hallintaan ovat moottorin kalibrointimuutokset, pakokaasun lämmittäminen lisälaitteella ja/tai lisättävät pakokaasun jälkikäsitteilyjärjestelmät [5]. Moottorikalibroinnilla ja lisälaitteella voidaan kasvattaa pakokaasun lämpötilaa, jolloin jälkikäsitteilyjärjestelmä saavuttaa nopeammin toiminta-alueensa. Moottorikalibroinnilla voidaan myös vähentää moottorin tuottamaa NO_x-päästöä kylmäkäynnistyksessä. Yksi ehdotetuista jälkikäsitteilyjärjestelmä vaihtoehdoista on sijoittaa toinen urearuisku ja SCR-katalysaattori pakolinjan alkuun ennen muita katalysaattoreita, jolloin se saavuttaa toiminta-alueensa nopeammin sen edessä olevan pienemmän lämpökapasiteetin ansiosta. Joka tapauksessa erittäin matalan NO_x-päästön saavuttamiseksi vaaditaan moottorin ja jälkikäsitteilyjärjestelmän integroitua hallintaa.

Jatkotutkimuksena tulisi tutkia kehitetyn säätöjärjestelmän robustisuutta katalysaattorin ikäänymisen aiheuttamille järjestelmän parametrien muuttumiselle. Tässä työssä mittaukset suoritettiin vain yhden ikäisillä, termalisesti ikäytetyillä katalysaattorin kennoilla. Suorituskyvyn muuttumista koko järjestelmän käyttöiän ajalla tulisi tutkia suorittamalla mittaukset monen ikäisillä kennoilla, joiden ikäytys on suoritettu dieselmoottorilla. Ikäänymisen vaikutus katalysaattorin mallin parametreihin tulisi selvittää ikäänymisen järjestelmän simuloinnin ja analysoimisen mahdollistamiseksi. Lisäksi voitaisiin tutkia adaptoituvan säätöjärjestelmän kehittämistä, jossa säädin mukautuu järjestelmän muuttuvien parametrien mukaan suorituskyvyn varmistamiseksi koko elinkaaren ajan.

LÄHTEET

- [1] DieselNet. *Emission Standards: Europe: Nonroad Engines*. URL: <https://www.dieselnet.com/standards/eu/nonroad.php> (viitattu 26.01.2022).
- [2] California Air Resource Board. *Potential Amendments to the Diesel Engine Off-Road Emission Standards: Tier 5 Criteria Pollutants and CO2 Standards*. URL: <https://ww2.arb.ca.gov/our-work/programs/tier5> (viitattu 09.03.2022).
- [3] Skaf, Z., Aliyev, T., Shead, L. ja Steffen, T. The state of the art in selective catalytic reduction control. *SAE Technical Papers* 1 (2014). DOI: 10.4271/2014-01-1533.
- [4] McKinley, T. L. ja Alleyne, A. G. Adaptive model predictive control of an SCR catalytic converter system for automotive applications. *IEEE Transactions on Control Systems Technology* 20 (2012), s. 1533–1547. DOI: 10.1109/TCST.2011.2169494.
- [5] Sharp, C., Webb, C. C., Neely, G., Sarlashkar, J. V., Rengarajan, S. B., Yoon, S., Henry, C. ja Zavala, B. Achieving Ultra Low NOX Emissions Levels with a 2017 Heavy-Duty On-Highway TC Diesel Engine and an Advanced Technology Emissions System - NOX Management Strategies. *SAE International Journal of Engines* 10.4 (2017). DOI: 10.4271/2017-01-0958.
- [6] Nova, I. ja Tronconi, E. *Urea-SCR Technology for DeNOx after Treatment of Diesel Exhausts*. New York: Springer, 2014.
- [7] Weeks, C. L., Ibeling, D. R., Han, S., Ludwig, L. ja Ayyappan, P. Analytical Investigation of Urea Deposits in SCR System. *SAE International Journal of Engines* 8.3 (2015). DOI: 10.4271/2015-01-1037.
- [8] DieselNet. *Technology Guide: Urea Dosing and Injection Systems*. URL: https://www.dieselnet.com/tech/cat_scr_diesel_urea_dosing.php (viitattu 05.04.2022).
- [9] Song, X., Naber, J. D. ja Johnson, J. H. A study of the effects of NH3 maldistribution on a urea-selective catalytic reduction system. *International Journal of Engine Research* 16.2 (2015), s. 213–222. DOI: 10.1177/1468087414532462.
- [10] Gieshoff, J., Schäfer-Sindlinger, A., Spurk, P. C., Van Den Tillaart, J. A. ja Garr, G. Improved SCR systems for heavy duty applications. *SAE Technical Papers* 2000.724 (2000). DOI: 10.4271/2000-01-0189.
- [11] Koebel, M., Madia, G. ja Elsener, M. Selective catalytic reduction of NO and NO2 at low temperatures. *Catalysis Today* 73.3-4 (2002), s. 239–247. DOI: 10.1016/S0920-5861(02)00006-8.

