

ESTRATEGIA DE CONTROL BASADA EN MODELO PARA LA PRODUCCIÓN DE CAUCHO ACRILONITRILO-BUTADIENO (NBR) DE ALTO CONTENIDO EN ACRILONITRILO

A MODEL-BASED CONTROL STRATEGY FOR PRODUCTION OF HIGH ACRYLONITRILE CONTENT NITRILE-BUTADIENE RUBBER (NBR)

Carlos I. Sanseverinatti^{a,b}, Luis A. Clementi^{b,c} y Jorge R. Vega^{a,b}

^a*Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC, UNL-CONICET), Ruta Nacional 168, km. 0, Paraje “El Pozo” (3000) Santa Fe, Argentina. <https://intec.conicet.gov.ar/>*

^b*Centro de Investigación y Desarrollo en Ingeniería Eléctrica y Sistemas Eléctricos (CIESE), Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Santa Fe, Lavaisse 610 (3000), Santa Fe, Argentina.*

^c*Instituto de Investigación y Desarrollo en Bioingeniería (IBB, UNER-CONICET), Ruta Provincial 11, km. 10.5, (3010), Oro Verde, Argentina. <https://ibb.conicet.gov.ar/>*

Palabras clave: Sensor inferencial, procesos batch, redes neuronales recurrentes, caucho NBR.

Resumen. El caucho Acrilonitrilo-Butadieno de alto contenido de A (NBR por sus siglas en inglés: nitrile-butadiene rubber) se obtiene generalmente por copolimerización en emulsión de acrilonitrilo (A) y butadieno (B). La producción se realiza operando por encima del “punto azeotrópico”, donde el proceso puede inestabilizarse, dificultando la uniformidad del producto. La limitación para medir en línea la composición del copolímero restringe estrategias de lazo cerrado para estabilizar el proceso. En este trabajo se propone una estrategia de control en lazo cerrado que ajusta la composición del copolímero operando por encima del punto azeotrópico. A partir de un modelo de primeros principios, se implementa un sensor inferencial basado en redes neuronales recurrentes para estimar en línea la composición y cerrar el lazo de control mediante la dosificación de B durante el proceso. Los resultados indican un desempeño aceptable de la metodología de control propuesta, asegurando condiciones estables y una composición uniforme, incluso con errores significativos de modelado.

Keywords: Soft sensors, batch processes, recurrent neuronal networks, NBR rubber.

Abstract. High A-content NBR (nitrile-butadiene rubber) is typically produced through emulsion copolymerization of acrylonitrile and butadiene. Production is carried out above the “azeotropic point,” where the process can become unstable, hindering uniform product quality. Limitations in online copolymer composition measurements restrict closed-loop control strategies for process stability. This study proposes a closed-loop control strategy to adjust copolymer composition during operation above the azeotropic point. Based on a first-principles model, a recurrent neural network inferential sensor estimates composition online, enabling closed-loop control via B dosing throughout the process. Results demonstrate acceptable control methodology performance, ensuring stable conditions and uniform composition, even with significant modeling errors.

1 INTRODUCCIÓN

Los procesos discontinuos o *batch*, caracterizados por su alta flexibilidad y adaptabilidad, son ampliamente utilizados en la industria química para la producción de bienes de alto valor comercial (Ji et al., 2023). Con el fin de obtener productos con niveles de calidad aceptables y en condiciones de estabilidad en el proceso, es fundamental realizar el control y monitoreo de las variables del mismo. Sin embargo, existen variables de calidad de difícil medición en línea (Qiu et al., 2021). Es por ello que han sido desarrollados sensores inferenciales (SI) que permiten estimar variables no medibles a partir de aquellas de fácil medición (típicamente presiones, temperatura, caudales, etc.).

La utilización de SIs en procesos *batch* es de gran interés en la industria. Por ejemplo, en Mowbray et al. (2022) se evaluó la combinación de mínimos cuadrados parciales multidireccionales con estimadores probabilísticos automáticos no lineales para inferir viscosidad en procesos *batch*. El objetivo fue comparar el rendimiento de los diferentes SI en función a la exactitud en la predicción. En cambio, en Qiu et al. (2022) se propuso un SI para procesos *batch* multifase basado en máquinas de vectores de relevancia, una técnica de aprendizaje automático que utiliza la inferencia bayesiana, para estimar la concentración de penicilina en procesos de fermentación. Los resultados indicaron una alta eficiencia del SI aún en casos de conjunto de datos del *batch* asimétricos.

