



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

Esta Tesis ha sido presentada como parte de los requisitos de la Universidad Nacional del Litoral, para la obtención del grado académico de Doctor en Tecnología Química

Métodos Estadísticos Multivariados para
Monitoreo y Control de Procesos.
Aplicación a Procesos de Polimerización

por

Bioing. José Luis Godoy

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC), dependiente de la Universidad Nacional del Litoral (UNL) y del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

Director:	Dr. Jacinto Luis Marchetti
Co-Director:	Dr. Jorge Ruben Vega
Miembros del Jurado:	Dra. Mabel Sánchez
	Dr. Guillermo E. Eliçabe
	Dr. David Zumoffen

Índice General

Resumen	v
Notación y acrónimos	vii
1 Introducción	1
1.1 Motivación.....	2
1.2 Objetivos.....	6
1.2.1 Objetivo general.....	6
1.2.2 Objetivos específicos.....	6
1.3 Estructura de la tesis.....	8
2 Sensor algorítmico para monitoreo de producción y calidad del caucho estireno-butadieno	11
2.1 Introducción.....	11
2.2 La estrategia de modelado PLSR.....	15
2.3 Diseño de experimentos.....	18
2.3.1 Determinación de los datos.....	18
2.3.2 Pre-procesamiento de los datos.....	19
2.4 Regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR).....	19
2.4.1 El algoritmo de modelado.....	19
2.4.2 Indicadores de bondad de ajuste.....	22
2.4.3 Análisis de la estructura del modelo.....	23
2.4.4 Selección del orden del modelo.....	25
2.5 Resultados y discusión.....	26
2.5.1 Análisis de la estructura del modelo PLSR.....	26
2.5.2 Modelo PLSR revisado.....	28
2.5.3 Determinación del orden del modelo final.....	30
2.5.4 Verificaciones pos-modelado.....	31
2.5.5 Simulación del proceso SBR con el sensor algorítmico en línea.....	34
2.5.6 Comparación de resultados con red neuronal artificial de Minari et al. (2007).....	35
2.6 Conclusiones.....	38
Apéndice 2.A Efecto de los errores de medición en la precisión de la predicción.....	39
3 Detección y diagnóstico de anomalías en base a descomposición PLSR del espacio de medición	41
3.1 Introducción.....	42
3.2 Extensión del Modelado PLSR.....	44
3.2.1 Descomposición PLSR de los espacios predictor y respuesta.....	46
3.3 Monitoreo de proceso basado en PLSR.....	48
3.3.1 Índices para detección de anomalías.....	49
3.3.2 Diagnóstico de anomalías mediante subespacios con alarmas.....	51
3.3.3 Identificación de variables responsables a través de sus contribuciones en cada subespacio.....	54
3.3.3.1 Análisis de la fiabilidad de las tareas de diagnóstico.....	56
3.4 Ejemplos de simulación.....	57
3.4.1 Monitoreo de un proceso instantáneo cíclico.....	57
3.4.2 Monitoreo de un proceso dinámico cíclico.....	60
3.4.3 Monitoreo de un reactor continuo controlado.....	65

3.5	Discusión.....	73
3.6	Conclusiones.....	74
	Apéndice 3.A Pruebas del Lema 1, y de los Teoremas 1 y 2.....	75
	Apéndice 3.B Límites de control.....	76
4	Monitoreo inferencial de calidad. Aplicación a un proceso SBR industrial	77
4.1	Introducción.....	78
4.2	Técnica de monitoreo inferencial de procesos.....	80
4.2.1	Límite de control multivariado modificado por la región de especificación.....	82
4.2.2	Identificación temprana de perturbaciones.....	84
4.2.3	Reconstrucción de lecturas defectuosas.....	87
4.2.4	Resumen de la técnica de monitoreo inferencial.....	88
4.3	Ejemplos de aplicación.....	89
4.3.1	Monitoreo inferencial de calidad y diagnóstico de anomalías en un proceso dinámico.....	89
4.3.2	Monitoreo inferencial de un proceso SBR industrial.....	93
4.3.2.1	Recolección del conjunto de datos bajo control.....	94
4.3.2.2	Escenarios de fallas.....	95
4.3.2.3	Selección del orden del modelo PLSR.....	96
4.3.2.4	Sistema de diagnóstico temprano.....	98
4.3.2.4.1	Identificación de perturbaciones en los reactivos alimentados.....	100
4.4	Conclusiones.....	102
	Apéndice 4.A Confiabilidad del índice combinado frente a límites de confianza.....	103
5	Comparación entre PCA y PLSR para el modelado y el monitoreo de procesos	105
5.1	Introducción.....	105
5.2	Monitoreo de procesos basado en descomposición PLSR de (X, Y)	108
5.2.1	Propiedades geométricas de PLSR relacionadas a PCA.....	110
5.3	Monitoreo de procesos basado en descomposición PCA de $[Y X]$	113
5.4	Análisis comparativo entre PCA y PLSR.....	114
5.4.1	Comparación de modelos latentes.....	114
5.4.2	Comparación de modelos de predicción.....	116
5.4.3	Comparación de técnicas de monitoreo.....	117
5.4.3.1	Comparación de índices para detección de fallas.....	117
5.4.3.2	Comparación de capacidades de diagnóstico.....	119
5.4.4	Visualización de analogías y diferencias a través de ejemplos de aplicación.....	119
5.5	Factores de similitud.....	127
5.6	Conclusiones.....	131
6	Monitoreo de procesos fuertemente no-lineales basado en Kernel PLS	133
6.1	Introducción.....	133
6.2	Regresión Kernel PLS (KPLS).....	134
6.3	Modelado basado en KPLS para monitoreo de procesos.....	138
6.3.1	Descomposición subyacente de los espacios predictor mapeado y respuesta.....	139
6.4	Monitoreo de procesos en base a KPLS.....	140
6.4.1	Índices para detección de anomalías.....	141
6.4.2	Diagnóstico de anomalías por medio de los subespacios alarmados.....	143
6.4.3	Aislación de fallas por medio de contribuciones en cada subespacio.....	144
6.5	Estudio de aplicación.....	146
6.5.1	Un ejemplo de simulación numérica no-lineal.....	146

6.6 Conclusiones.....	150
Apéndice 6.A.....	150
7 Conclusiones y perspectivas	153
7.1 Conclusiones generales.....	153
7.2 Perspectivas de trabajo futuro.....	156
Bibliografía	159

Resumen

El presente trabajo apunta a desarrollar, analizar y evaluar técnicas estadísticas multivariadas de interés para su aplicación a diversos procesos industriales. Específicamente, se investigan técnicas numéricas basadas en regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR) y, en forma más introductoria, en regresión por mínimos cuadrados parciales kernel (KPLS), que podrían aplicarse tanto a procesos continuos, semicontinuos o por lotes (batch).

Inicialmente, se presenta una metodología para construir y evaluar un sensor algorítmico PLSR capaz de monitorear adecuadamente la producción industrial de caucho estireno-butadieno (SBR). Dicha metodología intenta a su vez ofrecer una guía para otros desarrollos similares, sugiriendo atención sobre aspectos tales como: la recolección de datos con muestreo distribuido del espacio de operación, la eliminación de valores extremos (outliers), la selección apropiada del modelo inferencial (para no incluir variables que actúen como interferencias), la confirmación de la coherencia de los datos de calibración y de la precisión en el dominio de aplicación, y la validación del ajuste.

A continuación, se propone un modelado PLSR más completo, ampliando la proyección de las respuestas para desarrollar una descomposición de las mediciones con estadísticos específicos y herramientas de diagnóstico asociadas. Con esta base teórica se intenta desarrollar una técnica de monitoreo de procesos “completa”, en el sentido de lograr capacidad para detectar anomalías, clasificarlas, e identificar las variables responsables. Esta técnica utiliza un único índice para detección, el cual combina estadísticos específicos sin solapar sus dominios de aplicación, cubriendo la totalidad del espacio de medición. Mediante un modelo de anomalías se desarrolla la técnica de diagnóstico. La técnica propuesta se analiza mediante ejemplos simulados sencillos y fácilmente reproducibles, correspondientes a procesos instantáneos y dinámicos, la cual puede ser extendida para monitorear sistemas multivariados más complejos y a lazo cerrado. En este punto se ha simulado la operación de un reactor continuo con dos lazos de control a fin de evaluar no sólo el desempeño del reactor en sí, sino también el de sus controladores. La efectividad mostrada en las operaciones simuladas permite pensar en la potencial aplicación a sistemas reales de producción.

Para los procesos con variables de calidad no medibles en línea se presenta una técnica de monitoreo inferencial capaz de detectar una anomalía, clasificar su tipo e identificar las variables responsables. A fin de monitorear en forma inferencial la calidad multivariada

por medio de un único índice combinado se desarrolló un límite de control multivariado modificado por las especificaciones, para que forme parte de este índice de detección. Además, cuando se identifica una falla de sensor (anomalía localizada) se provee una reconstrucción de la lectura defectuosa para proporcionar inferencias más confiables. Esta técnica se aplica primero a un proceso dinámico simple para facilitar su interpretación, y después al simulador del proceso SBR industrial, permitiendo además identificar perturbaciones en las alimentaciones.

El análisis de componentes principales (PCA) está ampliamente difundido como herramienta para modelar estructuras de datos, predecir variables y monitorear procesos; y es recomendado a nivel internacional para su utilización en la industria. En tal sentido, este trabajo compara (analítica y numéricamente) las técnicas PLSR y PCA. En primer lugar se describen propiedades geométricas adicionales de PLSR que permiten comprender mejor su relación con PCA, y el efecto de la matriz de datos de variables de respuestas sobre la descomposición PLSR de la matriz de datos de variables predictoras. Se encuentran similitudes y diferencias entre PLSR y PCA, lo cual logra esclarecer la utilización de estos métodos. En particular, cuando se consideran las mismas variables en ambas técnicas, se presentan equivalencias en sus respectivos modelos predictivos y entre sus estadísticos. Además, se definen nuevos factores de similitud y se evalúa su capacidad discriminante.

Finalmente, se propone una técnica de monitoreo de procesos fuertemente no-lineales basada en el método KPLS (utilizado originalmente para predecir). Para ello, se desarrolló una descomposición KPLS (no-lineal) y estadísticos asociados a cada término, los que se combinan en un único índice. También, se presenta una técnica de diagnóstico derivada de los conceptos propuestos, que permite clasificar el tipo de anomalía e identificar las variables responsables.

Notación y acrónimos

En el presente documento se utilizará la siguiente notación:

0	Matriz o vector nulo
1	Matriz o vector de entradas unitarias
A	Número de variables latentes
$avg(R^2)$	Coefficiente de regresión multivariable cuadrático
$avg(sMSE)$	MSE (total) promediado sobre todas las respuestas
$\sqrt{avg(sMSE)}$	Error estándar promedio
B	Matriz de coeficientes de regresión t_a-u_a
$cI^2(z_i)$	Contribución normalizada de la variable z_i al índice I^2 (forma general)
$cI_{MX}(x_i)$	Contribución normalizada de x_i sobre S_{MX} a I_{TC}
$cI_{RX}(x_i)$	Contribución normalizada de x_i sobre S_{RX} a I_{TC}
$cI_{RY1}(x_i)$	Contribución normalizada de x_i sobre S_{MY} a I_{TC}
$cI_{RY1}(y_j)$	Contribución normalizada de y_j sobre S_{MY} a I_{TC}
$cI_{RY2}(y_j)$	Contribución normalizada de y_j sobre S_{RY} a I_{TC}
$d^2(\mathbf{x})$	Distancia estadística cuadrática de \mathbf{x}
$D_{\hat{\mathbf{x}}}$	Distancia estadística generalizada de $\hat{\mathbf{x}}$
$D_{\hat{\mathbf{y}}}$	Distancia estadística generalizada de $\hat{\mathbf{y}}$
$\delta_{x,\alpha}^2$	Límite de control α de SPE_x
$\delta_{y1,\alpha}^2$	Límite de control α de SPE_{y1}
$\delta_{y2,\alpha}^2$	Límite de control α de SPE_{y2}
D_x	Matriz diagonal con escalas de \mathbf{x}
D_y	Matriz diagonal con escalas de \mathbf{y}
G (q^{-1})	Función transferencia discreta
G₀	Matriz de ganancias
h_i	Apalancamiento de la i -ésima observación
I	Matriz identidad
I_j	Índice de aptitud para monitorear la respuesta y_j
I_C	Índice combinado inferencial
I_{Cm}	Índice combinado modificado
I_{TC}	Índice combinado total
I_{KPLS}	Índice combinado total basado en KPLS
I – PR'	Matriz proyector $\mathbf{x} \rightarrow \tilde{\mathbf{x}}$
I – QS'	Matriz proyector $\mathbf{y} \rightarrow \tilde{\mathbf{y}}_2$
$k(\cdot, \cdot)$	Función kernel
$\bar{\mathbf{k}}$	Vector de funciones kernel centradas y evaluadas en $(\mathbf{x}, \mathbf{x}_n)_{n=1..N}$
$\bar{\mathbf{K}}$	Matriz Gram kernel centrada
K^2	Límite de control multivariado modificado por especificaciones

$MSE(\hat{y}_j)$	Error cuadrático medio de predicción de la respuesta y_j
MC_p	Índice de capacidad multivariado
N	Número de observaciones del conjunto de calibración
\mathbf{P}	Matriz de pesos de \mathbf{t} (o de correlaciones \mathbf{t} - \mathbf{x})
\mathbf{P}_z	Matriz de pesos PCA de \mathbf{t}_z (o de correlaciones \mathbf{t}_z - \mathbf{z})
$\varphi(\cdot)$	Vector de funciones de mapeo no-lineal
\mathbf{PR}'	Matriz proyector $\mathbf{x} \rightarrow \hat{\mathbf{x}}$
\mathbf{QS}'	Matriz proyector $\mathbf{y} \rightarrow \hat{\mathbf{y}}^*$
\mathbf{Q}	Matriz de pesos de \mathbf{u} (o de correlaciones \mathbf{u} - \mathbf{y})
q^{-1}	Operador retardo unitario
\mathbf{R}	Matriz de proyección a \mathbf{t} ($\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{t}$)
$R(a+1)$	Tasa de cambio del error residual promedio
\mathbf{R}_x	Matriz de correlación del vector \mathbf{x}
\mathbf{R}_y	Matriz de correlación del vector \mathbf{y}
$R_x^2(a)$	Coefficiente de correlación en \mathbf{X} del a -ésimo componente
$R_y^2(a)$	Coefficiente de correlación en \mathbf{Y} del a -ésimo componente
\mathbf{S}	Matriz de proyección a \mathbf{u} ($\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{u}$)
S_{MX}	Subespacio modelo de $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$
S_{RX}	Subespacio residuo de $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$
S_{MY}	Subespacio modelo de $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$
S_{RY}	Subespacio residuo de $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$
SF_{PCA}	Factor de similitud PCA entre dos conjuntos de datos
SF_{PLSR}	Factor de similitud PLSR entre dos conjuntos de datos
SPE	Error cuadrático de predicción (o distancia al modelo)
SPE_x	Distancia al modelo de \mathbf{X} en S_{RX}
SPE_{y1}	Distancia al modelo de regresión en S_{MY}
SPE_{y2}	Distancia al modelo de \mathbf{Y} en S_{RY}
SPE_F	Distancia al modelo en W_R
$\sigma(t_a)$	Desvío estándar de t_a
$\sigma(u_a)$	Desvío estándar de u_a
Σ_x	Matriz de covarianza de \mathbf{x}
t_a	a -ésima variable latente
\mathbf{t}	Vector de coordenadas latentes sobre S_{MX}
\mathbf{T}	Matriz de observaciones de \mathbf{t} ($N \times A$)
T^2	Estadístico de Hotelling
T_t^2	Distancia estadística en S_{MX} (T^2 de Hotelling de \mathbf{t})
τ_α^2	Límite de control de T_t^2 para un nivel de significancia α
θ_x	Ángulo mínimo entre los subespacios complementarios S_{MX} y S_{RX}
θ_y	Ángulo mínimo entre los subespacios complementarios S_{MY} y S_{RY}
\mathbf{u}	Vector de coordenadas latentes sobre S_{MY}
\mathbf{U}	Matriz de observaciones de \mathbf{u} ($N \times A$)
$\mathbf{v}(k)$	Vector de variables manipuladas en el instante k
VIP_k	Importancia predictiva de la k -ésima variable predictora

W_M	Subespacio modelo dentro del espacio de alta dimensión
W_R	Subespacio residuo dentro del espacio de alta dimensión
\mathbf{X}	Vector predictor (columna)
$\hat{\mathbf{x}}$	Proyección de \mathbf{x} sobre S_{MX}
$\tilde{\mathbf{x}}$	Proyección de \mathbf{x} sobre S_{RX}
\mathbf{x}^r	Vector predictor reconstruido
$\bar{\mathbf{x}}$	Vector promedio de \mathbf{x}
\mathbf{X}	Matriz predictor ($N \times m$)
(\mathbf{X}, \mathbf{Y})	Conjunto de calibración
\mathbf{Y}	Vector respuesta (columna)
$\hat{\mathbf{y}}^*$	Proyección de \mathbf{y} sobre S_{MY}
$\tilde{\mathbf{y}}_2$	Proyección de \mathbf{y} sobre S_{RY}
$\hat{\mathbf{y}}$	Parte predecible de $\hat{\mathbf{y}}^*$ a partir de $\hat{\mathbf{x}}$
$\tilde{\mathbf{y}}_1$	Error de la transformación $\hat{\mathbf{x}} \rightarrow \hat{\mathbf{y}}^*$
$\mathbf{y}(k)$	Vector respuesta en el instante k
$\bar{\mathbf{y}}$	Vector promedio de \mathbf{y}
\mathbf{Y}	Matriz respuesta ($N \times p$)
$\mathbf{z} = [\mathbf{y}' \ \mathbf{x}']'$	Vector de mediciones (columna)
$\mathbf{Z} = [\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$	Matriz de datos ($N \times p+m$)

Cualquier alteración circunstancial de esta notación, será oportunamente aclarada.

Acrónimos derivados del inglés:

MSPM	Monitoreo estadístico de procesos multivariados
PLSR	regresión por cuadrados mínimos parciales
KPLS	regresión por cuadrados mínimos parciales basado en kernel
PAT	Tecnología Analítica de Procesos
FDA	Administración de Alimentos y Medicamentos
SBR	Caucho estireno-butadieno
FPM	Modelo de primeros principios
LHS	Muestreo latino del hipercubo
MSE	Error cuadrático medio
ARX	Autorregresivo con entrada exógena
MIMO	Sistema con múltiples entradas y salidas
SVD	Descomposición en valores singulares
PCA	Análisis de componentes principales
ICA	Análisis de componentes independientes
SVM	Maquina de soporte vectorial
ANN	Red neuronal artificial
PCR	Regresión de componentes principales
CCR	Regresión de coordenadas canónicas
MPLS	PLS Multi-modo
NNPLS	PLS no-lineal basado en redes neuronales
RPLS	PLS Recursivo
EWPLS	PLS pesado exponencialmente
MPC	Control Predictivo basado en Modelo
LV-MPC	Control Predictivo basado en Modelo de Variables Latentes

Capítulo 1

Introducción

La tecnología de estadística multivariada es la ciencia de separar la señal del ruido en datos con muchas variables y presentar esta información en un formato gráfico. Por ejemplo, posibilita pasar de una complicada tabla de números a un gráfico sencillo de lo esencial. Una gran ventaja del enfoque multivariado es que se descubren correlaciones entre las variables, que son en realidad la llave para abrir y mejorar los procesos.

Hoy en día, varias técnicas de monitoreo de proceso y desempeño de controladores, pueden proveer medios algorítmicos económicos para asegurar y mantener la calidad y seguridad del proceso sin recurrir a inversiones costosas en hardware. Estas técnicas también ayudan a maximizar la utilidad y eficiencia del hardware existente.

El objetivo de monitoreo estadístico de procesos multivariados (MSPM) es detectar la ocurrencia y la naturaleza de cambios operativos que causan que un proceso se desvíe de su objetivo deseado. La metodología para detectar cambios se basa en técnicas estadísticas que tratan con la recolección, clasificación, análisis e interpretación de los datos. Por lo tanto, esta metodología necesita de tareas de diagnóstico posteriores que faciliten la localización de la causa raíz del cambio en el proceso y que permita a los operadores del proceso tomar las medidas necesarias para corregir la situación, retornando así a las condiciones de operación deseada.

Las tareas de detección y diagnóstico se pueden realizar sobre las mediciones del proceso para obtener una perspectiva crítica en el desempeño no sólo del propio proceso, sino también del sistema de control automático que se implementa para asegurar el funcionamiento normal. Hoy en día, la integración de estas tareas con el software de control de procesos (sistema de control distribuido) están en desarrollo. Las tecnologías siguen avanzando, especialmente en la incorporación de estadística multivariada. Una prueba importante de esto es la Tecnología Analítica de Procesos (PAT) requerida por la Agencia de Alimentos y Medicamentos (FDA) (Guidance for industry PAT-FDA, 2004). La PAT tiene como objetivo comprender y controlar el proceso de fabricación. La FDA ha identificado las técnicas estadísticas multivariadas para diseño, adquisición de datos y análisis como esencial para obtener una comprensión del proceso.

Esta tesis intenta realizar aportes en esta área: evaluación del desempeño de procesos químicos o bioquímicos en general y, en particular, procesos de polimerización. Además, esta tesis pretende ser un recurso y una fuente de referencia para aquellos que estén interesados en evaluar el potencial de estas técnicas para aplicaciones específicas, y aprender sus fortalezas y limitaciones. Este capítulo introductorio presentará las motivaciones que impulsaron en general los desarrollos propuestos en esta tesis.

1.1 Motivación

Por iniciativa de la sección PAT de la FDA se ha estimulado a las compañías farmacéuticas a buscar nuevas herramientas quimiométricas que ayuden con las tareas de monitoreo y control de procesos (Guidance for industry PAT-FDA, 2004). Por iniciativa de PAT se ha pedido un esfuerzo a toda la industria para utilizar: “adquisición de datos multivariados y herramientas de análisis estadístico multivariado, modernos analizadores de proceso o herramientas de química analítica de proceso, herramientas de monitoreo y control de proceso o de punto final del proceso, y herramientas de mejora continua y de gestión del conocimiento (Guidance for industry PAT-FDA, 2004)”. Estos esfuerzos han permitido mejorar la comprensión de los procesos y promueven la mejora continua de los mismos. El análisis de datos multivariados, tales como las técnicas quimiométricas, proporcionan un medio útil para mejorar la comprensión de los procesos. Durante la fabricación de productos farmacéuticos, se recogen una gran cantidad de datos mientras se elabora un lote (o batch). El análisis de una cantidad tan grande de datos es más fácil de realizar utilizando técnicas multivariadas, que combinan los efectos de correlación multivariada en un pequeño número de variables ficticias (o latentes). Esta característica es una mejora sobre los métodos univariados que requieren inspeccionar todos los datos e ignorar los efectos multivariados. Técnicas multivariadas se han aplicado en una serie de bioprocesos, como por ejemplo, fermentación, cultivo de células, etc. (Alford, 2006; Lopes et al., 2004; Junker y Wang, 2006; Gunther et al., 2009). Actualmente, la mayoría de las industrias farmacéuticas importantes han auditado sus sistemas PAT desarrollados en base a software de Umetrics (www.umetrics.com), los cuales se basan principalmente en análisis de componentes principales (PCA) y regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR).

En la mayoría de los procesos industriales, los operadores ajustan las variables manipuladas para mantener la calidad del producto o de los residuos dentro de las especificaciones o de las reglamentaciones gubernamentales. La tarea generalmente se

realiza utilizando analizadores en línea y/o pruebas de laboratorio. Debido al mal funcionamiento de los analizadores o a los retrasos en las pruebas de laboratorio, los sensores algorítmicos (o “soft-sensors”) pueden auxiliar infiriendo las respuestas de calidad a partir de otras variables del proceso y proporcionando así información útil para regular la operación del proceso.

Las aplicaciones de sensores algorítmicos han atraído significativamente la atención en la industria de procesos (Kadlec et al., 2009). Hay dos categorías principales de desarrollo de sensores algorítmicos: los modelos de primeros principios y los modelos guiados por los datos. Un modelo físico de primeros principios se puede obtener del conocimiento fundamental del proceso. Sin embargo, debido a la complejidad de la mayoría de los procesos de fabricación, estos modelos fundamentales o bien requieren de mucho esfuerzo y tiempo para desarrollarlos, o son demasiado simplistas para ser precisos en la práctica. Por otro lado, los modelos guiados por datos pueden potencialmente proporcionar información precisa para una región de operación determinada. Estos modelos se construyen por medio de métodos de regresión multivariada (Burnham et al., 1996), tales como la regresión de componentes principales (PCR), la regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR), y la regresión de coordenadas canónicas (CCR). Estos modelos suelen ser lineales y por lo tanto carecen de la capacidad de extrapolar confiablemente a diferentes regiones de operación. Para cubrir una amplia región de operación, se pueden utilizar modelos no lineales construidos a partir de redes neuronales artificiales (ANN) (De Assis y Filho, 2000), máquinas de soporte vectorial (SVM) (Yan et al., 2004), y regresiones por mínimos cuadrados parciales basada en kernel (KPLS) (Zhang et al., 2008). En comparación con otros métodos no lineales, la principal ventaja de KPLS es que evita la optimización no lineal utilizando la función kernel correspondiente al producto interno en el espacio de características. Como resultado, KPLS esencialmente sólo requiere álgebra lineal, por lo que es tan simple como PLSR estándar (Kim et al., 2005). Por otra parte, KPLS puede manejar una amplia gama de no-linealidades debido a su capacidad de utilizar diferentes tipos de funciones kernel. Por lo tanto, resulta interesante investigar los distintos aspectos y usos de los métodos basados en PLSR y KPLS a fin de mejorar su aplicación.

En procesos de mediana y gran escala, tales como la fabricación de químicos, alimentos, acero, etc., hay un gran número de variables controladas y manipuladas. La naturaleza multivariada de la mayoría de estos procesos presenta variables altamente correlacionadas y con una dimensión efectiva mucho menor del subespacio en que se mueven las variables latentes. Los métodos de proyección en variables latentes pueden transformar datos

correlacionados y ruidosos en un conjunto informativo más pequeño y libre de mal condicionamiento. Técnicas como PCA y PLSR permiten ajustar un modelo utilizando un conjunto de identificación que podría haber sido originalmente mal condicionado. Muchos estudios realizados en los últimos años han puesto de manifiesto cómo estos métodos pueden ser utilizados con éxito para: el ajuste de modelos multivariados (Kiers y Smilde, 2007), el control de procesos batch (Flores-Cerrillo y MacGregor, 2005), el control de procesos sin contar con mediciones en línea de variables de calidad (Chen et al., 1998; McAvoy, 2002); el desarrollo de soft-sensors (Kano et al., 2009), la detección de fallas y anomalías en el proceso (Venkatasubramanian et al., 2003; Kourti, 2005), el procesamiento de valores perdidos en el conjunto de datos (Nelson et al., 1996), el monitoreo del estado de un sistema de control multivariado industrial (AlGhazzawi y Lennox, 2009), la detección de falla de sensor y reconstrucción (Liu et al., 2010), y la concordancia de patrones (Gunther et al., 2008). De lo anterior surge el interrogante, aún no esclarecido completamente, de cuál será el mejor método (PCA o PLSR) en cada aplicación (monitoreo de proceso, predicción en línea, etc.). Por lo tanto, surge la necesidad de comparar en profundidad los métodos PCA y PLSR a fin de determinar sus bondades y falencias.

Además de los distintos tipos de aplicaciones que presenta, el algoritmo PLSR (lineal) original presenta también derivaciones para que sea aplicable a problemas no-lineales, como PLS de múltiples vías (MPLS) (Bro, 1996), PLS con red neuronal (NNPLS) (Qin y McAvoy, 1992) y Kernel PLS (KPLS); y otra derivación es para que sea adaptativo como PLS recursivo (RPLS) (Qin, 1998) y PLS ponderado exponencialmente (EWPLS) (Dayal y MacGregor, 1997b) basado en la técnica de ventana móvil. A su vez existen varios algoritmos alternativos para ajustar el modelo PLSR lineal (Hoskuldsson A., 1988; Gang et al., 2010).

La Tabla 1.1 muestra la distribución de aplicaciones de los distintos métodos computacionales para construir modelos predictivos (“soft sensors”) y en ella se observa claramente la tendencia actual en el desarrollo de aplicaciones. Los métodos más populares son los estadísticos multivariados, es decir, PCA y PLSR, que en conjunto cubren el 38% de las aplicaciones presentadas en la revisión realizada por Kadlec et al. (2009). Otro método muy aplicado es el basado en redes neuronales artificiales (ANN), como el MLP (Perceptron Multi-Capa) con un 18% (Bishop, 1995). Sin embargo, los modelos de caja negra basados en ANN no revelan una relación transparente entre las variables de calidad y las variables del proceso. En consecuencia, los modelos inversos para fines de control no se

pueden obtener fácilmente. PLSR es menos aplicado que PCA y ANN en la industria de procesos siendo que es más intuitivo y posee una cantidad similar de publicaciones que las referidas a PCA o ANN. Esto se debe a la gran cantidad de variantes que posee esta técnica y a la falta de rigurosidad teórica en algunas de sus publicaciones. Por lo tanto, surge la necesidad de un marco unificador para el desarrollo, el análisis y la evaluación de modelos PLSR, buscando una conciliación de las diferentes variantes en un único marco. También se considera necesario mejorar la descripción del modelado basado en PLSR, a fin de asegurar la validez del modelo en las distintas aplicaciones en que se lo utiliza.

Tabla 1.1: Distribución de los métodos de aprendizaje computacional corrientemente aplicados en sensado algorítmico (datos tomados de Kadlec et al., 2009).

Método	Sigla	Porcentaje de aplicación
Análisis de componentes principales	PCA	23%
Regresión por mínimos cuadrados parciales	PLSR	15%
Perceptron multi-capa	MLP	18%
Red de funciones de base radial	RBFN	7%
Mapa autoorganizado	SOM	2%
Red neuronal recursiva	RNN	7%
Máquina de soporte vectorial	SVM	5%
Sistemas neuro-difuso	NFS	10%
Regresión multivariada clásica	CMR	3%
Misceláneos	---	10%

Los procesos de polimerización suelen ser bastante complejos, e incluyen normalmente un número importante de variables asociadas a la calidad del producto, las cuales son difíciles de medir en tiempos lo suficientemente reducidos como para implementar un lazo de control en tiempo real (Eliçabe y Meira, 1988; Dimitratos et al., 1994; Richards y Congalidis, 2006). Por lo tanto, la aplicación de sensores algorítmicos permite estimar en línea variables tales como la conversión, la composición, los pesos moleculares, etc., a partir de mediciones factibles como de caudales de reactivos y de calores de reacción. El monitoreo y control de estos procesos es de gran interés a fin de optimizar sus productos y especificaciones.

Libros de textos recomendados para abordar temas como análisis estadístico multivariado, calibración multivariable, quimiometría, y reconocimiento de patrones - aprendizaje de máquina, monitoreo estático de procesos multivariados, y control de reactores químicos son respectivamente Johnson y Wichern (1998), Martens y Naes

(1998), Otto (1999), Bishop (2006), Taylor y Cristianini, Cinar et al. (2007) y Luyben (2007). Sin embargo, no se encontraron libros de textos referentes a regresión no lineal basada en KPLS. Por otro lado, se ha notado un creciente y repentino interés en su aplicación al monitoreo de procesos multivariados (Kim et al., 2005; Woo et al., 2009; Zhang et al., 2008).

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo general

El problema de extraer información útil a partir de datos obtenidos en línea se potencia cuando las mediciones se capturan en un ambiente ruidoso, las variables están correlacionadas entre sí y resultan ser susceptibles a perturbaciones de diversos orígenes, como ocurre en la mayoría de las operaciones industriales. Desde un punto de vista amplio, la tarea que se propone en esta tesis tiene como objetivo incrementar el conocimiento y dominio de los métodos de análisis estadístico multivariado con el fin de desarrollar nuevas técnicas de control aplicables en la industria de procesos. La exploración teórica de nuevas modalidades del tratamiento de datos debe contribuir a la detección, la interpretación y la explotación de la información subyacente en las mediciones (obtenidas durante la operación del proceso productivo) con el objetivo de mejorar las condiciones de operación y las características de calidad de los productos asociados. La problemática es de particular interés en el manejo de procesos de polimerización, donde el enfoque clásico del control de procesos puede resultar no sólo poco robusto sino además, poco eficiente. Esto se debe principalmente a la infactibilidad física o económica para medir en tiempo real las principales variables de productividad y calidad del proceso. Es por esto último que, como objetivo de aplicación inmediata, se intentará resolver una serie de problemas que actualmente presentan algunos procesos de polimerización.

1.2.2 Objetivos específicos

La exploración teórica, de simulaciones y experimental, (necesaria para entender e interpretar todos los recursos del modelado matemático implícito en las distintas formas de tratamiento estadístico multivariado hoy disponibles, aplicables a reactores continuos, semi-batch, y batch) debe conducir luego a la propuesta de nuevas modalidades del tratamiento de datos. Dentro de este contexto, algunos objetivos a seguir son:

1. Introducir gráficamente los conceptos claves con el uso de unos pocos ejemplos elegidos a fin de describir las técnicas multivariadas en forma práctica y realizar presentaciones gráficas intuitivas de los resultados (Cap. 2-6).
2. Desarrollar una metodología completa para construir y evaluar un modelo inferencial (o sensor algorítmico) utilizando PLSR, a fin de monitorear procesos instantáneos (Cap. 2) y luego extender esta metodología a procesos dinámicos (Cap. 3).
3. Desarrollar un sensor algorítmico para monitorear en línea un proceso industrial de producción de caucho (Cap. 2).
4. Mejorar el modelado basado en PLSR de sistemas o procesos multivariados con variables correlacionadas (Cap. 3) a fin de completar su descripción y mejorar su interpretación.
5. Desarrollar una descomposición PLSR de los espacios de mediciones, utilizando una perspectiva geométrica a fin de crear mejores herramientas interpretativas y de diagnóstico (Cap. 3).
6. Desarrollar nuevos estadísticos específicos asociados a los diferentes términos que resulten de la descomposición PLSR, investigar las relaciones entre ellos y desarrollar un índice que los combine eficientemente sin solapar sus dominios de aplicación (Cap. 3).
7. Ampliar la comprensión de la estructura del modelo latente inducido por el algoritmo de ajuste PLSR, analizándolo analíticamente y experimentalmente por medio de simulaciones con sistemas o procesos ad-hoc (Cap. 2-5).
8. Desarrollar una técnica completa de monitoreo de procesos, basada en PLSR, involucrando detección y diagnóstico de anomalías e identificación de variables responsables. Evaluar su desempeño con ejemplos de aplicación que comprendan procesos instantáneos, dinámicos y dinámicos no-lineales (reactor controlado). Esta técnica no debe poseer mayores diferencias en su aplicación si el proceso es instantáneo o dinámico y debe poder diagnosticar todas las anomalías estudiadas como: cambios de la planta respecto al modelo, cambios de operación, fallas de sensores, perturbaciones, etc. (Cap. 3).
9. Desarrollar un límite de control multivariado modificado por las especificaciones de calidad (Cap. 4).
10. Desarrollar una técnica de monitoreo inferencial de procesos, involucrando detección y clasificación de anomalías, identificación de variables afectadas y

reconstrucción de lecturas defectuosas (según sea el caso) antes de predecir las respuestas del proceso. Evaluar su aplicación en un proceso dinámico ad-hoc. (Cap. 4). Desarrollar un sistema de monitoreo estadístico inferencial -a escala industrial- de variables de interés asociadas al proceso de polimerización continua en emulsión (SBR), desarrollado en un tren de reactores agitados continuos.

11. Comparar analítica y numéricamente las técnicas PCA y PLSR en sus aplicaciones para modelar estructuras latentes, predecir y monitorear procesos, buscando analogías y diferencias. Desarrollar y evaluar nuevos factores de similitud entre patrones (Cap. 5).
12. Adecuar y extender la metodología para construir y evaluar un modelo PLSR al caso KPLS aplicable a procesos fuertemente no-lineales. Evaluar su aplicación en un proceso ad-hoc (Cap. 6).
13. Completar el modelado basado en KPLS, desarrollar una descomposición KPLS de los espacios de mediciones y definir estadísticos asociados a cada uno de sus términos. Analizar la relación entre ellos a fin de combinarlos en un único índice de detección. Evaluar su aplicación en un proceso ad-hoc (Cap. 6).
14. Extender la estrategia diagnóstica al caso KPLS y desarrollar herramientas de análisis que permitan identificar las variables responsables de las anomalías detectadas. Evaluar su aplicación en un proceso ad-hoc (Cap. 6).

Del punto de vista metodológico, todos los desarrollos incluirán simulaciones numéricas y posteriores validaciones de resultados.

1.3 Estructura de la tesis

Los sistemas de monitoreo basados en modelos latentes son las principales herramientas con claras proyecciones industriales. Estas técnicas, que poseen variantes y complementos, se han estudiado durante décadas. Si bien existen innumerables aplicaciones industriales, el soporte teórico aún posee pautas intuitivas en su aplicación, y tampoco se han esclarecido formalmente algunos puntos. Con el objetivo de aportar a estos temas, esta tesis pretende dar un soporte teórico con demostraciones formales y verificaciones numéricas en procesos de prueba para cada estrategia propuesta. La metodología seguida en cada capítulo consistió en desarrollar el marco teórico que sustenta la herramienta, visualizar los conceptos, validar las estrategias con ejemplos numéricos específicos para su aplicación, y por último aplicar a un proceso real. Esto permitió dilucidar más claramente cada concepto

introducido y la visión integral de la herramienta, facilitando su futura aplicación industrial.

Siguiendo estas pautas se pudieron unificar criterios y extender resultados a diferentes estructuras de datos y tipos de procesos, lo cual se resume en el diagrama de flujo de los trabajos realizados (ver Fig. 1.1), donde se presenta la relación entre los capítulos y la transferencia de los principales conceptos entre los mismos. Además, la Fig. 1.2 muestra los principales tópicos perseguidos durante la investigación realizada.

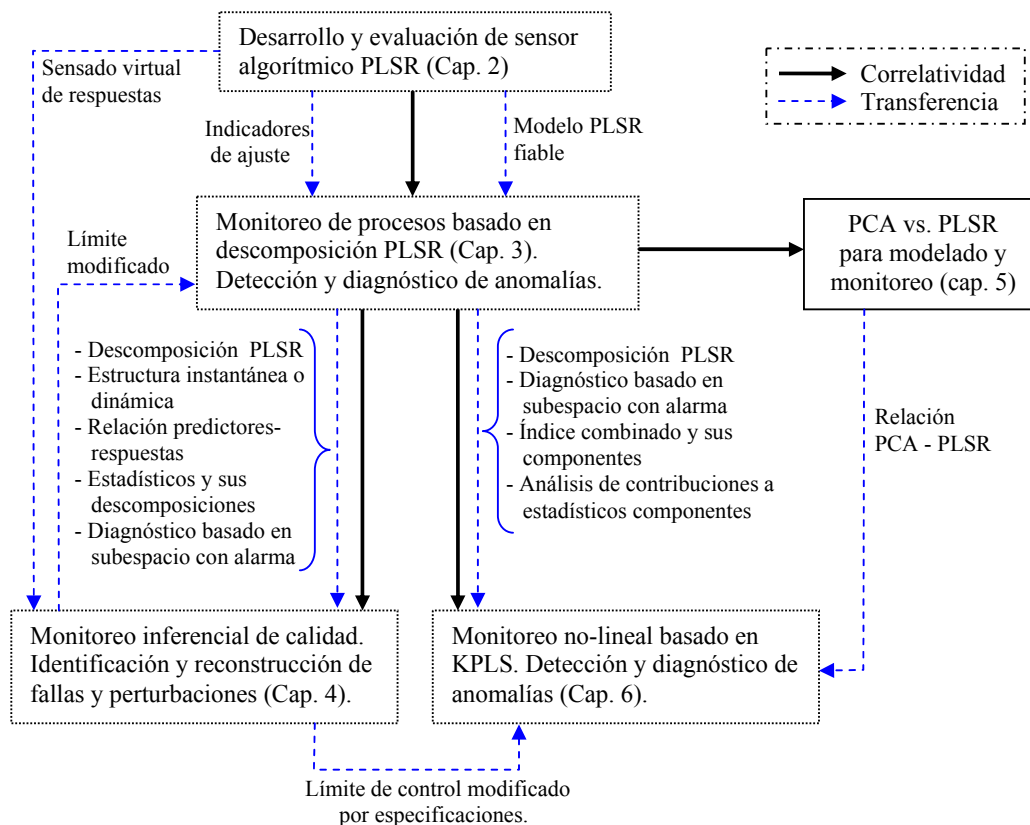


Figura 1.1: Diagrama de correlatividades de capítulos y transferencias de conceptos.

En resumen, la estructura de la tesis es como sigue. El capítulo 1 está destinado a una introducción a los métodos estadísticos multivariados abordados, con principal énfasis en las motivaciones de esta tesis y, a su vez a orientar sobre las relaciones entre los capítulos que la seguirán. Los capítulos 2 a 6 forman los desarrollos de la presente tesis, pasando por las distintas aplicaciones que aquí se investigan. En el capítulo 2 se desarrolla y evalúa un sensor algorítmico para su aplicación al monitoreo en línea de un proceso SBR. En el capítulo 3 se desarrolla una técnica de monitoreo de procesos basada en descomposición

PLSR, incluyendo detección y diagnóstico de anomalías e identificación de variables responsables. En el capítulo 4 se presenta una técnica de monitoreo inferencial que involucra detección y clasificación de anomalías (considerando las especificaciones de las variables de calidad no medibles en línea) seguida por identificación de variables afectadas y reconstrucción de lecturas defectuosas. En el capítulo 5 se efectúa la comparación entre PCA y PLSR a fin de determinar sus beneficios y falencias para modelar estructuras latentes, predecir las respuestas, y monitorear los procesos. En el capítulo 6 se propone una técnica de monitoreo no lineal basada en KPLS, incluyendo detección y diagnóstico de anomalías e identificación de variables responsables. Finalmente, el capítulo 7 presenta las conclusiones generales de la tesis y los temas que quedaron abiertos para futuros trabajos.

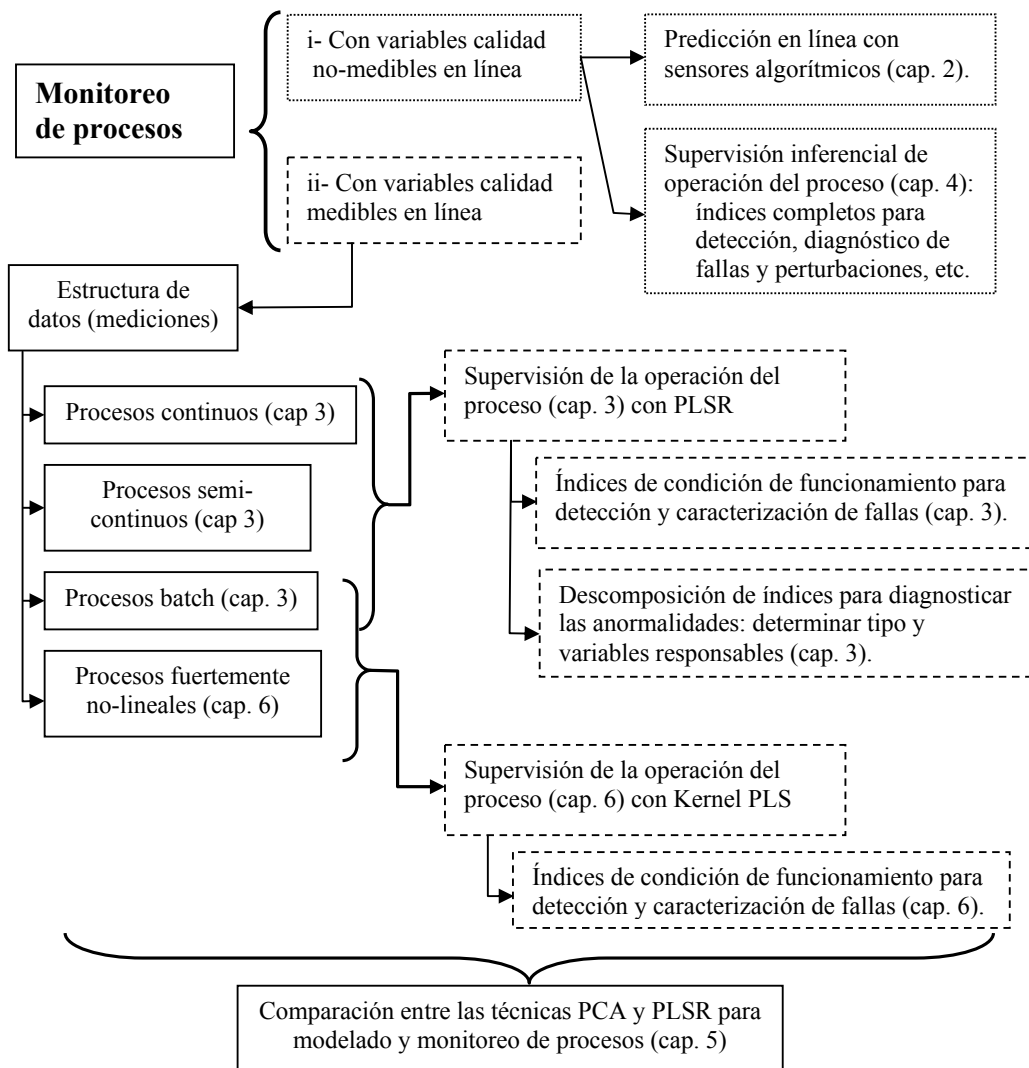


Figura 1.2: Diagrama de flujo de la investigación realizada.

Capítulo 2

Sensor algorítmico para el monitoreo de la producción y de la calidad del caucho estireno-butadieno

Resumen

Este capítulo presenta una metodología completa para construir y evaluar un sensor algorítmico capaz de monitorear la producción de caucho estireno-butadieno (SBR) en un tren industrial de 7 reactores tanques agitados continuos. El objetivo es desarrollar un dispositivo para la estimación en línea de las variables de producción y de calidad, utilizando una técnica estadística multivariable como regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR). Además de perseguir el desarrollo de sensores algorítmicos, este capítulo intenta ofrecer una guía para desarrollos similares, sugiriendo la atención sobre varios aspectos metodológicos específicos. Al respecto, se destacan las siguientes características: i) puesto que se desea un amplio rango de validación para este sensor y la planta real no puede ser alterada arbitrariamente, se utiliza un modelo fundamental complejo existente para explorar las diferentes condiciones de operación posibles, ii) el enfoque utilizado para desarrollar el sensor algorítmico incluye un muestreo distribuido de condiciones estacionarias multivariables para recolectar el conjunto de datos de calibración, y el uso de un filtro para excluir los valores extremos (outliers), y iii) se demuestra que el análisis del progreso de la variabilidad explicada cuando se incluyen variables latentes en el modelo, permite la detección de pobres variables predictoras. Esto proporciona la oportunidad de mejorar la regresión multivariable mediante la eliminación de contribuciones que actúan como interferencias. También se sugieren unas pocas técnicas de verificación pos-modelado, para confirmar la coherencia del conjunto de datos de calibración y la precisión del modelo en el dominio de aplicación.

2.1 Introducción

El caucho estireno-butadieno (SBR) es un producto de uso general empleado principalmente en la industria del neumático (Kirk y Othmer, 1981; Poehlein y Dougherty, 1977). Se produce por copolimerización en emulsión en frío de estireno (S) y butadieno (B) llevada a cabo en un proceso continuo. La planta industrial investigada (propiedad de

Petrobras Energía SA, Pto. Gral. San Martín, Santa Fe, Argentina) permite la producción continua del grado comercial SBR 1502, en un tren de siete reactores tanque agitado continuos idénticos. Cada reactor presenta un volumen de reacción de 17.473 L, y opera a 10 ° C. En el primer reactor del tren se alimentan continuamente: monómeros (S y B), agua (W), un sistema de iniciación tipo redox (iniciador I, agente reductor RA, y sulfato ferroso Fe), agente de transferencia de cadena o modificador (CTA), y emulsionante (E). En el último reactor se extrae el látex sintético resultante, y el monómero no reaccionado se recupera a partir del látex, en tanto que el caucho se precipita y se seca. Diversas variables que determinan la calidad, la procesabilidad y las propiedades de uso final del SBR final resultante son definidas durante el proceso de polimerización. Algunas propiedades están directamente influenciadas por la conversión de monómero final, que en la práctica se limita al 65% para evitar el deterioro del caucho debido a la ramificación, el entrecruzamiento y la deriva de la composición. Además, el CTA se añade para controlar directamente los pesos moleculares medios y el grado de ramificación.

Tabla 2.1: Variables de entrada / salida típicas en la producción (7 reactores) de SBR 1502 a un caudal de alimentación de $q_T = 302.8$ [L/min.]

Caudales de la receta base			Variables de salida ^a	Valores nominales	Límites de especificación ^b
Estireno	F_S [mol/min]	243.6	$x^{(7)}$ [%]	65.7	±5%
Butadieno	F_B [mol/min]	1159	$x_{sol}^{(7)}$ [%]	23.0	±5%
Agua	F_W [mol/min]	9787	$\bar{p}_S^{(7)}$ [%]	23.1	±5%
Iniciador	F_I [mol/min]	0.203	$\bar{d}_p^{(7)}$ [nm]	70.3	±10%
Sulfato ferroso	F_{Fe} [mol/min]	0.097	$G^{(7)}$ [Kg/min]	57.9	±5%
Agente reductor	F_{RA} [mol/min]	0.343	$\bar{M}_n^{(7)}$ [g/mol]	105000	±15%
Emulsionante	F_E [mol/min]	16.36	$\bar{M}_w^{(7)}$ [g/mol]	307200	±15%
Modificador	F_{CTA} [mol/min]	0.794	$\bar{B}_{n3}^{(7)}$ [molec ⁻¹]	0.15	±20%
			$\bar{B}_{n4}^{(7)}$ [molec ⁻¹]	0.06	±20%

^a El superíndice ⁽⁷⁾ representa al 7° reactor. ^b En porcentaje del valor nominal.

Un modelo de primeros principios (FPM) detallado del proceso de polimerización SBR (Gugliotta et al., 1995) consiste en dos módulos interconectados en serie: 1) un módulo básico, que predice conversión de monómeros (x), diámetro medio de partícula (\bar{d}_p), contenido de sólidos (x_{sol}), producción másica (G), composición del copolímero o fracción

másica promedio de S en el copolímero (\bar{p}_S); y 2) un módulo de pesos moleculares que predice pesos moleculares promedios en peso y en número (\bar{M}_w y \bar{M}_n), y promedios de ramificaciones tri- y tetra-funcionales por molécula (\bar{B}_{n3} y \bar{B}_{n4}). El modelo matemático utilizado en este trabajo es bastante complejo, en el sentido que involucra un conjunto de ecuaciones acopladas rígidas no-lineales; más concretamente, 18 ecuaciones diferenciales ordinarias y más de 60 ecuaciones algebraicas. Incluye cerca de 40 parámetros, varios de ellos ajustados sobre la base de mediciones recolectadas a lo largo de condiciones en estado estacionario y en transición durante la producción industrial de los grados SBR 1502 y 1712 (Gugliotta et al., 1995). Además, el FPM ajustado fue probado en estrategias de optimización en estado estacionario y transitorio (Vega et al., 1995a; Vega et al., 1995b; Minari et al., 2006). La Tabla 2.1 muestra los valores de las variables de entrada y salida (caudales molares de alimentación de reactivos y las variables de calidad final en el último reactor del tren) de una condición de operación de referencia empleada típicamente en la planta industrial para la producción del copolímero grado 1502.

Sensor algorítmico (soft-sensor) o sensor virtual es el nombre común para los desarrollos de software donde se procesan conjuntamente varias mediciones, típicamente para estimar propiedades que no se pueden medir. Este es un recurso tecnológico que está siendo reportado para complementar lecturas en línea de instrumentos y así mejorar el monitoreo y control de procesos (Lin et al., 2005). A pesar de que un sensor algorítmico se puede basar en un FPM detallado, este planteo da lugar con frecuencia a aplicaciones en tiempo real costosas computacionalmente (D'Anjou et al., 2003). En particular, en la producción industrial de SBR, mediciones en línea de las variables de calidad, así como estrategias de control a lazo-cerrado son normalmente inviables; sin embargo, se han propuesto estrategias diseñadas especialmente para monitoreo en línea (Minari et al., 2007).

Una serie de requisitos de diseño deberían ser cumplidos idealmente por un sensor algorítmico, tales como robustez, capacidad de generalización, capacidad de incorporar conocimiento previo del proceso, adaptabilidad, capacidad de auto-diagnóstico, facilidad para implementación y mantenimiento en línea, etc (Kordon et al., 2003). Sin embargo, no es posible encontrar en la práctica una técnica específica capaz de satisfacer todos los requisitos deseables.

La calibración de un sensor algorítmico implica el uso de conjuntos de datos empíricos y conocimientos previos para determinar cómo predecir información cuantitativa

desconocida Y a partir de mediciones disponibles X , vía alguna relación matemática. Aunque la calibración se base idealmente en datos obtenidos de la planta real, se podrían generar grandes cantidades de producto fuera de especificación si el diseño de experimentos requiere de cambios inusuales de las entradas. Por otra parte, los FPMs ajustados con precisión al proceso pueden ser utilizados para obtener datos sin ningún costo o peligro para la operación real.

La regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR) es una herramienta poderosa para determinar patrones dominantes implícitos en los datos. PLSR normalmente exhibe varias ventajas sobre las técnicas tradicionales de regresión, tales como alta capacidad para reducir la dimensión de los datos, robustez a datos altamente correlacionados y ruidosos, como así también fiabilidad aún cuando se dispone de pocas observaciones para calibrar (Martens y Naes, 1989). Robustez significa que los parámetros del modelo ajustado se mantienen casi sin cambios cuando se toman nuevos conjuntos de observaciones de la población total para re-calibrar. Además, una vez que el sensor algorítmico PLSR está instalado, su capacidad predictiva se puede mantener (o incluso mejorar) combinando el conjunto de calibración inicial (por ejemplo, obtenido de información simulada) con los nuevos datos recolectados (Qin, 1998).

Es importante mencionar que se seleccionó PLSR para desarrollar el sensor algorítmico de esta aplicación, porque es una técnica madura y bien comprendida. Se trata de un método sencillo para modelar procesos estacionarios complejos, y es bien aceptado por la mayoría de los profesionales. A pesar de las nuevas técnicas disponibles, con frecuencia los costos y el tiempo dedicado para desarrollar un sensor algorítmico están más orientados a obtener un diseño acertado y robusto basado en una técnica conocida en vez de explorar los muchos enfoques disponibles en la literatura. Además, el proceso industrial SBR presenta las siguientes características: a) el comportamiento global entrada-respuesta estacionaria es sólo moderadamente no-lineal, y b) ninguna multiplicidad de estados estables se espera que ocurra en la vecindad del punto de operación típico. Para comportamientos más complejos que involucren multiplicidad de estados estables, distribuciones gaussianas multimodales y/o datos con características no-gaussianas, probablemente deberían utilizarse otros algoritmos más específicos (Yu y Qin, 2008; Lee et al., 2004).

Este capítulo tiene como objetivo desarrollar un sensor algorítmico basado en PLSR para estimar variables de producción y calidad no-medibles en-línea a lo largo del proceso SBR industrial. Aunque esta técnica es bien conocida y ha sido utilizada en numerosas oportunidades, los ingenieros de proceso todavía se enfrentan a varias alternativas

metodológicas y preguntas sin respuesta cuando tienen que desarrollar una aplicación para sistemas de procesos grandes y complejos. La estrategia seguida aquí comienza determinando un conjunto de combinaciones de entradas/caudales (distribuidas en un espacio de operación factible) para luego realizar un experimento por cada combinación del cual se recolectarán datos en estado estacionario; a continuación propone herramientas estadísticas adecuadas para todos los pasos intermedios que conducen a la síntesis de un modelo PLSR fiable. En la parte final, la capacidad predictiva del sensor algorítmico propuesto se compara con otro previamente desarrollado en base a redes neuronales (Minari et al., 2007) y se muestra que un modelo PLSR bien ajustado es capaz de predecir en línea confiablemente las variables de producción y de calidad del proceso SBR.

La presentación de este capítulo es la siguiente. La Sección 2.2 resume las características principales de la estrategia de modelado propuesta. En la Sección 2.3, se explica el diseño experimental propuesto y se sugiere una técnica de pre-procesamiento para eliminar valores extremos (o outliers). La Sección 2.4 detalla el algoritmo de modelado (PLSR), propone formas de cuantificar la bondad de ajuste y discute los criterios empleados para determinar el número relevante de variables latentes (o internas); analizándose también las técnicas para validación de datos y verificación de la estructura del modelo. La Sección 2.5 presenta los resultados obtenidos simulando el proceso SBR con su FPM y proporciona un análisis detallado de la progresión de la síntesis del sensor algorítmico para llegar a su estructura final y al desempeño obtenido. Finalmente, las conclusiones se presentan en la Sección 2.6.

2.2 La estrategia de modelado PLSR

El proceso industrial SBR típicamente exhibe grandes constantes de tiempo (alrededor de 6 a 7 horas) (Gugliotta et al., 1995 ; Vega et al., 1995a ; Vega et al., 1995b ; Minari et al., 2006). En operación normal, sólo pequeños cambios en los caudales de alimentación son necesarios para pequeños ajustes de producción, y consecuentemente el sistema se mantiene permanentemente en un estado cuasi-estacionario. La Fig. 2.1a muestra un esquema del proceso industrial y las principales variables consideradas en este análisis. El vector $\mathbf{f} = [F_S \ F_B \ F_W \ F_I \ F_{Fe} \ F_{RA} \ F_E \ F_{CTA}]' \in \mathfrak{R}^8$ representa los caudales molares de alimentación de reactivos, que son las principales entradas al proceso. Sin embargo, los caudales reales que ingresan al primer reactor, pueden ser ligeramente diferentes debido a cambios desconocidos en las purzas de los reactivos \mathbf{f}_d . El vector $\mathbf{q} = [Q_R^{(1)} \ \dots \ Q_R^{(7)}]' \in$

\mathfrak{R}^7 representa las tasas instantáneas de calor de reacción de cada reactor del tren. Dado que los caudales y las tasas de calor de reacción son medidos y calculados, respectivamente, en línea, sus valores podrían ser influenciados por errores sistemáticos y aleatorios en los medidores (instrumentos). Además, trazas indeseables de oxígeno (F_{O_2}) que ingresan a los reactores y flujos calóricos intercambiados con el entorno (Q_{EX}) contribuyen a aumentar el número de fuentes de error que afectan la información disponible.

Note que el sensor algorítmico recibe ocho mediciones de caudales molares de los reactivos alimentados al primer reactor \mathbf{f}_m , y siete mediciones de tasas de calor de reacción \mathbf{q}_m , uno de cada reactor (Fig. 2.1a). Por lo tanto, en cada tiempo de muestreo, el vector predictor será $\mathbf{x}_m = [\mathbf{f}_m' \ \mathbf{q}_m']'$, el cual además de incluir información sobre los caudales de reactivos también conlleva los efectos de las perturbaciones no medibles a través de las tasas calóricas estimadas.

La estrategia propuesta para desarrollar el sensor algorítmico del proceso SBR se esquematiza en la Fig. 2.1b, la cual consiste en la búsqueda de una relación lineal acertada entre entradas estacionarias y respuestas estacionarias, utilizando un modelo PLSR. Para lograr esto, se establece un dominio finito mediante la selección de una ventana de operación alrededor del punto de funcionamiento nominal deseado. A continuación, se utiliza un diseño experimental de espacio-lleno (Montgomery, 2004) para determinar diferentes caudales molares \mathbf{f} que ingresarán al FPM del proceso SBR (Gugliotta et al., 1995). Las tasas de calor de reacción \mathbf{q} dadas por el FPM completarán el vector $\mathbf{x} = [\mathbf{f}' \ \mathbf{q}']'$ ($m \times 1$) $\in \mathfrak{R}^{15}$ el cual se tomará como entradas libres de ruido para el modelo PLSR. Las variables de respuesta correspondientes también se estimarán por el FPM para completar el conjunto de datos de calibración. Para cada reactor, las variables de respuesta son: cinco propiedades del proceso polimérico asociadas al módulo básico y cuatro propiedades de calidad del polímero asociadas al módulo de pesos moleculares. Por lo tanto, la salida multivariable (\mathbf{y} ($p \times 1$) $\in \mathfrak{R}^{63}$) está dada por:

$$\mathbf{y} = [\mathbf{y}^{(1)} \ \mathbf{y}^{(2)} \ \mathbf{y}^{(3)} \ \mathbf{y}^{(4)} \ \mathbf{y}^{(5)} \ \mathbf{y}^{(6)} \ \mathbf{y}^{(7)}] \quad (2.1)$$

donde

$$\mathbf{y}^{(r)} = \left[x^{(r)} \ x_{sol}^{(r)} \ \bar{p}_S^{(r)} \ \bar{d}_p^{(r)} \ G^{(r)} \ \bar{M}_w^{(r)} \ \bar{M}_n^{(r)} \ \bar{B}_{n_3}^{(r)} \ \bar{B}_{n_4}^{(r)} \right], \quad r = 1, 2, \dots, 7 \quad (2.2)$$

Los pares resultantes de observaciones multivariadas $\{\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i\}$ ($i = 1, \dots, N$) componen el conjunto de calibración (\mathbf{X}, \mathbf{Y}) utilizado para sintetizar el modelo PLSR para condiciones estacionarias (ver Fig. 2.1b). Note que estos pares de observaciones están relacionados de forma determinista por el FPM; por lo tanto, si el ruido de instrumentación (Fig. 2.1a) es

artificialmente incluido en las variables predictoras o respuestas, sólo serviría para ocultar información y, en consecuencia, corromper el ajuste del modelo de regresión. Consecuentemente, el conjunto de calibración se compone de datos libres de ruido.

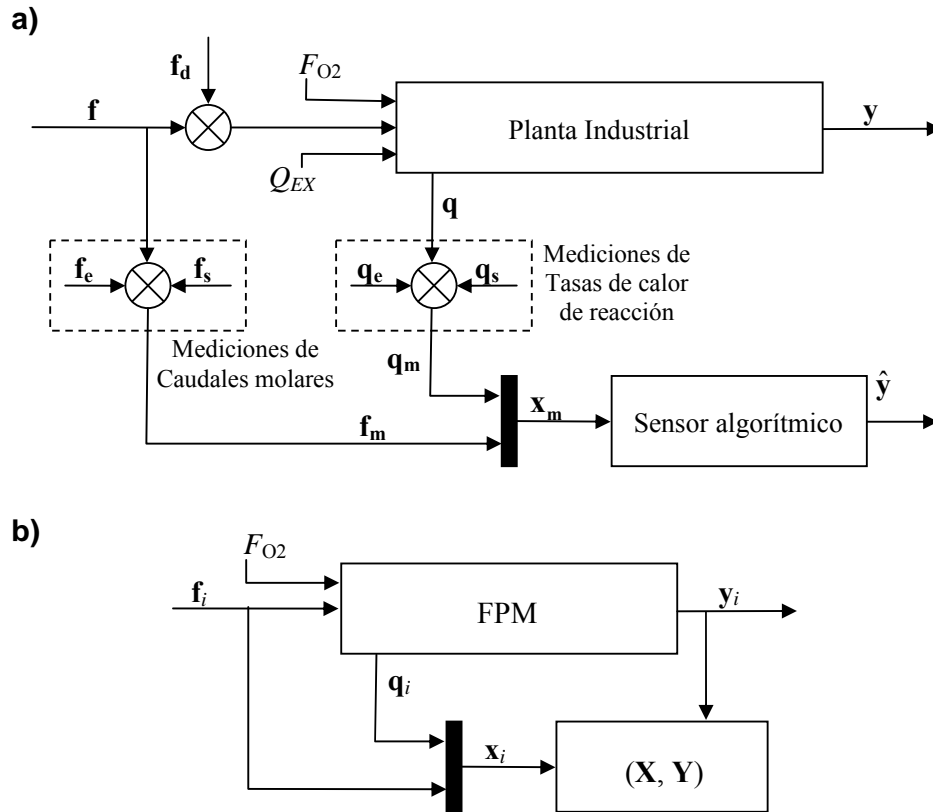


Figura 2.1: a) Sensor algorítmico propuesto para monitorear las variables de producción y de calidad. Fuentes de error que afectan las mediciones, *i*) dependientes de los sensores: sesgos sistemáticos (offsets) y errores aleatorios en los caudales, $f_s(t)$ y $f_e(t)$; sesgos sistemáticos y errores aleatorios en las tasas de calor de reacción, $q_s(t)$ y $q_e(t)$. *ii*) perturbaciones no medibles en línea: cambios en la pureza de reactivos, $f_d(t)$; caudal de impurezas de O_2 , $F_{O_2}(t)$; e intercambio calórico con el entorno $Q_{EX}(t)$. b) Diagrama esquemático sin fuentes de error, excepto por la impureza de O_2 con $F_{O_2}=0.083$ mol/min, utilizado para recolectar los pares de observaciones $\{x_i, y_i\}$ ($i = 1, \dots, N$) que componen al conjunto de calibración (X, Y) . Los caudales f_i ($i = 1, \dots, N$) siguen un diseño de experimento y con el FPM se estiman las respuestas correspondientes (q_i, y_i) a fin de formar el par (x_i, y_i) .

2.3 Diseño de experimentos

2.3.1 Determinación de los datos

Varias simulaciones se llevaron a cabo con el FPM para diferentes caudales de alimentación, y los resultados estacionarios obtenidos se utilizaron para calibración y evaluación del sensor algorítmico. Para definir estas diferentes condiciones de alimentación, se utilizó un diseño experimental que llena el espacio de trabajo. Esto se recomienda cuando hay poca información sobre las causas subyacentes que afectan la respuesta del sistema, o cuando los efectos son muy complejos (Montgomery, 2004). La estrategia aquí es esparcir diferentes puntos de operación en torno a la condición nominal, llenando el espacio de alta dimensión en una forma regularmente espaciada. El enfoque sistemático seguido aquí utiliza el método de muestreo latino del hipercubo (LHS) (Montgomery, 2004) con distribución uniforme multivariable. El diseño asume que cada caudal que ingresa al sistema tiene una extensión de variabilidad de alrededor de $\pm 20\%$ alrededor del punto de operación normal, como normalmente se observa en la planta industrial (Gugliotta et al., 1995; Vega et al., 1995a; Vega et al., 1995b; Minari et al., 2006; Minari et al., 2007). Luego, para cada variable de entrada F_k ($k = S, B, W, I, Fe, RA, E, CTA$) el diseño de espacio-lleno considera un intervalo $0.8\bar{F}_k \leq F_k \leq 1.2\bar{F}_k$ en torno al valor nominal \bar{F}_k (ver Tabla 2.1). Utilizando estas condiciones, la generación de los datos para el desarrollo del modelo PLSR comienza por muestrear una población multivariada distribuida uniformemente de los caudales con vector promedio y matriz de covarianza dados por $\bar{\mathbf{f}} = [\bar{F}_S, \dots, \bar{F}_{CTA}]'$ y $\Sigma_{\mathbf{f}} = \text{diag}(\sigma_S^2, \dots, \sigma_{CTA}^2)$, respectivamente. En otras palabras, el procedimiento genera "observaciones" independientes, $\mathbf{f}_i = [F_{S,i}, \dots, F_{CTA,i}]'$, $i = 1, \dots, N$ con distribuciones marginales uniformes dentro de un espacio donde las longitudes de los lados del hipercubo son los rangos de las variables caudal. Este enfoque produce un diseño experimental con estimulación completa del sistema sobre toda la ventana de operación de interés; un análisis cuidadoso de los puntos generados por el LHS indica que este provee $v=N$ diferentes niveles de proyección por factor F_k cuando se lleva a cabo un diseño de N puntos.