- [12] Schär, C. M., Onder, C. H. ja Geering, H. P. Control of an SCR catalytic converter system for a mobile heavy-duty application. *IEEE Transactions on Control Systems Technology* 14.4 (2006), s. 641–653. DOI: 10.1109/TCST.2006.876634.
- [13] Kamasamudram, K., Currier, N. W., Chen, X. ja Yezerets, A. Overview of the practically important behaviors of zeolite-based urea-SCR catalysts, using compact experimental protocol. *Catalysis Today* 151.3-4 (2010), s. 212–222. DOI: 10.1016/j.cattod.2010.03.055. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cattod.2010.03.055>.
- [14] Zhao, Y., Hu, J., Hua, L., Shuai, S. ja Wang, J. Ammonia storage and slip in a urea selective catalytic reduction catalyst under steady and transient conditions. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 50.21 (2011), s. 11863–11871. DOI: 10.1021/ie201045w.
- [15] DieselNet. *Emission Standards: USA: Nonroad Diesel Engines*. URL: <https://www.dieselnet.com/standards/us/nonroad.php> (viitattu 26.01.2022).
- [16] Scheuer, A., Hauptmann, W., Drochner, A., Gieshoff, J., Vogel, H. ja Votsmeier, M. Dual layer automotive ammonia oxidation catalysts: Experiments and computer simulation. *Applied Catalysis B: Environmental* 111-112 (2012), s. 445–455. DOI: 10.1016/j.apcatb.2011.10.032.
- [17] Colombo, M., Nova, I., Tronconi, E., Schmeißer, V., Bandl-Konrad, B. ja Zimmermann, L. R. Experimental and modeling study of a dual-layer (SCR+PGM) NH₃ slip monolith catalyst (ASC) for automotive SCR after treatment systems. Part 2. Validation of PGM kinetics and modeling of the dual-layer ASC monolith. *Applied Catalysis B: Environmental* 142-143 (2013), s. 337–343. DOI: 10.1016/j.apcatb.2013.05.032. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apcatb.2013.05.032>.
- [18] Willems, F., Cloudt, R., Van Den Eijnden, E., Van Genderen, M., Verbeek, R., De Jager, B., Boomsma, W. ja Van Den Heuvel, I. Is closed-loop SCR control required to meet future emission targets? *SAE Technical Papers* x (2007). DOI: 10.4271/2007-01-1574.
- [19] Kwak, J. H., Tran, D., Burton, S. D., Szanyi, J., Lee, J. H. ja Peden, C. H. Effects of hydrothermal aging on NH₃-SCR reaction over Cu/zeolites. *Journal of Catalysis* 287 (2012), s. 203–209. DOI: 10.1016/j.jcat.2011.12.025.
- [20] Dahlin, S., Lantto, C., Englund, J., Westerberg, B., Regali, F., Skoglundh, M. ja Pettersson, L. J. Chemical aging of Cu-SSZ-13 SCR catalysts for heavy-duty vehicles – Influence of sulfur dioxide. *Catalysis Today* 320 (2019), s. 72–83. DOI: 10.1016/j.cattod.2018.01.035.
- [21] Wang, D. Y., Yao, S., Shost, M., Yoo, J. H., Cabush, D., Racine, D., Cloudt, R. ja Willems, F. Ammonia sensor for closed-loop SCR control. *SAE Technical Papers* (2008). DOI: 10.4271/2008-01-0919.