Un caso particular de gran interés en los procesos *batch* es el de producción de caucho NBR (Clementi et al., 2018). Este producto se obtiene por copolimerización en emulsión de acrilonitrilo (A) y butadieno (B), y es utilizado en la industria automotriz, aeronáutica, y petroquímica. Una variable de calidad que define los diferentes tipos de caucho es la composición de A (p_A) que representa la fracción másica de acrilonitrilo unida al copolímero. En particular, el caucho NBR con alto contenido de A (denominado de aquí en adelante NBR-HA) presenta propiedades mecánicas y resistencia a solventes mejores al caucho común, lo que lo vuelve de gran utilidad en aplicaciones industriales específicas. El principal desafío de la producción de NBR-HA es la inestabilidad del proceso; ya que para conseguir p_A altos es necesario trabajar por sobre el denominado punto azeotrópico, donde en teoría el producto posee una composición química auto-regulada (de aproximadamente $p_A \approx 40\%$) (Grimm, 1998). En condiciones de reacción que determinen composiciones por encima del punto azeotrópico, existe el riesgo de producirse una auto-aceleración de algunas etapas cinéticas involucradas (Lightsey, 1998), generando una homopolimerización de A y un caucho de mala calidad, debido a la no uniformidad de la composición del copolímero obtenido a lo largo de la reacción. A pesar de que es posible estabilizar el proceso cumpliendo con cierta relación entre la cantidad de A y B inicial, incluir una gran cantidad de butadieno desde el comienzo del proceso produce valores bajos de conversión del polímero. Es por ello que se han estudiado procesos *semi-batch*, donde se inyecta un caudal de B a lo largo de la reacción de manera de obtener NBR-HA (Lightsey, 1998).

Desafortunadamente, la implementación de metodologías *semi-batch* basadas en control en lazo cerrado se ven limitadas por la dificultad para medir en línea la composición del copolímero. En este aspecto, surgen los SIs como potenciales herramientas para la implementación de estrategias en lazo cerrado. Los SIs pueden modelarse en base a datos (*data-driven*) o a modelos matemáticos detallados (Shokrya et al., 2018). Una metodología ampliamente aplicada en el modelado de SI basados en datos es la de redes neuronales recurrentes (RNN). En particular, las RNNs de memoria a corto-largo plazo (RNN-LSTM) han demostrado ser una herramienta de gran utilidad para la estimación y el monitoreo de variables en procesos *batch*. Tal es el caso de Ren y Ni (2020), donde se propuso una red codificadora-decodificadora basada en RNN- LSTM multicapa por lotes para el monitoreo de procesos *batch*.

La red extrae características dinámicas no lineales y obtiene estados ocultos para construir indicadores estadísticos. El método propuesto se evaluó en la fermentación de penicilina, presentando buenos resultados de estimación. Por otro lado, en [Lei et al. \(2022\)](#) se planteó un sensor inferencial basado en RNN-LSTM de aprendizaje profundo para estimar temperatura en el proceso de producción *batch* de aluminio. El modelo utiliza imágenes de temperatura del fundido como entradas a la red LSTM. Las estimaciones han demostrado ser más exactas que las metodologías clásicas, permitiendo realizar la medición en-línea de la temperatura del aluminio.

El presente trabajo propone una estrategia de control para la producción de NBR-HA a través de la inyección continua de B. La variable a controlar es la composición p_A . Debido a que no es posible medir en línea la composición del copolímero, se plantea el desarrollo de un SI para su estimación. El SI se constituye en base a una RNN-LSTM entrenada a partir de una base de datos generada mediante un modelo simplificado del proceso. Por otro lado, la metodología propuesta se evalúa sobre la base de un modelo detallado y basado en primeros principios del proceso, permitiendo evaluar el desempeño del lazo cerrado propuesto ante errores estructurales de modelado. Los resultados obtenidos mostraron un desempeño aceptable de la metodología propuesta, permitiendo operar en forma estable el proceso y obteniendo composiciones aceptablemente uniformes a lo largo de la reacción de copolimerización.

2 METODOLOGÍA

2.1 Lazo de control del proceso NBR

El principal desafío en la producción de caucho NBR-HA es el de mantener regulada la composición en valores superiores a los del punto azeotrópico. Para ello, se propone la estrategia de control en lazo cerrado indicada en la [Figura 1](#). La variable a controlar es la composición $p_A(t)$, y para ello se manipula la adición continua de un flujo molar de B. El agregado de B apunta a mantener estable la composición, ya que si se consume totalmente B, se produce la homopolimerización de A. Esta homopolimerización es una reacción de alta velocidad, produciendo una notable aceleración de la reacción y un incremento descontrolado de A en el copolímero ($p_A \rightarrow 1$), degradando las propiedades mecánicas del material final.