2.3.2 Pre-procesamiento de los datos

Una vez que todos los pares predictor-respuesta deseados $\{\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i\}$ ($i = 1, \dots, N$) están disponibles, se utiliza la técnica de discriminación de Hampel (Pearson, 2001) para la eliminación de valores extremos. Estos valores extremos surgen a causa de calores de reacción extraordinarios \mathbf{q}_i correspondientes a combinaciones inusuales de caudales de reactivos \mathbf{f}_i . La aplicación de esta técnica requiere de un escalamiento robusto de tales datos para reducir el efecto de valores extremos múltiples cuando se estima la media y la desviación estándar (Lin et al., 2007). En este escalamiento, la media se sustituye por la mediana y la desviación estándar se sustituye por la desviación absoluta de la mediana (*MAD*), $s_k^{MAD} = 1.48 \text{median}\{|x_{k,i} - x_k^{med}|\}$, donde x_k^{med} es la mediana de x_k y la constante 1.48 se requiere para hacer s_k^{MAD} una estimación no-sesgada de la desviación estándar para datos gaussianos. La regla “ $K\sigma$ ” con escalamiento robusto (comúnmente conocido como el identificador de Hampel (Pearson, 2001)) es la siguiente: $|x_{k,i} - x_k^{MED}| / s_k^{MAD} > K$. Con el umbral de $K = 3^{1/2}$, este identificador detecta correctamente la mayoría de los valores extremos. Dicho umbral se determina dividiendo la variación extrema $R_k/2$ (donde $R_k = 0.4\bar{F}_k$ es el rango del caudal k) por su desviación estándar ($\sigma_k = 0.2\bar{F}_k / \sqrt{3}$) para proporcionar variabilidad homogénea en las variables predictoras. Por lo tanto, algunos pares $(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$ fueron eliminados del conjunto de datos original compuesto por $N = 1000$ observaciones multivariantes. Este procedimiento se aplicó cuando cualquier calor de reacción estandarizado se situó fuera de los límites $\pm 3^{1/2}$. Alrededor de 30 valores extremos de los 98 identificados inicialmente, exhibieron distancias estadísticas cuadráticas $d^2(\mathbf{x}_i) > 45 (=3m)$, lo cual representa el límite superior esperado asumiendo que las m variables predictoras son independientes y uniformemente distribuidas. Este límite se obtiene cuando todas las variables toman valores en los extremos del hipercubo. Los 902 datos restantes se utilizarán en la fase de calibración para determinar el modelo PLSR.

2.4 Regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR)

2.4.1 El algoritmo de modelado

Entre varios métodos disponibles para calcular los parámetros del modelo PLSR, se optó por el algoritmo mínimos cuadrados parciales iterativo no-lineal (NIPALS) con intercambio de scores y deflación en ambas matrices de datos (Geladi y Kowalski, 1986a).

Esta selección se basa en que: i) es más preciso que otros métodos utilizados para procesos con salida multivariada (De Jong, 1993). ii) Es más apropiado para monitoreo de procesos que los algoritmos PLSR alternativos como PLS con deflación pesada (W-PLS) y PLS simplificado (SIMPLS), ver Gang et al. (2010). Además, el mismo artículo referenciado muestra que el algoritmo PLS-NIPALS con deflación de \mathbf{X} solamente produce el mismo modelo PLSR que el algoritmo propuesto PLS-NIPALS con deflación de \mathbf{X} e \mathbf{Y} (Dayal y MacGregor, 1997). iii) La deflación simultánea de ambas matrices, \mathbf{X} e \mathbf{Y} , permite la eliminación de las variables predictoras que pueden desempeñar un rol de interferencia en el modelo de regresión.

Se asume que se dispone de la matriz predictor con datos de entrada centrados y escalados $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N]'$ ($N \times m$) y de la matriz respuesta correspondiente con datos de salida centrados y escalados $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_N]'$ ($N \times p$). La primera variable latente $t_1 = \mathbf{w}_1' \mathbf{x}$ es la combinación lineal de variables predictoras que maximiza la descripción de la covarianza entre el espacio de \mathbf{x} y el espacio de \mathbf{y} . El primer vector de peso \mathbf{w}_1 es el autovector asociado al mayor autovalor de la matriz de covarianza muestral $(\mathbf{Y}_1' \mathbf{X}_1)'(\mathbf{Y}_1' \mathbf{X}_1)$, donde $\mathbf{X}_1 = \mathbf{X}$ y $\mathbf{Y}_1 = \mathbf{Y}$; es decir, el primer componente principal de la matriz de correlación $\mathbf{Y}_1' \mathbf{X}_1$. Una vez que se han calculado los scores $\mathbf{t}_1 = \mathbf{X}_1 \mathbf{w}_1$ del primer componente, se regresionan las columnas de \mathbf{X}_1 e \mathbf{Y}_1 sobre \mathbf{t}_1 para obtener los vectores del modelo externo $\mathbf{p}_1' = \mathbf{t}_1' \mathbf{X}_1 / \mathbf{t}_1' \mathbf{t}_1$ y $\mathbf{q}_1' = \mathbf{t}_1' \mathbf{Y}_1 / \mathbf{t}_1' \mathbf{t}_1$, respectivamente. A continuación, se calculan los scores de salida $\mathbf{u}_1 = \mathbf{Y}_1 \mathbf{q}_1 / \mathbf{q}_1' \mathbf{q}_1$, y resulta el coeficiente de regresión lineal entre los scores: $b_1 = \mathbf{u}_1' \mathbf{t}_1 / \mathbf{t}_1' \mathbf{t}_1$. Finalmente, se deflacionan las matrices \mathbf{X}_1 e \mathbf{Y}_1 para dar las matrices residuales $\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1 - \mathbf{t}_1 \mathbf{p}_1'$ e $\mathbf{Y}_2 = \mathbf{Y}_1 - b_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{q}_1'$. Este procedimiento se repite para obtener la segunda variable latente $t_2 = \mathbf{w}_2' \mathbf{x}_2$, donde \mathbf{w}_2 es el primer autovector (o componente) de $(\mathbf{Y}_2' \mathbf{X}_2)'(\mathbf{Y}_2' \mathbf{X}_2)$, y así sucesivamente, hasta obtener una cantidad conveniente (A) de componentes (Wold et al., 2001).

Para poder estimar los scores t_a directamente de los datos originales \mathbf{x} (sin deflacionar) se transforman los vectores peso \mathbf{w}_a ($a = 1, \dots, A \leq m$) en vectores peso \mathbf{r}_a más convenientes, de la siguiente manera (De Jong, 1993):

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{w}_1 \text{ y } \mathbf{r}_a = \prod_{i=1}^{a-1} (\mathbf{I} - \mathbf{w}_i \mathbf{p}_i') \mathbf{w}_a \text{ para } a=2 \dots A, \quad (2.3a)$$

Las matrices $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1 \dots \mathbf{w}_A]$, $\mathbf{P} = [\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_A]$ y $\mathbf{R} = [\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_A]$ poseen la siguiente relación:

$$\mathbf{R} = \mathbf{W}(\mathbf{P}'\mathbf{W})^{-1}, \quad (2.3b)$$

por lo tanto, se tiene que $\mathbf{P}'\mathbf{R} = \mathbf{R}'\mathbf{P} = \mathbf{I}$. Los componentes \mathbf{r}_a permiten estimar la matriz de scores $\mathbf{T} = [\mathbf{t}_1 \dots \mathbf{t}_A]$ ($N \times A$) a partir de la matriz de datos originales \mathbf{X} , de la siguiente manera (De Jong, 1993; Wold et al., 2001):

$$\mathbf{T} = \mathbf{X}\mathbf{R}, \quad (2.4)$$

La estructura del modelo PLSR se caracteriza por un modelo externo, donde las matrices \mathbf{X} e \mathbf{Y} se descomponen en vectores de scores (\mathbf{t}_a y \mathbf{u}_a), vectores peso (\mathbf{p}_a y \mathbf{q}_a), y matrices de errores residuales ($\tilde{\mathbf{X}}$ e $\tilde{\mathbf{Y}}_2$), de la siguiente manera (Geladi y Kowalski, 1986a):

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}' + \tilde{\mathbf{X}} = \sum_{a=1}^A \mathbf{t}_a \mathbf{p}'_a + \tilde{\mathbf{X}} = \sum_{a=1}^A \hat{\mathbf{X}}_a + \tilde{\mathbf{X}} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{U}\mathbf{Q}' + \tilde{\mathbf{Y}}_2 = \sum_{a=1}^A \mathbf{u}_a \mathbf{q}'_a + \tilde{\mathbf{Y}}_2 = \sum_{a=1}^A \hat{\mathbf{Y}}_a + \tilde{\mathbf{Y}}_2 \quad (2.6)$$

donde $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_A]$ y $\mathbf{Q} = [\mathbf{q}_1 \dots \mathbf{q}_A]$. Esto se completa con un modelo interno, en donde los vectores \mathbf{t}_a ($N \times 1$) de scores de \mathbf{X} son regresionados linealmente contra los vectores \mathbf{u}_a ($N \times 1$) de scores de \mathbf{Y} para dar,

$$\mathbf{U} = \mathbf{T}\mathbf{B} + \tilde{\mathbf{U}}, \quad \mathbf{B} = \text{diag}(b_1 \dots b_A), \quad (2.7)$$

donde b_a (con $a=1 \dots A$) son los coeficientes de regresión \mathbf{t}_a - \mathbf{u}_a y $\tilde{\mathbf{U}}$ es la matriz residual.

De esta manera, las matrices \mathbf{X} e \mathbf{Y} están relacionadas indirectamente por la relación interna (Ec. (2.7)). A partir de las Ecs. (2.4), (2.6) y (2.7), resulta el siguiente modelo de regresión:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{R}\mathbf{B}\mathbf{Q}' + (\tilde{\mathbf{U}}\mathbf{Q}' + \tilde{\mathbf{Y}}_2) = \mathbf{X}\mathbf{B}_{PLS} + \tilde{\mathbf{Y}} \quad (2.8)$$

ya la salida \mathbf{Y} se predice a partir de la entrada \mathbf{X} como sigue: $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\mathbf{R}\mathbf{B}\mathbf{Q}' = \mathbf{X}\mathbf{B}_{PLS}$ donde $\mathbf{B}_{PLS} = \mathbf{R}\mathbf{B}\mathbf{Q}'$ es la matriz modelo PLSR, e $\tilde{\mathbf{Y}} = \tilde{\mathbf{U}}\mathbf{Q}' + \tilde{\mathbf{Y}}_2$ es la matriz de errores de predicción.

Ahora bien, dado un nuevo valor \mathbf{x} del vector predictor, la respuesta (en unidades originales) se estima por:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{D}_y \mathbf{B}_{PLS} \mathbf{D}_x^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) + \bar{\mathbf{y}} \quad (2.9)$$

donde las desviaciones estándar muestrales $\mathbf{D}_x = \text{diag}(\sigma_{x_1} \dots \sigma_{x_m})$, $\mathbf{D}_y = \text{diag}(\sigma_{y_1} \dots \sigma_{y_p})$, y los promedios $\bar{\mathbf{x}}$, $\bar{\mathbf{y}}$, se determinan después del pre-procesamiento de los datos (Sección 2.3.2).

2.4.2 Indicadores de bondad de ajuste

Aunque es frecuente encontrar indicadores de desempeño para técnicas de regresión múltiple, es decir, cuando una variable respuesta es descrita por varias variables predictoras, las extensiones a aplicaciones de regresión múltiple multivariable (varias variables respuesta y varias variables predictoras) no lo son. Por lo tanto, se proponen aquí algunas definiciones de sentido común para disponer de indicadores de desempeño de valor único para el sensor algorítmico ajustado.

El error cuadrático medio (*MSE*) es una herramienta estadística clásica para la evaluación de un estimador. Si, para un \mathbf{x} dado, \hat{y}_j es la estimación de la variable y_j , el *MSE* estará dado por $MSE(\hat{y}_j) = E[(\hat{y}_j - y_j)^2] = Var[\hat{y}_j] + Bias^2[\hat{y}_j]$, donde j denota el número de variable respuesta, $Var[\hat{y}_j] = Var[(\hat{y}_j - y_j)] = Var[e_j]$, y $Bias[\hat{y}_j] = E[(\hat{y}_j - y_j)]$ (Remcher, 2002). Por lo tanto, las estimaciones muestrales utilizando N observaciones son,

$$MSE(\hat{y}_j) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\hat{y}_{j,i} - y_{j,i}]^2, \quad j = 1, 2, \dots, p \quad (2.10)$$

Para los modelos de regresión *multivariable*, el índice de desempeño de la Ec. (2.10) se puede escalar (*sMSE*) y promediar sobre todas las variables estimadas. En otras palabras,

$$avg(sMSE) \triangleq \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p \frac{MSE(\hat{y}_j)}{\sigma_{y_j}^2} = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p sMSE_j, \quad \in [0,1] \quad (2.11)$$

También, podría ser útil contar con el equivalente al error estándar calculado por $\sqrt{avg(sMSE)}$ (o $\sqrt{avg(sMSE)\%}$), y el coeficiente de regresión multivariable cuadrático definido por

$$avg(R^2) \triangleq \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p R_j^2 = 1 - \frac{N \, avg(sMSE)}{N - m - 1}, \quad \in [0,1] \quad (2.12)$$

donde R_j^2 es el coeficiente de regresión múltiple cuadrático individual para la variable j . El último estadístico mide cuán exitoso es el modelo de regresión para explicar la variabilidad de los datos, y un desempeño aceptable es indicado por $0.97 < avg(R^2) < 1.00$.

En este capítulo, los estadísticos anteriores se utilizan para evaluar el desempeño del sensor algorítmico. Además, para determinar la fiabilidad del ajuste PLSR alcanzado se utiliza un método de validación cruzada estratificada de 10 particiones (Martens y Naes,

1989) sobre el error total (Ec. 2.11) y sus componentes dados por: $avg\left(\text{Var}(e_j)/\sigma_{y_j}^2\right)$ y $avg\left(\text{Bias}^2(\hat{y}_j)/\sigma_{y_j}^2\right)$.

2.4.3 Análisis de la estructura del modelo

El algoritmo detallado en la Sección 2.4.1 enfatiza la descripción de las respuestas \mathbf{Y} mediante la subordinación de las principales direcciones de variabilidad en los datos predictores \mathbf{X} . En consecuencia, con frecuencia ocurre que a medida que el número a de componentes latentes se incrementa, la varianza explicada de \mathbf{Y} aumenta a una tasa diferente a la varianza utilizada de \mathbf{X} en la descripción. La experiencia adquirida en este trabajo indica que un modelo que presente similares tendencias incrementales de ambas varianzas acumuladas debería ser aceptado como estructuralmente mejor que un modelo que presente una diferencia significativa entre ambas tendencias. Un lento incremento en la varianza acumulada de la parte utilizada de \mathbf{X} comparado con un rápido crecimiento de la varianza explicada de \mathbf{Y} se puede tomar como una indicación de que hay una cierta variabilidad extra en \mathbf{X} que no puede ser asociada a \mathbf{Y} , lo que en otras palabras significa que una o más variables incluidas en \mathbf{X} podrían tener baja capacidad predictiva. Por el contrario, un lento crecimiento en la variación de \mathbf{Y} respecto al número a es una indicación de que no hay suficientes grados de libertad en \mathbf{X} (tomado como el número de direcciones latentes significativas) para explicar la variabilidad presente en \mathbf{Y} .

Por lo tanto, el análisis que aquí se propone consiste en determinar la importancia de cada componente \mathbf{r}_a buscando la cantidad de variabilidad explicada en \mathbf{X} e \mathbf{Y} para cada a -ésima dirección latente (Martens y Naes, 1989). Para lograr esto, es conveniente calcular los coeficientes de correlación apropiados de la siguiente manera:

$$R_X^2(a) = \frac{\text{tr}(\hat{\mathbf{X}}_a' \hat{\mathbf{X}}_a)}{\text{tr}(\mathbf{X}' \mathbf{X})} = \frac{\sigma^2(t_a)}{\sum_{k=1}^m \sigma_{x_k}^2}, \quad (2.13a)$$

$$R_Y^2(a) = \frac{\text{tr}(\hat{\mathbf{Y}}_a' \hat{\mathbf{Y}}_a)}{\text{tr}(\mathbf{Y}' \mathbf{Y})} = \frac{\sigma^2(u_a)}{\sum_{j=1}^p \sigma_{y_j}^2}, \quad (2.14a)$$

donde se utilizaron las siguientes relaciones útiles:

$$\sum_{k=1}^m \sigma_k^2(a) = \text{tr}(\hat{\mathbf{X}}_a' \hat{\mathbf{X}}_a) = \text{tr}(\mathbf{p}_a \mathbf{t}_a' \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a') = (\mathbf{t}_a' \mathbf{t}_a) \text{tr}(\mathbf{p}_a \mathbf{p}_a') = \sigma^2(t_a). \quad (2.13b)$$

$$\sum_{j=1}^p \sigma_j^2(a) = \text{tr}(\hat{\mathbf{Y}}_a' \hat{\mathbf{Y}}_a) = \text{tr}(\mathbf{q}_a \mathbf{t}'_a b_a b_a \mathbf{t}_a \mathbf{q}'_a) = b_a^2 (\mathbf{t}'_a \mathbf{t}_a) \text{tr}(\mathbf{q}_a \mathbf{q}'_a) = \sigma^2(u_a). \quad (2.14b)$$

Estos coeficientes (Ec. 2.13-2.14) evalúan cada componente por separado. Es decir, un valor alto de $R_X^2(a)$ indica que la variable latente correspondiente t_a explica una cantidad significativa de la varianza en el modelo externo de \mathbf{X} (Ec. 2.5). Además, las sumas acumuladas de estos coeficientes proveen la varianza explicada de \mathbf{Y} y la varianza utilizada de \mathbf{X} , determinadas por el modelo PLSR como funciones de a . Por lo tanto, si existen variables predictoras no relacionadas a las respuestas (variables interferencias), el valor de $R_X^2(a)$ será menor al de $R_Y^2(a)$, dado que PLSR ajusta el componente \mathbf{r}_a sólo con fines predictivos ($\hat{\mathbf{Y}}_a = \mathbf{X} \mathbf{r}_a b_a \mathbf{q}'_a$), abandonando el modelado de sus varianzas.

Alternativamente, también es posible inspeccionar la tendencia de las desviaciones estándar de los scores individuales t_a y u_a ($=b_a t_a$), es decir, $\sigma(t_a) = \sqrt{\mathbf{t}'_a \mathbf{t}_a} / \sqrt{N-1}$ y $\sigma(u_a) = b_a \sqrt{\mathbf{t}'_a \mathbf{t}_a} / \sqrt{N-1}$, para valores crecientes de a . Una tendencia monótona decreciente, tanto en $\sigma(t_a)$ como en $\sigma(u_a)$, comprueba una deflación consistente. Diferencias significativas o comportamientos inesperados en las trayectorias decrecientes seguidas por $\sigma(t_a)$ y $\sigma(u_a)$ con frecuencia revelan características no-detectadas en la estructura del modelo.

Si bien los procedimientos anteriores son útiles para alertar sobre problemas ocultos en la estructura del modelo, se necesita información adicional para proceder con las correcciones. Con mucha frecuencia, el control de la estructura del modelo implica una revisión de la pertinencia de las variables predictoras incluidas originalmente. El índice "importancia predictiva de la variable" (*VIP*) se ha propuesto para medir la importancia de cada variable para contribuir a incrementar la capacidad predictiva total (Wold et al., 2001). Una vez ajustado un modelo PLSR (Ec. 2.3-2.7), el *VIP* de la k -ésima variable predictora (VIP_k) se obtiene por:

$$VIP_k = \sqrt{m \sum_{a=1}^A \left(\frac{r_{a,k}}{\|\mathbf{r}_a\|} \right)^2 \frac{\sigma^2(u_a)}{\sum_{a=1}^A \sigma^2(u_a)}}, \quad k = 1, 2, \dots, m \quad (2.15)$$

donde el elemento $r_{a,k}$ de \mathbf{r}_a es el peso de la k -ésima variable predictora x_k sobre la a -ésima variable latente t_a , y el factor m se incluye para forzar que el promedio de $(VIP_k)^2$ sea 1. Además, $\sigma^2(u_a)$ representa la suma de las varianzas de \mathbf{y} explicadas por el componente a .

La importancia predictiva de x_k es independiente descripta por su VIP , lo que representa una medida de su contribución a la descomposición de \mathbf{X} , y su correlación con \mathbf{Y} . En general, las variables con bajos valores de VIP presentan una débil capacidad de predicción, y por lo tanto pueden ser eliminadas del modelo de regresión considerado. Sin embargo, para evitar la exclusión de variables importantes se considera eliminar del modelo sólo a aquellas variables predictoras que verifican $VIP < 0.8$, como se sugiere en Li et al. (2002). Por el contrario, cualquier variable x_k con un $VIP_k \geq 0.8$ tiene una importancia predictiva superior a la importancia media para describir \mathbf{Y} .

2.4.4 Selección del orden del modelo PLSR

Las no-linealidades tornan más difícil la selección de A , sobre todo porque el enfoque lineal identifica términos lineales solamente. Las consecuencias son dos: 1) PLSR provee estimaciones con sesgos dependientes del punto y que no se pueden eliminar por completo mediante adición de más componentes lineales (es decir, aumentando simplemente el valor de A durante la calibración PLSR), y 2) el valor de A tiende a ser mayor que el número de variables latentes verdaderamente significativo. Dado que el proceso SBR involucra varias fuentes de no-linealidades, el enfoque propuesto para definir el orden del modelo interno A da prioridad a la capacidad predictiva del modelo por medio de indicadores específicos como se describe en los párrafos siguientes.

Dos herramientas estadísticas diferentes se utilizan en este capítulo para verificar la adecuada selección del orden del modelo interno A . La selección de un número adecuado de variables latentes que se incluirán en el modelo PLSR es crucial. Si se utilizan más de las variables necesarias, un indeseable exceso de ajuste (o sobre-entrenamiento) podría reducir la capacidad predictiva de PLSR. El primer criterio consiste en trazar $avg(sMSE(a))$ versus a , como para tener una visualización gráfica de la cantidad de variabilidad que el modelo es capaz de cubrir. Tenga en cuenta que $avg(sMSE(a))$ se refiere a la Ec. (2.11) cuando se utilizan las primeras a variables latentes, lo cual representa el error cuadrático total del modelo con a componentes. Dado que la mayoría de las veces existe una idea preliminar acerca de la cantidad deseada de variabilidad explicada (por ejemplo, 95 o 98%), este indicador muestra el número mínimo de variables latentes que se incluirán cuando éste alcance el 5 o el 2% respectivamente.

El segundo criterio se enfoca en la contribución incremental (para describir la variabilidad total) que cada componente adicional es capaz de producir en comparación

con el anterior. La regla $R_{0.95}$ de Wold (Wold et al., 2001; Chong y Jun, 2005), que también es generalizada aquí para el caso de respuesta multivariable, se puede escribir como $R(a+1) = \text{avg}(sMSE(a+1)) / \text{avg}(sMSE(a))$. Para valores sucesivos de a , la secuencia se detiene cuando $R(a+1) > 0.95$, y por lo tanto, $A = a$ (Chong y Jun, 2005). Conceptualmente, este criterio establece que una variable latente adicional no se incluirá en el modelo PLSR a menos que proporcione una mejora significativa de predicción, y por lo tanto, provee el número máximo de componentes que deben incluirse en el modelo.

El gráfico de los indicadores anteriores frente a la cantidad de componentes constituye una ayuda importante para definir el orden adecuado del modelo. En particular, la aplicación reportada en la Sección 2.5 para resolver el problema del proceso SBR muestra la utilidad de estas herramientas para seleccionar un valor fiable de A .

2.5 Resultados y discusiones

2.5.1 Análisis de la estructura del modelo PLSR

Las simulaciones realizadas con el FPM son libres de ruido de medición tanto en variables de entrada como de respuesta. Por lo tanto, la variabilidad obtenida de las respuestas obedece exclusivamente a cambios de entradas definidos por el diseño experimental. Después del pre-procesamiento de los datos como se indica en la Subsección 2.3.2, se implementó el algoritmo NIPALS para encontrar el modelo PLSR, y el primer análisis se enfocó en la estructura del modelo PLSR.

Las Fig. 2.2a y 2.2b muestran la dependencia de la capacidad predictiva del modelo PLSR en función de a (el número de componentes) durante la primera prueba. Los resultados de la Fig. 2.2a son consistentes con el NIPALS utilizado que maximiza la descripción de \mathbf{Y} mediante la subordinación de las direcciones principales de variabilidad en \mathbf{X} . Esto se puede observar al señalar que la varianza modelada acumulada de \mathbf{Y} alcanza los valores más altos más rápidamente que la variabilidad modelada acumulada de \mathbf{X} . La característica principal es la separación notable entre las curvas. Las desviaciones estándar individuales de t_a y u_a mostrados en la Fig. 2.2b sirven para inspeccionar la solidez del modelo interno. Estos estadísticos representan la variabilidad aportada al modelo por cada variable latente adicional. Aunque $\sigma(u_a)$ muestra una disminución sostenida, $\sigma(t_a)$ exhibe un incremento al incluir el 8° componente comportándose como una interferencia (Geladi y Kowalski, 1986b), el cual se mantiene por el 9° componente.

Los resultados en las Fig. 2.2a y 2.2b confirman que debería realizarse un esfuerzo adicional para mejorar la fiabilidad del modelo. Como se mencionó en la Subsección 2.4.3, el índice VIP de la Ec. (2.15) es una herramienta eficaz para revisar la selección preliminar y de alguna manera arbitraria de variables predictoras x_k . La Fig. 2.2c muestra el valor de VIP para cada variable x_k , del cual se puede concluir que los caudales F_I (x_4 : iniciador redox), F_{Fe} (x_5 : activador), y F_{RA} (x_6 : agente reductor), correspondientes a la cupla redox de iniciación (Gugliotta et al., 1995), tienen una influencia predictiva muy baja sobre las variables respuesta. Estos valores muy bajos de VIP_k denotan lo que podría ser reconocido como una falla estructural en el modelo sintetizado.

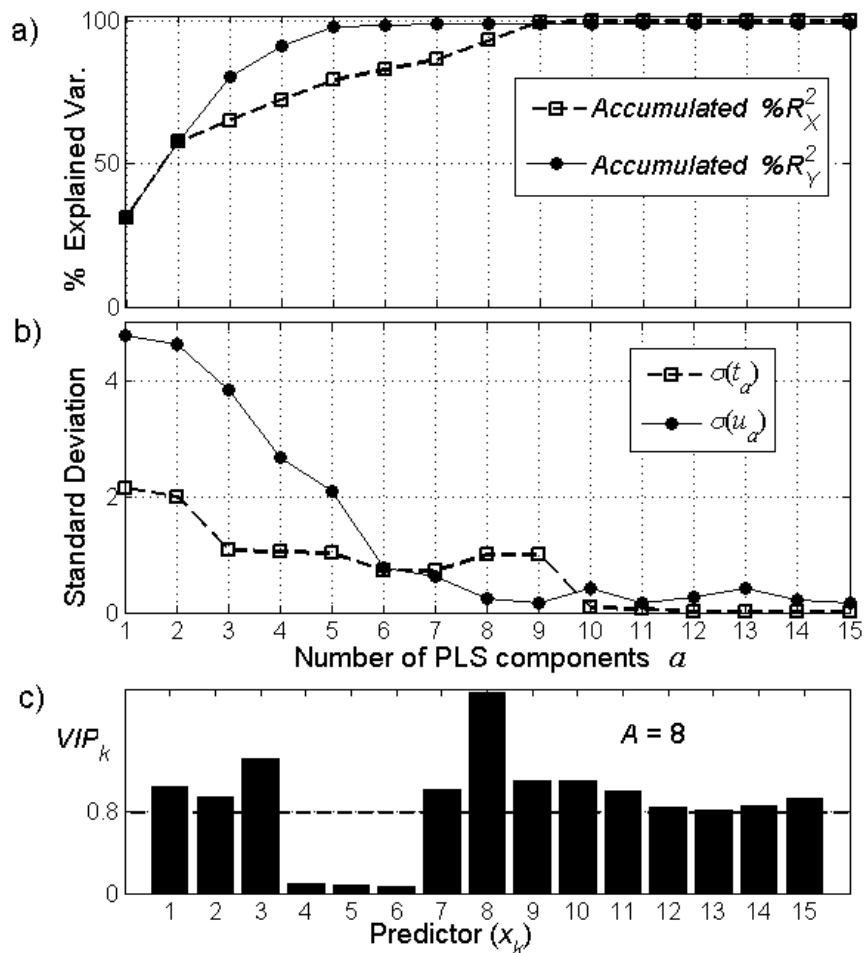


Figura 2.2: Progreso de la habilidad predictiva durante la primera prueba. a) Pareto de $\%R_X^2(a)$ y $\%R_Y^2(a)$. b) Desviaciones estándar de las variables latentes. c) Gráfico de contribución a la predicción utilizando el índice VIP para $A=8$.

Estos resultados determinan la necesidad de una segunda prueba que se inicia revisando las tres variables de entrada con bajo *VIP*. Volviendo a la receta nominal, se observa que las relaciones molares de x_5 y x_6 a x_4 (Tabla 2.1) son 48% y 169%, respectivamente. Dado que esta proporción debe mantenerse para proporcionar la fuerza de iniciación necesaria, cada vez que haya un cambio en el iniciador, x_4 , x_5 , y x_6 deben moverse en la misma dirección y mantener las proporciones anteriores. Sin embargo, el diseño experimental utilizado antes ignoró esta práctica: sus valores se movieron de manera independiente y con dispersiones diferentes siguiendo un patrón aleatorio. Por lo tanto, es preferible eliminar esta independencia en los datos de calibración rediseñando el experimento para evitar variables que puedan producir un efecto de interferencia.

2.5.2 Modelo PLSR revisado

En esta sección se muestra el efecto de un nuevo diseño de experimentos similar al anterior, pero ahora considerando las relaciones entre las variables de iniciación F_I , F_{Fe} y F_{RA} . Para representar esta interacción, se asume que un único factor ξ del LHS en \mathfrak{R}^6 determina el conjunto ternario $\{F_I, F_{Fe}, F_{RA}\}$ a través de las siguientes relaciones afines: $F_I = k_I \xi + \bar{F}_I$, $F_{Fe} = k_{Fe} \xi + \bar{F}_{Fe}$, $F_{RA} = k_{RA} \xi + \bar{F}_{RA}$, donde los coeficientes de proporcionalidad mantiene los rangos individuales de cada variable. De esta manera, fijando el iniciador F_I es equivalente a determinar F_{Fe} y F_{RA} a través de ξ . Sin embargo, el gráfico del *VIP* (Fig. 2.2c) muestra que los tres caudales son redundantes, y no sólo dos de ellos. Esto ocurre porque los calores de reacción aparentemente proveen información casi equivalente a la cantidad de iniciador que ingresa al primer reactor, y esto sería la razón para excluir a F_I también. Esta decisión también se basa en el hecho de que los calores de reacción son sensibles a perturbaciones inesperadas o a cambios no-mensurables del caudal o concentración del iniciador.

Por lo tanto, en la segunda prueba se eliminan las tres variables de iniciación $\{F_I, F_{Fe}, F_{RA}\}$ del vector predictor, pero en el diseño experimental se sustituyen por una única variable ξ y tres relaciones afines. El nuevo modelo PLSR incluye sólo 5 caudales de alimentación de reactivos: $\mathbf{f}_r = [F_S \ F_B \ F_W \ F_E \ F_{CTA}]' \in \mathfrak{R}^5$ y todos los calores de reacción \mathbf{q} . Por lo tanto, el nuevo vector predictor esta dado por: $\mathbf{x} = [\mathbf{f}_r' \ \mathbf{q}']' \in \mathfrak{R}^{12}$ mientras que las variables respuesta son las mismas (ver Ec. 2.1). El conjunto de calibración generado por LHS incluye 891 muestras, de nuevo, tomadas a partir de 1000, donde 42 valores extremos de los 109 tenían $d^2(\mathbf{x}) > 36$.

Esta vez, la Fig. 2.3a muestra un patrón creciente en $\%R_X^2(a)$ acumulado el cual sigue más de cerca al $\%R_Y^2(a)$ acumulado. Además, un comportamiento decreciente más regular se obtiene ahora para $\sigma(u_a)$ y $\sigma(t_a)$ en la Fig. 2.3b, y el gráfico *VIP* en la Fig. 2.3c muestra un patrón equilibrado cuando se evalúan las contribuciones de las variables predictoras. Todos los coeficientes de regresión b_a ($a = 1, \dots, 8$) en este modelo tienen valores similares: 2,088, 1,996, 3,552, 2,529, 2,060, 2,274, 1,378 y 3,677 (lo que no ocurrió en la primer prueba), y los índices promedios para evaluar bondad de ajuste muestran una ligera mejora: estos pasaron de $avg(sMSE) = 0.0101$, $\sqrt{avg(sMSE)}\% = 10.07\%$, y $avg(R^2) = 0.9899$ a 0.0088, 9.37% y 0.9912, respectivamente.

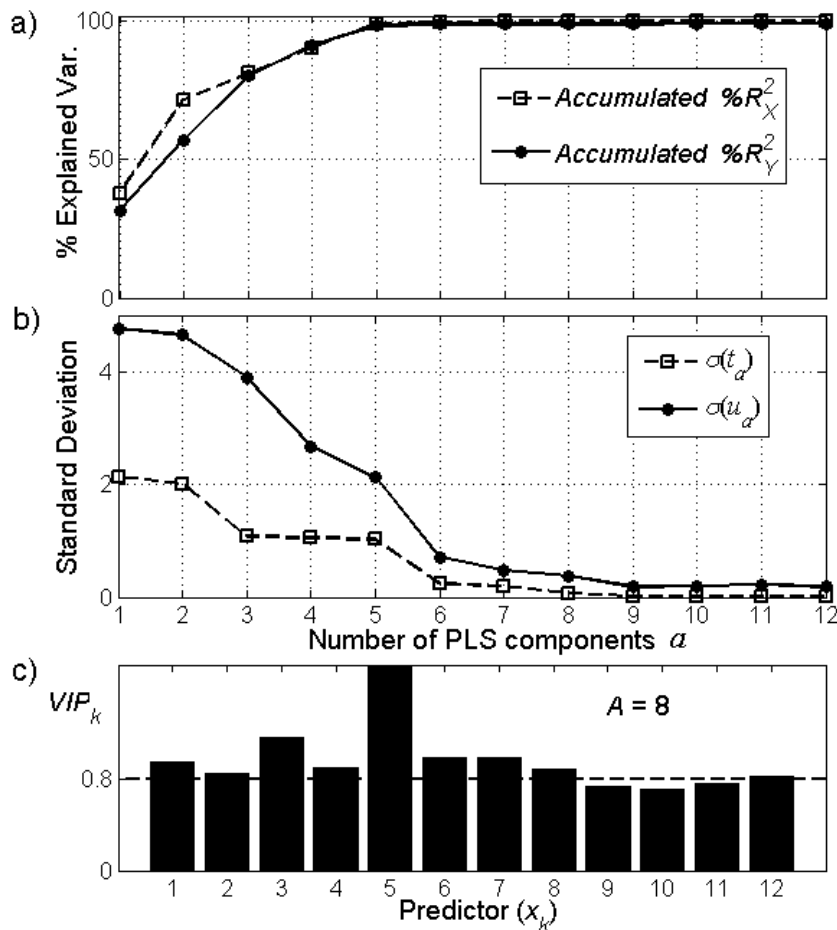


Figure 2.3: Habilidad predictiva del modelo PLSR revisado (segunda prueba). a) Pareto de $\%R_X^2(a)$ y $\%R_Y^2(a)$. b) Desviaciones estándar de las variables latentes. c) Gráfico de contribución a la predicción utilizando el índice *VIP* para $A=8$.

2.5.3 Determinación del orden del modelo final.

Aunque determinar el orden del modelo interno correcto tiene sentido sólo después que el modelo PLSR ha sido limpiado de variables predictoras espurias, podría ser conveniente un uso iterativo o aún simultáneo de los estadísticos indicados en las Secciones 2.4.3 y 2.4.4. En el diseño de este sensor algorítmico dos pruebas fueron necesarias por las razones descritas anteriormente.

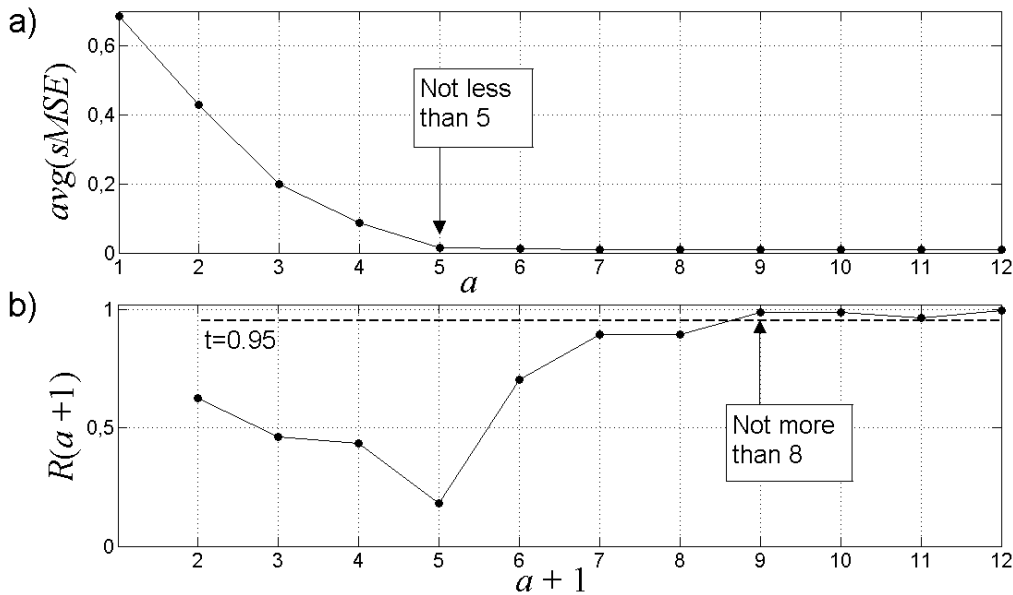


Figura 2.4: Determinación del orden del modelo interno. a) varianza promedio del error residual frente al número de variables latentes utilizadas. b) Tasa de cambio de la varianza promedio del error residual frente al número de variables latentes utilizadas.

La Fig. 2.4a muestra el decaimiento del índice $avg(sMSE)$ cuando se incrementa número de componentes a durante la segunda prueba. De la simple inspección, es evidente que la mayoría de la variabilidad encontrada en Y se explica con 5 componentes como mínimo. El hecho de que $avg(sMSE)$ disminuya y se establezca casi asintóticamente es un comportamiento bastante sorprendente, puesto que se espera típicamente un ligero aumento cuando se incluyen componentes innecesarios. Esta característica sugiere que la matriz de diseño $(Y'X)'(Y'X)$ no es de rango deficiente a pesar que los resultados puedan conducir a inferir alta colinealidad en las variables originales.

Además, siguiendo la regla $R_{0.95}$ de Wold (ver Fig. 2.4b), un modelo con 8 componentes sería suficiente, puesto que este modelo es el último en dar un valor del índice R por debajo

del umbral 0.95. En otras palabras, esto significa que utilizar 9 componentes no reduce más el $avg(sMSE)$ que utilizando 8. Por lo tanto, un modelo de 8 componentes se convierte en una solución razonable para retener la mayoría de la habilidad predictiva (Wold et al., 2001).

2.5.4 Verificaciones pos-modelado

Una vez que se ajusta el modelo PLSR, se puede verificar el conjunto de datos de calibración, el dominio de aplicación y la capacidad del sensor algorítmico:

i) verificar el conjunto de calibración consiste básicamente en comprobar el grado de pertinencia de todas las observaciones utilizadas para la calibración. Una prueba útil para esto se basa en el concepto de "apalancamiento" (Martens y Naes, 1989). El apalancamiento h_i es una medida de la influencia que un punto de diseño tiene sobre la regresión (PLSR) debido a su ubicación en el espacio de entrada (o predictor). En este sentido, se define por

$$h_i = \sum_{a=1}^A (t_{a,i}^2 / \mathbf{t}'_a \mathbf{t}_a) = \frac{d^2(\mathbf{t})}{N-1}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.16)$$

donde $\mathbf{t} = \mathbf{R}'\mathbf{x}_i = [t_{1,i} \cdots t_{A,i}]'$ ($A \times 1$) son los scores correspondientes a la i -ésima observación \mathbf{x}_i y $d^2(\mathbf{t}) = \mathbf{x}'_i \mathbf{R} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{R}' \mathbf{x}_i$ es su distancia estadística cuadrática, basada en su matriz de covarianza $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\sigma^2(t_1) \cdots \sigma^2(t_A))$. El apalancamiento mide cuán única es una observación en relación a las demás. Si un punto de calibración dado se repite n veces, su influencia se reduce por $1/n$, es generalmente indeseable un h_i alto y un valor bajo indica que la observación tiene baja influencia sobre el modelo. Un buen conjunto de calibración presenta por lo general valores de h_i similares para todas las observaciones y el límite de advertencia se define por $h_i > T_{A,N-A}^2(\alpha)/(N-1)$, donde $T_{A,N-A}^2(\alpha)$ es el T^2 de Hotelling para A variables y nivel de significación α . La Fig. 2.5a muestra que todas las observaciones utilizadas en el diseño PLSR tienen valores de apalancamientos por debajo de este límite.

ii) Una prueba simple y útil para comprobar la precisión del modelo inferencial PLSR consiste en verificar que el error estándar promedio, calculado como $\sqrt{avg(sMSE)}$, sea aproximadamente constante a lo largo de todo el dominio de aplicabilidad. Una forma de llevar a cabo la prueba comienza dividiendo el dominio total en sub-dominios o zonas

determinadas por intervalos de distancias estadísticas. Luego se calcula $\sqrt{\text{avg}(sMSE)}$ para cada zona y se grafican sus valores frente a $d^2(\mathbf{x})$ (donde \mathbf{x} es el centro de cada zona anular). La Fig. 2.5b verifica que $\sqrt{\text{avg}(sMSE)}$ en zonas anulares circundantes al punto medio esté alrededor de 0.094, lo que demuestra que la precisión del sensor algorítmico se mantiene casi constante para el espacio de trabajo completo.

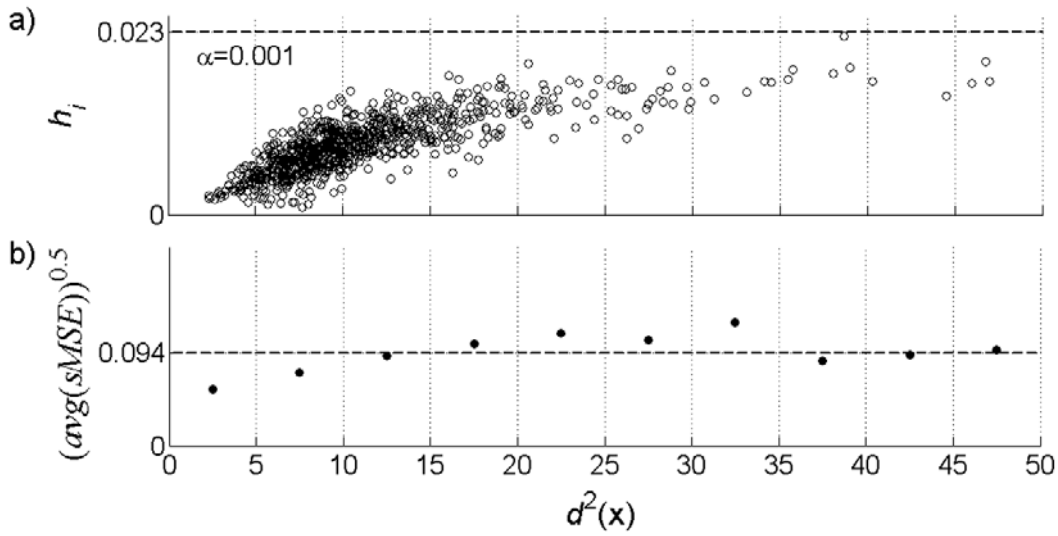


Figura 2.5: Verificaciones pos-modelado. a) prueba de validación para las observaciones incluidas en el conjunto de entrenamiento. Límite de confianza establecido para $\alpha=0.001$. b) Precisión del sensor algorítmico verificada como el error residual estándar $\sqrt{\text{avg}(sMSE)}$ para zonas anulares [intervalos de $d^2(\mathbf{x})$].

iii) La utilidad del sensor algorítmico se puede evaluar comparando el error de predicción con el intervalo entre los límites de especificación superior e inferior (USL y LSL , respectivamente). Una forma sencilla de hacerlo es a través de un índice de aptitud estándar calculado para cada variable respuesta y_j , dividiendo el intervalo de especificación $\Delta S_j = USL_j - LSL_j$ por seis veces el error estándar del estimador, es decir, $I_j = \Delta S_j / 6\sqrt{MSE(\hat{y}_j)}$. Claramente, los valores altos de I_j son los valores deseables y los bajos (<1) son los indeseables. La Tabla 2.2 muestra los valores de I_j para las variables respuesta del último reactor solamente, éstos se calculan utilizando los límites de especificación mostrados en la última columna de la Tabla 2.1. La viabilidad de utilizar el sensor algorítmico propuesto para monitorear las variables de calidad final del SBR es confirmada en general puesto que todos los valores del índice de aptitud son mayores a

uno, es decir, la precisión es bastante aceptable para la mayoría de las variables respuesta, mostrando la menor habilidad predictiva para $\bar{M}_w^{(7)}$. Nótese también que la Tabla 2.2 provee una desviación escalada porcentual, $\%RMSE_j = 100\sqrt{MSE(\hat{y}_j)}/\sigma_{y_j}$, para cada variable respuesta en cada reactor.

Tabla 2.2: Error estándar porcentual estimado para las variables respuesta en el tren SBR ($\%RMSE_j$).

Número de Reactor	$x^{(r)}$	$x_{sol}^{(r)}$	$\bar{p}_S^{(r)}$	$\bar{d}_p^{(r)}$	$G^{(r)}$	$\bar{M}_w^{(r)}$	$\bar{M}_n^{(r)}$	$\bar{B}_{n3}^{(r)}$	$\bar{B}_{n4}^{(r)}$
$r = 1$	5.10	6.98	5.44	5.89	1.40	15.55	10.94	11.29	11.29
$r = 2$	5.03	7.13	5.84	5.97	1.40	15.26	10.88	11.28	11.28
$r = 3$	4.96	7.10	6.08	6.07	1.42	14.86	10.87	11.16	11.15
$r = 4$	4.87	7.07	6.12	6.20	1.21	15.00	10.89	11.04	11.03
$r = 5$	4.83	7.04	6.12	6.26	1.27	15.95	10.93	11.25	11.25
$r = 6$	4.85	6.99	6.12	6.29	1.37	17.68	10.99	11.54	11.53
$r = 7$	4.90	6.92	6.10	6.23	1.48	20.43	11.08	11.81	11.82
$\sigma_{y_j}^2$ ($j = 55...63$)	6.01	2.55	2.96	1.79	4.14	66969	14856	0.028	0.011
I_j ($j = 55...63$)	3.71	2.17	2.13	21.0	15.74	1.12	3.19	3.02	3.07

iv) Además, una vez que se calibra el sensor utilizando datos sin ruido, el desempeño total en línea también se puede evaluar considerando el efecto de los errores de medición aleatorios (\mathbf{f}_s y \mathbf{q}_s en la Fig. 2.1a) en la precisión de predicción. Ver el Apéndice 2.A para más detalles.

Para tener una estimación confiable de la bondad de ajuste (Martens y Naes, 1989) se implementó una validación cruzada de 10 particiones (10 fold-CV) utilizando el MSE total (Ec. 2.11) y sus componentes. Este método particiona 10 veces el conjunto de datos para obtener 10 estimaciones de los índices (una por partición) en calibración y en prueba. El valor verdadero de $avg(smSE)$ se halla entre los dos promedios de estimaciones, uno de estimaciones en calibración y otro en prueba. Como es usual cuando se aplica CV, el modelo se considera confiable si los promedios de los índices en calibración y en prueba, son comparables. Para el ajuste PLSR indagado aquí, estos dos promedios obtenidos de CV resultaron muy próximos, en consecuencia, el modelo PLSR es confiable (no posee sobreentrenamiento). A su vez estos promedios también son iguales al error total (Ec. 2.11) encontrado utilizando el conjunto de calibración completo (el cual provee el límite inferior [Martens y Naes, 1989]). Por lo tanto, se concluye que el modelo inferencial PLSR ajustado cubre el espacio de trabajo deseado con precisión confiable. Como el componente

$avg\left(\text{Bias}^2(\hat{y}_j)/\sigma_{y_j}^2\right)$ resultó aproximadamente igual a cero, el error total se debe a falta de precisión de predicción principalmente; es decir, $avg(sMSE) \cong avg\left(\text{Var}(e_j)/\sigma_{y_j}^2\right)$.

2.5.5 Simulación del proceso SBR con el sensor algorítmico en línea.

El FPM se utiliza para simular el efecto de cambios en los caudales de alimentación de reactivos sobre la producción final y la calidad del polímero. El cambio de entrada simulado es un incremento de 6.25% en todos los caudales de reactivos de tal manera que el caudal total de alimentación pasa de 302.8 L/min a 321.8 L/min, lo que lleva al nuevo punto de operación a una distancia (cuadrática) $d^2(\mathbf{x}) = 7.42$ (ver Fig. 2.5b) respecto del nominal. Además, todas las variables de la Fig. 2.1 son perturbadas por ruidos blancos gaussianos de variaciones apropiadas para simular mediciones realistas. El FPM provee la evolución temporal "verdadera" de las principales variables de calidad, es decir, los valores reales libres de ruido.

La Fig. 2.6 muestra la evolución temporal de las respuestas al cambio escalón efectuado en $t = 2000$ min., entre dos puntos operativos. En general, los nuevos estados estacionarios (a partir de $t = 2000$ min.) se predicen muy aceptablemente después que los calores de reacción llegan a la nueva condición estacionaria alrededor de $t = 2800$ min. Sin embargo, el sensor algorítmico es incapaz de estimar adecuadamente las respuestas transitorias. Una buena precisión se exhibe para las primeras cinco variables respuesta y desplazamientos (u offsets) aceptables en las últimas cuatro respuestas. Estos desplazamientos sostenidos en el tiempo no implican predicciones sesgadas, sino que obedecen a las varianzas residuales $\text{Var}(e_j)$ dejadas por el modelo lineal propuesto. Este error muestral es el mismo que se cuantifica en la Tabla 2.2, y determina la precisión alcanzable.

Las Fig. (2.6a-2.6e) muestran la evolución de las variables de producción. Los nuevos estados estacionarios exhiben valores reducidos de x , x_{sol} , y \bar{d}_p (Figs. 2.6a, 2.6b y 2.6d), como una consecuencia del tiempo de residencia más corto de las partículas de polímero en el tren de reactores. Por el contrario, \bar{p}_s se mantiene prácticamente constante, puesto que depende principalmente de la relación de alimentación estireno/butadieno (no cambiada). La producción másica total aumentó de 57.90 kg/min a 60.57 kg/min (Fig. 2.6e) como consecuencia del cambio del caudal total, mientras que la calidad de salida se mantiene aproximadamente constante (Fig. 2.6f-2.6i). Importantes cambios en las variables de calidad no son esperados debido a que la relación modificador/monómeros se mantuvo

constante; sólo se observó una ligera reducción en los estados estacionarios finales de cuatro variables respuesta, y esto es una consecuencia de la conversión más baja alcanzada en el último reactor del tren.

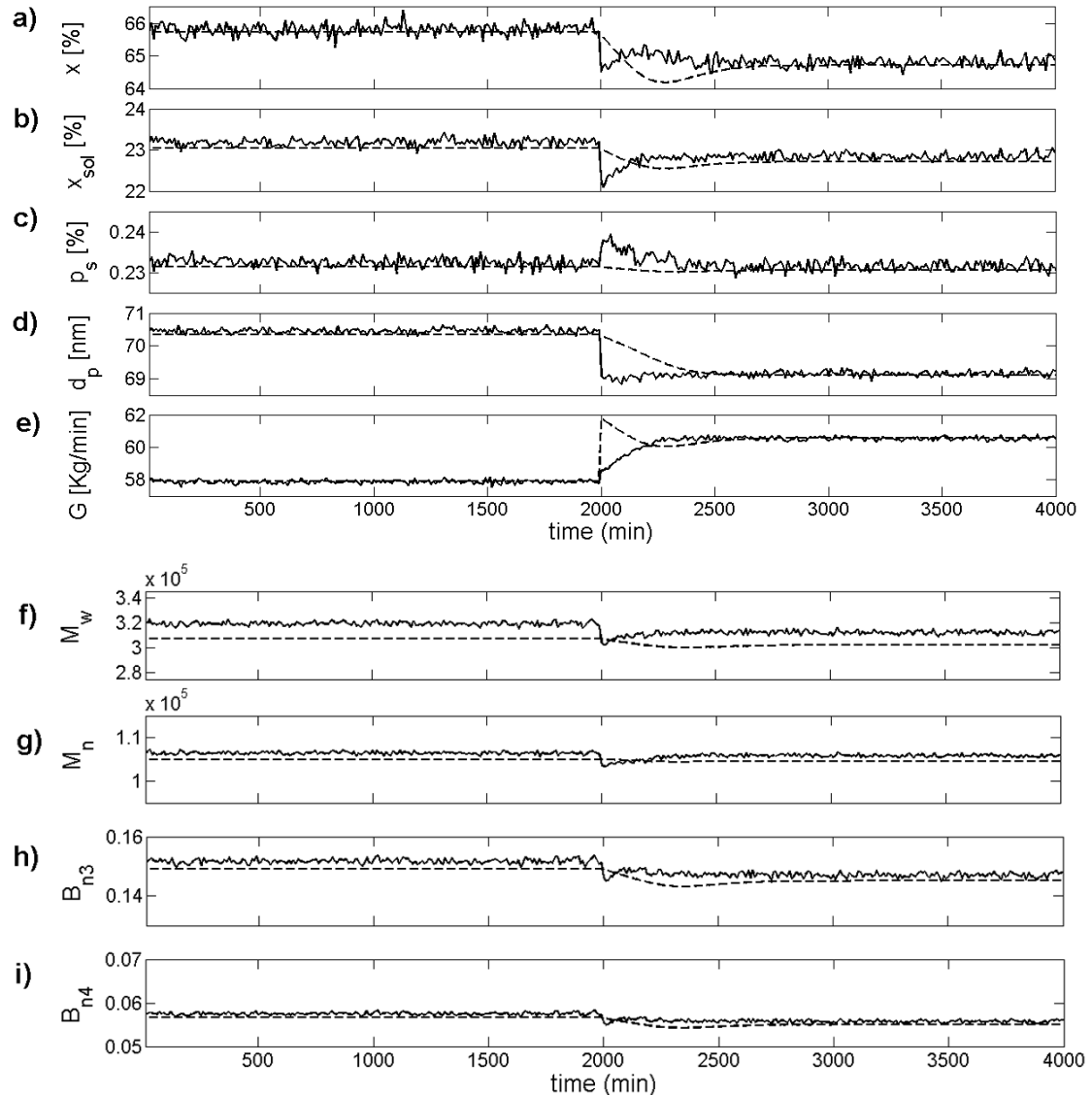


Figura 2.6: Evolución temporal de las variables respuesta del último reactor durante un cambio escalón en los caudales de reactivos en el instante 2000 min. Las respuestas del FPM se indican en líneas discontinuas y las estimaciones del sensor algorítmico en líneas continuas.

2.5.6 Comparación de resultados con red neuronal artificial de Minari et al. (2007)

Minari et al. (2007) presentaron un sensor algorítmico basado en dos redes neuronales artificiales (ANN) para el mismo proceso SBR. La primer ANN fue utilizada para predecir

las primeras cinco variables respuesta, y la segunda ANN se utilizó para estimar las cuatro respuestas restantes. Además de dividir la tarea de predicción en dos algoritmos, utilizaron una estrategia de muestreo muy diferente: siguiendo reglas de sentido común y práctico, el conjunto de entrenamiento fue generado cambiando simultáneamente tan sólo 2 caudales cada vez ($l = 2$), de los 9 disponibles (8 caudales de reactivos más el caudal de oxígeno que ingresa al sistema, $C = 9$). Dado que los caudales se modificaron de acuerdo a cinco niveles diferentes (-20%, -10%, 0%, 10% y 20% de la receta base, $\nu = 5$), todas las combinaciones más la receta base dan 901 observaciones diferentes, es decir, $N = 1 + \binom{C}{l} \nu^l = 901$. Nótese que tal estrategia de muestreo provee pocos niveles de proyección diferentes por factor F_k , es decir, $\nu \ll N$.

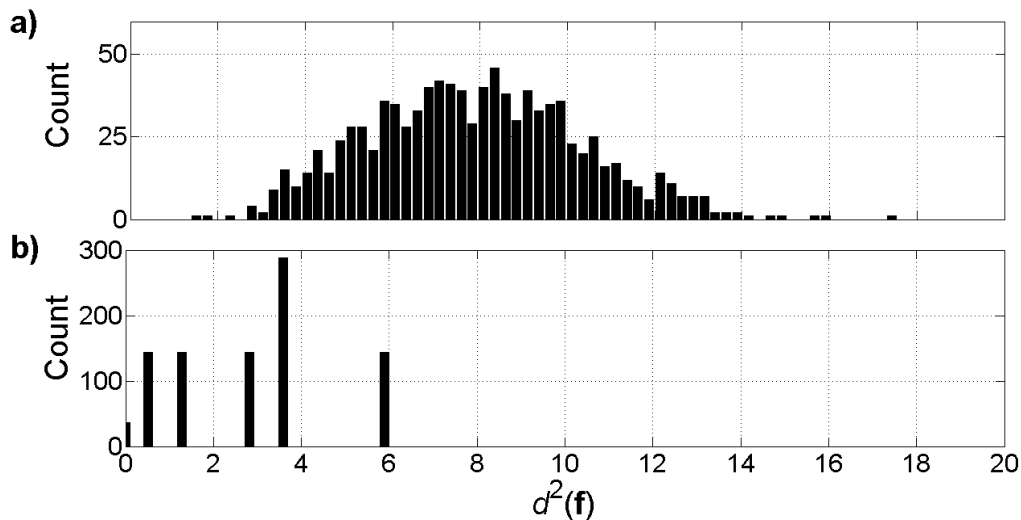


Figura 2.7: Histogramas de las distancias estadísticas cuadráticas de \mathbf{f} para: a) conjunto de datos generado por el método LHS, y b) conjunto de datos de Minari et al. (2007).

La Fig. 2.7 muestra dos histogramas de distancias estadísticas cuadráticas de los caudales muestreados $d^2(\mathbf{f})$: el primero resulta del método LHS utilizado en este capítulo, mientras que el segundo proviene de la toma de muestras descrita arriba (Minari et al., 2007). Aunque en ambos casos el espacio muestreado y el número de puntos de muestreo son similares, las distribuciones resultantes son muy diferentes. El LHS produce una dispersión homogénea, no sólo en un sentido multidimensional (Fig. 2.7a), sino también en cada dimensión. Por el contrario, el método de muestreo que se adoptó en Minari et al.

(2007) permite zonas intermedias vacías y es poco eficiente para cubrir distancias generadas por más de dos cambios simultáneos (Fig. 2.7b).

Para comparar desempeños se realizó una validación externa (Martens y Naes, 1989) para ambos sensores comprobando un método predictivo con el conjunto de calibración del otro y calculando del error estándar $\sqrt{\text{avg}(sMSE)\%}$ como indicador general. La Tabla 2.3 muestra que el sensor PLSR da 4.34 con el conjunto de calibración de la ANN como conjunto de comprobación, mientras que éste llega a 5.44 con los datos de calibración propuestos en este trabajo. Puesto que no hay diferencia significativa entre estos valores, una calibración fiable se puede atribuir a la PLSR. Por otra parte, la ANN obtiene un impresionante 0.35 con su propio conjunto de calibración, pero 20.13 utilizando los datos de este trabajo para comprobación, es decir, un valor casi 60 veces mayor. Puesto que se puede argumentar que la ANN no estaba capacitada para puntos situados encima de $d^2(\mathbf{f}) > 6$, se repitió la prueba para puntos dentro de la esfera de diámetro 6. Sorprendentemente, el resultado es aún peor: el cambio a 22.94 no puede ser explicado por las distancias estadísticas en el conjunto de datos, sino como obedeciendo a un sobre-entrenamiento que sigue patrones de cambios bi-dimensionales impuestos por el diseño experimental de Minari et al. (2007). Por lo tanto, esta ANN podrá predecir confiablemente cuando el valor de \mathbf{f} esté en algún plano bi-dimensional incluido en \mathfrak{R}^8 , pero no así en cualquier otro punto intermedio.

Tabla 2.3: Comparación de habilidad de predicción con un desarrollo previo (Minari et al., 2007)

Conjunto de datos	ANN	PLSR
Este trabajo	20.13 ^{a)}	5.44 ^{b)}
Este trabajo ($d^2(\mathbf{f}) \leq 6$)	22.94 ^{a)}	3.24 ^{b)}
Como en Minari et al. (2007)	0.35 ^{b)}	4.34 ^{a)}

^{a)} $\sqrt{\text{avg}(sMSE)\%}$ obtenido con el conjunto de datos de comprobación.

^{b)} $\sqrt{\text{avg}(sMSE)\%}$ obtenido con el conjunto de datos de calibración.

Sin embargo, es justo decir que una ANN debe ser más eficiente para predecir el comportamiento no-lineal del proceso SBR en la medida que se elija un conjunto de datos apropiados para su entrenamiento y se seleccione la estructura mínima para evitar sobre-entrenamiento. En este caso particular, el FPM disponible del proceso SBR permite seleccionar uno de los mejores conjuntos de entrenamiento posibles, y teniendo en cuenta que el proceso SBR estacionario es sólo moderadamente no-lineal, es razonable que la

capacidad de generalización del método PLSR conduzca a estimaciones más fiables que el sensor presentado por Minari et al. (2007). De todos modos, el coeficiente de correlación global $\sqrt{\text{avg}(R^2)}$ es 0.9956, en consecuencia se puede asumir una relación lineal dominante en la ventana de operación utilizada. Por lo tanto, para esta aplicación no hay necesidad de utilizar métodos no lineales de calibración, dado que poseen menor capacidad de generalización que los lineales.

2.6 Conclusiones

En este trabajo se utilizó regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR) para desarrollar un sensor algorítmico que estime en línea las propiedades del producto final de un proceso de polimerización SBR industrial. El análisis presentado expone aspectos metodológicos que son convenientes de tener en cuenta cuando se enfrentan sistemas de procesos grandes y complejos. Dado que el proceso no puede ser alterado arbitrariamente y es deseado un amplio dominio de aplicabilidad, un modelo de primeros principios (FPM) con parámetros ajustados a la planta actual se utiliza para obtener los datos necesarios para calibrar el modelo PLSR. Esta experiencia indica algunos puntos metodológicos críticos que se deben tener en cuenta para desarrollos similares:

i) Un muestreo apropiadamente distribuido del espacio de entrada multivariado se debe adoptar para obtener predicciones fiables y precisas; en este trabajo el método de muestreo latino del hipercubo con distribución uniforme multivariada se utiliza exitosamente para determinar diferentes estados estacionarios que cubren una amplia ventana de operación con similar apalancamiento.

ii) Si bien el diseño experimental dispersa los puntos de operación dentro de una ventana de operación permitida, el uso de un FPM del proceso puede generar condiciones de operación inusuales que deben ser excluidas del conjunto de datos de entrenamiento. En esta experiencia se resuelve el problema utilizando una técnica de pre-procesamiento para eliminar valores extremos.

iii) Un progreso sistemático y gradual en el diseño del sensor algorítmico requiere la inspección de indicadores de desempeño global. Por lo tanto, algunos estadísticos útiles para evaluar el ajuste de la regresión múltiple se extienden para cubrir el caso de regresión múltiple multivariada.

iv) Una diferencia significativa en el crecimiento de las varianzas modeladas acumuladas $\sigma_{\hat{X}}^2 = tr(\hat{X}'\hat{X})$ y $\sigma_{\hat{Y}}^2 = tr(\hat{Y}'\hat{Y})$ cuando se incrementa el número de componentes, es una indicación de una posible mala selección de variables predictoras. La inspección de las desviaciones estándar de las variables latentes durante el proceso deflacionario ayuda a visualizar la presencia de irregularidades no-detectadas. Este análisis puede ser complementado con el índice importancia de la variable en la proyección (*VIP*), que ha demostrado su utilidad para la detección de variables predictoras pobres proporcionando la oportunidad de mejorar la precisión PLSR mediante la eliminación de variables que interfieren con baja capacidad predictiva.

v) La selección del número adecuado de variables latentes incluidas en el modelo PLSR se puede realizar exitosamente examinando el error total de predicción y el cociente de sucesivos errores totales o criterio de Wold generalizado.

La estrategia seguida en este trabajo ofrece una metodología integral para el desarrollo sistemático de sensores algorítmicos para sistemas de procesos complejos. Los valores aceptables de los índices de desempeño que cubren el espacio de operación principal dan soporte/apoyo al enfoque propuesto aquí. Además, los resultados de la simulación muestran una sensibilidad adecuada para predecir los cambios en la producción y los niveles de calidad.

Una validación externa realizada con otro sensor ya disponible en la literatura, basado en una red neuronal y aplicado al mismo proceso SBR, dio resultados insatisfactorios. Esto sucedió principalmente porque se ajustó la ANN con un conjunto de datos de entrenamiento que se limitó a sólo dos cambios simultáneos por observación; es decir, el desempeño de la ANN reportado aquí no debe ser atribuido a razones algorítmicas. Hasta cierto punto, esto enfatiza (para ambas estrategias PLSR y ANN) la importancia de contar con conjuntos de datos de entrenamientos consistentes con los objetivos perseguidos y de la habilidad para incorporar conocimiento previo del proceso o de la estructura de los datos. Para muchos sistemas de procesos complejos esto implica una tarea que va más allá de la simple aplicación del algoritmo NIPALS.

