

**Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura
Universidad Nacional de Rosario**

Identificación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 3
*Identificación de una Planta
de Neutralización de pH*

Mayo 2012

Trabajo Práctico Nro. 3

Identificación de una Planta de Neutralización de pH

1. Descripción del Proceso

El control de pH de una solución es crítico en una variedad de procesos. Los procesos de neutralización de pH son extremadamente difíciles de controlar debido a que exhiben un comportamiento fuertemente no lineal debido a la curva estática de titulación (titration curve) (que es la característica de salida del proceso), que puede tener variaciones de varios órdenes de magnitud en un rango pequeño de valores de pH ([1],[2]).

El proceso de neutralización de pH consiste de un flujo de solución ácida (acid stream HNO_3) cuyo pH se quiere neutralizar adicionando una solución base (base stream NaOH), y una solución buffer que se adiciona para facilitar la reacción (buffer stream NaHCO_3). Estos flujos entran a un tanque agitado (Stirred Tank Reactor) donde se mezclan. Un diagrama esquemático del proceso de neutralización de pH se muestra en la Figura 1.

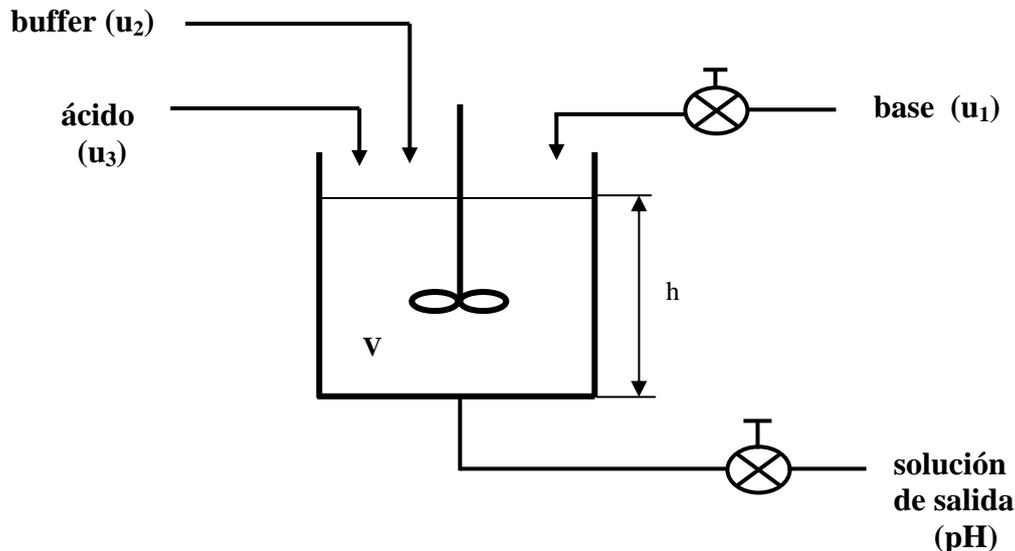


Figura 1: Diagrama Esquemático de un Proceso de Neutralización de pH.

El **objetivo de control** es regular el pH (pH) de la solución de salida a través de la manipulación del flujo de la solución base (u_1), compensando los posibles cambios en el flujo del buffer (u_2) que se considera como una perturbación no medible. El flujo de la solución ácida (u_3), y el volumen del tanque (V) se asumen constantes.

El equilibrio químico puede modelarse introduciendo dos *invariantes de reacción* por cada flujo entrante ([2]). Estas invariantes de reacción están definidas como

$$\begin{aligned} W_{ai} &= [H^+]_i - [OH^-]_i - [HCO_3^-]_i - 2[CO_3^{2-}]_i \\ W_{bi} &= [H_2CO_3]_i + [HCO_3^-]_i + [CO_3^{2-}]_i \end{aligned} \quad (1)$$

donde $i=3$ indica la solución ácida, $i=2$ indica el buffer, e $i=1$ indica la solución base. Combinando los balances de masa en cada una de las especies iónicas del sistema, se obtiene la siguiente ecuación diferencial que describe el comportamiento de las invariantes de reacción de la solución de salida:

$$\begin{aligned}\frac{dW_a}{dt} &= \frac{1}{V}(W_{a3} - W_a)u_3 + \frac{1}{V}(W_{a1} - W_a)u_1 + \frac{1}{V}(W_{a2} - W_a)u_2 \\ \frac{dW_b}{dt} &= \frac{1}{V}(W_{b3} - W_b)u_3 + \frac{1}{V}(W_{b1} - W_b)u_1 + \frac{1}{V}(W_{b2} - W_b)u_2\end{aligned}\quad (2)$$

donde u_3 , u_2 y u_1 son respectivamente los flujos volumétricos de la solución ácida, del buffer, y de la solución base, y donde $V=Ah$ es el volumen del tanque, siendo h la altura de líquido en el mismo y A el área de su sección transversal.