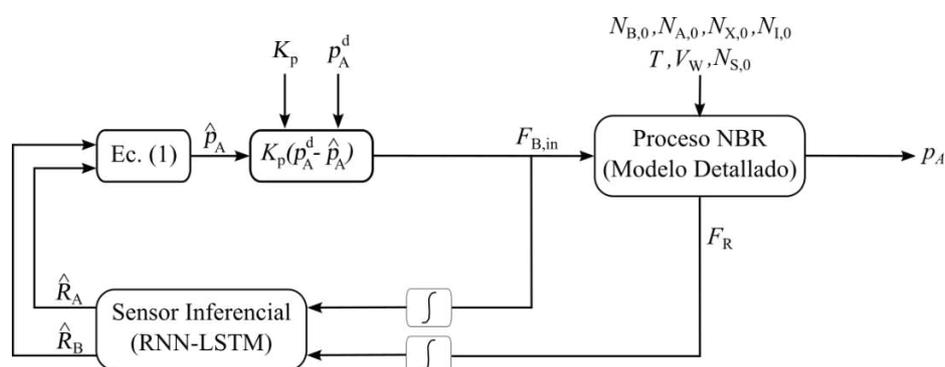


Figura 1: Diagrama de Flujo de lazo cerrado de proceso NBR para regulación de composición

Debido a que $p_A(t)$ es de difícil medición, se propone un SI para su estimación en línea. El control se basa en la estrategia clásica de análisis de error instantáneo estimado, $p_A^d - \hat{p}_A(t)$, donde el símbolo “^” representa el valor inferido. Se propone un control proporcional simple, sin agregado de componente integral debido a posibles inestabilidades en la predicción.

Como se observa en la [Figura 1](#), la estimación de $p_A(t)$ se obtiene en a partir de las

velocidades de polimerización, $\widehat{R}_A(t)$ y $\widehat{R}_B(t)$, las cuales se infieren mediante el SI propuesto. La Ec. (1) expresa la relación entre las velocidades de polimerización y la composición.

$$\widehat{P}_A = \frac{M_A \widehat{N}_{A,b}(t)}{M_A \widehat{N}_{A,b}(t) + M_B \widehat{N}_{B,b}(t)} = \frac{M_A \int_0^t \widehat{R}_A(t) dt}{M_A \int_0^t \widehat{R}_A(t) dt + M_B \int_0^t \widehat{R}_B(t) dt} \quad (1)$$

donde M_A (= 53.06 g/mol) y M_B (= 54.09 g/mol) son las masas molares de los monómeros A y B, $\widehat{N}_{A,b}$ y $\widehat{N}_{B,b}$ son los moles totales reaccionados de A y de B respectivamente.

2.2 Red neuronal LSTM para estimación de variables de calidad en proceso *batch*

En este trabajo se propone un SI para estimar las velocidades de polimerización implementado mediante una RNN-LSTM. Estas redes fueron diseñadas específicamente para tratar datos secuenciales, lo que las hace especialmente atractivas para los procesos *batch*. El funcionamiento básico es la estimación de valores instantáneos o futuros en función a información pasada del proceso.

Se considera una serie temporal de datos de entrada $\{x_1, x_2, x_3, \dots, x_t\}$, donde $t = 1, 2, 3, \dots, T$; siendo T el período de tiempo completo de un *batch*; $x_t \in \mathbb{R}^{n,m}$ el vector de entradas a la RNN-LSTM (en general, variables medibles); e $\widehat{y}_t \in \mathbb{R}^{n,l}$ la salida estimada. La Figura 2 presenta un diagrama de flujo del funcionamiento de la red. La inferencia en RNN se basa en un principio fundamental conocido como uso compartido de parámetros, donde para una secuencia determinada se utilizan los mismos conjuntos de parámetros en cada paso de cálculo, lo que permite obtener los denominados estados ocultos h_t . Estos estados se relacionan entre sí a través de las celdas de memoria, componentes principales de las RNN que retienen información de la secuencia por ciertos períodos de tiempo. Cada celda posee además un denominado estado de celda c_t .

Para un tiempo t , la primera capa recurrente recibe dos entradas: su propio estado oculto correspondiente h_{t-1}^1 , cuyo valor depende de las entradas a tiempos anteriores, y el elemento de entrada de la serie a tiempo t , x_t . Además, posee definido su propio estado de celda c_t . A partir de cálculos internos de esta primera celda se obtiene h_t^1 , y el proceso se repite para todas las celdas. Así, los estados ocultos de cada celda son las entradas secuenciales de la celda posterior. El cálculo continúa hasta que se obtiene el valor de estados ocultos de la última celda, lo que permite obtener \widehat{y}_t .