Apéndice 2.A Efecto de los errores de medición en la precisión de la predicción

Los datos de calibración generados con el FPM están libres de ruidos de medición, mientras que en las mediciones industriales esto es inevitable. El ruido presente en las variables predictoras se propaga a través del sensor algorítmico a sus estimaciones,

produciendo incertidumbre en las predicciones. Evaluar con cuanta precisión el modelo predictivo PLSR se desempeñará en la práctica exige tener en cuenta las fuentes de errores que se pueden propagar a las predicciones, como los errores de medición. Cuando el sensor algorítmico se implementa en el proceso real, el error de predicción total \mathbf{e}_{total} , se puede estimar como la suma del error propagado \mathbf{e}_{pro} y el error de ajuste $\mathbf{e}_{fit} = \mathbf{y} - E[\hat{\mathbf{y}}]$. En otras palabras (ver Ec. 2.8),

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_{total} &= \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - \mathbf{B}'_{PLS} (\mathbf{x} + \mathbf{e}_m) \\ &= (\mathbf{y} - \mathbf{B}'_{PLS} \mathbf{x}) + (\mathbf{B}'_{PLS} \mathbf{e}_m) = \mathbf{e}_{fit} + \mathbf{e}_{pro}\end{aligned}\quad (2.A.1)$$

donde \mathbf{x} es un vector predictor fijo y \mathbf{e}_m es el vector de errores de medición. Los errores \mathbf{e}_m y \mathbf{e}_{fit} son variables aleatorias no-correlacionadas; es decir, $cov(\mathbf{e}_m, \mathbf{e}_{fit}) = 0$. Por lo tanto, el *MSE* total esperado, promediado sobre todas las variables respuestas, está dada por:

$$\begin{aligned}\frac{1}{p} E[\mathbf{e}'_{total} \mathbf{e}_{total}] &= \frac{1}{p} E[\mathbf{e}'_m \mathbf{B}_{PLS} \mathbf{B}'_{PLS} \mathbf{e}_m + \mathbf{e}'_m \mathbf{B}_{PLS} \mathbf{e}_{fit} + \mathbf{e}'_{fit} \mathbf{B}'_{PLS} \mathbf{e}_m + \mathbf{e}'_{fit} \mathbf{e}_{fit}] \\ &= \frac{1}{p} E[\mathbf{e}'_m \mathbf{B}_{PLS} \mathbf{B}'_{PLS} \mathbf{e}_m] + \frac{1}{p} E[\mathbf{e}'_{fit} \mathbf{e}_{fit}] \\ &= \frac{1}{p} E[\mathbf{e}'_{pro} \mathbf{e}_{pro}] + \frac{1}{p} E[\mathbf{e}'_{fit} \mathbf{e}_{fit}]\end{aligned}\quad (2.A.2)$$

donde el primer término es el *avg(sMSE)* debido a la propagación de errores de medición, y el segundo término es el *avg(sMSE)* debido al error de ajuste (Ec. 2.11).

En la planta industrial de SBR, los errores estándares ($\%e_k = 100\sigma_k/\bar{x}_k$) de las mediciones en línea son cercanos a 0.5% en los caudales molares (incluyendo los errores de medición de caudales volumétricos y de concentraciones), y a 1% en los calores de reacción. Recordar que estos calores se estiman integrando los caudales de refrigeración y utilizando balances de energía apropiados (Gugliotta et al., 1999; Vega et al., 2002). Si los errores de medición están normalizados por desviaciones de referencia como $\sigma_k = 0.2\bar{x}_k/\sqrt{3}$, el vector \mathbf{e}_m se calcula por $\mathbf{e}_m = \sqrt{3}/20[e_1 \cdots e_{12}]'$. Siguiendo este procedimiento, el error total esperado (Ec. 2.A.2) resulta igual a: $avg(sMSE)_{total} = 0.0084 + 0.0088 = 0.0172$ (es decir, $\sqrt{avg(MSE)_{total}} \% = 13.1\%$). Nótese que el modelo PLSR revisado no sólo brinda el menor error de ajuste (0.0084), sino también menor error de propagación debido al menor número de variables predictoras consideradas.

Capítulo 3

Detección y diagnóstico de fallas basado en descomposición PLSR del espacio de medición

Resumen

En este capítulo se propone un procedimiento de modelado basado en regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR) más completo. El mismo adiciona la proyección del espacio respuesta sobre el subespacio respuesta predicho (subespacio imagen del espacio predictor), permitiendo descomponer el error de predicción en dos términos. En base a las matrices del modelo PLSR más completo se desarrolló una nueva descomposición PLSR de los espacios predictor y respuesta, y de su interrelación, mediante la cual se puede descomponer cada espacio en dos subespacios oblicuos complementarios. Se crearon nuevos estadísticos para monitorear en línea los desplazamientos de las nuevas proyecciones PLSR en cada subespacio. Para detectar anomalías se diseñó un índice único que combina estos estadísticos específicos, que actúan sobre cada subespacio sin solapar sus dominios de aplicación, el cual es completo por cubrir todo el espacio de medición. A través de un modelo se analiza el efecto de cada anomalía estudiada sobre los subespacios PLSR, para determinar que estadísticos componentes contribuirán al índice combinado durante cada tipo de evento. Para completar este diagnóstico, se propone una nueva descomposición de cada estadístico componente con alarma en las contribuciones de cada variable. Un análisis de la fiabilidad respecto de las capacidades de diagnóstico de la descomposición propuesta del índice combinado en sus contribuciones garantiza una correcta aislación de fallas (o variables responsables). Mediante toda esta información se pueden clasificar hasta seis tipos de anomalías o fallas. A partir de todo esto, se desarrolló una nueva técnica de monitoreo estadístico multivariado basado en un modelo PLSR construido con datos de funcionamiento normal, la cual detecta una anomalía/falla utilizando un único índice combinado, diagnostica su tipo en base al patrón de estadísticos componentes con alarmas y por último, identifica las variables responsables a través de sus principales contribuciones positivas. Varias características de la técnica propuesta se analizan a través de ejemplos de simulación estáticos y dinámicos fácilmente reproducibles. La técnica también puede ser utilizada para monitorear sistemas multivariados a lazo cerrado y detectar el funcionamiento anormal de algún controlador. La

efectividad de la técnica mostrada en los ejemplos simulados permite pensar en su potencial aplicación en sistemas reales de producción.

3.1 Introducción

La necesidad de asociar mediciones en línea de varias variables de entrada y salida originadas en un proceso multivariado complejo, constituye un problema que requiere cada vez más atención. En la industria se utilizan estrategias de monitoreo para detectar y diagnosticar el comportamiento anormal de los procesos. Últimamente, se están proponiendo índices de detección de fallas para indicar anomalías en las operaciones de un proceso: una señal de alarma aparece básicamente cuando un índice simple o combinado cruza su límite de control. Después que se detecta una falla, la necesidad de tener un diagnóstico sobre su causa se vuelve casi imperativa. Por lo general, este diagnóstico se realiza analizando las contribuciones hechas por cada variable al índice que originó la alarma. Se examinan las contribuciones de cada variable a un índice determinado con la idea de que las variables que contribuyen tendrán grandes valores (positivos). Un requisito esencial para el diagnóstico de fallas es evitar diagnósticos erróneos tanto como sea posible. Los gráficos de contribución, básicamente calculan las contribuciones de las variables en una situación de falla y seleccionan las variables con grandes contribuciones como indicadores de la causa probable de la falla (Alcala y Qin, 2009). Con este concepto, un análisis de contribuciones bien definido debe tener las siguientes propiedades deseables: i) cuando no hay falla presente, todas las contribuciones de variables deberían tener estadísticamente el mismo valor medio (bajo), el cual establecerá un nivel base para comparar las contribuciones cuando exista una falla, ii) si se produce una falla en una sola variable, la contribución de esa variable debe ser la más grande, y iii) si están presentes más de una falla (por ejemplo, fallas de sensores múltiples), la contribución de cada medición anormal debe ser mayor que el resto (Alcala y Qin, 2011).

En procesos de mediana y gran escala, tales como la fabricación de químicos, alimentos, acero, etc., hay un gran número de variables controladas y manipuladas, y variables de proceso. La naturaleza multivariada de la mayoría de estos procesos presenta variables altamente correlacionadas y con una dimensión efectiva mucho menor en el subespacio en que se mueven las variables latentes. Por esta razón, los métodos de proyección a variables latentes pueden transformar datos correlacionados y ruidosos en un conjunto más pequeño pero que guarda la mayor parte de la información y que está libre de mal condicionamiento

(Kourti, 2005). Las técnicas como PCA, ICA (análisis de componentes independientes) y PLSR permiten ajustar un modelo utilizando un conjunto de datos que podrían haber estado originalmente mal condicionados. En particular PLSR determina un conjunto reducido de variables latentes de entrada y salida, lo que permite ajustar un sistema lineal MIMO aún utilizando datos mal condicionados. Por otro lado, los sistemas de monitoreo basados en modelos latentes son las principales herramientas con claras posibilidades de aplicación a sistemas industriales. Estas técnicas poseen variantes que se han estudiado durante décadas. Sin embargo, varios trabajos recientes (AlGazzawi et al., 2009; Gang et al., 2010; Alcalá et al., 2011; Godoy et al., 2011) demuestran esfuerzos por entender aún más la técnica y mejorar su aplicación. PLSR se ha convertido en una herramienta poderosa para encontrar estructuras multivariadas lineales en los datos, debido principalmente a que colinealidades importantes, frecuentemente implícitas, pueden ser adecuadamente superadas. Hoy en día, las industrias de procesos químicos apelan a tecnologías de control multivariable para controlar complejos procesos multi-entrada multi-salida (MIMO). Sin embargo, en general, está claro que no sólo los sistemas de control multivariable, sino también los tradicionales sistemas de control multi-lazo deben ser monitoreados para mejorar los estándares de calidad, desempeño, y estabilizar rendimientos de producción. Últimamente, algunas aplicaciones basadas en PCA/PLSR se realizan a través de sistemas de adquisición de datos que recolectan mediciones directamente de la planta. Una importante contribución en este campo fue proporcionada por AlGazzawi y Lennox (2009), quienes investigaron la habilidad de técnicas de control estadístico de procesos multivariados (MSPC) para supervisar sistemas industriales de control predictivo basado en modelo (MPC). Por lo tanto, el desarrollo de herramientas de vigilancia para detectar anomalías o bajos rendimientos indeseables se ha convertido en un campo de investigación importante.

Este capítulo intenta realizar una contribución en este campo, proporcionando una técnica de procesamiento de datos en línea capaz de orientar a los ingenieros de proceso sobre las causas principales de las fallas y actuaciones indeseables que disparan una alarma. El capítulo se organiza de la siguiente manera: en la Sección 3.2, se recuerdan las principales relaciones que surgen en el desarrollo de un modelo PLSR y se describe la modificación propuesta para completar el modelado, en particular se formaliza la descomposición implícita PLSR y se describen varias propiedades geométricas útiles para una mejor comprensión de la contribución. En la Sección 3.3 se presentan las herramientas estadísticas principales y se describen sus roles en la descomposición de las mediciones. El

ejemplo de aplicación numérica en la Subsección 3.4.1 tiene una importancia fundamental en la comprensión de la técnica propuesta. La Subsección 3.4.2 presenta las características de aplicar la técnica a un proceso dinámico cíclico. En la Subsección 3.4.3 se presenta un caso más realista a través de la aplicación a un reactor tanque agitado continuo (CSTR) no isotérmico. Finalmente, las conclusiones se presentan en la Sección 3.5.

3.2 Extensión del modelado PLSR

El modelo PLSR aquí desarrollado se calcula deflacionando simultáneamente las matrices de datos, utilizando el algoritmo PLSR-NIPALS clásico (Geladi y Kowalski, 1986), el cual da mejores resultados para predicción multi-variable y para monitoreo de procesos que otros algoritmos alternativos (Gang et al., 2010). La deflación simultánea de las matrices de datos permite la detección temprana de variables predictoras que interfieren en el modelo de regresión; es decir, que no poseen importancia para predecir las variables respuesta (Godoy et al., 2011).

Dada una matriz predictor $\mathbf{X}=[\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N]'$ ($N \times m$), que consiste en N muestras con m variables por muestra, y una matriz respuesta $\mathbf{Y}=[\mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_N]'$ ($N \times p$), con p variables por muestra, se puede utilizar PLSR para encontrar un modelo de regresión entre los vectores de medición $\mathbf{x}=[x_1 \dots x_m]'$ e $\mathbf{y}=[y_1 \dots y_p]'$, incluso cuando sus matrices de correlación \mathbf{R}_x y \mathbf{R}_y son positivas semi-definidas (es decir, \mathbf{X} e \mathbf{Y} poseen variables colineales). El método proyecta \mathbf{X} e \mathbf{Y} sobre espacios correlacionados de baja dimensión definidos por un número de variables latentes A común. El algoritmo PLSR-NIPALS utilizado para realizar PLSR se describe en la Tabla 3.1. El objetivo de PLSR implícito en este algoritmo para la a -ésima iteración es encontrar la solución del siguiente problema:

$$\max_{\mathbf{w}_a, \mathbf{q}_a} (\mathbf{w}_a' \mathbf{X}_a' \mathbf{Y}_a \mathbf{q}_a) \quad \text{suje}to \quad a: \quad \|\mathbf{w}_a\|=1, \|\mathbf{q}_a\|=1 \quad (3.1)$$

donde \mathbf{X}_a e \mathbf{Y}_a son las a -ésimas versiones deflacionadas de $\mathbf{X}_1=\mathbf{X}$ e $\mathbf{Y}_1=\mathbf{Y}$ ($a=1$). La selección de A se determina supervisando la deflación simultánea de \mathbf{X} e \mathbf{Y} (Godoy et al., 2011).

Este procedimiento (Tabla 3.1) induce un modelo externo y otro interno. El modelo externo descompone \mathbf{X} e \mathbf{Y} en observaciones de variables latentes (\mathbf{t}_a y \mathbf{u}_a), vectores peso (\mathbf{p}_a y \mathbf{q}_a), y matrices de errores residuales ($\tilde{\mathbf{X}}$ e $\tilde{\mathbf{Y}}_2$), como sigue:

$$\mathbf{X} = \sum_{a=1}^A \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a' + \tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{TP}' + \tilde{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{X}} + \tilde{\mathbf{X}}, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{Y} = \sum_{a=1}^A \mathbf{u}_a \mathbf{q}'_a + \tilde{\mathbf{Y}}_2 = \mathbf{UQ}' + \tilde{\mathbf{Y}}_2 = \hat{\mathbf{Y}}^* + \tilde{\mathbf{Y}}_2, \quad (3.3)$$

donde $\mathbf{P} = [\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_A]$, $\mathbf{Q} = [\mathbf{q}_1 \dots \mathbf{q}_A]$, $\mathbf{T} = [\mathbf{t}_1 \dots \mathbf{t}_A]$, y $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_A]$ son ortogonales por columnas (ver Tabla 3.1). Este modelo externo (o de correlaciones) relaciona variables latentes de entrada (salida) con variables predictoras (respuesta) medibles. En el modelo interno, \mathbf{t}_a es linealmente regresionado contra el vector \mathbf{u}_a (ver Tabla 3.1), i.e.:

$$\mathbf{U} = \mathbf{TB} + \tilde{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{U}} + \tilde{\mathbf{U}}, \quad \mathbf{B} = \text{diag}(b_1 \dots b_A) \quad (3.4)$$

donde $b_1 \dots b_A$ son los coeficientes de regresión determinados por minimización de cada columna de la matriz residual $\tilde{\mathbf{U}}$. Este modelo interno (o de relaciones causales) relaciona variables latentes de entrada y salida.

Las predicciones de \mathbf{T} y \mathbf{U} se obtienen por medio de $\mathbf{R} = [\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_A]$ (la pseudo-inversa de \mathbf{P}' , es decir, $\mathbf{P}'\mathbf{R} = \mathbf{R}'\mathbf{P} = \mathbf{I}$) y $\mathbf{S} = [\mathbf{s}_1 \dots \mathbf{s}_A]$ (la pseudo-inversa de \mathbf{Q}' , es decir, $\mathbf{Q}'\mathbf{S} = \mathbf{S}'\mathbf{Q} = \mathbf{I}$); directamente de la Ec. (3.2) y (3.3) respectivamente, como:

$$\mathbf{T} = \mathbf{XR}, \quad (3.5)$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{YS}, \quad (3.6)$$

debido a que el espacio filas de $\tilde{\mathbf{X}}$ ($\tilde{\mathbf{Y}}_2$) pertenece al espacio nulo de \mathbf{R} (\mathbf{S})¹⁾, por tanto $\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{R} = 0$ ($\tilde{\mathbf{Y}}_2\mathbf{S} = 0$). Luego, reemplazando la predicción de \mathbf{T} (Ec. 3.5) en el modelo interno (Ec. 3.4) y esto a su vez en el modelo externo de \mathbf{Y} (Ec. 3.3), resulta el siguiente modelo de predicción:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{XRBQ}' + \tilde{\mathbf{U}}\mathbf{Q}' + \tilde{\mathbf{Y}}_2 = \hat{\mathbf{Y}} + \tilde{\mathbf{Y}}_1 + \tilde{\mathbf{Y}}_2 \quad (3.7)$$

donde $\tilde{\mathbf{Y}}_2 = \mathbf{Y} - \mathbf{YSQ}'$ e $\tilde{\mathbf{Y}}_1 = \mathbf{YSQ}' - \hat{\mathbf{Y}}$ son las matrices de errores de proyección y de predicción, respectivamente. Además, $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{XRP}'$ verifica la siguiente relación:

$$\hat{\mathbf{X}}\mathbf{RBQ}' = \mathbf{XRBQ}' = \hat{\mathbf{Y}} \quad (3.8)$$

En resumen, la adición de la predicción de \mathbf{U} a partir de las respuestas \mathbf{Y} (Ec. 3.6) extiende la descripción del modelo PLSR, permitiendo descomponer el error de predicción total $\tilde{\mathbf{Y}}$ en dos términos $\tilde{\mathbf{Y}}_1$ y $\tilde{\mathbf{Y}}_2$. Esto constituye la extensión respecto a la Subsección 2.4.1.

¹⁾ La matriz \mathbf{R} se obtiene por medio de la descomposición en valores singulares (SVD) compacta de $\mathbf{P}' = \bar{\mathbf{U}}\bar{\Sigma}\bar{\mathbf{V}}'$, como $\mathbf{R} = (\mathbf{P}')^- = \bar{\mathbf{V}}\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{U}}'$, donde $^-$ denota una inversa generalizada (Meyer, 2000). En forma similar se obtiene la matriz \mathbf{S} .

Tabla 3.1: Algoritmo PLSR-NIPALS deflacionando \mathbf{X} e \mathbf{Y} .

Centrar las columnas de \mathbf{X} e \mathbf{Y} a media cero y escalarlas a varianza unitaria.

0. Fijar $a=1$ y $\mathbf{X}_1 = \mathbf{X}$, $\mathbf{Y}_1 = \mathbf{Y}$. (Inicialización)

1. Fijar \mathbf{u}_a y \mathbf{t}_a^0 igual a la columna de máxima varianza de \mathbf{Y}_a y \mathbf{X}_a , respectivamente.

2. $\mathbf{w}_a = \mathbf{X}'_a \mathbf{u}_a / \|\mathbf{X}'_a \mathbf{u}_a\|$, ($\|\mathbf{w}_a\|=1$)

3. $\mathbf{t}_a = \mathbf{X}'_a \mathbf{w}_a$,

4. $\mathbf{q}_a = \mathbf{Y}'_a \mathbf{t}_a / \|\mathbf{Y}'_a \mathbf{t}_a\|$, ($\|\mathbf{q}_a\|=1$)

5. $\mathbf{u}_a = \mathbf{Y}'_a \mathbf{q}_a$,

Si $\|\mathbf{t}_a^0 - \mathbf{t}_a\| < \varepsilon$, ir al paso 6, sino fijar $\mathbf{t}_a^0 = \mathbf{t}_a$ y volver al paso 2.

6. $\mathbf{p}_a^* = \mathbf{X}'_a \mathbf{t}_a / (\mathbf{t}'_a \mathbf{t}_a)$, $\mathbf{p}_a = \mathbf{p}_a^* / \|\mathbf{p}_a^*\|$, ($\|\mathbf{p}_a\|=1$)

7. $\mathbf{t}_a = \mathbf{t}_a \|\mathbf{p}_a^*\|$, $\mathbf{w}_a = \mathbf{w}_a \|\mathbf{p}_a^*\|$, ($\|\mathbf{w}_a\| \neq 1$) (Compensación de escalas por normalización anterior)

8. $b_a = \mathbf{u}'_a \mathbf{t}_a / (\mathbf{t}'_a \mathbf{t}_a)$, (Regresión interna)

9. $\mathbf{X}_{a+1} = \mathbf{X}_a - \mathbf{t}_a \mathbf{p}'_a$, $\mathbf{Y}_{a+1} = \mathbf{Y}_a - b_a \mathbf{t}_a \mathbf{q}'_a$, (Deflaciones)

10. $\mathbf{P} \leftarrow \mathbf{p}_a$, $\mathbf{Q} \leftarrow \mathbf{q}_a$, $\mathbf{B} \leftarrow b_a$, $\mathbf{T} \leftarrow \mathbf{t}_a$, $\mathbf{U} \leftarrow \mathbf{u}_a$, (Guardar datos en matrices de salida)

Fijar $a=a+1$ y volver al paso 1. Parar cuando $a>A$.

Salidas directas del algoritmo: \mathbf{P} , \mathbf{Q} , \mathbf{B} , y \mathbf{T} , \mathbf{U} .

3.2.1 Descomposición PLSR de los espacios predictor y respuesta

Después de sintetizar un modelo PLSR, los vectores de mediciones $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ e $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$, se pueden descomponer en proyecciones y estas se hallan interrelacionadas como se describe a continuación.

Lema 1. Se llama a $\Pi_{\mathbf{P}|\mathbb{R}^+}$ ($\Pi_{\mathbf{Q}|\mathbb{S}^\perp}$) el proyector sobre el subespacio modelo

$S_{MX} \equiv \text{Span}\{\mathbf{P}\} \subseteq \mathbb{R}^m$ ($S_{MY} \equiv \text{Span}\{\mathbf{Q}\} \subseteq \mathbb{R}^p$), a lo largo del subespacio residuo

$S_{RX} \equiv \text{Span}\{\mathbf{R}\}^\perp$ ($S_{RY} \equiv \text{Span}\{\mathbf{S}\}^\perp$). Entonces:

$$\Pi_{\mathbf{P}|\mathbb{R}^+} = \mathbf{P}\mathbf{R}', \quad \Pi_{\mathbf{R}^\perp|\mathbf{P}} = \mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}', \quad (3.9)$$

$$\Pi_{\mathbf{Q}|\mathbb{S}^\perp} = \mathbf{Q}\mathbf{S}', \quad \Pi_{\mathbb{S}^\perp|\mathbf{Q}} = \mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{S}', \quad (3.10)$$

donde $^\perp$ denota el complemento ortogonal del subespacio (ver prueba en el Apéndice 3.A).

A partir del Lema 1 se propone el siguiente teorema sobre la descomposición inducida por PLSR de los espacios de medición involucrados.

Teorema 1. *Los espacios de variables predictoras ($\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$) y de variables respuestas ($\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$) se pueden descomponer (por PLSR) en subespacios oblicuos complementarios como:*

$$\begin{aligned}\mathbf{x} &= \hat{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^m, \\ \hat{\mathbf{x}} &= \mathbf{P}\mathbf{R}'\mathbf{x} \in S_{MX} \equiv \text{Span}\{\mathbf{P}\}, \\ \tilde{\mathbf{x}} &= \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}')\mathbf{x} \in S_{RX} \equiv \text{Span}\{\mathbf{R}\}^\perp\end{aligned}\quad (3.11)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{y} &= \hat{\mathbf{y}}^* + \tilde{\mathbf{y}}_2 \in \mathbb{R}^p, \\ \hat{\mathbf{y}}^* &= \mathbf{Q}\mathbf{S}'\mathbf{y} \in S_{MY} \equiv \text{Span}\{\mathbf{Q}\}, \\ \tilde{\mathbf{y}}_2 &= \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}^* = (\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{S}')\mathbf{y} \in S_{RY} \equiv \text{Span}\{\mathbf{S}\}^\perp,\end{aligned}\quad (3.12)$$

donde $\hat{\mathbf{x}}$, $\tilde{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}^*$ e $\tilde{\mathbf{y}}_2$ denotan las proyecciones sobre S_{MX} , S_{RX} , S_{MY} y S_{RY} , respectivamente.

Ambos subespacios modelo S_{MX} e S_{MY} se interrelacionan de acuerdo a:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{y}}^* &= \hat{\mathbf{y}} + \tilde{\mathbf{y}}_1, \\ \hat{\mathbf{y}} &= \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{R}'\hat{\mathbf{x}} \in S_{MY}, \\ \tilde{\mathbf{y}}_1 &= \hat{\mathbf{y}}^* - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{Q}\mathbf{S}'\mathbf{y} - \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{R}'\hat{\mathbf{x}} \in S_{MY}\end{aligned}\quad (3.13)$$

donde $\tilde{\mathbf{y}}_1$ es el error de la transformación lineal $\hat{\mathbf{x}} \rightarrow \hat{\mathbf{y}}^*$ e $\hat{\mathbf{y}}$ denota la parte predecible de $\hat{\mathbf{y}}^*$ a partir de $\hat{\mathbf{x}}$ (ver prueba en el Apéndice 3.A).

Las coordenadas latentes sobre los subespacios (o hiper-planos) modelo S_{MX} y S_{MY} , correspondientes a las proyecciones $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}^*$, están dadas por:

$$\begin{aligned}\mathbf{t} &= \mathbf{P}'\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{R}'\mathbf{x}, \\ \mathbf{u} &= \mathbf{Q}'\hat{\mathbf{y}}^* = \mathbf{S}'\mathbf{y},\end{aligned}\quad (3.14a)$$

donde $\mathbf{t} = [t_1 \cdots t_A]'$ y $\mathbf{u} = [u_1 \cdots u_A]'$ son los vectores de coordenadas latentes sobre S_{MX} y S_{MY} , respectivamente. Estos vectores se hallan relacionados entre sí de la siguiente manera:

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{B}\mathbf{t}.\quad (3.14b)$$

donde $\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{S}'\hat{\mathbf{y}}^*$ es la estimación de \mathbf{u} (ver Ec. 3.6). Nótese también que:

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{P}\mathbf{t}, \quad \hat{\mathbf{y}}^* = \mathbf{Q}\hat{\mathbf{u}}.\quad (3.14c)$$

Por lo tanto, las matrices de correlación involucradas se relacionan como sigue:

$$\mathbf{\Lambda} = \mathbf{R}'\mathbf{R}_x\mathbf{R} = (N-1)^{-1}\mathbf{T}'\mathbf{T} = \text{diag}(\lambda_1 \dots \lambda_A),\quad (3.15a)$$

$$\Delta = (N - 1)^{-1} \hat{\mathbf{U}}' \hat{\mathbf{U}} = \mathbf{B} \Lambda \mathbf{B} = \text{diag}(\hat{\delta}_1 \dots \hat{\delta}_A), \quad (3.15b)$$

$$\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{x}}} = (N - 1)^{-1} \hat{\mathbf{X}}' \hat{\mathbf{X}} = \mathbf{P} \Lambda \mathbf{P}' = \sum_{a=1}^A \lambda_a \mathbf{p}_a \mathbf{p}_a' \quad (3.16a)$$

$$\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}} = (N - 1)^{-1} \hat{\mathbf{Y}}' \hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Q} \Delta \mathbf{Q}' = \sum_{a=1}^A \lambda_a b_a^2 \mathbf{q}_a \mathbf{q}_a' \quad (3.16b)$$

donde λ_i y $\hat{\delta}_i$ son las varianzas estimadas de t_i y \hat{u}_i , respectivamente. Nótese también que $\Delta_{\mathbf{u}} = (N - 1)^{-1} \mathbf{U}' \mathbf{U} = \mathbf{S}' \mathbf{R}_y \mathbf{S} = \text{diag}(\delta_1 \dots \delta_A)$ (ver Ec. 3.6).

La Fig. 3.1 muestra las principales propiedades geométricas de la descomposición PLSR a través de un ejemplo ilustrativo. En este ejemplo, se descompone cada vector de medición \mathbf{x} e \mathbf{y} en sus respectivas proyecciones y éstas se comparan con sus regiones bajo control (intervalos para S_{RX} y S_{RY} , y elipses para S_{MX} y S_{MY}). Además, se ilustra la relación entre ambos subespacios modelo S_{MX} y S_{MY} , y el ángulo oblicuo θ_X (θ_Y) entre el subespacio modelo S_{MX} (S_{MY}) y su subespacio residuo complementario S_{RX} (S_{RY}).

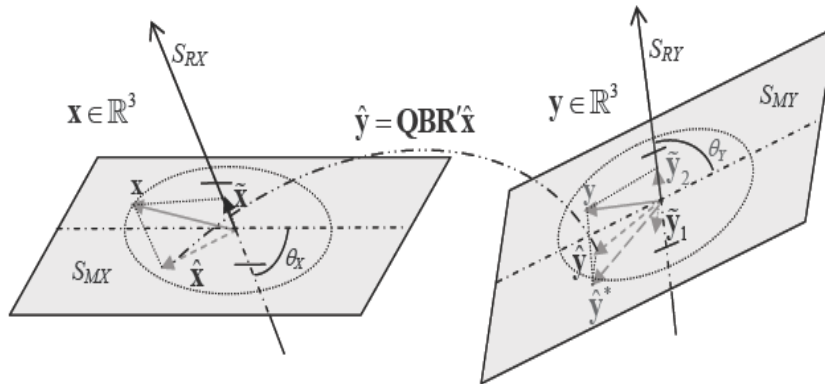


Figura 3.1: Ejemplo ilustrativo para visualizar la descomposición PLSR de \mathbf{x} e \mathbf{y} en sus respectivas proyecciones, con sus relaciones y regiones de control.

3.3 Monitoreo de proceso basado en PLSR

El monitoreo estadístico de un proceso consiste en tres actividades: 1) la detección de una situación fuera de control (o falla), 2) el diagnóstico del tipo de anomalía que originó el comportamiento anormal, y 3) la identificación de las variables responsables. Las técnicas de monitoreo dedicadas a detección y diagnóstico deberán proporcionar la información

necesaria para determinar las acciones correctivas. Las Subsecciones 3.3.1, 3.3.2 y 3.3.3 de esta Sección tratan los puntos 1), 2) y 3), respectivamente.

3.3.1 Índices para detección de anomalías

En base a un modelo PLSR *bajo-control*, se puede analizar cualquier comportamiento actual del proceso, proyectando las mediciones \mathbf{x} y \mathbf{y} actuales sobre cada subespacio (S_{MX} , S_{RX} , S_{MY} , y S_{RY}) y midiendo sus desviaciones para compararlas con sus límites de control. Por lo tanto, para detectar un cambio significativo en S_{MX} , se define el siguiente estadístico T^2 de Hotelling para \mathbf{t} como:

$$T_{\mathbf{t}}^2 = \|\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\mathbf{t}\|^2 = \|(\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\mathbf{P}')\hat{\mathbf{x}}\|^2 = \|(\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\mathbf{R}')\mathbf{x}\|^2 \quad (3.17)$$

Cuando se produce un nuevo evento especial (originalmente no considerado por el modelo PLSR bajo-control), la nueva observación \mathbf{x} se moverá fuera de S_{MX} hacia S_{RX} . El error cuadrático de predicción de \mathbf{x} ($SPE_{\mathbf{x}}$), o distancia al modelo en S_{RX} , se define como:

$$SPE_{\mathbf{x}} = \|\tilde{\mathbf{x}}\|^2 = \|(\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}')\mathbf{x}\|^2 \quad (3.18)$$

Para detectar un cambio significativo en S_{MY} se define el estadístico T^2 para $\hat{\mathbf{u}}$ como:

$$T_{\hat{\mathbf{u}}}^2 = \|\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\hat{\mathbf{u}}\|^2 = \|(\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\mathbf{S}')\hat{\mathbf{y}}\|^2 \quad (3.19)$$

Para complementar la medida sobre este mismo subespacio se define la distancia al modelo de regresión en S_{MY} como (ver Ec. 3.13):

$$SPE_{y_1} = \|\tilde{\mathbf{y}}_1\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{Q}\mathbf{S}' & -\mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{R}' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} \right\|^2 = \|\mathbf{Q}(\mathbf{S}'\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{R}'\mathbf{x})\|^2 = \overbrace{\|\mathbf{Q}\|^2}^{=1} \|\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}}\|^2 \quad (3.20)$$

y la distancia al modelo en S_{RY} se define como:

$$SPE_{y_2} = \|\tilde{\mathbf{y}}_2\|^2 = \|(\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{S}')\mathbf{y}\|^2 \quad (3.21)$$

Con frecuencia, $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{x}}}$ y $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}$ son singulares, porque $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$ poseen variables colineales. En consecuencia, se considera la distancia de Mahalanobis generalizada de $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$, dadas por:

$$D_{\hat{\mathbf{x}}} = \hat{\mathbf{x}}'\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{x}}}^{-}\hat{\mathbf{x}}, \quad (3.22a)$$

$$D_{\hat{\mathbf{y}}} = \hat{\mathbf{y}}'\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}^{-}\hat{\mathbf{y}}. \quad (3.22b)$$

Teorema 2. *Los estadísticos sobre $\hat{\mathbf{x}}$, \mathbf{t} , $\hat{\mathbf{u}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$ son equivalentes, es decir:*

$D_{\hat{\mathbf{x}}} = T_{\mathbf{t}}^2 = T_{\hat{\mathbf{u}}}^2 = D_{\hat{\mathbf{y}}}$ (ver prueba en el Apéndice 3.A).

Este resultado sugiere que las variables de respuesta \mathbf{y} pueden ser monitoreados a través de un estadístico PLSR sobre las variables predictoras \mathbf{x} . Debido a esta equivalencia (ver Teorema 2), se propone realizar el monitoreo utilizando sólo cuatro estadísticos independientes, T_t^2 , SPE_x , SPE_{y1} , y SPE_{y2} , cada uno actuando sobre un subespacio diferente: S_{MX} , S_{RX} , S_{MY} , y S_{RY} , respectivamente; y sus medidas de distancia no se superponen y juntas abarcan ambos espacios de medición completos (ver Fig. 3.1). En consecuencia, resulta un índice combinado total I_{TC} que considera ambos espacios de medición completos sin superposición de actuación (o medida de distancia), el cual está dado por:

$$I_{TC} = \frac{T_t^2}{\tau_\alpha^2} + \frac{SPE_x}{\delta_{x,\alpha}^2} + \frac{SPE_{y1}}{\delta_{y1,\alpha}^2} + \frac{SPE_{y2}}{\delta_{y2,\alpha}^2} = [\mathbf{y}' \quad \mathbf{x}'] \overbrace{\begin{bmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} \\ \Phi_{12}' & \Phi_{22} \end{bmatrix}}^{\Phi} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}, \quad (3.23)$$

$$\Phi_{11} = [(\delta_{y1,\alpha}^2)^{-1} + (\delta_{y2,\alpha}^2)^{-1}] \mathbf{S}\mathbf{S}' + (\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{S}' - \mathbf{S}\mathbf{Q}') (\delta_{y2,\alpha}^2)^{-1}$$

$$\Phi_{12} = -(\delta_{y1,\alpha}^2)^{-1} \mathbf{S}\mathbf{B}\mathbf{R}',$$

$$\Phi_{22} = \mathbf{R} [\mathbf{I} (\delta_{x,\alpha}^2)^{-1} + \mathbf{\Lambda}^{-1} (\tau_\alpha^2)^{-1} + \mathbf{B}^2 (\delta_{y1,\alpha}^2)^{-1}] \mathbf{R}' + (\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}' - \mathbf{R}\mathbf{P}') (\delta_{x,\alpha}^2)^{-1}$$

donde τ_α^2 , $\delta_{x,\alpha}^2$, $\delta_{y1,\alpha}^2$, $\delta_{y2,\alpha}^2$ son los respectivos límites de control α , Φ es simétrica definida positiva y el límite de control α de I_{TC} es I_α (ver Apéndice 3.B). La estructura de Φ resulta de combinar las Ecs. (3.17), (3.18), (3.20) y (3.21) en la Ec. (3.23) del índice combinado. Este índice es útil para monitorear en forma conjunta la calidad del proceso, las fallas del proceso, y las fallas de los sensores. Las principales diferencias entre los estadísticos que componen al I_{TC} son el escalamiento y el subespacio en que actúa. Usualmente la escala τ_α^2 (del estadístico T_t^2) es mucho mayor que cualquiera de las escalas $\delta_{x,\alpha}^2$, $\delta_{y1,\alpha}^2$ o $\delta_{y2,\alpha}^2$, de los errores cuadráticos. Esto sucede porque la variabilidad tipo ruido de cada error cuadrático es mucho menor que la variabilidad de la señal T_t^2 respondiendo a la estructura de correlación. Por lo tanto, un desplazamiento en S_{MX} contribuye mucho menos a I_{TC} (Ec. 3.23) que un desplazamiento de igual magnitud en S_{RX} , S_{MY} , o S_{RY} , medido a través de SPE_x , SPE_{y1} , o SPE_{y2} , respectivamente. Un índice de detección combinado define una región elíptica multidimensional que es compatible con la suposición de que los datos son multi-normales, lo que reduce las falsas alarmas y la tasa de fallas no detectadas con respecto a la utilización de índices separados (Yue y Qin, 2001).

3.3.2 Diagnóstico de anomalías mediante subespacios con alarmas

Se define anomalía a un cambio en las mediciones que dispare una condición de alarma dada por $I_{TC} \geq I_\alpha$. La causa de la anomalía puede ser: a) cambio de ganancias del proceso, b) cambio significativo de la variabilidad de una o más variables del proceso, c) alteración de las correlaciones temporales y/o cruzadas entre variables; d) fallas en los sensores, o e) cambio de operación excesivo. El caso e) implica un cambio en las mediciones siguiendo la estructura de correlación capturada por el modelo PLSR, mientras que los casos a), b) c) y d) implican cambios en una o más variables que alteran su patrón de correlación con las restantes.

Para poder analizar el efecto de cada anomalía sobre los estadísticos específicos que componen a I_{TC} y los subespacios PLSR asociados, se definirá un modelo de proceso afectado por una anomalía. Para lo cual, primero se define un modelo de proceso “normal” con mediciones \mathbf{x}_0 e \mathbf{y}_0 correlacionadas (que dependen de un proceso intrínseco \mathbf{t}_0 de dimensión $A \leq m, p$) como sigue:

$$\begin{cases} \mathbf{t}_0 \sim N(0, \mathbf{\Lambda}), \quad \mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1 \dots \lambda_A) \\ \mathbf{x}_0 = \mathbf{P}\mathbf{t}_0 \in S_{MX} \equiv \text{Span}\{\mathbf{P}\} \subseteq \mathbb{R}^m \\ \mathbf{y}_0 = \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{t}_0 \in S_{MY} \equiv \text{Span}\{\mathbf{Q}\} \subseteq \mathbb{R}^p \end{cases} \quad (3.24a)$$

donde la predicción \mathbf{t}_0 e \mathbf{y}_0 a partir de \mathbf{x}_0 esta dada por: $\mathbf{t}_0 = \mathbf{R}'\mathbf{x}_0$ con $\mathbf{R}' = \mathbf{P}^-$ (i.e.

$\mathbf{R}'\mathbf{P} = \mathbf{I}$) e $\mathbf{y}_0 = \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{R}'\mathbf{x}_0 = \sum_{a=1}^A b_a \mathbf{q}_a \mathbf{r}'_a \mathbf{x}_0$, respectivamente. En este modelo $\mathbf{t}_0 \in \mathbb{R}^A$ son las

variables intrínsecas que se propagan a las mediciones \mathbf{x}_0 e \mathbf{y}_0 . Las matrices de correlación

de \mathbf{x}_0 e \mathbf{y}_0 (Ec. 3.24a) son: $\mathbf{R}_{\mathbf{x}_0} = \sum_{a=1}^A \lambda_a \mathbf{p}_a \mathbf{p}'_a$ y $\mathbf{R}_{\mathbf{y}_0} = \sum_{a=1}^A \lambda_a b_a^2 \mathbf{q}_a \mathbf{q}'_a$. Luego, una anomalía se

define como un cambio de la estructura del proceso normal (Ec. 3.24a) o una falla en sus mediciones, y se describe con un único término $\Delta\mathbf{P}$, $\Delta\mathbf{B}$, $\Delta\mathbf{Q}$, $\boldsymbol{\xi}$, o $\boldsymbol{\eta}$ distinto de cero en la generación de \mathbf{x} e \mathbf{y} :

$$\begin{cases} \mathbf{x} = (\mathbf{P} + \Delta\mathbf{P})\mathbf{t}_0 + \boldsymbol{\xi} = \mathbf{P}_p \mathbf{t}_0 + \boldsymbol{\xi} \\ \mathbf{y} = (\mathbf{Q} + \Delta\mathbf{Q})(\mathbf{B} + \Delta\mathbf{B})\mathbf{t}_0 + \boldsymbol{\eta} = \mathbf{Q}_p \mathbf{B}_p \mathbf{t}_0 + \boldsymbol{\eta} \end{cases}, \quad \begin{cases} \boldsymbol{\xi} = \sum_i f_i \boldsymbol{\xi}_i \\ \boldsymbol{\eta} = \sum_j g_j \boldsymbol{\eta}_j \end{cases} \quad (3.24b)$$

donde $\boldsymbol{\xi}$ e $\boldsymbol{\eta}$ son las fallas de sensores en las mediciones \mathbf{x} e \mathbf{y} . Cada falla i que compone a $\boldsymbol{\xi}$ (Ec. 3.24b) depende de su magnitud f_i y de su dirección $\boldsymbol{\xi}_i$, dada por la columna i de la matriz identidad, i.e. $\boldsymbol{\xi}_i = [0 \ 0 \dots 1 \dots 0]'$. En forma equivalente se compone $\boldsymbol{\eta}$ (Ec. 3.24b).

La Fig. 3.2a muestra el diagrama de flujo del proceso descrito (Ec. 3.24a-3.24b). La Fig. 3.2b muestra el diagrama de flujo correspondiente a la descomposición PLSR de \mathbf{x} e \mathbf{y} , y la ubicación de cada estadístico componente (ver Ec. 3.23) sobre el término y el subespacio en que actúa. Un buen ajuste PLSR logra que $\hat{\mathbf{x}} \cong \mathbf{x}_0$ e $\hat{\mathbf{y}} \cong \mathbf{y}_0$ (Fig. 3.2).

Aquí se consideran 6 tipos de anomalías diferentes (ver Ec. 3.24b), las cuales se describen a continuación junto con las desviaciones resultantes en la descomposición PLSR de \mathbf{x} e \mathbf{y} :

- | | |
|---|---|
| 1) Cambios de ganancias \mathbf{x} - \mathbf{y} , $\Delta\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$. | $\Delta\mathbf{x} = 0, \Delta\mathbf{y} = \mathbf{Q}(\Delta\mathbf{B})\mathbf{R}'\mathbf{x}_0 \in S_{MY}$ |
| 2) Cambios de variabilidades y/o de correlaciones en \mathbf{x} , $\Delta\mathbf{P} \neq \mathbf{0}$ | $\Delta\mathbf{x} = \Delta\mathbf{P}\mathbf{t} \in S_{RX}, \Delta\mathbf{y} = \mathbf{QBR}'\Delta\mathbf{x} \in S_{MY}$ |
| 3) Cambios de variabilidades y/o de correlaciones en \mathbf{y} , $\Delta\mathbf{Q} \neq \mathbf{0}$ | $\Delta\mathbf{x} = 0, \Delta\mathbf{y} = \Delta\mathbf{QBR}'\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^p = S_{MY} \oplus S_{RY}$ |
| 4) Fallas de sensores en \mathbf{x} , $\xi \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^m$ | $\Delta\mathbf{x} \cong \xi \in S_{RX}, \Delta\mathbf{y} = 0$ |
| 5) Fallas de sensores en \mathbf{y} , $\eta \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^p$ | $\Delta\mathbf{x} = 0, \Delta\mathbf{y} \cong \eta \in S_{RY}$ |
| 6) Cambio de operación excesivo siguiendo estructura de correlación,
$\mathbf{t} \sim N(\boldsymbol{\mu}_t, \boldsymbol{\Lambda}_t) \neq N(0, \boldsymbol{\Lambda})$ | $\Delta\mathbf{x} = \Delta\mathbf{x}_0 \in S_{MX}, \Delta\mathbf{y} = \mathbf{QBR}'\Delta\mathbf{x}_0 \in S_{MY}$ |

Analizando los efectos de la anomalía 1 a la 6 sobre el diagrama de descomposición (Fig. 3.2b) se determina que estadísticos componentes de I_{TC} contribuirán más a disparar la condición de alarma para cada tipo de evento. La Tabla 3.2 muestra para cada tipo de anomalía los estadísticos sobre cada subespacio que evidenciarán la existencia de tal anomalía, es decir el patrón esperado de estadísticos con alarmas. Las filas 1), 2), 3) y 6) de la Tabla 3.2 caracterizan cambios complejos del proceso, mientras que las filas 4) y 5) representan fallas localizadas en sensores. Por lo tanto, se propone como estrategia de monitoreo utilizar una descomposición PLSR de (\mathbf{x}, \mathbf{y}) , que permita diagnosticar el tipo de anomalía de acuerdo al patrón de estadísticos componentes que más contribuyen a disparar la alarma del índice combinado total.

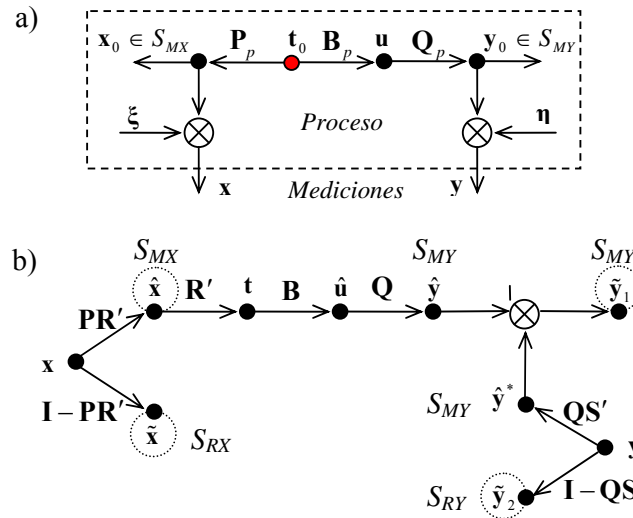


Figura 3.2: a) Diagrama de flujo del proceso afectado por alguna anomalía (Ec. 3.24b) y sus mediciones x e y accesibles. b) Diagrama de flujo de la descomposición PLSR de x e y en base al proceso identificado (Ec. 3.24a); ubicación de cada estadístico componente de I_{TC} (círculos punteados) y subespacio en que actúa.

Tabla 3.2: Patrón esperado de alertas en estadísticos componentes de I_{TC} para cada tipo de anomalía.

Tipo de Anomalía	Estadístico Componente			
	T_t^2 / τ_α^2	$SPE_x / \delta_{x,\alpha}^2$	$SPE_{y1} / \delta_{y1,\alpha}^2$	$SPE_{y2} / \delta_{y2,\alpha}^2$
1) cambios de ganancias (ΔB)	-	-	++	-
2) cambios de correlaciones en x (ΔP)	-	++	++	-
3) cambios de correlaciones en y (ΔQ)	-	-	++	++
4) fallas de sensor en x (ξ)	-	++	-	-
5) fallas de sensor en y (η)	-	-	-	++
6) cambio excesivo de operación ($\Delta \mu_t, \Delta \Lambda_t$)	++	-	-	-
	S_{MX}	S_{RX}	S_{MY}	S_{RY}
	<i>Subespacio asociado</i>			

++: valor alto. -: valor insignificante. +/-: valor bajo o insignificante.

En el espacio predictor \mathbb{R}^m cuando $A \rightarrow m$, el subespacio falla de sensores en x tiende a estar completamente incluido en S_{MX} , y como consecuencia el desplazamiento (de una falla) proyectado sobre S_{RX} tiende a cero. En consecuencia, cuanto más grande sea $\dim(S_{MX})=A \leq m$, menor será la $\dim(S_{RX})=m-A$ y por tanto, menos se expresará la falla en

el subespacio residuo S_{RX} . En el espacio respuesta, ocurre en forma similar con la $\dim(S_{MY})=A \leq p$ en relación a $\dim(S_{RY})=p-A$ para las fallas en \mathbf{y} . En resumen, para que las fallas de sensores en \mathbf{x} (\mathbf{y}) estén lo suficientemente representadas en S_{RX} (S_{RY}), y por lo tanto, se manifiesten (Tabla 3.2) prácticamente en SPE_x (SPE_{y2}), se debe verificar la siguiente regla práctica: $\dim(S_{RX})=m-A \geq 3$ ($\dim(S_{RY})=p-A \geq 3$). Los ejemplos de aplicación muestran la efectividad de esta regla práctica (ver Sección 3.4), la cual sólo se demostró numéricamente. Además, mediante un análisis de las contribuciones a uno de estos estadísticos componentes con alarma, como $SPE_x/\delta_{x,\alpha}^2$ (o $SPE_{y2}/\delta_{y2,\alpha}^2$), se podría identificar el sensor anormal en \mathbf{x} (o \mathbf{y}).

3.3.3 Identificación de variables responsables a través de sus contribuciones en cada subespacio

Teniendo en cuenta las correlaciones entre las variables monitoreadas, se pueden definir fallas simples y fallas complejas. Una falla simple (por ejemplo, un offset del sensor) se produce en un determinado sensor y su efecto no se propaga a otras variables. Esto significa que sólo la variable correspondiente al sensor específico altera su patrón de correlación con las variables restantes. Una falla compleja (por ejemplo, una perturbación) afecta simultáneamente a más de una variable del proceso. Esto significa que un subconjunto de variables altera su patrón de correlación con todas las variables restantes. Por lo tanto, es necesario una descomposición de cada estadístico para aislar la variable anormal o conocer el patrón de contribuciones causado por una anomalía dada (Alcalá y Qin, 2011).

Se propone aplicar una estrategia genérica para descomponer cualquier índice cuadrático $I^2 = \mathbf{z}'\mathbf{A}\mathbf{z}$ (como T_t^2 , SPE_x , SPE_{y1} , o SPE_{y2}) en una suma única de las contribuciones de cada variable z_i , la cual está dada por:

$$I^2 = \|\mathbf{A}^{1/2}\mathbf{z}\|^2 = (\mathbf{A}^{1/2}\mathbf{z})' \left(\mathbf{A}^{1/2} \sum_{i=1}^n \mathbf{z}_i \right) = \sum_{i=1}^n \mathbf{z}'\mathbf{a}_i z_i = \sum_{i=1}^n cI^2(z_i) \quad (3.25)$$

donde $\mathbf{a}_i = [a_{i1} \cdots a_{in}]'$ es la columna i de $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{1/2}'\mathbf{A}^{1/2} = [a_{ij}]$, $\mathbf{z}_i \triangleq [0 \cdots z_i \cdots 0]'$ ($n \times 1$)

denota a un vector de simple entrada y $cI^2(z_i) = \mathbf{z}'\mathbf{a}_i z_i = z_i \sum_{j=1}^n a_{ij} z_j$ es la contribución de z_i a

I^2 . La razón de adoptar esta cantidad como una contribución de z_i es que captura el gradiente del índice en la dirección z_i , es decir:

$$\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{z}} (I^2) \cdot \mathbf{z}_i = \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{z}} (\mathbf{z}' \mathbf{A} \mathbf{z}) \cdot \mathbf{z}_i = \mathbf{z}' \mathbf{a}_i \mathbf{z}_i = cI^2(z_i) \quad (3.26)$$

Nótese que $cI^2(z_i) = 0.5 z_i \partial I^2(\mathbf{z}) / \partial z_i$ y que la descomposición anterior (Ec. 3.25) es un reordenamiento de los términos de la expansión de Taylor de I^2 en $\mathbf{z}=\mathbf{0}$, i.e. $\mathbf{A} \equiv \nabla^2 I^2(\mathbf{0})$.

A partir de la Ec. (3.25) resultan las siguientes descomposiciones:

$$T_i^2 = \sum_{i=1}^m \mathbf{x}' \mathbf{a}_i x_i = \sum_{i=1}^m cT_i^2(x_i), \text{ con } \mathbf{A} = \mathbf{R} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{R}' = [\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_m]_{m \times m} \quad (3.27)$$

$$SPE_X = \sum_{i=1}^m \mathbf{x}' \mathbf{a}_i x_i = \sum_{i=1}^m cSPE_X(x_i), \text{ con } \mathbf{A} = (\mathbf{I} - \mathbf{P} \mathbf{R}')' (\mathbf{I} - \mathbf{P} \mathbf{R}') = [\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_m]_{m \times m} \quad (3.28)$$

$$SPE_{Y1} = \sum_{j=1}^p [\mathbf{y}' \quad \mathbf{x}'] \mathbf{a}_j y_j + \sum_{i=1}^m [\mathbf{y}' \quad \mathbf{x}'] \mathbf{a}_{p+i} x_i = \sum_{j=1}^p cSPE_{Y1}(y_j) + \sum_{i=1}^m cSPE_{Y1}(x_i) \quad (3.29a)$$

$$\text{con: } \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{S} \mathbf{S}' & -\mathbf{S} \mathbf{B} \mathbf{R}' \\ -\mathbf{R} \mathbf{B} \mathbf{S}' & \mathbf{R} \mathbf{B}^2 \mathbf{R}' \end{bmatrix} = [\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_p \mathbf{a}_{p+1} \cdots \mathbf{a}_{p+m}]_{(p+m) \times (p+m)} \quad (3.29b)$$

$$SPE_{Y2} = \sum_{j=1}^p \mathbf{y}' \mathbf{a}_j y_j = \sum_{j=1}^p cSPE_{Y2}(y_j), \text{ con } \mathbf{A} = (\mathbf{I} - \mathbf{Q} \mathbf{S}')' (\mathbf{I} - \mathbf{Q} \mathbf{S}') = [\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_p]_{p \times p} \quad (3.30)$$

Debido a la propiedad idempotente de cada proyección, se tiene que: $\mathbf{R}' \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{R}' \mathbf{x}$, $(\mathbf{I} - \mathbf{P} \mathbf{R}') \tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{I} - \mathbf{P} \mathbf{R}') \mathbf{x}$, $\mathbf{S}' \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{S}' \mathbf{y}$, y $(\mathbf{I} - \mathbf{Q} \mathbf{S}') \tilde{\mathbf{y}}_2 = (\mathbf{I} - \mathbf{Q} \mathbf{S}') \mathbf{y}$. Realizando estas sustituciones en las Ec. (3.27-3.30), se obtienen relaciones entre los subespacios y las contribuciones normalizadas, como se describe en la Tabla 3.3. Reemplazando las descomposiciones anteriores (Ec. 3.27 – 3.30) en la Ec. (3.23), resulta la descomposición de I_{TC} dependiente de los cuatro estadísticos componentes (uno en cada subespacio) como sigue:

$$I_{TC} = I_{MX} + I_{RX} + I_{RY1} + I_{RY2} \quad (3.31)$$

$$I_{TC} = \sum_{i=1}^m cI_{MX}(x_i) + \sum_{i=1}^m cI_{RX}(x_i) + \left(\sum_{j=1}^p cI_{RY1}(y_j) + \sum_{i=1}^m cI_{RY1}(x_i) \right) + \sum_{j=1}^p cI_{RY2}(y_j)$$

donde, por ejemplo, el término $cI_{MX}(x_i) = cT_i^2(x_i) / \tau_\alpha^2$ es la contribución normalizada de x_i a I_{TC} a través de la proyección sobre S_{MX} (ver Tabla 3.3). Analizando las contribuciones positivas significativas $cI_{RX}(\cdot)$ (o $cI_{RY2}(\cdot)$), se puede identificar el sensor defectuoso en \mathbf{x} (o \mathbf{y}). Una falla de sensor simple producirá un único valor alto de $cI_{RX}(\cdot)$ (o $cI_{RY2}(\cdot)$), es decir, una única variable responsable. En resumen, la Tabla 3.2 guía la clasificación del tipo de anomalía analizando cuáles estadísticos aportan significativamente a I_{TC} en el instante de

alarma; luego se identifican las variables responsables de las principales contribuciones a estos estadísticos para completar el diagnóstico.

Tabla 3.3: Contribución de x_i (o y_j) sobre un subespacio y a través de un estadístico componente a I_{TC} .

Estadísticos normalizados:		T_t^2 / τ_α^2	$SPE_x / \delta_{x,\alpha}^2$	$SPE_{y1} / \delta_{y1,\alpha}^2$	$SPE_{y2} / \delta_{y2,\alpha}^2$
x_i ($i=1..m$)	$\hat{x}_i \in S_{MX}$	$\hat{\mathbf{x}}' \mathbf{a}_i \hat{x}_i / \tau_\alpha^2$	–	$[\hat{\mathbf{y}}^* \ \hat{\mathbf{x}}'] \mathbf{a}_j \hat{x}_i / \delta_{y1,\alpha}^2$	–
	$\tilde{x}_i \in S_{RX}$	–	$\tilde{\mathbf{x}}' \mathbf{a}_i \tilde{x}_i / \delta_{x,\alpha}^2$	–	–
y_j ($j=1..p$)	$\hat{y}_j^* \in S_{MY}$	–	–	$[\hat{\mathbf{y}}^* \ \hat{\mathbf{x}}'] \mathbf{a}_j \hat{y}_j^* / \delta_{y1,\alpha}^2$	–
	$\tilde{y}_{2,j} \in S_{RY}$	–	–	–	$\tilde{\mathbf{y}}_2' \mathbf{a}_j \tilde{y}_{2,j} / \delta_{y2,\alpha}^2$
Contribuciones a I_{TC} :		$cI_{MX}(\cdot)$	$cI_{RX}(\cdot)$	$cI_{RY1}(\cdot)$	$cI_{RY2}(\cdot)$

3.3.3.1 Análisis de la fiabilidad de las tareas de diagnóstico

Una falla del sensor k en \mathbf{x} se representa como: $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + f_k \xi_k$ (Alcalá y Qin, 2009). Si la falla es lo suficientemente grande en comparación con la medición libre de fallas \mathbf{x}_0 , la medición multivariada errónea puede ser expresada como: $\mathbf{x} = f_k \xi_k$. Un requisito básico para un método de diagnóstico es que éste señale correctamente la variable afectada o anormal. De este modo, mediante la sustitución de la falla en la contribución a un índice genérico I^2 , se tiene que:

$$cI^2(x_i) = \begin{cases} f_k \xi_k' \mathbf{a}_i 0 = 0 & \text{para } i \neq k \\ f_k \xi_k' \mathbf{a}_i f_k = f_k^2 a_{ii} & \text{para } i = k \end{cases} \quad (3.32)$$

Un diagnóstico correcto se garantiza cuando la contribución de la variable normal es menor o igual a la contribución de la variable anormal, es decir, cuando $cI^2(x_i) \leq cI^2(x_k)$. Por lo tanto, un diagnóstico correcto se garantiza cuando $a_{ii} \geq 0$ (Ec. 3.32), lo cual siempre es válido para cualquier matriz \mathbf{A} semidefinida positiva. Esto se cumple para cada estadístico incluido en I_{TC} . Por tanto, si la falla $f_k \xi_k \in \text{Span}\{(\mathbf{I} - \mathbf{PR}')\}$, se producirá el siguiente patrón de contribuciones a I_{TC} (Ec. 3.28):

$$cI_{MX}(x_i) \approx 0 \quad \forall i, \quad cI_{RX}(x_k) = \tilde{x}_k \mathbf{a}'_k \tilde{\mathbf{x}} / \delta_{x,\alpha}^2 > 0, \quad cI_{RX}(x_i) = \tilde{x}_i \mathbf{a}'_i \tilde{\mathbf{x}} / \delta_{x,\alpha}^2 \approx 0 \quad \forall i \neq k, \\ cI_{RY1}(x_i) \approx 0 \quad \forall i, \quad cI_{RY1}(y_j) \approx 0 \quad \forall j, \quad cI_{RY2}(y_j) \approx 0 \quad \forall j.$$

La Ec. (3.32) muestra también que una falla en un sensor k específico no afecta las contribuciones de las variables restantes, permitiendo la discriminación de fallas múltiples. En consecuencia, la aislación de fallas analizando las contribuciones cI_{RX} y cI_{RY2} es directa.

3.4 Ejemplos de simulación

Las estructuras de los tres procesos que se analizarán a continuación son diferentes, para poner de manifiesto tanto las similitudes como las particularidades de cada aplicación.

3.4.1 Monitoreo de un proceso instantáneo cíclico

Para comprender el modelado y las descomposiciones propuestas, y los estadísticos componentes como herramientas de diagnóstico, se simularon diferentes anomalías en un proceso instantáneo/estático cíclico. La operación normal de un ciclo del proceso sigue una secuencia latente de 4 estados internos: $\{(t_1^*, t_2^*)\}_{1..4} = \{(1,1), (1,3), (3,3), (3,1)\}$. Las partes internas y externas del proceso están dadas por:

$$\begin{aligned}
 \text{Parte interna} & \begin{cases} \mathbf{t}_0 = \mathbf{t}^* + \boldsymbol{\varepsilon}, & \boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, 0.1^2 \mathbf{I}_2), \\ \mathbf{u} = \mathbf{B}\mathbf{t}_0 + \boldsymbol{\gamma}, & \mathbf{B} = \text{diag}(2, 0.5), \boldsymbol{\gamma} \sim N(\mathbf{0}, 0.05^2 \mathbf{I}_2), \end{cases} \\
 \text{Parte externa} & \begin{cases} \mathbf{x} = \mathbf{P}\mathbf{t}_0 + \boldsymbol{\xi}, & \mathbf{P} = [\mathbf{p}_1 \quad \mathbf{p}_2], \boldsymbol{\xi} \sim N(\mathbf{0}, 0.05^2 \mathbf{I}_7), \\ \mathbf{y} = \mathbf{Q}\mathbf{u} + \boldsymbol{\eta}, & \mathbf{Q} = [\mathbf{q}_1 \quad \mathbf{q}_2], \boldsymbol{\eta} \sim N(\mathbf{0}, 0.05^2 \mathbf{I}_3), \end{cases} \\
 & \mathbf{p}_i = \mathbf{p}_i^* / \|\mathbf{p}_i^*\|, \quad \mathbf{q}_j = \mathbf{q}_j^* / \|\mathbf{q}_j^*\|, \quad (3.33) \\
 & \mathbf{p}_1^* = [1.5, 0, 2, 1, 0.5, 0, 2.5]^T, \quad \mathbf{p}_2^* = [0, 2.5, 0.5, -0.5, -1, 1.5, 0]^T, \\
 & \mathbf{q}_1^* = [1.5, 0, -0.5, 0, 2]^T, \quad \mathbf{q}_2^* = [0, 1, 0.5, -1, 0.5]^T,
 \end{aligned}$$

El modelo PLSR (Ecs. 3.2, 3.3, 3.6) se ajustó con datos centrados, sin escalar, para identificar a una versión centrada del proceso latente. Utilizando 32 observaciones bajo condición de operación normal se ajustó un modelo PLSR con dos componentes y se estimaron los límites de control (ver Apéndice 3.B). Las diferencias entre las matrices identificadas y las verdaderas (Ec. 3.33) son despreciables, aunque las columnas de \mathbf{R} y \mathbf{Q} pueden incluir signos opuestos a los verdaderos. Dado que tal alteración de signos está presente en ambas matrices, ésta se cancela. La Fig 3.3 muestra las coordenadas \mathbf{t} y \mathbf{u} de las proyecciones PLSR de las observaciones \mathbf{x} y \mathbf{y} recolectadas, y las direcciones de cada variable sobre estos subespacios modelo.

La Tabla 3.4 muestra las seis anomalías simuladas, una por cada tipo de la Tabla 3.2. Las anomalías 1, 2 y 3 se adicionan alterando las matrices correspondientes del proceso (ver Ecs. 3.24b y 3.33). Las fallas 4 y 5 se adicionan a las mediciones (ver Ecs. 3.24b y 3.33) y para la anomalía 6 se suma a t un cambio Δt tal que $I_{TC} > I_\alpha$. La Fig. 3.4 muestra la evolución temporal de I_{TC} y de cada estadístico componente. En $I_{TC}(k)$ se puede detectar cada anomalía simulada y en sus componentes se puede clasificar cada tipo en base a la información dada en la Tabla 3.2. Para completar el diagnóstico las principales contribuciones positivas de cada variable a un estadístico significativo (Fig. 3.4) se examinan en la Tabla 3.5.

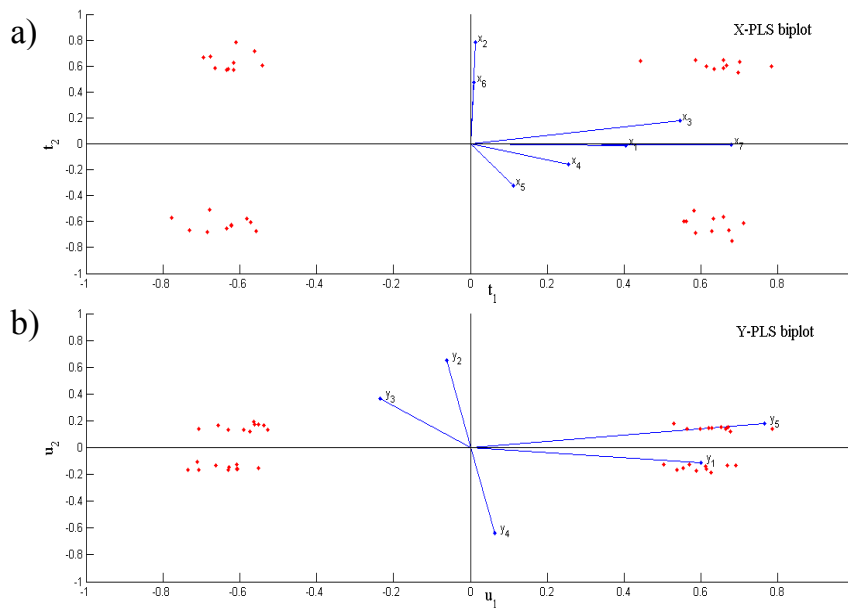


Figura 3.3: Biplot basado en a) los componentes r_a , y b) los componentes s_a .
 Dispersión de las observaciones de x (y) proyectadas sobre S_{MX} (S_{MY}) y las direcciones de las variables x_i (y_j) sobre este plano.

Tabla 3.4: Escenarios de anomalías simuladas.

