

AUTONOMOUS CIRCULAR QUALITY CELL (ACQC)

Calidad *inline*, sensores virtuales y optimización segura con integridad OT

Mariano Millañanco Fernández

Puertollano. Ciudad Real, España
Universidad de Sevilla — Máster en Microelectrónica
UTAMED — Máster en Inteligencia Artificial

github.com/tangodelta217/ACQC
mariano.millananco@gmail.com

2026

Resumen

La variabilidad en la composición de *feedstocks* circulares (p. ej. aceites de pirólisis plástica) dificulta mantener la calidad de producto, introduciendo contaminantes e incertidumbre en el proceso [1]. Las tecnologías de control actuales dependen de análisis de laboratorio tardíos, lo que retrasa decisiones operativas. Este trabajo propone una celda autónoma de calidad (ACQC) que integra sensores analíticos en línea y modelos predictivos (*soft sensors*) en el *edge* para estimar propiedades de calidad en tiempo real, complementada con un optimizador seguro de setpoints en modo recomendación (operador en el bucle) y medidas de integridad OT para garantizar ciberseguridad y trazabilidad. Se describen los módulos, entregables, KPIs y un plan de implementación por fases orientado a maximizar la consistencia de la calidad y la eficiencia operativa sin comprometer la seguridad ni la confiabilidad del sistema.

Abstract

The variability of circular feedstock composition (e.g. waste plastic pyrolysis oils) makes it challenging to maintain consistent product quality, introducing contaminants and uncertainty [1]. Current control practices rely on delayed laboratory analyses, slowing down operational decisions. This work proposes an Autonomous Circular Quality Cell (ACQC) integrating inline analytical sensors and predictive *soft-sensor* models at the edge to estimate quality properties in real time. It includes a safe setpoint optimizer in advisory mode (human-in-the-loop) and OT integrity measures (secure boot, data signing) to ensure cybersecurity and traceability. We outline the system modules, deliverables, key performance indicators, and a phased implementation roadmap aimed at improving quality consistency and operational efficiency without compromising safety or reliability.

Keywords: soft sensors; PAT; optimización segura; OT security

Resumen ejecutivo (entregables medibles)

- Sistema de inferencia en tiempo real de calidad: sensor NIR/Raman + ML (*soft sensor*) con error esperado <5 % respecto al laboratorio.
- Modo *fallback* documentado: sensores virtuales suplen fallos de instrumento, con detección de deriva y recalibración automática.
- Módulo de optimización robusta en modo asesor: recomienda setpoints operativos garantizando 0 violaciones de restricciones (según pruebas).
- Integración OT endurecida: *edge* con *secure boot*, firmware firmado y registro auditable de datos y modelos (trazabilidad completa).
- Dashboard para operador: visualización de calidad estimada, alarmas de confianza, histórico por lote y reportes de métricas de desempeño.

1. Introducción

Los procesos industriales que incorporan materias primas recicladas o residuales enfrentan una alta variabilidad en la composición del *feedstock*. En el contexto de refinado y petroquímica circular, por ejemplo, la calidad de los aceites de pirólisis de plástico puede fluctuar ampliamente en términos de contaminantes y propiedades físicas, dificultando lograr productos consistentes [1]. Actualmente, la garantía de calidad depende en gran medida de análisis de laboratorio *ex situ* sobre muestras de lote. Esta modalidad conlleva una

latencia significativa: los resultados llegan tarde, limitando la capacidad de ajuste proactivo del proceso. La tendencia moderna es implantar *Process Analytical Technology* (PAT) para monitorización en tiempo real, reemplazando al control reactivo por lotes [2]. Sin embargo, muchas plantas aún operan con visibilidad reducida en línea, lo que obliga a fijar márgenes operativos conservadores (setpoints subóptimos) para asegurar la especificación de calidad, a expensas de eficiencia energética y productividad.