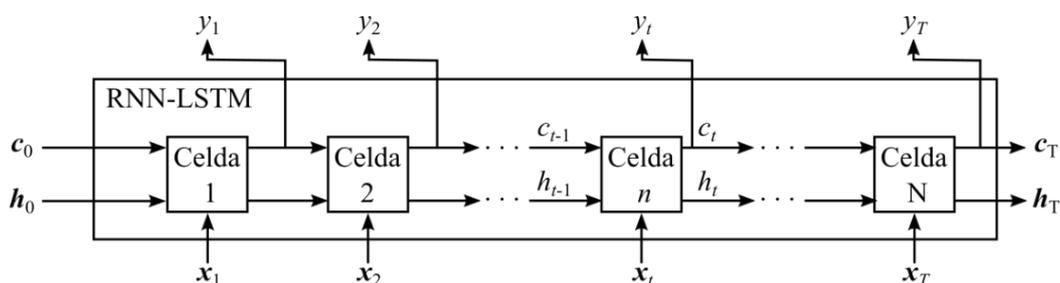


Figura 2: Esquema de red neuronal recurrente

La estructura de las celdas de memoria depende del tipo de RNN. Para el caso de LSTM, estas celdas se componen de cuatro puertas fundamentales: puerta de entrada i_t , puerta de olvido f_t , puerta de celda (o candidato de celda) g_t , y puerta de salida o_t (ver Figura 3). Los estados ocultos y de celda se relacionan según el sistema de Ec. (2):

$$\begin{aligned}
 i_t &= \sigma(W_{xi}x_t + b_{xi} + W_{hi}h_{t-1} + b_{hi}) \\
 f_t &= \sigma(W_{xf}x_t + b_{xf} + W_{hf}h_{t-1} + b_{hf}) \\
 g_t &= \tanh(W_{xg}x_t + b_{xg} + W_{hg}h_{t-1} + b_{hg}) \\
 o_t &= \sigma(W_{xo}x_t + b_{xo} + W_{ho}h_{t-1} + b_{ho}) \\
 c_t &= f_t * c_{t-1} + i_t * g_t \\
 h_t &= o_t * \tanh(c_t)
 \end{aligned} \tag{2}$$

donde W_{xi} , W_{hi} , W_{xf} , W_{hf} , W_{xg} , W_{hg} , W_{xo} y W_{ho} son las matrices de parámetros y b_{xi} , b_{hi} , b_{xf} , b_{hf} , b_{xg} , b_{hg} , b_{xo} y b_{ho} son los vectores de sesgo, los cuales se definen durante la etapa de entrenamiento de la red. Los símbolos σ y \tanh representan funciones de activación sigmoidea y tangente hiperbólica, respectivamente, y el símbolo “*” denota el producto de Hadamard.

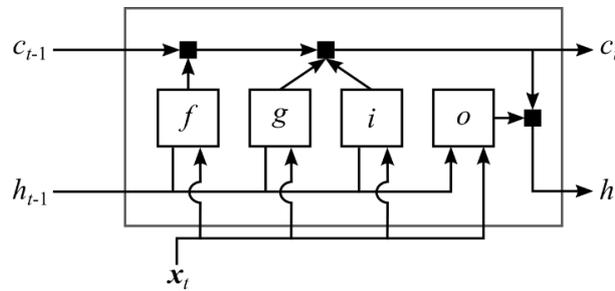


Figura 3: Diagrama de flujo de celdas de memoria y funcionamiento de puertas fundamentales

En la estructura de una celda LSTM, i_t determina la fracción de los valores de entrada que se incorporarán al estado actual de la celda; la puerta de olvido f_t determina hasta qué punto se deben conservar o descartar los estados pasados; y la puerta de salida o_t determina cuánto afecta el estado de la celda al estado oculto actual.

2.3 Entrenamiento y Testeo: Modelos simplificados y detallados del proceso NBR

En el presente trabajo se utilizaron dos modelos del proceso NBR: un modelo detallado basado en primeros principios (Vega et al., 1997) y un modelo simplificado obtenido a partir del modelo detallado (Clementi et al., 2018). Este último surge de aplicar hipótesis simplificadoras al modelo detallado, lo que disminuye su complejidad. Para mayor información sobre la obtención del modelo simplificado consultar Clementi et al. (2018).

Dada la exactitud del modelo detallado, el cual se ajustó a valores de planta y considera las dinámicas del proceso con un mínimo de simplificaciones, se asume este modelo como una representación aceptable del proceso. Así, y debido a la imposibilidad de utilizar el proceso industrial real, se evaluará el desempeño de la metodología propuesta sobre el modelo detallado. En consecuencia, el entrenamiento del SI basado en RNN-LSTM se realiza sobre la base del modelo simplificado, y el control en lazo cerrado se prueba sobre el modelo detallado. De esta forma, el desempeño de la metodología puede evaluarse en presencia de errores estructurales de modelado.

La Figura 4 presenta el esquema utilizado para el entrenamiento de la red sobre la base del modelo simplificado de la planta. El lazo de control se realiza mediante el monitoreo de $p_A(t)$ a través de R_A y R_B (ver Ec. (1)). Debido a que es un proceso de tipo *batch*, la riqueza de la información se refleja en la historia del proceso; es por eso que se utilizan como entradas del SI los flujos integrados de caudal de B y de refrigerante. Así, para el entrenamiento, se simulan

diferentes puntos de operación, se registran los flujos de butadieno y flujo refrigerante respectivos, y se registran también las velocidades de polimerización R_A y R_B . Se obtiene así una base de datos representativa de diferentes estados de operación del proceso, la cual se utilizará para entrenar el SI implementado mediante la RNN-LSTM.