- [22] Yuan, X., Liu, H. ja Gao, Y. Diesel Engine SCR Control: Current Development and Future Challenges. *Emission Control Science and Technology* 1.2 (2015), s. 121–133. DOI: 10.1007/s40825-015-0013-z.
- [23] Childress, B. ja Chen, P. A Decomposition Algorithm for a Class of Nonlinear Dynamic Systems with Cross-sensitive Output Measurement. *Proceedings of the IEEE Conference on Decision and Control 2018-Decem.Cdc* (2019), s. 662–667. DOI: 10.1109/CDC.2018.8619701.
- [24] Frobert, A., Raux, S., Creff, Y. ja Jeudy, E. About cross-sensitivities of NO_x sensors in SCR operation. *SAE Technical Papers* 2 (2013). DOI: 10.4271/2013-01-1512.
- [25] Pla, B., Piqueras, P., Bares, P. ja Aronis, A. NO_x sensor cross sensitivity model and simultaneous prediction of NO_x and NO₃ slip from automotive catalytic converters under real driving conditions. *International Journal of Engine Research* 22.10 (2021), s. 3209–3218. DOI: 10.1177/1468087420966406.
- [26] Bonfils, A., Creff, Y., Lepreux, O. ja Petit, N. Closed-loop control of a SCR system using a NO_x sensor cross-sensitive to NH₃. *Journal of Process Control* 24.2 (2014), s. 368–378. DOI: 10.1016/j.jprocont.2013.08.010. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jprocont.2013.08.010>.
- [27] Kubinski, D. J. ja Visser, J. H. Sensor and method for determining the ammonia loading of a zeolite SCR catalyst. *Sensors and Actuators, B: Chemical* 130.1 (2008), s. 425–429. DOI: 10.1016/j.snb.2007.09.007.
- [28] Ning, J. ja Yan, F. Nonlinear Disturbance Observer design for estimation of ammonia storage ratio in selected catalytic reduction systems. 2015, s. 495–500. DOI: 10.1109/ACC.2015.7170784.
- [29] Zhang, H., Wang, J. ja Wang, Y. Y. Nonlinear Observer Design of Diesel Engine Selective Catalytic Reduction Systems with NO_x Sensor Measurements. *IEEE/ASME Transactions on Mechatronics* 20 (4 2015), s. 1585–1594. DOI: 10.1109/TMECH.2014.2355039.
- [30] Hsieh, M. F. ja Wang, J. An extended Kalman filter for ammonia coverage ratio and capacity estimations in the application of Diesel engine SCR control and on-board diagnosis. *Proceedings of the 2010 American Control Conference, ACC 2010* (2010), s. 5874–5879. DOI: 10.1109/acc.2010.5530516.
- [31] Zhou, G., Jørgensen, J. B., Duwig, C. ja Huusom, J. K. State estimation in the automotive SCR DeNO_x process. *IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline)* 8 (2012), s. 501–506. DOI: 10.3182/20120710-4-SG-2026.00133.
- [32] Surenahalli, H. S., Parker, G. ja Johnson, J. Extended kalman filter estimator for NH₃ storage, NO, NO₂ and NH₃ estimation in a SCR. *SAE Technical Papers* 2.2 (2013). DOI: 10.4271/2013-01-1581.
- [33] Sun, K., Ji, F., Yan, X., Jiang, K. ja Yang, S. A particle filter for ammonia coverage ratio and input simultaneous estimations in Diesel-engine SCR system. *PLoS ONE* 13 (2 2018). DOI: 10.1371/journal.pone.0192217.