2. Metodología

La solución propuesta, denominada **Autonomous Circular Quality Cell (ACQC)**, consta de cuatro módulos integrados (Fig. 1) que abordan las deficiencias identificadas:

- **Módulo A: Analítica de Proceso (PAT).** Se implementan sensores analíticos en línea (espectroscopía NIR/Raman) combinados con señales de proceso convencionales, para estimar en tiempo real variables de calidad del producto (p. ej. propiedades fisicoquímicas, contaminantes). Mediante modelos quimiométricos y calibración multivariante, estos sensores espectroscópicos actúan como *soft sensors* espectrales [3], proporcionando visibilidad inmediata de atributos críticos de calidad (CQAs) sin esperar al laboratorio.
- **Módulo B: Sensores virtuales y fallback.** Se desarrollan modelos de estimación basados en datos históricos y aprendizaje automático para aquellas variables de calidad o rendimiento que no cuenten con un sensor físico fiable. Estos *soft sensors* data-driven aportan información de respaldo, y pueden tomar el relevo ante fallo o mantenimiento de un sensor físico, asegurando continuidad operativa. Así, se provee información importante del proceso que de otro modo solo estaría disponible vía análisis off-line [4]. Se define un modo degradado controlado: condiciones bajo las cuales los modelos virtuales suplen la medición directa, con alertas de confianza.
- **Módulo C: Optimización segura (advisory).** Sobre la base de las variables de calidad inferidas, se implementa un recomendador de setpoints o ajustes de receta que optimiza la operación (rendimiento, eficiencia) respetando todas las restricciones de proceso y calidad. Dado el enfoque *human-in-the-loop*, este módulo sugiere al operador acciones operativas en lugar de actuar automáticamente. Se emplean técnicas de optimización robusta bajo incertidumbre, asegurando que ninguna recomendación viole límites de seguridad o calidad incluso considerando errores de modelo [5]. En la práctica, esto equivale a un algoritmo de optimización bayesiana segura o control predictivo con restricciones endurecidas, cuyo resultado es un conjunto de parámetros operativos candidatos con estimación de impacto y nivel de confianza. Además, incorpora reglas de negocio del tipo "no recomendar si..." "para evitar cambios innecesarios o riesgosos (p. ej., si la confianza del modelo es baja o el sistema está fuera de dominio válido).
- **Módulo D: Integridad y seguridad OT.** Todos los componentes anteriores se despliegan en un entorno de edge industrial endurecido. Se habilita *secure boot* y firma digital tanto del software de inferencia como de los modelos ML utilizados, de forma que cualquier manipulación no autorizada sea detectable. Asimismo, se aplica versionado y registros auditables de cada recomendación emitida y de los datos procesados (trazabilidad completa de decisiones). La comunicación con sistemas OT sigue principios de defensa en profundidad: el ACQC opera inicialmente en modo solo lectura, sin inyectar comandos, para no perturbar el control existente; se ubica en zona desmilitarizada (DMZ) o red segregada; y se configuran alarmas ante cualquier anomalía de ciberseguridad. Este módulo garantiza que la introducción de analítica avanzada no

comprometa la disponibilidad ni la seguridad de la planta.

3. Resultados / Evaluación

Al tratarse de una propuesta, se definen **resultados esperados** y un **plan de evaluación** en lugar de valores medidos actuales. El sistema entregará varios componentes verificables (ver Resumen ejecutivo), cuyo desempeño será evaluado en etapas:

- **Validación offline:** usando datos históricos y campañas de muestreo específicas, se calibrarán los modelos de calidad (Módulo A/B) y se simularán escenarios para el recomendador (Módulo C). Se espera alcanzar correlaciones altas entre las predicciones en línea y los valores de laboratorio (error <5 % en variables clave).
- **Pruebas en planta en sombra:** el servicio de inferencia en *edge* se conectará en lectura al historiador/OPC durante varias semanas. Se monitorizará la latencia end-to-end (meta: sub-segundos a pocos segundos por ciclo) y la robustez ante pérdidas de comunicación o datos anómalos.
- **Comparación con laboratorio:** una vez afinados los modelos, se ejecutará una validación paralela: las predicciones de calidad en línea se contrastarán con resultados de laboratorio para un número significativo de lotes, calculando métricas de error (MAE, RMSE) y coeficiente R^2 por cada propiedad crítica.
- **Evaluación del recomendador:** en modo simulación (sobre un gemelo digital o datos históricos reprocesados) se activará el módulo de optimización para generar recomendaciones. Se verificará que ninguna recomendación propuesta habría violado restricciones del proceso en casos históricos y que, de haber sido aplicadas, habrían mantenido la calidad dentro de especificaciones. También se medirá el impacto potencial en eficiencia (e.g. ahorro energético proyectado).

