

## Modelado de un Sistema de Control de pH

Enrique Castelán Rodríguez, Brian Manuel González,  
Universidad Autonoma de Tlaxcala  
Av. Juárez 908-1 Col. Centro Apizaco, Tlaxcala Código-Postal 90300, México  
ecastelan@prodigy.net.mx  
Tel: (241) 4182288, Fax: (241) 4130014

Jaime Muñoz Arteaga  
Instituto Nacional de Astrofísica Óptica y Electrónica de Puebla (INAOEP)

### RESUMEN

Se presentan algunas técnicas para el diseño y validación de un sistema de control de pH. El modelo no lineal obtenido a través de la técnica de Invariantes de Reacción es usado para proponer un primer método de control: Control Por Linealización, mientras que adicionalmente se emplean las técnicas de la lógica difusa para crear un segundo método: Control Difuso adaptable. Para las simulaciones se desarrolla un modelo que considera la interacción de un ácido débil con una base que es controlada. Para el control de pH se emplean ambos controladores, mostrándose las pruebas de seguimiento y regulación.

**Palabras Clave:** pH, Control Difuso Adaptable, Control por Linealización, Mecanismo de Adaptación.

### 1. INTRODUCCION

En muchas aplicaciones industriales, el agua se utiliza en grandes cantidades para fines de enfriamiento, mezcla, dilución, lavado y funciones tales como el control de humedad. En éstas aplicaciones, la acidez y la alcalinidad de la solución tienen una gran importancia para el control de los procesos. La determinación de la acidez o alcalinidad, se conoce con el nombre de medición del pH. La medición propiamente dicha se hace en relación con la concentración de iones de hidrógeno e hidroxilo. En los tratamientos de aguas de desecho, la neutralización es un tema de importancia debido a la gran cantidad de componentes ácidos que pueden estar presentes. Típicamente, la neutralización consiste en el aumento o disminución de los niveles de pH añadiendo uno o más químicos alcalinos para mantener el pH en rangos aceptables. Así, la problemática planteada en éste proyecto consiste en asegurar el control de un sistema de neutralización de pH a través de la aplicación de dos estructuras de control. Se analizan las condiciones más comunes de este tipo de procesos, de modo que se logra una propuesta de laboratorio, y brinda un buen banco de trabajo para la prueba de nuevas estrategias de control.

### 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Los sistemas de pH han sido reconocidos como uno de los problemas SISO más difíciles en el área del control de procesos, debido a lo siguiente:

- La respuesta del pH a la adición de reactivos (variable manipulada) es altamente no lineal. La respuesta a la misma cantidad de base (ó ácido) puede diferir demasiado de un sistema a otro y de un pH a otro.
- La característica "no lineal" se debe a un estado interno representado por la concentración de iones de hidrógeno  $[H^+]$ , los cuáles no pueden ser directamente medidos [2].
- La relación logarítmica ( $pH = -\log_{10} [H^+]$ ) hace al proceso muy sensible a pequeños cambios en la vecindad del punto de neutralización. Esto es mostrado por una pendiente casi infinita en el  $pH = 7$  de la curva característica del proceso [4].
- Es difícil derivar e identificar un modelo matemático adecuado para el proceso de pH, porque pequeñas cantidades de elementos extraños con capacidad de ser Buffers cambian la dinámica del proceso.
- El tiempo muerto del proceso es variable, dependiendo de la variación en el volumen, el flujo de entrada y la velocidad del mezclado.
- La característica de Buffer es variable. Cuando la ganancia es pequeña (alto contenido de Buffer), la respuesta del pH en lazo cerrado puede ser lenta, mientras que para altas ganancias (bajo o nulo contenido de Buffer), la respuesta del pH en lazo cerrado puede ser inestable[2].

Una comparación directa para decidir cuál estrategia de control es mejor, resulta difícil debido a los diferentes sistemas químicos, niveles de concentración y equipo empleado en el proceso. Independientemente de las diferentes estrategias que se han usado, el hecho es que el problema del control de pH no ha sido resuelto perfectamente.

