Estatística aplicada

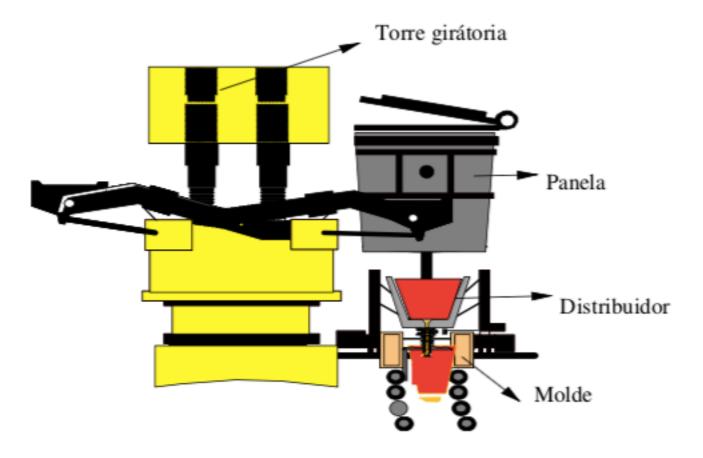
Tópicos especiais em Estatística Aplicada Prof. Celso J. Munaro (cjmunaro@gmail.com)

XIII - Controle estatístico de processos multivariados (MSPC)

Kruger, Uwe; XIE, Lei. Statistical Monitoring of Complex Multivatiate Processes: With Applications in Industrial Process Control. John Wiley & Sons, 2012.

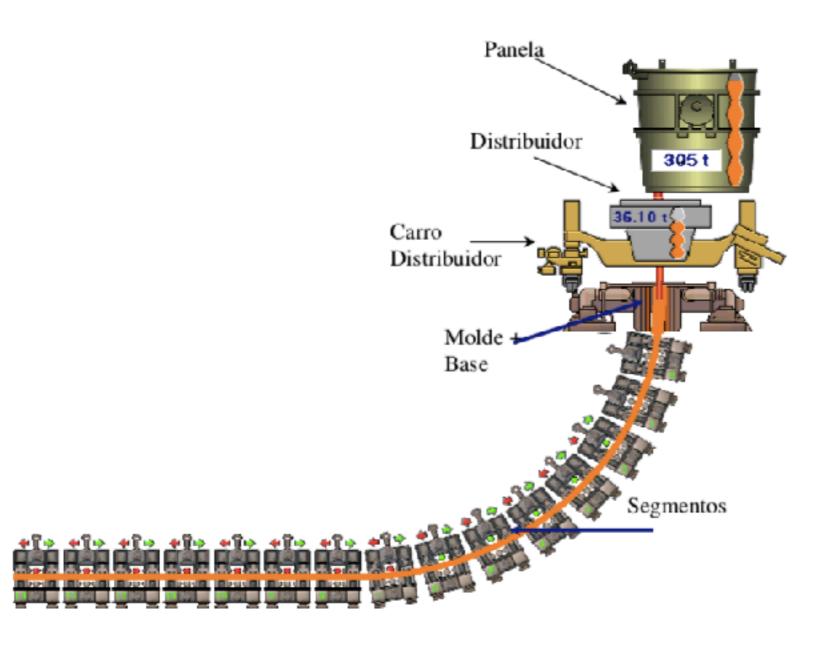
Chiang, Leo H., Evan L. Russell, and Richard D. Braatz. Fault detection and diagnosis in industrial systems. Springer Science & Business Media, 2000.

Seja o problema de lingotamento contínuo, que visa a transformação do aço (em estado líquido a 1.600°C), em placas de aço de formato, espessura, superfície, consistência e propriedades mecânicas conhecidas e controladas segundo padrões existentes.

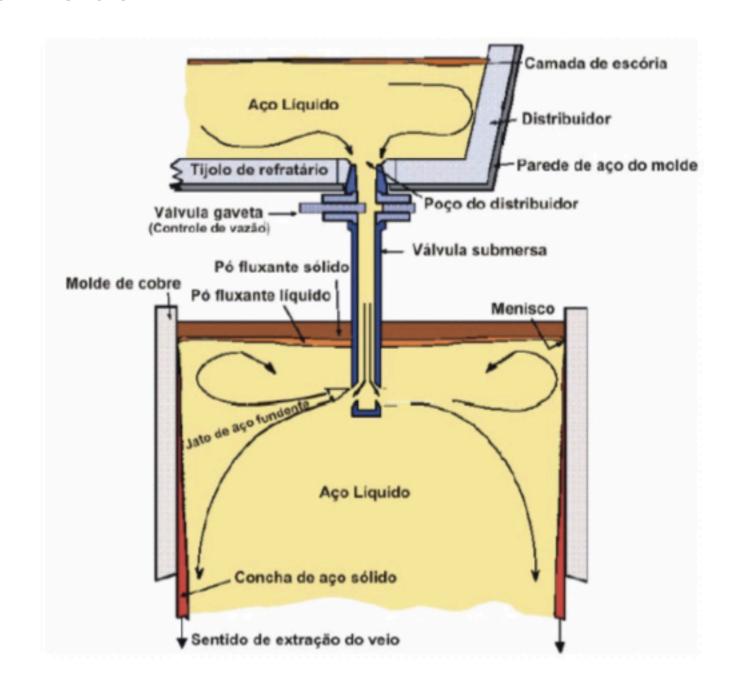


Sanchotene, F.B, dissertação de mestrado, PPGEE/UFES, 2009

Máquina de lingotamento contínuo



Controle de nível do molde



Deseja-se monitorar os parâmetros de qualidade das placas de aço.