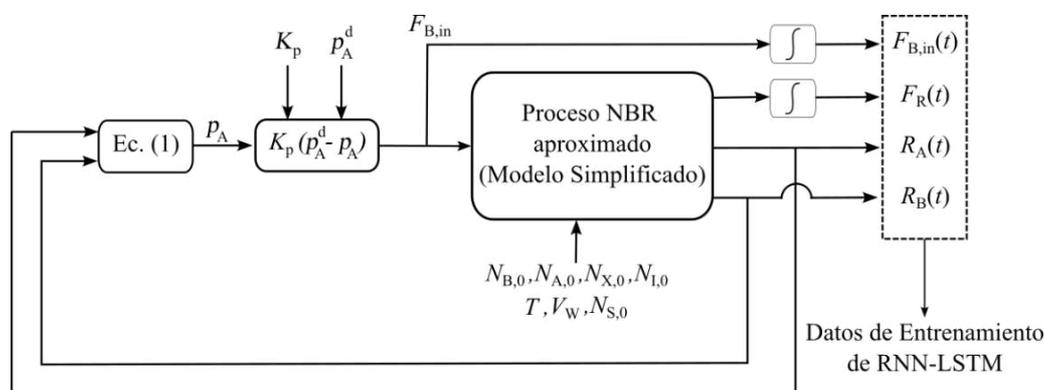


Figura 4: Diagrama de flujo de lazo cerrado para generación de datos de entrenamiento.

3 SIMULACIÓN Y RESULTADOS

3.1 Implementación del Sensor Inferencial

Con el fin de entrenar la RNN se simulan 81 operaciones del proceso (ver [Figura 4](#)) a partir de diferentes recetas (principalmente diferente número de moles iniciales de A y B; $N_{A,0}$ y $N_{B,0}$ respectivamente), diferentes valores de la ganancia proporcional K_p y de los valores finales de composición deseada. Cada una de las 81 operaciones se simula durante $T = 550$ min. Los valores adoptados por cada variable se resumen a continuación: $N_{A,0}$ desde 44000 a 46000 mol, a intervalos regulares de 1000 mol; $N_{B,0}$ desde 22000 mol a 24000 mol, con la misma regularidad que $N_{A,0}$; K_p desde 15000 a 25000 a intervalos regulares de 5000, y la composición final deseada con valores de 44, 45 y 46%. Para cada operación simulada, se registró $G_{R,t} = \int_0^T F_R(t) dt$, y $G_{B,t} = \int_0^T F_{B,in}(t) dt$, y R_A y R_B , a intervalos regulares de 1 min. Respecto al conjunto de entrenamiento obtenido, las [Figuras 5a-5d](#) presentan las señales normalizadas de entrada al SI, $G_{R,t}$ y $G_{B,t}$, las señales de salida al SI, R_A y R_B , y la variación de la composición p_A . Cada color en las [Figuras 5a, 5b y 5d](#) representa una operación *batch* diferente. Del total de registros obtenidos, el 70% es utilizado para entrenamiento, mientras que se reserva un 30% para validación.

La RNN requiere en su definición el seteo de los hiperparámetros que definen su arquitectura. Se plantea una búsqueda de grilla de estos hiperparámetros, para luego comparar los errores cuadráticos medios de cada una y escoger aquella que mejor desempeño presenta. Los hiperparámetros a definir son la cantidad de capas de la RNN, el número de neuronas de cada unidad oculta, el parámetro de regularización de la red y el número de épocas a entrenar. Los resultados de la búsqueda de grilla finalmente permitieron escoger: 3 capas LSTM con 100 unidades ocultas cada una; regularización de 2% y 3500 épocas de entrenamiento.

A manera de ejemplo, la [Figura 6a y 6b](#) compara las inferencias $\hat{R}_A(t)$ y $\hat{R}_B(t)$, la composición estimada a partir de ellas, y los valores obtenidos mediante el modelo simplificado de dichas variables para una operación *batch*. Se observa que las velocidades de polimerización pueden ser estimadas aceptablemente, resultando en una composición también aceptable, evidenciando un proceso de entrenamiento aceptable.