### 3. PROPUESTA CONCEPTUAL

Se parte de una modelación adecuada del fenómeno, para arribar a un grupo de formulaciones matemáticas que constituyen un modelo bastante aproximado al comportamiento real del proceso. Mediante simulaciones se comprueba la validez del modelo y la aplicación de dos tipos de controladores: uno obtenido mediante una técnica de linealización, en el cual se aplican estrategias de optimización tales como la acción integral y un sistema del tipo adaptable. El otro, un controlador difuso adaptable cuyo desarrollo para el control de sistemas de pH se basa en técnicas de inteligencia artificial (AI). Cuando se desea usar el sistema de inferencia difuso en control se debe poseer una salida convencional, por lo cual se hace uso de un método de desdifusificación (mapeo inverso difuso) para obtener la mejor representación que proporciona el conjunto difuso. Cuando el sistema de inferencia difuso tiene sus entradas y salidas convencionales, se realiza un mapeo no lineal de su espacio de entrada a su espacio de salida. El antecedente y la consecuencia de las reglas difusas especifica una región difusa de los espacios de entrada y salida [5].

Ambos controles constituyen un punto de referencia para comparar el desempeño de otros controladores.

### 4. DESCRIPCION DEL SISTEMA

En éste documento se usa el método de *invariantes de reacción* el cual es una de las más completas descripciones para sistemas de pH, enfocado al modelado de ciertos procesos ácido-base.

Los *invariantes de reacción* son cantidades de que toman los mismos valores antes, durante y después de una reacción. Se identifica un grupo de invariantes de reacción que son transformaciones lineales de los números de los moles de las especies.

El concepto de *invariantes de reacción*, bien definido por Aris (1965), es el resultado de una transformación natural de las variables de estado de un sistema químico. Las variables de estado (concentraciones de especies) son transformadas en un grupo de variables que dependen de las reacciones químicas (Variantes de la Reacción) y en otro grupo, las que son independientes de las reacciones (Invariantes de la Reacción) [3].

Los *invariantes de reacción* tienen su origen en leyes básicas tales como la carga atómica y la conservación de la energía, éste método fue generalizado por Waller y Mäkilä (1980) así como Gustafsson y Waller (1983) para sistemas con un número arbitrario de ácidos y bases [4].

Tomando éste antecedente, el equilibrio químico para nuestro caso puede modelarse introduciendo dos *Invariantes de Reacción* por cada flujo entrante.

Estos invariantes están definidos por las siguientes ecuaciones:

$$W_{ai} = [H^+]_i - [OH^-]_i - [HCO_3^-]_i - 2[CO_3^{2-}]_i \quad (1)$$

$$W_{bi} = [H_2CO_3]_i + [HCO_3^-]_i + [CO_3^{2-}]_i \quad (2)$$

Donde

i = 1 es la solución ácida

i = 2 es el buffer

i = 3 es la solución base

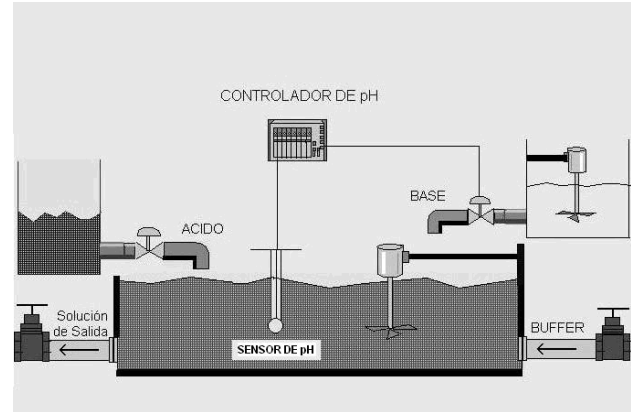


Fig. 1. Sistema de neutralización de pH

Mediante un balance de masa, se obtienen las ecuaciones diferenciales (3) y (4) que describen el comportamiento de los *Invariantes de Reacción* de la solución de salida:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = \frac{q_1}{v}(W_{a1} - x_1) + \frac{1}{v}(W_{a2} - x_1)d + \frac{1}{v}(W_{a3} - x_1)u \\ \dot{x}_2 = \frac{q_1}{v}(W_{b1} - x_2) + \frac{1}{v}(W_{b2} - x_2)d + \frac{1}{v}(W_{b3} - x_2)u \end{cases} \quad (3,4)$$

La Ec. (5) es la ecuación de salida:

$$c(x, y) = x_1 + a(y)x_2 + b(y) \quad (5)$$

Donde:

$x = [x_1 \ x_2]^T = [W_{a4} \ W_{b4}]^T$  (vector de estados)