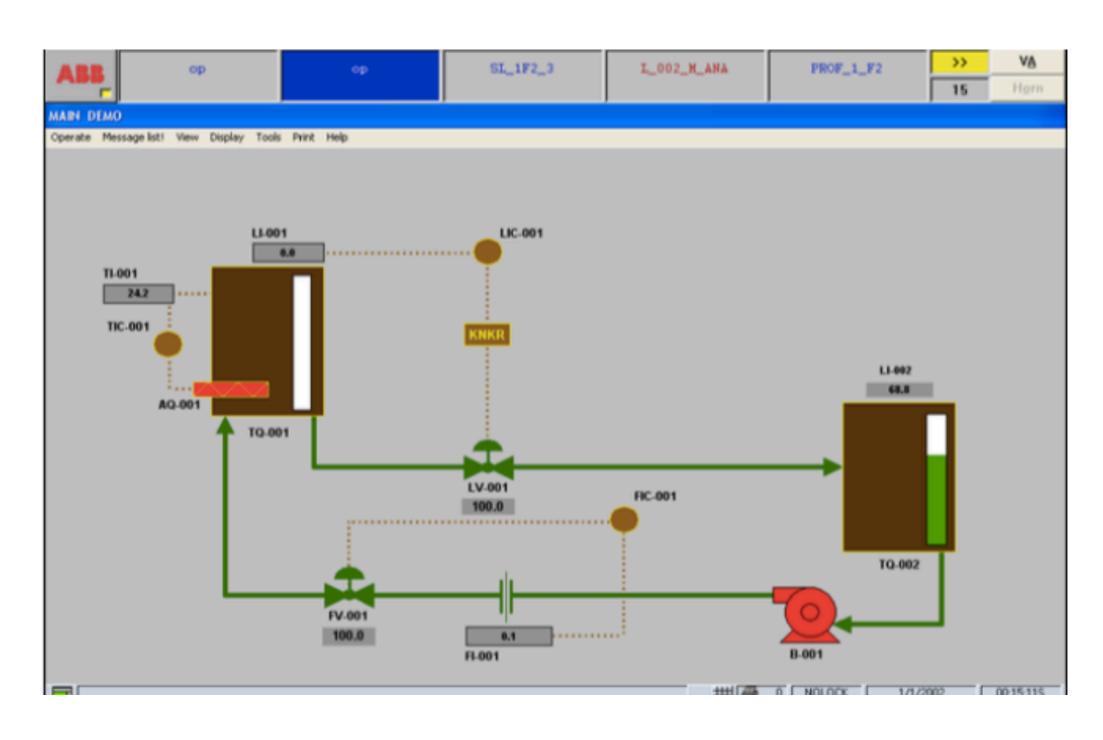
Entretanto, variáveis que afetam essa qualidade devem ser também monitoradas, eventualmente antecedendo problemas no produto final.

Nesse caso, problemas no nível afetarão a qualidade das placas.

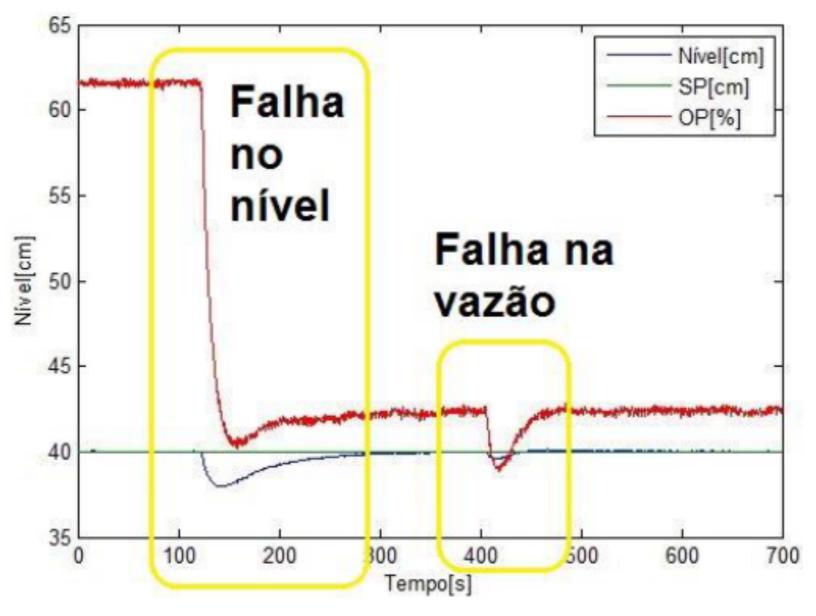
Portanto, deve-se monitorar diversas variáveis bem como a relação entre elas.

Uma carta de controle univariado não atenderia esse problema.