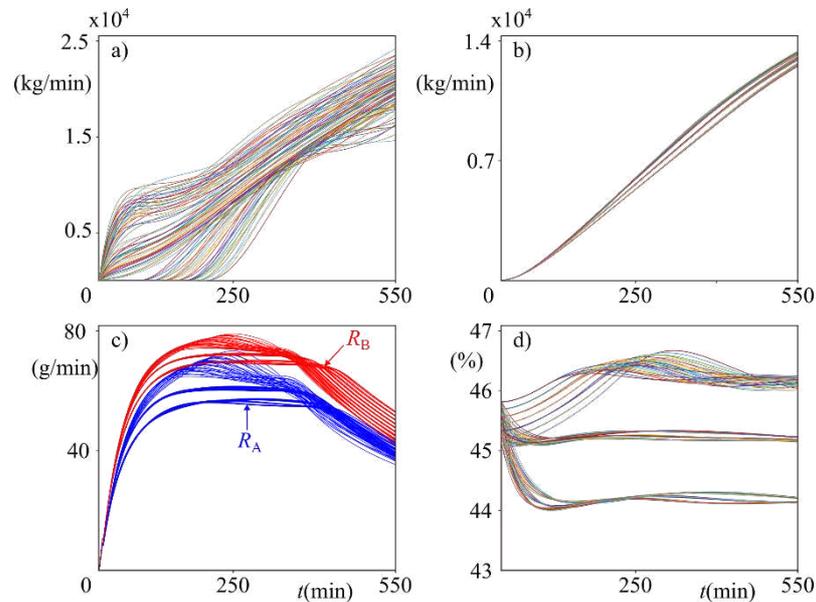


Figura 5: Datos de entrada y salida de SI utilizadas para entrenamiento de RNN-LSTM obtenidos en 81 operaciones *batch* de 550 minutos. a) Flujo de butadieno integrado y normalizado; b) flujo refrigerante integrado y normalizado; c) tasas de polimerización R_A y R_B ; d) composición p_A .

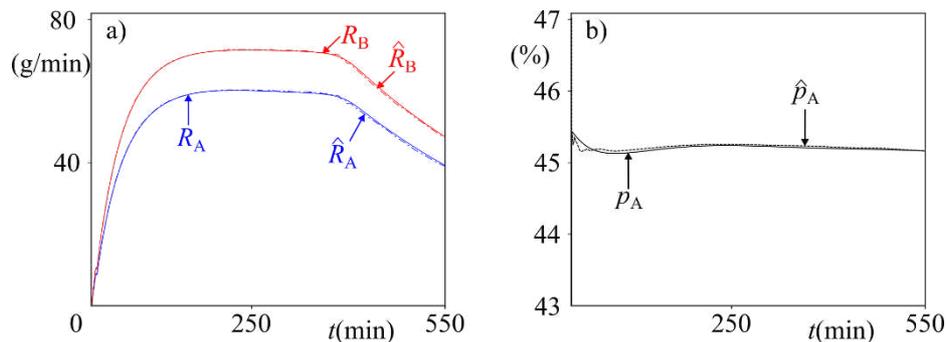


Figura 6: Validación de RNN-LSTM para la estimación de velocidades de polimerización y composición. a) Comparación de R_A (azul) y R_B (rojo) reales (línea continua) y estimadas (línea a trazos); b) comparación de p_A real (línea continua) y estimada (línea a trazos).

Con el fin de evaluar el desempeño de la metodología de control propuesta, se utiliza el error cuadrático medio (RMSE) como indicador de desempeño, según la Ec. (3):

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3)$$

donde el cálculo se aplica a las estimaciones de R_A y R_B , y de p_A .

3.2 Simulación de lazo cerrado en modelo detallado del proceso

Con el propósito de comprender la necesidad del agregado continuo de B en la operación del proceso NBR en condiciones por encima del punto azeotrópico, las [Figura 7a](#) y [7b](#) presentan las variables de relevancia del proceso en operación *batch* sin control del proceso en lazo cerrado. De la [Figura 7b](#), puede razonarse que aproximadamente al minuto 300, se consume por completo B, desencadenando así una homopolimerización de acrilonitrilo, generando un caucho con una composición global de 65%. No obstante, durante la etapa en la cual $N_B = 0$, todo el polímero sintetizado es homopolímero de A ($p_A = 1$). Esto se ve reflejado en el pico de

R_A , que simultáneamente resulta en un valor de R_B nulo (ver Figura 7a). De este ejemplo puede concluirse la importancia del control en lazo cerrado del proceso.

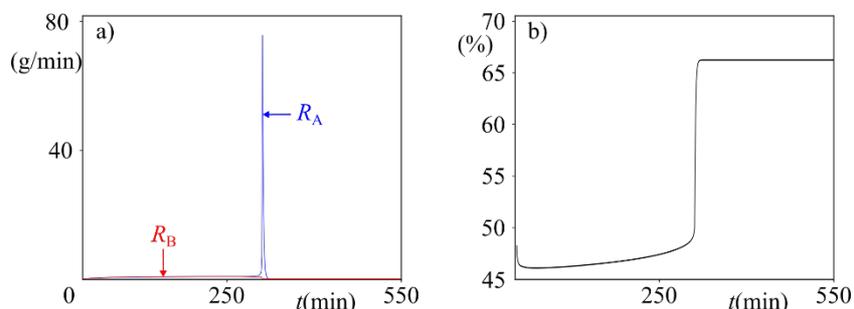


Figura 7: Variables químicas en proceso *batch* NBR sin lazo de control. a) Velocidades de polimerización (R_A azul, R_B rojo); b) composición p_A .