Tipo de anomalía	Nro. de muestra, k	Magnitud de la desviación
1	11	$\Delta b_2 = 0.5 b_2$
2	19	$\Delta p_2 = [0 \ 0.28 \ 0 \ 0 \ -0.07 \ 0.14 \ -0.14]'$
3	27	$\Delta q_1 = [-0.05 \ 0.025 \ 0.05 \ 0.025 \ -0.1]'$
4	35	$\xi = [0.3 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ -0.25 \ 0]'$ (falla múltiple)
5	43	$\eta = [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0.35]'$ (falla simple)
6	51	$\Delta t = [0 \ 6]'$

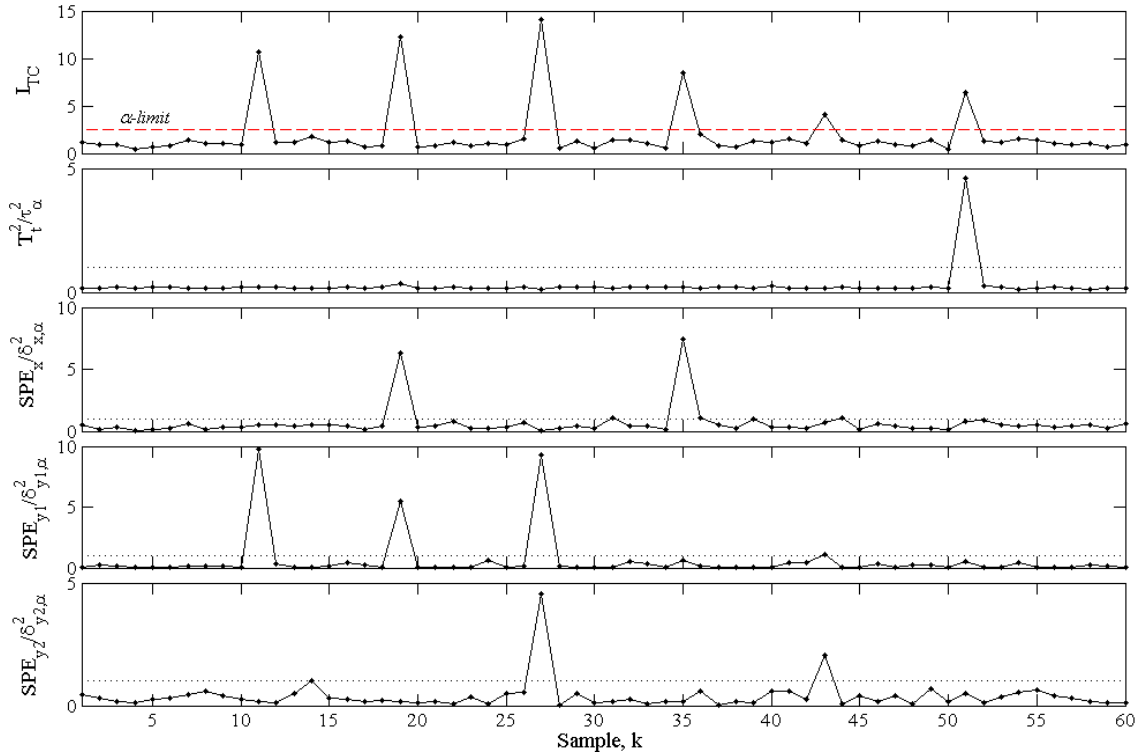


Figura 3.4: Evolución temporal del índice combinado I_{TC} y de sus estadísticos componentes.

Tabla 3.5: Principales contribuciones positivas en la muestra k alertada y su diagnóstico derivado de Fig. 3.4 y número de contribuciones significativas

Nro. de Muestra, k	$cI_{MX}(\cdot)$	$cI_{RX}(\cdot)$	$cI_{RY1}(\cdot)$	$cI_{RY2}(\cdot)$	Diagnóstico (Tipo de anomalía)
11	—	—	$\hat{x}_i, i=2,6,5$ $\hat{y}_j^*, j=2,4,3$	—	Cambio de Ganancia (1)
19	—	$\tilde{x}_i, i=2$	$\hat{x}_i, i=2,6,5$ $\hat{y}_j^*, j=1,5$	—	Cambio de correlaciones en \mathbf{x} (2)
27	—	—	$\hat{x}_i, i=2,6,5$ $\hat{y}_j^*, j=1,5$	$\tilde{y}_{2,j}, j=1$	Cambio de correlaciones en \mathbf{y} (3)
35	—	$\tilde{x}_i, i=1,6$	—	—	Falla de sensor en x_1 y x_6 (4)
43	—	—	—	$\tilde{y}_{2,j}, j=5$	Falla de sensor en y_5 (5)
51	$\hat{x}_i, i=2,6,5$	—	—	—	Cambio de operación excesivo (6)

La dimensión de ambos subespacios residuos, $\dim(S_{RX})=7-2=5$ y $\dim(S_{RY})=5-2=3$, es mayor o igual a 3. Esto ocasionó que las fallas de sensores en \mathbf{x} ($k=35$) o en \mathbf{y} ($k=43$) se

manifiesten en un único estadístico SPE_x o SPE_{y2} , respectivamente (ver Fig. 3.4), con contribuciones sólo en las variables defectuosas (ver Tabla 3.5).

En la Tabla 3.5 se identifican las variables responsables de las contribuciones positivas que más contribuyeron a un estadístico con alarma, el cual a su vez contribuye predominantemente al índice I_{TC} en una muestra k en donde se disparó la condición de alarma (ver Fig. 3.4). Se asume que en este proceso se toman mediciones sin correlaciones temporales, sub-muestreando el proceso con un intervalo de muestreo mayor al tiempo de establecimiento. Por lo tanto, un cambio $\Delta \mathbf{R}$ inducirá que la próxima medición de \mathbf{x} siga la nueva estructura de correlación, dada por $\mathbf{x} = (\mathbf{P} + \Delta \mathbf{P}) \mathbf{t}_0$. En consecuencia, la próxima medición de \mathbf{x} , tendrá un cambio dado por $\Delta \mathbf{x} = \Delta \mathbf{P} \mathbf{t}_0 \in \mathbb{R}^7$ (ver Tabla 3.5 en $k=19$). Las principales contribuciones positivas en $k=11$ se deben a las variables más alineadas a t_2 y u_2 (ver Fig. 3.3); es decir, x_2, x_6, x_5 e y_2, y_4, y_3 . Las principales contribuciones positivas en $k=51$ siguen el X-PLS biplot para t_2 significativo (ver Fig. 3.3); es decir, con grandes valores en x_2, x_6, x_5 .

La última anomalía posee una proporción entre normas en subespacios complementarios de $\|\Delta \hat{\mathbf{x}}\|/\|\Delta \tilde{\mathbf{x}}\| \cong 20$, este pequeño valor residual contribuye a I_{TC} debido a su baja escala $\delta_{x,\alpha}^2$ (ver SPE_x/δ^2 en Fig. 3.4).

Dado que una anomalía consiste en una desviación de las correlaciones modeladas, esta aumentará el estadístico que actúa en el subespacio afectado. Sin embargo, si el porcentaje de variabilidad explicada es menor a 100%, las anomalías se manifestarán en ambos subespacios complementarios. Esto sucede prácticamente en la mayoría de los casos. Para el caso de las fallas de sensores, si además la $\dim(S_{RX}) < 3$ (o $\dim(S_{RY}) < 3$), la proyección en S_{RX} (o S_{RY}) se reducirá; y por lo tanto, las mismas se identificarán en las contribuciones a T_t^2 (o SPE_{y1}) debido al bajo valor de SPE_x (o SPE_{y2}).

3.4.2 Monitoreo de un proceso dinámico cíclico

A diferencia de la aplicación anterior, el siguiente proceso es causal y dinámico. El proceso dinámico analizado posee una estructura discreta dada por:

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{A}_1 \mathbf{y}(k-1) + \mathbf{B}_1 \mathbf{v}(k-1) + \mathbf{B}_2 \mathbf{v}(k-2) + \boldsymbol{\eta}(k),$$

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} 0.9435 & 0 & 0 \\ 0.6290 & 0 & 0 \\ 0.3145 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_1 = \begin{bmatrix} 0.4385 & 1.2579 \\ 0 & 0.8386 \\ -0.8771 & 0.4193 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} -0.0877 & 0.3145 \\ 0 & 0.2097 \\ 0.1754 & 0.1048 \end{bmatrix}, \quad (3.34)$$

donde $\mathbf{y}(k) \in \mathbb{R}^3$ es el vector de respuestas en el instante k , $\mathbf{v}(k) \in \mathbb{R}^2$ es el vector de variables manipuladas, y $\boldsymbol{\eta}(k) \sim N(\mathbf{0}, 0.05^2 \mathbf{I}_3)$. La Ec. (3.34) puede expresarse también como:

$$\mathbf{y}(k) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 | \mathbf{B}_1 | \mathbf{B}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}(k-1) \\ \mathbf{v}(k-1) \\ \mathbf{v}(k-2) \end{bmatrix} + \boldsymbol{\eta}(k) = \mathbf{QBR}'\mathbf{x}(k) + \boldsymbol{\eta}(k), \quad (3.35a)$$

donde la SVD compacta de la matriz $\begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 | \mathbf{B}_1 | \mathbf{B}_2 \end{bmatrix}$ está dada por: $\begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 | \mathbf{B}_1 | \mathbf{B}_2 \end{bmatrix} = \mathbf{QBR}'$, con:

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 0.8018 & 0.4472 \\ 0.5345 & 0 \\ 0.2673 & -0.8944 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (3.35b)$$

$$\mathbf{R}' = \begin{bmatrix} 0.5883 & 0 & 0 & 0 & 0.7845 & 0 & 0.1961 \\ 0 & 0 & 0 & 0.9806 & 0 & -0.1961 & 0 \end{bmatrix}.$$

Las matrices \mathbf{Q} , \mathbf{B} y \mathbf{R} , pueden estimarse por medio de PLSR directamente del conjunto de datos de identificación. Otra manera conocida de expresar la misma estructura de la Ec. (3.34) está dada por:

$$\mathbf{y}(k) = (\mathbf{I} - \mathbf{A}_1 q^{-1})^{-1} (\mathbf{B}_1 q^{-1} + \mathbf{B}_2 q^{-2}) \mathbf{v}(k) + \boldsymbol{\eta}(k) = \mathbf{G}(q^{-1}) \mathbf{v}(k) + \boldsymbol{\eta}(k) = \mathbf{y}_0(k) + \boldsymbol{\eta}(k), \quad (3.36)$$

donde q^{-1} representa el operador retardo unitario y la ganancia \mathbf{G}_0 (3×2) de este sistema (Ec. 3.36) está dada por: $\mathbf{G}_0 = \mathbf{G}(q^{-1}) \Big|_{q^{-1}=1} = (\mathbf{I} - \mathbf{A}_1)^{-1} (\mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2)$.

Durante un ciclo de operación normal, el vector $\mathbf{v}(k)$ sigue una trayectoria prefijada, a partir de la condición inicial: $\mathbf{y}(0)=\mathbf{0}$, $\mathbf{v}(0)=\mathbf{0}$ y hasta el tiempo final, cada vez que se reinicia el proceso ($\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{0}$). La Fig. 3.5a muestra la trayectoria de control $\mathbf{v}(k-1)$ durante un ciclo, la cual se relaciona en forma biunívoca con la trayectoria en el espacio latente $\mathbf{t}(k)$ dada por: $\{(t_1(k), t_2(k))\}_{k=1..4} = \{(-1, -1), (-1, 1), (1, 1), (1, -1)\}$. La Fig. 3.5b muestra la trayectoria de las respuestas. Estas trayectorias esperadas (Fig. 3.5) describen las correlaciones temporales y cruzadas que sigue el proceso (tipo semi-batch) durante un ciclo de operación normal.

Cuando los datos son auto-correlacionados, las matrices \mathbf{X} , \mathbf{Y} se componen con mediciones retrasadas en cada vector observación $\mathbf{x}(k)$ (Ec. 3.35a), de acuerdo a sus órdenes de retraso para identificar estructuras dinámicas discretas (tipo ARX) utilizando PLSR. Se obtuvo un muestreo equilibrado y representativo para identificar la estructura

dinámica con PLSR, sintetizando observaciones de $\mathbf{t}_k = \mathbf{t}(k) + \boldsymbol{\gamma}(k)$, con $\boldsymbol{\gamma}(k) \sim N(\mathbf{0}, 0.1^2 \mathbf{I}_2)$, y mediante las relaciones: $\mathbf{x}_k = \mathbf{P}\mathbf{t}_k$, $\mathbf{y}_k = \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{t}_k + \boldsymbol{\eta}(k)$, se recolectaron las observaciones $(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k)$ en (\mathbf{X}, \mathbf{Y}) . Utilizando las observaciones sin escalar de 4 ciclos semi-batch se ajustó un modelo PLSR ($A=2$) con un MSE insignificante. Las matrices \mathbf{Q} , \mathbf{B} y \mathbf{R} identificadas son prácticamente iguales a las reales (Ec. 3.35b). Una manera alternativa de identificar estas matrices es utilizando un método convencional para identificar la estructura ARX y luego con SVD se obtendrían directamente.

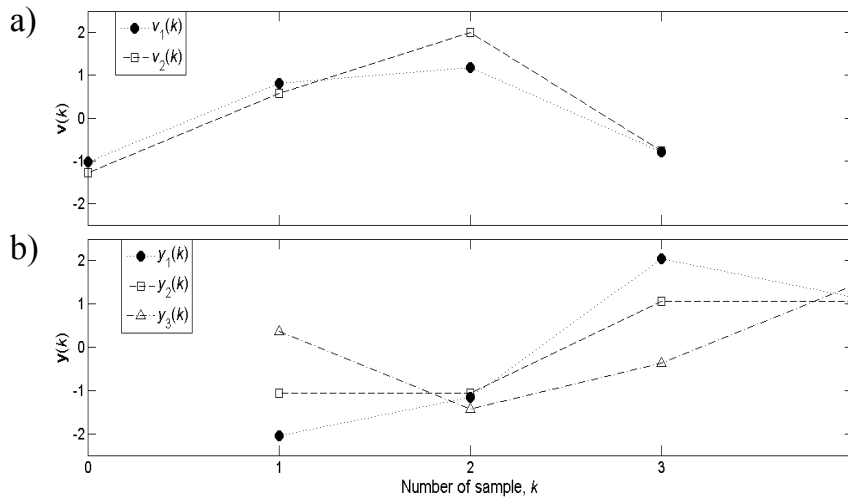


Figura 3.5: Trayectorias esperadas del proceso. a) Trayectoria de control de las variables manipuladas v_1 y v_2 . b) Trayectoria de las respuestas y_1 , y_2 e y_3 .

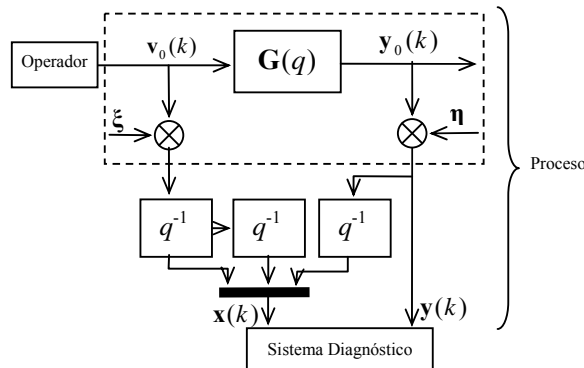


Figura 3.6: Esquema del sistema diagnóstico utilizado para monitorear el proceso dinámico.

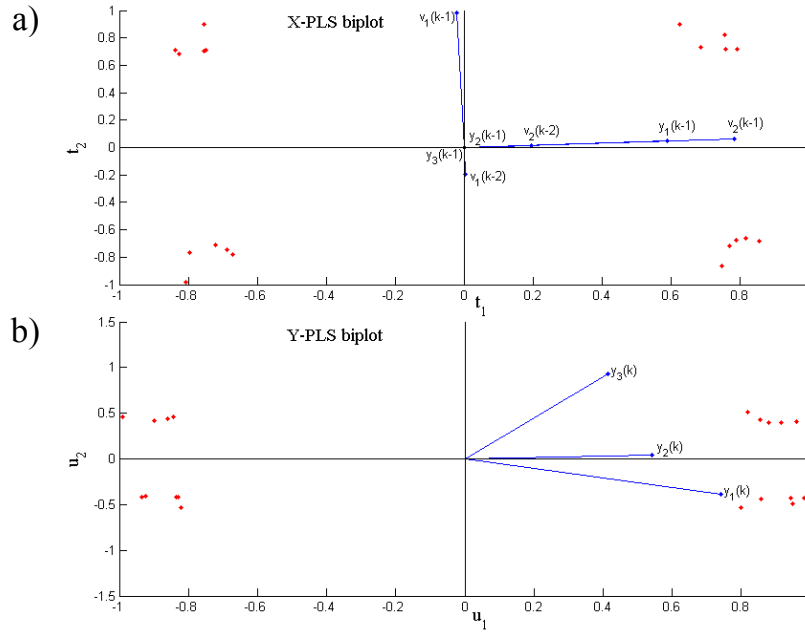


Figura 3.7: Biplot basado en: a) los componentes \mathbf{r}_{a_s} , y b) los componentes \mathbf{s}_a .
 Dispersión de las observaciones de \mathbf{x} (\mathbf{y}) proyectadas sobre S_{MX} (S_{MY}) y las direcciones de las variables x_i (y_j) sobre este plano.

Por otro lado, se obtuvo otro conjunto de datos para caracterizar la operación normal del proceso y así poder estimar sus límites de control, recolectando pares (\mathbf{x}, \mathbf{y}) a partir de trayectorias $\mathbf{v}(k)$ modificadas aleatoriamente respecto de la esperada (Fig. 3.5a), según: $\mathbf{v}(k) = \mathbf{v}_0(k) + \boldsymbol{\varepsilon}(k)$, $\boldsymbol{\varepsilon}(k) \sim N(\mathbf{0}, 0.1^2 \mathbf{I}_2)$. La Fig. 3.6 muestra un esquema del proceso (Ec. 3.36) y de la composición en línea de $\mathbf{x}(k)$ e $\mathbf{y}(k)$ (Ec. 3.35a), que ingresan al sistema diagnóstico utilizado para monitorear el proceso cíclico descrito.

La Fig. 3.7 muestra las proyecciones PLSR de \mathbf{x} e \mathbf{y} , y las direcciones de las variables sobre los espacios latentes. La Tabla 3.6 muestra las fallas simuladas y el diagnóstico obtenido a partir de la Fig. 3.8 y la cantidad de contribuciones significativas. La Fig. 3.8 muestra la evolución temporal de I_{TC} y de sus estadísticos componentes sobre cada subespacio. Se clasificó correctamente cada una de las cinco anomalías simuladas (ver Fig. 3.8 y Tabla 3.6).

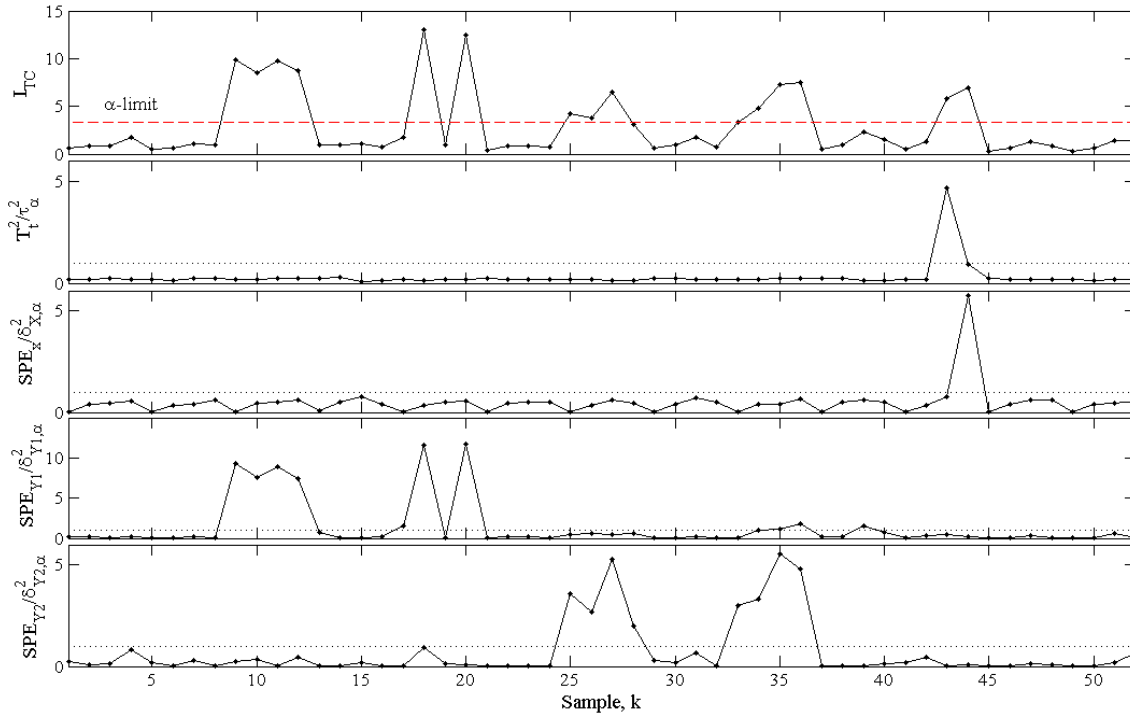


Figura 3.8: Evolución temporal del índice combinado I_{TC} y de los estadísticos PLSR que lo componen.

Tabla 3.6: Fallas simuladas y su diagnóstico extraído de la Fig. 3.8 y número de contribuciones significativas.

<i>Nro. de muestra, k</i>	<i>Tipo y Magnitud de Falla</i>	<i>Nro. de Contribuciones significativas</i>	<i>Diagnóstico</i>
9-12	$\Delta b_2 = 0.2$	>3	1
17-20	$\Delta \mathbf{r}_1 = [0.06 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0.04 \ 0 \ 0.02]'$	>3	2
25-28	$\Delta \mathbf{q}_2 = [0 \ -0.12 \ 0]'$	2 (en $y_1(k)$ e $y_2(k)$)	3/5*
33-36	$\boldsymbol{\eta} = [0 \ 0.12 \ 0]'$	2 (en $y_1(k)$ e $y_2(k)$)	3/5*
43	$\Delta \mathbf{v} = [6 \ 0]'$	>3	6

*No se cumple la regla practica, dado que $\dim(S_{Ry})=1<3$, por tanto no se puede discriminar 5 de 3.

Para esta estructura de proceso surge un nuevo caso en $k = 44$, en donde se detecta una falla con un SPE_X/δ^2 alto (Fig. 3.8) y una contribución máxima en $v_1(k-2)$, denunciando una falla en ese sensor. Lo cual se debe a una ruptura de la correlación temporal de $v_1(k-2)$ con el resto. Esto se produjo porque en $k = 43$ la variable manipulada $v_1(k-1)$ se aleja excesivamente de su trayectoria esperada (Tabla 3.6) y a continuación (en $k=44$), $v_1(k-2)$

tiene el valor anterior (anormal) de $v_1(k-1)$, destruyendo su correlación temporal esperada con el valor normal actual de $v_1(k-1)$ perteneciente a la trayectoria esperada (Fig. 3.5). Por lo tanto, en procesos con esta estructura siempre existirá una alerta en SPE_X/δ^2 luego de finalizar un cambio de operación excesivo. Las fluctuaciones temporales presentes en I_{TC} o en sus estadísticos componentes (ver Fig. 3.8) durante cada evento anormal se deben a que se agregaron anomalías que afectan solamente a una única dirección latente (ver Ec. 3.35b y Fig. 3.7).

3.4.3 Monitoreo de un reactor continuo controlado

El proceso estudiado es un sistema dinámico fuertemente no lineal con lazos de control. Este caso de estudio simulado se utiliza para evaluar el desempeño de la técnica de monitoreo propuesta en una variedad de escenarios de falla para este tipo de estructura. El proceso estudiado es un reactor tanque agitado continuo (CSTR), con una camisa de refrigeración y dos lazos de control PI. La cinética química se caracteriza por una clásica reacción de primer orden irreversible: $A \rightarrow B$. La instrumentación incluye sensores de nivel, caudal y temperatura; y dos controladores analógicos PI, con set-points SP_T y SP_h . Las variables controladas son la temperatura del reactor (T) y el nivel del tanque (h). Las variables manipuladas son el caudal de refrigerante (Q_J) y el caudal de salida del reactor (Q). La Fig. 3.9 muestra un diagrama esquemático del reactor controlado. Las condiciones de entrada T_F , T_{JF} , y C_{AF} (ver Fig. 3.9) se asumen constantes en los valores descritos en la Tabla 3.7.

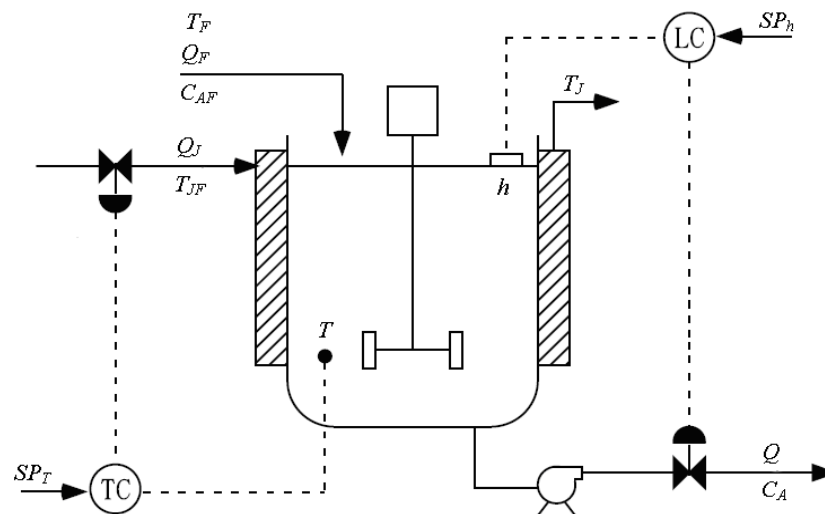


Figura 3.9: Esquema del sistema CSTR con un sistema de control multi-lazo.

El modelo matemático del sistema se formula a partir de los balances de masa y energía, y está representado por (Singhal y Seborg, 2002):

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_0 e^{-E/RT} C_A + \frac{Q_F C_{AF} - Q C_A}{A_0 h}, \quad (3.37a)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta H) k_0 e^{-E/RT} C_A}{\rho C_p} + \frac{Q_F T_F - Q T}{A_0 h} + \frac{U A_J (T_J - T)}{\rho C_p A_0 h}, \quad (3.37b)$$

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{Q_J (T_{JF} - T_J)}{V_C} + \frac{U A_J (T - T_J)}{\rho_J C_{pJ} V_C}, \quad (3.37c)$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{Q_F - Q}{A_0}, \quad (3.37d)$$

$$\frac{dQ_J}{dt} = K_{C1} \frac{d(SP_T - T)}{dt} + \frac{K_{C1}}{T_{i1}} (SP_T - T), \quad (3.37e)$$

$$\frac{dQ}{dt} = K_{C2} \frac{d(SP_h - h)}{dt} + \frac{K_{C2}}{T_{i2}} (SP_h - h), \quad (3.37f)$$

$$x = \frac{C_{AF} - C_A}{C_{AF}}, \quad (3.37g)$$

$$\dot{H} = \Delta H k_0 e^{-E/RT} C_A A_0 h. \quad (3.37h)$$

Tabla 3.7: Condiciones de operación nominal y parámetros del modelo (Ec.

3.37) para el CSTR de la Fig. 3.9

$Q = 100$ L/min	$A_0 = 0.1666$ m ²
$Q_J = 15$ L/min	$k_0 = 7.2 \times 10^{10}$ min ⁻¹
$T_F = 320$ °K	$\Delta H = -5 \times 10^4$ J/mol
$T_{JF} = 300$ °K	$\rho C_p = 239$ J/(L °K)
$T = 402.35$ °K	$\rho_J C_{pJ} = 4175$ J/(L °K)
$T_J = 345.44$ °K	$E/R = 8750$ °K
$C_{AF} = 1.0$ mol/L	$U A_J = 5 \times 10^4$ J/(min °K)
$C_A = 0.037$ mol/L	$V_J = 10$ L
$h = 0.6$ m	$K_{C1} = -1, T_{i1} = 1, K_{C2} = -15, T_{i2} = 10,$
$Q_F = 100$ L/min,	$SP_T = 402.35$ °K, $SP_h = 0.6$ m

Asumiendo que T_F , T_{JF} , C_{AF} , y los parámetros del modelo (Ec. 3.37) se conocen (ver Tabla 3.7), el análisis funcional de las Ecs. (3.37a-h) indica que, conociendo el valor instantáneo de cinco variables (h , Q , C_A , T , T_J), las variables restantes pueden ser calculadas a través de las Ecs. (3.37a-h). Por lo tanto, se prevé que A sea igual a 5. En consecuencia, para que $\dim(S_{RY})=p-A=3$ se eligió un vector de respuestas con ocho

variables ($p=8$), dado por $\mathbf{y} = [Q_J \quad Q \quad C_A \quad T \quad T_J \quad h \quad x \quad \dot{H}]'$. Es decir, se agregaron variables colineales en \mathbf{y} para que se discriminen fácilmente las fallas de sensores respecto de cambios de correlación en las respuestas. En esta aplicación, se fijó un tiempo de muestreo $T_s = 5$ min., el cual resulta bastante razonable respecto a un tiempo de asentamiento aproximado de $T_{st} = 120$ min; y la estructura ARX adoptada es de orden 3, por lo que la representación del modelo de regresión PLSR toma la siguiente forma:

$$\hat{\mathbf{y}}(k) = \underbrace{[\mathbf{B}_1 \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_3]}_{\text{QBR}'} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{z}(k-1) \\ \mathbf{y}(k-1) \\ \mathbf{y}(k-2) \\ \mathbf{y}(k-3) \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}(k)} = \mathbf{B}_1 \mathbf{z}(k-1) + \mathbf{A}_1 \mathbf{y}(k-1) + \mathbf{A}_2 \mathbf{y}(k-2) + \mathbf{A}_3 \mathbf{y}(k-3) \quad (3.38)$$

donde $\mathbf{z} = [SP_T \quad SP_h \quad Q_F]'$ es el vector de variables de entrada. Los vectores \mathbf{y} y \mathbf{z} , incluyen mediciones comúnmente utilizadas en el monitoreo de CSTRs, debido a su bajo costo de implementación. Los vectores $\mathbf{x}(k) \in \mathbb{R}^{27}$ e $\mathbf{y}(k) \in \mathbb{R}^8$, relacionados de acuerdo a la Ec. (3.38), son centrados y escalados. Se adoptó un orden 3 por considerar más de un 10% ($15 \text{ min}/120 \text{ min}=0.125$) de información pasada en la predicción (Ec. 3.38). En este caso el modelado PLSR funcionará como un método alternativo de identificación de dinámicas discretas tipo ARX. Como los datos de esta aplicación son auto-correlacionados, \mathbf{X} incluirá mediciones retrasadas hasta orden 3. Para construir el conjunto de datos de identificación, se estimuló el sistema (Fig. 3.9) con un cambio de set-point en $\mathbf{z}(k)$ (tipo escalón multivariado) cada 120 min., y se recolectaron las respuestas $\mathbf{y}(k)$ durante los siguientes 120 min. después de cada cambio escalón en \mathbf{z} , a fin de armar las observaciones apareadas $(\mathbf{x}(k), \mathbf{y}(k))$. Las amplitudes de los escalones siguieron distribuciones uniformes en torno a sus valores nominales (Tabla 3.7), con los siguientes rangos: SP_h : 0.6 ± 0.05 m, SP_T : 402.35 ± 3 °K, y Q_F : 100 ± 5 L/min. Las matrices \mathbf{X} , \mathbf{Y} se formaron con las observaciones $\mathbf{x}(k)$, $\mathbf{y}(k)$ (Ec. 3.38) recolectadas durante 50 cambios de set-point. Con este conjunto de datos normales se ajustó el modelo PLSR y se estimaron los límites de control.

La Fig. 3.10a muestra el análisis de Pareto de $\%R_X^2(a)$ y de $\%R_Y^2(a)$, ilustrando la habilidad predictiva del modelo PLSR. Las desviaciones estándar de t_a y u_a , y la ganancia interna b_a , muestran el aspecto deflacionario (Fig. 3.10b). La Fig. 3.10a-b muestra para $a=1-5$ que: i) $\sigma(t_a)$ y $\sigma(u_a)$ decrecen monótonamente; ii) b_a se mantiene aproximadamente constante; y iii) las varianzas explicadas en \mathbf{X} e \mathbf{Y} no se separan, alcanzando ambas casi el

100% en $a=5$. Todas estas tendencias señalan que no hay presencia de variables interferencias en \mathbf{x} (Godoy et al., 2011). La Fig. 3.10c muestra la varianza del error residual (MSE) frente al número de variables latentes a , y la Fig. 3.10d, la relación de las sucesivas variaciones de error residual, R . En este último gráfico, se determina el orden $A=5$ cuando R cruza el umbral 0.75. Las líneas auxiliares en la Fig. 3.10 muestran la coherencia entre los cuatro gráficos respecto al orden interno seleccionado ($A=5$), dado que b_a y R decrecen para órdenes superiores. El orden interno seleccionado del modelo PLSR dinámico coincide con el previsto a partir del análisis funcional cualitativo.

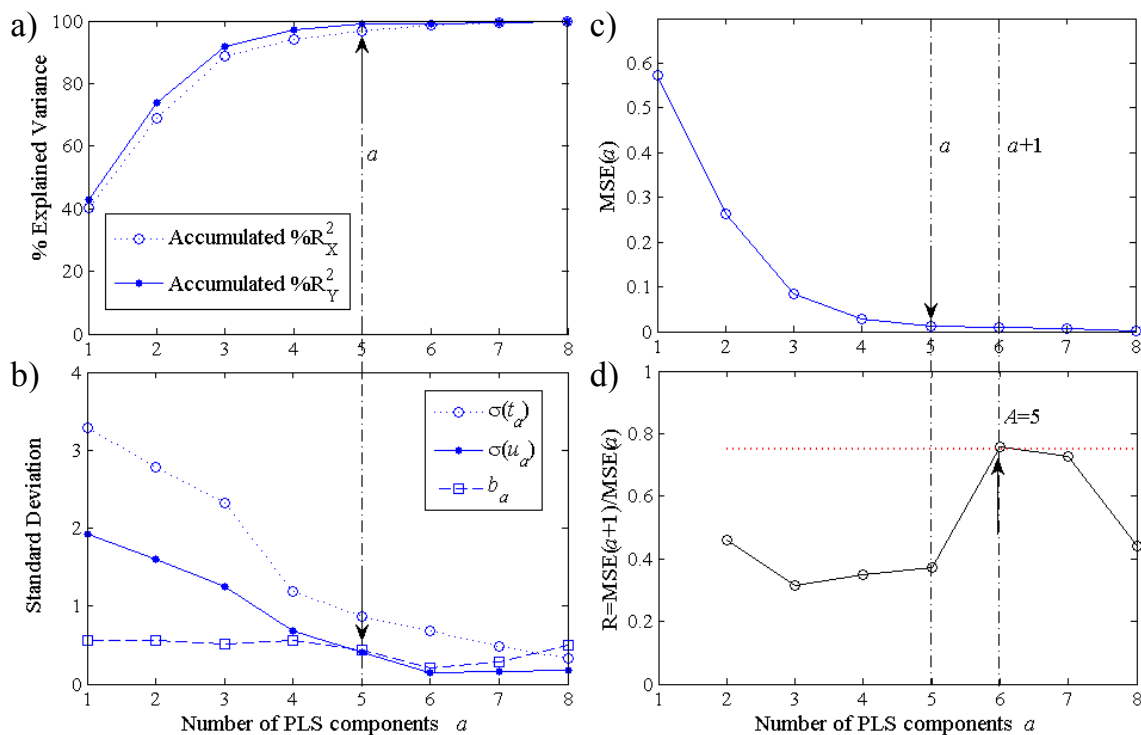


Figura 3.10: Selección del orden interno A del modelo PLSR dinámico (Ec. 3.38).

La Fig. 3.11 muestra verificaciones post-modelado PLSR, ajustado con $A=5$, resultando un error estándar promedio de $\approx 4,2\%$. El índice de importancia predictiva de la variable (VIP_i), resulta mayor o igual a 0,8 para cada x_i ($i=1 \dots 27$) (ver Fig. 3.11a), indicando que todos los predictores utilizados son significantes en la predicción (Godoy et al., 2011). Para verificar la precisión sobre el dominio de aplicabilidad del modelo se grafica el error estándar promedio $\sqrt{\text{avg}(sMSE)}$ para zonas anulares $d^2(\mathbf{x})$ (Godoy et al., 2011). La Fig.

3.11b muestra que $\sqrt{\text{avg}(sMSE)}$ crece con $d^2(\mathbf{x})$, lo cual señala el aumento de la no-linealidad con $d^2(\mathbf{x})$. Sin embargo, como el error máximo es muy bajo, el modelo sigue siendo aceptable en todo el dominio considerado.

El sistema no-lineal del CSTR, con sus lazos de control automático (Ecs. 3.37a-h), fue simulado en modo continuo. Utilizando un modelo dinámico PLSR discreto y lineal (Ec. 3.38), se monitoreó la condición del CSTR controlado. La Tabla 3.8 muestra las cuatro fallas analizadas, con las cuales se representan todas las particularidades de esta aplicación. La Fig. 3.12 muestra la evolución temporal de I_{TC} y de cada estadístico componente, observándose la correcta detección y clasificación de las cuatro anomalías simuladas (Tabla 3.8). La Tabla 3.9 resume las principales contribuciones positivas en algunos tiempos con I_{TC} en alarma (ver Fig. 3.12), y el diagnóstico según los estadísticos componentes con alarmas (Tabla 3.2) y la cantidad de variables responsables.

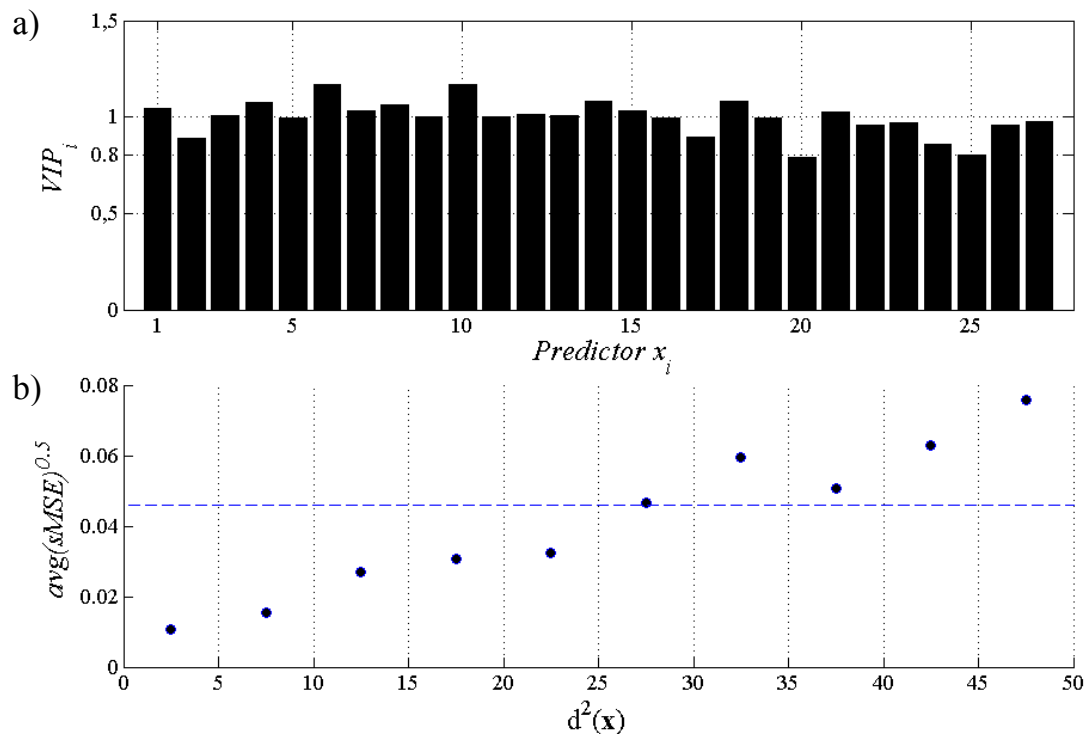


Figura 3.11: Post-verificaciones del modelo PLSR ajustado con $A=5$. Valores del índice VIP y exactitud de la predicción sobre todo el dominio de aplicabilidad.

Tabla 3.8: Escenario de anomalías simuladas.

<i>Tipo de falla/anomalía</i>	<i>Ubicación (ver intervalo de muestras en Fig. 3.12)</i>	<i>Magnitud</i>
Falla de sensor	$k=21..41$	$dQ_F=20$ L/min
Falla de sensor que afecta al PI	$k=71..91$	$dh = 0.15$ m
Cambio de ganancia individual PI	$k=121..141$	$dK_{C2} = -0.75$
Cambio de un parámetro del proceso	$k=171..191$	$dk_0 = 0.36 \cdot 10^{10} \text{ min}^{-1}$

La falla de sensor dQ_F se detecta y diagnostica directamente conforme al estadístico SPE_X/δ^2 en alarma (Fig. 3.12) con sólo una contribución significativa (ver Tabla 3.9 para $k=30$). La variable Q_F sólo está presente en el vector $\mathbf{x}(k)$.

Es importante notar que la variable h se halla presente en el denominador de algunos términos del proceso CSTR monitoreado (Ecs. 3.37a-b). Un offset de 0.15 m en la medición de la variable controlada h (en $k=71..91$), provoca que el PI 2 fuerce el proceso hacia un nuevo punto de operación con h tendiente a 0.45 m (Tabla 3.7). Esta reducción de h incrementa enormemente a C_A (Ec. 3.37a). En consecuencia, la predicción PLSR de C_A y x es significativamente sesgada por el desplazamiento fuertemente no lineal de estas variables, además del offset presente en la variable predictora h . Este cambio no-lineal aleja enormemente el modelo identificado del proceso real.

Durante la falla dh , se detectó e identificó correctamente un cambio de operación excesivo y un cambio total del proceso, y las mayores contribuciones fueron en C_A y x (ver Fig. 3.12 y Tabla 3.9), resultando sólo incorrecto el diagnóstico de la variable responsable. Es decir, si h hubiese sido la única variable (responsable) con contribución significativa la identificación sería correcta. Sin embargo, los dos tipos de anomalías identificadas sirven de guía para encontrar la verdadera causa del comportamiento anormal. Por otro lado, en el lazo PI 1 no sucede lo mismo, sino que en este caso la detección y el diagnóstico son directos. Esto se debe a que la variable controlada T se halla sólo en el numerador de los términos del modelo (Ec. 3.37), es decir, T mantiene una relación proporcional con cada respuesta.

El cambio de ganancia individual dK_{C2} del PI 2 afecta directamente a la respuesta Q (Ec. 3.37), cambiando instantáneamente y excesivamente el punto de operación del reactor controlado. La acción PI 2 consigue, luego de un lapso, retornar el punto de operación a la zona de control (ver Fig. 3.12 en $k>127$). Para esta anomalía (ver Tabla 3.9), en $k=121$ se identifica una falla en la respuesta Q o un cambio de ganancia individual x_i-Q , en $k=122$ se identifica un cambio de ganancia, y en $k=123$ se identifica un cambio de ganancia más un

cambio de operación excesivo. A continuación, en $k=128$ (Tabla 3.9) se identifica como la acción del PI 2 conduce el proceso hacia el mismo punto de operación bajo control. La alarma del cambio de ganancia desaparece en estado estacionario por no-actuación del PI 2. Por lo tanto, la herramienta detecta y diagnostica correctamente la anomalía analizada.

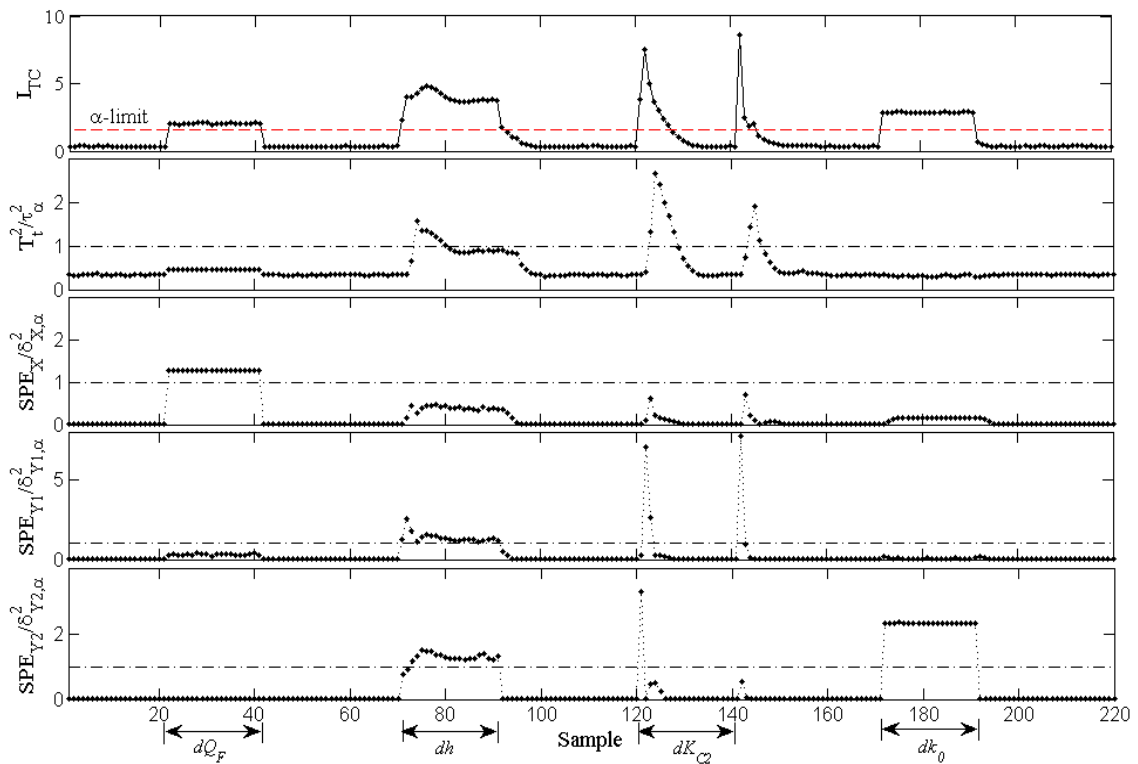


Figura 3.12: Evolución temporal del índice combinado I_{TC} (respecto a su límite de control) y de sus estadísticos componentes, durante las 4 anomalías simuladas en la operación del CSTR a lazo-cerrado. Los intervalos (abajo) señalan la ubicación de cada anomalía.

En las muestras $k = 121, 122$ y 123 , el modelo PLSR discreto no pudo seguir el rápido cambio experimentado por el proceso continuo, resultando valores altos en SPE_{y1} , SPE_{y2} , y SPE_x . Durante la primera transición (a partir de $k = 121$), K_{C2} se aleja de la sintonía apropiada. Por el contrario, durante la segunda transición (a partir de $k = 141$), K_{C2} se acerca a la sintonía correcta. Por lo tanto, el sistema de control necesita más tiempo para la estabilización de las variables controladas durante la primera transición que cuando retorna a la situación anterior (ver T_t^2/τ^2 en Fig. 3.12).

Es importante notar que los términos exponenciales en la Ec. (3.37a-b) que dependen de k_0 , T , y C_A no influyen en la dinámica del CSTR, son prácticamente constantes para el rango de operación considerado, debido a que: i) en el rango utilizado de T (402.35 ± 3 °K) las exponenciales (ver Ec. 3.37a-b) son prácticamente constantes; y ii) los valores de c_{36} , c_{37} , c_{46} y c_{47} , son despreciables, donde $[c_{ji}] = \mathbf{QBR}'$ es la matriz regresión (ver Ec. 3.38). En consecuencia, las respuestas C_A y T (es decir, y_3 e y_4) no dependen de sus valores anteriores. Por lo tanto, ante un cambio dk_0 la variable principalmente afectada (en forma estática) será \dot{H} (Ec. 3.37h).

Durante la falla dk_0 no se percibe dinámica sobre el I_{TC} alertado (ver Fig. 3.12 en $k=171..191$), y el componente SPE_{Y2}/δ^2 es el estadístico que más aporta a la condición de alarma. La Tabla 3.9 diagnostica eficazmente esta anomalía como una falla en \dot{H} o un cambio de ganancia individual $x_i - \dot{H}$.

Tabla 3.9: Principales contribuciones positivas en la muestra k alertada y su diagnóstico.

Falla	Nro. de Muestra	$cI_{MX}(\cdot)$	$cI_{RX}(\cdot)$	$cI_{RY1}(\cdot)$	$cI_{RY2}(\cdot)$	Diagnóstico
dQ_F	30	—	$\tilde{x}_i, i=3$	—	—	Falla del sensor Q_F
dh	76	$\hat{x}_i, i=6,10,14, 18,22,26$	$\tilde{x}_i, i=6,10,14, 18, 22,26$	$\hat{x}_i, i=6,10,14,18, 22,26. \hat{y}_j^*, j=3,7$	$\tilde{y}_{2,j}, j=3,7$	Cambio total del Proceso + cambio de pto. Operación. Variables afectadas C_A y x .
”	85	$\hat{x}_i, i=6,10,14, 18,22,26$	$\tilde{x}_i, i=6,10,14, 18, 22,26$	$\hat{x}_i, i=6,10,14,18, 22,26. \hat{y}_j^*, j=3,7$	$\tilde{y}_{2,j}, j=3,7$	Cambio total del Proceso + cambio de pto. Operación. Variables afectadas C_A y x .
dK_{C2}	121	—	—	—	$\tilde{y}_{2,j}, j=2$	Falla del sensor Q /Cambio de ganancia individual $x_i - Q$
”	122	—	—	$\hat{x}_i, i=4,8,12,16 \hat{y}_j^*, j=1,3,5,6,7$	—	Cambio de Ganancias
”	123	$\hat{x}_i, i=2,4,6,10$	—	$\hat{x}_i, i=4,8,12,16 \hat{y}_j^*, j=1,3,5,6,7$	—	Cambio de Ganancias + cambio de pto. Operación.
”	128	$\hat{x}_i, i=4,12, 22,25,26$	—	—	—	Cambio menor del pto. Operación
dk_0	180	—	—	—	$\tilde{y}_{2,j}, j=8$	Falla sensor \dot{H} /Cambio de ganancia individual $x_i - \dot{H}$

$\mathbf{y}(k) = \begin{bmatrix} Q_j(k) & Q(k) & C_A(k) & T(k) & T_j(k) & h(k) & x(k) & \dot{H}(k) \end{bmatrix}'$															
	j	=	1	2	3	4	5	6	7	8					
$\mathbf{x}(k) = \begin{bmatrix} SP_T(k-1) & SP_h(k-1) & Q_F(k-1) & Q_j(k-1) & Q & C_A & T & T_j & h & x & \dot{H} & Q_j(k-2) \dots \end{bmatrix}'$															
	i	=	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	...

En resumen, la herramienta propuesta detectó y diagnosticó correctamente todas las anomalías analizadas. Solamente en el caso dh , no resultó precisa la señalización de la variable responsable, debido a la relación funcional fuertemente no-lineal de h con las respuestas (Ec. 3.37).

Los resultados de simulación muestran que el prototipo desarrollado es capaz de identificar anomalías atribuidas a pobre desempeño del control, cambios del proceso, y perturbaciones, así como a fallas de sensores. El planteo general propuesto para monitorear un sistema a lazo cerrado se basa en el diseño de un modelo PLSR que debe ser luego utilizado en línea para identificar anomalías. El modelo que soporta este enfoque de monitoreo se basa en los datos de funcionamiento tomados a lo largo de períodos donde se supone que el controlador funciona de manera satisfactoria. La recolección de datos del proceso constituye un paso crítico en el desarrollo de modelos empíricos para monitoreo de desempeño de control y por tal motivo, es muy conveniente estar operando lo más cerca posible a un estado óptimo durante el período en que se recolectan dichos datos.

3.5 Discusión

Si se incluyera T_u^2 en el I_{TC} a fin de contar con un estadístico que actúe sobre la parte con estructura de correlación en S_{MY} , el índice combinado resultaría equivalente a: $I_{TC} = (2T_t^2)/\tau_\alpha^2 + SPE_x/\delta_{x,\alpha}^2 + SPE_{y1}/\delta_{y1,\alpha}^2 + SPE_{y2}/\delta_{y2,\alpha}^2$, lo cual muestra el efecto de superposición de información al adicionarse el factor 2 respecto a la Ec. (3.23). Este solapamiento de medidas de distancia ocultaría el efecto sobre el I_{TC} de los tres estadísticos normalizados restantes.

Se presentó una nueva descomposición de un índice cuadrático genérico en sus contribuciones. En particular, la descomposición de T_t^2 (Ec. 3.27) mantiene relaciones con las ya existentes. La contribución $cT_t^2(x_i) = x_i \mathbf{a}_i' \mathbf{x}$ (con $\mathbf{a}_i' = \mathbf{r}_i^* \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{R}'$ y \mathbf{r}_i^* ($1 \times A$) el i -ésimo renglón de \mathbf{R}') posee una fórmula equivalente a la contribución de Westerhuis et al. (2000); y tiende hacia la contribución de Alvarez et al. (2007), cuando $S_{MX} \rightarrow \mathbb{R}^m$. Esto último, se debe a que cuando $D_{\hat{x}} \rightarrow T_x^2 = \mathbf{x}' \mathbf{R}_x^{-1} \mathbf{x}$, sus respectivas contribuciones se aproximan. Sin embargo, las contribuciones de Alvarez et al. (2007) sólo se pueden estimar si \mathbf{R}_x es no-singular. Nótese también que T_x^2 en el espacio original es igual T_x^2 en el espacio estandarizado, $(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_0)' \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1} (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_0) = (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_0)' \mathbf{D}_x^{-1} \mathbf{R}_x^{-1} \mathbf{D}_x^{-1} (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_0) = \mathbf{x}' \mathbf{R}_x^{-1} \mathbf{x}$,

donde $\bar{\mathbf{x}}_0$ es la media y $\mathbf{D}_x = \text{diag}(\hat{\sigma}_1 \dots \hat{\sigma}_m)$ son las escalas. Por tanto, sus contribuciones son iguales.

Es importante notar que T_t^2 también puede ser descompuesto en contribuciones de \hat{y}_j , es decir: $T_t^2 = \sum_{j=1}^p \hat{\mathbf{y}}_j' \mathbf{a}_j \hat{y}_j$ (ver Teorema 2), lo cual permite identificar las respuestas y_j más afectadas ante un cambio de operación significativo.

3.6 Conclusiones

El enfoque del monitoreo de procesos multivariados propuesto se basa en un modelo PLSR que representa las condiciones bajo control. Por lo tanto, una desviación significativa de las variables respecto a sus trayectorias esperadas sirve para la detección y diagnóstico de los comportamientos anormales del proceso. Los resultados obtenidos con tres ejemplos de simulación muestran que la estrategia propuesta es eficaz y lo suficientemente precisa como para ser explotada con mayor énfasis en el futuro. En particular, el CSTR controlado fue correctamente monitoreado durante diferentes condiciones de falla o anomalías de proceso utilizando los nuevos estadísticos combinados en un único, sensible y eficaz índice de detección de fallas. El índice de detección I_{TC} propuesto es una composición de medidas de distancias escaladas, lo cual implica que su hiper-elipsoide asociado (de nivel de confianza α) sea de volumen mínimo. En los ejemplos de aplicación se simuló anomalías con desviaciones pequeñas para mostrar la bondad de circunscripción del volumen de control asociado al I_{TC} . La combinación de las condiciones de alarma / no-alarma que ocurren durante el monitoreo simultáneo de los estadísticos componentes propuestos se puede utilizar para clasificar el suceso perturbador, y contribuye a un diagnóstico preliminar, el cual se completó con un análisis de contribuciones a los estadísticos que presentan alarma.

La estrategia de diagnóstico se basa en la descomposición PLSR del espacio de mediciones, la cual clasifica el tipo de anomalía/falla de acuerdo al estadístico componente que más contribuye a disparar la condición de alarma. Valores positivos significativos de $cI_{MX}(x_i)$ denuncian un punto de operación fuera del funcionamiento normal del proceso, pero siguiendo su estructura de correlación. Valores positivos significativos de $cI_{RX}(x_i)$ (o $cI_{RY2}(y_j)$) denuncian una falla de sensor o cambios de correlaciones entre las variables monitoreadas o una perturbación no medible en las variables predictoras. Grandes valores

positivos de $cI_{RY1}(\bullet)$ denuncian un cambio de ganancia \mathbf{x} - \mathbf{y} . En resumen, se presentó una estrategia que permite identificar el tipo de anomalía que afecta al proceso. Conocer la fuente de la anomalía permitirá anticipar acciones correctivas.

En los ejemplos de evaluación numérica se mostró la elevada precisión en la identificación de cada matriz del modelo respecto a la real. Esto demuestra la gran bondad de ajuste del modelo PLSR propuesto. A través de los tres ejemplos de aplicación se intentó describir el uso de la estrategia de monitoreo propuesta; los cuales son diferentes y de complejidad creciente a fin de cubrir la mayoría de los aspectos teóricos y prácticos de la estrategia de identificación, construcción de carta de control e interpretación diagnóstica de resultados.

Apéndice 3.A Pruebas del Lema 1, y de los Teoremas 1 y 2

Prueba del Lema 1. El proyector oblicuo sobre $Span\{\mathbf{A}\}$ a lo largo de $Span\{\mathbf{B}\}$ se puede obtener mediante la siguiente ecuación (Meyer, 2000):

$$\mathbf{\Pi}_{\mathbf{A}|\mathbf{B}} = \mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{\Pi}_{\mathbf{B}}^{\perp}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}'\mathbf{\Pi}_{\mathbf{B}}^{\perp} \quad (3.A1)$$

donde $\mathbf{\Pi}_{\mathbf{B}}^{\perp}$ es el proyector ortogonal sobre $Span\{\mathbf{B}\}^{\perp}$.

Dado que \mathbf{R} y \mathbf{S} son de rango completo por columnas, resulta que:

$$\mathbf{\Pi}_{\mathbf{R}^{\perp}}^{\perp} = \mathbf{\Pi}_{\mathbf{R}} = \mathbf{R}(\mathbf{R}'\mathbf{R})^{-1}\mathbf{R}' = \mathbf{R}\mathbf{R}', \quad (3.A2)$$

$$\mathbf{\Pi}_{\mathbf{S}^{\perp}}^{\perp} = \mathbf{\Pi}_{\mathbf{S}} = \mathbf{S}(\mathbf{S}'\mathbf{S})^{-1}\mathbf{S}' = \mathbf{S}\mathbf{S}'. \quad (3.A3)$$

Dado que $\mathbf{P}'\mathbf{R} = \mathbf{R}'\mathbf{P} = \mathbf{I}$ (o $\mathbf{Q}'\mathbf{S} = \mathbf{S}'\mathbf{Q} = \mathbf{I}$), de la Ec. (3.A1) y Ec. (3.A2) [o de Ec. (3.A1) y (A3)] resulta que: $\mathbf{\Pi}_{\mathbf{P}|\mathbf{R}^{\perp}} = \mathbf{P}\mathbf{R}'$ (o $\mathbf{\Pi}_{\mathbf{Q}|\mathbf{S}^{\perp}} = \mathbf{Q}\mathbf{S}'$). Similarmente, se obtiene

$$\mathbf{\Pi}_{\mathbf{R}^{\perp}|\mathbf{P}} = \mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}' \quad (\text{o } \mathbf{\Pi}_{\mathbf{S}^{\perp}|\mathbf{Q}} = \mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{S}'). \quad \square$$

Cada proyector oblicuo (Ec. 3.9-3.10) funciona como una matriz identidad cuando se aplica sobre un vector que pertenece a su rango/recorrido.

Prueba del Teorema 1. Las Ec. (3.11) y (3.12) se pueden probar, teniendo en cuenta que:

(i) $Span\{\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}'\} = Span\{\mathbf{R}\}^{\perp}$ y $Span\{\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{S}'\} = Span\{\mathbf{S}\}^{\perp}$ (ver lema 1), y (ii) las proyecciones pertenecen a subespacios complementarios, porque

$rank(\mathbf{PR}'(\mathbf{I} - \mathbf{PR}')) = \dim(S_{MX}) + \dim(S_{RX}) = m$ y $rank(\mathbf{QS}'(\mathbf{I} - \mathbf{QS}')) = \dim(S_{MY}) + \dim(S_{RY}) = p$. Por último, la Ec. (3.13) se deriva directamente de la Ec. (3.8). \square

La descomposición de \mathbf{x} (Ec. 3.11) ya ha sido demostrada por Gang et al. (2010).

Prueba del Teorema 2. Dado que \mathbf{Q} es ortogonal por columnas, la propiedad de la inversa generalizada de una SVD indica que: $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}^- = (\mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}')^- = \mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{Q}'$. En consecuencia, a partir de la Ec. (22b) resulta: $D_{\hat{\mathbf{y}}} = \hat{\mathbf{y}}'\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}^-\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{y}}'\mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{Q}'\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{u}}'\mathbf{\Lambda}^{-1}\hat{\mathbf{u}} = T_{\hat{\mathbf{u}}}^2$. De manera equivalente, sustituyendo $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{x}}}^- = (\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}')^- = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{P}'$ en la Ec. (3.22a), resulta: $D_{\hat{\mathbf{x}}} = \hat{\mathbf{x}}'\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{x}}}^-\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}'\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{P}'\hat{\mathbf{x}} = T_{\hat{\mathbf{t}}}^2$. Además, combinando las Ecs. (3.14, 3.15, 3.16, 3.19), se obtiene: $T_{\hat{\mathbf{u}}}^2 = \mathbf{t}'\mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{t} = T_{\hat{\mathbf{t}}}^2$. Por último, conectando todas estas igualdades se prueba el Teorema 2. \square

Apéndice 3.B. Límites de control

El límite de control de T^2 , con un nivel de confianza $(1-\alpha)$, está dada por: $\tau_{\alpha}^2 = \left[(AN^2 - A)/(N^2 + NA) \right] F_{A, N-A}(\alpha)$; donde $F_{A, N-A}(\cdot)$ es la distribución F con A y $N-A$ grados de libertad. Por otro lado, el límite de control α de SPE_X (o SPE_{Y1} o SPE_{Y2}) está dado por: $\delta_{X, \alpha}^2 = (\sigma/2\nu)\chi_{2\nu^2/\sigma}^2(\alpha)$; donde ν y σ son la media y la varianza muestral estimadas con N observaciones de SPE_X , y $\chi_{2\nu^2/\sigma}^2(\cdot)$ es la distribución χ^2 con $2\nu^2/\sigma$ grados de libertad. El límite de control α del I_{TC} está dada por:

$$I_{\alpha} = g \chi_h^2(\alpha), \tag{3.B1}$$

con

$$g = \sum v_a \lambda_a^2 = \frac{tr\left[\left(\mathbf{R}_{[y'x]}\mathbf{\Phi}\right)^2\right]}{tr\left(\mathbf{R}_{[y'x]}\mathbf{\Phi}\right)}, \quad h = \frac{\left(\sum v_a \lambda_a\right)^2}{\sum v_a \lambda_a^2} = \frac{\left[tr\left(\mathbf{R}_{[y'x]}\mathbf{\Phi}\right)\right]^2}{tr\left[\left(\mathbf{R}_{[y'x]}\mathbf{\Phi}\right)^2\right]}, \tag{3.B2}$$

donde v_a es el a -ésimo autovalor de $\mathbf{R}_{[y'x]}\mathbf{\Phi}$ con multiplicidad λ_a . Se utiliza la distribución aproximada para calcular los límites de confianza (Ec. 3.B1) de los índices combinados. En todos los casos, los límites de control fueron establecidos en el percentil 99 ($\alpha = 0.01$).

Capítulo 4

Monitoreo inferencial de calidad. Aplicación a un proceso industrial de producción de caucho

Resumen

En este capítulo se desarrolla una técnica de monitoreo inferencial de procesos con atributos (o variables) de calidad no medibles en línea, basada en descomposición PLSR de las entradas, la cual permite supervisar la calidad y el estado del proceso en forma conjunta utilizando un único índice que señala si todas las variables de calidad están o no dentro de sus tolerancias o si el proceso posee o no alguna anomalía. Para poder monitorear en forma inferencial la calidad multivariada (respecto a sus especificaciones) con un único índice se desarrolla un límite de control multivariado modificado por las especificaciones, el cual formará parte del índice combinado de detección. La técnica es capaz de detectar una anomalía, clasificar su tipo en: i) cambio excesivo de operación respecto a sus especificaciones, ii) falla de sensores, o iii) cambio de correlaciones (incluyendo perturbación), e identificar las variables responsables. De esta manera, provee una validación de las mediciones antes que el modelo inferencial PLSR (o sensor algorítmico) prediga las respuestas de calidad. Para los casos no válidos (como el tipo ii) se provee una reconstrucción de lecturas defectuosas a fin de proporcionar una predicción sin los efectos de las variables predictoras defectuosas. En primer lugar se procede a mostrar la eficacia de la técnica propuesta mediante un ejemplo de evaluación numérica y luego se extiende su aplicación a un proceso industrial (producción de caucho SBR en un tren de reactores). Para evaluar esta aplicación se consideran dos anomalías que frecuentemente perturban el funcionamiento estacionario del proceso SBR: fallas de sensores y perturbaciones no medibles en línea (por ejemplo, niveles de impurezas en algunos reactivos). Los resultados de simulación muestran que la técnica propuesta identifica correctamente a las fallas de sensores y a las perturbaciones analizadas y por lo tanto sugieren que los métodos propuestos son herramientas adecuadas para supervisar y controlar el funcionamiento estacionario del proceso SBR.

4.1 Introducción

En la mayoría de los procesos industriales, los operadores ajustan las variables manipuladas para mantener la calidad del producto o de los residuos dentro de las especificaciones o de las reglamentaciones gubernamentales. La tarea generalmente se realiza utilizando analizadores en línea y/o pruebas de laboratorio. Debido al mal funcionamiento de los analizadores o a los retrasos en las pruebas de laboratorio, los sensores algorítmicos pueden auxiliar infiriendo las respuestas de calidad a partir de otras variables del proceso y proporcionando así información útil para regular la operación del proceso. Las aplicaciones de sensores algorítmicos han atraído significativamente la atención en la industria del proceso (Kadlec et al., 2009).

Sin embargo, el desempeño de predicción de un sensor algorítmico no sólo depende de la capacidad del modelo inferencial, sino también de la calidad de las mediciones que ingresan al modelo. En general, se ha reportado el uso de sensores algorítmicos para complementar mediciones de instrumentos con fines de monitoreo y/o control de procesos. Un ejemplo es el reportado por Godoy et al. (2011), donde se publica un sensor algorítmico para monitorear en línea un proceso SBR. No obstante, un sensor algorítmico puede dar una predicción errónea cuando fallas de sensores y/o perturbaciones (cambios no medibles en línea) modifican las mediciones adquiridas que se utilizan para predecir las respuestas.

Una propuesta para mitigar esto se presenta en el trabajo de Qin et al. (1997) en donde se reconstruyen las lecturas afectadas por múltiples fallas de sensores que ocurren en forma secuencial, es decir en tiempos sucesivos. En la práctica, es probable que las fallas en múltiples sensores se deban no a una falla simultánea de los instrumentos de medición, sino a un mal funcionamiento del sistema de adquisición de datos. Por ejemplo, cuando una parte de las variables predictoras proviene de otro sistema de control, cuyos datos se podrían perder o alterar si falla la puerta de entrada (o señal de lectura/adquisición).