$q_1$  = Flujo de la solución ácida (constante)

$d$  = Flujo del buffer (perturbación)

$u$  = Flujo de la solución base (entrada de control)

$y$  = pH (variable de salida)

$v$  = volumen (Invariante de Reacción Conocido)

$W_{ai}, W_{bi}, i=1,2,3$  (Invariantes de Reacción conocidos)

El modelo matemático puede ser representado mediante la ecuación (6) como punto de partida [4]:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f(x) + g(x)u + p(x)d \\ C(x, y) &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Para estimar el parámetro  $d$  (perturbación ó flujo del buffer) el cual no se puede medir, se debe construir un observador no lineal basándose en la entrada  $u$  y el estado  $x$ , el cual deberá permitir la estimación de estados y

parámetros [3]. Posteriormente se realizan algunas consideraciones sobre la derivada temporal de la relación  $c(x,y)=0$ , (puesto que la salida no está dada como una función del estado), con el objeto de deducir que *el Grado Relativo del Sistema es igual a uno* dado que la derivada del error depende directamente de la entrada.

**4.1. Control por Linealización**

Consideramos sistemas no lineales afines en la *entrada de control*, es decir, de la forma

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f(x) + g(x)u, \\ y &= h(x), \end{aligned} \tag{7}$$

y planteamos qué condiciones se necesitan para que exista una *realimentación de estados*

$$u = \alpha(x) + \beta(x)v \tag{8}$$

y un cambio de variables que transformen al sistema no lineal a una *forma lineal equivalente*.

$$z = T(x) \tag{10}$$

El objetivo es desarrollar un control por linealización para obtener un control  $u$  que aplicado al sistema no lineal lo transforme a una forma lineal donde se puede realizar el estudio de estabilidad con los métodos tradicionales para sistemas lineales. El resultado es la ecuación (10)

$$u_{lx} = - \left[ \frac{\frac{\partial c(x, e_y)}{\partial x} (f(x) + p(x)d) + \frac{\partial c(x, e_y)}{\partial e_y} v}{\frac{\partial c(x, e_y)}{\partial x} g(x)} \right] \tag{10}$$

con  $v = K_1 e_y, K_1 < 0$

Al tener la señal de control por linealización, lo único que debemos procurar es ajustar el parámetro de ganancia  $K_1$  tal que nos permita estabilizar el sistema. Al realizar el cálculo de la dinámica de los ceros encontraremos el rango en que ésta es asintóticamente estable, por lo tanto el sistema será *mínima fase* en dicho rango.

Con la linealización entrada - estado, la ecuación de estado se linealiza completamente y el problema de estabilización del sistema no lineal se transforma en un problema de estabilización de un sistema lineal controlable. Después de esto, en la Ec. (11) se propone agregar una *acción integral* al esquema de linealización exacta para lograr regulación de la salida en forma robusta.

$$u = \alpha(x, e_y) + \beta(x, e_y)v \quad \text{donde} \begin{cases} v = K_1 e_y + K_2 \sigma \\ \dot{\sigma} = e_y \end{cases} \tag{11}$$

Así, para que el sistema sea asintóticamente estable, el objetivo del control se logra porque se integra el error  $e_y = y - yr$  y además el sistema encontrado es asintóticamente estable. La Ec. (12) muestra el control adaptativo resultante:

$$ua = \alpha(x, e_y) + \beta(x, e_y)[v - W(x, e_y)ed]$$

donde:

$$W(x, e_y) = \frac{\frac{\partial c}{\partial x} p(x)}{\frac{\partial c}{\partial e_y}} \quad \text{y} \quad ed = d - \hat{d} \tag{12}$$

Para calcular la ley de adaptación del sistema de tal manera que todas las señales del sistema a lazo cerrado estén acotadas y se logre que la salida  $e_y$  (error) tienda asintóticamente a cero realizamos un estudio de estabilidad mediante la función de Lyapunov.

**4.2. Control Difuso**

Para el diseño de un controlador PI difuso se debe escoger de manera apropiada las señales de entradas (estados del proceso) y salidas del controlador, conjuntamente con una buena obtención del conocimiento experto (reglas difusas) del proceso a controlar. Las variables de estado del proceso y la salida del controlador corresponden a las partes de la premisa y consecuencia de las reglas difusas, de manera respectiva [5].