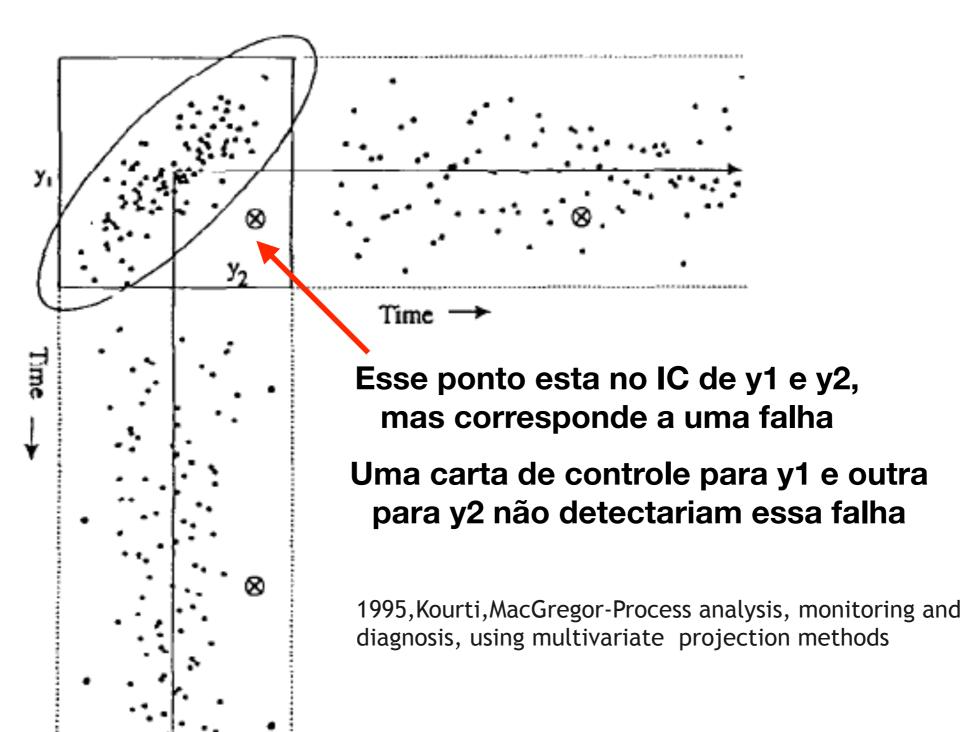
Falha no nível e depois na bomba

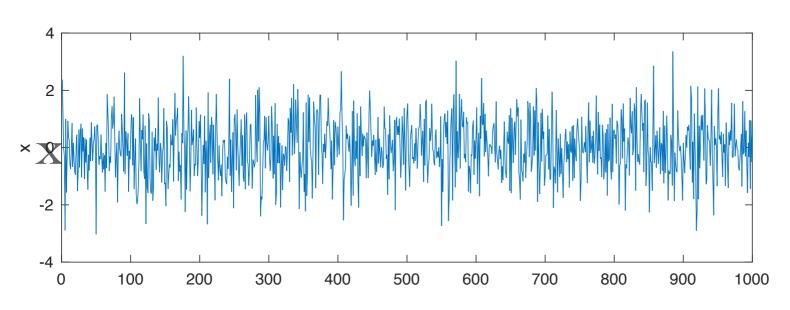


O sinal de controle (OP) muda, mas as PVs voltam a seus setpoints

As variáveis estão correlacionadas e assumem diferentes valores dependendo da referência de nível

Um carta de controle univariada também nano serviria nesse caso.