Recientemente, en Liu et al. (2010) se propuso un sensor algorítmico basado en PLSR con autovalidación y reconstrucción de lecturas defectuosas (para los casos no válidos) con el fin de proporcionar una predicción inferencial (estimación de las respuestas) sin los efectos de las variables predictoras defectuosas. La técnica consistió en validar las mediciones antes de predecir con el modelo inferencial PLSR y, una vez que los sensores defectuosos han sido identificados, reconstruir su valor. La fórmula de reconstrucción empleada en Liu et al. (2010) es apta para fallas múltiples, pero identifica secuencialmente los sensores defectuosos, indagando una variable a la vez al minimizar un índice combinado con esa variable reconstruida. Sin embargo, debido a las correlaciones entre las

variables afectadas, esta etapa de identificación no es confiable. Para que mejore la confiabilidad de esta técnica es necesario identificar fehacientemente las mediciones predictoras afectadas antes de iniciar la reconstrucción, lo cual se propone implementar a continuación. Lo que se propone es complementar la técnica de monitoreo inferencial de Liu et al. (2010), agregando una clasificación del tipo de anomalía, seguida por una identificación de las variables responsables en base a análisis de contribuciones y por una identificación de perturbaciones. Si además se produce el diagnóstico de perturbaciones en forma temprana (antes que la producción salga de especificaciones), se podrían determinar acciones preventivas en procesos con grandes constantes de tiempos como el proceso SBR estudiado.

Con frecuencia, las observaciones recolectadas durante el funcionamiento normal de un proceso caracterizan una zona de operación diferente en tamaño a la zona de trabajo bajo especificación. En otras palabras, un conjunto regular de datos históricos se usa para obtener la estructura de correlaciones y puede incluir variabilidades que no necesariamente coinciden con las permitidas por las especificaciones. En consecuencia surge la necesidad de disponer de un límite de control que dependa de las especificaciones para ser utilizado en monitoreo multivariado. En monitoreo univariado ya existe el límite de control modificado (Montgomery, 2004a), concepto análogo al buscado. En este capítulo se propone un nuevo límite de control modificado por las especificaciones para utilizar en una carta de control multivariada T^2 de Hotelling. En particular, este límite formará parte de un índice combinado propuesto aquí para monitoreo inferencial.

En resumen, la técnica propuesta utiliza un índice combinado para detectar una anomalía, advirtiendo la necesidad de acciones correctivas que retornen al proceso dentro de sus especificaciones. Por medio del análisis de las contribuciones a cada estadístico componente del índice combinado, es posible diagnosticar si la anomalía es un problema del proceso siguiendo su estructura de correlación (como un punto de operación fuera de especificaciones), o si se trata de una falla (como un sensor que no funciona correctamente) o de un cambio de las correlaciones (como un cambio del proceso o una perturbación). Las perturbaciones provocan patrones de contribuciones diferentes a las fallas de sensor. Las últimas provocan un único valor positivo (correspondiente al sensor fallado) mucho mayor que el resto de las contribuciones, lo cual permite su aislación directa. Por el contrario las perturbaciones provocan un patrón de varias contribuciones significativas. Para identificar una perturbación entrante, la técnica de aislamiento propuesta utiliza una colección de perturbaciones conocidas para clasificar el evento actual.

El capítulo se organiza de la siguiente manera: en la Sección 4.2, se describe la técnica de monitoreo inferencial propuesta. En la sección 4.3 se somete esta técnica a evaluación por medio de su aplicación a un proceso dinámico arbitrario (Subsección 4.3.1) y a un proceso SBR industrial simulado (Subsección 4.3.2). El ejemplo de aplicación numérica en la Subsección 4.3.1 tiene una importancia fundamental en la comprensión global de la técnica propuesta, mientras que el otro ejemplo de aplicación en la Subsección 4.3.2 describe además la identificación de perturbaciones y otros tópicos particulares de la aplicación. Finalmente, las conclusiones se presentan en la Sección 4.4.

4.2. Técnica de monitoreo inferencial de procesos

Dado un conjunto de datos recolectados durante el funcionamiento normal del proceso, $\mathbf{X}=[\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N]'$ ($N \times m$) - $\mathbf{Y}=[\mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_N]'$ ($N \times p$), se puede utilizar PLSR para encontrar un modelo de regresión entre el vector predictor $\mathbf{x}=[x_1 \dots x_m]'$ y el vector respuesta $\mathbf{y}=[y_1 \dots y_p]'$ con variables “no medibles en línea”, dado por:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{QBR}'\mathbf{x} \quad (4.1)$$

Después de construir el modelo inferencial PLSR (Ec. 4.1), las mediciones en línea de \mathbf{x} se pueden descomponer como:

$$\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^m \quad (4.2)$$

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{PR}'\mathbf{x} \in S_{MX} \subseteq \mathbb{R}^m,$$

$$\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{I} - \mathbf{PR}')\mathbf{x} \in S_{RX} \subseteq \mathbb{R}^m,$$

donde $\hat{\mathbf{x}}$ es la proyección oblicua sobre el subespacio modelo S_{MX} a lo largo del subespacio residuo S_{RX} , y $\tilde{\mathbf{x}}$ es la proyección oblicua sobre S_{RX} a lo largo de S_{MX} . Estos vectores pertenecen a subespacios oblicuos complementarios, por tanto pueden ser no-ortogonales, es decir: $\hat{\mathbf{x}}'\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}'\mathbf{R}(\mathbf{P}' - \mathbf{R}')\mathbf{x} \neq 0$. El ángulo mínimo θ_{min} entre ambos subespacios (no nulos) S_{MX} y S_{RX} se define como el número $0 \leq \theta_{min} \leq \pi/2$ que satisface (Ipsen y Meyer, 1995): $\cos \theta_{min} = \max_{\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}} (\hat{\mathbf{x}}'\tilde{\mathbf{x}} / \|\hat{\mathbf{x}}\| \|\tilde{\mathbf{x}}\|)$, y éste ángulo puede estimarse a través de la relación:

$\sin \theta_{min} = 1 / \|\mathbf{PR}'\|_2$. Como las proyecciones oblicuas se efectúan sobre dos subespacios complementarios, la magnitud de cada proyección depende del cuadrante donde se ubica \mathbf{x} . Esta diferencia entre cuadrantes se incrementa al disminuir θ_{min} y desaparece cuando los subespacios se tornan ortogonales ($\theta_{min} = \pi/2$). PLSR intenta ajustar el subespacio S_{MX} , dentro de un espacio de variables correlacionadas, el cual a su vez se debe correlacionar

con las respuestas en S_{MY} . Un bajo valor de θ_{min} indicaría que el algoritmo PLSR no logró un buen ajuste, dado que no diferencia claramente las proyecciones modeladas en S_{MX} de las residuales en S_{RX} . Por lo tanto, resulta importante incluir la inspección de θ_{min} en la selección del orden del modelo.

Cuando algunas de las variables respuestas \mathbf{y} no son medibles en línea, se propone utilizar un índice combinado basado en un modelo PLSR “bajo-control” (es decir, con sus límites de control), para monitorear solamente a \mathbf{x} . Quitando del índice combinado total (ver Ec. 3.23) los estadísticos componentes que no pueden ser medidos en línea, resulta el siguiente índice combinado inferencial:

$$I_C = \frac{T_t^2}{\tau_\alpha^2} + \frac{SPE_x}{\delta_{x,\alpha}^2} = \mathbf{x}'\Phi\mathbf{x}, \quad (4.3)$$

donde $\Phi = \mathbf{R}\Lambda^{-1}\mathbf{R}'(\tau_\alpha^2)^{-1} + (\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}')'(\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}')(\delta_{x,\alpha}^2)^{-1}$ es simétrica definida positiva y $\tau_\alpha^2, \delta_{x,\alpha}^2$ son los límites de control para un nivel de significancia α . El I_C considera el subespacio respuesta S_{MY} y el espacio de entrada completo \mathbb{R}^m (ya sea con matriz de autocorrelación $\mathbf{R}_x \geq 0$ ó $\mathbf{R}_x > 0$), proporcionando una medida de la variabilidad total de entrada junto con una medida de la variabilidad de respuesta predicha. Por lo tanto, el índice puede monitorear en forma conjunta calidad del proceso, anomalías (alteraciones) del proceso y fallas de sensores. La supervisión de un proceso multivariado a través del índice combinado I_C propuesto es más confiable (ver Apéndice 4.A) que adicionar límites de confianza a cada predicción (Ec. 4.1) obtenida por medio del modelo PLSR (Liu et al., 2010).

La técnica de diagnóstico inferencial se basa en la descomposición PLSR del espacio predictor, clasificando el tipo de anomalía de acuerdo al estadístico componente (T_t^2/τ_α^2 o $SPE_x/\delta_{x,\alpha}^2$) que más contribuya a disparar la condición de alarma. Del Cap. 3 resulta la descomposición del índice combinado inferencial I_C como:

$$I_C = \sum_{i=1}^m \left(\frac{cT_t^2(x_i)}{\tau_\alpha^2} + \frac{cSPE_x(x_i)}{\delta_{x,\alpha}^2} \right) = \sum_{i=1}^m (cI_{MX}(x_i) + cI_{RX}(x_i)) \quad (4.4)$$

donde $cI_{MX}(x_i)$ y $cI_{RX}(x_i)$ son las contribuciones normalizadas de x_i a I_C , actuando sobre el subespacio S_{MX} (o S_{MY}) y sobre S_{RX} , respectivamente. Valores positivos elevados de $cI_{MX}(x_i)$ denuncian un punto de operación desplazado (fuera del funcionamiento normal) siguiendo su estructura de correlación. Por el contrario, valores positivos altos de $cI_{RX}(x_i)$

denuncian una falla de sensor o un cambio de correlaciones (incluyendo perturbaciones). Una falla en el sensor j ($f_j \xi_j$) se produce en una fuente específica y su efecto no se propaga a las otras variables, alterando sólo su patrón de correlación con las restantes y produciendo así el siguiente patrón de contribuciones (Cap. 3): $cI_{MX}(x_i) \approx 0 \quad \forall i$, $cI_{RX}(x_j) = \tilde{x}_j \mathbf{a}'_j \tilde{\mathbf{x}} / \delta_{x,\alpha}^2 > 0$, $cI_{RX}(x_i) \approx 0 \quad \forall i \neq j$. Por lo tanto, grandes valores positivos de $cI_{RX}(x_i)$ denuncian directamente los sensores dañados. Por el contrario, una perturbación afecta simultáneamente un subconjunto de variables del proceso alterando su patrón de correlación con las restantes, lo cual causa un patrón característico de contribuciones significativas que no pueden aislar directamente por sí mismas la perturbación responsable. Sin embargo, cada perturbación puede generar un patrón característico identificado como una dirección multivariada particular. En consecuencia, es necesario analizar aún más la caracterización proporcionada por la descomposición PLSR (Ec. 4.2) a fin de diseñar una técnica que pueda aislar (o identificar) perturbaciones.

4.2.1 Límite de control multivariado modificado por la región de especificación

En PLSR, dadas las matrices de correlación $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{x}}}$ y $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}$ de las proyecciones $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$, respectivamente; y la matriz de correlación $\mathbf{\Lambda}$ del vector de coordenadas $\mathbf{t} = \mathbf{R}'\mathbf{x} = [t_1 \cdots t_A]'$ sobre S_{MX} , se tiene la siguiente relación (ver Cap. 3):

$$\hat{\mathbf{x}}' \mathbf{R}_{\hat{\mathbf{x}}}^{-1} \hat{\mathbf{x}} = T_t^2 = \hat{\mathbf{y}}' \mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}^{-1} \hat{\mathbf{y}}, \quad (4.5a)$$

donde

$$T_t^2 = \mathbf{t}' \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{t}, \quad (4.5b)$$

siendo $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{R}'\mathbf{R}_x\mathbf{R} = \text{diag}(\lambda_1 \dots \lambda_A)$ y λ_a la varianza estimada de la a -ésima variable latente t_a . La Ec. (4.5a) muestra que se puede monitorear la respuesta del proceso a través de un estadístico PLSR del vector predictor \mathbf{x} medible en línea. Esto motiva la búsqueda de un límite de control modificado por las especificaciones para reemplazar al límite de confianza τ_α^2 .

La Fig 4.1a muestra el espacio de respuesta $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$ donde se hallan las variables de calidad y_1, y_2 e y_3 , con sus respectivos límites de especificación inferior e superior (LSL_j y USL_j para $j=1..3$), formando el cubo de tolerancia dentro del cual se halla el plano latente $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^2$ y sobre éste se proyectan las especificaciones. La Fig. 4.1b muestra el elipsoide de

confianza α ($T_1^2 = t_1^2/\lambda_1 + t_2^2/\lambda_2 = \tau_\alpha^2$) contenido dentro del elipsoide de especificación K^2 , aunque podría ser al revés (τ_α^2 contener a K^2). A su vez, el contorno de densidad constante K^2 es el de máximo volumen contenido en la región de especificación latente confinada por sus límites LL_a y UL_a para $a=1..2$. El valor de K^2 se elige tal que el elipsoide resultante sea el de volumen más grande dentro de las especificaciones proyectadas y se determina como:

$$K^2 = \min_{a=1..A} \left(\frac{UL_a^2}{\lambda_a}, \frac{LL_a^2}{\lambda_a} \right), \tag{4.6}$$

donde LL_a y UL_a son los límites latentes, los cuales resultan de proyectar los vértices del hiper-cubo de especificaciones y buscar en cada a -ésima variable latente el mínimo y el máximo, respectivamente. La fórmula para obtener K^2 es una generalización del problema de encontrar el índice de capacidad de un proceso multivariado (MC_P), el cual se define como la relación del volumen de la región de tolerancia (o especificación) al volumen de la región del proceso (Jessenberger y Weihs, 1998). Para este caso se consideran los volúmenes sobre S_{MX} , por lo tanto, el MC_P resulta igual a:

$$MC_P = \frac{vol(\mathbf{t}'\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{t} \leq K^2)}{vol(\mathbf{t}'\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{t} \leq \tau_\alpha^2)} = \left(\frac{K^2}{\tau_\alpha^2} \right)^{p/2} \tag{4.7}$$

donde el volumen del elipsoide del numerador está dado por $(\pi K^2)^{p/2} |\mathbf{\Lambda}|^{1/2} / \Gamma(p/2 + 1)$.

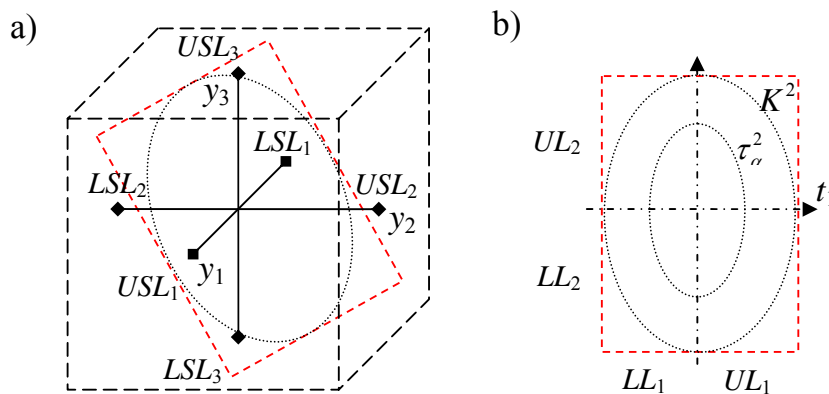


Figura 4.1: a) Región de especificación (cubo) en las variables originales (determinada por los límites de especificación individuales LSL_j y USL_j para $j=1..3$) y su proyección sobre el hiper-plano latente. b) Elipsoide de máximo volumen contenido en la región de especificación latente (contorno K^2), que a su vez contiene el elipsoide de confianza (contorno τ_α^2).

Por lo tanto, el límite de control modificado $K^2 = (MC_p)^{2/p} \tau_\alpha^2$ pertenece al máximo contorno contenido dentro de la región de especificación latente, resultando el siguiente índice combinado modificado:

$$I_{cm} = \frac{T_t^2}{K^2} + \frac{SPE_{\mathbf{x}}}{\delta_{\mathbf{x},\alpha}^2} = \mathbf{x}' \Phi_m \mathbf{x} \quad (4.8)$$

donde se reemplazó τ_α^2 por K^2 (ver Ec. 4.3) y su límite de control $I_{\alpha,m}$ se estima según el Apéndice 3.B.

En resumen, la calidad multivariada y del proceso puede ser monitoreada en forma inferencial controlando el estadístico PLSR $T_t^2(\mathbf{x})$ (Ec. 4.5b), el cual depende de las mediciones actuales \mathbf{x} , respecto a K^2 . Una condición de alarma ($T_t^2(\mathbf{x}) \geq K^2$) indicaría que al menos una especificación se ha quebrantado.

4.2.2 Identificación temprana de perturbaciones

Cuando ocurre un nuevo evento especial (que no fue considerado por el modelo PLSR bajo-control), sus mediciones \mathbf{x} se apartarán del hiperplano modelo S_{MX} . Este evento se puede caracterizar con la posición angular de \mathbf{x} respecto a ambos hiperplanos (S_{MX} y S_{RX}). Los ángulos entre \mathbf{x} y sus proyecciones en ambos subespacios complementarios están dadas por:

$$\theta_{\text{mod}} = \cos^{-1} \left(\hat{\mathbf{x}}' \mathbf{x} / \|\hat{\mathbf{x}}\| \|\mathbf{x}\| \right), \quad (4.9)$$

$$\theta_r = \cos^{-1} \left(\tilde{\mathbf{x}}' \mathbf{x} / \|\tilde{\mathbf{x}}\| \|\mathbf{x}\| \right),$$

$$\theta_{\text{mod}} + \theta_r = \cos^{-1} \left(\hat{\mathbf{x}}' \tilde{\mathbf{x}} / \|\hat{\mathbf{x}}\| \|\tilde{\mathbf{x}}\| \right),$$

La Fig. 4.2 muestra como el par $(\theta_{\text{mod}}, \theta_r)$ determina la ubicación de \mathbf{x} respecto a ambos subespacios.

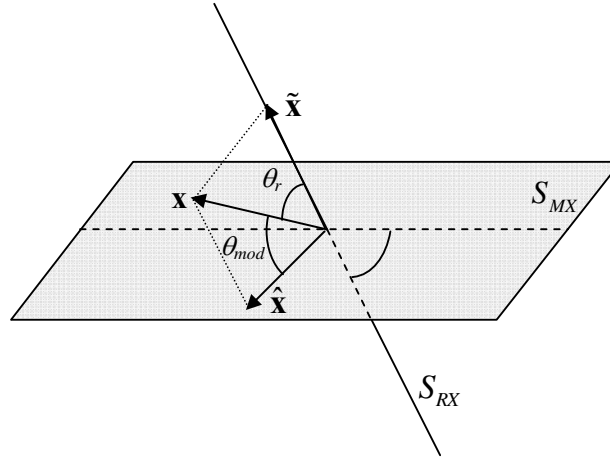


Figura 4.2: Interpretación geométrica de los ángulos considerados para un espacio ambiente \mathbb{R}^3 .

Dicho lo anterior, lo que aquí se propone es caracterizar el efecto de cada perturbación d_i en las mediciones \mathbf{x}_i a través de sus direcciones en ambos subespacios, dadas por:

$$\hat{\mathbf{x}}_i^n = \hat{\mathbf{x}}_i / \|\hat{\mathbf{x}}_i\| \in S_{MX}, \quad \tilde{\mathbf{x}}_i^n = \tilde{\mathbf{x}}_i / \|\tilde{\mathbf{x}}_i\| \in S_{RX} \quad (4.10)$$

(se asume que $\|\hat{\mathbf{x}}_i\| \neq 0$ y $\|\tilde{\mathbf{x}}_i\| \neq 0$). Una biblioteca de perturbaciones conocidas consiste en todas sus direcciones multivariadas \mathbf{x}_i^n ($i=1, \dots, l$) proyectadas sobre ambos subespacios y normalizadas según la Ec. (4.10), formando los siguientes conjuntos: $\{\hat{\mathbf{x}}_i^n\}_{i=1, \dots, l}$, $\{\tilde{\mathbf{x}}_i^n\}_{i=1, \dots, l}$. Estos dos conjuntos de direcciones proyectadas incluyen toda la información conocida en ambos subespacios sobre las l perturbaciones consideradas. Las direcciones \mathbf{x}_i^n de cada perturbación pueden ser obtenidas a partir de información estacionaria vía pruebas en planta, un modelo mecanicista, o datos históricos de perturbaciones.

En consecuencia, se proponen medidas angulares relacionadas a θ_{mod} y θ_r (Fig. 4.2) para aislar perturbaciones, como el coseno del ángulo entre una proyección actual $\hat{\mathbf{x}}$ ($\tilde{\mathbf{x}}$) y una de las direcciones anormales en S_{MX} (S_{RX}), $\hat{\mathbf{x}}_i^n$ ($\tilde{\mathbf{x}}_i^n$), lo cual da una medida relativa de su colinealidad, es decir: $\cos \hat{\theta}_i = (\hat{\mathbf{x}}' \hat{\mathbf{x}}_i^n) / \|\hat{\mathbf{x}}\|$ ($\cos \tilde{\theta}_i = (\tilde{\mathbf{x}}' \tilde{\mathbf{x}}_i^n) / \|\tilde{\mathbf{x}}\|$). Cuando el valor absoluto del i -ésimo coseno es cercano a uno, la proyección $\hat{\mathbf{x}}$ ($\tilde{\mathbf{x}}$) es casi colineal con la i -ésima dirección anormal. Por lo tanto, la perturbación tentativamente puede ser aislada como la

ubicación i_d del máximo en ambos conjuntos $\left\{|\cos \hat{\theta}_i| / |\cos \tilde{\theta}_i| > \hat{u}_i\right\}_{i \in \Gamma_1}$ y $\left\{|\cos \tilde{\theta}_i| / |\cos \hat{\theta}_i| > \tilde{u}_i\right\}_{i \in \Gamma_2}$, de la siguiente manera:

$$i_1 = \arg \left[\max_{i \in \Gamma_1} (|\cos \hat{\theta}_i|) \right], \quad i_2 = \arg \left[\max_{i \in \Gamma_2} (|\cos \tilde{\theta}_i|) \right],$$

$$\text{si } (i_1 = i_2) \text{ entonces } i_d = i_1, \quad (4.11)$$

donde i_d es el índice de la perturbación identificada. Los umbrales $\hat{u}_i < 1$ y $\tilde{u}_i < 1$ se utilizan para limitar la región angular de aceptación. Cuanto menor sea el umbral, mayor será la respectiva región angular de aceptación dada por $\pm \cos^{-1} u$ rad. Las reglas de optimización (Ec. 4.11) junto con sus umbrales, generan zonas cónicas de aceptación colineales a $\hat{\mathbf{x}}_i^n$ y a $\tilde{\mathbf{x}}_i^n$, para cada perturbación $i = 1, \dots, l$. Cada zona cónica posee una apertura angular igual a $2 \cos^{-1}(\hat{u}_i)$ sobre S_{MX} y a $2 \cos^{-1}(\tilde{u}_i)$ sobre S_{RX} . Si la biblioteca de perturbaciones posee ubicaciones angulares $(\theta_{\text{mod}}, \theta_r)$ diferentes para cada perturbación, el método de aislación será específico. La lógica de aislación (Ec. 4.11) será lo suficientemente específica si la separación entre valores consecutivos de θ_{mod} (θ_r) dentro de la biblioteca es mayor que $2 \cos^{-1} u$.

Por otro lado, la relación señal de falla-a-ruido está dada por:

$$SNR_{\text{fault}} = \frac{I_C}{I_\alpha} = \frac{\|\Phi^{1/2} \mathbf{x}\|^2}{I_\alpha} \quad (4.12)$$

donde I_α es el límite de control de I_C (ver Apéndice 3.B). Esta relación (Ec. 4.12) depende de la dirección y magnitud del vector de mediciones \mathbf{x} anormales. Por lo tanto, se tiene detección temprana de una perturbación si ésta se detecta con un $SNR_{\text{fault}} < 1$. Es decir, la detección es temprana si se dispara otra condición de alarma aún cuando I_C (Ec. 4.3) sea menor a su límite de control I_α . En consecuencia, la regla de aislación en la Ec. (4.11) queda supeditada por la siguiente sentencia:

$$\text{Si } I_C(\mathbf{x}) \geq 0.2 I_\alpha, \text{ entonces ejecutar la Ec. (4.11).} \quad (4.13)$$

donde se fijó una $SNR_{\text{fault}} \geq 0.2$.

4.2.3 Reconstrucción de lecturas defectuosas

Cuando una o más lecturas de variables predictoras se corrompen por alguna anomalía, se puede reconstruir su(s) verdadero(s) valor(es) a partir de las lecturas confiables restantes. Para estimar las variables afectadas por una falla múltiple en sus respectivos sensores se minimiza el índice combinado I_C (Ec. 4.3) cuando éste supera el límite de control (Liu et al., 2010). Esta condición se puede plantear a partir de:

$$\left(\frac{\partial I_C}{\partial x_i} \right)_{x_i \neq \{x_j\}} = (\mathbf{I} - \text{diag}(\xi)) \frac{\partial \mathbf{x}' \Phi \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = 2(\mathbf{I} - \text{diag}(\xi)) \Phi \mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (4.14)$$

donde $\{x_j\}$ es el conjunto de sensores defectuosos identificados mediante las mayores contribuciones $cI_{RX}(x_j)$ a S_{RX} y $\text{diag}(\xi)$ es una matriz diagonal de componentes iguales a uno para los sensores defectuosos y a cero para los sensores normales. Es decir, se minimiza la parte del I_C que no es afectada por mediciones defectuosas. Las variables predictoras se pueden descomponer como: $\mathbf{x} = \text{diag}(\xi)\mathbf{x} + (\mathbf{I} - \text{diag}(\xi))\mathbf{x} = \mathbf{x}_f + (\mathbf{I} - \text{diag}(\xi))\mathbf{x}$, donde $\mathbf{x}_f = \text{diag}(\xi)\mathbf{x}$ es la parte defectuosa a reconstruir. Si se reemplaza esta descomposición en la Ec. (4.14) y, a continuación, se despeja \mathbf{x}_f , se obtiene la reconstrucción de la(s) variable(s) defectuosa(s) como:

$$\mathbf{x}_f^r = -((\mathbf{I} - \text{diag}(\xi))\Phi)^{-1} (\mathbf{I} - \text{diag}(\xi))\Phi(\mathbf{I} - \text{diag}(\xi))\mathbf{x}. \quad (4.15a)$$

En el caso de una perturbación en una variable predictora detectada e identificada en forma independiente, también se reconstruye la variable defectuosa utilizando la Ec. (4.15). Luego, por diferencia con la lectura actual asociada se estima la perturbación responsable. Una vez reconstruida la parte defectuosa del vector predictor \mathbf{x} , se pueden predecir las respuestas (Ec. 4.1) sin la influencia de lecturas defectuosas, utilizando el vector:

$$\mathbf{x}^r = \mathbf{x}_f^r + (\mathbf{I} - \text{diag}(\xi))\mathbf{x}. \quad (4.15a)$$

En Liu et al. (2010) presentan la reconstrucción simultánea de varias variables defectuosas (Ec. 4.15), pero no simulan su desempeño durante fallas múltiples, dado que su técnica carece de identificación del subconjunto de variables defectuosas dentro de \mathbf{x} , por lo que sólo determinaban el sensor defectuoso por reconstrucción secuencial de cada variable. Por lo tanto, al detectar el conjunto de variables afectadas $\{x_j\}$ en la Ec. (4.15), la propuesta que aquí se realiza complementa la técnica de Liu et al. (2010) mejorando significativamente la técnica.

4.2.4 Resumen de la técnica de monitoreo inferencial

El desempeño de predicción de un sensor algorítmico no sólo depende de la capacidad predictiva del modelo inferencial, sino también de la calidad de las mediciones que ingresan a éste. Consecuentemente, en el enfoque propuesto aquí las mediciones adquiridas en línea y el estado actual del proceso se validan antes de realizar una predicción. Para los casos no-válidos (como sensores defectuosos o perturbaciones en las entradas) se reduce el deterioro predictivo (debido a las mediciones defectuosas) reconstruyendo las variables afectadas. A continuación, es posible utilizar el modelo inferencial para predecir las respuestas utilizando el vector predictor reconstruido. Para el caso de anomalías del proceso como cambios de correlaciones se emite una alarma y se inhabilitan las predicciones del sensor algorítmico.

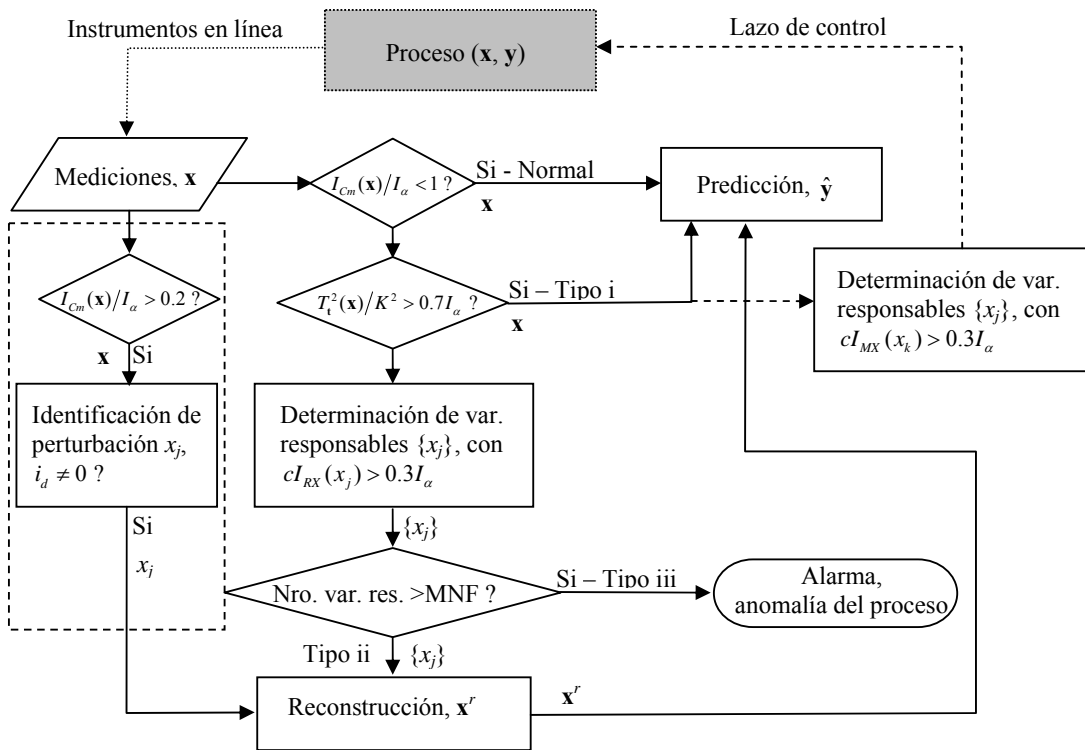


Figura 4.3: Diagrama de flujo de la técnica propuesta. El camino señalado con línea de puntos no es necesario en algunos procesos.

La Fig. 4.3 muestra el diagrama de flujo de la técnica propuesta, en donde se describen los cinco caminos posibles a seguir dependiendo del diagnóstico. La técnica (Fig. 4.3)

detecta una anomalía, clasifica su tipo en: i) cambio excesivo de operación en relación a sus especificaciones, ii) falla(s) de sensor(es), o iii) cambio de correlaciones (incluyendo perturbación), identifica las variables responsables y reconstruye las variables defectuosas (en algunos casos) antes de predecir las respuestas. Cuando el camino opcional (Fig. 4.3) está implementado, se identifica la entrada asociada la perturbación para luego reconstruirla. Este camino opcional no es aplicable en algunos procesos. De todas maneras, las perturbaciones están incluidas en el tipo iii, dado que afectan las correlaciones esperadas entre las mediciones. El lazo de control con línea de puntos en la Fig. 4.3 indica el lugar en el que se podría ubicar un algoritmo de optimización o control, el cual estaría vinculado a la clasificación tipo i. Los porcentajes utilizados en el árbol de decisiones se fijaron en forma intuitiva, y MNF es el máximo número posible de fallas simultáneas.

Es importante remarcar que la reconstrucción de lecturas provenientes de sensores defectuosos elimina el efecto de las mediciones defectuosas sobre las predicciones del modelo, en lugar de mejorar el desempeño predictivo con datos reconstruidos.

4.3 Ejemplos de aplicación

Para evaluar la descomposición PLSR propuesta y los estadísticos como herramientas de detección y diagnóstico, se simulan dos tipos de anomalías en un sistema arbitrario: 1) un alejamiento puntual de la trayectoria manipulada esperada y 2) una falla de sensor. Se compara el desempeño de la técnica de monitoreo inferencial considerando, o no, las especificaciones de calidad. La técnica también se aplica al proceso SBR explicado en el Cap. 2, en donde además se diagnostica en forma temprana cada perturbación esperable de un conjunto de posibles perturbaciones con caracterizaciones PLSR conocidas.

4.3.1 Monitoreo inferencial de calidad y diagnóstico de anomalías en un proceso dinámico

Se asume que en el proceso estudiado (idéntico al de la Sección 3.4.2) sólo es posible medir en línea una (y_1) de sus tres respuestas. En consecuencia, se plantea el siguiente modelo de regresión dinámica:

$$\hat{\mathbf{y}}(k) = \overbrace{[\mathbf{A}_1 \mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2]}^{\text{QBR}'} \begin{matrix} \overbrace{\left[\begin{array}{c} y_1(k-1) \\ \mathbf{v}(k-1) \\ \mathbf{v}(k-2) \end{array} \right]}^{\mathbf{x}(k)} \\ \end{matrix} = \mathbf{A}_1 y_1(k-1) + \mathbf{B}_1 \mathbf{v}(k-1) + \mathbf{B}_2 \mathbf{v}(k-2) \quad (4.16)$$

donde $\mathbf{y}(k) \in \mathbb{R}^3$ es el vector de respuestas en el instante k , y $\mathbf{v}(k) \in \mathbb{R}^2$ es el vector de variables manipuladas. Este proceso podría representar, por ejemplo, a un proceso de polimerización semi-batch con salidas como: y_1 : calor de reacción, y_2 : conversión, y_3 : peso molecular; y manipuladas como: v_1 : caudal de monómeros y v_2 : caudal de iniciador. Es importante notar que, el vector predictor \mathbf{x} (Ec. 4.16) debe incluir al menos una variable del proceso (e.g.: calor de reacción, temperatura, densidad, etc.) que permita descomponer \mathbb{R}^m en S_{MX} y S_{RX} , para poder discriminar fallas en sensores respecto a cambios de correlación entre variables manipuladas y las del proceso.

El modelo PLSR de este proceso ya fue calibrado en el Cap. 3. Sin embargo, la composición del vector predictor $\mathbf{x}(k)$ difiere respecto a la empleada en el Cap. 3 para monitorear el mismo proceso pero con todas sus respuestas medibles en línea. El vector $\mathbf{x}(k)$ utilizado en esta aplicación (Ec. 4.16) no posee las variables $y_2(k-1)$ e $y_3(k-1)$, por lo tanto, se excluyen los renglones 2 y 3 de la matriz \mathbf{P} (ver Cap. 3) a fin de obtener un modelo PLSR acorde con la Ec. (4.16). El límite de control $\delta_{\mathbf{x},\alpha}^2$ se obtuvo recolectando nuevamente el $SPE_{\mathbf{x}}$ para este nuevo modelo. Luego, a partir de los límites de control τ_{α}^2 y $\delta_{\mathbf{x},\alpha}^2$, y el modelo PLSR, se obtuvo Φ (Ec. 4.3) y su respectivo límite de control global I_{α} (ver Cap. 3, Anexo 3.B).

Se simularon dos anomalías para evaluar el desempeño de la técnica de monitoreo inferencial propuesta. La primera es un cambio excesivo de operación (anormal), dado por un desplazamiento puntual significativo de la trayectoria manipulada esperada, el cual se simuló adicionando $\Delta\mathbf{v} = [4 \ 0]'$ a $\mathbf{v}(k-1)$ en $k = 7$. La segunda anomalía es una falla espuria en el sensor de y_1 , simulada con un desplazamiento igual a -4 de y_1 en $k=15$.

La Fig. 4.4 muestra la evolución temporal de $I_C(\mathbf{x})$ (Ec. 4.3) y de sus contribuciones $cI_{MX}(x_i)$ y $cI_{RX}(x_i)$ (Ec. 4.4), donde es posible detectar y clasificar el tipo de anomalía simulada sobre la base de la información dada (ver Cap. 3). En las Fig. 4.4b y 4.4c se identifican claramente las variables responsables o defectuosas a partir de las mayores contribuciones positivas a un estadístico componente alertado en una muestra k . Además se observa que I_C está próximo a disparar la condición de alarma (ver Fig. 4.4a).

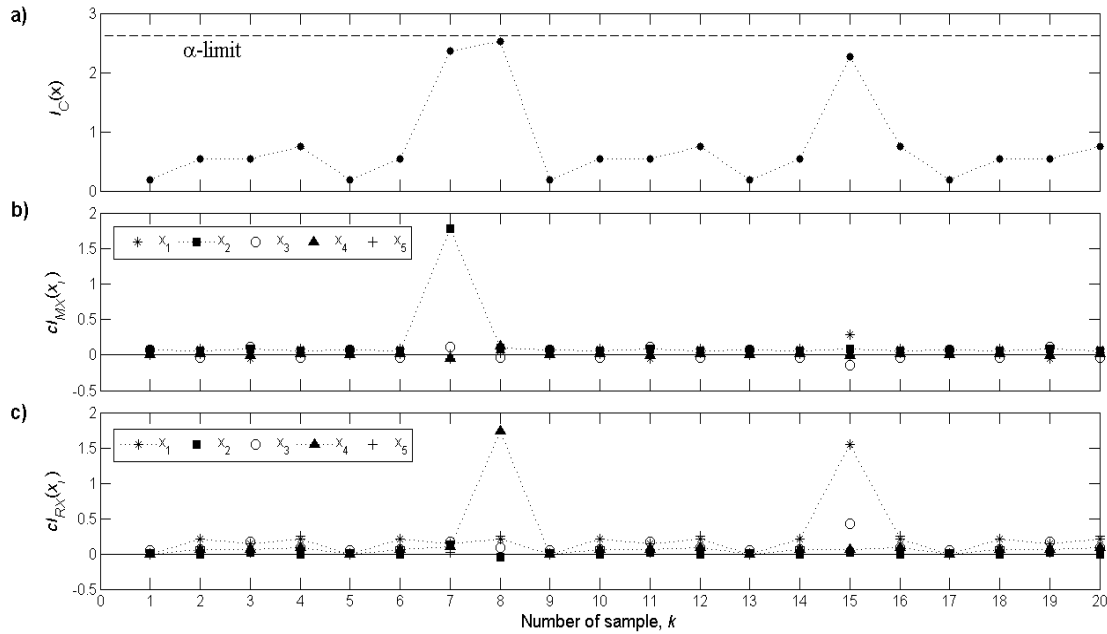


Figura 4.4: Evolución temporal de I_C , y de sus contribuciones $cI_{MX}(x_i)$ y $cI_{RX}(x_i)$.

En particular, el alejamiento en $k=7$ de la trayectoria esperada de las manipuladas se detecta e identifica correctamente (Fig. 4.4a-b). Sin embargo, la Fig. 4.4c denuncia en $k=8$ una falla en el sensor x_4 , es decir en $v_1(k-2)$, la cual no fue simulada. Esta alarma no se debe tener en cuenta porque la variable $v_1(k-2)$ en $k=8$ toma el valor de $v_1(k-1)$ en $k=7$, trasladando el desplazamiento anormal ingresado. Por lo tanto, luego de finalizar un cambio de operación anormal siempre existirá su sombra en los $cI_{RX}(x_i)$, dado que el valor anormal retardado $v_1(k-2)$ romperá su correlación temporal con el valor normal actual $v_1(k-1)$ perteneciente a la trayectoria esperada. La acción correctiva sobre el subespacio S_{MX} $d\hat{\mathbf{x}}_{ac} = \mathbf{P}dt_{ac}$, se adiciona en $k=8$, y se calcula utilizando cualquier regla de optimización.

La falla de sensor simulada en $k=15$ presenta la mayor contribución en $cI_{RX}(x_i)$, por tanto se detecta e identifica correctamente (ver Fig. 4.4a y 4.4c). Al valor registrado de $y_1(15)$ equivalente a $x_1(15)$, se resta su reconstrucción (Ec. 4.15) para estimar el sesgo, resultando prácticamente igual al simulado.

A continuación, se construye la carta de control inferencial de calidad propuesta a fin de comparar con la técnica anterior, la cual no considera especificaciones. Los límites de especificación inferior y superior de las tres variables respuestas son: y_1 : [-2.5, 2.5], y_2 : [-1.2, 1.2], y_3 : [-1.8, 1.8]. A partir de estos intervalos se obtuvieron los vectores vértices $\mathbf{y}^{(i)}$ ($i=1..8$) del cubo de especificación, donde el superíndice (i) indica el número del vértice.

Proyectando estos vértices sobre el plano latente a través de: $[t_1^{(i)}, t_2^{(i)}]' = \mathbf{t}^{(i)} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{S}'\mathbf{y}^{(i)}$ (ver Ec. 3.14a y 3.14b del Cap. 3), se extraen los conjuntos: $\{t_1^{(i)}\}_{i=1..8}$ y $\{t_2^{(i)}\}_{i=1..8}$. A continuación, se determinan los límites inferior y superior de las especificaciones proyectadas sobre S_{MX} como:

$$\begin{aligned} LL_1 &= \min_{i=1..8}(t_1^{(i)}), & UL_1 &= \max_{i=1..8}(t_1^{(i)}), \\ LL_2 &= \min_{i=1..8}(t_2^{(i)}), & UL_2 &= \max_{i=1..8}(t_2^{(i)}), \end{aligned} \tag{4.18}$$

A partir de estos límites de especificación en el plano (t_1, t_2) (Ec. 4.18) se obtuvo el valor del contorno $K^2 = 2.45$ (Ec. 4.6), el cual resulta inferior al límite de confianza $\tau_\alpha^2 = 13.33$ respectivo, resultando un índice de capacidad multivariada menor a 1 ($MC_p = 0.079$).

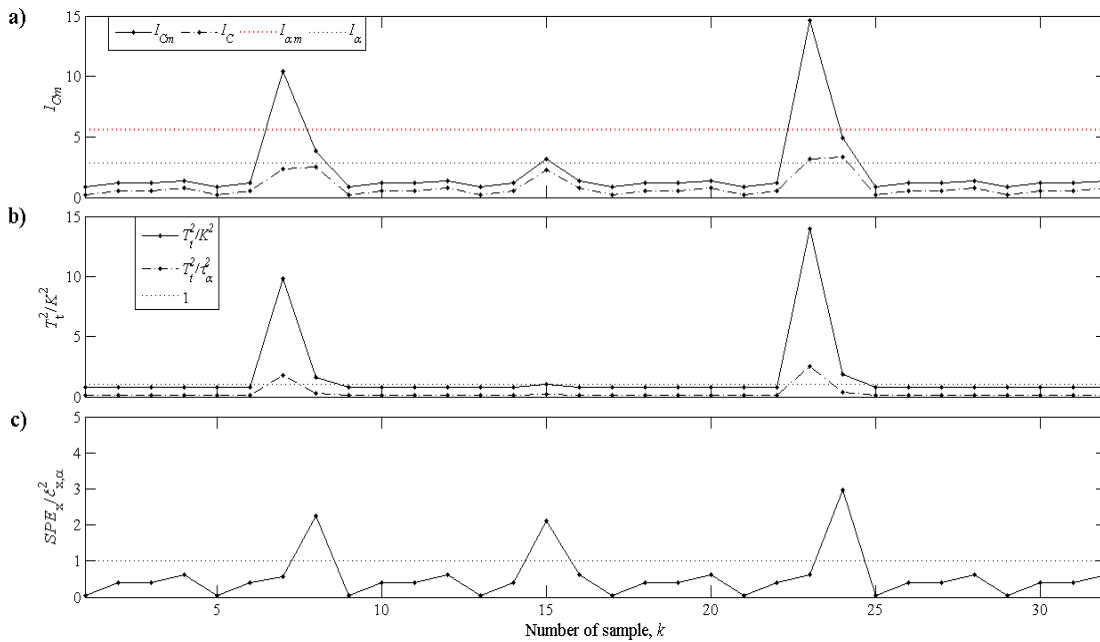


Figura 4.5: Evolución temporal del índice modificado I_{Cm} y de sus estadísticos componentes durante una falla de sensor y dos cambios excesivos de operación que traspasan las especificaciones de calidad. Para comparación, se muestra también la evolución del I_C y del estadístico componente T_t^2/τ_α^2 .

La Fig. 4.5 muestra el índice combinado modificado (Fig. 4.5a) y sus estadísticos componentes (Fig. 4.5b y 4.5c) durante las mismas anomalías simuladas anteriormente (ver Fig. 4.5), más otro cambio excesivo de operación, adicionando $\Delta\mathbf{v} = [5 \ 0]'$ a $\mathbf{v}(k-1)$ en $k=23$. Los dos cambios de operación implican puntos fuera de especificación. En particular,

los valores de las respuestas en estos dos instantes son: $\mathbf{y}(7) = [3.81, 1.03, -3.90]'$ e $\mathbf{y}(23) = [4.24, 1.08, -4.76]'$, traspasando dos de las tres tolerancias. Por lo tanto, la técnica de monitoreo inferencial de calidad detecta puntos fuera de especificación confiablemente (ver Fig. 4.5) respecto a la técnica anterior (ver Fig. 4.4). El límite de control modificado $I_{\alpha m}$ es mayor que el límite I_{α} porque el contorno K^2 está incluido en el contorno τ_{α}^2 (ver Fig. 4.5a).

4.3.2 Monitoreo inferencial de un proceso SBR industrial

La planta industrial continua investigada involucra la producción de caucho SBR grado 1502 en un tren de siete reactores agitados continuos (CSTRs) idénticos, y fue descrita en la Sección 2.1. La Fig. 4.6 muestra una representación esquemática del proceso investigado, indicando los caudales de reactivos, los calores de reacción instantáneos medidos en línea y las variables de calidad final consideradas en el último reactor del tren ($r = 7$), las cuales están sujetas a especificaciones (ver Tabla 2.1 del Cap. 2).

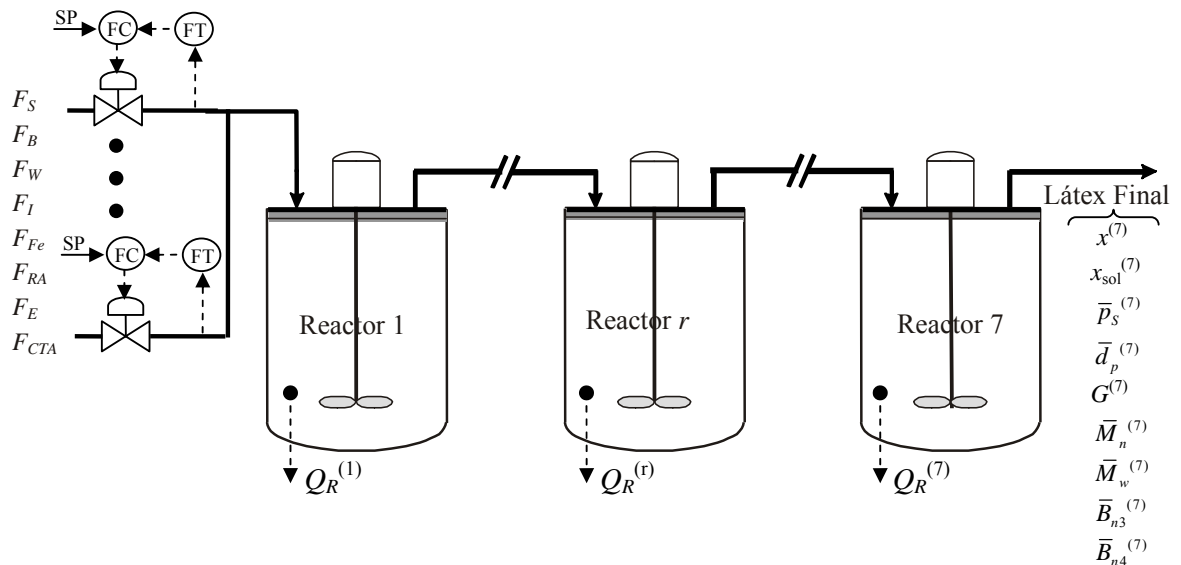


Figura 4.6: Representación esquemática del tren de reactores investigado.

Los caudales molares de alimentación de reactivos, dados por $\mathbf{f} = [F_S \ F_B \ F_W \ F_I \ F_{Fe} \ F_{RA} \ F_E \ F_{CTA}]' \in \mathbb{R}^8$, representan las principales entradas al proceso. Sin embargo, los caudales reales que ingresan al primer reactor pueden ser ligeramente diferentes debido a cambios desconocidos en las purzas de los reactivos \mathbf{f}_d (perturbación). El vector $\mathbf{q} = [Q_R^{(1)} \ \dots \ Q_R^{(7)}]' \in \mathbb{R}^7$ representa los calores de reacción instantáneos generados

por cada reactor del tren. Las mediciones de \mathbf{f} y \mathbf{q} , podrían estar influenciadas por errores sistemáticos y aleatorios (ver Fig. 2.1a del Cap. 2). Además, trazas indeseables de oxígeno (F_{O_2}) que ingresan en los reactores e intercambio calórico con el entorno (Q_{EX}) colaboran para incrementar las fuentes de error que afectan la información disponible en línea. Las principales variables de respuesta consideradas son nueve propiedades de calidad del polímero por reactor. Por lo tanto, la respuesta multivariada ($\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{63}$) está dada por:

$$\mathbf{y} = [\mathbf{y}^{(1)} \ \mathbf{y}^{(2)} \ \mathbf{y}^{(3)} \ \mathbf{y}^{(4)} \ \mathbf{y}^{(5)} \ \mathbf{y}^{(6)} \ \mathbf{y}^{(7)}] \quad (4.18)$$

donde

$$\mathbf{y}^{(r)} = [x^{(r)} \ x_{sol}^{(r)} \ \bar{p}_s^{(r)} \ \bar{d}_p^{(r)} \ G^{(r)} \ \bar{M}_w^{(r)} \ \bar{M}_n^{(r)} \ \bar{B}_{n_3}^{(r)} \ \bar{B}_{n_4}^{(r)}], \quad r = 1, 2, \dots, 7 \quad (4.19)$$

Dado que el sistema se mantiene casi permanentemente en un estado cuasi-estacionario (ver Sección 2.1), se optó por utilizar un modelo de regresión estático. El modelo de regresión \mathbf{x} - \mathbf{y} inicial está formado por el vector de respuestas \mathbf{y} según la Ec. (4.18) y el vector predictor \mathbf{x} compuesto por $\mathbf{x} = [\mathbf{f}' \ \mathbf{q}']' \in \mathbb{R}^{15}$.

Se considera ahora el uso de un modelo de polimerización detallado del proceso (FPM) para la calibración y evaluación de los métodos estadísticos estudiados (ver Cap. 2). Las variables respuestas del modelo de regresión PLSR no son medibles en línea, y por lo tanto, se desarrolló una aplicación de la técnica inferencial propuesta, la cual se calibrará en base a simulaciones estacionarias del FPM, para diferentes condiciones de entrada. En la Fig. 4.1a del Cap. 2 se describen las posibles perturbaciones que pueden ingresar al proceso industrial, y las diferentes fuentes de error que pueden afectar la información entregada a un sistema de supervisión y al sensor algorítmico desarrollado en el Cap. 2. Si el sistema de supervisión inferencial propuesto no detecta anomalías o perturbaciones, las predicciones del sensor algorítmico se consideran confiables.

4.3.2.1 Recolección del conjunto de datos bajo control

Las mediciones de los caudales molares y calores de reacción pueden ser afectadas por errores sistemáticos y aleatorios (ver \mathbf{f}_s , \mathbf{f}_e , \mathbf{q}_s , y \mathbf{q}_e , en la Fig. 2.1a del Cap. 2). Los caudales son variables manipuladas en forma independiente pero las tres variables de iniciación, F_I , F_{Fe} y F_{RA} , se fijan manteniendo relaciones molares de 48% y 169% de F_{Fe} y F_{RA} respecto a F_I , respectivamente. El vector de caudales molares de alimentación \mathbf{f} presenta una distribución normal multivariada, en torno a su punto de operación nominal, inducida por la propagación de errores en la medición de caudales volumétricos y/o

concentraciones/purezas. Para simular dicha distribución se adoptaron errores de medición estándar, $100\sigma_i/\bar{F}_i$, de 4% en los caudales molares y de 5% en los calores de reacción. Por lo tanto, las distribuciones marginales esperadas poseerán desvíos iguales a $\sigma_i = (0.04\bar{F}_i)^2$ para los caudales molares ($i=1..8$) y $\sigma_i = (0.05\bar{Q}_i)^2$ para los calores de reacción ($i=9..15$).

Para obtener datos en el rango de funcionamiento normal en torno al punto nominal se simuló el FPM del proceso SBR con diferentes caudales de alimentación \mathbf{f} . Para sintetizar cada combinación de caudales \mathbf{f}_i se realizó un diseño de experimento de tipo “espacio lleno” utilizando muestreo del hipercono latino con distribución normal (Godoy et al., 2011). Para cada \mathbf{f}_i se simuló el FPM y se recolectaron las variables de proceso y de calidad en EE creando los pares entrada-salida $(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$ e incorporando en \mathbf{x}_i los calores de reacción \mathbf{q}_i en EE. Posteriormente se analizaron los \mathbf{x}_i para eliminar “outliers” utilizando un identificador de Hampel con umbral igual a 3 (Pearson, 2001). En consecuencia, se pudieron obtener estimaciones robustas de medias, varianzas y covarianzas utilizando un conjunto de datos “bajo control” y libre de outliers. Este diseño experimental produce una estimulación completa del sistema FPM sobre todo el rango de operación normal de interés, ocasionando una distribución marginal de cada F_i perfectamente gaussiana.

4.3.2.2 Escenarios de fallas

A efectos de validar la técnica de monitoreo propuesta se generaron cinco escenarios de perturbaciones y treinta escenarios de fallas en sensores (offset y derivas). La Tabla 4.1 muestra el tipo de anomalía considerada y su magnitud expresada como desvío fraccional porcentual, $e_i = 100\Delta x_i/\bar{x}_i$. Las fallas de sensores simuladas fueron de tipo escalón (offset) y de tipo rampa (deriva), y las perturbaciones fueron sólo de tipo rampa (ver Tabla 4.1). La reacción del CTA no produce un calor de reacción significativo, por lo tanto, su perturbación no es observable a través de las mediciones disponibles. En consecuencia, sólo se consideran perturbaciones en las composiciones de estireno, butadieno y cupla redox (iniciador redox, sal ferrosa y agente reductor), las cuales originan modificaciones importantes en los calores de reacción (ver Fig. 4.6 y Tabla 4.1). Cada escenario de falla se simula en el FPM para evaluar el desempeño del sistema diagnóstico en cada anomalía examinada. Se simuló el proceso SBR (FPM) durante 3000 min. (300 muestras) y cada perturbación comenzó en el minuto 1000. Además, se agregó ruido

blanco gaussiano a todas las variables medibles en \mathbf{x} (ver Fig. 2.1a del Cap. 2) para simular el error de medición.

Tabla 4.1: Escenarios de fallas simulados

Caso	Tipo	Variable afectada	Patrón ^{a)}
1..15	Falla de Sensor	$\mathbf{f}_i, i=1..8$ $\mathbf{q}_i, i=1..7$	Escalón: $e_i: 0 \rightarrow \pm 13\% \quad i = 1..15$
16..30	Falla de Sensor	$\mathbf{f}_i, i=1..8$ $\mathbf{q}_i, i=1..7$	Rampa: $dx_i/dt = \pm x_i^{ini} 2.510^{-4}$ ^{a)} $i = 1..15 \quad e_{max, i} = \pm 13\%$
31..35	Perturbación	$\mathbf{fd}_i, i=\{1,2,4,5,6\}$ $F_S F_B F_I F_{FE} F_{RA}$	Rampa: $d\mathbf{fd}_i/dt = \pm \mathbf{fd}_i^{ini} 2.510^{-4}$ $i=\{1,2,4,5,6\} \quad e_{max, \mathbf{fd}_i} = \pm 5\%$ $e_{max, \mathbf{fd}_5} = \pm 10\%$

^{a)} el supra-índice ⁱⁿⁱ denota al valor inicial (antes del cambio).

4.3.2.3 Selección del orden del modelo PLSR

A partir del conjunto de datos recolectados se pretende ajustar un modelo PLSR. Los resultados del algoritmo NIPALS se muestran en la Fig. 4.7. De acuerdo con el criterio ajustado de Wold $R(a+1)$, un modelo PLSR con 6 componentes ofrece la mejor opción (ver Fig. 4.7b). Sin embargo, la Fig. 4.7a muestra una separación entre las tendencias acumuladas de $\%R^2_X(a)$ y $\%R^2_Y(a)$ (con $\%R^2_X(a)$ menor a $\%R^2_Y(a)$ desde $a=1$ hasta $a=8$), señalando la existencia de varianza de entrada no utilizada para explicar las respuestas. Esto indica la presencia de variables predictoras con efecto de interferencias, las cuales por no estar correlacionadas con los datos no pueden ser eficazmente modeladas. La Fig. 4.7c muestra que el séptimo componente se comporta como una interferencia ($\text{var}(t_a)$ alto y b_a bajo), es decir, no tiene ninguna influencia predictiva. Las Figs. 4.7a, 4.7b, 4.7c y 4.7d muestran una tendencia consistente con el incremento del número de componentes hasta el sexto componente, en $a=7$ se produce un incremento de $\text{var}(t_a)$ junto con un decremento de b_a (Fig. 4.7c), $R(a+1)$ cruza el umbral en $a+1=7$ y por otro lado, decrece θ_{min} en $a=7$. Todos estos criterios informan la existencia de un componente interferencia. Además, una vez que $R(a+1)$ cruza el umbral por primera vez (Fig. 4.7b), θ_{min} se reduce significativamente (Fig. 4.7c) correspondiéndose con un sobreentrenamiento. Con seis componentes el ángulo mínimo entre los hiperplanos S_{MX} y S_{RX} es $\theta=85^\circ$ (ver Fig. 4.7d en $a=6$) y alcanza el mínimo en $a=8$. En resumen, los tres criterios (Figs. 4.7b - 4.7d) coinciden en $A = 6$, lo cual demuestra la fiabilidad del nuevo criterio $\theta(a)$ para guiar la selección del orden interno de un modelo inferencial. La determinación apropiada de A

permite un buen ajuste del modelo PLSR al proceso estudiado, lo cual implica que las fallas de sensores se manifiesten principalmente en S_{RX} (ver Cap. 3). Contrario a las simulaciones efectuadas por Liu et al. (2010) donde las fallas de sensores se manifestaban con altos valores de T_t^2 .

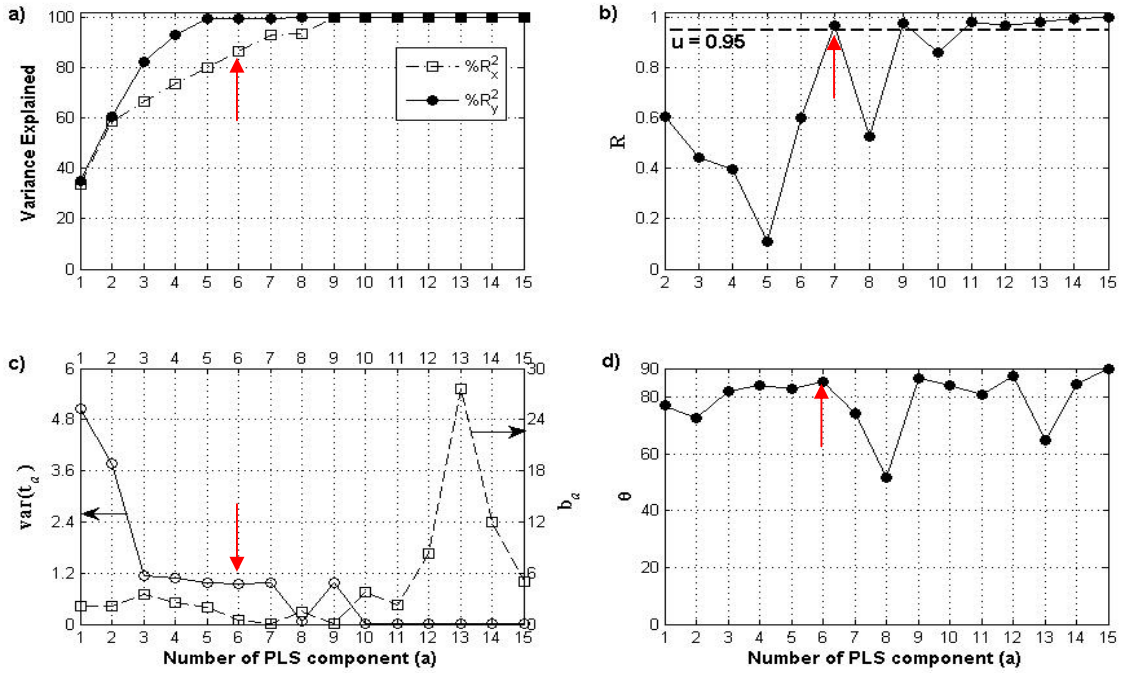


Figura 4.7: Determinación del orden del modelo interno A (datos sin ruido).

a) Pareto de $\%R_X^2(a)$ y $\%R_Y^2(a)$. b) Tasa de cambio de la varianza promedio del error residual frente al número de componentes utilizados. c) varianza y coeficiente de regresión de cada variable latente. d) ángulo mínimo θ_{min} frente al número de componentes utilizados.

En el Cap. 2 se mostró que los caudales del sistema de iniciación (F_I , F_{Fe} , y F_{RA}) poseen a una baja influencia predictiva sobre las variables respuesta, con valores VIP muy bajos. Por lo tanto, no se incluyen estas variables en el vector predictor óptimo del modelo de regresión final, el cual está dado por $\mathbf{x} = [\mathbf{f}'_r \ \mathbf{q}'^T] \in \mathbb{R}^{12}$ con $\mathbf{f}_r = [F_S \ F_B \ F_W \ F_E \ F_{CTA}] \in \mathbb{R}^5$ (ver Cap. 2). Los tres caudales excluidos se deben monitorear por separado. La determinación del orden interno del nuevo modelo de regresión resulta igual a 8 y su bondad de ajuste y verificación pos-modelado son como en Godoy et al. (2011). El modelo PLSR revisado no presenta diferencia significativa con el perteneciente al sensor algorítmico del Cap. 2. Sin embargo, la principal diferencia en los datos de calibración son

los desvíos de las variables predictoras, en particular los desvíos de F_I , F_{Fe} , y F_{RA} ; los cuales serán utilizados en cartas de control univariadas. Además, a partir de los errores de ajuste PLSR se estimaron los límites de control τ_α^2 y $\delta_{x,\alpha}^2$, para poder obtener Φ (Ec. 4.3) y su límite de control global I_α (ver Cap. 3, Anexo 3.B).

4.3.2.4 Sistema de diagnóstico temprano

Las variables x_4 , x_5 y x_6 se excluyeron del monitoreo multivariado basado en PLSR y por tal motivo se podrían utilizar cartas de Shewhart individuales para supervisarlas. Por otro lado, dado que la zona de funcionamiento normal del proceso SBR en torno a un punto de operación comprende una pequeña zona, se propone monitorear todas las variables registrables en línea utilizando una carta de control con centro móvil, la cual se calibró con simulaciones y se describe a continuación. Dada una nueva medición \mathbf{x} en unidades originales se la estandariza mediante: $\mathbf{x}^* = \mathbf{D}_x^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})$, donde $\bar{\mathbf{x}}$ y $\mathbf{D}_x = \text{diag}(\hat{\sigma}_1 \dots \hat{\sigma}_{15})$ son las medias y las desviaciones poblacionales, respectivamente. Este vector $\bar{\mathbf{x}}$ puede cambiar con el tiempo para desplazar el objetivo/target nominal cuando el proceso SBR cambia de punto de operación. Después de un cambio de operación se puede reemplazar $\bar{\mathbf{x}}$ por un nuevo vector objetivo, lo cual es posible dado que la relación lineal entre predictores y respuestas predomina en pseudo-estacionario (Godoy et al., 2011). Un cambio de operación en los caudales de alimentación de reactivos \mathbf{f} inicia una actualización automática del vector de medias $\bar{\mathbf{x}} = [\bar{\mathbf{f}} \bar{\mathbf{q}}]$ mediante un filtro de mediana móvil con un tamaño de ventana deslizante de 100 minutos, el cual finaliza una vez transcurridos 1000 min. El filtro de mediana reemplaza el valor actual de $\bar{\mathbf{x}}$ con la mediana de todas las lecturas dentro de la ventana de tiempo. En consecuencia, las cartas de control de Shewhart individuales descriptas y el sistema diagnóstico basado en PLSR, se desplazan hacia un nuevo punto de operación. De esta manera, la técnica de monitoreo propuesta para esta aplicación considera todos los sensores y el funcionamiento del proceso pero sin contrastar con las especificaciones.

Las cartas de control de las mediciones individuales (x_i , $i=1..8$) para detección de fallas en sensores de caudales molares poseen una sensibilidad a la detección dada por: $\delta x_i \geq 3\sigma_i = 0.12\bar{x}_i$. El índice I_C y las cartas de Shewhart se utilizan para detectar una situación anormal en la operación del tren del reactor, y la identificación de perturbaciones se utiliza para diagnosticar anormalidades en forma temprana. La Fig. 4.8 muestra la

evolución temporal de las variables medidas en sus unidades originales durante una falla tipo escalón, un cambio de operación y una falla tipo rampa. La Fig. 4.9 muestra las cartas de Shewhart individuales monitoreando los caudales, en donde se detectan sólo las fallas simuladas mientras que el cambio de operación no produce falsa alarma.

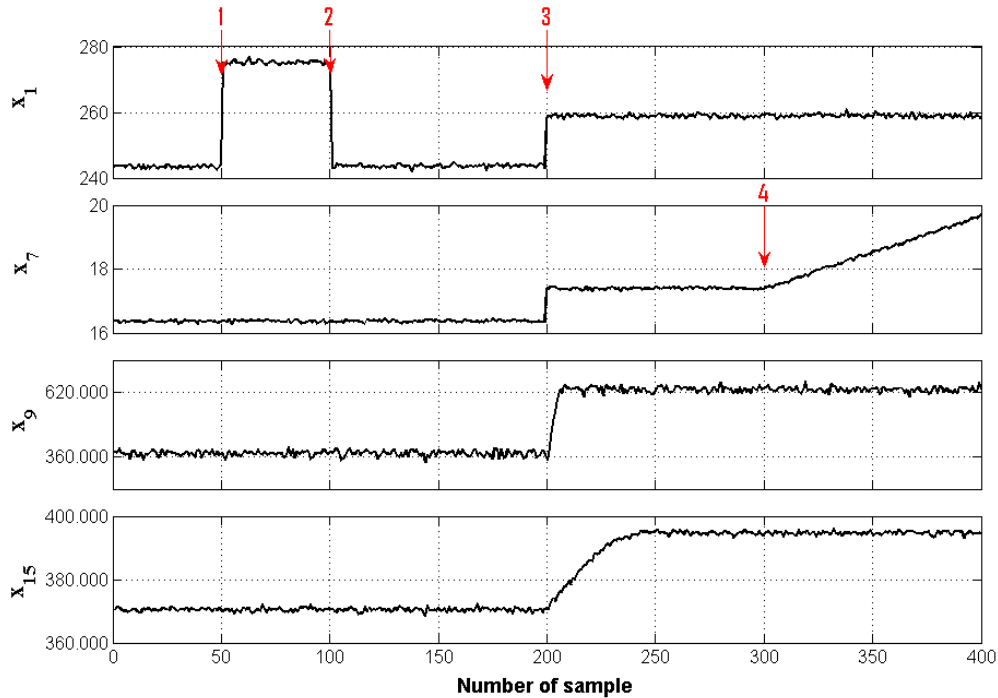


Figura 4.8: Evolución temporal de algunas variables registradas durante: falla en el sensor $F_S(x_1)$ tipo escalón (corrimiento) entre 1 y 2, manifestaciones en $Q_R^{(1)}(x_9)$ y $Q_R^{(7)}(x_{15})$ del cambio de operación efectuado en 2, y falla en el sensor $F_E(x_7)$ tipo rampa (deriva) iniciada en 4.