El pH de la solución de salida (pH) se determina a partir de las invariantes de reacción W_a y W_b usando la siguiente relación implícita:

$$W_a + 10^{pH-14} - 10^{-pH} + W_b \frac{1 + 2 \times 10^{pH-pK_2}}{1 + 10^{pK_1-pH} + 10^{pH-pK_2}} = 0, \quad (3)$$

donde pK_1 y pK_2 son las constantes de disociación de H_2CO_3 y HCO_3^- respectivamente, que se asumen conocidas.

Definiendo

$$\begin{aligned}x &= [x_1 \quad x_2]^T = [W_a \quad W_b]^T && \text{vector de estado} \\ d &= u_2 && \text{perturbación (no medible)} \\ u &= u_1 && \text{variable manipulada (entrada de control)} \\ y &= pH && \text{variable de salida}\end{aligned}$$

el modelo (2)-(3) puede escribirse como:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x) + g(x)u + p(x)d \\ c(x, y) &= 0\end{aligned}\quad (4)$$

donde

$$\begin{aligned}f(x) &= \left[\frac{u_3}{V}(W_{a3} - x_1) \quad \frac{u_3}{V}(W_{b3} - x_2) \right]^T \\ g(x) &= \left[\frac{1}{V}(W_{a1} - x_1) \quad \frac{1}{V}(W_{b1} - x_2) \right]^T \\ p(x) &= \left[\frac{1}{V}(W_{a2} - x_1) \quad \frac{1}{V}(W_{b2} - x_2) \right]^T\end{aligned}$$

$$h(x, y) = x_1 + 10^{y-14} - 10^{-y} + x_2 \frac{1 + 2 \times 10^{y-pK_2}}{1 + 10^{pK_1-y} + 10^{y-pK_2}}$$

2. La Planta real

La planta que se considerará en este Trabajo Práctico es una Planta de Neutralización de pH existente en la University of California, Santa Barbara (ver [1]). Los valores correspondientes a las condiciones de operación nominal de la planta son los siguientes:

$$\begin{aligned}
W_{a3} &= 3 \times 10^{-3} \text{ M} & W_{b3} &= 0 \text{ M} \\
W_{a2} &= -3 \times 10^{-2} \text{ M} & W_{b2} &= 3 \times 10^{-2} \text{ M} \\
W_{a1} &= -3.05 \times 10^{-3} \text{ M} & W_{b1} &= 5 \times 10^{-5} \text{ M} \\
W_a &= -4.32 \times 10^{-4} \text{ M} & W_b &= 5.28 \times 10^{-4} \text{ M} \\
\bar{u}_3 &= 16.60 \text{ ml/s} & \bar{u}_2 &= 0.55 \text{ ml/s} & \bar{u}_1 &= 15.55 \text{ ml/s} \\
V &= 2900 \text{ ml} \\
pK_1 &= 6.35 & pK_2 &= 10.25 \\
\bar{y} &= 7.0
\end{aligned}$$

3. Modelo Computacional

Desde el punto de vista de la simulación digital, el modelo (4) tiene el inconveniente de que la salida no está dada como una función explícita del estado sino a través de la función implícita $h(x, y) = 0$, que representa la denominada **curva de titulación (titration curve)**. Este problema se puede subsanar tomando la derivada temporal en la relación implícita $h(x, y) = 0$, resultando

$$\frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \dot{y} = 0$$

de donde

$$\begin{aligned}
\dot{y} &= - \left[\frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \right]^{-1} \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \dot{x} \\
&= - \left[\frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \right]^{-1} \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} [f(x) + g(x)u + p(x)d]
\end{aligned} \tag{5}$$

que es una relación explícita para la derivada de la salida, y que por lo tanto puede implementarse en Simulink, para luego obtener la salida y , integrando esta ecuación.

El modelo (4) ha sido implementado en **Simulink** en el archivo `planta_pH.mdl`, en tanto que los parámetros nominales de la planta se encuentran en el archivo `planta_pH_parametros.m`.

4. Simulación de la planta en lazo abierto

Analice el comportamiento del sistema en lazo abierto, para valores constantes del flujo del buffer ($u_2 = d$) de 0 y 0.55 ml/s, produciendo cambios en escalón de +/- 10 % en la variable de control ($u_1 = u$), a partir del valor nominal. El objetivo de esta sección es poner en evidencia la característica no lineal del modelo.

5. Identificación de un modelo lineal alrededor del punto de operación nominal

En esta sección se propone identificar un modelo lineal de la planta alrededor del punto de operación nominal de la misma, a partir de datos de entrada-salida del sistema.