- [34] Herman, A., Wu, M. C., Cabush, D. ja Shost, M. Model based control of SCR dosing and OBD strategies with feedback from NH₃ sensors. *SAE Technical Papers* 2.1 (2009), s. 375–385. DOI: 10.4271/2009-01-0911.
- [35] Hsieh, M. F. ja Wang, J. A two-cell backstepping-based control strategy for diesel engine selective catalytic reduction systems. *IEEE Transactions on Control Systems Technology* 19.6 (2011), s. 1504–1515. DOI: 10.1109/TCST.2010.2098477.
- [36] Hsieh, M. F. ja Wang, J. Adaptive and efficient ammonia storage distribution control for a two-catalyst selective catalytic reduction system. *Journal of Dynamic Systems, Measurement and Control, Transactions of the ASME* 134.1 (2012). DOI: 10.1115/1.4005372.
- [37] Rao, S., Sarlashkar, J., Rengarajan, S., Sharp, C. ja Neely, G. A Controls Overview on Achieving Ultra-Low NO_x. *SAE Technical Papers* (2020). DOI: 10.4271/2020-01-1404.
- [38] Ljung, L. ja Glad, T. *Modeling of Dynamic Systems*. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall, 1994.
- [39] Gundlapally, S. R., Papadimitriou, I., Wahiduzzaman, S. ja Gu, T. Development of ECU Capable Grey-Box Models from Detailed Models — Application to a SCR Reactor. *Emission Control Science and Technology* (2016), s. 124–136. DOI: 10.1007/s40825-016-0039-x. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s40825-016-0039-x>.
- [40] Hsieh, M. F. ja Wang, J. Development and experimental studies of a control-oriented SCR model for a two-catalyst urea-SCR system. *Control Engineering Practice* 19.4 (2011), s. 409–422. DOI: 10.1016/j.conengprac.2011.01.004. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.conengprac.2011.01.004>.
- [41] Figura, J., Kihás, D., Pekar, J., Uchanski, M., Khaled, N. ja Srinivasan, S. Automotive Selective Catalytic Reduction System Model-Based Estimators for On-ECU Implementation: A Brief Overview. *SAE Technical Papers* (2016). DOI: 10.4271/2016-01-0972.
- [42] Green, D. W., Southard, M. Z. ja Perry, R. H. *Perry's chemical engineers' handbook*. eng. Toim. D. W. Green, M. Z. Southard ja R. H. Perry. 9th ed. New York, N.Y: McGraw-Hill Education, 2019.
- [43] Nova, I., Lietti, L., Tronconi, E. ja Forzatti, P. Transient response method applied to the kinetic analysis of the DeNO_x-SCR reaction. *Chemical Engineering Science* 56.4 (2001), s. 1229–1237. DOI: 10.1016/S0009-2509(00)00344-4.
- [44] Olsson, L., Wijayanti, K., Leistner, K., Kumar, A., Joshi, S. Y., Kamasamudram, K., Currier, N. W. ja Yezerets, A. A multi-site kinetic model for NH₃-SCR over Cu/SSZ-13. *Applied Catalysis B, Environmental* 174-175 (2015), s. 212–224. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.11.001>.
- [45] Glad, T. ja Ljung, L. *Control Theory: Multivariable and Nonlinear Methods*. New York: Taylor & Francis, 2000.

- [46] Franklin, G. F., Powell, D. J. ja Workman, M. *Digital Control of Dynamic Systems*. 3. painos. Half Moon Bay, California: Ellis-Kagle Press, 1998.
- [47] Åström, K. J. ja Wittenmark, B. *Computer Controlled Systems: Theory and Design*. 3. painos. Upper Saddle River, New Jersey: Prentice Hall, 1997.
- [48] Shaked, U. Guaranteed Stability Margins for the Discrete-Time Linear Quadratic Optimal Regulator. *IEEE Transactions on Automatic Control* 31 (1986), s. 162–165. DOI: 10.1109/TAC.1986.1104222.
- [49] Åström, K. J. *Introduction to Stochastic Control Theory*. New York: Academic Press, 1970.
- [50] Doyle, J. C. Guaranteed Margins for LQG Regulators. *IEEE Transactions on Automatic Control* 23 (1978), s. 756–757.
- [51] Åström, K. J. ja Wittenmark, B. *Adaptive Control*. Mineola, New York: Dover Publications, 1995.
- [52] Rugh, W. J. ja Shamma, J. S. Research on gain scheduling. *Automatica* 36 (2000), s. 1401–1425.
- [53] Särkkä, S. *Bayesian filtering and smoothing*. 2010. DOI: 10.1017/CB09781139344203. URL: https://users.aalto.fi/~ssarkka/pub/cup_book_online_20131111.pdf.
- [54] Mathworks Inc. *MATLAB Documentation: fmincon*. URL: <https://www.se.mathworks.com/help/optim/ug/fmincon.html> (viitattu 24.03.2022).
- [55] Grewal, M. S. ja Andrews, A. P. *Kalman Filtering: Theory and Practice*. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall, 1993.
- [56] Åström, K. J. ja Rundqwist, L. Integrator Windup and How to Avoid It. *American Control Conference* (1989), s. 1693–1698.
- [57] DieselNet. *How Emissions Are Regulated*. URL: <https://www.dieselnet.com/standards/intro.html> (viitattu 07.04.2022).
- [58] DieselNet. *Emission Test Cycles: NRTC*. URL: <https://www.dieselnet.com/standards/cycles/nrtc.php> (viitattu 07.04.2022).