Las *entradas* del controlador seleccionadas son:

La señal de error ( $e$ ).

La diferencia del error ( $\Delta e$ ).

La suma de errores o integral del error ( $\sum e$  o  $\int e dt$ ).

Las *salidas* del controlador seleccionadas son:

Diferencia de la salida del control ( $\Delta u$ ).

Salida del control ( $u$ ).

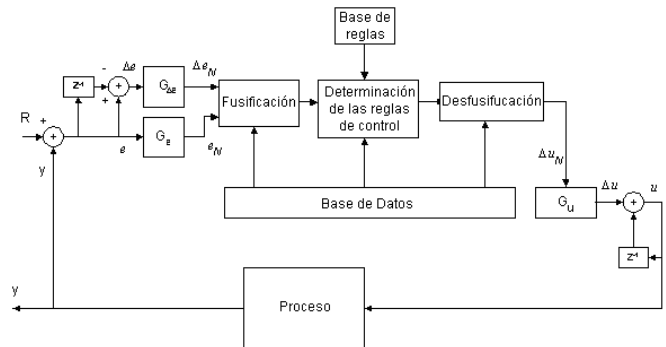


Figura 2. Estructura de controladores PI difuso

En la Figura 2 se muestran las estructuras más usadas de los controladores difusos PI. En éste controlador difuso se coloca factores de escalamiento  $G_e, G_{\Delta e}$  y  $G_u$  a fin de sintonizar el controlador.

El controlador PI difuso posee un integrador en su salida, por lo que la parte consecuente de las reglas difusas del control está en función de la diferencia de la salida ( $\Delta u$ ).

El valor de la salida actualizada del controlador ( $u$ ), es obtenido de la Ec. (13):

$$u(k) = u(k - 1) + \Delta u(k) \quad (13)$$

donde  $k$  es el instante muestreo y  $\Delta u(k)$  es el incremento actual de la salida del controlador. Las reglas difusas no son afectadas por el incremento de la salida del controlador ( $\Delta u(k)$ ), debido a que esta operación se realiza en el exterior del controlador PI difuso.

El tipo de funciones de membresía utilizadas es de triángulos y los trapecios, los cuales se muestran a continuación.

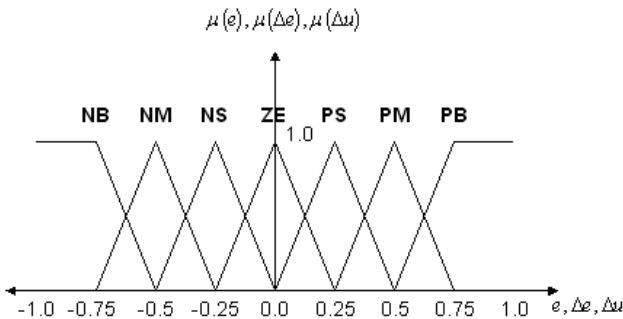


Figura 3. Funciones de membresía y conjuntos difusos de las entradas ( $e$  y  $\Delta e$ ) y la salida ( $\Delta u(k)$ )

El intervalo  $[-1,1]$  representa el universo de discurso de las entradas  $e$  y  $\Delta e$  y la salida  $\Delta u(k)$ , de los controladores PI difusos.

Las reglas del controlador PI difuso son del tipo:

*Si e es E y Δe es ΔE entonces Δu es ΔU*

La base de reglas difusas utilizadas en este controlador se muestran a continuación y es una base de reglas muy utilizada, desarrollada con ayuda del plano de fase.

$\Delta e / e$	NB	NM	NS	ZE	PS	PM	PB
NB	NB	NB	NB	NM	NS	NS	ZE
NM	NB	NM	NM	NM	NS	ZE	PS
NS	NB	NM	NS	NS	ZE	PS	PM
ZE	NB	NM	NS	ZE	PS	PM	PB
PS	NM	NS	ZE	PS	PS	PM	PB
PM	NS	ZE	PS	PM	PM	PM	PB
PB	ZE	PS	PS	PM	PB	PB	PB

Figura 4. Base de reglas difusas del controlador PI difuso

El significado de los conjuntos difusos es:

NB: Negativo Grande                      PS: Positivo Pequeño  
 NM: Negativo Medio                      PM: Positivo Medio

NS: Negativo Pequeño                      PB: Positivo Grande  
 ZE: Cero

El controlador PI Difuso Adaptable está formado por un controlador PI difuso y un Mecanismo de Adaptación difuso, ambos con un sistema de inferencia del tipo Mamdani. El mecanismo de adaptación es un modelo no lineal función de  $e$  y  $\Delta e$  independiente del proceso a controlar y de la política de control adoptada. El diagrama a bloques del controlador PI difuso adaptable es mostrado en la Figura 5. Los datos del diseño y sintonización del controlador PI difuso adaptable son mostrados en [5].