Para evaluar el desempeño de la metodología de control propuesta, utilizando el modelo detallado del proceso, se simularán tres casos de estudio alternativos. C_1 : operación normal del proceso *semi-batch*; C_2 : proceso con perturbación de $+1.5\text{ }^\circ\text{C}$ en la temperatura debido a un control deficiente de la misma, y C_3 : proceso llevado a cabo con un error de tipo *offset* de 15% en las mediciones del sensor de F_R . Nótese que se evalúa el desempeño de la metodología propuesta bajo condiciones de operación estándares, y en presencia de perturbaciones. También, nótese que la evaluación de la metodología se realiza sobre un modelo del proceso diferente al utilizado para entrenar el sensor RNN. Se evalúa en consecuencia la capacidad de generalización de la metodología de control ante errores de modelado.

Para los tres casos de estudio, se utiliza una receta no presentada a la red en el entrenamiento ni tampoco en el proceso de validación: $N_{A,0} = 43900$; $N_{B,0} = 23500$; y $K_p = 17000$. El valor del indicador RMSE de cada caso, así como la descripción de los mismos, se resumen en la Tabla 1. Las Figuras 8a-8f presentan los valores $F_{B,in}$ y F_R , y la composición p_A para cada caso de estudio. Se observa que, para C_1 (Figura 8a y 8b), mediante el flujo variable de B (Figura 8a) es posible regular la composición en un valor cercano a 45%. Además, el SI logra una estimación aceptable de \hat{p}_A con errores instantáneos máximos del orden del 0.2% (Figura 8b).

Con respecto a C_2 (Figura 8c-8d), se observa una mayor inyección de $F_{B,in}$ en los primeros minutos del *batch* y un aumento en la cantidad total de B inyectada en comparación a C_1 . Además, el incremento en la temperatura origina una mayor demanda de flujo refrigerante (ver Figura 8c). Nuevamente \hat{p}_A se aproxima al valor real de la variable, siendo el error RMSE aproximadamente igual al obtenido para C_1 (Figura 8d – Tabla 1). Es importante destacar que, para este tipo de funcionamiento anormal del proceso, aún con estimaciones que presentan error en ciertos períodos de tiempo, es posible regular aceptablemente la composición en el valor deseado.

Caso	Descripción	RMSE p_A
C_1	Operación estandar	0.0203
C_2	$+1.5\text{ }^\circ\text{C}$	0.0204
C_3	Offset de 15% en F_R	0.0204