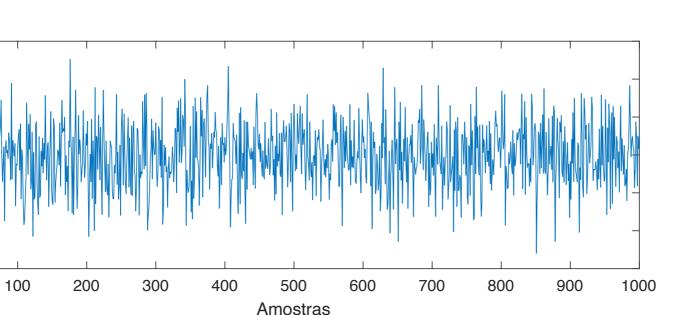


2

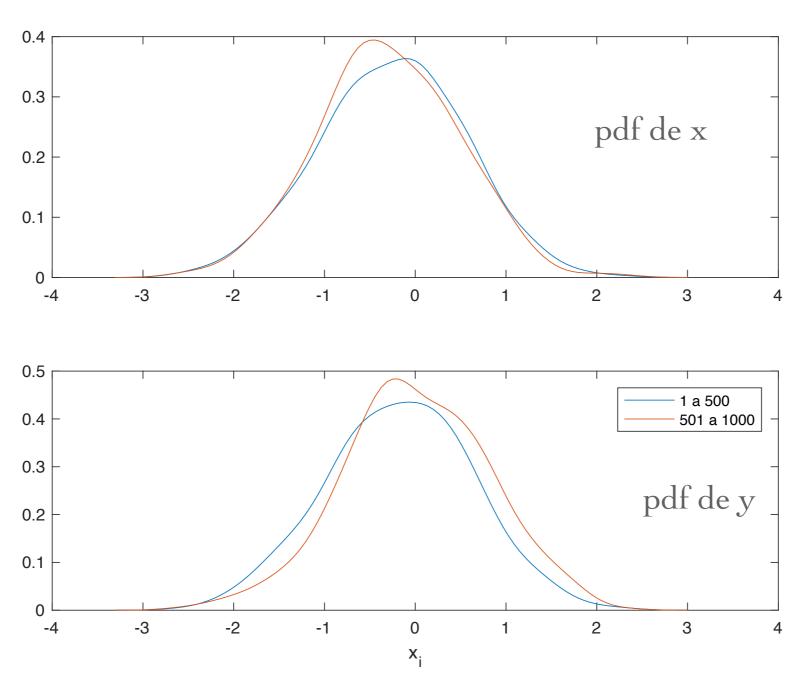
-2

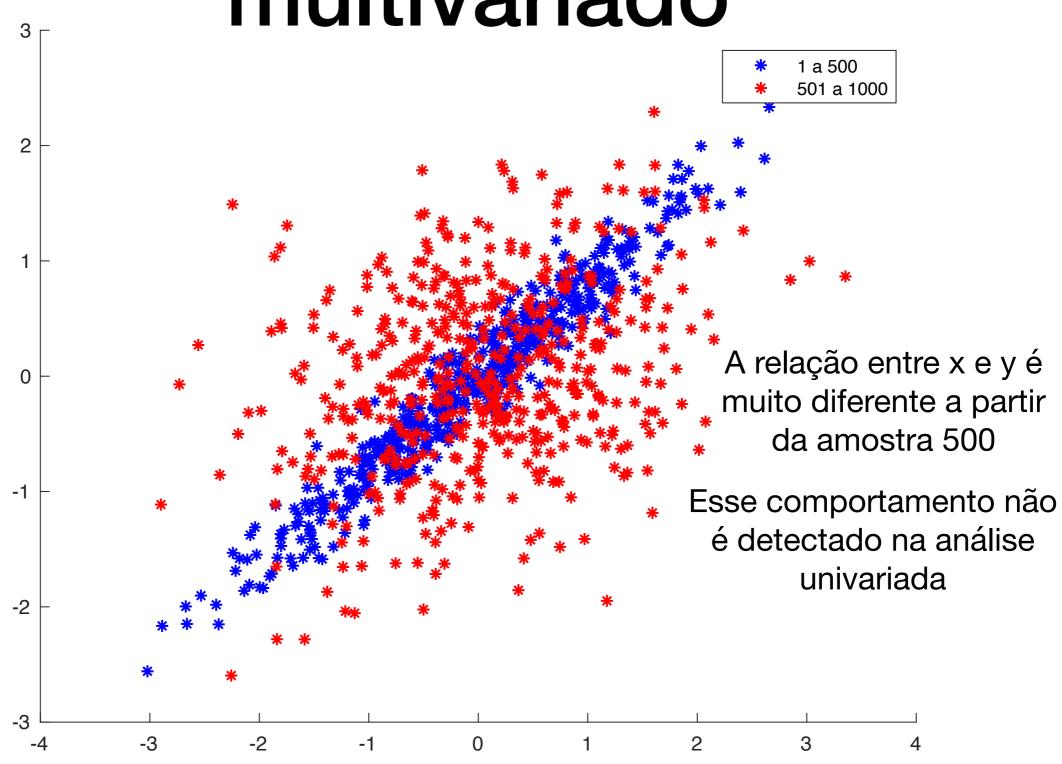
-3

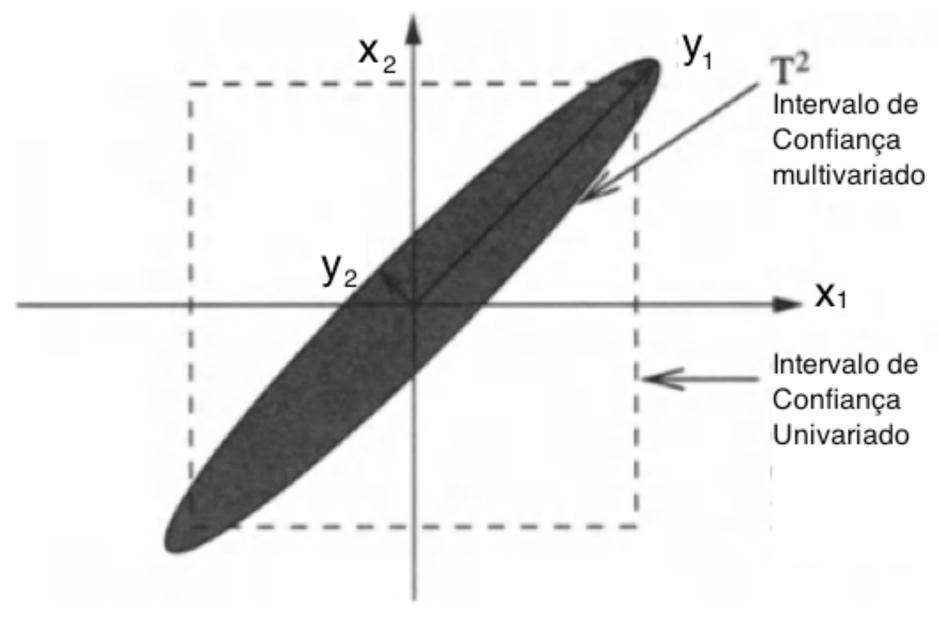
0



Duas variáveis sendo monitoradas por cartas de controle univariadas







A figura anterior ilustra o conservatismo eliminado empregando estatística multivariada contra abordagem de análise univariada.

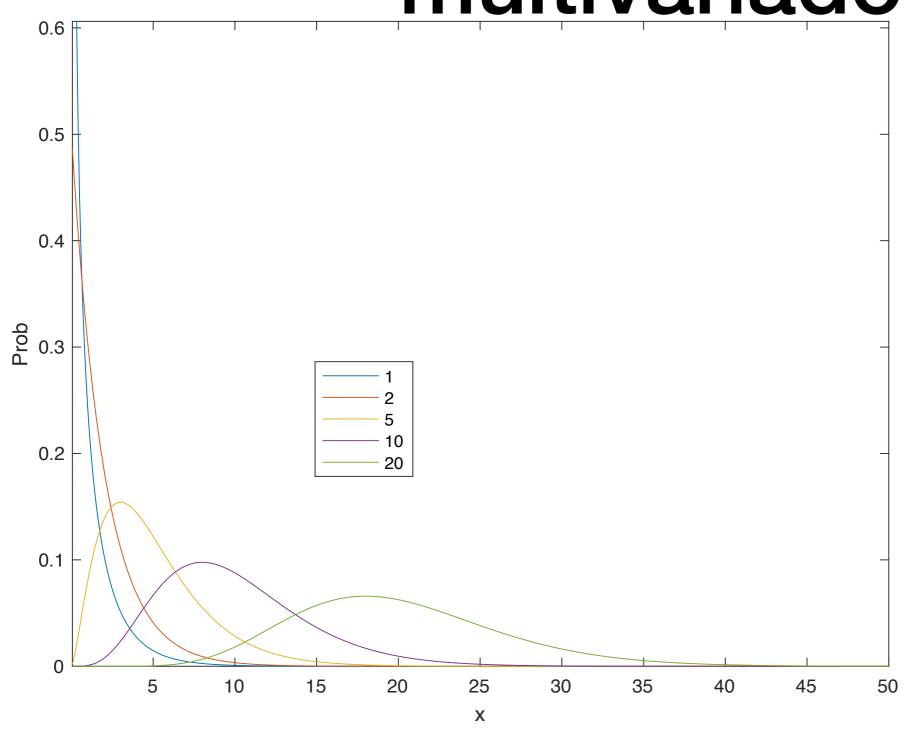
A região de confiança se torna mais alongada quando o grau de correlação aumenta, reduzindo a quantidade de conservatismo.