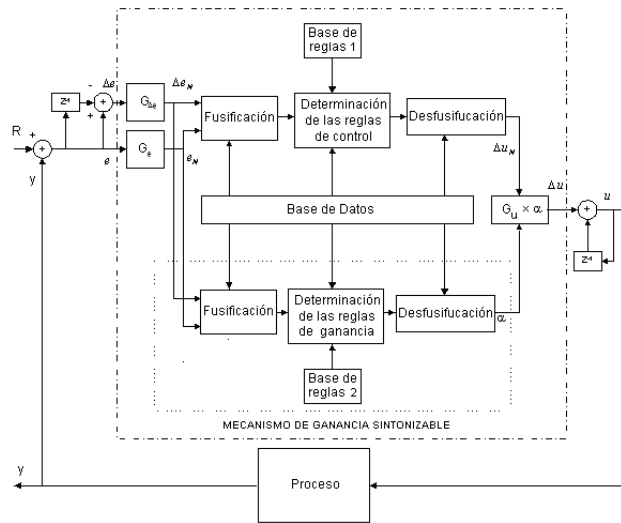


Figura 5. Diagrama a bloques del controlador PI difuso adaptable

Los estados actuales del proceso son utilizados para ajustar el factor de escala de salida (ganancia del controlador). Este ajuste se realiza por medio del factor de adaptación de ganancia  $\alpha$ , el cual es una función no lineal del error ( $e$ ) y la diferencia del error ( $\Delta e$ ).

El factor de ganancia de actualización  $\alpha$  es una función de tipo lingüístico (difusa). La función difusa de  $\alpha$  es:

$$a(k) = f(e(k), \Delta e(k)) \quad (14)$$

donde  $f$  es una función lingüística (no lineal) del error y la diferencia del error ( $e$  y  $\Delta e$ ). Esto demuestra que  $\alpha$  no es dependiente de los parámetros del proceso, sino de los estados ( $e$  y  $\Delta e$ ). El tipo de funciones de membresía utilizadas se muestra a continuación, los cuales también son triángulos y trapecios

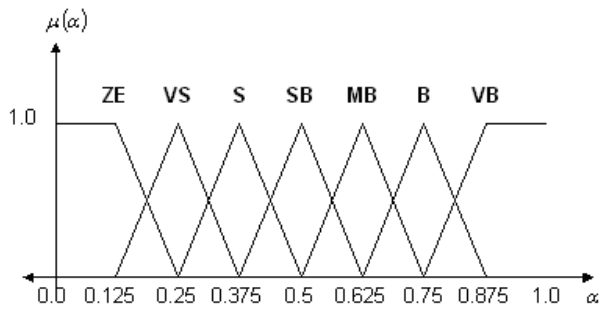


Figura 6. Funciones de membresía de  $\alpha$  (factor de actualización de ganancia).

El intervalo  $[0,1]$  es el universo de discurso de la salida  $\alpha$  del mecanismo de adaptación, conocida como factor de actualización de ganancia; mientras que las funciones de membresía de las entradas ( $e$  y  $\Delta e$ ) son iguales a las de las entradas del controlador PI difuso básico definidas con un universo de discurso sobre el intervalo  $[-1,1]$ . Las reglas del mecanismo de adaptación son del tipo:

*Si  $e$  es  $E$  y  $\Delta e$  es  $\Delta E$  entonces  $\alpha$  es  $\alpha$*

La base de reglas difusas utilizadas en este controlador se muestran a continuación y es una base de reglas muy utilizada, desarrollada con ayuda del plano de fase.