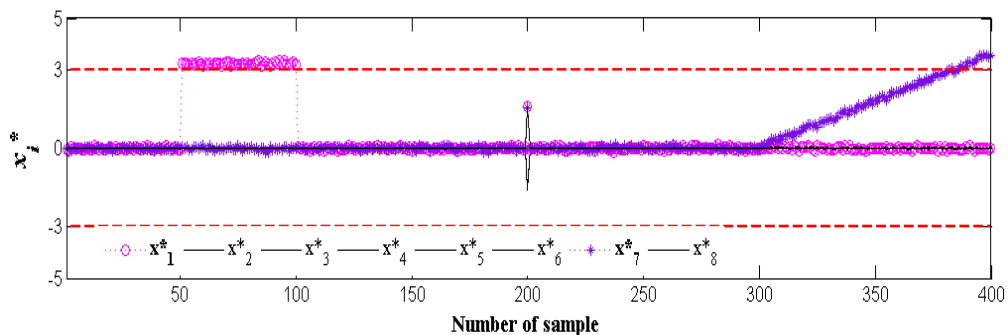


Figura 4.9: Monitoreo de caudales de alimentación (variables independientes) utilizando cartas individuales de Shewhart. Se detectan fallas solo en los sensores de $x_1(F_S)$ y de $x_7(F_E)$. El cambio de operación en la muestra 200 no produce una alarma.

4.3.2.4.1 Identificación de perturbaciones en los reactivos alimentados

Las perturbaciones afectan a varias variables medidas del proceso, modificando los calores de reacción q (ver Fig. 4.6). Las anomalías analizadas son cambios en las purzas de los reactivos (Tabla 4.1, casos 31 a 35). Estas últimas anomalías son defectos en las mediciones de caudales molares de alimentación. Utilizando el FPM en paralelo con el modelo PLSR se obtiene la biblioteca de perturbaciones, para lo cual se simulan los casos 31 a 35 (Tabla 4.1) y se registran sus respectivos vectores directrices en estado estacionario.

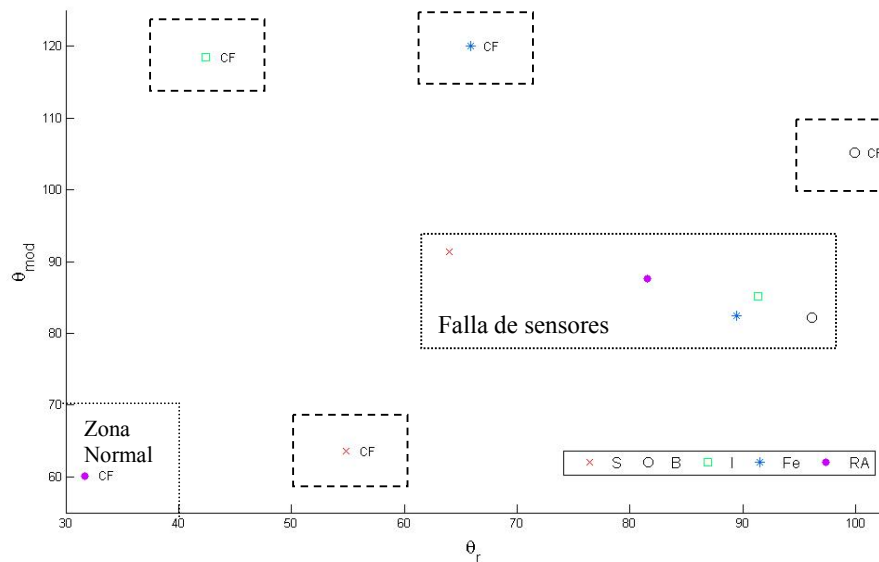


Figura 4.10: Análisis de especificidad angular para aislamiento de perturbaciones, las cuales se señalan con CF (fallas complejas).

La dirección de cada evento en el espacio se puede representar con la posición angular del vector respecto a ambos hiperplanos (S_{MX} y S_{RX}), es decir, mediante el par (θ_{mod}, θ_r) . La Fig. 4.10 presenta los patrones angulares de las perturbaciones de 5% en S, B, I y RA, y 10% en Fe, todas en el rango de $0.2 < SNR_{falla} < 0.4$. Como se utilizaron los mismos umbrales en ambos subespacios, la vecindad de aceptación es cuadrada (Fig. 4.10). Las fallas en sensores (tipo offset) poseen un $\theta_{mod} \approx 90^\circ$ (Fig. 4.10), debido a que sólo una variable se aleja significativamente del hiperplano S_{MX} . Las perturbaciones se alejan aproximadamente $\pm 30^\circ$ de S_{RX} independientemente del sentido (+ o -) de x respecto S_{RX} (Fig. 4.10). La Fig. 4.10 muestra que la biblioteca de perturbaciones posee ubicaciones angulares (θ_{mod}, θ_r) diferentes para cada perturbación, sin solapar sus conos de aceptación

(cuadrados punteados en el plano $(\theta_{\text{mod}}, \theta_r)$), y además no se solapan con la zona normal, ni con la zona de fallas de sensores. Por lo tanto, el sistema de aislación es específico, existiendo una gran separación entre las zonas de aceptación. Dado que se incluye RA en exceso en la receta para un mejor desempeño transitorio del proceso de iniciación, sólo perturbaciones mayores al 30% del nominal afectarían el desempeño estacionario, por lo cual, no es importante detectarla. La Fig. 4.10 muestra que el patrón angular de una perturbación de 5% de RA se halla dentro de la zona normal.

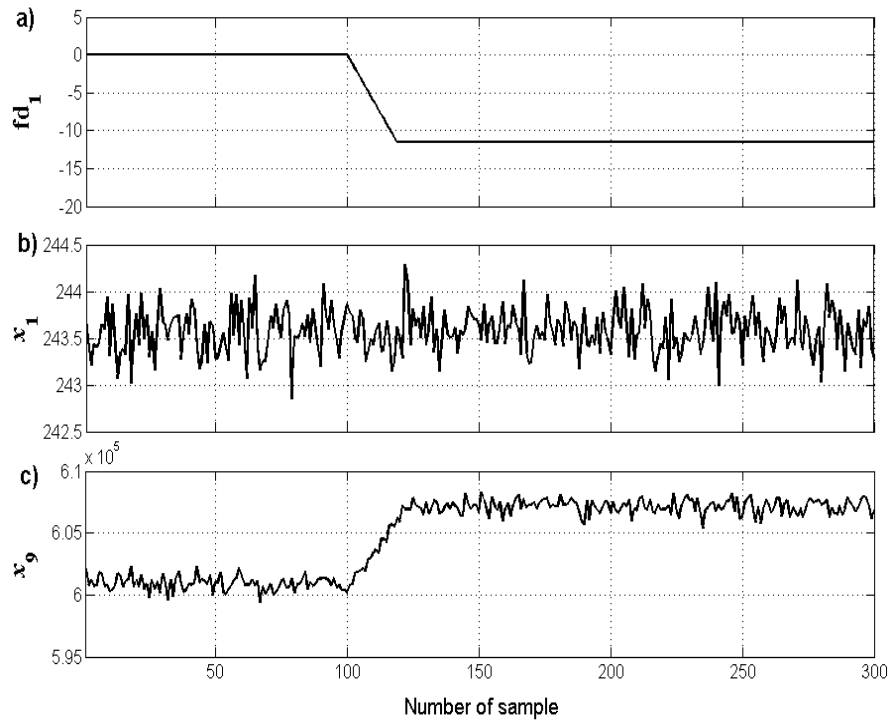


Figura 4.11: a) Perturbación en S, fd_1 . b) Registro del caudal de alimentación de S $F_S(x_1)$. c) Registro del calor de reacción en el reactor 1 $Q_R^{(1)}(x_9)$.

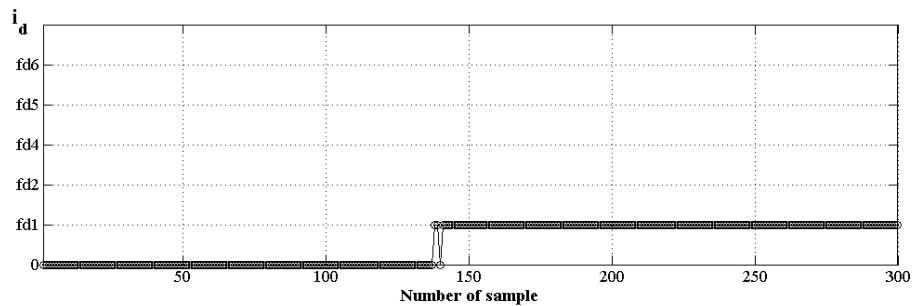


Figura 4.12: Evolución temporal del índice de aislación de perturbación i_d , detectando una perturbación en S, fd_1 , a partir de la muestra 140 aproximadamente.

La Fig. 4.11 muestra la simulación de una perturbación tipo rampa en F_S no advertida por la lectura asociada x_1 (F_S) pero sí afectando los calores de reacción \mathbf{q} , como por ejemplo la medición de $Q_R^{(1)}$ (x_9). La Fig. 4.12 muestra el índice de aislación de perturbación detectando específicamente la perturbación simulada una vez que el proceso se estabilizo. El método de diagnóstico propuesto detecta y aísla correctamente la perturbación simulada (Fig. 4.12). Aunque no se muestran, todos los casos simulados (Tabla 4.1) se han detectado con éxito. El método propuesto ha demostrado ser muy sensible para detectar e identificar adecuadamente las perturbaciones simuladas.

4.4 Conclusiones

Se presentó una técnica inferencial de monitoreo multivariado de calidad que considera todas las especificaciones en un único índice combinado inferencial. La misma se basa en descomposición PLSR y es capaz de detectar una anomalía, clasificar su tipo e identificar las variables responsables. Para el caso en que se identifique una falla de sensor (anomalía localizada) se provee una reconstrucción de la lectura defectuosa a fin de mitigar su efecto sobre la predicción proporcionando inferencias más confiables. Este nuevo índice informa el estado del proceso y si las predicciones son confiables, y además permite incluir una estrategia de control inferencial para reducir el funcionamiento fuera de especificación. Además, se presentó un nuevo método de identificación de perturbaciones. La clasificación del tipo de anomalía y la identificación de variables responsables optimiza la reconstrucción de lecturas defectuosas.

Se presentó un límite de control modificado por la zona de especificación el cual forma parte del índice combinado propuesto. Este límite es la primera propuesta para extender el concepto del límite de control modificado univariado al caso multivariado. El índice combinado inferencial tiene una derivación formal a diferencia del propuesto empíricamente por Liu et al. (2010) y permite monitorear en forma inferencial la calidad del proceso en relación a las especificaciones y no en relación a las variabilidades de un patrón histórico.

A través de un ejemplo de simulación ad-hoc se demostró la efectividad de la técnica. Luego, se aplicó al simulador del proceso SBR industrial, en donde además se identificó tempranamente el tipo de perturbación en las alimentaciones (caudales molares de reactivos), como por ejemplo cambios en los niveles de pureza. Esta identificación de perturbaciones en las alimentaciones se desarrolló en base a una caracterización PLSR de

las entradas y permite planificar acciones preventivas (antes que la producción salga de especificación). El método propuesto sobre el proceso SBR industrial estudiado, demostró ser adecuado para fallas simples tipo escalón (offset) y rampa (deriva), y para poder aislar una perturbación en forma efectiva de un conjunto preestablecido. Todos los escenarios simulados fueron exitosamente detectados e identificados. Por lo tanto, los modelos PLSR pueden exitosamente ser incluidos en una técnica de control supervisora del proceso SBR, especialmente cuando se implementa decisiones de control con poca frecuencia.

Se mostró también la utilidad de θ_{min} en la selección del orden del modelo interno, el cual está en concordancia con los índices ya utilizados (ver Cap. 2 y 3) y describe la bondad de la descomposición PLSR para separar el espacio predictor del residual. El parámetro θ_{min} sirve para identificar la presencia de variables predictoras con efecto de interferencia en el modelo de regresión \mathbf{x} - y estudiado.

Apéndice 4.A Confiabilidad del índice combinado frente a límites de confianza

Liu et al. (2010) presentaron una técnica de monitoreo inferencial basada en PLSR, quienes propusieron agregar límites de confianza a las predicciones de las respuestas para examinar la confiabilidad de las observaciones \mathbf{x} que ingresan al sistema de monitoreo inferencial. La incertidumbre de predicción por el modelo PLSR (soft-sensor) para nuevos datos es (Liu et al., 2010):

$$\begin{aligned} \text{var}(y_j - \hat{y}_j) &= \text{var}(y_j) + \text{var}(\hat{y}_j) \\ &= \sigma_j^2 \left[1 + \mathbf{x}' \mathbf{R} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{R}' \mathbf{x} / (N-1) \right] = \sigma_j^2 \left[1 + T_t^2 / (N-1) \right] = \hat{\sigma}_j^2 \end{aligned} \quad (4.A1)$$

donde σ_j^2 es la varianza de la respuesta y_j en el conjunto de datos de calibración (de N observaciones). En consecuencia, los intervalos de confianza $(1-\alpha)$ (CI) para la nueva predicción PLSR pueden ser establecidos como (Liu et al., 2010):

$$CI = \pm t_{\alpha/2, N-m} \hat{\sigma}_j^2, \quad (4.A2)$$

donde $t_{\alpha/2, N-m}$ es una distribución- t con $N-m$ grados de libertad. El modelo inferencial no estaría adaptado si las observaciones estuvieran fuera de estos intervalos de confianza.

La Ec. (4.A1) muestra que los CI dependen sólo del estadístico en S_{MX} , T_t^2 . Por el contrario, el índice I_C es una medida completa de variabilidad considerando ambos subespacios y con límite de control determinado por datos normales. Además, en un modelo PLSR bien ajustado, las fallas de sensores se manifiestan principalmente en S_{RX} . Por lo tanto, si el sistema de monitoreo estadístico propuesto (I_C) no detecta ninguna falla

de sensores o perturbación en el proceso (es decir, $I_C < I_\alpha$), las predicciones se consideran confiables. En consecuencia, se propone monitorear en línea sólo a I_C , y no agregar los CI , para examinar la confiabilidad de las nuevas observaciones. Si las mediciones \mathbf{x} se registran durante una anomalía del proceso (falla de sensor o perturbación) la predicción del sensor algorítmico (Ec. 4.1) sería errónea.

Capítulo 5

Comparación entre PCA y PLSR para el modelado y el monitoreo de procesos

Resumen

Los métodos PLSR y Análisis de Componentes Principales (PCA) proyectan los datos a estructuras latentes para poder modelar correlaciones entre las variables, y en particular PLSR considera además relaciones causales entre las variables. Sin embargo, es intuitivo esperar que si PCA y PLSR consideran las mismas variables, ambos métodos modelarán estructuras latentes equivalentes. Este capítulo presenta una comparación analítica y numérica entre ambos métodos frecuentemente utilizados para: modelar estructuras latentes, predecir variables respuesta y monitorear procesos. En primer lugar se describen propiedades geométricas adicionales de PLSR que permiten comprender mejor su relación con PCA, en particular, el efecto de la matriz de datos Y sobre la descomposición PLSR de la matriz de datos X . También se presentan similitudes y diferencias entre PLSR y PCA, lo cual aporta a esclarecer el estado del arte en torno a estos métodos. Particularmente se presenta una equivalencia entre ambos modelos latentes, entre ambos modelos predictivos, entre los estadísticos de detección de fallas y entre las técnicas diagnósticas. En consecuencia, dado un procedimiento definido para un método (PCA o PLSR) se puede derivar el equivalente en el otro método utilizando alguna de estas equivalencias. En particular, se define un nuevo factor de similitud basado en PCA y por medio de las equivalencias encontradas se deriva el correspondiente a PLSR. Luego, se evalúa el desempeño discriminante de los mismos, simulando diferentes condiciones en un proceso conocido.

5.1. Introducción

Los métodos PCA y PLSR permiten ajustar un modelo utilizando un conjunto de datos de identificación que podría haber estado originalmente mal condicionados. Muchos estudios realizados en los últimos años han puesto de manifiesto cómo estos métodos pueden ser utilizados con éxito para: el ajuste de modelos multivariados (Kiers y Smilde, 2007), el control de procesos batch (Flores-Cerrillo y MacGregor, 2005), el control de procesos sin las mediciones en línea de las variables de calidad (McAvoy, 2002; Godoy et

al., 2009; Godoy et al., 2010); el desarrollo de soft-sensors (Godoy et al., 2011a), la detección de fallas y anomalías en el proceso (Godoy et al., 2011b), el tratamiento de valores perdidos en el conjunto de datos (Nelson et al., 1996), el monitoreo del estado de un sistema MPC industrial basado en mediciones recolectadas (AlGhazzawi y Lennox, 2009), y el control predictivo basado en modelo de variables latentes (Golshan et al., 2010; Laurí et al, 2010).

Los métodos más utilizados como PCA (Yue y Qin, 2001) y Análisis de Componentes Independientes (ICA) (Lee et al., 2004) se basan sólo en modelos de correlación subyacentes, mientras que PLSR considera además las relaciones causales del proceso (Gang et al., 2010). El monitoreo de procesos que se realiza utilizando estos métodos ajusta un modelo de variables latentes y en base al mismo, define estadísticos de detección de fallas. Hoy, los sistemas de monitoreo basados en modelos latentes son las principales herramientas con claras posibilidades de aplicación industrial (Kourti, 2005), por lo tanto, resulta de interés comparar la nueva estrategia de monitoreo basada en PLSR propuesta en Cap. 3 con la estrategia más utilizada basada en PCA.

Estos métodos presentan variantes que se han estudiado durante décadas. Sin embargo, su aplicación al monitoreo de condición (o desempeño) de sistemas de control multivariable y al Control Predictivo basado en Modelo de Variables Latentes (LV-MPC) son temas de investigación reciente.

Solo ultimamente, se han realizado algunas aplicaciones de monitoreo de condición basadas en PCA o PLSR, recolectando mediciones directamente de la planta a través de sistemas de adquisición de datos. Una importante contribución en estos temas fue proporcionada por AlGhazzawi y Lennox (2009), en donde se investigó la habilidad de técnicas de control estadístico multivariado basadas en PCA y PLSR para supervisar sistemas MPC industriales, pero sin conocer formalmente la vinculación entre ambos métodos.

Por otro lado, la reciente estrategia LV-MPC implementa la identificación y el control en el espacio de variables latentes facilitando la identificación en el caso de datos correlacionados y ruidosos, y reduciendo la complejidad computacional, al resolver en el espacio latente (donde las variables aparecen desacopladas) la optimización sujeta a restricciones. Hasta el momento, sólo existen algunos pocos trabajos publicados de la metodología LV-MPC “guiada por los datos” (Flores-Cerrillo y MacGregor, 2005; MacGregor et al., 2009; Golshan et al., 2010; Laurí et al, 2010). El desarrollo de un modelo es, por lejos, el paso más crítico y que más tiempo consume en la implementación de un

MPC (Morari y Lee, 1999; Bars et al., 2006). La mayor ventaja de la identificación guiada por datos y basada en variables latentes (como PLSR y PCA), es su rápida aplicación industrial (Kourti, 2005). Básicamente, se han publicado dos estrategias LV-MPC, una basada en PCA (MacGregor et al., 2009) y otra en PLSR (Laurí et al., 2010), pero aún no se compararon sus desempeños. Por lo tanto, resulta de interés determinar el modelo latente con mejor predicción de trayectorias futuras, a fin de determinar cuál es la mejor estrategia LV-MPC. Por lo expuesto, es importante conocer en profundidad las analogías y diferencias que poseen los métodos PCA y PLSR antes de seguir investigando esta estrategia.

Este capítulo trata de resaltar analogías y diferencias entre PCA y PLSR en tres aspectos: modelo latente, modelo de predicción, y estadísticos para detección y diagnóstico de anomalías. Se muestra que sólo dependiendo de la selección del grupo de variables que intervienen, pueden existir diferencias genuinas entre ambos enfoques. Un posible uso de las analogías encontradas es la generalización de una variante de un método hacia el otro. Este capítulo utiliza una equivalencia entre PCA y PLSR para derivar un factor de similitud PLSR (entre dos conjuntos de datos) a partir de un factor de similitud PCA propuesto aquí. Estos factores cuantifican el grado relativo de semejanza entre diferentes conjuntos de datos. Recientemente se propuso un factor de similitud PLSR empírico (Gunther et al., 2008) a diferencia del propuesto aquí, el cual posee una derivación teórica.

El capítulo se organiza de la siguiente manera: en la Sección 5.2, para los dos métodos PLSR y PCA se resumen los conceptos de modelo latente, modelo de predicción, descomposición en proyecciones y estadísticos para detección de anomalías, a fin de facilitar la búsqueda de analogías entre estos. En particular, se describen propiedades geométricas de PLSR relacionadas a PCA. En la Sección 5.4 se describen las analogías y diferencias encontradas entre PLSR y PCA respecto al modelo latente, al modelo de predicción, y a los estadísticos para detección y diagnóstico de anomalías. Para una mejor comprensión, la Sección 5.4.4 presenta ejemplos de aplicación que permiten visualizar las analogías y diferencias discutidas. A continuación, en la Sección 5.5 se define un factor de similitud PCA y a partir del mismo se deriva un factor de similitud PLSR por medio de las equivalencias PCA-PLSR encontradas. Un ejemplo de aplicación muestra la habilidad del nuevo factor para discriminar cambios del proceso comparando sus conjuntos de datos. Finalmente, las conclusiones se presentan en la Sección 5.6.

5.2 Monitoreo de procesos basado en descomposición PLSR de (X, Y)

Dada una matriz predictor $\mathbf{X}=[\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N]'$ ($N \times m$), que consiste en N muestras con m variables por muestra, y una matriz respuesta $\mathbf{Y}=[\mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_N]'$ ($N \times p$), con p variables por muestra, el algoritmo PLSR-NIPALS (ver Tabla 3.1 del Cap. 3) provee un modelo externo y uno interno. El modelo externo descompone las matrices \mathbf{X} e \mathbf{Y} en observaciones de variables latentes y vectores peso como sigue:

$$\mathbf{X} = \mathbf{TP}' + \tilde{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{X}} + \tilde{\mathbf{X}}, \quad (5.1)$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{UQ}' + \tilde{\mathbf{Y}}_2 = \hat{\mathbf{Y}}^* + \tilde{\mathbf{Y}}_2, \quad (5.2)$$

donde $\mathbf{P}=[\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_A]$ y $\mathbf{Q}=[\mathbf{q}_1 \dots \mathbf{q}_A]$ poseen los vectores peso, y $\mathbf{T}=[\mathbf{t}_1 \dots \mathbf{t}_A]$ y $\mathbf{U}=[\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_A]$ los scores. Mientras que el modelo interno relaciona \mathbf{T} a \mathbf{U} como sigue:

$$\mathbf{U} = \mathbf{TB} + \tilde{\mathbf{U}}, \quad \mathbf{B} = \text{diag}(b_1 \dots b_A), \quad (5.3)$$

donde \mathbf{T} y \mathbf{U} son ortogonales por columna y \mathbf{B} sus coeficientes de regresión.

Para nuevas mediciones ordenadas en \mathbf{X} e \mathbf{Y} , las predicciones directas de \mathbf{T} y \mathbf{U} se obtienen como:

$$\mathbf{T} = \mathbf{XR}, \quad \mathbf{R} = [\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_A], \quad (5.4)$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{YS}, \quad \mathbf{S} = [\mathbf{s}_1 \dots \mathbf{s}_A], \quad (5.5)$$

donde $\mathbf{R} = (\mathbf{P}')^-$ y $\mathbf{S} = (\mathbf{Q}')^-$ son pseudo-inversas (i.e., $\mathbf{P}'\mathbf{R} = \mathbf{I}$ y $\mathbf{Q}'\mathbf{S} = \mathbf{I}$). Combinando el modelo interno (Ec. 5.3) con el externo (Ec. 5.2) y las predicciones latentes (Ec. 5.4-5.5), resulta el siguiente modelo de predicción (o regresión) PLSR:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{XRBQ}' + \tilde{\mathbf{U}}\mathbf{Q}' + \tilde{\mathbf{Y}}_2 = \hat{\mathbf{Y}} + \tilde{\mathbf{Y}}_1 + \tilde{\mathbf{Y}}_2 \quad (5.6)$$

donde, $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{XRBQ}' = \mathbf{TBQ}'$ es la parte predecible de las respuestas proyectadas, $\hat{\mathbf{Y}}^* = \mathbf{YSQ}'$ (ver Ec. 5.2), y los errores de proyección y de predicción son $\tilde{\mathbf{Y}}_2 = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}^*$ e $\tilde{\mathbf{Y}}_1 = \hat{\mathbf{Y}}^* - \hat{\mathbf{Y}}$, respectivamente. Por lo tanto, el error de predicción de \mathbf{Y} se descompone en dos términos como $\tilde{\mathbf{Y}} = \tilde{\mathbf{Y}}_1 + \tilde{\mathbf{Y}}_2$ (Ec. 5.6).

La selección del orden interno A se determina supervisando la deflación simultánea de \mathbf{X} e \mathbf{Y} , a fin de detectar la presencia de variables predictoras que puedan interferir en el modelo de regresión seleccionado (Godoy et al., 2011a), para luego excluirlas del grupo de variables predictoras en el modelo de regresión final.

Después de calibrar un modelo PLSR (dado por \mathbf{P} , \mathbf{Q} y \mathbf{B}), se pueden descomponer los vectores de mediciones $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ e $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$ en proyecciones oblicuas complementarias como (ver Cap. 3 y Godoy et al., 2011b):

$$\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^m, \quad (5.7)$$

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{P}\mathbf{R}'\mathbf{x} \in S_{MX} \equiv \text{Span}\{\mathbf{P}\} \subseteq \mathbb{R}^m,$$

$$\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}')\mathbf{x} \in S_{RX} \equiv \text{Span}\{\mathbf{R}\}^\perp \subseteq \mathbb{R}^m,$$

$$\mathbf{y} = \hat{\mathbf{y}}^* + \tilde{\mathbf{y}}_2 \in \mathbb{R}^p, \quad (5.8)$$

$$\hat{\mathbf{y}}^* = \mathbf{Q}\mathbf{S}'\mathbf{y} \in S_{MY} \equiv \text{Span}\{\mathbf{Q}\} \subseteq \mathbb{R}^p,$$

$$\tilde{\mathbf{y}}_2 = (\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{S}')\mathbf{y} \in S_{RY} \equiv \text{Span}\{\mathbf{S}\}^\perp \subseteq \mathbb{R}^p,$$

donde $\mathbf{P}\mathbf{R}'$ ($\mathbf{Q}\mathbf{S}'$) es el proyector sobre el subespacio modelo S_{MX} (S_{MY}), a lo largo del subespacio residuo S_{RX} (S_{RY}); e $\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}'$ ($\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{S}'$) es el proyector sobre S_{RX} (S_{RY}) a lo largo de S_{MX} (S_{MY}). Las proyecciones $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}^*$ sobre los subespacios modelos S_{MX} y S_{MY} , están interrelacionadas como:

$$\hat{\mathbf{y}}^* = \hat{\mathbf{y}} + \tilde{\mathbf{y}}_1, \quad \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{R}'\hat{\mathbf{x}} \in S_{MY}, \quad \tilde{\mathbf{y}}_1 = \hat{\mathbf{y}}^* - \hat{\mathbf{y}} \in S_{MY}, \quad (5.9)$$

donde $\hat{\mathbf{y}}$ denota la parte predecible de $\hat{\mathbf{y}}^*$ a partir de $\hat{\mathbf{x}}$ e $\tilde{\mathbf{y}}_1$ el error de predicción.

La técnica propuesta de monitoreo de procesos multivariados basada en PLSR (ver Cap. 3) utiliza cuatro estadísticos (una distancia estadística que considera la estructura de correlación más tres distancias euclídeas al modelo), los cuales están dados por:

$$T_t^2 = \left\| \left(\mathbf{\Lambda}^{-1/2} \mathbf{P}' \right) \hat{\mathbf{x}} \right\|^2, \quad (5.10a)$$

$$SPE_x = \|\tilde{\mathbf{x}}\|^2, \quad SPE_{y_2} = \|\tilde{\mathbf{y}}_2\|^2, \quad SPE_{y_1} = \|\tilde{\mathbf{y}}_1\|^2. \quad (5.10b)$$

donde cada estadístico actúa sobre cada subespacio S_{MX} , S_{RX} , S_{MY} , y S_{RY} ; respectivamente. Estos cuatro estadísticos se escalan por sus respectivos límites de control (τ_α^2 , $\delta_{x,\alpha}^2$, $\delta_{y_1,\alpha}^2$, $\delta_{y_2,\alpha}^2$) y se combinan en un único índice para detección de anomalías, dado por (ver Ec. 3.23):

$$I_{TC} = \frac{T_t^2}{\tau_\alpha^2} + \frac{SPE_x}{\delta_{x,\alpha}^2} + \frac{SPE_{y_1}}{\delta_{y_1,\alpha}^2} + \frac{SPE_{y_2}}{\delta_{y_2,\alpha}^2} = [\mathbf{y}' \quad \mathbf{x}'] \mathbf{\Phi}_{PLSR} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}, \quad (5.11)$$

donde $\mathbf{\Phi}_{PLS}$ es simétrica definida positiva. Mediante este índice combinado (Ec. 5.11) se puede monitorear en forma conjunta calidad del proceso, fallas del proceso, y fallas de sensores; y además define una región elíptica de control con extremos determinados por

sus escalas (límites de control de cada estadístico componente). El límite de control α de I_{TC} (ver Cap. 3) se denota como I_α .

La técnica PLSR diagnostica el tipo de anomalía que afecta al proceso en base al patrón esperado de estadísticos componentes con alarmas, el cual se describe en la Tabla 3.2. Una vez que se detecta una alarma en I_{TC} el patrón de alertas (ver Tabla 3.2) permite clasificar el evento anormal. Luego, mediante un análisis de las contribuciones a los estadísticos con alertas se identifican las variables responsables.

5.2.1 Propiedades geométricas de PLSR relacionadas a PCA

El ángulo mínimo θ_x entre ambos subespacios S_{MX} y S_{RX} (no nulos) se define como el número $0 \leq \theta_x \leq \pi/2$ que satisface: $\cos \theta_x = \max(\hat{\mathbf{x}}'\tilde{\mathbf{x}}/\|\hat{\mathbf{x}}\|\|\tilde{\mathbf{x}}\|)$, donde $\hat{\mathbf{x}} \in S_{MX}$, $\tilde{\mathbf{x}} \in S_{RX}$. En forma similar se define el ángulo mínimo θ_y entre S_{MY} y S_{RY} . A su vez, se puede estimar θ_x (θ_y) mediante la siguiente relación:

$$\sin \theta_x = 1/\|\mathbf{PR}'\|_2, \quad \sin \theta_y = 1/\|\mathbf{QS}'\|_2 \quad (5.12)$$

Los ángulos θ_x y θ_y entre los subespacios complementarios se ilustran en la Fig. 3.1 del Capítulo 3, y están compuestos por los ángulos elementales entre \mathbf{p}_a (\mathbf{q}_a) y \mathbf{r}_a (\mathbf{s}_a), para $a=1..A$, según:

$$\phi_a = \cos^{-1}(\mathbf{p}'_a \mathbf{r}_a / \|\mathbf{p}_a\| \|\mathbf{r}_a\|), \quad (5.13a)$$

$$\varphi_a = \cos^{-1}(\mathbf{q}'_a \mathbf{s}_a / \|\mathbf{q}_a\| \|\mathbf{s}_a\|), \quad (5.13b)$$

Estos ángulos elementales (Ec. 5.13) generalmente no son cero, principalmente los ϕ_a . La Fig. 5.1 muestra para un ejemplo particular, la composición del ángulo θ_x (entre $Span\{\mathbf{R}\}^\perp$ y $Span\{\mathbf{P}\}$) a partir de sus ángulos elementales ϕ_1 y ϕ_2 . En la cual se muestra que cuanto mayor sean los ángulos entre \mathbf{p}_a y \mathbf{r}_a para $a=1..2$, menor será θ_x . Por lo tanto, si $\phi_a = 0$ para $a = 1..A$, entonces $\theta_x = \pi/2$. Es importante remarcar que el algoritmo PLSR-NIPALS enfatiza la descripción de las respuestas \mathbf{Y} subordinando las principales direcciones de variabilidad en los datos predictores \mathbf{X} (Wold et al., 2001). Por lo tanto, θ_y se aproxima a $\pi/2$ lo que equivale a que \mathbf{Q} se aproxime a ser ortogonal por columna, mientras que θ_x puede tomar cualquier valor.

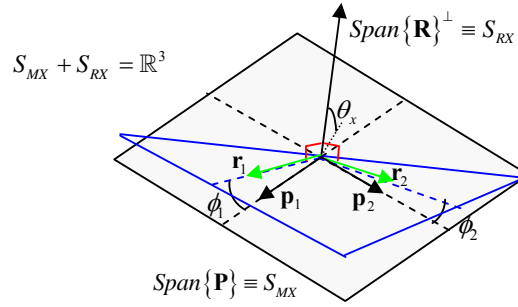


Figura 5.1: Ángulos en la descomposición PLSR de \mathbf{X} inducidos por el efecto de \mathbf{Y} , para un caso particular con $m=3$ y $A=2$, donde $\mathbf{P} = [\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2]$ y $\mathbf{R} = [\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2]$.

A continuación, en base a estas propiedades geométricas se describe el efecto de \mathbf{Y} sobre la descomposición PLSR de \mathbf{X} , y su relación a la descomposición PCA de \mathbf{X} . En principio, para analizar el impacto de \mathbf{Y} sobre la descomposición PLSR de \mathbf{X} , se asume que \mathbf{X} tiene la siguiente descomposición PCA:

$$\mathbf{X} = \sum_{a=1}^A \mathbf{t}_a^x \mathbf{v}_a' = \mathbf{T}_x \mathbf{V}', \quad \mathbf{T}_x = [\mathbf{t}_1^x \cdots \mathbf{t}_A^x], \quad \mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \cdots \mathbf{v}_A] \quad (5.14a)$$

donde \mathbf{v}_a (con $a = 1 \dots A$, donde $A = \text{rank}(\mathbf{X}) \leq m$) son los autovectores ortonormales relacionados con los autovalores no nulos $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_A$ de la matriz covarianza

$$\mathbf{X}'\mathbf{X} = \sum_{a=1}^A \lambda_a \mathbf{v}_a \mathbf{v}_a' = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda}_x \mathbf{V}', \quad \mathbf{\Lambda}_x = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_A). \quad (5.14b)$$

En PCA, sólo la matriz \mathbf{V} define la descomposición de \mathbf{X} (Yue y Qin, 2001), mediante \mathbf{V} se proyecta al espacio latente ($\mathbf{T}_x = \mathbf{X}\mathbf{V}$) y a través de \mathbf{V}' se reconstruye ($\mathbf{X} = \mathbf{T}_x \mathbf{V}'$).

A diferencia de PCA, en PLSR la descomposición de \mathbf{X} se define mediante dos matrices, con \mathbf{R} se proyecta al espacio latente (Ec. 5.4) y con \mathbf{P}' se reconstruye (Ec. 5.1). Por lo tanto, los ángulos ϕ_a ($a = 1 \dots A$) (ver Ec. 5.13a), a menos que sean cero, podrían reflejar el impacto de \mathbf{Y} sobre la descomposición PLSR de \mathbf{X} .

De acuerdo a las propiedades de PLSR, el vector \mathbf{r}_a está en el $\text{Span}\{\mathbf{v}_1 \cdots \mathbf{v}_A\}$, es decir que $\mathbf{r}_a = \|\mathbf{r}_a\| \sum_{a=1}^A \alpha_a \mathbf{v}_a$ donde $\sum_{a=1}^A \alpha_a^2 = 1$. El vector \mathbf{p}_a esta dado por: $\mathbf{p}_a = \mathbf{X}'\mathbf{t}_a / \|\mathbf{X}'\mathbf{t}_a\|$ donde

$\mathbf{t}_a = \mathbf{X}_a \mathbf{r}_a$ (ver Tabla 3.1), por tanto, $\mathbf{p}_a = \mathbf{X}'_a \mathbf{X}_a \mathbf{r}_a / \|\mathbf{X}'_a \mathbf{X}_a \mathbf{r}_a\|$. Luego, si se considera la siguiente igualdad $\mathbf{X}'_a \mathbf{X}_a \mathbf{r}_a = \mathbf{X}' \mathbf{X} \mathbf{r}_a = \|\mathbf{r}_a\| \sum_{a=1}^A \lambda_a \alpha_a \mathbf{v}_a$ en la expresión de \mathbf{p}_a , resulta que:

$$\mathbf{p}_a = \frac{\mathbf{X}' \mathbf{X} \mathbf{r}_a}{\sqrt{(\mathbf{r}'_a \mathbf{X}' \mathbf{X}) (\mathbf{X}' \mathbf{X} \mathbf{r}_a)}} = \frac{\sum_{a=1}^A \lambda_a \alpha_a \mathbf{v}_a}{\sqrt{\left(\sum_{a=1}^A \lambda_a \alpha_a \mathbf{v}'_a \right) \left(\sum_{a=1}^A \lambda_a \alpha_a \mathbf{v}_a \right)}} = \frac{\sum_{a=1}^A \lambda_a \alpha_a \mathbf{v}_a}{\sqrt{\sum_{a=1}^A \lambda_a^2 \alpha_a^2}}. \quad (5.15)$$

Por lo tanto, ya que $\|\mathbf{p}_a\| = 1$, se tiene que:

$$\cos \phi_a = \frac{\mathbf{p}'_a \mathbf{r}_a}{\|\mathbf{r}_a\|} = \frac{\left(\sum_{a=1}^A \lambda_a \alpha_a \mathbf{v}'_a \right) \left(\|\mathbf{r}_a\| \sum_{a=1}^A \alpha_a \mathbf{v}_a \right)}{\|\mathbf{r}_a\| \sqrt{\sum_{a=1}^A \lambda_a^2 \alpha_a^2}} = \frac{\sum_{a=1}^A \lambda_a \alpha_a^2}{\sqrt{\sum_{a=1}^A \lambda_a^2 \alpha_a^2}}. \quad (5.16)$$

Nótese que: i) si \mathbf{r}_a es un autovector de $\mathbf{X}' \mathbf{X}$, todos menos un α_a son cero, lo cual implica que la Ec. (5.16) resulta igual a uno y $\phi_a = 0$; es decir si $\alpha_a=1$ se tiene que $\mathbf{p}_a = \mathbf{r}_a = \mathbf{v}_a$, y ii) si todos los autovalores λ_a 's son iguales, resulta también $\phi_a = 0$. En definitiva, la Ec. (5.16) muestra que el ángulo ϕ_a depende de la forma elipsoidal de la covarianza de \mathbf{X} (es decir, de los λ_a 's) y de los α_a 's, los cuales se mostrará a continuación que dependen también de \mathbf{Y} .

Para visualizar la influencia de \mathbf{Y} sobre los α_a 's se considera la matriz covarianza del vector predictor \mathbf{x} y la del vector respuesta \mathbf{y} : $\mathbf{X}' \mathbf{X} = \sum_{a=1}^A \lambda_a \mathbf{v}_a \mathbf{v}'_a$ e $\mathbf{Y}' \mathbf{Y} = \sum_{a=1}^A \delta_a \mathbf{q}_a \mathbf{q}'_a$, y la

relación interna dada por: $\mathbf{Y} = \sum_{a=1}^A \mathbf{u}_a \mathbf{q}'_a = \sum_{a=1}^A b_a \mathbf{t}_a \mathbf{q}'_a$, donde $\mathbf{t}_a = \mathbf{X} \mathbf{r}_a = \mathbf{X} \|\mathbf{r}_a\| \sum_{a=1}^A \alpha_a \mathbf{v}_a$. Si se

proyecta \mathbf{Y} sobre su a -ésima dirección principal \mathbf{q}_a , por medio de \mathbf{s}_a la pseudoinversa de \mathbf{q}_a (i.e., $\mathbf{q}'_a \mathbf{s}_a = 1$), se obtiene $\mathbf{u}_a = \mathbf{Y} \mathbf{s}_a$. Luego, partiendo de la igualdad:

$\mathbf{Y} \mathbf{s}_a b_a^{-1} = \mathbf{t}_a = \mathbf{X} \|\mathbf{r}_a\| \sum_{a=1}^A \alpha_a \mathbf{v}_a$, resulta la siguiente expresión para calcular los α_a 's de cada \mathbf{r}_a

en función de las direcciones principales de \mathbf{Y} , dada por:

$$\begin{aligned} (b_a \|\mathbf{r}_a\|)^{-1} (\mathbf{X}' \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{Y} \mathbf{s}_a &= \sum_{a=1}^A \alpha_a \mathbf{v}_a, & \sum_{a=1}^A \alpha_a^2 &= 1 \\ (b_a \|\mathbf{r}_a\|)^{-1} \Lambda_x^{-1} \mathbf{T}'_x \mathbf{u}_a &= \Delta_a \mathbf{1}_A, & \Delta_a &= \text{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_A) \end{aligned} \quad (5.17)$$

donde $\mathbf{1}_A = [1 \dots 1]'$ ($A \times 1$) y las columnas de $\mathbf{T}_x \Lambda_x^{-1}$ poseen norma uno. La Ec. (5.17)

muestra que \mathbf{r}_a es una transformación lineal de \mathbf{s}_a , es decir $\mathbf{r}_a = b_a^{-1}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}\mathbf{s}_a$; y además que α_a es el coeficiente de correlación entre la a -ésima columna de $\mathbf{T}_x\mathbf{\Lambda}_x^{-1}$ y $(b_a\|\mathbf{r}_a\|)^{-1}\mathbf{u}_a$. Por lo tanto, el impacto de \mathbf{Y} sobre la descomposición PLSR de \mathbf{X} depende de las direcciones principales en \mathbf{Y} que se correlacionan con \mathbf{X} ; es decir, de los α_a 's que determinan la dirección de cada \mathbf{r}_a .

De las Ecs. (5.16) y (5.17) se concluye que, si \mathbf{Y} está principalmente correlacionada con los valores latentes de las direcciones (o componentes) principales de \mathbf{X} , la descomposición PLSR de \mathbf{X} es similar a la descomposición PCA de \mathbf{X} . En resumen, cuanto más se aproxime θ_x a $\pi/2$, más se aproximará la descomposición PLSR de \mathbf{X} a la descomposición PCA de \mathbf{X} equivalente. En este caso, las técnicas de monitoreo PCA pueden ser directamente aplicadas al modelo y a los residuos. Si, por otro lado, \mathbf{Y} está fuertemente correlacionada con los valores latentes en las direcciones no-principales de \mathbf{X} , la descomposición PLSR de \mathbf{X} puede ser muy diferente de la descomposición PCA de \mathbf{X} . En consecuencia, dado que la varianza explicada remanente en los residuos del modelo PCA de \mathbf{X} puede ser grande, la aplicación directa de control estadístico basado en SPE sobre estos residuos puede ser cuestionable.

5.3 Monitoreo de procesos basado en descomposición PCA de $[\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$

El monitoreo de un proceso multivariado con entradas y respuestas colineales se puede realizar también a través de un modelo basado en PCA, aunque este enfoque no diferencia variables de respuesta respecto a variables de entrada. Dada una matriz de datos $\mathbf{Z} = [\mathbf{Y} \ \mathbf{X}] = [\mathbf{z}_1 \ \dots \ \mathbf{z}_N]'$ ($N \times p+m$), que consiste en N muestras con $p+m$ variables por muestra, mediante PCA (utilizando el algoritmo NIPALS) se encuentra un modelo latente que descompone \mathbf{Z} en vectores de scores y vectores peso como sigue (Yue y Qin, 2001):

$$\mathbf{Z} = \mathbf{T}_z\mathbf{P}_z' + \tilde{\mathbf{Z}} = \hat{\mathbf{Z}} + \tilde{\mathbf{Z}}, \quad (5.18)$$

donde \mathbf{P}_z es ortogonormal por columnas, i.e., $\mathbf{P}_z'\mathbf{P}_z = \mathbf{I}$. Pos-multiplicando \mathbf{Z} (Ec. 5.18) por \mathbf{P}_z se obtienen las predicciones de \mathbf{T}_z como:

$$\mathbf{T}_z = \mathbf{Z}\mathbf{P}_z = \underbrace{[\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]}_{\mathbf{Z}} \begin{bmatrix} \mathbf{P}_y \\ \mathbf{P}_x \end{bmatrix} = \mathbf{Y}\mathbf{P}_y + \mathbf{X}\mathbf{P}_x. \quad (5.19)$$

Después de ajustar un modelo PCA, se puede descomponer el vector de mediciones $\mathbf{z} = [\mathbf{y}' \ \mathbf{x}']' \in \mathbb{R}^{m+p}$ en proyecciones ortogonales complementarias como:

$$\mathbf{z} = \hat{\mathbf{z}} + \tilde{\mathbf{z}} \in \mathbb{R}^{p+m}, \quad (5.20)$$

$$\hat{\mathbf{z}} = \mathbf{P}_z \mathbf{P}'_z \mathbf{z} \in S_{MZ} \equiv \text{Span}\{\mathbf{P}_z\} \subseteq \mathbb{R}^{m+p},$$

$$\tilde{\mathbf{z}} = (\mathbf{I} - \mathbf{P}_z \mathbf{P}'_z) \mathbf{z} \in S_{RZ} \equiv \text{Span}\{\mathbf{P}_z\}^\perp \subseteq \mathbb{R}^{m+p},$$

donde $\hat{\mathbf{z}}$ es la proyección ortogonal sobre el subespacio modelo S_{MZ} y $\tilde{\mathbf{z}}$ es la proyección ortogonal sobre el subespacio residuo S_{RZ} , con $S_{MZ} \perp S_{RZ}$. A diferencia de PLSR, en la descomposición PCA (Ec. 5.20) $\hat{\mathbf{z}}$ siempre es ortogonal a $\tilde{\mathbf{z}}$.

Los índices de detección de fallas basados en PCA están dados por:

$$T_t^2 = \left\| (\Lambda_z^{-1/2} \mathbf{P}'_z) \hat{\mathbf{z}} \right\|^2 = \left\| (\Lambda_z^{-1/2} \mathbf{P}'_z) \mathbf{z} \right\|^2 \quad (5.21)$$

$$SPE_z = \|\tilde{\mathbf{z}}\|^2 = \left\| (\mathbf{I} - \mathbf{P}_z \mathbf{P}'_z) \mathbf{z} \right\|^2 \quad (5.22)$$

donde $\Lambda_z = \text{diag}(\lambda_1^z \dots \lambda_A^z)$ y λ_a^z es la varianza estimada del score t_a^z (presente en la a -ésima columna de \mathbf{T}_z). Estos dos estadísticos se combinan en un único índice de detección como sigue:

$$I_C = \frac{T_t^2}{\tau_\alpha^2} + \frac{SPE_z}{\delta_{z,\alpha}^2} = \overbrace{[\mathbf{y}' \quad \mathbf{x}']^z} \Phi_{PCA} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}, \quad (5.23)$$

donde Φ_{PCA} es simétrica definida positiva. El límite de control α de I_C se estima según el Apéndice 3.B del Cap. 3.

5.4 Análisis comparativo entre PCA y PLSR

En esta sección se comparan los métodos PCA y PLSR, en base a tres aspectos: 1) sus modelos latentes, 2) sus modelos de predicción (o regresión), y 3) sus índices de detección de fallas y técnicas diagnosticas. Por último, a través de ejemplos de aplicación se muestran las similitudes y diferencias entre ambos métodos.

5.4.1 Comparación de modelos latentes

Dado el modelo latente PCA de la matriz $\mathbf{Z} = [\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$ expresado como:

$$\overbrace{\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Y}} & \hat{\mathbf{X}} \end{bmatrix}}^{\hat{\mathbf{z}}} = \overbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{Y} & \mathbf{X} \end{bmatrix}}^{\mathbf{z}} \mathbf{P}'_z = \mathbf{T}_z \mathbf{P}'_z = \mathbf{T}_z \underbrace{[\mathbf{P}'_y \quad \mathbf{P}'_x]}_{\mathbf{T}_z}, \quad (5.24)$$

se busca construir un modelo latente (con el mismo número de variables latentes A) a partir de las matrices (identificadas) de PLSR que sea equivalente a éste (Ec. 5.24). En principio,

se observa de la Ec. (5.6) que si $\tilde{\mathbf{Y}}_1 = \mathbf{0}$ (o $\tilde{\mathbf{U}} = \mathbf{0}$ en la Ec. (5.3)) se tiene que $\hat{\mathbf{Y}} = \hat{\mathbf{Y}}^* = \mathbf{Y}\mathbf{S}\mathbf{Q}' = \mathbf{U}\mathbf{Q}'$. Por lo tanto, de las Ecs. (5.3-5.6) se tiene que:

$$\mathbf{X}\mathbf{R} = \mathbf{T} = \mathbf{Y}\mathbf{S}\mathbf{B}^{-1}. \quad (5.25)$$

Pos-multiplicando la Ec. (5.25) por \mathbf{P}' , se tiene también que:

$$\mathbf{X}\mathbf{R}\mathbf{P}' = \hat{\mathbf{X}} = \mathbf{Y}\mathbf{S}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{P}'. \quad (5.26)$$

La Ec. (5.25) (Ec. (5.26)) muestra que \mathbf{T} ($\hat{\mathbf{X}}$) se puede obtener de las variables predictoras \mathbf{X} o de las variables respuestas \mathbf{Y} . De esta manera, de las Ecs. (5.1) y (5.6) resulta la primer parte del modelo latente PLSR de la matriz aumentada $[\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$ como:

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Y}} & \hat{\mathbf{X}} \end{bmatrix} = \mathbf{T} \begin{bmatrix} \mathbf{B}\mathbf{Q}' & \mathbf{P}' \end{bmatrix}, \quad (5.27)$$

donde la matriz residual respecto a $[\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$ (ver Ec. 5.1-5.2), está dada por:

$$\begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{Y}}_2 & \tilde{\mathbf{X}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{Y} & \mathbf{X} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Y}} & \hat{\mathbf{X}} \end{bmatrix}. \quad (5.28)$$

Por otro lado, a partir de la Ec. (5.25) se obtiene la siguiente relación para PLSR:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{Y} & \mathbf{X} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{S}\mathbf{B}^{-1} \\ \mathbf{R} \end{bmatrix} = \mathbf{Y}\mathbf{S}\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{X}\mathbf{R} = 2\mathbf{T}. \quad (5.29)$$

En consecuencia, si se incluye la Ec. (5.29) en la Ec. (5.27) y se distribuye el término $\sqrt{1/2}$ en las matrices proyectoras para absorber en éstas el término 2 de la Ec. (5.29), y posteriormente se escalan estas matrices proyectoras para que sus columnas posean norma unitaria, resulta la siguiente proyección de $[\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$ a un plano latente (en base a PLSR) como:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Y}} & \hat{\mathbf{X}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{Y} & \mathbf{X} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{1/2} \mathbf{S}\mathbf{B}^{-1} \\ \sqrt{1/2} \mathbf{R} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{1/2} \mathbf{B}\mathbf{Q}' & \sqrt{1/2} \mathbf{P}' \end{bmatrix}, \\ \hat{\mathbf{Z}} &= \begin{bmatrix} \mathbf{Y} & \mathbf{X} \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{1/2} \mathbf{S}\mathbf{B}^{-1} \mathbf{D}_y^{-1} \\ \sqrt{1/2} \mathbf{R} \mathbf{D}_x^{-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{P}_z^*} \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{1/2} \mathbf{D}_y \mathbf{B}\mathbf{Q}' & \sqrt{1/2} \mathbf{D}_x \mathbf{P}' \end{bmatrix}}_{(\mathbf{P}_z^*)'} = \underbrace{\mathbf{Z}\mathbf{P}_z^*}_{\mathbf{r}_z^*} (\mathbf{P}_z^*)', \end{aligned} \quad (5.30)$$

donde $\mathbf{D}_y = \mathbf{B}^{-1} \text{diag}(\|\mathbf{s}_1\|, \dots, \|\mathbf{s}_A\|)$, $\mathbf{D}_x = \text{diag}(\|\mathbf{r}_1\|, \dots, \|\mathbf{r}_A\|)$ y $(\mathbf{P}_z^*)' \mathbf{P}_z^* = \mathbf{I}$. Por lo tanto, la Ec. (5.30) muestra la descomposición “PCA equivalente” de $[\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$ obtenida a partir de un modelo PLSR de (\mathbf{X}, \mathbf{Y}) . En particular, muestra la composición de las matrices proyectoras a partir de un modelo PLSR y su equivalencia con el modelo PCA (Ec. 5.24). Las matrices de autovectores principales “equivalentes” están dadas por:

$$\mathbf{P}_z^* = \begin{bmatrix} \sqrt{1/2} \mathbf{S} \text{diag} (1/\|\mathbf{s}_1\| \cdots 1/\|\mathbf{s}_A\|) \\ \sqrt{1/2} \mathbf{R} \text{diag} (1/\|\mathbf{r}_1\| \cdots 1/\|\mathbf{r}_A\|) \end{bmatrix}, \quad (5.31)$$

$$(\mathbf{P}_z^*)' = \left[\sqrt{1/2} \text{diag} (\|\mathbf{s}_1\| \cdots \|\mathbf{s}_A\|) \mathbf{Q}' \quad \sqrt{1/2} \text{diag} (\|\mathbf{r}_1\| \cdots \|\mathbf{r}_A\|) \mathbf{P}' \right], \quad (5.32)$$

donde las columnas de \mathbf{P}_z^* (Ec. 5.31) poseen norma unitaria. Luego, por analogía de la Ec. (5.24) con las Ecs. (5.29) y (5.30) resulta que:

$$\mathbf{P}_y \equiv \sqrt{1/2} \mathbf{S} \text{diag} (1/\|\mathbf{s}_1\| \cdots 1/\|\mathbf{s}_A\|), \quad \mathbf{P}_x \equiv \sqrt{1/2} \mathbf{R} \text{diag} (1/\|\mathbf{r}_1\| \cdots 1/\|\mathbf{r}_A\|), \quad (5.33)$$

$$\mathbf{P}'_x \equiv \sqrt{1/2} \text{diag} (\|\mathbf{r}_1\| \cdots \|\mathbf{r}_A\|) \mathbf{P}', \quad \mathbf{P}'_y \equiv \sqrt{1/2} \text{diag} (\|\mathbf{s}_1\| \cdots \|\mathbf{s}_A\|) \mathbf{Q}', \quad (5.34)$$

Las variables latentes “equivalentes” (ver Ec. 5.30) están dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_z^* &= [\mathbf{Y} \ \mathbf{X}] \mathbf{P}_z^* = \sqrt{1/2} \mathbf{T} \left[\mathbf{B} \text{diag} (1/\|\mathbf{s}_1\| \cdots 1/\|\mathbf{s}_A\|) + \text{diag} (1/\|\mathbf{r}_1\| \cdots 1/\|\mathbf{r}_A\|) \right], \\ &= \sqrt{2} \mathbf{T} \text{diag} (1/\|\mathbf{r}_1\| \cdots 1/\|\mathbf{r}_A\|) \end{aligned} \quad (5.35)$$

donde $\mathbf{B} = \text{diag} (\|\mathbf{s}_1\|/\|\mathbf{r}_1\| \cdots \|\mathbf{s}_A\|/\|\mathbf{r}_A\|)$. En definitiva, estas relaciones entre PCA y PLSR (Ecs. 5.33 - 5.35) indican que cualitativamente ambos métodos encuentran el mismo espacio latente, salvo las diferencias de escalas. Para ilustrar esta equivalencia se utilizará un ejemplo numérico de aplicación.

5.4.2 Comparación de modelos de predicción

En PCA el vector de mediciones $\mathbf{z} = [\mathbf{y}' \ \mathbf{x}']'$ se puede dividir en la parte conocida \mathbf{x} y en la parte desconocida \mathbf{y} . Por lo tanto, se puede particionar el modelo PCA como:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{z} \\ \mathbf{y} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_z \\ \mathbf{P}_y \\ \mathbf{P}_x \end{bmatrix} \mathbf{t}_z = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_y \mathbf{t}_z \\ \mathbf{P}_x \mathbf{t}_z \end{bmatrix} \quad (5.36)$$

Si se utiliza \mathbf{x} (la parte conocida de \mathbf{z}) para estimar el vector de scores \mathbf{t}_z , se obtiene la siguiente relación (Nelson et al., 1996; Flores-Cerrillo y MacGregor, 2005):

$$\hat{\mathbf{t}}_z = (\mathbf{P}'_x \mathbf{P}_x)^{-1} \mathbf{P}'_x \mathbf{x} \quad (5.37)$$

En consecuencia, se puede obtener la predicción de \mathbf{y} a partir de \mathbf{x} como (Nelson et al., 1996; Flores-Cerrillo y MacGregor, 2005):

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{P}_y (\mathbf{P}'_x \mathbf{P}_x)^{-1} \mathbf{P}'_x \mathbf{x} \quad (5.38)$$

Este algoritmo de estimación (Ec. 5.38) se conoce como “proyección al plano modelo” (Nelson et al., 1996; Flores-Cerrillo y MacGregor, 2005; Golshan et al., 2010) y se lo utiliza también para estimar valores perdidos. Reemplazando las equivalencias

$\mathbf{P}'_y \equiv \sqrt{1/2} \text{diag}(\|\mathbf{s}_1\| \cdots \|\mathbf{s}_A\|) \mathbf{Q}'$ (Ec. 5.34) y $\mathbf{P}'_x \equiv \sqrt{1/2} \mathbf{R} \text{diag}(1/\|\mathbf{r}_1\| \cdots 1/\|\mathbf{r}_A\|)$ (Ec. 5.33) en la Ec. (5.38), resulta la siguiente relación:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{P}_y (\mathbf{P}'_x \mathbf{P}_x)^{-1} \mathbf{P}'_x \mathbf{x} \equiv \underbrace{\mathbf{Q} \text{diag}(\|\mathbf{s}_1\|/\|\mathbf{r}_1\| \cdots \|\mathbf{s}_A\|/\|\mathbf{r}_A\|)}_{\mathbf{B}} \mathbf{R}' \mathbf{x} = \mathbf{QBR}' \mathbf{x} \quad (5.39)$$

La Ec. (5.39) muestra la equivalencia del modelo de predicción PCA con respecto al basado en PLSR (Ecs. 5.1-5.6), es decir: $\mathbf{P}_y (\mathbf{P}'_x \mathbf{P}_x)^{-1} \mathbf{P}'_x \equiv \mathbf{QBR}'$. Lo cual indica que no existen diferencias teóricas entre utilizar un modelo PCA frente a un modelo PLSR para predecir las respuestas y a partir de \mathbf{x} (Ec. 5.39). Por lo tanto, sólo resta evaluar la bondad de ajuste de los algoritmos de identificación PCA y PLSR frente a diferentes estructuras de procesos a fin de finalizar su comparación.

5.4.3 Comparación de técnicas de monitoreo

5.4.3.1 Comparación de índices para detección de fallas

Para monitorear procesos, tanto PCA como PLSR utilizan índices combinados que cubren todo el espacio de medición, pero estos índices se diferencian en su composición. Por lo tanto, para encontrar una relación entre ambos índices combinados se comparan sus términos componentes. A partir de la Ec. (5.35) se deduce que el estadístico normalizado T_t^2/τ_α^2 es equivalente en ambos índices combinados (ver Ecs. 5.11 y 5.23). El error cuadrático de predicción en PLSR (a diferencia de PCA), se descompone en tres términos, resultando necesaria una comparación entre todos los SPE. Nótese que en PCA (ver Ec. 5.22) se presenta la siguiente igualdad:

$$\frac{SPE_z}{\delta_{z,\alpha}^2} = \frac{\|\tilde{\mathbf{z}}\|^2}{\delta_{z,\alpha}^2} = \frac{1}{\delta_{z,\alpha}^2} [\tilde{\mathbf{y}}' \quad \tilde{\mathbf{x}}'] \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{y}} \\ \tilde{\mathbf{x}} \end{bmatrix} = \frac{1}{\delta_{z,\alpha}^2} (\tilde{\mathbf{y}}' \tilde{\mathbf{y}} + \tilde{\mathbf{x}}' \tilde{\mathbf{x}}) = \frac{(SPE_x + SPE_y)}{\delta_{z,\alpha}^2} \quad (5.40)$$

Por otro lado, si en PLSR se asume $E(\|\tilde{\mathbf{y}}_1\|^2) \cong 0$, se tiene que $SPE_{y2} = SPE_y$ y $SPE_{y1} \equiv 0$.

Entonces, resulta que los términos de error de predicción en PCA (Ec. 5.40) y PLSR (Ec. 5.11) están relacionados por:

$$\frac{SPE_z}{\delta_{z,\alpha}^2} = \overbrace{\frac{SPE_x}{\delta_{z,\alpha}^2} + \frac{SPE_y}{\delta_{z,\alpha}^2}}^{PCA} < \overbrace{\frac{SPE_x}{\delta_{x,\alpha}^2} + \frac{SPE_y}{\delta_{y,\alpha}^2}}^{PLSR}. \quad (5.41)$$

debido a que $\delta_{z,\alpha}^2 = \delta_{x,\alpha}^2 + \delta_{y,\alpha}^2$ (ver Apéndice 3.B). En cambio, si se asume $E(\|\tilde{\mathbf{y}}_1\|^2) > 0$ con $E(\tilde{\mathbf{y}}_1' \tilde{\mathbf{y}}_2) \neq 0$, el error de predicción PLSR en \mathbf{y} (SPE_y) se descompone en dos términos, resultando la siguiente relación:

$$\frac{SPE_y}{\delta_{y,\alpha}^2} = \frac{\|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2}{\delta_{y,\alpha}^2} = \frac{\|\tilde{\mathbf{y}}\|^2}{\delta_{y,\alpha}^2} \geq \frac{1}{\delta_{y,\alpha}^2} \left(\|\tilde{\mathbf{y}}_1\|^2 + \|\tilde{\mathbf{y}}_2\|^2 \right) = \frac{SPE_{y1}}{\delta_{y,\alpha}^2} + \frac{SPE_{y2}}{\delta_{y,\alpha}^2}. \quad (5.42)$$

Si además $\delta_{y,\alpha}^2 \approx \delta_{y1,\alpha}^2 \approx \delta_{y2,\alpha}^2 < \delta_{z,\alpha}^2$, luego sumando el SPE_x a la Ec. (5.42) resulta que:

$$\frac{SPE_x}{\delta_{x,\alpha}^2} + \frac{SPE_y}{\delta_{y,\alpha}^2} > \frac{SPE_x}{\delta_{x,\alpha}^2} + \frac{SPE_{y1}}{\delta_{y1,\alpha}^2} + \frac{SPE_{y2}}{\delta_{y2,\alpha}^2}. \quad (5.43)$$

Como los sentidos de las desigualdades en las Ec. (5.41) y (5.43) son opuestos, y además $SPE_y/\delta_{y,\alpha}^2 < SPE_y/\delta_{z,\alpha}^2$ para PCA (ver Ec. 5.43), resulta la siguiente equivalencia aproximada entre PCA y PLSR:

$$\frac{SPE_z}{\delta_{z,\alpha}^2} \approx \frac{SPE_x}{\delta_{x,\alpha}^2} + \frac{SPE_{y1}}{\delta_{y1,\alpha}^2} + \frac{SPE_{y2}}{\delta_{y2,\alpha}^2}. \quad (5.44)$$

Por lo tanto, la magnitud de ambos índices combinados es aproximadamente equivalente (Ec. 5.40), no así su composición. La principal diferencia es el término SPE_{y1} , no considerado en PCA, el cual mide el error de la relación causal PLSR.

Para el caso en que las variables de respuesta (o calidad) no puedan ser medidas en línea (caso de monitoreo inferencial), en PLSR se mostró la siguiente relación (Godoy et al., 2011c):

$$\hat{\mathbf{x}}' \mathbf{R}_{\hat{\mathbf{x}}}^- \hat{\mathbf{x}} = T_t^2 = \hat{\mathbf{y}}' \mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}^- \hat{\mathbf{y}}, \quad (5.45)$$

donde $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{x}}}$ y $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}$ son las matrices de correlación de $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$, respectivamente. La Ec. (5.45) muestra que un estadístico sobre la parte modelada de \mathbf{x} es igual a un estadístico sobre la parte modelada de \mathbf{y} . Es decir, mediante modelado PLSR se puede monitorear la respuesta del proceso a través de un estadístico de la entrada medible en línea. Esta relación (Ec. 5.45) entre el espacio predictor, el espacio latente y el espacio de respuesta, no puede ser asegurada cuando se ajusta un modelo PCA al espacio \mathbf{X} solamente. Por lo tanto, en este caso (de monitoreo inferencial) sólo se puede utilizar el método PLSR para monitorear el proceso.

5.4.3.2 Comparación de capacidades de diagnóstico

La descomposición PLSR (Ec. 5.7-5.9) de las mediciones posee más términos específicos que la descomposición PCA (Ec. 5.20), porque proyecta sobre cuatro subespacios respecto a dos. En consecuencia, PLSR descompone el índice combinado en un mayor número de estadísticos componentes que PCA. En PCA todos los residuos de modelado son incluidos en el término SPE_z reduciendo su capacidad de diagnóstico. En definitiva, PLSR puede discriminar más tipos de anomalías (seis tipos) que PCA (dos tipos), porque PLSR divide el error de modelado en tres términos (ver Ec. 5.44). Ambas técnicas discriminan la anomalía tipo 6 (ver Tabla 3.2, cambio excesivo de operación) del resto, pero PCA agrupa las cinco anomalías restantes en dos grupos: fallas del proceso y fallas de sensores, distinguibles sólo mediante análisis de contribuciones.

En particular, el análisis de las contribuciones a cada estadístico componente PLSR (o subespacio asociado) resulta de gran utilidad en la anomalía 1 y 6 (Tabla 3.2), dado que en el primer caso informan la relación causal modificada y en el otro las variables desplazadas de la zona normal. Este no es posible discernir del análisis de contribuciones de PCA, dado que identifican las variables responsables pero no pueden asociarle un efecto.

El análisis de contribuciones utilizado para identificar las variables responsables (Sección 3.3.3; Yue y Qin, 2001; Alcalá y Qin, 2011) es similar en ambos enfoques; en consecuencia, no se lo analizará aquí.