LIITE A: KATALYSAATTORIN LINEARISOIDUN TILAMALLIN MATRIISIT

Tässä liitteessä esitetään katalysaattorin jatkuva-aikaisen tilamallin matriisien johto. Sarjaankytketään N kappaletta CSTR-soluja, jolloin solun n sisäänmenoksi sijoitetaan

$$\begin{aligned} u_n(t) &= y_{n-1}(t) \\ &= C_{n-1}x_{n-1}(t) + D_{n-1}u_{n-1}(t) \end{aligned} \tag{A.1}$$

missä $2 \leq n \leq N$. Kahden CSTR-solun sarjaankytkennäksi saadaan

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= A_1x_1(t) + B_1u_1(t) \\ \dot{x}_2(t) &= A_2x_2(t) + B_2y_1(t) \\ &= A_2x_2(t) + B_2(C_1x_1(t) + D_1u_1(t)) \\ y_2(t) &= C_2x_2(t) + D_2(C_1x_1(t) + D_1u_1(t)) \end{aligned} \tag{A.2}$$

Jatkamalla sarjaankytkentää rekursiivisesti N :lle solulle saadaan muodostettua koko katalysaattorin tilamalliksi

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}(t) &= \mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}u_1(t) \\ y_N &= \mathbf{C}\mathbf{x}(t) + Du_1(t) \end{aligned} \tag{A.3}$$

missä

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ B_2 C_1 & A_2 & 0 & \dots & 0 \\ B_3 D_2 C_1 & B_3 C_2 & A_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ B_N D_{N-1} \dots D_2 C_1 & B_N D_{N-1} \dots D_3 C_2 & B_N D_{N-1} \dots D_4 C_3 & \dots & A_N \end{bmatrix} \quad (\text{A.4})$$

$$B = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 D_1 \\ B_3 D_2 D_1 \\ \vdots \\ B_N D_{N-1} \dots D_1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$C = \begin{bmatrix} D_N D_{N-1} \dots D_2 C_1 & D_N D_{N-1} \dots D_3 C_2 & \dots & C_N \end{bmatrix} \quad (\text{A.6})$$

$$D = \begin{bmatrix} D_N D_{N-1} \dots D_2 D_1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_N \end{bmatrix}^T \quad (\text{A.8})$$

Valitsemalla ohjausmuuttujaksi $u(t) = \frac{u_1(t)}{c_{NO,us} + c_{NO_2,us}}$ ja lisäämällä satunnaishäiriöt $w(t)$ ja $v(t)$ saadaan tilamalliksi

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}(t) &= A\mathbf{x}(t) + B_u u(t) + B_w w(t) \\ m(t) &= C_m \mathbf{x}(t) + D_m u(t) + v(t) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

missä tilamatriisi on lohkoalakolmiomatriisi

$$A \in \mathbb{R}^{N \times N}, \quad (\text{A.10})$$

ohjausmatriisi on

$$B_u = (c_{NO,us} + c_{NO_2,us}) \cdot B \in \mathbb{R}^{N \times 1}, \quad (\text{A.11})$$

häiriömatriisi on

$$B_w = B \in \mathbb{R}^{N \times 1}, \quad (\text{A.12})$$

mittausmatriisi on

$$C_m = C \in \mathbb{R}^{1 \times N}, \quad (\text{A.13})$$

ja suoravaikutusmatriisi on

$$D_m = D \in \mathbb{R}^{1 \times 1}. \quad (\text{A.14})$$

LIITE B: SÄÄTIMEN TILAMALLI

Tässä liitteessä johdetaan työssä suunnitellun säätimen tilamalli avoimen- ja suljetun järjestelmän tilamallien luomista varten. Luodaan ensin tilamalli aikainvariantille Kalman-suotimelle

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k} = \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + L(m_k - [C_m \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + D_m u_k]), \quad (\text{B.1})$$

missä

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} = \Phi \hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1} + \Gamma u_k. \quad (\text{B.2})$$

Sijoittamalla päivitetty estimaatti B.1 predikoidun esimaatin differenssiyhtälöön B.2 ja siirtämällä aikaindeksijä yhden aika-askeleen eteenpäin saadaan

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}_{k+1|k} &= \Phi(\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + L(m_k - [C_m \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + D_m u_k])) + \Gamma u_k \\ &= \Phi \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + \Phi L m_k - \Phi L C_m \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} - \Phi L D_m u_k + \Gamma u_k \\ &= \underbrace{(\Phi - \Phi L C_m)}_{\Phi_{est}} \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + \underbrace{(\Gamma - \Phi L D_m)}_{\Gamma_{est,1}} u_k + \underbrace{\Phi L}_{\Gamma_{est,2}} m_k \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Päivitetynksi estimaatiksi saadaan