$\Delta e / e$	NB	N	NS	ZE	PS	PM	PB
NB	VB	VB	VB	B	SB	S	ZE
NM	VB	VB	B	B	MB	S	VS
NS	VB	MB	B	VB	VS	S	VS
ZE	S	SB	MB	ZE	MB	SB	S
PS	VS	S	VS	VB	B	MB	VB
PM	VS	S	MB	B	B	VB	VB
PB	ZE	S	MB	B	VB	VB	VB

Figura 7. Base de reglas difusas utilizada en el mecanismo de adaptación del controlador PI difuso adaptable.

El significado de los conjuntos difusos de  $\alpha$  es:

ZE: Cero  
 VS: Muy Pequeño  
 S: Pequeño  
 SB: Pequeño Grande  
 MB: Mediano Grande  
 B: Grande  
 VB: Muy Grande

El mapeo sobre el universo de discurso  $[-1,1]$  de las entradas ( $e$  y  $\Delta e$ ) y la salida  $\Delta u(k)$  del controlador, por medio de los factores de escalamiento  $G_e$ ,  $G_{\Delta e}$  y  $G_u$  respectivamente, da como resultado el escalamiento de las entradas ( $e_N$  y  $\Delta e_N$ ) y la salida  $\Delta u_N(k)$ . La apropiada selección de los factores de escalamiento  $G_e$ ,  $G_{\Delta e}$  y  $G_u$ , es hecha de acuerdo al conocimiento que se tiene del proceso y a un procedimiento de selección

mediante ensayo y error. El mapeo descrito anteriormente en los controladores PI difusos, es desarrollado por las Ecs. (15), (16) y (17):

$$e_N = G_e \cdot e \quad (15)$$

$$\Delta e_N = G_{\Delta e} \cdot \Delta e \quad (16)$$

$$\Delta u = (\alpha \cdot G_u) \cdot \Delta u_N \quad (17)$$

Donde  $\alpha$  es la ganancia de adaptación o factor de ganancia de actualización.

Para sintonizar el controlador PI difuso básico se debe eliminar el mecanismo de adaptación  $\alpha=1$ , lo cual implica sintonizar el controlador difuso básico (convencional). Se recomienda que el factor de escalamiento  $G_e$  se seleccione de forma tal que el error cubra el universo de discurso completo correspondiente al intervalo  $[-1,1]$ . Cuando el sistema posea una respuesta lenta, es necesario aumentar el valor de  $G_e$ , y  $G_u$ . En la manipulación del factor de escala  $G_u$  se debe tener cuidado, debido a su influencia sobre las constantes proporcional e integral (derivativo) del controlador PI (o PD). Si el sistema posee un sobretiro muy grande, es necesario incrementar el valor de  $G_{\Delta e}$ . La selección de los factores de escalamiento de entrada ( $G_e$  y  $G_{\Delta e}$ ) y salida ( $G_u$ ) debe realizarse de forma tal que la respuesta transitoria del sistema sea lo más aceptable posible [5].

## 6. CONCLUSIONES

La simulación de los sistemas desarrollados se ha realizado haciendo uso del software Matlab versión 5.3 de la compañía Mathworks Inc. La parte adaptable de ambos sistemas de control expuestos en éste documento exhibirán siempre un mejor comportamiento dinámico. Para el control difuso adaptable esto se debe en gran medida a la optimización dada por los índices de funcionamiento ISE, IAE e ITAE además de mostrar una característica de gran inmunidad ante perturbaciones y un mejor comportamiento dinámico ante variaciones de demanda de carga (seguimiento de referencia).

Por su parte, el comportamiento del control por linealización ante cambios en el set point, también tendrá en la parte adaptativa una respuesta temporal más suave. Todo lo anterior, tiene como beneficios una mejor dosificación de las soluciones ácido y base lo que implican un mejor aprovechamiento de éstos recursos y una reducción en el consumo de los mismos.

En la Figura 8, se observan las simulaciones del modelo obtenido a lazo abierto, donde se observa el comportamiento no lineal del sistema, y su gran sensibilidad frente a la variación de los parámetros. Variaciones del flujo del buffer (d) de 0 a 0,55 ml/s, producen cambios en escalón de la variable de control (flujo base) de  $\pm 10\%$ .