Se establecen **KPIs y criterios de éxito** cuantitativos (Tabla 1) para considerar el proyecto satisfactorio. Cada KPI incluye la métrica a medir, un umbral mínimo a lograr y el método de verificación (fuente de datos: laboratorio, simulación, logs, etc.). En particular, se enfatiza lograr alta fidelidad de las predicciones (error bajo frente al laboratorio), detección temprana de fallos o derivas de sensores (para activar *fallback*), tiempos de respuesta suficientemente rápidos, y que el optimizador nunca sugiera acciones que comprometan la seguridad o la calidad (cero violaciones de restricciones).

4. Discusión

Para que la ACQC tenga éxito, se deben gestionar ciertos riesgos clave: **(1) Ground truth insuficiente:** si el conjunto de datos de laboratorio para entrenar y validar los modelos es escaso o no cubre toda la variabilidad del proceso, las inferencias podrían ser poco confiables. Se mitiga planificando un muestreo mínimo viable (con apoyo de los responsables de Calidad) que asegure datos representativos de las diferentes materias primas y condiciones de operación. Cada muestra irá trazada (fecha, lote, origen) para relacionarla con las predicciones en línea y permitir recalibraciones futuras. **(2) Deriva de sensores o modelos:** con el tiempo, los sensores físicos pueden descalibrarse o los datos de proceso

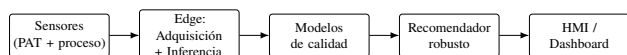


Figura 1: Esquema simplificado de la ACQC, integrando sensores de proceso y analíticos (PAT) con inferencia local en *edge*, optimización segura de setpoints y visualización en sistemas de operación.

Tabla 1: KPIs y criterios de aceptación propuestos.

Indicador (KPI)	Métrica	Umbral	Verificación
Calidad vs lab (precisión)	RMSE calidad	$\leq 5\%$ FS	Contra resultados lab.
Detección fallo sensor	F1-score	$\geq 0,90$	Simulación de fallos
Latencia inferencia	t_{p95}	≤ 5 s	Logs del sistema
Disponibilidad servicio	% uptime	$\geq 99\%$	Monitorización 24/7
Cobertura incertidumbre	P.I. 95 %	$\geq 90\%$	Pruebas retrospectivas
Recomendaciones Violaciones seguras		0	Tests históricos/sim.

pueden desviarse del rango entrenado en los modelos ML. Esto puede introducir sesgos que degraden el desempeño si no se detectan [6]. Se propone implementar detección de deriva (*drift*) continua: monitorear la diferencia entre predicciones y valores de laboratorio, o entre sensores redundantes, disparando alarmas si excede umbrales. Ante derivas significativas, se activa el modo *fallback* (usando modelos auxiliares o últimos valores confiables) y se agenda recalibración del sensor o reentrenamiento del modelo. El sistema bloquea cualquier recomendación del optimizador si las entradas están fuera del dominio válido o si la incertidumbre del modelo es muy alta, para evitar decisiones erróneas. **(3) Integración OT y ciberseguridad:** conectar un nuevo sistema al entorno de control de planta conlleva riesgos de disponibilidad o intrusión. Para minimizar impacto, la integración inicial será *read-only*, sin control automatizado, de modo que ante cualquier anomalía se pueda aislar el sistema sin afectar al proceso. Se aplican las mejores prácticas de seguridad industrial (normativas IEC-62443): endurecimiento del dispositivo edge, puertos y servicios mínimos, autenticación robusta y segmentación de red. Además, se realiza un *pentesting* previo y se involucra al equipo de OT/ciberseguridad de la planta desde el diseño. Estas acciones de mitigación buscan asegurar que la ACQC se incorpore de forma confiable y segura, generando confianza en los operadores y stakeholders.