Distribuição chi-quadrado

Definição: Sejam Z_1, Z_2, \dots, Z_k variáveis aleatórias independentes com distribuição normal padronizada.

Então, a soma de seus quadrados
$$Q = \sum_{i=1}^{k} Z_i^2$$

tem distribuição chi-quadrado com k graus de liberdade, $Q \sim \chi_k^2$



$$E[\mathcal{X}_k^2] = k$$

$$var E[\mathcal{X}_k^2] = 2k$$

Seja o conjunto de m variáveis com n amostras

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix}$$

e a matriz S de covariância amostral $S = \frac{1}{n-1}X^TX$

Assume-se que as variáveis tenham média zero.

Faz-se a decomposição da matriz S em seus autovalores

e autovetores, $S = V\Lambda V^T$. Λ é diagonal e $VV^T = I$

Os elementos da diagonal da matriz S são as variâncias dos *m* sinais na matriz *X*.

$$Var(X) = E\{(X - \mu)^2\}$$

Os elementos fora das diagonais são as covariância entre os sinais.

Como traço(S)=traço(Λ), a soma das variâncias é igual a soma dos autovalores.

A projeção $y = V^T x$ de um vetor de m observações x desacopla o espaço de observação para um conjunto de variáveis não correlacionadas, correspondentes aos elementos de y.

A variância do i-ésimo elemento de y é igual à do i-ésimo autovalor da matriz Λ .

Seja como exemplo o caso de duas variáveis, m=2.

$$T^2 = y^T \Lambda^{-1} y$$
 A variável x foi transformada na variável pela operação $y = V^t x$

$$y = [y_1 y_2]^T$$

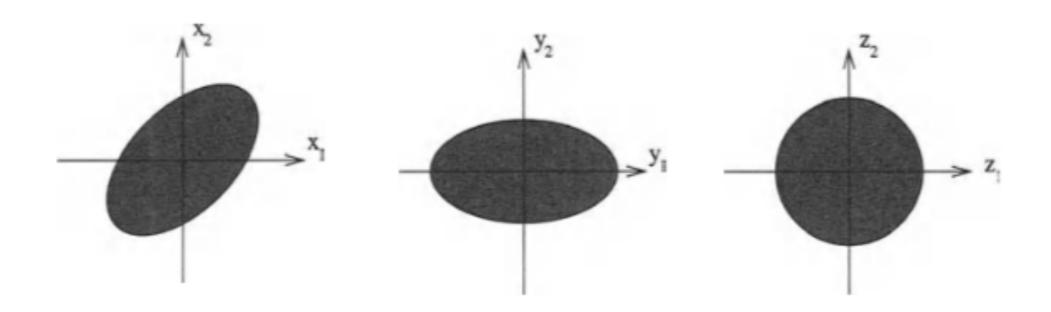
$$\Lambda^{-1} = \begin{bmatrix} 1/\lambda_1 & 0\\ 0 & 1/\lambda_2 \end{bmatrix}$$

$$T^{2} = y^{T} \Lambda^{-1} y = [y_{1} \ y_{2}][1/\lambda_{1} \ 0; 0 \ 1/\lambda_{2}][y_{1} \ y_{2}] = \frac{y_{1}^{2}}{\lambda_{1}} + \frac{y_{2}^{2}}{\lambda_{2}}$$

Portanto, a variável x foi transformada na variável y e normalizada ao ser dividida pelos autovalores.

Os autovalores λ_1, λ_2 definem o formato da elipse. Se os dois forem iguais a 1, tem-se um círculo.

Efeito dos autovalores



Assumindo que S seja invertível e com a definição

$$z = \Lambda^{-1/2} V^T x$$

a variância de z é dividida pelos autovalores.

A estatística T^2 de Hotelling é então dada por

$$T^2 = z^T z = x^T V \Lambda^{-1} V^T x = x^T S^{-1} x$$

Como a variável z tem distribuição normal padronizada, a estatística chi-quadrado pode ser aplicada.

$$T^2 \leq T_\alpha^2$$

Como a matriz de covariância real é estimada a partir dos dados, o limiar é determinado por

$$T_{\alpha}^{2} = \frac{m(n-1)(n+1)}{n(n-m)}F_{\alpha}(m,n-m)$$

onde $F_{\alpha}(m, n-m)$ é o limite superior para α na distribuição F com m e n-m graus de liberdade.

O limite usando $F_{\alpha}(m, n-m)$ é maior (mais conservador) do que o limite obtido através da distribuição chi-quadrado.

Os dois limites se aproximam quando a quantidade de dados aumenta.

Quantas amostras são necessárias para que a matriz de covariância estimada represente adequadamente as variáveis?