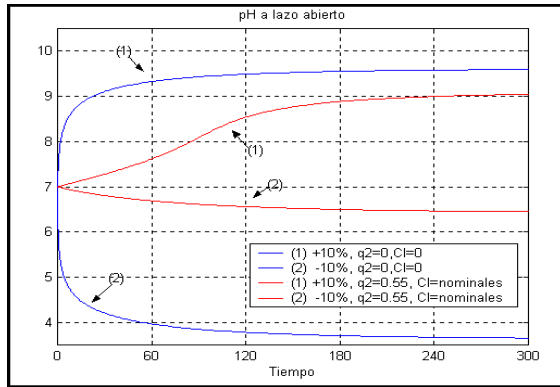


Figura 8. Simulación a lazo abierto

En la Figura 9 se muestra como ambos controladores en cuanto al tiempo de respuesta, tienden a comportarse en forma similar.

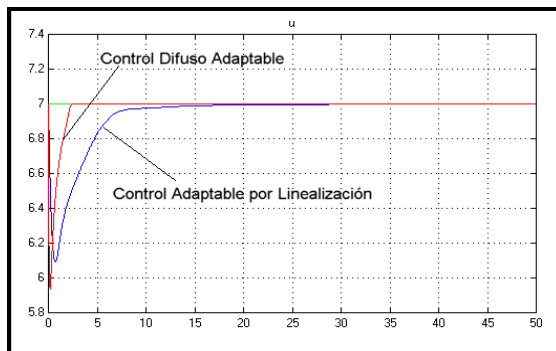


Figura 9. Comparación de los métodos de control

## 5. TRABAJOS RELACIONADOS

Se mencionan algunos trabajos relacionados con los sistemas de control de pH, así como los elementos que algunos autores han contemplado para el desarrollo de éstos sistemas.

McAvoy et al. [1], Presenta un modelo para la neutralización de un ácido débil y una base fuerte, basado en los principios de conservación de masa en condiciones de equilibrio y la electro neutralidad de las soluciones.

Gustafsson y Waller [4] utilizan una formulación matricial haciendo balances de masas de todos los ácidos y bases que reaccionan, considerando además la estequiometría del sistema. Efectuando transformaciones lineales al vector de concentraciones, se llega también a una formulación general pero haciendo uso de variables que son independientes de la reacción química. Posteriormente se realiza una estimación en línea de estas variables utilizando el método de mínimos cuadrados y luego se utiliza un controlador PID que hace uso de estas estimaciones.

Con Zanabria, [2] Se plantea un Problema de Referencia (PdR) para el control del proceso de Neutralización de pH, basado en experimentos y simulaciones. Se analizan las condiciones más comunes a nivel industrial de este tipo de procesos.

[Raymond A. Wright y Costas Kravaris] [8] Control No Lineal de procesos de pH usando un equivalente de Ácido Fuerte. Definen un objetivo de control equivalente al pH y formulan un controlador lineal y no adaptable en términos de este nuevo objetivo. También se han diseñado controladores no lineales tanto adaptables como no adaptables.

## 7. REFERENCIAS

[1] McAvoy T. et al. "Dynamics of pH in controlled stirred tank reactor". Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., vol. 11, N1 1, pp. 68-70, 1972.

[2] Zanabria S. Oscar and García Claudio "Linear and Nonlinear Based-Model Control Strategies Applied to a pH Neutralization Process". Polytechnic School of the University of Sao Paulo. Sao Paulo-SP, Brazil

[3] Alegrechi Diego y Capalbo Andrés "Sistema de Control de pH". Depto. de Ing. Electrónica, Universidad Nacional de Rosario, 2000.

[4] Gustafsson T. y Waller K. "Dynamic modeling and control invariant control of pH". Chemical Engineering Science, vol. 38, N13, pp. 389-398, 1983.

[5] Pinto Castillo Sergio Enrique, "Sistema De Control Con Desacopladores Difusos Adaptables Para La Regulación De Carga De Una Central Termoeléctrica", Tesis de Maestría en Ciencias, Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico, Noviembre 2001.

[6] Gadewar B. Sagar, Doherty F. Michael, Malone F. Michael "A Systematic Method for Reaction Invariants and Mole Balances for Complex Chemistries". Department of Chemical Engineering, University of Massachusetts, USA, 2000.

[7] Isidori Alberto "Nonlinear Control Systems" Springer-Verlag, 3rd Edition, 1995.

[8] Wright R. and Kravaris C. "Nonlinear control of pH processes using strong acid equivalent" Ind. Eng. Chemical Res. vol. 30, pp. 1561-1572, 1991.