5.4.6 Visualización de analogías y diferencias a través de ejemplos de aplicación

Para comprender los Biplots, que se utilizarán en esta sección, considere el siguiente modelo latente $\mathbf{P}_z = [\mathbf{p}_1 \ \mathbf{p}_2]$ (con $A=2$ y $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{p+m}$). La proyección de una observación \mathbf{z} sobre el plano $\mathbf{p}_1 \times \mathbf{p}_2$ esta dada por: $\mathbf{t} = \mathbf{P}_z \mathbf{z} = \mathbf{p}'_1 \mathbf{z} + \mathbf{p}'_2 \mathbf{z}$, y las direcciones de las $p+m$ variables originales sobre este plano son:

$$t_{1,i} = \mathbf{p}'_1 \mathbf{z}_i, \quad t_{2,i} = \mathbf{p}'_2 \mathbf{z}_i, \quad i = 1 \dots p+m \quad (5.46)$$

donde $\mathbf{z}_i = [0 \dots 1 \dots 0]'$ es un vector de simple entrada, igual a la i -ésima columna de la matriz identidad. Estas direcciones (Ec. 5.46) indican cómo se movería en el espacio (t_1, t_2) , la variable i si las demás fuesen cero y brinda un marco de referencia sobre el plano latente para comprender los desplazamientos de las variables latentes en función de las originales.

Para entender las diferencias expuestas en la Sección 5.2.1 y las analogías presentadas en la Ecs. (5.30) a (5.35), se comparan a continuación los modelos latentes basados en PCA y en PLSR de un proceso conocido. La operación normal de un ciclo de este proceso sigue una secuencia latente de 4 estados internos dada por: $\{(t_1^0, t_2^0)\}_{1..4} = \{(1,1), (1,3), (3,3), (3,1)\}$. El proceso incluye una parte interna y una externa, dadas por:

$$\begin{cases}
 \mathbf{t} = \mathbf{t}^0 + \boldsymbol{\varepsilon}, & \boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, 0.1^2 \mathbf{I}_2), \\
 \mathbf{u} = \mathbf{B}\mathbf{t} + \boldsymbol{\gamma}, & \mathbf{B} = \text{diag}(2, 0.5), \boldsymbol{\gamma} \sim N(\mathbf{0}, 0.05^2 \mathbf{I}_2), \\
 \mathbf{x} = \mathbf{P}\mathbf{t} + \boldsymbol{\xi}, & \mathbf{P} = [\mathbf{p}_1 \quad \mathbf{p}_2], \boldsymbol{\xi} \sim N(\mathbf{0}, 0.05^2 \mathbf{I}_7), \\
 \mathbf{y} = \mathbf{Q}\mathbf{u} + \boldsymbol{\eta}, & \mathbf{Q} = [\mathbf{q}_1 \quad \mathbf{q}_2], \boldsymbol{\eta} \sim N(\mathbf{0}, 0.05^2 \mathbf{I}_3), \\
 \mathbf{p}_i = \mathbf{p}_i^* / \|\mathbf{p}_i^*\|, & \mathbf{q}_j = \mathbf{q}_j^* / \|\mathbf{q}_j^*\|, \\
 \mathbf{p}_1^* = [1.5, 0, 2, 1, 0.5, 0, 2.5]', & \mathbf{p}_2^* = [0, 2.5, 0.5, -0.5, -1, 1.5, 0]', \\
 \mathbf{q}_1^* = [1.5, 0, -0.5, 0, 2]', & \mathbf{q}_2^* = [0, 1, 0.5, -1, 0.5]'.
 \end{cases} \quad (5.47)$$

Las matrices \mathbf{X} e \mathbf{Y} se obtienen recolectando 32 observaciones de \mathbf{x} e \mathbf{y} , respectivamente. La Fig. 5.2 muestra las realizaciones del modelo interno. El modelo PLSR se ajustó con datos centrados, sin escalar, para identificar una versión centrada del proceso latente (Fig. 5.2). La selección de $A=2$ se determinó supervisando la deflación simultánea de \mathbf{X}_a y \mathbf{Y}_a para evitar interferencias (Godoy et al., 2011). Los ángulos mínimos resultaron: $\theta_x = 81^\circ$ y $\theta_y = 89.5^\circ$. Nótese que en este proceso (Ec. 5.47) no se incluyen variables de interferencia. Si se incluyeran, podrían ser independientemente monitoreadas porque no se correlacionan con las respuestas. Las diferencias entre las matrices \mathbf{R} y \mathbf{Q} identificadas y las verdaderas son despreciables, aunque \mathbf{r}_2 y \mathbf{q}_2 poseen signos opuestos a los verdaderos, éstos se cancelan. Esto último se puede ver claramente en la expresión: $\hat{\mathbf{y}} = \sum_{a=1}^A b_a \mathbf{q}_a \mathbf{r}_a' \mathbf{x}$.

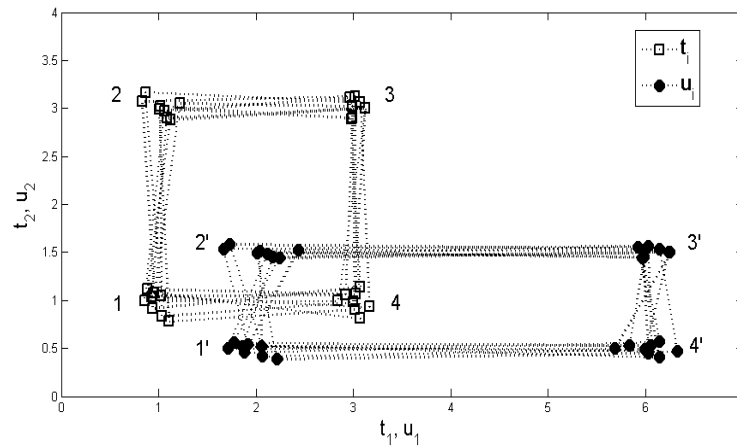


Figura 5.2: Realizaciones del modelo interno (Ec. 5.47).

La Fig. 5.3 muestra las coordenadas latentes, (t_1, t_2) y (u_1, u_2) , de las proyecciones PLSR de las observaciones \mathbf{x} e \mathbf{y} recolectadas, y las direcciones (con magnitud) de cada variable sobre estos subespacios modelo. Es decir, la Fig. 5.3a muestra el biplot de PLSR de \mathbf{X} y la Fig. 5.3b el biplot de \mathbf{Y} . La Fig. 5.3c muestra las coordenadas latentes de las proyecciones PCA de \mathbf{x} para el mismo conjunto de datos \mathbf{X} y las direcciones de las variables (biplot de PCA de \mathbf{X}). Las direcciones en la Fig. 5.3c son muy diferentes a las del biplot de PLSR de \mathbf{X} (ver Fig. 5.3a), porque PCA encuentra direcciones de máxima variabilidad en \mathbf{t} (ver diagonales 1-3 y 2-4 en la Fig. 5.2), las cuales no se correlacionan con las direcciones de máxima variabilidad en \mathbf{u} (ver segmentos 1'-2' y 1'-4' en la Fig. 5.2). Por lo tanto, los componentes \mathbf{r}_a van a ser muy diferentes a los componentes principales \mathbf{v}_a . Es decir, sus biplots serán muy diferentes, lo cual se aprecia claramente comparando la Fig. 5.3a con la Fig. 5.3c. Por el contrario, los componentes PLSR de \mathbf{Y} (Fig. 5.3b) y los componentes PCA de \mathbf{Y} (Fig. 5.3d) son similares, dado que ambos métodos buscan direcciones de máxima variabilidad. Por lo tanto, los modelos PCA de \mathbf{X} y PCA de \mathbf{Y} , independientemente ajustados, no están alineados. La Fig. 5.4a muestra los valores latentes estimados a través PCA de \mathbf{X} y con PCA de \mathbf{Y} , en donde se aprecia la falta de alineación (correlación) entre las dos muestras latentes. La Fig. 5.4b muestra los valores latentes estimados con PLSR \mathbf{X} - \mathbf{Y} , en donde se aprecian las muestras latentes correlacionadas, las cuales son versiones centradas del proceso latente verdadero (ver Fig. 5.2).

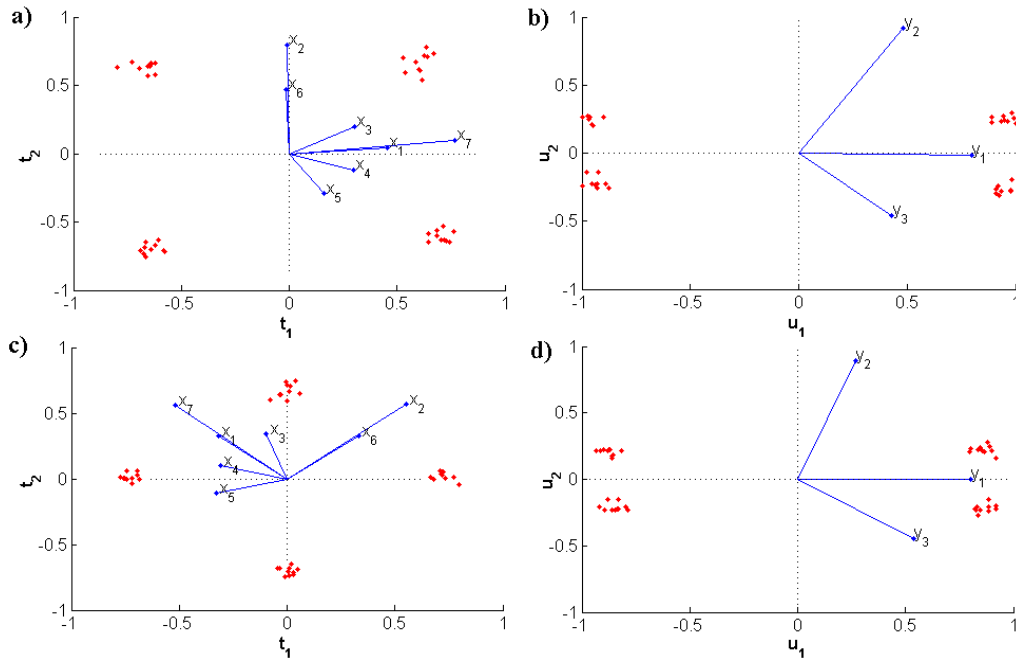


Figura 5.3: Biplots basados en: a) componentes PLSR de \mathbf{X} , \mathbf{r}_a . b) componentes PLSR de \mathbf{Y} , \mathbf{s}_a . c) componentes PCA de \mathbf{X} , \mathbf{v}_a . d) componentes PCA de \mathbf{Y} , \mathbf{v}_a .

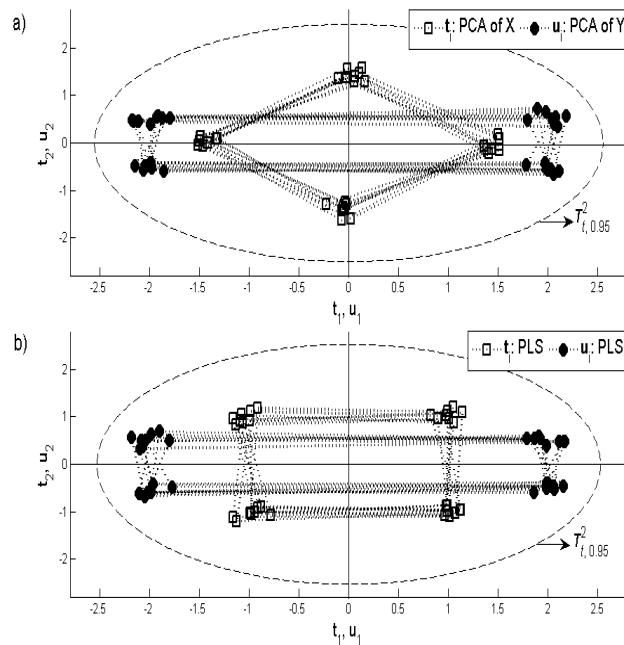


Figura 5.4: Dispersión de observaciones de \mathbf{t} y \mathbf{u} con sus elipsoides de control, utilizando a) dos modelos PCA independientes, uno para \mathbf{X} y otro para \mathbf{Y} , y b) un modelo PLSR de \mathbf{X} - \mathbf{Y} .

La Fig. 5.5b muestra el biplot PCA de $\mathbf{Z}=[\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$, es decir, utilizando todos los datos, mientras que la Fig. 5.5a muestra el biplot del modelo latente (PLSR) equivalente, basado en las direcciones equivalentes \mathbf{P}_z^* y en los scores equivalentes \mathbf{T}_z^* . El error entre \mathbf{P}_z y \mathbf{P}_z^* es despreciable, por lo cual ambos biplots son idénticos (Fig. 5.6a y 5.6b). Por lo tanto, el modelo latente PCA de $[\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$ es equivalente al encontrado con PLSR de $\mathbf{X}-\mathbf{Y}$. Esto se debe a que en PCA de $\mathbf{Z}=[\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$ se busca un espacio latente común a todas las mediciones.

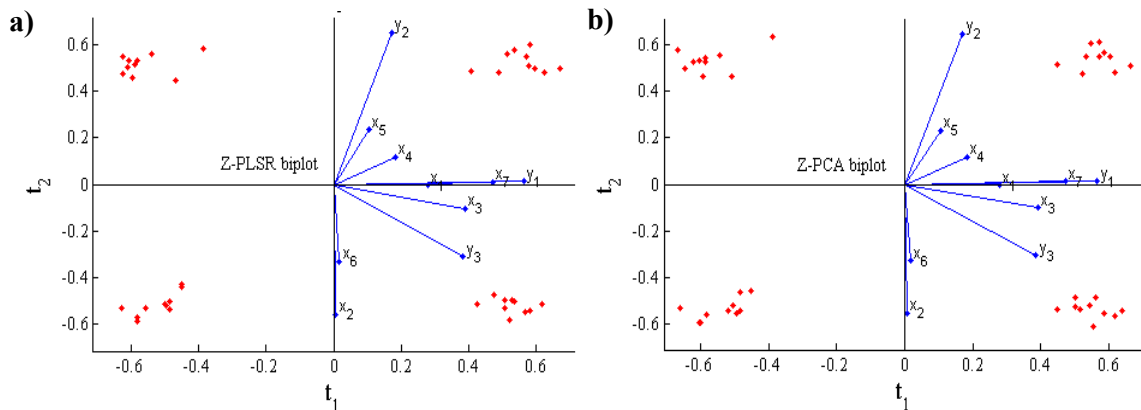


Figura 5.5: Biplots basados en componentes PLSR y PCA. a) componentes \mathbf{P}_z^* equivalentes de $\mathbf{Z} = [\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$. b) componentes PCA de \mathbf{Z} , \mathbf{P}_z .

Existe una diferencia clave entre PCA de \mathbf{Z} y PLSR de $\mathbf{X}-\mathbf{Y}$ en la estimación de las variables latentes. El primero utiliza todas las variables (Ec. 5.20), y el segundo sólo utiliza las entradas o las salidas (Ec. 5.25). Dado que PCA no considera un modelo bilineal subyacente, el modelo PLSR podría estar más cerca del modelo verdadero cuando se identifica un proceso con relaciones causales, sin embargo, el modelo PCA explica las relaciones causales como correlaciones. La Fig. 5.6 muestra el plano modelo (t_1, t_2) incluido en el espacio (y_1, y_2, y_3) y la dispersión de las observaciones en torno al mismo. En la Fig. 5.6 se presentan también las direcciones de las variables x_1, \dots, x_7 en función de sus colinealidades con las variables y_1, y_2, y_3 (ver Fig. 5.5a y 5.5b). Esta representación (Fig. 5.6) incluye todas las variables presentes en $\mathbf{z} = [\mathbf{y}' \ \mathbf{x}']'$ a fin de ilustrar la similitud encontrada entre PCA y PLSR (Fig. 5.5a y 5.5b).

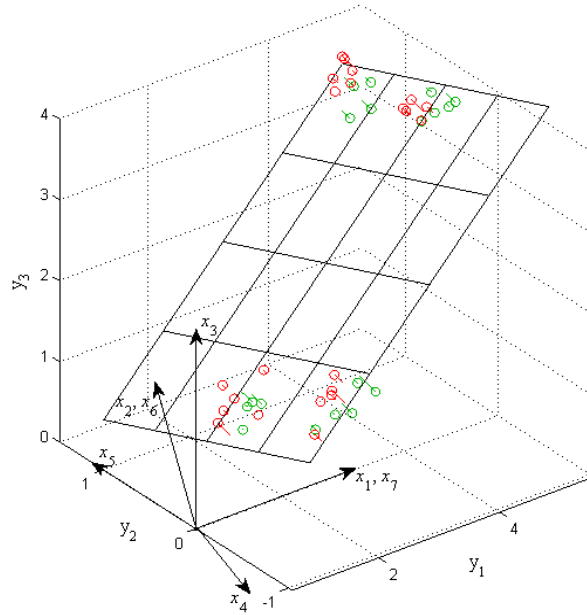


Figura 5.6: Plano modelo sobre el cual se proyectan (mediante PLSR) las mediciones de \mathbf{x} e \mathbf{y} , el cual coincide con el plano modelo sobre el cual se proyecta $\mathbf{z} = [\mathbf{y}' \ \mathbf{x}']'$ (mediante PCA).

Para verificar la equivalencia encontrada entre los modelos predictivos (Ec. 5.39) se realizó una comparación numérica de desempeño. Utilizando el proceso descrito en la Ec. (5.47) se ajustó el modelo de predicción usando PLSR (Ec. 5.6) y PCA (Ec. 5.38) por separado. La Tabla 5.1 muestra el Error Cuadrático Medio (MSE) para cada método y para cada estructura del proceso estudiado (Ec. 5.47), donde $MSE_x = E[(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})'(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})]/m$, $MSE_y = E[(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})'(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})]/p$ y $MSE_z = E[(\mathbf{z} - \hat{\mathbf{z}})'(\mathbf{z} - \hat{\mathbf{z}})]/(p+m)$. En la Tabla 5.1 se observa que el error de predicción de ambos métodos resulta similar aún cuando PCA posee menor error de calibración en \mathbf{z} . La matriz de regresión (o predicción) verdadera del proceso está dada por \mathbf{QBR}' (ver Ec. 5.47), su estimación con PCA es (Ec. 5.38): $\mathbf{P}_y (\mathbf{P}_x' \mathbf{P}_x)^{-1} \mathbf{P}_x'$, y con PLSR es (Ec. 5.6): \mathbf{QBR}' . La Tabla 5.1 muestra que el error de estimación de la matriz de regresión (o predicción) es despreciable en ambos métodos, y la diferencia entre ambas estimaciones es también despreciable (del orden 10^{-6}). Por lo tanto, PCA y PLSR poseen el mismo desempeño para predecir \mathbf{y} a partir de \mathbf{x} .

Tabla 5.1: Comparación de bondad de ajuste y habilidad predictiva de PCA frente a PLSR.

Estructura del Proceso (Ec. 5.47)	Método	Error de calibración: $(MSE_x + MSE_y)$ o MSE_z	Error de predicción: MSE_v	Error de la matriz de regresión.
con $\gamma \neq 0$	PLSR	0.0019+0.0048=0.0067	0.0048	$1.9488 \cdot 10^{-4}$
	PCA	0.0019	0.0048	$2.0254 \cdot 10^{-4}$
con $\gamma \equiv 0$	PLSR	0.0016+0.0046=0.0062	0.0046	$9.3721 \cdot 10^{-5}$
	PCA	0.0018	0.0046	$9.8764 \cdot 10^{-5}$

Para verificar la equivalencia encontrada entre los índices de detección de anomalías y para contrastar las capacidades diagnósticas de ambas técnicas, se simuló el proceso descrito en la Ec. (5.47) afectándolo por seis anomalías, las mismas que en el Capítulo 3. La Tabla 3.4 del Capítulo 3 muestra las seis anomalías simuladas, una por cada tipo de la Tabla 3.2. Las anomalías 1, 2 y 3 se adicionan alterando las matrices correspondientes del proceso. Las fallas 4 y 5 se adicionan a las mediciones y para la anomalía 6 se suma un cambio Δt tal que $I_{TC} > I_\alpha$ (límite de control). Utilizando las observaciones recolectadas bajo condición de operación normal se ajustó un modelo PLSR con dos variables latentes y se estimaron los límites de control. La Fig. 5.7 muestra la evolución temporal de I_{TC} y de sus cuatro estadísticos componentes. A través de $I_{TC}(k)$ se detecta eficazmente cada anomalía simulada y mediante el patrón de sus estadísticos componentes con alertas (Fig. 5.7) se diagnostica correctamente cada tipo en base a la Tabla 3.2. Por otro lado, se ajustó un modelo PCA con dos variables latentes y se estimaron los límites de control. La Fig. 5.8 muestra la evolución temporal de I_C (Ec. 5.24) y de sus dos estadísticos componentes (Ecs. 5.22 y 5.23) normalizados. En $I_C(k)$ se puede detectar cada anomalía simulada y a través de sus componentes se puede discriminar claramente sólo la última anomalía del resto. Esto confirma las equivalencias presentadas para detección de anomalías y las diferencias en sus capacidades diagnósticas. Comparando la amplitud de $I_{CT}(k)$ (basado en PLSR) con la de $I_C(k)$ (basado en PCA) en los puntos con alarmas se muestra que existe una leve diferencia en las anomalías 1, 2 y 3 principalmente, lo cual se debe a las diferencias de escalas entre las proyecciones, pero esto no afecta el resultado final con una capacidad de detección equivalente.

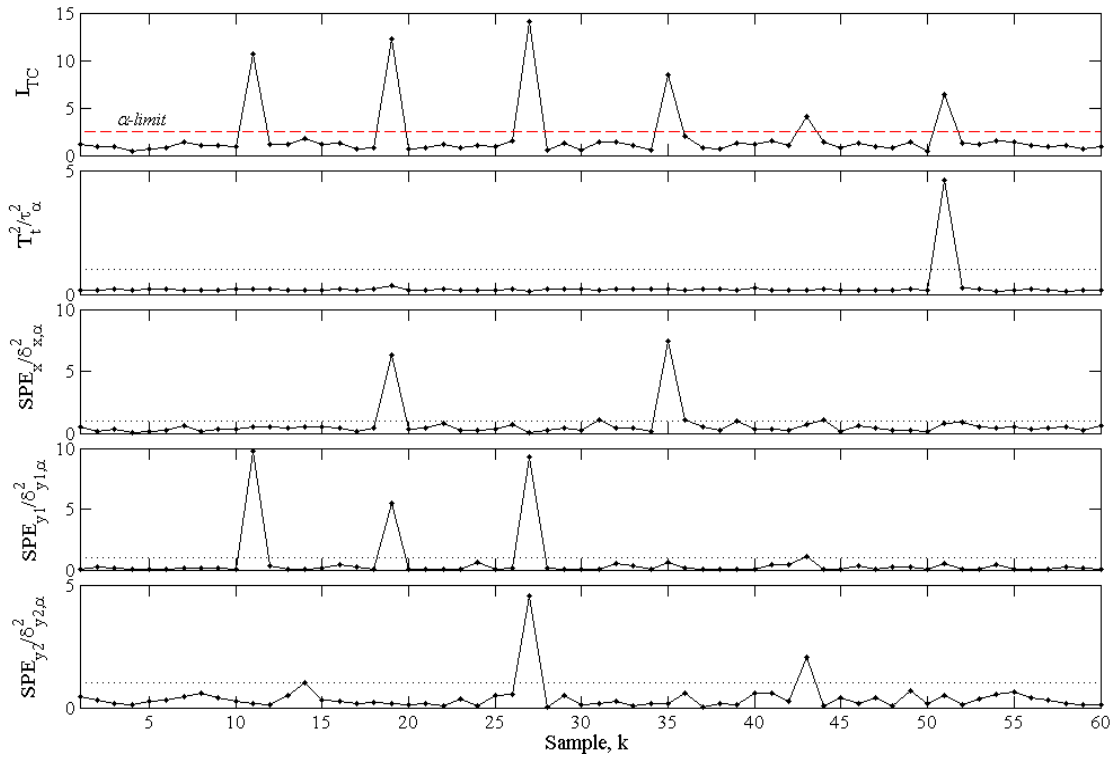


Figura 5.7: Evolución temporal del índice combinado I_{TC} (basado en PLSR) y de sus estadísticos componentes.

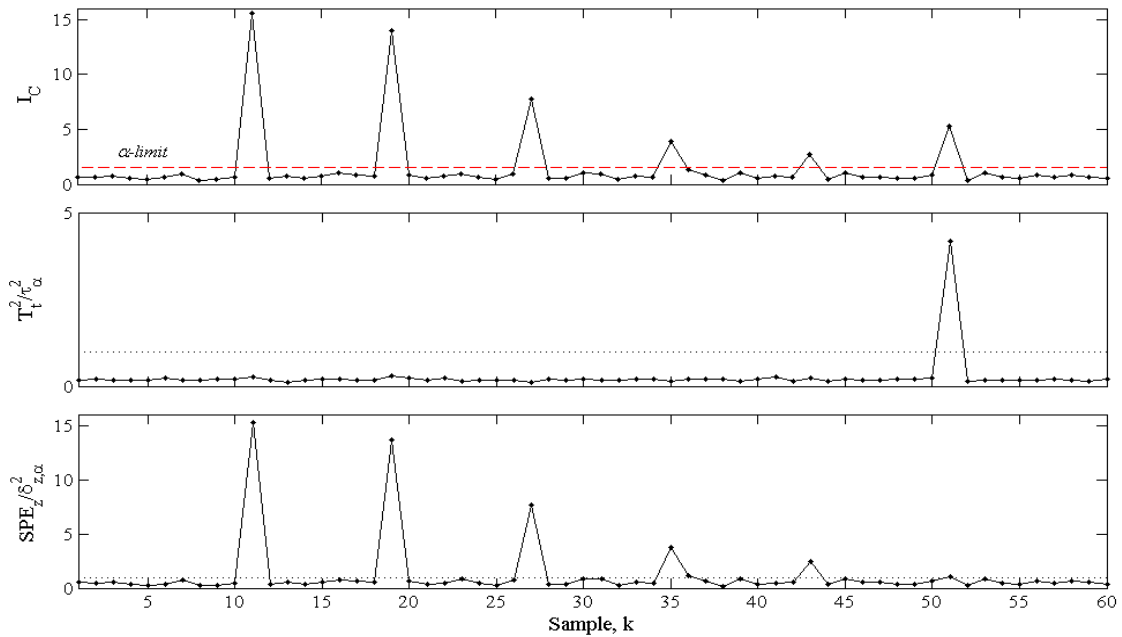


Figura 5.8: Evolución temporal del índice combinado I_C (basado en PCA) y de sus estadísticos componentes, durante las mismas 6 fallas simuladas anteriormente.

En particular, el análisis de las contribuciones PLSR en la anomalía 1 y 6 son de utilidad, dado que informan la relación causal modificada y las variables desplazadas de la zona normal, respectivamente. Lo cual no es posible discernir desde el análisis de contribuciones PCA al estadístico SPE_z .

5.5 Factores de similitud

Los factores de similitud son medidas que cuantifican el grado relativo de semejanza entre conjuntos de datos diferentes. El factor de similitud PCA (Krzanowski, 1979) provee una caracterización útil del grado de similitud de dos conjuntos de datos multivariados \mathbf{Z}_i y \mathbf{Z}_j , cuantificando esa similitud. Los conjuntos de datos se consideran similares, si el factor excede un límite especificado o valor de umbral. En esta sección, primero se define un nuevo factor de similitud PCA, y luego mediante las equivalencias encontradas con PLSR, se deriva un nuevo factor de similitud PLSR a partir del basado en PCA. Esta propuesta permitirá comparar más naturalmente dispersiones multivariadas que provengan de diferentes muestras de un mismo proceso.

La Fig. 5.9 muestra dos conjuntos de datos \mathbf{Z}_1 y \mathbf{Z}_2 con dimensión dos, incluidos en sus respectivos elipsoides de control. Es natural intuir que estas dos dispersiones multivariadas serán similares, si también lo son sus elipsoides de control. Comparar dos elipsoides equivale a comparar sus semiejes (en dirección y magnitud). Para comparar estos dos conjuntos de datos multivariados es natural definir un factor de similitud desde el enfoque PCA, y luego, de ser necesario puede ser extendido al caso PLSR el cual considera que existe una relación causal entre las variables z_i .

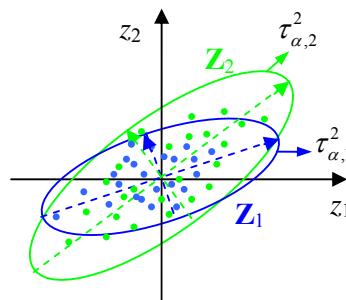


Figura 5.9: Dos muestras (o conjuntos) de datos bivariados ($\mathbf{z} \in \mathbb{R}^2$) junto con sus elipses de control.

Para definir un factor de similitud PCA se considera la región bajo control de cada conjunto de datos, con sus varianzas capturadas y límite de control estimado. La prueba (de hipótesis) T^2 de Hotelling basada en el modelo PCA, $\mathbf{P}_{z,i} = [p_{k,a}]$ ($(p+m \times A)$), establece que una observación $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{p+m}$ pertenece a la población del conjunto de datos i si:

$$\begin{aligned} \frac{T_i^2}{\tau_{\alpha,i}^2} &= \left\| \frac{1}{\tau_{\alpha,i}} \mathbf{R}_{z,i}^{-1/2} \mathbf{z} \right\|^2 = \left\| \frac{1}{\tau_{\alpha,i}} (\mathbf{\Lambda}_i^{-1/2} \mathbf{P}'_{z,i}) \mathbf{z} \right\|^2 = \left[(\tau_{\alpha,i}^{-1} \mathbf{\Lambda}_i^{-1/2} \mathbf{P}'_{z,i}) \mathbf{z} \right]' \left[(\tau_{\alpha,i}^{-1} \mathbf{\Lambda}_i^{-1/2} \mathbf{P}'_{z,i}) \mathbf{z} \right] \\ &= \left(\sum_{a=1}^A \frac{1}{\tau_{\alpha,i} \sqrt{\lambda_a}} p_{1,a} z_1 + \cdots + \sum_{a=1}^A \frac{1}{\tau_{\alpha,i} \sqrt{\lambda_a}} p_{p+m,a} z_{p+m} \right)^2 < 1 \end{aligned} \quad (5.48)$$

donde $\mathbf{R}_{z,i} = \mathbf{P}_{z,i} \mathbf{\Lambda}_i \mathbf{P}'_{z,i}$ es la matriz de correlación y $\tau_{\alpha,i}^2$ es el límite de control estimado. La Ec. (5.48) representa el interior de un elipsoide de control y el término $\mathbf{M}'_i = \tau_{\alpha,i}^{-1} \mathbf{\Lambda}_i^{-1/2} \mathbf{P}'_{z,i}$ determina su forma y orientación, conteniendo todos sus vectores semiejes (ver Fig. 5.9). Los parámetros de \mathbf{M}_i ($(p+m) \times A$) se determinan mediante ajuste basado en PCA. En consecuencia, se puede comparar dos conjuntos de datos \mathbf{Z}_i y \mathbf{Z}_j contrastando sus respectivos elipsoides de control determinados por \mathbf{M}_i y \mathbf{M}_j , respectivamente. La propuesta aquí es hacerlo a través del siguiente factor de similitud:

$$SF_{PCA}(i, j) = \frac{\text{trace}(\mathbf{M}'_i \mathbf{M}_j \mathbf{M}'_j \mathbf{M}_i)}{\text{trace}(\tau_{\alpha,i}^{-2} \mathbf{\Lambda}_i^{-1} \mathbf{\Lambda}_j^{-1} \tau_{\alpha,j}^{-2})} \quad (5.49)$$

donde $\mathbf{M}'_j = \tau_{\alpha,j}^{-1} \mathbf{\Lambda}_j^{-1/2} \mathbf{P}'_{z,j}$. Este factor SF_{PCA} resulta convenientemente acotado entre cero (para modelos completamente distintos) y uno (para modelos idénticos), debido al término incluido en el denominador (Ec. 5.49). Para la interpretación geométrica de SF_{PCA} considere la siguiente ecuación (Krzanowski, 1979):

$$\text{trace}(\mathbf{P}'_{z,i} \mathbf{P}_{z,j} \mathbf{P}'_{z,j} \mathbf{P}_{z,i}) = \sum_{a=1}^A \sum_{b=1}^A \cos^2 \theta_{ab}, \quad (5.50)$$

donde $\cos \theta_{ab}$ es el elemento- ab de $\mathbf{P}'_{z,i} \mathbf{P}_{z,j}$, con $\mathbf{P}_{z,j}$ (Ec. 5.50) formado por los A vectores componentes principales (ortonormales). Por lo tanto, SF_{PCA} (Ec. 5.49) es la suma de los productos internos al cuadrado entre cada uno de los A semiejes del elipsoide que contiene a \mathbf{Z}_i , $(\tau_{\alpha,i} \sqrt{\lambda_a})^{-1} \mathbf{p}_a$, y cada uno de los A semiejes que caracterizan a \mathbf{Z}_j (ver Fig. 5.9).

Para generalizar el factor de similitud PCA al caso PLSR, se parte de la equivalencia entre los estadísticos T^2 de Hotelling asociados a cada método. Como el T^2 de PCA es igual al de PLSR, al remplazar la expresión del T^2 (Ec. 5.48) por la del T^2 basado en PLSR de

$(\mathbf{X}_i, \mathbf{Y}_i)$, se generaliza el factor de similitud al caso PLSR. El T^2 considerado en las Ecs. (5.48-5.50) para PCA está dado por la Ec. (5.21) y para PLSR por la Ec. (5.10a), es decir:

$T_i^2 = \left\| \left(\mathbf{\Lambda}^{-1/2} \mathbf{R}' \right) \mathbf{x} \right\|^2$. En este último caso, las columnas de \mathbf{R} no poseen norma unitaria. En consecuencia, se agrega una matriz diagonal para que el factor de similitud PLSR siga acotado entre 0 y 1, de la siguiente manera:

$$SF_{PLSR}(i, j) = \frac{\text{trace}(\mathbf{N}'_i \mathbf{N}_j \mathbf{N}'_j \mathbf{N}_i)}{\text{trace}(\tau_{\alpha,i}^{-2} \mathbf{\Lambda}_i^{-1} \mathbf{D}_i \mathbf{D}_j \mathbf{\Lambda}_j^{-1} \tau_{\alpha,j}^{-2})}, \quad (5.51)$$

donde $\mathbf{N}'_i = \tau_{\alpha,i}^{-1} \mathbf{\Lambda}_i^{-1/2} \mathbf{R}'_i$ y $\mathbf{D}_i = \text{diag}(\|\mathbf{r}_1\|^2 \dots \|\mathbf{r}_A\|^2)$ con \mathbf{r}_a la a -ésima columna de \mathbf{R}_i . Este nuevo factor de similitud PLSR (Ec. 5.51) es capaz de cuantificar el grado de semejanza entre dos modelos PLSR diferentes. El SF_{PLSR} constituye una mejora a los factores de similitud PLSR existentes, ya que este es formalmente derivado y su definición pone más énfasis en las direcciones latentes que capturan la mayor parte de la varianza presente en los modelos PLSR.

A fin de ilustrar la aplicabilidad del nuevo factor de similitud PLSR presentado, se comparan muestras de 20 observaciones. La muestra histórica posee observaciones del proceso normal, mientras que las muestras de prueba se recolectaron durante anomalías, las cuales se listan en la Tabla 5.2. La Tabla 5.2 muestra el SF_{PLSR} entre el conjunto de datos de referencia y el conjunto anormal (con uno de los ocho cambios simulados). Los cambios del proceso se simularon modificando algunos de sus parámetros (Ec. 5.47). Los cuatro últimos cambios en la Tabla 5.2 (que no están explícitos) se describen a continuación:

$$-\mathbf{p}_{2m} = (\mathbf{p}_2 + d\mathbf{p}_2) \|\mathbf{p}_2 + d\mathbf{p}_2\|^{-1} \text{ con } d\mathbf{p}_2 = [0 \ 3 \ 0 \ 0 \ -2 \ 0.5 \ -1]'$$

$$-\mathbf{P}_m = (\mathbf{P} + [d\mathbf{p}_1 \ d\mathbf{p}_2]) \text{diag}(\left[\|\mathbf{p}_1 + d\mathbf{p}_1\|^{-1} \ \|\mathbf{p}_2 + d\mathbf{p}_2\|^{-1} \right]), \text{ con } d\mathbf{p}_1 = [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ -1]'$$

$$-\mathbf{Q}_m = (\mathbf{Q} + [d\mathbf{q}_1 \ d\mathbf{q}_2]) \text{diag}(\left[\|\mathbf{q}_1 + d\mathbf{q}_1\|^{-1} \ \|\mathbf{q}_2 + d\mathbf{q}_2\|^{-1} \right]), \text{ con } d\mathbf{q}_1 = [1 \ 3 \ 0 \ 3 \ -2]'$$

$$d\mathbf{q}_2 = [4 \ 0 \ 0 \ 1 \ -2]'$$

$$-\left\{ (t_1^m, t_2^m) \right\}_{1..4} = \{(1,1), (1,3), (3,7), (5,7)\}$$

Los casos 2 y 8 de la Tabla 5.2 corresponden a cambios de variabilidades siguiendo la estructura de correlación modelada con desviaciones dentro del elipsoide de control, por lo tanto, producen valores de SF_{PLSR} cercanos a uno. En el caso 4 (Tabla 5.2) se percibe una similitud disminuida. Los casos 5 y 6 de la Tabla 5.2 corresponden a cambios de correlaciones entre las variables predictoras. El SF_{PLSR} identifica eficazmente el patrón que

más se aleja del histórico, correspondiente al caso 6. Los resultados obtenidos muestran la precisión del factor de similitud PLSR para detectar cambios del proceso al contrastar sus patrones, aunque es poco sensible para detectar cambios de las correlaciones entre las variables de respuesta, \mathbf{Q} (ver casos 2, 3 y 7 en Tabla 5.2).

Tabla 5.2: Factor de similitud PLSR para cada caso.

Cambio del proceso	1) $\mathbf{t}^0 \rightarrow 2\mathbf{t}^0$	2) $\mathbf{B}_0 \rightarrow 2\mathbf{B}_0$	3) $\boldsymbol{\gamma} \rightarrow 10\boldsymbol{\gamma}$	4) $\boldsymbol{\xi} \rightarrow 10\boldsymbol{\xi}$
SF_{PLSR}	0.9993	0.9990	0.9977	0.9213
Cambio del proceso	5) $\mathbf{p}_2 \rightarrow \mathbf{p}_{2m}$	6) $\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P}_m$	7) $\mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{Q}_m$	8) $\mathbf{t}^0 \rightarrow \mathbf{t}^m$
SF_{PLSR}	0.9339	0.5226	0.9988	0.9805

El factor de similitud PLSR empleado no percibe los cambios del proceso que afectan a las variables de respuesta o a la relación predictor-respuesta (ver casos 2, 3 y 7 en Tabla 5.2). Esto se explica por la composición del SF_{PLSR} (Ec. 5.51), la cual hace que sea esperable que un cambio de ganancia (caso 2), una degradación de la relación interna (caso 3) o un cambio de correlaciones entre las variables de respuesta (caso 7), no sean percibidos como patrones anormales. Para poder percibir cambios de este tipo a través de un factor de similitud se debe agregar en su formulación la parte del modelo PLSR correspondiente a la respuesta. Esto sugiere considerar un índice combinado total I_{TC} (Ec. 5.11) y a partir de éste, derivar un factor de similitud PLSR más completo siguiendo la misma metodología. Bajo este razonamiento se define el elipsoide de control como

$$\frac{I_{TC}}{I_\alpha} = \left\| \frac{1}{\sqrt{I_\alpha}} \boldsymbol{\Phi}_{PLSR}^{1/2} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} \right\|^2 < 1, \quad (5.52)$$

de donde resulta el siguiente factor de similitud PLSR “completo”:

$$CSF_{PLSR}(i, j) = \frac{\text{trace}(\mathbf{N}'_i \mathbf{N}_j \mathbf{N}'_j \mathbf{N}_i)}{\text{trace}(\mathbf{D}_i \mathbf{D}_j)}, \quad (5.53)$$

y donde $\mathbf{N}'_i = I_{\alpha,i}^{-1/2} \boldsymbol{\Phi}_{PLSR,i}^{1/2}$. Las escalas $\mathbf{D}_i = \text{diag}(\|\mathbf{n}_1\|^2 \cdots \|\mathbf{n}_{m+p}\|^2)$ de $\mathbf{N}_i = [\mathbf{n}_1 \cdots \mathbf{n}_{m+p}]$ en el denominador implican que el factor esté acotado entre 0 y 1. Efectivamente, utilizando este factor más completo se perciben sensiblemente los patrones anormales correspondientes a los casos 2, 3 y 7.

5.6 Conclusiones

Se ha encontrado que si se considera $\mathbf{Z} = [\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$ como el conjunto de datos a modelar, entonces PCA tiende a modelar las relaciones causales \mathbf{X} - \mathbf{Y} como correlaciones entre las variables. Consecuentemente, se presentó una equivalencia entre los modelos latentes basados en PCA de $\mathbf{Z} = [\mathbf{Y} \ \mathbf{X}]$ y PLSR entre \mathbf{X} e \mathbf{Y} , por medio de la cual se puede generalizar desde un método hacia el otro, cualquier variante definida en uno sólo de ellos.

En consecuencia, el monitoreo de un proceso que posee variables de entrada y de respuesta con colinealidades se puede realizar mediante un modelo basado en PCA (que no diferencia respuestas de entradas) o mediante un modelo PLSR (el cual considera relaciones causales). A diferencia del PCA, un modelo PLSR se acerca más a la estructura intrínseca del proceso, ya que permite identificar y eliminar algunas variables predictoras (o de entrada) no deseadas del grupo de variables originales preseleccionadas (por ejemplo, aquellas que interfieren en el modelo de regresión). Además, en PLSR el error de predicción se separa en tres términos, por lo que la región bajo control de su índice combinado es más ajustada que la del índice combinado de PCA, reduciendo así la tasa de error de detección esperada. Respecto al diagnóstico, el índice combinado de PLSR posee más estadísticos componentes que se relacionan a diferentes características de un proceso y dependen específicamente de las variables de respuesta, o de entrada, o de la interrelación entre ellas, lo cual ayuda a discriminar los diferentes tipos de anomalías. Por ejemplo, un alto SPE_{y1} indica una ruptura de la relación causa-efecto, incrementando la descripción de la anomalía. Por lo tanto, la estrategia de monitoreo PLSR posee un poder diagnóstico mucho mayor que la basada en PCA.

Para el caso en que las variables de respuesta no son medibles en línea, se mostró que se puede implementar una estrategia de monitoreo inferencial en base a un modelo PLSR, debido a la equivalencia existente entre un estadístico PLSR de entrada (medible en línea) con respecto a uno de respuesta.

También se mostró que para el caso en que todas las variables son medibles en línea, que a pesar de que los modelos latentes son equivalentes, es conveniente utilizar el método PLSR del Cap. 3 antes que el PCA para monitorear un proceso, dado que el PLSR discrimina una mayor cantidad de anomalías.

Respondiendo a los resultados anteriores, se define aquí un factor de similitud PCA entre dos conjuntos de datos multivariados y a también se deriva un factor de similitud PLSR mediante las equivalencias encontradas. El factor de similitud PCA propuesto se

diferencia del desarrollado por Johannesmeyer (1999) en que incluye el límite de control global de cada elipsoide $\tau_{\alpha,i}^2$, por lo cual considera como referencia el volumen del elipsoide de cada muestra/conjunto de datos (es decir, su variabilidad global). En particular, el nuevo factor de similitud PLSR considera la variabilidad global además de la variabilidad en las direcciones principales respecto al propuesto por Gunther et al. (2008).

De acuerdo con la comparación realizada en este capítulo, PLSR brinda más beneficios que PCA, entre los cuales se menciona: i) selección óptima del grupo de variables relacionadas (modelo de regresión sin variables interferencias), ii) medidas específicas de error de modelado, iii) mayor capacidad para diagnosticar el tipo de anomalía permitiendo reconocer una gran variedad, iv) predicción multivariada más precisa, y v) mayor capacidad para implementar monitoreo inferencial. Aunque el principal resultado ha sido mostrar que ambos métodos pueden ser equivalentes según la forma en la cual se elija el grupo de variables que intervienen, cada aplicación puede requerir de uno u otro método (PCA o PLSR) dependiendo de las variantes que posean.

El que se pueda obtener un modelo a partir del otro en base a las equivalencias presentadas, abre un camino para poder generalizar conceptos de un método hacia el otro.

Capítulo 6

Monitoreo de procesos fuertemente no-lineales basado en kernel PLS

Resumen

Originalmente, el método de regresión por mínimos cuadrados parciales *kernel* (KPLS) se utilizó para calibrar “soft-sensors” que predicen variables de calidad en procesos no-lineales. En este capítulo se utilizarán los conceptos teóricos de dicho método para una función diferente, a saber: el monitoreo de procesos fuertemente no-lineales. La idea principal consiste en utilizar la descomposición que implícitamente realiza KPLS de los vectores de mediciones de entrada y respuesta, para el desarrollo de nuevos estadísticos útiles tanto para la detección como para el diagnóstico de fallas. En lo referente al diagnóstico, éste se complementa con el análisis pormenorizado de cada una de las contribuciones de la descomposición, lo que permite determinar fallas localizadas de los sensores del proceso. La eficacia del método propuesto se probó mediante un ejemplo de simulación extraído de la literatura.

6.1 Introducción

La necesidad de contar con un modelo que asocie mediciones (datos) de entrada con mediciones de respuestas obtenidas en línea, en un proceso complejo, constituye un problema que atrae una atención creciente. Recientemente, KPLS (Kernel Partial Least Squares) se ha convertido en un poderoso método para encontrar estructuras multivariadas no-lineales, principalmente porque puede dar cuenta, satisfactoriamente, de fuertes correlaciones no-lineales implícitas en los datos. Más concretamente, KPLS es un método de regresión prometedor para enfrentar problemas no-lineales, porque puede calcular eficientemente los coeficientes de regresión en el espacio de alta dimensión - al que son mapeados los datos para dar cuenta, de forma lineal, de la no-linealidad del proceso - por medio de la función kernel no-lineal. Por tanto, KPLS es un método eficiente para estimar y predecir variables de calidad en procesos fuertemente no-lineales, pues sólo requiere de cálculos de álgebra lineal, los que terminan siendo casi tan simples como los utilizados en los métodos de proyección lineal multivariada, y pueden además manejar una amplia gama de no-linealidades debido a su habilidad para usar diferentes funciones kernel. Los

resultados de la aplicación, resumidos en un ejemplo sencillo, muestran que el método propuesto puede efectivamente captar la relación no-lineal entre las variables de un proceso.

La detección de anomalías propuesta, por otro lado, hace uso de los llamados índices de detección de fallas basados en modelo. Una falla se detecta cuando uno de estos índices es mayor a su límite de control o cuando un único índice que los combina a todos ellos, es mayor a su límite. Una vez que una falla es detectada, es necesario diagnosticar su causa. Cuando se considera un proceso fuertemente no-lineal, un modelo PLSR lineal podría no ser lo suficientemente preciso para monitorearlo. La similitud entre PCA y PLSR mostrada en el Cap. 4, motivan la búsqueda de una estrategia de monitoreo basada en KPLS dado que actualmente existen sólo estrategias de monitoreo no-lineal basadas en Kernel PCA (Alcala y Qin, 2010).

El capítulo se organiza de la siguiente manera. En la Sección 6.2 se introduce el método de regresión basado en KPLS. Luego, en la Sección 6.3, se obtiene la descomposición implícita en el método (por KPLS). A continuación, en la Sección 6.4 se utilizan las principales propiedades geométricas de esta descomposición para diseñar una estrategia de monitoreo no-lineal empleando nuevos índices de detección de anomalías que actúan en los subespacios resultantes de la descomposición, lo cual permite diagnosticar el tipo de anomalía. También se derivan nuevas contribuciones que permitan identificar fallas localizadas en los sensores del proceso en estudio. El esquema para detección y diagnóstico propuesto se prueba en la Sección 6.5, utilizando un proceso multivariado no-lineal tomado de la literatura. En dicha simulación se introducen diferentes anomalías, de modo de poder observar claramente el desempeño de la estrategia propuesta. Por último, en la Sección 6.6, se presentan las conclusiones del capítulo.

6.2 Regresión Kernel PLS

El método KPLS consiste en mapear los datos (vectores) de entrada a un espacio de alta dimensión, donde se puede obtener un modelo de regresión lineal que relaciona los datos del espacio de alta dimensión con los datos de salida del espacio respuesta. Este modelo induce, siempre en forma implícita, una descomposición del espacio de alta dimensión en un espacio latente de baja dimensión (o subespacio modelo) y otro espacio residual, siendo el primer subespacio el dominio efectivo en el que se buscará un modelo de regresión lineal.

Como es habitual en los métodos basados en datos, primero se debe reunir un conjunto de N muestras del vector predictor (o de entrada), $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$, con $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^m$ y el conjunto apareado de las respectivas N muestras del vector respuesta, $\{\mathbf{y}_i\}_{i=1}^N$, con $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}^p$, lo cual se llama conjunto de datos para identificación (IDS). Una vez que estos datos son recolectados, el método KPLS mapea los vectores \mathbf{x}_i , desde \mathbb{R}^m a un espacio de alta-dimensión \mathbb{R}^c (con $c \gg m$), donde un modelo de regresión lineal basado en PLSR puede ser creado para relacionar los vectores en \mathbb{R}^c con los vectores \mathbf{y}_i en \mathbb{R}^p . De esta manera, un modelo latente puede ser formulado en \mathbb{R}^c , a fin de extender PLSR lineal a kernel-PLS no-lineal (Rosipal y Trejo, 2001). La transformación no-lineal que mapea vectores desde \mathbb{R}^m hasta \mathbb{R}^c , no se realiza por medio de una función no-lineal explícita $\boldsymbol{\varphi}(\cdot): \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^c$, sino por medio de una función kernel $k(\cdot, \cdot)$ seleccionada para calcular los siguientes productos internos:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)' \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_j), \quad (6.1)$$

para $i = 1 \cdots N$ y $j = 1 \cdots N$.

Es decir, donde se halle un producto interno $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)' \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_j)$ su valor se estima por medio de la función $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$. Nótese que a través de este truco de sustitución kernel (Rosipal y Trejo, 2001), se puede evitar tanto la realización explícita de mapeos no-lineales, como el cómputo de productos internos en el espacio de alta-dimensión. Además, como se conoce y se verá más adelante, el método de regresión KPLS sólo necesita productos internos para realizar la regresión. Ahora, a partir de la Ec. (6.1) se obtiene la matriz *Gram Kernel*, $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, la cual se define de la siguiente manera:

$$\mathbf{K} = \boldsymbol{\Phi} \boldsymbol{\Phi}', \quad \boldsymbol{\Phi} = [\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_1) \cdots \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_N)]'. \quad (6.2)$$

Los elementos de esta matriz (Ec. 6.2) son los productos internos cruzados entre todos los vectores mapeados $\{\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$.

Como en el método PLSR, se asume aquí un modelo KPLS no-lineal con media cero. Para centrar los datos mapeados en el espacio de alta-dimensión \mathbb{R}^c , la matriz \mathbf{K} debe ser sustituida por la matriz centrada $\bar{\mathbf{K}}$ ($N \times N$), dada por (Rosipal y Trejo, 2001):

$$\bar{\mathbf{K}} = \bar{\boldsymbol{\Phi}} \bar{\boldsymbol{\Phi}}' = \mathbf{K} - \mathbf{K}\mathbf{E} - \mathbf{E}\mathbf{K} + \mathbf{E}\mathbf{K}\mathbf{E} = (\mathbf{I} - \mathbf{E})\mathbf{K}(\mathbf{I} - \mathbf{E}), \quad (6.3)$$

donde \mathbf{E} ($N \times N$) es una matriz con todos sus elementos iguales a $1/N$, y donde $\bar{\mathbf{K}}$ y $\bar{\Phi}$ son las versiones centradas de \mathbf{K} y Φ , respectivamente. Cada vector mapeado centrado está dado por:

$$\bar{\varphi}(\mathbf{x}_i) = \varphi(\mathbf{x}_i) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \varphi(\mathbf{x}_j) = \varphi(\mathbf{x}_i) - \Phi' \mathbf{e}, \quad (6.4)$$

donde \mathbf{e} ($N \times 1$) es un vector con todos sus elementos iguales a $1/N$. La función kernel centrada $\bar{k}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \bar{\varphi}(\mathbf{x}_i)' \bar{\varphi}(\mathbf{x}_j)$ corresponde al elemento ij de $\bar{\mathbf{K}}$.

Ahora, a partir de las matrices de datos centrados $\bar{\mathbf{K}}$ ($N \times N$) y $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N]'$ ($N \times p$), se deriva el algoritmo de entrenamiento KPLS como una secuencia de pasos NIPALS modificados, de la siguiente manera (Rosipal y Trejo, 2001):

Primero, inicializar el algoritmo fijando $a=1$ y $\bar{\mathbf{K}}_1 = \bar{\mathbf{K}}$, $\mathbf{Y}_1 = \mathbf{Y}$. A continuación:

1. Inicializar el vector \mathbf{u}_a ($N \times 1$) de observaciones de una variable latente de \mathbf{Y}_a como la columna de máxima varianza de \mathbf{Y}_a .
2. Calcular el vector \mathbf{t}_a ($N \times 1$) de observaciones de una variable latente de $\bar{\Phi}_a$ como:

$$\mathbf{t}_a = \bar{\mathbf{K}}_a \mathbf{u}_a \left(\|\bar{\mathbf{K}}_a \mathbf{u}_a\| \right)^{-1}, \text{ donde } \|\mathbf{t}_a\| = 1.$$
3. Regresionar las columnas de \mathbf{Y}_a sobre \mathbf{t}_a : $\mathbf{c}_a = \mathbf{Y}_a' \mathbf{t}_a$, donde \mathbf{c}_a es un vector de pesos.
4. Calcular el nuevo vector de scores \mathbf{u}_a para \mathbf{Y}_a como: $\mathbf{u}_a = \mathbf{Y}_a \mathbf{c}_a \left(\|\mathbf{Y}_a \mathbf{c}_a\| \right)^{-1}$, donde $\|\mathbf{u}_a\| = 1$.
5. Repetir los pasos 2-4 hasta que la convergencia de \mathbf{t}_a .
6. Deflacionar las matrices: $\bar{\mathbf{K}}_{a+1} = (\mathbf{I} - \mathbf{t}_a \mathbf{t}_a')$ $\bar{\mathbf{K}}_a (\mathbf{I} - \mathbf{t}_a \mathbf{t}_a')$, $\mathbf{Y}_{a+1} = \mathbf{Y}_a - \mathbf{t}_a \mathbf{t}_a' \mathbf{Y}_a$,
7. Fijar $a=a+1$ y volver al paso 1. Detener cuando $a > A$, siendo A el número de variables latentes seleccionado en el espacio de alta-dimensión \mathbb{R}^c .

La selección de A se determina mediante la supervisión de la deflación sólo de \mathbf{Y}_a , dado que la deflación de $\bar{\mathbf{K}}_a$ no es apreciable claramente por sus no linealidades. Una vez más, como en PLSR lineal, la predicción sobre datos de entrenamiento tiene la siguiente forma (Rosipal y Trejo, 2001):

$$\hat{\mathbf{Y}} = \bar{\Phi} \mathbf{B}_{PLS} = \underbrace{\bar{\Phi} \bar{\Phi}' \mathbf{U}}_{\mathbf{R}} \left(\mathbf{T}' \bar{\mathbf{K}} \mathbf{U} \right)^{-1} \mathbf{T}' \mathbf{Y} = \bar{\mathbf{K}} \underbrace{\mathbf{U} \left(\mathbf{T}' \bar{\mathbf{K}} \mathbf{U} \right)^{-1} \mathbf{T}'}_{\mathbf{V}} \mathbf{Y} = \mathbf{T} \underbrace{\mathbf{T}' \mathbf{Y}}_{\mathbf{C}'} = \mathbf{T} \mathbf{C}', \quad (6.5)$$

donde las matrices $\mathbf{T}=[\mathbf{t}_1 \dots \mathbf{t}_A]$, $\mathbf{U}=[\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_A]$ y $\mathbf{C}=[\mathbf{c}_1 \dots \mathbf{c}_A]$ son ortogonales por columnas. Téngase en cuenta que la matriz de coeficientes de regresión \mathbf{B}_{PLS} existe, pero nunca es calculada por el algoritmo KPLS, ya que la sustitución kernel evita la necesidad de un cálculo explícito.

La igualdad en la Ec. (6.5) muestra que las respuestas (o salidas) se pueden obtener a partir de los productos internos de los vectores mapeados. Así, para una nueva observación \mathbf{x} del vector predictor, el vector respuesta correspondiente será estimado por:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{B}_{PLS} \bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) = \mathbf{Y}' \mathbf{T} \left[\mathbf{U} (\mathbf{T}' \bar{\mathbf{K}} \mathbf{U})^{-1} \right]' \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \mathbf{C} \mathbf{V}' \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (6.6)$$

donde $\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \left[\bar{k}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}) \dots \bar{k}(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}) \right]' (N \times 1)$ es el vector de funciones kernel centradas y evaluadas en los pares $(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)$ con $j=1 \dots N$. En adelante, para simplificar notación se omitirá el argumento (\mathbf{x}) de la función vectorial $\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$, salvo que sea meritorio remarcarlo.

A partir de la Ec. (6.3), resulta que este vector está dado por:

$$\bar{\mathbf{k}} = \bar{\boldsymbol{\Phi}} \bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) = \mathbf{k} - \mathbf{K} \mathbf{e} - \mathbf{E} \mathbf{k} + \mathbf{E} \mathbf{K} \mathbf{e} = (\mathbf{I} - \mathbf{E}) [\mathbf{k} - \mathbf{K} \mathbf{e}] \quad (6.7)$$

donde $\mathbf{k} = \left[k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}) \dots k(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}) \right]' (N \times 1)$ es el vector de funciones kernels no-centradas correspondiente a la nueva observación \mathbf{x} . Cada uno de los elementos de $\bar{\mathbf{k}}$ (Ec. 6.7) se calcula como sigue:

$$\begin{aligned} \bar{k}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) &= k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{n=1}^N k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_n) \\ &= k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) - \mathbf{k}'(\mathbf{x}_j) \mathbf{e} - \mathbf{k}'(\mathbf{x}) \mathbf{e} + \mathbf{e}' \mathbf{K} \mathbf{e} \end{aligned} \quad (6.8)$$

Ahora, se centra la atención en los vectores latentes $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^A$. De la Ec. (6.5), se deduce que para una nueva observación \mathbf{x} , este vector estará dado por:

$$\mathbf{t}' = [t_1 \dots t_A]' = \bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})' \mathbf{R} = \bar{\mathbf{k}}' \mathbf{V}, \quad \mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \dots \mathbf{v}_A] \quad (6.9)$$

donde $\mathbf{R} = [\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_A]$ es la matriz de componentes PLSR, dada por $\mathbf{r}_a = \sum_{j=1}^N \alpha_j \bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}_j)$ con

$\alpha_j \in \mathbb{R}$. Nótese que cada variable latente t_a ($a=1 \dots A$) se puede estimar independientemente, es decir: $t_a = \bar{\mathbf{k}}' \mathbf{v}_a$. En consecuencia, la predicción puede ser calculada a partir de \mathbf{t} , como (ver Ec. 6.5):

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{C} \mathbf{t}. \quad (6.10)$$

Ahora bien, dada una nueva lectura del vector predictor \mathbf{x} en unidades originales, se predice el vector respuesta \mathbf{y} (también en unidades originales) por:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{D}_y \mathbf{C} \mathbf{V}' \bar{\mathbf{k}} (\mathbf{D}_x^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})) + \bar{\mathbf{y}}, \quad (6.11)$$

donde las desviaciones estándares muestrales $\mathbf{D}_x = \text{diag}(\hat{\sigma}_{x_1} \dots \hat{\sigma}_{x_m})$, $\mathbf{D}_y = \text{diag}(\hat{\sigma}_{y_1} \dots \hat{\sigma}_{y_p})$, y los promedios $\bar{\mathbf{x}}$, $\bar{\mathbf{y}}$, son determinados antes de iniciar el procedimiento de entrenamiento. La Ec. (6.11) involucra el caso más general donde las variables originales son escaladas además de centradas.

6.3 Modelado basado en KPLS para monitoreo de procesos

El algoritmo KPLS induce un modelo externo, uno interno y uno de regresión. De acuerdo con el modelo PLSR lineal (ver Cap. 3) se asume que existe una relación interna lineal entre las observaciones \mathbf{t}_a y las de \mathbf{u}_a (proyecciones de \mathbf{Y}_a sobre la a -ésima dirección latente), y como además el algoritmo KPLS escala \mathbf{t}_a y \mathbf{u}_a a norma unitaria (forzando así una proporción unitaria entre ambos), resulta que:

$$\mathbf{U} = \mathbf{T} + \tilde{\mathbf{U}}, \quad (6.12)$$

donde la a -ésima columna de la matriz residual $\tilde{\mathbf{U}}$ posee los residuos de la regresión $\mathbf{t}_a - \mathbf{u}_a$. El modelo externo inducido descompone $\bar{\mathbf{\Phi}}$ e \mathbf{Y} en observaciones de variables latentes (\mathbf{t}_a y \mathbf{u}_a), vectores peso (\mathbf{p}_a y \mathbf{c}_a), y matrices de errores residuales ($\tilde{\mathbf{\Phi}}$ e $\tilde{\mathbf{Y}}_2$), de la siguiente manera:

$$\bar{\mathbf{\Phi}} = \mathbf{T} \mathbf{P}' + \tilde{\mathbf{\Phi}}, \quad (6.13)$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{U} \mathbf{C}' + \tilde{\mathbf{Y}}_2, \quad (6.14)$$

donde $\mathbf{P} = \bar{\mathbf{\Phi}}' \mathbf{T} = \bar{\mathbf{\Phi}}' \bar{\mathbf{K}} \mathbf{V}$ y $\mathbf{C} = \mathbf{Y}' \mathbf{T} = \mathbf{Y}' \bar{\mathbf{K}} \mathbf{V}$. Por medio de \mathbf{R} (la pseudo-inversa de \mathbf{P}' , es decir: $\mathbf{P}' \mathbf{R} = \mathbf{R}' \mathbf{P} = \mathbf{I}$) y \mathbf{D} (la pseudo-inversa de \mathbf{C}' , es decir: $\mathbf{C}' \mathbf{D} = \mathbf{D}' \mathbf{C} = \mathbf{I}$); se obtiene directamente las predicciones de \mathbf{T} y \mathbf{U} a partir de $\bar{\mathbf{\Phi}}$ e \mathbf{Y} (ver Ecs. 6.13 y 6.14) respectivamente, como:

$$\mathbf{T} = \bar{\mathbf{\Phi}} \mathbf{R}, \quad (6.15)$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{Y} \mathbf{D}, \quad (6.16)$$

debido a que el espacio fila de $\tilde{\mathbf{\Phi}}$ ($\tilde{\mathbf{Y}}_2$) pertenece al espacio nulo de \mathbf{R} (\mathbf{D}), y por tanto $\tilde{\mathbf{\Phi}} \mathbf{R} = \mathbf{0}$ ($\tilde{\mathbf{Y}}_2 \mathbf{D} = \mathbf{0}$). El modelo externo (Ecs. 6.13-6.14) relaciona variables latentes con mediciones de las respuestas y de las entradas mapeadas, mientras que el modelo interno

(Ec. 6.12) relaciona variables latentes entre si. Combinado ambos modelos se obtiene el siguiente modelo de predicción basado en kernel dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y} &= \bar{\mathbf{K}}\mathbf{V}\mathbf{C}' + \tilde{\mathbf{U}}\mathbf{C}' + \tilde{\mathbf{Y}}_2 = \hat{\mathbf{Y}} + \tilde{\mathbf{Y}}_1 + \tilde{\mathbf{Y}}_2, \\ \mathbf{Y} &= \mathbf{T}\mathbf{C}' + \tilde{\mathbf{Y}}_1 + \tilde{\mathbf{Y}}_2 \end{aligned} \quad (6.17)$$

donde $\tilde{\mathbf{Y}}_2 = \mathbf{Y} - \mathbf{Y}\mathbf{D}\mathbf{C}'$ e $\tilde{\mathbf{Y}}_1 = \mathbf{Y}\mathbf{D}\mathbf{C}' - \hat{\mathbf{Y}}$ son las matrices de errores proyección y de regresión, respectivamente.

Un punto interesante del procedimiento propuesto es que las matrices \mathbf{R} y \mathbf{P} nunca serán estimadas (de lo contrario no sería práctico). Se definieron estas matrices sólo para desarrollar la demostración que sigue, a fin de encontrar estadísticos en base al truco de sustitución kernel.

6.3.1 Descomposición subyacente de los espacios predictor mapeado y respuesta

Después de sintetizar un modelo KPLS “bajo control”, los nuevos vectores medidos $\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^c$ e $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$ se descomponen (subyacentemente) como se describe a continuación.

Dado un nuevo vector mapeado $\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})$ (asociado a las mediciones \mathbf{x}) se puede descomponer como:

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) &= \hat{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) + \tilde{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) \quad \in \mathbb{R}^c \\ \hat{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) &= \mathbf{P}\mathbf{R}'\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) = \mathbf{P}\mathbf{t} \quad \in W_M \equiv \text{Span}\{\mathbf{P}\} \subseteq \mathbb{R}^c \\ \tilde{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) &= (\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}')\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) \quad \in W_R \equiv \text{Span}\{\mathbf{V}\}^\perp \subseteq \mathbb{R}^c \end{aligned} \quad (6.18)$$

donde $\mathbf{P}\mathbf{R}'$ $\{(\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}')\}$ es el proyector sobre el subespacio modelo W_M (W_R) a lo largo del subespacio residuo W_R (W_M), denotando con $^\perp$ al complemento ortogonal del subespacio. Nótese que el rango de \mathbf{P} es W_M y el espacio nulo es W_R . Por lo tanto, las proyecciones oblicuas que aparecen en la Ec. (6.18), descomponen el espacio de alta-dimensión \mathbb{R}^c , en dos subespacios complementarios W_M y W_R , es decir $W_M \oplus W_R \equiv \mathbb{R}^c$ (Godoy et al., 2011).

Por otro lado, si se generalizan los resultados del Cap. 3 para el caso KPLS, el espacio de variables respuesta ($\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$) también se puede descomponer (por KPLS) en dos subespacios oblicuos complementarios, como:

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= \hat{\mathbf{y}}^* + \tilde{\mathbf{y}}_2 \quad \in \mathbb{R}^p \\ \hat{\mathbf{y}}^* &= \mathbf{C}\mathbf{D}'\mathbf{y} \quad \in S_{MY} \equiv \text{Span}\{\mathbf{C}\} \subseteq \mathbb{R}^p, \\ \tilde{\mathbf{y}}_2 &= (\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{D}')\mathbf{y} \quad \in S_{RY} \equiv \text{Span}\{\mathbf{D}\}^\perp \subseteq \mathbb{R}^p \end{aligned} \quad (6.19)$$

Además, ambos subespacios modelo W_M y S_{MY} se interrelacionan de acuerdo a:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{y}}^* &= \hat{\mathbf{y}} + \tilde{\mathbf{y}}_1, \\ \hat{\mathbf{y}} &= \mathbf{CV}'\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \in S_{MY}, \\ \tilde{\mathbf{y}}_1 &= \hat{\mathbf{y}}^* - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{CD}'\mathbf{y} - \mathbf{CV}'\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \in S_{MY}, \end{aligned} \quad (6.20)$$

donde $\tilde{\mathbf{y}}_1$ es el error de la transformación lineal $\hat{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{\mathbf{y}}^*$ e $\hat{\mathbf{y}}$ denota la parte predecible de $\hat{\mathbf{y}}^*$ a partir de $\hat{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{x})$.