5. Conclusiones

La propuesta ACQC aspira a servir como un célula de calidad autónoma que complemente el control existente en plantas industriales, especialmente ante el reto de materias primas de origen circular con alta variabilidad. Mediante la combinación de PAT en línea, sensores virtuales, optimización segura y salvaguardas OT, se espera reducir la dependencia del laboratorio y habilitar decisiones operativas más rápidas y fundamentadas en datos en tiempo real, todo ello manteniendo la seguridad de la operación.

Como guía de implementación, se plantea un **roadmap** en fases:

Gate 0: Acceso a datos e historial, recopilación del diccionario de señales y definición de los CQAs objetivo junto con Calidad.

Gate 1: PoC offline reproducible – desarrollo inicial de modelos *soft sensor* con datos históricos y validación cruzada básica.

Gate 2: Despliegue del servicio en *edge* en modo escucha (lectura de datos en tiempo real) y desarrollo del dashboard de monitoreo.

Gate 3: Validación contra laboratorio – comparación sistemática de las predicciones en línea vs. resultados lab, ajuste de calibraciones.

Gate 4: Activación del modo *advisory* – integración del optimizador robusto que genera recomendaciones visibles para el operador; se afinan criterios de inhibición de recomendación y se verifica trazabilidad de todo el ciclo.

Gate 5: *Handover* final – documentación completa, transferencia de conocimiento y preparación de un paquete de despliegue para producción (incluyendo manuales, código, modelos entrenados y procedimientos de MLOps para mantenimiento).

En síntesis, ACQC ofrece una vía para incrementar la observabilidad y capacidad de acción en procesos con *feedstocks* heterogéneos, evitando tanto decisiones a ciegas como intervenciones automáticas inseguras. Como trabajo futuro se contempla extender la célula a un lazo de control autónomo una vez que las recomendaciones hayan generado confianza y se cuenten con procedimientos de gestión de cambios formales. Por ahora, el enfoque se mantiene en asistencias al operador, reforzando la toma de decisiones con analítica avanzada, pero siempre con el humano validando el paso final hacia la actuación.

Referencias

- [1] S. H. Lim, H. H. Pham, E. H. Kwon y N. S. Nho, “Optimizing the use of pyrolysis waste oil as a feedstock for the naphtha cracking process by hydrotreating and hydrocracking”, *Resources, Environment and Sustainability*, vol. 22, pág. 100 277, 2025. doi: [10.1016/j.resenv.2025.100277](https://doi.org/10.1016/j.resenv.2025.100277)
- [2] P. Sathiyapriyan et al., “Current PAT landscape in the downstream processing of biopharmaceuticals”, *Analytical Science Advances*, vol. 6, n.º 1, e70013, 2025. doi: [10.1002/ansa.70013](https://doi.org/10.1002/ansa.70013)
- [3] A. Dietrich, L. Heim y J. Hubbuch, “Raman-based PAT for multi-attribute monitoring during VLP recovery by dual-stage CFF: attribute-specific spectral preprocessing for model transfer”, *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, vol. 13, pág. 1 631 807, 2025. doi: [10.3389/fbioe.2025.1631807](https://doi.org/10.3389/fbioe.2025.1631807)

- [4] D. Stanišić, L. Mejić, B. Jorgovanović, V. Ilić y N. Jorgovanović, “An algorithm for soft sensor development for a class of processes with distinct operating conditions”, *Sensors*, vol. 24, n.º 6, pág. 1948, 2024. DOI: [10.3390/s24061948](https://doi.org/10.3390/s24061948)
- [5] D. Krishnamoorthy y F. J. Doyle, “Model-free real-time optimization of process systems using safe Bayesian optimization”, *AIChE Journal*, vol. 69, n.º 4, e17993, 2023. DOI: [10.1002/aic.17993](https://doi.org/10.1002/aic.17993)
- [6] H. Y. Teh, A. W. Kempa-Liehr y K. I.-K. Wang, “Sensor data quality: a systematic review”, *Journal of Big Data*, vol. 7, n.º 1, pág. 11, 2020. DOI: [10.1186/s40537-020-0285-1](https://doi.org/10.1186/s40537-020-0285-1)