Resposta: uma quantidade de amostras que produza um limiar próximo daquele que seria obtido usando uma quantidade infinita de amostras.

$$\varepsilon = \frac{\frac{m(n-1)(n+1)}{n(n-m)}F_{\alpha}(m,n-m) - \chi_{\alpha}^{2}(m)}{\chi_{\alpha}^{2}(m)}$$

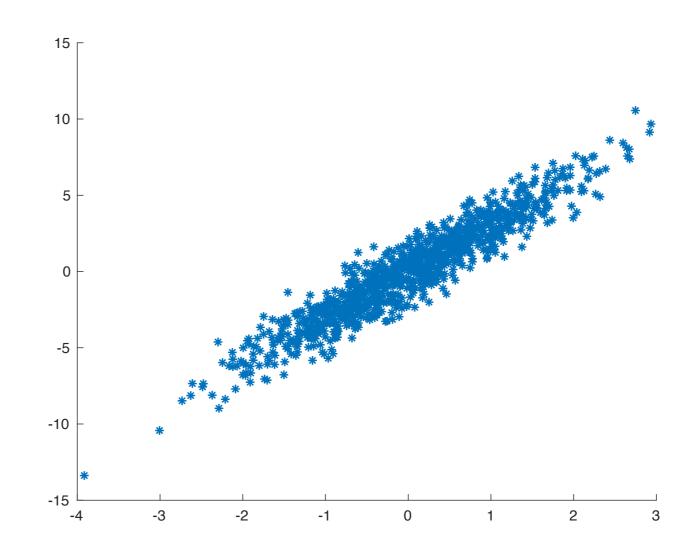
Infinitas amostras

$$\varepsilon = \frac{\frac{m(n-1)(n+1)}{n(n-m)}F_{\alpha}(m,n-m) - \chi_{\alpha}^{2}(m)}{\chi_{\alpha}^{2}(m)}$$

Number of observation variables m	Data requirement n
1	19
2	30
3	41
4	52
5	63
10	118
25	284
50	559
100	110
200	2210

$$\epsilon = 0.1, \alpha = 0.5$$

```
N=1000;
x=normrnd(0,1,N,1);
e=normrnd(0,1,N,1);
y=3*x+e;
X=[x y]
scatter(x,y,'*');
```



Variância das duas variáveis

 $var(X) = [1.0238 \ 10.3886] = [var(x) \ var(y)]$

Autovalores = eig(S=X'*X/999)=[0.0961 11.3163]

Soma das variâncias = soma dos autovalores

Cálculo do limiar usando distribuição chi-quadrado: chi2inv(0.95,2)=5.9915

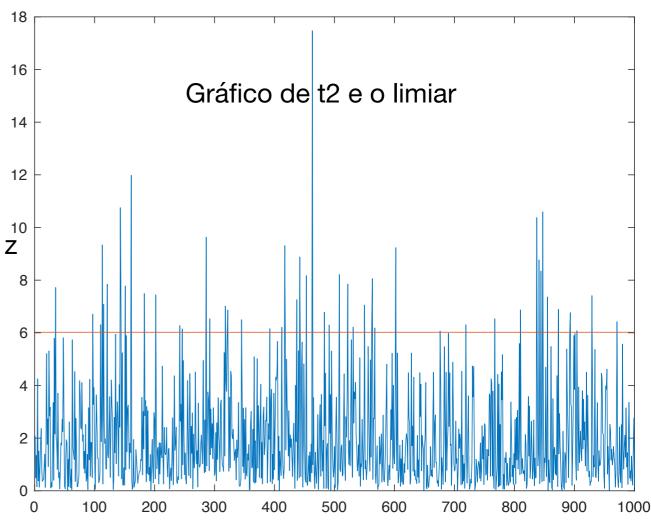
Cálculo usando a distribuição F

2*(N-1)*(N+1)/(N*(N-2))*finv(0.95,2,1000-2)=6.0215

Cálculo da estatística T^2 para as N amostras

```
S=X'*X/999;
Si=inv(S);
for i=1:N
     t2(i)=X(i,:)*Si*X(i,:)';
end
```

Ao invés de fazer o monitoramento univariado de x e y, faz-se o monitoramento multivariado de z



Seja

eig(S)=[0.0096, 0.0100, 105.3749, 109.1584]

A matriz e covariância S é quase singular: problemas para inversão!

- Permite reduzir o número de variáveis monitoradas
- Reduz a sensibilidade da estatística aos ruídos
- Gera mecanismos para calcular o efeito de variáveis para a estatística violada

Outras abordagens:

- Análise por componentes independentes (ICA)
- Mínimos quadrados parciais (PLS)
- PCA dinâmico (DPCA)

É uma técnica de redução de dimensionalidade linear, ideal em termos de captura da variabilidade dos dados.

Dado um conjunto de *n* observações de *m* variáveis de processo com média zero armazenadas em uma matriz *X*, os vetores de pesos (loading vectors) são as colunas de matriz de *V* a partir da decomposição de autovalores da matriz de covariância amostral *S*,

$$S = \frac{1}{n-1} X^T X = V \Lambda V^T$$

A matriz diagonal Λ contém os autovalores não negativos em ordem decrescente.

Para capturar de forma otimizada as variações dos dados, minimizando o efeito do ruído na representação PCA, apenas os vetores de pesos correspondentes aos maiores autovalores são retidos.

Alguns comentários sobre decomposição em valores singulares

Dada a matriz $X_{n.m}$, sua decomposição em valores singulares é dada por

$$X = USV^T$$

$$U_{n,n}$$
 $S_{n,m}$ $V_{m,m}$

U e V são matrizes ortogonais e S contém os valores singulares em sua diagonal.

```
x =
    3
          2
>> [u,s,v]=svd(x)
u =
  -0.3186 0.9149 -0.2481
  -0.5419 -0.3905 -0.7442
  -0.7777 -0.1027
                    0.6202
                                     x=u*s*v'
s =
   5.7474
            1.4028
                 0
v =
  -0.8796 -0.4758
  -0.4758
            0.8796
```

$$X^T * X = V^T S^T U^T U S V^T = V^T S^2 V^T$$

Assim,
$$eig(X^TX) = \sigma(X)^2$$

Autovalores são definidos apenas para matrizes quadradas.