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}_{k|k} &= \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + L(m_k - [C_m \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + D_m u_k]) \\ &= \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + L m_k - L C_m \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} - L D_m u_k \\ &= \underbrace{(I - L C_m)}_{C_{est}} \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + \underbrace{(-L D_m)}_{D_{est,1}} u_k + \underbrace{L}_{D_{est,2}} m_k \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Valitsemalla prediktoitu estimaatti $\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}$ Kalman-suotimen tilaksi, voidaan Kalman-suodin esittää tilamallina

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}_{k+1|k} &= \Phi_{est} \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + \Gamma_{est,1} u_k + \Gamma_{est,2} m_k \\ \hat{\mathbf{x}}_{k|k} &= C_{est} \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + D_{est,1} u_k + D_{est,2} m_k \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Asetetaan tilan ja säädettävän suureen asetusarvoksi nolla, jolloin käytetty säätölaki on

$$u_k = -K \hat{\mathbf{x}}_{k|k} + k_i z_k, \quad (\text{B.6})$$

missä integraattorin tila toteuttaa differenssiyhtälön

$$z_{k+1} = z_k - C_y \hat{\mathbf{x}}_{k|k}. \quad (\text{B.7})$$

Sijoitetaan päivitetty estimaatti B.4 säätölakiin B.6, jolloin saadaan:

$$\begin{aligned} u_k &= -K(C_{est} \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + D_{est,1} u_k + D_{est,2} m_k) + k_i z_k \\ &= -K C_{est} \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} - K D_{est,1} u_k + k_i z_k - K D_{est,2} m_k, \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

josta ratkaisemalla ohjaus u_k saadaan:

$$u_k = -K C_{est} M^{-1} \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + k_i M^{-1} z_k - K D_{est,2} M^{-1} m_k, \quad (\text{B.9})$$

missä $M = 1 + K D_{est,1} \neq 0$. Sijoittamalla säätölaki B.9 prediktoidun tilaestimaatin tiladifferenssiyhtälöön B.3 ja integraattorin tiladifferenssiyhtälöön B.7 sekä ryhmittelemällä termit saadaan:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}_{k+1|k} &= (\Phi_{est} - \Gamma_{est,1} K C_{est} M^{-1}) \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + \Gamma_{est,1} k_i M^{-1} z_k \\ &\quad + (\Gamma_{est,2} - \Gamma_{est,1} K D_{est,2} M^{-1}) m_k \\ z_{k+1} &= (C_y D_{est,1} K C_{est} M^{-1} - C_y C_{est}) \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + (1 - C_y D_{est,1} k_i M^{-1}) z_k \\ &\quad + (C_y D_{est,1} K D_{est,2} M^{-1} - C_y D_{est,2}) m_k. \\ u_k &= -K C_{est} M^{-1} \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + k_i M^{-1} z_k - K D_{est,2} M^{-1} m_k \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Merkitään säätimen tilaa $\mathbf{x}_c = [\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}^T \quad z_k]^T$. Säätimelle voidaan muodostaa tilamalli, jonka sisäänmenona on mittaus m_k ja ulostulona ohjaus u_k . Tilamalli on:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{c,k+1} &= \Phi_c \mathbf{x}_{c,k} + \Gamma_c m_k \\ u_k &= C_c \mathbf{x}_{c,k} + D_c m_k \end{aligned}, \quad (\text{B.11})$$

missä

$$\begin{aligned} \Phi_c &= \begin{bmatrix} \Phi_{est} - \Gamma_{est,1} K C_{est} M^{-1} & \Gamma_{est,1} k_i M^{-1} \\ C_y D_{est,1} K C_{est} M^{-1} - C_y C_{est} & 1 - C_y D_{est,1} k_i M^{-1} \end{bmatrix} \\ \Gamma_c &= \begin{bmatrix} \Gamma_{est,2} - \Gamma_{est,1} K D_{est,2} M^{-1} \\ C_y D_{est,1} K D_{est,2} M^{-1} - C_y D_{est,2} \end{bmatrix} \\ C_c &= \begin{bmatrix} -K C_{est} M^{-1} & k_i M^{-1} \end{bmatrix} \\ D_c &= -K D_{est,2} M^{-1} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$