La Fig. 6.1 ilustra parte de la descomposición KPLS subyacente, la cual descompone cada vector \mathbf{x} de mediciones mapeado al espacio de alta dimensión y las proyecciones del vector mapeado se comparan con sus respectivos límites de control. Las siluetas grises representan las zonas correspondientes al conjunto bajo control, el cual fue recolectado considerando que las variables respuestas se hallen dentro de la zona de operación normal del proceso.

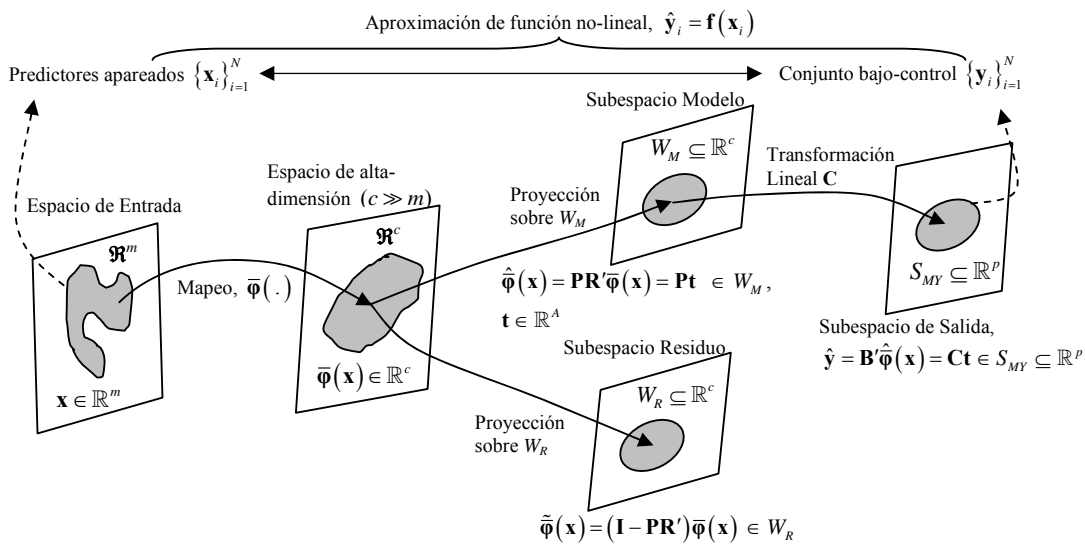


Figura 6.1: Estructura intrínseca de KPLS mostrando la descomposición subyacente del espacio de entrada con sus relaciones y regiones de control.

6.4 Monitoreo de proceso en base a KPLS

Como en el método KPCA, la idea clave de KPLS es mapear los espacios de medición \mathbb{R}^m y \mathbb{R}^p al espacio de características \mathbb{R}^c , para que los datos en este espacio estén linealmente distribuidos (Alcala y Qin, 2010). Por lo tanto, es natural intentar realizar detección de fallas definiendo estadísticos en el espacio de características \mathbb{R}^c . Para

monitorear los subespacios modelo y residual simultáneamente, se propone utilizar el mismo concepto del índice combinado utilizado en el Cap. 3. Tal índice es una combinación de los estadísticos sobre cada subespacio normalizados por sus límites de control. Respecto al diagnóstico, se generaliza la estrategia desarrollada en el Cap. 3 al caso KPLS a fin de determinar el tipo de anomalía y mediante análisis de contribuciones poder identificar fallas localizadas en sensores.

6.4.1 Índices para detección de fallas

La estrategia de monitoreo de proceso multivariable utiliza índices estadísticos asociados a los diferentes subespacios con fines de detección de anomalías. En base a un modelo KPLS *bajo-control* calibrado con datos históricos, se puede analizar cualquier comportamiento actual del proceso, proyectando las mediciones actuales $\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})$ e \mathbf{y} sobre cada subespacio (W_M , W_R , S_{MY} , y S_{RY}) y midiendo sus desviaciones para compararlas con sus límites de control. En cada uno de estos subespacios, es posible medir distancias en forma independiente. Sin embargo, puesto que no hay fórmulas explícitas disponibles para las proyecciones de la Ec. (6.18), se debe encontrar nuevos estadísticos utilizando la sustitución kernel para obtener distancias estimables de los vectores proyectados.

Por lo tanto, para detectar un cambio significativo en W_M , se define el siguiente estadístico T^2 de Hotelling de \mathbf{t} como:

$$T_t^2 = \mathbf{t}'\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\mathbf{t} = (N-1)\bar{\mathbf{k}}'\mathbf{V}\mathbf{V}'\bar{\mathbf{k}}, \quad (6.21)$$

donde $\boldsymbol{\Lambda} = (N-1)^{-1}\mathbf{T}'\mathbf{T} = (N-1)^{-1}\mathbf{I}$.

Cuando se produce un nuevo evento especial (originalmente no considerado por el modelo KPLS bajo-control), la nueva observación mapeada $\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})$ se moverá fuera de W_M hacia W_R . El error de predicción al cuadrado de $\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})$ (SPE_F), o distancia desde el modelo en W_M se define como:

$$\begin{aligned} SPE_F &= \|\tilde{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})\|^2 = \|\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) - \hat{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})\|^2 \\ &= \bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})' \bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) - 2\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})' \hat{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) + \hat{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})' \hat{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) \\ &= \bar{k}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2\bar{\mathbf{k}}'\bar{\mathbf{K}}\mathbf{V}\mathbf{t} + \mathbf{t}'\mathbf{T}'\bar{\mathbf{K}}\mathbf{T}\mathbf{t} \end{aligned} \quad (6.22)$$

donde $\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})' \hat{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})' \mathbf{P}\mathbf{t} = \bar{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})' \bar{\boldsymbol{\Phi}}'\bar{\mathbf{K}}\mathbf{V}\mathbf{t} = \bar{\mathbf{k}}'\bar{\mathbf{K}}\mathbf{V}\mathbf{t}$ y

$\hat{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x})' \hat{\boldsymbol{\varphi}}(\mathbf{x}) = \mathbf{t}'\bar{\mathbf{K}}\bar{\boldsymbol{\Phi}}\bar{\boldsymbol{\Phi}}'\bar{\mathbf{K}}\mathbf{V}\mathbf{t} = \mathbf{t}'\mathbf{T}'\bar{\mathbf{K}}\mathbf{T}\mathbf{t}$. Por lo tanto, el SPE_F se puede utilizar para detectar

un cambio en W_R . Cuando el proceso está bajo control, el índice SPE_F representa las fluctuaciones que no pueden ser explicadas por el modelo KPLS.

La distancia desde el modelo de regresión en S_{MY} se define como (ver Cap. 3):

$$SPE_{y_1} = \|\tilde{y}_1\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{CD}' & -\mathbf{CV}' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \bar{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \right\|^2 = \underbrace{\|\mathbf{C}\|^2}_{=1} \|\mathbf{D}'\mathbf{y} - \mathbf{V}'\bar{\mathbf{k}}\|^2 \quad (6.23)$$

$$SPE_{y_1} = \mathbf{y}'\mathbf{DD}'\mathbf{y} - 2\mathbf{y}'\mathbf{DV}'\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{k}}'\mathbf{VV}'\bar{\mathbf{k}}$$

y la distancia desde el modelo en S_{MY} , para detectar cambios en S_{RY} , se define como:

$$SPE_{y_2} = \|\tilde{y}_2\|^2 = \|(\mathbf{I} - \mathbf{CD}')\mathbf{y}\|^2 = \mathbf{y}'(\mathbf{I} - \mathbf{CD}')'(\mathbf{I} - \mathbf{CD}')\mathbf{y} \quad (6.24)$$

Con frecuencia, las matrices de correlación $\mathbf{R}_{\hat{\boldsymbol{\phi}}}$ y $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}$ son singulares, porque $\hat{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{x})$ e $\hat{\mathbf{y}}$ poseen variables colineales. En consecuencia, se considera la distancia de Mahalanobis generalizada de $\hat{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{x})$ e $\hat{\mathbf{y}}$, dadas por:

$$D_{\hat{\boldsymbol{\phi}}} = \hat{\boldsymbol{\phi}}'\mathbf{R}_{\hat{\boldsymbol{\phi}}}^{-}\hat{\boldsymbol{\phi}}, \quad (6.25)$$

$$D_{\hat{\mathbf{y}}} = \hat{\mathbf{y}}'\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}^{-}\hat{\mathbf{y}}. \quad (6.26)$$

donde las matrices de correlación están dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}} &= (N-1)^{-1} \hat{\mathbf{Y}}'\hat{\mathbf{Y}} \\ &= \mathbf{C}[(N-1)^{-1}\mathbf{T}'\mathbf{T}]\mathbf{C}' = (N-1)^{-1}\mathbf{CC}' \end{aligned} \quad (6.27)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{\hat{\boldsymbol{\phi}}} &= (N-1)^{-1} \hat{\boldsymbol{\Phi}}'\hat{\boldsymbol{\Phi}} \\ &= (N-1)^{-1} \mathbf{PT}'\mathbf{TP}' = (N-1)^{-1} \mathbf{PP}' \end{aligned} \quad (6.28)$$

Puesto que \mathbf{C} es ortogonal por columnas, la propiedad de la inversa generalizada de una SVD implica que: $\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}^{-} = (\mathbf{C}[(N-1)^{-1}\mathbf{I}]\mathbf{C}')^{-} = (N-1)\mathbf{CC}'$. Luego, reemplazando esta pseudoinversa y la Ec. (6.10) dentro de la Ec. (6.26), resulta la siguiente igualdad:

$$D_{\hat{\mathbf{y}}} = \hat{\mathbf{y}}'\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{y}}}^{-}\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{t}'\mathbf{C}'((N-1)\mathbf{CC}')\mathbf{C}\mathbf{t} = (N-1)\mathbf{t}'\mathbf{t} = T_{\mathbf{t}}^2. \quad (6.29)$$

Del mismo modo, $\mathbf{R}_{\hat{\boldsymbol{\phi}}}^{-} = (N-1)\mathbf{PP}'$ (ver Ec. 6.28). A continuación, resulta que:

$$D_{\hat{\boldsymbol{\phi}}} = \hat{\boldsymbol{\phi}}'[(N-1)\mathbf{PP}']\hat{\boldsymbol{\phi}} = (N-1)\mathbf{t}'\mathbf{t} = T_{\mathbf{t}}^2 = D_{\hat{\mathbf{y}}}. \quad (6.30)$$

Por lo tanto, los estadísticos sobre $\hat{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{x})$, \mathbf{t} o $\hat{\mathbf{y}}$ son equivalentes. Este resultado sugiere que las variables de respuesta y (o de calidad) pueden ser monitoreados a través de un estadístico KPLS sobre las variables predictoras \mathbf{x} (o de entrada).

Debido a esta equivalencia (Ec. 6.30), se propone realizar el monitoreo utilizando sólo cuatro estadísticos KPLS independientes: T_t^2 , SPE_F , SPE_{y1} , y SPE_{y2} , cada uno actuando sobre un subespacio diferente: W_M , W_R , S_{MY} , y S_{RY} , respectivamente; así no se superponen sus medidas de distancia.

En consecuencia, se propone combinar estos estadísticos normalizados por sus respectivos límites de control: τ_α^2 , δ_F^2 , δ_{y1}^2 , $\delta_{y2,\alpha}^2$; en un único índice, dado por:

$$I_{KPLS} = \frac{T_t^2}{\tau_\alpha^2} + \frac{SPE_F}{\delta_F^2} + \frac{SPE_{y1}}{\delta_{y1}^2} + \frac{SPE_{y2}}{\delta_{y2,\alpha}^2} \quad (6.31)$$

6.4.2 Diagnóstico de anomalías por medio de los subespacios con alarmas

Una anomalía es un cambio en las mediciones siguiendo o no la estructura de correlación no-lineal capturada por el modelo KPLS. Si el cambio produce un punto fuera de control, la fuente de la anomalía se puede clasificar como: a) un cambio de operación excesivamente grande respecto a la zona de operación normal, b) un aumento significativo de la variabilidad; c) una alteración de las correlaciones cruzadas, y d) una falla de sensor. Los casos a) y b) implican cambios en las mediciones siguiendo la estructura de correlación modelada, mientras que los casos c) y d) implican cambios en algunas variables que alteran su patrón de correlación con las restantes. De hecho, un comportamiento anormal del proceso implica una desviación de las correlaciones modeladas, aumentando así el valor del estadístico que actúa sobre el subespacio afectado.

Para la clasificación de las anomalías, se analiza el efecto sobre cada subespacio y se toma la Tabla 6.1 como referencia (la cual es una generalización de la utilizada en el Cap. 3). La Tabla 6.1 muestra para cada tipo de anomalía los estadísticos normalizados en cada subespacio que evidenciarán la existencia de tal anomalía. Las filas 1), 2), 3) y 6) de la Tabla 6.1 caracterizan cambios complejos del proceso, mientras que las filas 4) y 5) representan fallas localizadas en sensores.

En resumen, la estrategia de monitoreo propuesta se basa en una descomposición KPLS del espacio de entrada y de salida, la cual clasifica el tipo de anomalía de acuerdo al estadístico que dispara la condición de alarma. Los distintos patrones de estadísticos bajo alarma para cada anomalía (Tabla 6.1) indican que se pueden clasificar, analizando el efecto sobre cada estadístico/subespacio.

Tabla 6.1: Diagnóstico de anomalías en base al patrón de estadísticos componentes con alarmas.

Tipo de Anomalía	Estadístico Normalizado			
	T_t^2/τ^2	SPE_F/δ^2	SPE_{y1}/δ^2	SPE_{y2}/δ^2
1) cambios de ganancias	-	-	++	-
2) cambios de correlaciones en x	-	++	++	-
3) cambios de correlaciones en y	-	-	++	++
4) fallas de sensor en x	-	++	-	-
5) fallas de sensor en y	-	-	-	++
6) cambio excesivo de operación	++	-	-	-
	W_M	W_R	S_{MY}	S_{RY}
	<i>Subespacio en que actúa</i>			

++: valor alto. -: valor insignificante. +/-: valor alto o bajo.

Mediante el análisis de las contribuciones a un estadístico con alarma (Alcalá y Qin, 2011), como SPE_F (o SPE_{y1}), se podrían discriminar cambios de correlaciones no lineales en **x** (o lineales en **y**) frente a fallas de sensores en **x** (o en **y**). A continuación, se proponen nuevas contribuciones a los estadísticos componentes definidos.

6.4.3 Aislación de fallas por medio de contribuciones en cada subespacio

En el Cap. 3 se presentó una estrategia genérica para descomponer cualquier índice cuadrático I^2 en una suma de sus contribuciones, las cuales poseen una forma diferencial, dada de la siguiente manera:

$$I^2(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{x_i}{2} \frac{\partial I^2(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right) \tag{6.32}$$

Por otro lado, los índices T_t^2 , SPE_F y SPE_{y1} son formas cuadráticas del vector de funciones no lineales $\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$, pero no de **x**. Sin embargo, en una vecindad de un \mathbf{x}_0 dado, donde $\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0) = 0$, la aproximación de Taylor de segundo orden es una forma cuadrática de **x** (ver Apéndice 6.A).

Si se asume que se cumple aproximadamente la Ec. (6.32), se puede definir la contribución de la variable x_i a un estadístico normalizado dependiente de $\bar{\mathbf{k}}$, como:

$$cI^2(x_i) = \frac{x_i}{2} \frac{\partial I^2(\mathbf{x})}{\partial x_i} \tag{6.33}$$

donde x_i (y_i) representa la i -ésima variable del vector **x** (**y**) actual. En una función kernel del vector $\bar{\mathbf{k}}$, sólo se presenta una vez x_i como variable (y no dos), dado que los valores

históricos (o de entrenamiento) de esta variable son fijos. La contribución de la variable y_i a un estadístico (Ec. 6.23-6.24) se define como la Ec. (6.33) pero reemplazando y_i por x_i .

Las derivadas parciales respecto a x_i de las Ecs. (6.21-6.23) están dadas por:

$$\frac{\partial T_t^2}{\partial x_i} = (N-1)2\bar{\mathbf{k}}'\mathbf{V}\mathbf{V}'\frac{\partial\bar{\mathbf{k}}}{\partial x_i}, \quad (6.34)$$

$$\frac{\partial SPE_F}{\partial x_i} = -2\mathbf{e}'\frac{\partial\bar{\mathbf{k}}}{\partial x_i} - 4\bar{\mathbf{k}}'\bar{\mathbf{K}}\mathbf{V}\mathbf{V}'\frac{\partial\bar{\mathbf{k}}}{\partial x_i} + 2\bar{\mathbf{k}}'\mathbf{V}\mathbf{T}'\bar{\mathbf{K}}\mathbf{T}\mathbf{V}'\frac{\partial\bar{\mathbf{k}}}{\partial x_i}, \quad (6.35)$$

$$\frac{\partial SPE_{y_1}}{\partial x_i} = -2\mathbf{y}'\mathbf{D}\mathbf{V}'\frac{\partial\bar{\mathbf{k}}}{\partial x_i} + \bar{\mathbf{k}}'\mathbf{V}\mathbf{V}'\frac{\partial\bar{\mathbf{k}}}{\partial x_i}, \quad (6.36)$$

donde $\frac{\partial\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \left[\frac{\partial\bar{k}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x})}{\partial x_i} \dots \frac{\partial\bar{k}(\mathbf{x}_N, \mathbf{x})}{\partial x_i} \right]'$. Cada elemento de este vector está dado por (ver

Ec. 6.8):

$$\frac{\partial\bar{k}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x})}{\partial x_i} = \frac{\partial k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x})}{\partial x_i} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x})}{\partial x_i}, \quad (6.37)$$

donde $\frac{\partial k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x})}{\partial x_i} = \frac{2}{h}(x_{j,i} - x_i)e^{-\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}\|^2/h}$, si se asumió una función kernel de base radial (o

gaussiana) $k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) = \exp(-\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}\|^2/h)$, y denotándose con $x_{j,i}$ al j -ésimo valor fijo de entrenamiento de la variable x_i . Las derivadas parciales respecto a y_i de las Ecs. (6.23-6.24) están dadas por:

$$\frac{\partial SPE_{y_1}}{\partial y_i} = 4\xi'_i\mathbf{D}\mathbf{V}'\mathbf{y} - 2\xi'_i\mathbf{D}\mathbf{V}'\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (6.38)$$

$$\frac{\partial SPE_{y_2}}{\partial y_i} = 2\xi'_i(\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{D}')'(\mathbf{I} - \mathbf{C}\mathbf{D}')\mathbf{y} \quad (6.39)$$

donde $\xi'_i = [0 \dots 1 \dots 0]$ es un vector de ceros salvo en la posición i donde vale uno. Las contribuciones de una variable cualquiera x_i o y_i a uno de los estadísticos normalizados (Ecs. 6.21-6.24) se calculan con la Ec. (6.33), en la cual se reemplaza la respectiva derivada parcial dividida por el respectivo límite τ_α^2 , δ_F^2 , $\delta_{y_1}^2$, o $\delta_{y_2, \alpha}^2$. Las contribuciones dependen del subespacio considerado (W_M , W_R , S_{MY} , o S_{RY}), por lo cual se las denotará como: $cI_{WM}(x_i)$, $cI_{WR}(x_i)$, $cI_{MY}(x_i / y_i)$, $cI_{RY}(y_i)$.

6.5 Estudio de aplicación

6.5.1 Un ejemplo de simulación numérica no-lineal

Un estudio de un caso simulado se utiliza para evaluar el desempeño de la técnica de monitoreo propuesta para una variedad de anomalías. Para entender las descomposiciones implícitas y las estadísticas como herramientas de monitoreo, se simularon diferentes anomalías en un sistema conocido. Se empleó el ejemplo de simulación no-lineal multivariable ideado por Zhang et al. (2008) y Zhao et al. (2006), el cual se define de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}x_1 &= t^2 - t + 1 + \varepsilon_1, \\x_2 &= \sin(t) + \varepsilon_2, \\x_3 &= t^3 + t + \varepsilon_3, \\y &= x_1^2 + x_1 x_2 + 3 \cos(x_3) + \varepsilon_4\end{aligned}$$

donde t se distribuye uniformemente en el intervalo $[-1, 1]$ y ε_i , $i = 1, 2, 3, 4$ son los componentes de ruido uniformemente distribuidos en $[-0.1, 0.1]$. Los datos generados de 300 muestras son segmentados en conjuntos de datos para entrenamiento y para validación. Éstos se ilustran en la Fig. 6.2. Las primeras 200 muestras se seleccionan para entrenamiento, y las posteriores 100 muestras se utilizan como conjunto de datos para validación. Es evidente que las variables de entrada son guiadas por una única variable latente t en este caso. De la Fig. 6.2, se puede ver que la variable de respuesta está no-linealmente correlacionada con las variables de entrada.

En esta aplicación se utiliza un kernel de base radial, $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{h}\right)$.

Cuando se utiliza esta función kernel el valor del parámetro $h=2\sigma^2=0.06$ ($\sigma=0.1732$) tiene una influencia significativa en el desempeño de la predicción por KPLS (Zhang et al., 2008).

El error cuadrático medio (MSE) se utiliza para evaluar el estimador. La Fig. 6.3a muestra el $\%RMSE = 100\sqrt{MSE}$ (error estándar) para cada componente a utilizando los datos de entrenamiento o los datos de prueba (o datos de validación externa). Nótese que $MSE(a)$ se refiere al MSE obtenido cuando el modelo utiliza las primeras a variables latentes para predecir.

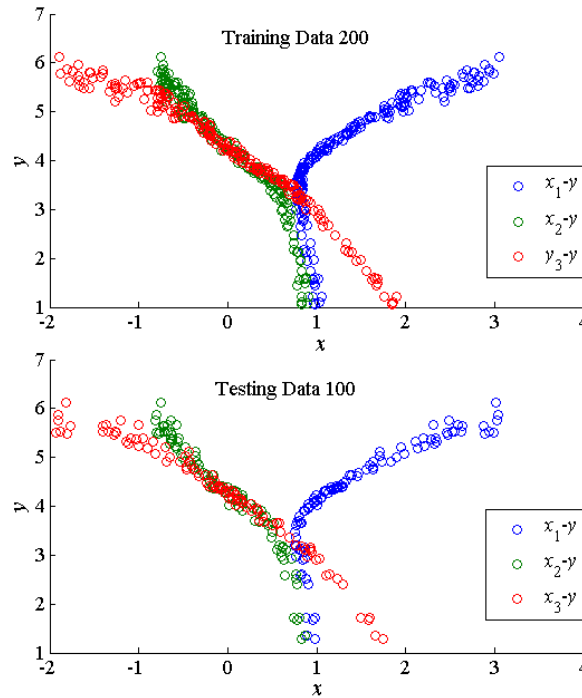


Figura 6.2: Relación entre las entradas (x_1, x_2, x_3) y la respuesta (y).

La selección del número A adecuado de variables latentes que se incluirán en el modelo KPLS es crucial, si se utilizan más variables latentes que las necesarias, un sobre-ajuste (o sobre-entrenamiento) indeseable podría reducir la habilidad predictiva. Se utiliza la regla $R_{0.9}$ de Wold, la cual se puede escribir como $R(a+1) = MSE(a+1)/MSE(a)$. Para valores sucesivos de a , la secuencia se detiene cuando $R(a+1) > 0.9$; y por lo tanto, $A=a$.

Conceptualmente, este criterio establece que una variable latente adicional no será incluida en el modelo KPLS a menos que proporcione una mejora significativa de predicción, y consecuentemente provee el número máximo de componentes que deben incluirse en el modelo. La Fig. 6.3b muestra el cociente anterior $R(a+1)$ frente al número de componentes latentes a para datos de entrenamiento y datos de prueba. El cociente para datos de entrenamiento es mayor que 0.9 en $a+1=12$, por lo tanto, el modelo más parsimonioso corresponde a $A=a=11$ (Zhang et al., 2008). El mismo cociente calculado con datos de prueba es para monitorear el sobreentrenamiento cuando se selecciona un valor fiable de A . La Fig. 6.4 muestra los resultados de predicción de los datos de entrenamiento y de prueba utilizando la Ec. (6.11). La parte superior de la Fig. 6.4 muestra los valores actuales (reales) y predichos de la respuesta, y la parte inferior muestra los errores entre ambos valores.

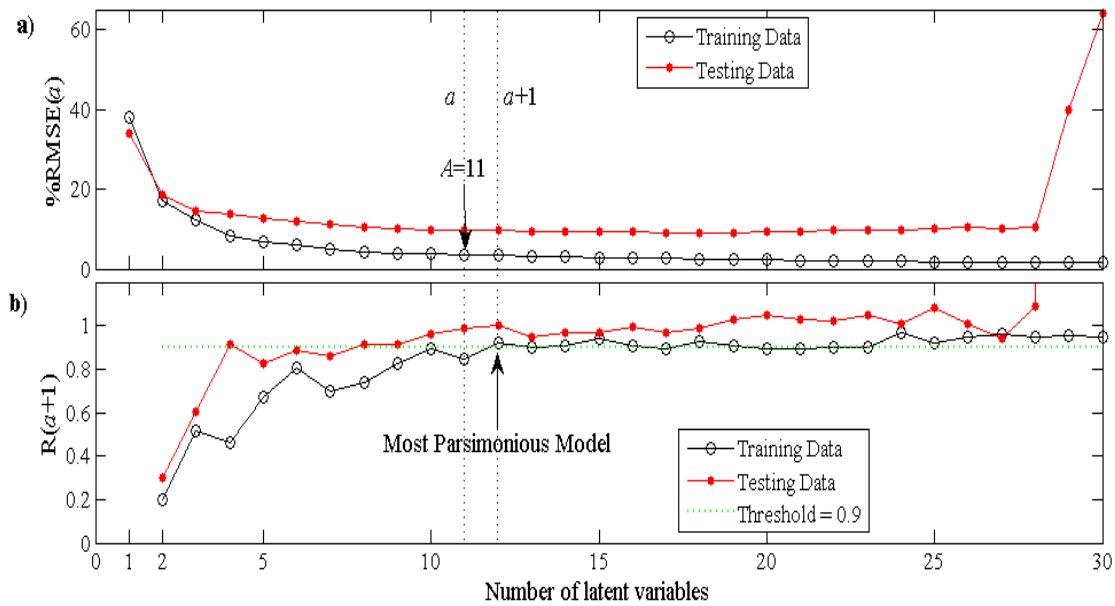


Figura 6.3: Determinación del orden del modelo KPLS. a) varianza del error residual frente al número de variables latentes. b) Tasa de varianzas sucesivas del error residual.

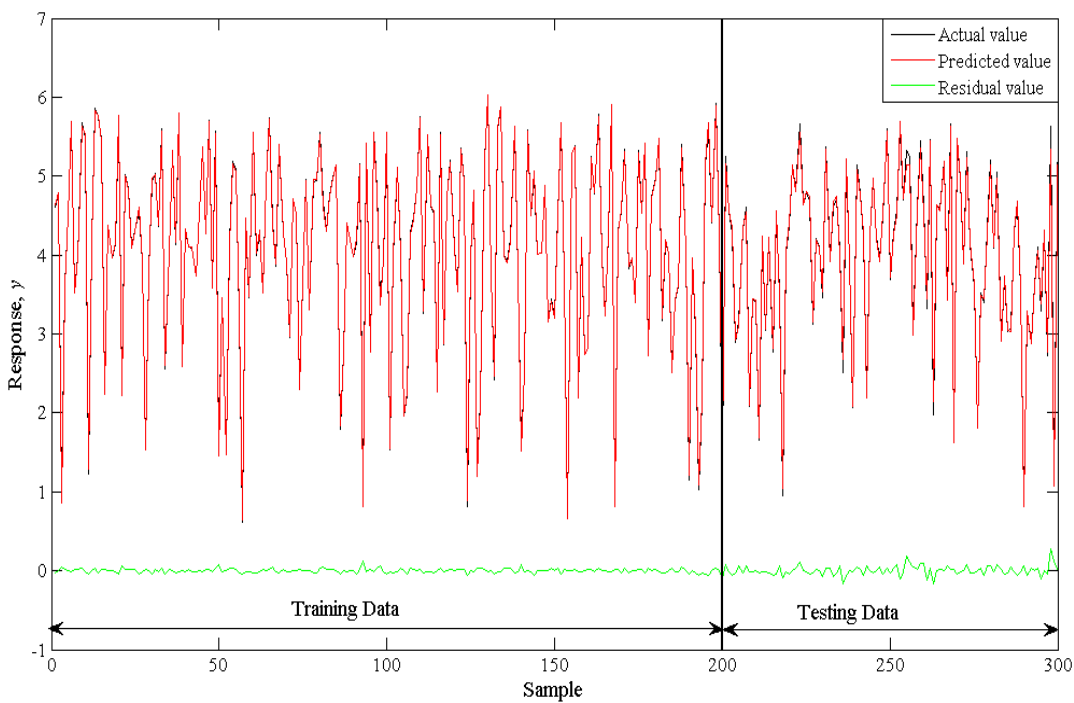
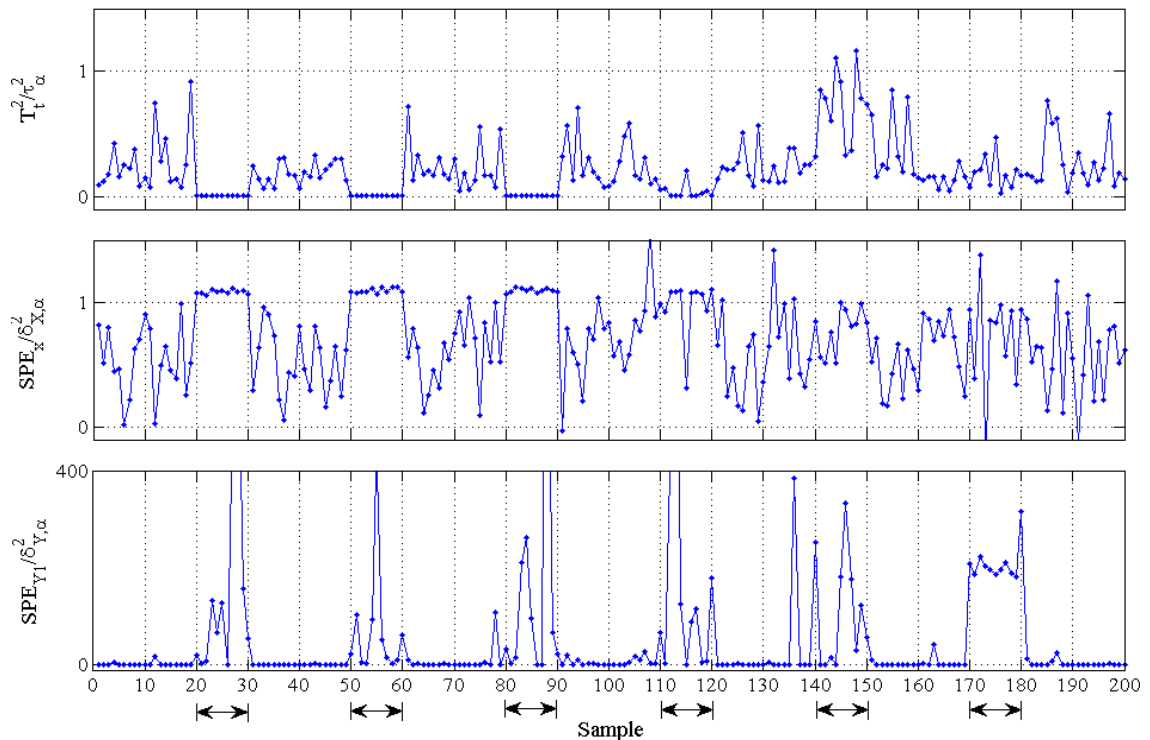


Figura 6.4: Resultados de la predicción a través del modelo KPLS ajustado.

Tabla 6.2: Escenarios de anomalías simuladas.

Tipo de anomalía	Nro. de muestras	Magnitud de la desviación	Contribuciones significativas	Diagnóstico (ver Tabla 6.1)
4	20...30	$dx_1 = -1.5$ (offset)	$cI_{WR}^2(x_1)$	4
4	50...60	$dx_2 = 1.5$ (offset)	$cI_{WR}^2(x_2)$	4
4	80...90	$dx_3 = 1.5$ (offset)	$cI_{WR}^2(x_3)$	4
2	110...120	$x_1 = 3t^3 - t + 1 + \varepsilon_1$	$cI_{WR}^2(x_1), cI_{MY}^2(x_1), cI_{MY}^2(y)$	2
6	140...150	$t = 1.01$ (fijo)	$cI_{WM}^2(x_1), cI_{WM}^2(x_2), cI_{WM}^2(x_3)$	6
5	170...180	$dy = 1.5$ (offset)	$cI_{MY}^2(y)$	5

**Figura 6.5:** Evolución temporal de cada estadístico KPLS normalizado.

Se simularon seis anomalías para evaluar la estrategia propuesta, las cuales se describen en la Tabla 6.2. La Tabla 6.1 muestra el diagnóstico esperado en cada anomalía simulada. La Fig. 6.5 muestra la evolución temporal de cada estadístico normalizado por su límite de control, en donde claramente se manifiestan las seis anomalías simuladas, y es posible detectar y clasificar cada tipo simulada, sobre la base de la información dada en la Tabla

6.1. Puesto que $y \in \mathfrak{R}^1$ (es decir, no es multivariable), $SPE_{y2} \equiv 0$ y $SPE_{y1} = \|y - \hat{y}\|^2$. Por lo tanto, la falla del sensor de y se producirá en SPE_{y1} (ver Tabla 6.1). Los resultados de la simulación muestran que la estrategia desarrollada es capaz de identificar las anomalías atribuidas a fallas de sensores, cambios del proceso, alteraciones del punto de operación y perturbaciones. El modelo que soporta este enfoque de monitoreo se basa en datos históricos de funcionamiento normal. Por lo tanto, la recolección de datos del proceso constituye un paso fundamental en el desarrollo de modelos empíricos para monitoreo.

6.6 Conclusiones

Muchos sistemas de monitoreo de procesos multivariables podrían basarse en un modelo KPLS no-lineal que represente condiciones bajo-control (o de funcionamiento normal). Al igual que lo tradicional, una desviación significativa de las variables de sus trayectorias esperadas sirve para detección y diagnóstico de comportamientos anormales del proceso. Los resultados de un ejemplo de simulación no lineal muestra que la estrategia propuesta es eficaz y precisa.

Sin embargo, estos resultados son preliminares, aplicaciones más realistas son necesarias para una validación fiable del método y para aprender más aspectos prácticos sobre la estrategia no-lineal propuesta, como sobre la determinación adecuada de los parámetros de la función kernel empleada.

Apéndice 6.A

La aproximación de Taylor de segundo orden de T_t^2 (Ec. 6.20) alrededor de \mathbf{x}_0 , está dada por:

$$T_t^2(\mathbf{x}) = T_t^2(\mathbf{x}_0) + \nabla T_t^2(\mathbf{x}_0)'(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)' \nabla^2 T_t^2(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0). \quad (6.A1)$$

Para un \mathbf{x}_0 dado tal que $\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0) = 0$, la aproximación resulta igual a:

$$T_t^2(\mathbf{x}) \cong (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)' \nabla^2 T_t^2(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \quad (6.A2)$$

donde $\nabla^2 T_t^2(\mathbf{x}_0) = \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)'}{\partial x_i} \mathbf{V} \mathbf{V}' \frac{\partial \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)}{\partial x_j} \right] \quad (m \times m)$. Los tres términos de la Ec. (6.A1)

están dados por:

$$\begin{aligned}
T_t^2(\mathbf{x}_0) &= \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)' \mathbf{V}\mathbf{V}'\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0) = 0, \\
\nabla T_t^2(\mathbf{x}_0)' &= 2\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)' \mathbf{V}\mathbf{V}' \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)}{\partial x_1} \dots \frac{\partial \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)}{\partial x_m} \right] = 0, \\
\nabla^2 T_t^2(\mathbf{x}_0) &= \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial T_t^2(\mathbf{x}_0)}{\partial x_j} \right) \right] = \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(2\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x})' \mathbf{V}\mathbf{V}' \frac{\partial \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial x_j} \right) \Bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \right] \\
&= \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)'}{\partial x_i} \mathbf{V}\mathbf{V}' \frac{\partial \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)}{\partial x_j} + 2\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)' \mathbf{V}\mathbf{V}' \frac{\partial^2 \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j} \right] = \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)'}{\partial x_i} \mathbf{V}\mathbf{V}' \frac{\partial \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_0)}{\partial x_j} \right],
\end{aligned}$$

La aproximación en la Ec. (6.A2) se alejará de T_t^2 cuanto mayor sea $\|\mathbf{x}\|$, aunque en forma no-homogénea según las direcciones, debido a la forma no-lineal de $\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$. Sin embargo, para fines de diagnóstico, esto puede ser de utilidad para determinar que variables son las responsables de una falla.

Capítulo 7

Conclusiones y perspectivas futuras

7.1 Conclusiones

Si bien las técnicas estadísticas multivaridas han sido estudiadas por décadas y se han realizado innumerables aplicaciones industriales, sus implementaciones han tenido fundamentalmente pautas intuitivas. Muchas publicaciones apoyan sus conclusiones en resultados numéricos sin llegar a esclarecer formalmente a que se deben algunos de ellos. Solo muy recientemente aparecieron algunos trabajos que han intentado dar un marco formal y unificador a estas técnicas, por ejemplo Gang et al. (2010) y Alcalá et al. (2011), que tratan de utilizar mayor rigurosidad matemática.

En esta tesis, en general, se intentó contribuir desde una óptica formal a mejorar la implementación de técnicas estadísticas multivariadas en la industria, logrando a nuestro entender algunos avances en diferentes tópicos:

- 1- se presentó una base formal que permitió desarrollar una guía metodológica completa para sintetizar y evaluar sensores algorítmicos basados en PLSR, que luego se extendió a Kernel PLS. En esta guía se proponen los pasos a seguir frente a una aplicación y se concluye que el algoritmo PLS-NIPALS con deflación de ambas matrices de datos es la mejor opción para obtener modelos confiables. Este camino logra reducir la gran cantidad de alternativas disponibles en la literatura especializada. Además, la metodología propuesta es aplicable para sintetizar tanto un sensor algorítmico como un sistema de monitoreo de procesos.
- 2- se presentó un modelado PLSR que permite encontrar nuevas descomposiciones y estadísticos específicos, en particular aquel que mide la distancia al modelo causal.
- 3- se esclarecieron las diferencias de utilizar un método basado en PCA frente a otro basado en PLSR para modelar procesos e implementar técnicas de monitoreo de procesos multivariados.
- 4- se desarrolló una técnica completa y eficaz de monitoreo de procesos multivariados, con sustento formal, para detección y diagnóstico de anomalías, e identificación de variables responsables, aplicable a procesos continuos, semi-continuos y batch, ya

sea con comportamiento instantáneo o con memoria, abarcando así varias variantes en una sola técnica.

- 5- se logró comprender claramente las formulaciones propuestas analizando ejemplos de simulación ad-hoc, lo cual permitió generalizar conceptos para su posterior aplicación a procesos reales, como un reactor continuo controlado, en donde se evaluó no sólo el desempeño del reactor en sí, sino también el de sus controladores.
- 6- se propuso una técnica muy simple de monitoreo multivariado de calidad que considera todas las especificaciones en un único índice, y se extendió al caso de monitoreo inferencial. Dicha técnica puede ser de interés en la industria porque es simple, completa, y permite implementar un control inferencial sin los riesgos de las lecturas defectuosas.
- 7- como consecuencia de que la metodología para el desarrollo PLSR presentado logra más beneficios que PCA, se piensa que la técnica aquí propuesta podría tener algún impacto, ya sea en su aplicación directa o en nuevos desarrollos que tomen como base los conceptos aquí presentados.
- 8- se desarrolló una técnica completa y eficaz para monitoreo de procesos fuertemente no-lineales en base a KPLS, la cual detecta una anomalía, diagnostica su tipo e identifica las variables responsables.
- 9- la efectividad mostrada en las operaciones simuladas tanto con PLSR como con KPLS permite pensar en la potencial aplicación a sistemas reales de producción.

Entre los resultados obtenidos por capítulo se puede destacar:

Capítulo 2. Se propuso un algoritmo específico para calcular los parámetros del modelo PLSR entre varias alternativas disponibles. Esta selección se basó en que: i) es más preciso para respuesta multivariada; ii) posee mayor capacidad predictiva o correlación predictoras – respuestas; iii) permite detectar variables predictoras que pueden interferir en el modelo de regresión, a fin de elegir la estructura óptima. A continuación, se presentó una metodología completa para desarrollar y evaluar sensores algorítmicos basados en PLSR. Se presentaron pautas metodológicas para recolección de datos, modelado, ajuste, análisis de estructura, selección del orden, pos-verificaciones, validaciones, etc.. que principalmente permitieron identificar la estructura intrínseca del proceso (variables vinculadas y orden del sistema) y evaluar por partes. En definitiva, se desarrolló una guía

específica de pasos a seguir para sintetizar en forma sistemática el mejor sensor algorítmico para usar con una amplia variedad de estructuras de datos o tipos de procesos.

Capítulo 3. Se propuso un modelado PLSR más completo y mediante el cual se desarrolló una descomposición de los espacios de medición. Una perspectiva geométrica permitió comprender la naturaleza de cada proyección y su relación al subespacio en que actúa. Esto impulsó el desarrollo de nuevos estadísticos y una técnica de diagnóstico capaz de clasificar hasta seis tipos de anomalías. Esta última se realizó en base a un modelo de anomalías. Con lo anterior se desarrollo una técnica de monitoreo y se aplicó primero a un proceso ad-hoc instantáneo y luego a otro ad-hoc con memoria para verificar su desempeño y facilitar la comprensión de su uso. Por último, se evaluó la aplicación de esta técnica de detección y diagnóstico simulando la operación de un reactor continuo con sistema de control incluido, demostrando su efectividad y potencialidad para otras aplicaciones más complejas.

Capítulo 4. En la operación de procesos de polimerización resulta de interés poder determinar un punto de operación fuera de especificaciones, el ingreso inesperado de perturbaciones en las alimentaciones y la falla de algún sensor, sin la necesidad de realizar mediciones de laboratorio. Para esta situación, donde las principales variables de respuesta (o calidad) no son medibles en línea, se presentó una técnica de monitoreo inferencial de procesos capaz de detectar una anomalía, clasificar su tipo e identificar las variables responsables. A fin de monitorear en forma inferencial la calidad multivariada por medio de un único índice combinado se desarrolló un límite de control multivariado modificado por las especificaciones, para que forme parte de este índice de detección. Además, cuando se identifica una falla de sensor (anomalía localizada) se provee una reconstrucción de la lectura defectuosa para proporcionar inferencias más confiables. A través de un ejemplo de simulación ad-hoc se demostró la efectividad de la técnica. Luego, se aplicó al simulador del proceso SBR industrial, en donde además se identificó tempranamente el tipo de perturbación en las alimentaciones (caudales molares de reactivos), como por ejemplo cambios en los niveles de pureza. Esta identificación de perturbaciones en las alimentaciones se desarrolló en base a una caracterización PLSR de las entradas.

Capítulo 5. Se comparó el método PLSR propuesto con PCA (método actualmente muy usado). Se hallaron similitudes y diferencias resultando PLSR con más beneficios que

PCA. Cabe destacar que a la fecha no existía un análisis matemático formal que compare ambas metodologías. Los teoremas del Capítulo 3 permitieron esta comparación, la cual resultó a favor de utilizar PLSR frente a PCA en todos los casos, ya sea en procesos continuos, semi-continuos, batch o procesos con variables de calidad no medibles en línea. Se muestra también en forma clara y completa la relación de PLS con PCA, usando el algoritmo PLS-NIPLAS propuesto. Se propuso también un factor de similitud de patrones para comparar datos de corridas batch a fin de realizar control de calidad frente a un batch de referencia.

Capítulo 6. Se propone una estrategia de monitoreo no-lineal basada en KPLS, que se espera resulte de significativa utilidad cuando el proceso a monitorear presente características fuertemente no-lineales. Se estudian también nuevos índices de detección y una técnica para diagnosticar el tipo de falla. Si bien no se ha desarrollado en el texto, el límite multivariado modificado por las especificaciones (presentado en el Capítulo 5) también podría ser incluido en el índice combinado propuesto para KPLS. Además, en este caso, resta desarrollar algún índice que mida la importancia predictiva (con utilidad similar al VIP definido para PLSR). Esto debiera permitir elegir las mejores variables predictoras a partir de un grupo preseleccionado. Con esto último, la metodología KPLS presentada mostraría un símil con la versión PLSR analizada en Capítulos 2 y 3.

Una ventaja clave de los métodos estadísticos aquí estudiados es la transparencia y la unicidad del modelo PLSR y la consiguiente posibilidad de asociar un significado físico a las correlaciones subyacentes, tornándolo intuitivo para los operadores y adecuado para modelos inversos simples que también pueden ser utilizados para fines de control. De esta manera, se ha logrado cierta sinergia de herramientas estadísticas y proveer un marco integrador a estas técnicas.

7.2 Perspectivas de trabajo futuro

MPC es un método de control avanzado muy utilizado en procesos industriales, debido a su capacidad para manejar sistemas multivariantes sujetos a restricciones de entrada y de salida (Camacho y Bordons, 2007). Por otro lado, los sistemas de monitoreo basados en modelos latentes (como PLSR y PCA) son los más aplicados en la industria. La fusión de dos métodos muy utilizados en la industria (PLSR y MPC) en la técnica conocida como

control predictivo basado en modelo de variables latentes (LV-MPC), torna muy atractiva su aplicación industrial. El método LV-MPC implementa la identificación y el control en el espacio de variables latentes facilitando la identificación en el caso datos correlacionados y ruidosos, y reduciendo la complejidad computacional, al resolver en el espacio latente (donde las variables aparecen desacopladas) la optimización sujeta a restricciones. Este método constituye un tema de investigación reciente con claras perspectivas industriales, debido a sus principales ventajas: 1) identificación guiada por los datos con mínimos requerimientos para las señales de excitación (no necesariamente deben ser de tipo excitación persistente, y sólo deben cubrir en forma dispersa el rango de operación), 2) identificación factible para datos mal condicionados (problema frecuente en los procesos de gran escala). El LV-MPC superó el desempeño de un MPC convencional guiado por los datos en términos de complejidad computacional y seguimiento de referencia (Laurí et al., 2010). Sin embargo, estos intentos por desarrollar LV-MPC tienen varios aspectos a ser investigados a fin de afianzar la técnica.

Por lo tanto, las metodologías y conceptos desarrolladas aquí se podrían extender para su aplicación al diseño de la técnica LV-MPC, y a su aplicación a procesos industriales de interés y en el monitoreo de su desempeño.

En particular, las analogías y diferencias encontradas entre PCA y PLSR permitirán futuras comparaciones de las dos versiones de LV-MPC, una con PCA (Golshan et al., 2010) y otra con PLS (Laurí et al., 2010), en diferentes aplicaciones a procesos continuos y semi-continuos, a fin de establecer cuál es la mejor técnica LV-MPC.

El desarrollo de un modelo es, por lejos, el paso más crítico y que más tiempo consume en la implementación de un MPC (Bars et al., 2006). Por lo cual, resulta de interés extender los resultados hallados en identificación de modelos latentes a la etapa respectiva de la técnica LV-MPC, devengando pautas de modelado y ajuste para lograr la mejor predicción de trayectorias futuras.

En Laurí et al. (2010) se propusieron términos en forma empírica para incluir en la función costo y se sintonizaron parámetros para ajustar el controlador, dejando el interrogante de si la formulación posee o no rigurosidad matemática. Es importante notar, que las referencias citadas de LV-MPC hacen recaer principalmente la potencia del método en la etapa de identificación. Resulta entonces de interés revisar la formulación en base a los conceptos aquí desarrollados con el objetivo de mejorarla. Los intentos preliminares por desarrollar LV-MPC tienen varios aspectos a ser mejorados.

El “MPC económico” incluye objetivos económicos (demanda, capacidad de producción, etc.) en la función costo a optimizar además de errores de seguimiento (o tracking). Éste controlador provee mejores prestaciones en grandes transiciones con respeto al objetivo económico que los controladores estándar para *tracking*. Por lo tanto, resulta de interés extender la función de costo del LV-MPC para que incluya objetivos económicos del proceso (típicamente independientes, y frecuentemente contrapuestos, a los objetivos dinámicos habituales), sin perder los beneficios que esta técnica presenta: reducción de complejidad, uso de modelos más confiables, como así también los beneficios propios de la técnica MPC, i.e. garantía de estabilidad, factibilidad y optimalidad.

El amplio rango de operación que presentan algunas plantas acentúa la naturaleza no lineal de sus dinámicas incrementando el grado de incertidumbre respecto al modelo lineal utilizado por el MPC aplicado. A la naturaleza compleja del sistema se le suman las restricciones en su operación, condicionando notablemente el comportamiento del sistema lo cual acentúa aún más su aspecto no lineal. En los capítulos 3 y 6 se ha alcanzado un cierto nivel de abstracción en lo referente a la teoría que subyace en la técnica de monitoreo de sistemas multivariados controlados. Las técnicas desarrolladas basadas en PLSR y KPLS podrían utilizarse para monitorear la condición de un lazo de control MPC o LV-MPC, impidiendo fallas en el sistema de control automático multivariable, o eventualmente detectando la pérdida de fiabilidad, a través de niveles superiores de monitoreo y supervisión. Por lo tanto, resulta interesante desarrollar variaciones de diseño que permitan su aplicación directa al monitoreo del desempeño de control predictivo a procesos industriales, con la garantía de que la estrategia de monitoreo tendrá en cuenta las contingencias típicas de cada tipo de aplicación. En consecuencia, resulta también de interés evaluar el desempeño de dichas técnicas tanto lineales como no-lineales, a fin de establecer las bondades y carencias de cada técnica en función de la aplicación MPC monitoreada.

Estas ideas constituyen la base de futuras tareas de investigación a realizar dentro de la especialidad.

Bibliografía

- Alcala C.F. y Qin S.J., 2009. Reconstruction-based contribution for monitoring. *Automatica* 45, 1593-1600.
- Alcala C.F. y Qin S.J., 2010. Reconstruction-Based Contribution for Process Monitoring with Kernel Principal Component Analysis. *Ind. Eng. Chem. Res* 49, 7849-7857.
- Alcala C.F. y Qin S.J., 2011. Analysis and generalization of fault diagnosis methods for process monitoring. *J. Process Control* 21, 322-330.
- Alford J.S., 2006. Bioprocess control: advances and challenges. *Comput. Chem. Eng.* 30, 1464–1475.
- AlGazzawi A. y Lennox B., 2009. Model predictive control monitoring using statistics. *J. Process Control* 19, 314-327.
- Alvarez C.R., Brandolin A. y Sánchez M.C., 2007. On the variable contributions to the D-statistic. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* 88, 189-196.
- Bars R., Colaneri P., de Souza C.E., Dugard L., Allgöwer F., Kleimenov A., Scherer C. 2006. Theory, algorithms and technology in the design of control system. *Annual Reviews in Control*, 30, 19–30.
- Bishop C.M., 1995. *Neural networks for pattern recognition*. Oxford University Press.
- Bishop C.M., 2006. *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer.
- Bro R., 1996. Multiway calibration: Multilinear PLS. *Journal of Chemometrics*, 10, 47–61.
- Burnham A.J., Viveros R., MacGregor J.F., 1996. Frameworks for Latent Variable Multivariate Regression. *J. Chemom.* 10, 31-45.
- Camacho E.F. y Bordons C., 2007. *Model Predictive Control*. Springer.
- Chen G., McAvoy T., Piovoso M., 1998. A multivariate statistical controller for on-line quality improvement. *Journal of Process Control*. 8, 139–150.
- Chiang L.H., Kotanchek M. E., Kordon A. K., 2004. Fault diagnosis based on Fisher discriminate analysis and support vector machines. *Comp. & Chem. Eng.* 28, 1389-1401.
- Chong I.G. y Jun C.H., 2005. Performance of some variable selection methods when multicollinearity is present. *Chem. Intell. Lab. Syst.* 78, 103-112.
- Cinar A., Palazoglu A., Kayihan F., 2007. *Chemical Process performance evaluation*. CRC Press.

- d'Anjou A., Torrealdea F.J., Leiza J.R., Asua J.M., Arzamendi G., 2003. Model Reduction in Emulsion Polymerization Using Hybrid First-Principles/Artificial Neural Network Models. *Macromol. Theory & Simul.* 12, 42-56.
- Dayal B.S. y MacGregor J.F., 1997a. Improved PLS algorithms. *Journal of Chemometrics*, 11, 73-85.
- Dayal B.S. y MacGregor J.F., 1997b. Recursive exponentially weighted PLS and its applications to adaptive control and prediction. *Journal of Process Control*, 7, 169-179.
- De Assis A.J. y Filho R.M., 2000. Soft Sensors Development for Online Bioreactor State Estimation. *Comput. Chem. Eng.* 24, 1099.
- De Jong S., 1993. SIMPLS: an alternative approach to partial least squares regression. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* 18, 251-263.
- Dimitratos J., Eliçabe G. y Georgakis C., 1994. Control of Emulsion Polymerization Reactors. *AIChE Journal*. 40, 1993-2021.
- Dunia R. y Qin S.J., 1998. Subspace Approach to Multidimensional Identification and Reconstruction Fault. *AIChE Journal*. 44, 1813-1831.
- Eliçabe G. y Meira G., 1988. Estimation and Control in Polymerization Reactors. A Review. *Polym. Eng. and Sci.* 28, 121-135.
- FDA (U.S. Food and Drug Administration), 2004. Guidance for industry PAT: A framework for innovative pharmaceutical development, manufacturing, and quality assurance, Available at <http://www.fda.gov/cder/guidance/6419fnl.pdf>.
- Flores-Cerrillo J. y MacGregor J., 2005. Latent variable MPC for trajectory tracking in batch processes. *J. Process Control*. 15, 651-663.
- Gang L.G., Qin S.J. and Zhou D., 2010. Geometric properties of partial least squares for process monitoring. *Automatica* 46, 204-210.
- Geladi P. y Kowalski B., 1986a. Partial least-squares regression: A tutorial. *Anal. Chim. Acta*, 185, 1-17.
- Geladi P. y Kowalski B., 1986b. An example of 2-block predictive partial-least squares regression with simulated data. *Anal. Chim. Acta*. 185, 19-32.
- Godoy J.L., Minari R.J., Vega J.R., Marchetti J.L., 2009a. Multivariate Statistical Monitoring in an Industrial SBR Process. Part I: Prediction of Quality Variables. RPIC 2009, Rosario-Argentina. Artículo 103 en Anales.

- Godoy J.L., Minari R.J., Vega J.R., Marchetti J.L., 2009b. Multivariate Statistical Monitoring in an Industrial SBR Process. Part II: Fault Detection and Diagnosis. RPIC 2009, Artículo 168 en Anales.
- Godoy J.L., Minari R.J., Vega J.R., Marchetti J.L., 2010. Monitoreo Estadístico Multivariado Inferencial. XXII° Congreso Argentino de Control Automático (AADECA 2010), Septiembre de 2010, Bs. As.-Arg.
- Godoy J.L., Minari R.J., Vega J.R., Marchetti J.L., 2011a. Multivariate Statistical Monitoring of an Industrial SBR Process. Soft-sensor for Production and Rubber Quality. *Chem. Intell. Lab. Syst.* 107, 258–268.
- Godoy J.L., Vega J.R., Marchetti J.L., 2011b. Process monitoring based on measurement space decomposition. 5th International Conference on Integrated Modeling and Analysis in Applied Control and Automation (IMAACA 2011), Rome, Italy, (2011) paper 42 in proceedings.
- Godoy J.L., Vega J.R., Marchetti J.L., 2011c. Geometric Properties of Partial Least Squares Regression for Application to Process Monitoring. III Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial (III MACI), Bahía Blanca - Argentina, 9-11 de mayo de 2011, 463-466.
- Godoy J.L., Vega J.R., Marchetti J.L., 2011d. Geometric Properties of Kernel Partial Least Squares for non-linear process monitoring. *IMAACA 2011*. September 2011. Rome, Italy. Paper 60 in proceedings.
- Golshan M., MacGregor J.F., Bruwer M.J., Mhaskar P., 2010. Latent Variable Model Predictive Control (LV-MPC) for trajectory tracking in batch processes. *J. Process Control*. 20, 538–550.
- Gugliotta L.M., Brandolini M.C., Vega J.R., Iturralde E.O., Azum J.L., Meira G.R., 1995. Dynamic Model of a Continuous Emulsion Copolymerization of Styrene and Butadiene. *Polym. Reaction Eng.* 3, 201-233.
- Gugliotta L.M., Vega J.R., Antonione C.E., Meira G.R., 1999. Emulsion Copolymerization of Acrylonitrile and Butadiene in an Industrial Batch Reactor. Estimation of Conversion and Polymer Quality from On-line Energy Measurements. *Polym. Reaction Eng.* 7, 531-552.
- Gunther J.C., Conner J.S., Seborg D.E., 2008. PLS pattern matching in design of experiment, batch process data. *Chem. Intell. Lab. Syst.* 94, 43–50.
- Hoskuldsson A., 1988. "PLS regression methods," *J. Chemometrics*, 2, 211–228.

- Ipsen I. y Meyer C., 1995. The angle between complementary subspaces. *Am. Math. Month.* 102, 904–911.
- Jessenberger J. y Weihs C, 1998. A note on a multivariate analogue of the process capability index Cp. Volmen 7 de Technical Report - Universität Dortmund, SFB 475.
- Johannesmeyer M. C., 1999. Abnormal Situation Analysis Using Pattern Recognition Techniques and Historical Data. MSc. Thesis. University of California, Santa Barbara, CA.
- Johnson R.A. y Wichern D.W., 1998. Applied Multivariate Statistical Analysis, 4th Edition, Prentice Hall.
- Junker B. y Wang H., 2006. Bioprocess monitoring and computer control: key roots of the current PAT initiative. *Biotechnol. Bioeng.*, 95, 226–261.
- Kadlec P., Gabrys B., Strandt S., 2009. Data-driven Soft Sensors in the Process Industry. *Comp. Chem. Eng.* 33, 795.
- Kano M., Lee S., Hasebe S., 2009. Two-stage subspace identification for softsensor design and disturbance estimation. *J. Process Control.* 19, 179–186.
- Kiers H.A.L. y Smilde A.K., 2007. A comparison of various methods for multivariate regression with highly collinear variables. *Stat. Methods & Appl.* 16, 193–228.
- Kim K., Lee J.M., Lee I.B., 2005. A novel multivariate regression approach based on kernel partial least squares with orthogonal signal correction. *Chem. Intell. Lab. Syst.* 79, 22–30.
- Kirk R.E. y Othmer D.F., 1981. *Encycl. Chem. Technol.* 8, 608-622.
- Kordon A.K., Smits G.F., Kalos A.N., Jordaan E.M., 2003. Robust soft sensor development using genetic programming. Chapter 3, in *Nature Inspired Methods in Chemometrics: Genetic Algorithms and Artificial Neural Networks*. R. Leardi, Ed. Data Handling in Science and Technology. Vol. 23, Elsevier.
- Kourti T., 2005. Application of latent variable methods to process control and multivariate statistical process control in industry. *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing*, 19, 213–246.
- Krzanowski W. J., 1979. Between-Groups Comparison of Principal Components. *Journal of the American Statistical Association*, 74, 703-707.
- Laurí D., Rossiter J.A., Sanchis J., Martínez M., 2010. Data-driven latent-variable model-based predictive control for continuous processes. *J. Process Control* 20, 1207–1219.
- Lee J.M., Yoo C.K, Lee I.B., 2004. Statistical process monitoring with independent component analysis. *J. Process Control.* 14, 467-485.

- Li B., Morris J., Martin E.B., 2002. Model selection for partial least squares regression. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 64, 79-89.
- Lin B., Recke B., Renaudat P., Knudsen J., Jørgensen S.B., 2005. A Systematic Approach for Soft Sensor Development. *Comp. Aided Chem. Eng.* 20, 1147-1152.
- Lin B., Recke B., Knudsen J.K.H., Jørgensen S.B., 2007. A systematic approach for soft sensor development. *Comp. & Chem. Eng.* 31, 419-425.
- Liu J., Chen D.S., Shen J.F., 2010. Development of Self-Validating Soft Sensors using Fast Moving Window Partial Least Squares. *Ind. Eng. Chem. Res.* 49, 11530-11546.
- Lopes J.A., Costa P.F., Alves T.P., Menezes J.C., 2004. Chemometrics in bioprocess engineering: process analytical technology (PAT) applications, *Chemom. Intell. Lab.* 74, 269-275.
- Luyben W.L., 2007. *Chemical reactor design and control*. John Wiley & Sons, Inc.
- MacGregor J., Bruwer M.J., Golshan M., 2009. *System and Method for the Model Predictive Control of Batch Processes Using Latent Variable Dynamic Models*. US 20090287320 A1.
- Martens H. y Naes T., 1989. *Multivariate calibration*. John Wiley & Sons.
- McAvoy T., 2002. Model predictive statistical process control of chemical plants, *Ind. Eng. Chem. Res.* 41, 6337-6344.
- Meyer D., 2000. *Matrix analysis and applied linear algebra*. SIAM, USA.
- Minari R.J., Vega J.R., Gugliotta L.M., Meira G.R., 2006. Continuous Emulsion Styrene-Butadiene Rubber (SBR) Process: Computer Simulation Study for Increasing Production and for Reducing Transients between Steady States, *Ind. Eng. Chem. Res.* 45, 245-257.
- Minari R.J., Stegmayer G.S., Gugliotta L.M., Chiotti O.A., Vega J.R., 2007. Industrial SBR process: Computer simulation study for online estimation of steady-state variables using neural networks. *Macromol. React. Eng.* 1, 405-412.
- Montgomery D., 2004a. *Control estadístico de la calidad*. Limusa-Wiley.
- Montgomery D., 2004b. *Design and Analysis of Experiments*, 6° Ed., Wiley.
- Morari M. y Lee J.H., 1999. Model predictive control: past, present and future, *Comp. & Chem. Eng.* 23, 667-682.
- Nelson P., Taylor P., MacGregor J., 1996. Missing data methods in PCA and PLS: score calculations with incomplete observations. *Chem. Intell. Lab. Syst.* 35, 45-65.
- Otto M., 1999. *Chemometrics*. Wiley-VCH.
- Pearson P., 2001. Exploring process data. *J. Process Control*, 11, 179-194.

- Poehlein G.W. y Dougherty D.J., 1977. *Rubber Chem. Technol.* 50, 601-608.
- Qin S.J. y McAvoy T.J., 1992. Nonlinear PLS modeling using neural networks. *Computers Chem. Eng.* 16, 379-391.
- Qin S.J., Yue H., Dunia R., 1997. Self-Validating Inferential Sensors with Application to Air Emission Monitoring. *Ind. Eng. Chem. Res.* 36, 1675.
- Qin S.J., 1998. Recursive PLS algorithms for adaptive data modeling. *Computers Chem. Eng.* 22, 503-514.
- Remcher A., 2002. *Methods of Multivariate Analysis*. 2° Ed., Vol. 1, John Wiley & Sons.
- Richards J.R. y Congalidis J.P., 2006. Measurement and control of polymerization reactors. *Computers and Chemical Engineering*. 30, 1447-1463.
- Rosipal R. y Trejo L.J., 2001. Kernel Partial Least Squares Regression in Reproducing Kernel Hilbert Space. *J. of Machine Learning Research*, 2, 97-123.
- Singhal A. and Seborg D.E., 2002. Pattern Matching in Multivariate Time Series Databases Using a Moving-Window Approach. *Ind. Eng. Chem. Res.* 41, 3822-3838.
- Taylor J.S. y Cristianini N., 2004. *Kernel Methods for Pattern Analysis*. Cambridge University Press.
- Vapnik V., 1998. *Statistical Learning Theory*, Wiley, New York.
- Vega J.R., Gugliotta L.M., Brandolini M.C., Meira G.R., 1995a. Steady-State Optimization in a Continuous Emulsion Copolymerization of Styrene and Butadiene. *Lat. Amer. Appl. Res.* 25, 207-214.
- Vega J.R., Gugliotta L.M., Meira G.R., 1995b. Continuous Emulsion Polymerization of Styrene and Butadiene. Reduction of Off-Spec Product between Steady-States. *Lat. Amer. Appl. Res.* 25, 77-82.
- Vega J.R., Gugliotta L.M., Meira G.R., 2002. Emulsion Copolymerization of Acrylonitrile and Butadiene. Semi-Batch Strategies for Controlling Molecular Structure on the Basis of Calorimetric Measurements. *Polym. Reaction Eng.*, 10, 59-82.
- Venkatasubramanian V., Rengaswamy R., Kavuri S.N., Yin K., 2003. A review of process fault detection and diagnosis Part III: Process history based methods. *Computers and Chemical Engineering*. 27, 327-346.
- Westerhuis J.A., Gurden S.P. y Smilde A.K. (2000) Generalized contribution plots in multivariate statistical process Monitoring. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* 51 95-114.
- Wold S., Sjöström M, Eriksson L., 2001. PLS-regression: a basic tool of chemometrics. *Chem. Intell. Lab. Syst.* 58, 109-130.

- Woo S.H., Jeon C.O., Yun Y.S., Choi H., Lee C.S., Lee D.S., 2009. On-line estimation of key process variables based on kernel partial least squares in an industrial cokes wastewater treatment plant. *Journal of Hazardous Materials*. 161, 538–544.
- Yan W., Shao H., Wang X., 2004. Soft Sensing Modeling Based on Support Vector Machine and Bayesian Model Selection. *Comput. Chem. Eng.* 28, 1489.
- Yu J. y Qin S.J., 2008. Multimode process monitoring with Bayesian inference-based finite Gaussian mixture models. *AIChE Journal*. 54, 1811-1829.
- Yu J., 2011. Localized Fisher Discriminant Analysis Based Complex Chemical Process Monitoring. *AIChE Journal*. 57, 1817-1828.
- Yue H.H y Qin S.J., 2001. Reconstruction-based Fault Identification Using a Combined Index. *Ind. Eng. Chem. Res.* 40, 4403-4414.
- Zhao S.J., Zhang J., Xu Y.M. y Xiong Z.H., 2006. Nonlinear Projection to Latent Structures Method and its Applications. *Ind. Eng. Chem. Res.* 45, 3843-3852.
- Zhang X., Yan W., Shao H., 2008. Nonlinear Multivariate Quality Estimation and Prediction Based on Kernel Partial Least Squares. *Ind. Eng. Chem. Res.* 47, 1120–1131.