Variância nos dados

Matriz de Covariância de X:
$$S = \frac{X^T X}{n-1}$$

$$Como X = \frac{USV^T}{\sqrt{(n-1)}}$$

A variância total de X é obtida somando todos os elementos da diagonal de S.

Variância nos dados

```
Seja o Exemplo:
x=normrnd(0,10,1000,2);
y=normrnd(0,0.1,1000,2);
X=[x y];
               Ou S=cov(X)
S=X'*X/999;
eig(S)
var(X)=[91.6062 99.0852 0.0110 0.0102]
> S=X'*X/999
  S =
 91.6068 -4.9586 0.0687 -0.0440
 -4.9586 99.1382 -0.0431 0.0202
  0.0687 -0.0431 0.0110 -0.0001
 -0.0440 0.0202 -0.0001
                           0.0102
A variância de cada elemento da variável X (colunas) aparece na diagonal de S, e
(svd(X)/sqrt(999)).^2 = eig(S)
```

As projeções das observações em X no espaço dimensional inferior estão contidas na matriz de escores

$$T = XP$$

 $T_{n,a}$ = matriz de escores

 $P_{m.a}$ = matriz com as colunas de V associadas aos maiores autovalores

A i-ésima coluna de T é chamada componente principal de X.

A projeção de T de volta ao espaço m-dimensional de observações é dada por

$$\tilde{X} = TP^T, P_{m.a}$$

A diferença entre X e sua estimativa é a matriz residual

$$E = X - \tilde{X} = X = TP^{T} = X - XPP^{T} = X(I - PP^{T})$$

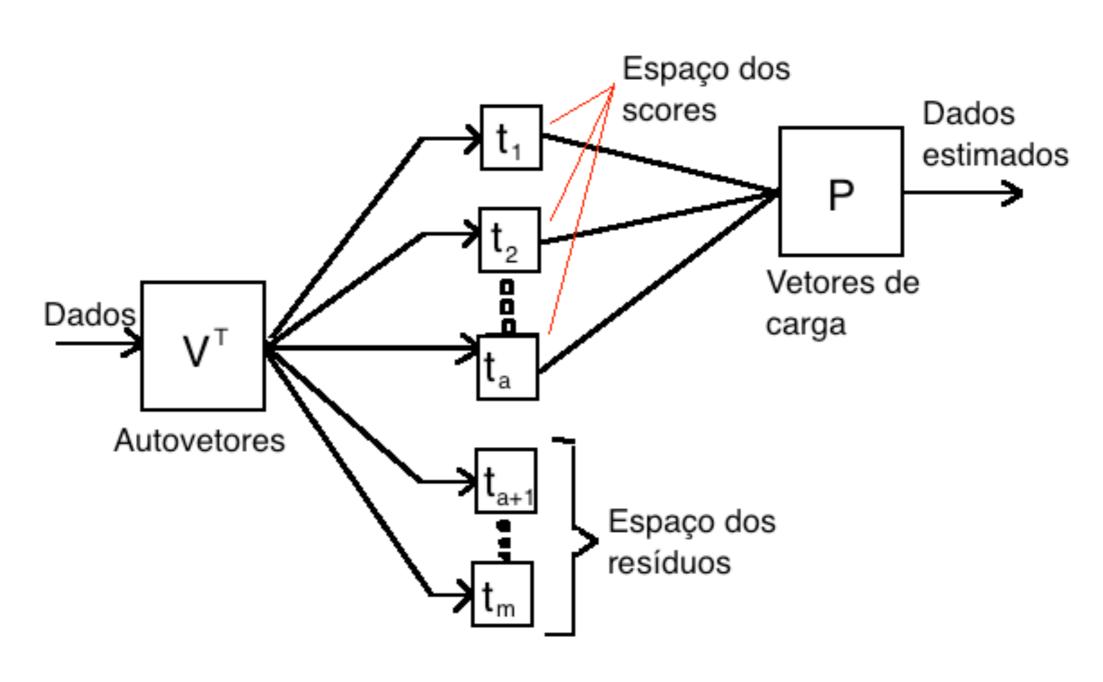
Caso
$$P = V$$

$$T = XV e TV^T = X$$
.

Portanto, X pode ser escrito como a soma de produtos de vetores de posto unitário:

$$X = t_1 v_1^T + t_2 v_2^T + \dots + t_n v_n^T$$

A matriz residual captura variações no espaço de observações gerados pelos vetores de carga associados aos m-a menores autovalores.



 $M=[0.6 \ 0.7 \ 0.2 \ 0.1;$

```
Voltemos ao Exemplo: 0.4 0.8 0.2 0.3; x=normrnd(0,10,1000,2); y=normrnd(0,0.1,1000,2); X=[x y]*M; S=cov(X); var(X)=eig(S)=[0.0096 0.0104 99.8312 102.3545]
```

[U,L,V]=svd(X);

 $U_{1000x1000}, L_{1000x4}, V_{4x4}$

Escolhendo as duas maiores componentes principais, mantemos 99.9% da variância dos dados,

var(X)=[140.5459 56.3984 6.5745 2.2108]