Esta sección es **abierta**, y usted podrá utilizar cualquier técnica de identificación lineal que conozca. Por supuesto que los datos de entrada-salida deberán generarse por simulación del modelo implementado en la Sección 3.

La idea es analizar el rango de validez del modelo lineal, y comparar su performance con la de los modelos no lineales que se identificarán en las secciones siguientes.

6. Identificación de un modelo no lineal del tipo Wiener

Los procesos de neutralización de pH han sido frecuentemente modelados en la literatura con un modelo no lineal del tipo Wiener, consistente en un sistema lineal estacionario en cascada con una no linealidad estática que representa la curva de titulación de salida [2],[4]. El objetivo de esta sección es identificar un modelo del tipo Wiener del proceso. Se propone utilizar el método propuesto en [5] usando los mismos datos de estimación y validación que en la Sección 5., de manera de poder comparar los distintos modelos identificados.

7. Diseño de un Observador No Lineal para la Estimación del Flujo del buffer (d)

Desde el punto de vista del diseño de controladores, el modelo (4) presenta el inconveniente de que el flujo del buffer d es en general no medible y además no es constante, sino que tiene fluctuaciones alrededor del valor correspondiente a las condiciones de operación nominal de la planta. Surge entonces la necesidad de estimar *on-line* la magnitud d . Una posibilidad para realizar esto es a través del uso de un observador no lineal. En esta sección, se propone un observador no lineal para la estimación de d (ver [6]).

La ecuación de estado (4) puede escribirse como

$$\dot{x} = F(x)d + G(x, u) \quad (6)$$

donde

$$\begin{aligned} F(x) &= p(x) \\ G(x, u) &= f(x) + g(x)u \end{aligned}$$

Para un sistema descrito por una ecuación de la forma (6), Friedland (en [3]) propone el siguiente observador no lineal para la estima d

$$\begin{aligned} \hat{d} &= \phi(x) + z \\ \dot{z} &= -\Phi(x)[F(x)\hat{d} + G(x, u)] \end{aligned} \quad (7)$$

donde $\phi(x)$ es una función no lineal elegida adecuadamente, y $\Phi(x)$ es su matriz Jacobiana. La función $\phi(x)$ debe elegirse de forma tal que el error de estimación

$$e_d(t) = d - \hat{d} \quad (8)$$

tienda a cero asintóticamente cuando $t \rightarrow \infty$.

Problema 1: Para el observador propuesto en (7), halle la ecuación diferencial que describe la dinámica del error $e_d(t)$.

Problema 2: Basándose en un análisis de Lyapunov, verifique que una condición suficiente que debe cumplir la función $\Phi(x)$ para asegurar la convergencia asintótica del error de estimación a cero, es que la matriz

$$L(t) = \Phi(x(t))F(x(t), u(t))$$

sea semi-definida positiva y acotada.

Problema 3: Note que una posible forma de elegir la función $\Phi(x)$ de manera que se satisfaga la condición establecida en el Problema 2, es tomando

$$\Phi(x) = F^T(x)Q,$$

donde Q es cualquier matriz definida positiva. Verifique este hecho.

Adoptando $Q = k_{est}I$, donde I es la matriz identidad de dimensiones apropiadas y $k_{est} > 0$, halle las expresiones resultantes para las funciones $\phi(x)$ y $\Phi(x)$, y la expresión del observador no lineal (7), para este caso.

Problema 4: Implemente en **Simulink** el observador no lineal descrito en esta sección, y realice ensayos de simulación para analizar la performance del mismo (su convergencia).

Referencias

- [1] Henson, M. and Seborg, D.. "Nonlinear Adaptive Control of a pH Neutralization Process". In *Proceedings of ACC*, pp 2586-2590, 1992.
- [2] Henson, M. and Seborg, D. (edit.). *Nonlinear Process Control*, Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 1997.
- [3] Friedland, B.. "A Nonlinear Observer for estimating Parameters in Dynamic Systems". *Automatica*, Vol 33, No. 8, pp.1525-1530, 1997.
- [4] Kalafatis, A.; Arifin, N.; Wang, L. and Cluett, W.R.. "A new approach to the identification of pH processes based on the Wiener model". *Chemical Engineering Science*, Vol. 50, No. 23, pp. 3693-3701, 1995.
- [5] Gómez, J.C. and Baeyens, E. (2004). Identification of Block-oriented Nonlinear Systems using Orthonormal Bases. *Journal of Process Control*, Vol. 14, No. 6, pp. 685-697, 2004.
- [6] Gómez, J.C., Jutan, A. and Baeyens, E. (2004). Wiener Model Identification and Predictive Control of a pH Neutralization Process. *IEE Proceedings on Control Theory and Applications*, Vol. 151, No. 3, pp. 329-338, May 2004.