Tabla 1: Descripción de casos de estudio

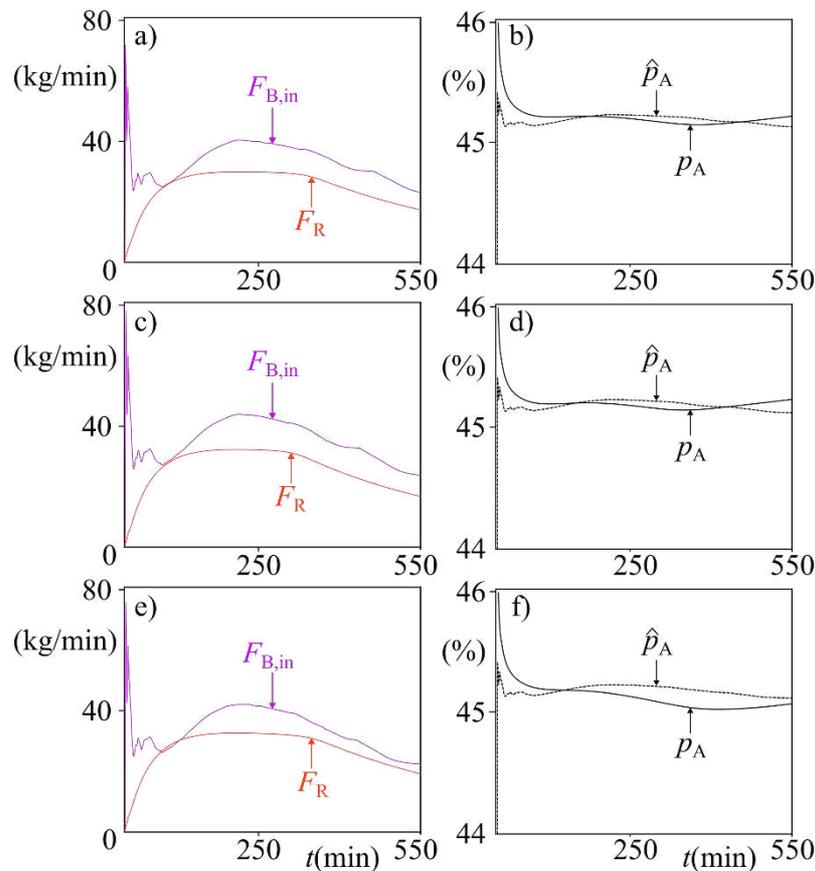


Figura 8: Análisis de variables para cada caso de estudio. C₁: Figuras 8a-8b; C₂: Figuras 8c-8d; C₃: Figuras 8e-8f. Descripción de Figuras por columnas: primera izquierda, variable controlada $F_{B,in}$ (violeta) y F_R (naranja); columna derecha, comparación de p_A real (línea continua) y estimada (línea a trazos)

Por último, en C₃ (Figura 8e-8f) se simula el funcionamiento anormal en el sensor de flujo refrigerante. Se pretende evaluar el efecto en cambios de las variables de entrada en el SI. La Figura 8e refleja la desviación de 15% en las mediciones de F_R , y el efecto que esta tiene en el flujo de inyección de butadieno, siendo este mayor. El resultado es una composición con mayores errores en la inferencia, como se observa en la Figura 8f. De todas formas, la variable puede controlarse en valores cercanos a los deseados.

4 CONCLUSIONES

En este trabajo se propone una estrategia de control para la producción de caucho NBR de alto contenido de acrilonitrilo. El control se realiza mediante el agregado continuo de butadieno con el objetivo de mantener la composición de A en un valor deseado. Esta variable es calculada a través de las estimaciones de las velocidades de polimerización. La estrategia ha presentado buenos rendimientos en la regulación de p_A , tanto en funcionamiento normal como en condiciones anormales debido a perturbaciones. El SI logra captar la dinámica asociada al proceso, y reacciona en forma positiva ante puntos de operación no enseñados en su aprendizaje. En futuros trabajos se prevé entrenar la RNN-LSTM con datos simulados en condiciones de inestabilidad, lo que no sólo aumentaría la robustez del SI, si no también le daría utilidad como detector de falla en el sistema.

REFERENCIAS

Clementi, L. A., Suvire, R. B., Rossomando, F.G., and Vega, J.R., A Closed-Loop Control

- Strategy for Producing Nitrile Rubber of Uniform Chemical Composition in a Semibatch Reactor: A Simulation Study. *Macro-molecular Reaction Engineering*, 12:1700054, 2018.
- Grimm, D. C. (1998). *Method for the Production of Nitrile rubber*. U.S. Patent: No. 5708132.
- Ji, C., Ma, F., Wang, J., and Sun W., Profitability related industrial-scale batch processes monitoring via deep learning based soft sensor development. *Computers & Chemical Engineering*, 170:108125, 2023.
- Lei, Y., Karimi, H. R., and Chen, X., A novel self-supervised deep LSTM network for industrial temperature prediction in aluminum processes application. *Neurocomputing*, 502:177-185, 2022.
- Lightsey, J. W. (1998). *Continuous Polymerization Process for Producing NBR Rubber having a High Bound Content of Acrylonitrile*. U.S. Patent: No. 5770660.
- Mowbray, M., Kay, H., Kay, S., Castro Caetano, P., Hicks, A., Mendoza, C., Lane, A., Martin, P., and Zhang, D., Probabilistic machine learning based soft-sensors for product quality prediction in batch processes. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 228: 104616, 2022.
- Qiu, K., Wang, J., Zhou, X., Wang, R., and Guo, Y., Soft sensor based on localized semi-supervised relevance vector machine for penicillin fermentation process with asymmetric data. *Measurement*, 202:111823, 2022.
- Qiu, K., Wang, J., Wang, R., Guo, Y., and Zhao, L., Soft sensor development based on kernel dynamic time warping and a relevant vector machine for unequal-length batch processes. *Expert Systems with Applications*, 182:115223, 2021.
- Ren, J., Ni, D., A batch-wise LSTM-encoder decoder network for batch process monitoring. *Chemical Engineering Research and Design*, 164:102-112, 2020.
- Shokry, A., Vicente, P., Escudero, G., Pérez-Moya, M., Graells, M., and Espuña, A., Data-driven soft-sensors for online monitoring of batch processes with different initial conditions. *Computers & Chemical Engineering*, 118:159-179, 2018.
- Vega, J.R., Gugliotta, L., Bielsa, R., Brandolini, M., and Meira, G., Emulsion copolymerization of acrylonitrile and butadiene. Mathematical model of an industrial reactor. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 36:1238-1246, 1998.