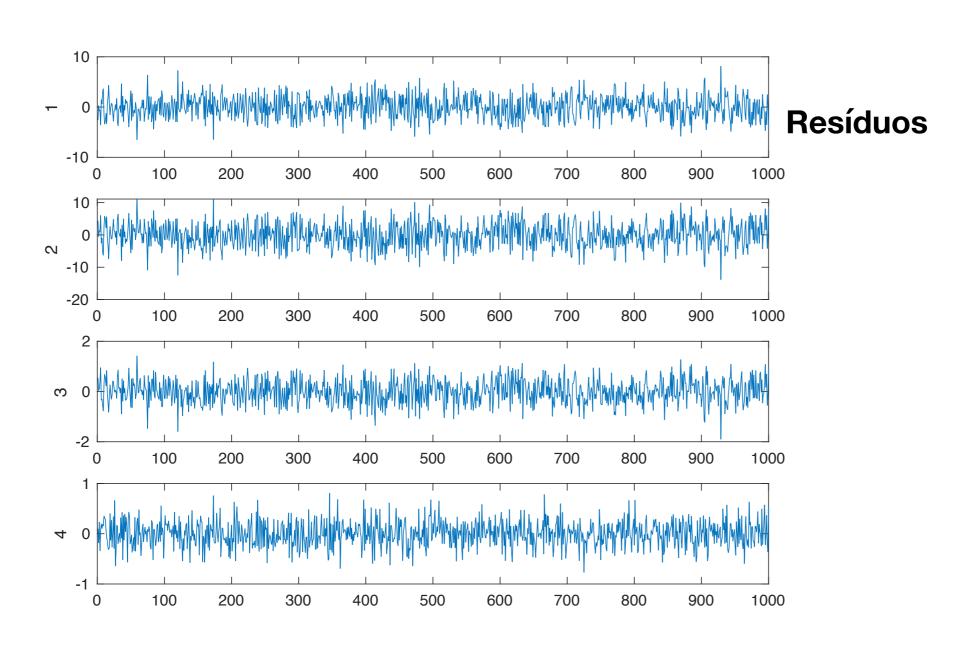
140.5459/var(X)=0.68

Ou seja, T = XP, sendo P=[v1] e V=[v1 v2 v3 v4]

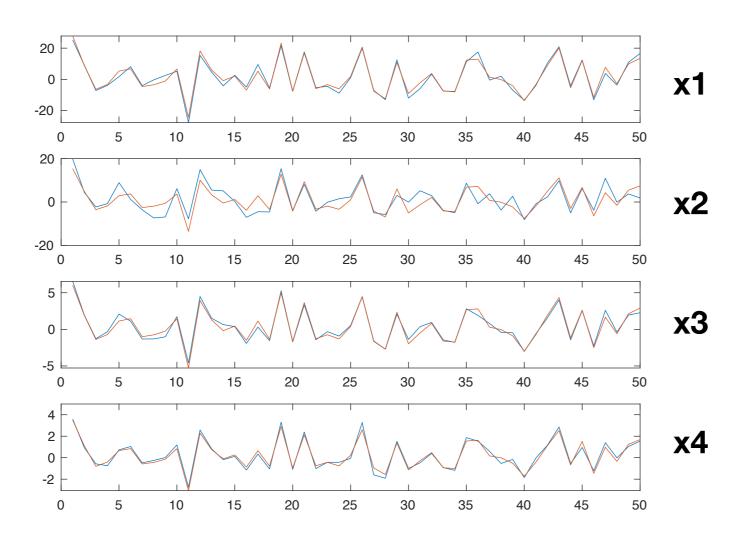
P foi escolhida como a coluna v1 associada ao maior autovalor de S

A estimativa de X a partir das duas componentes principais é $\tilde{X} = TP^T = XPP^T$

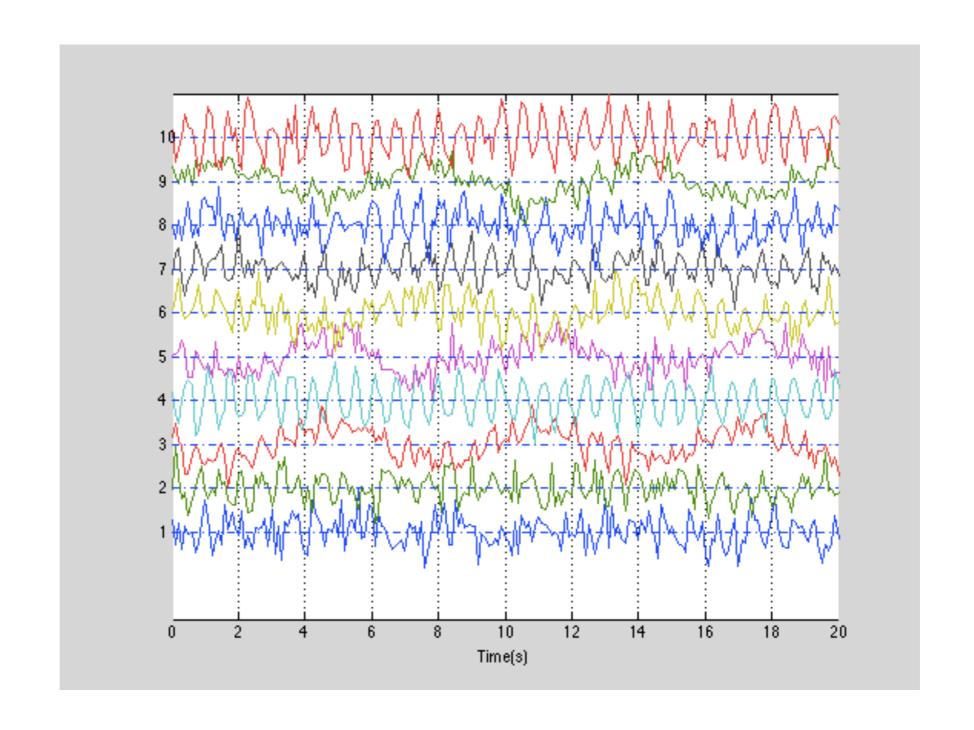
Erro da estimativa : $E = X - XPP^T = X(I - PP^T)$



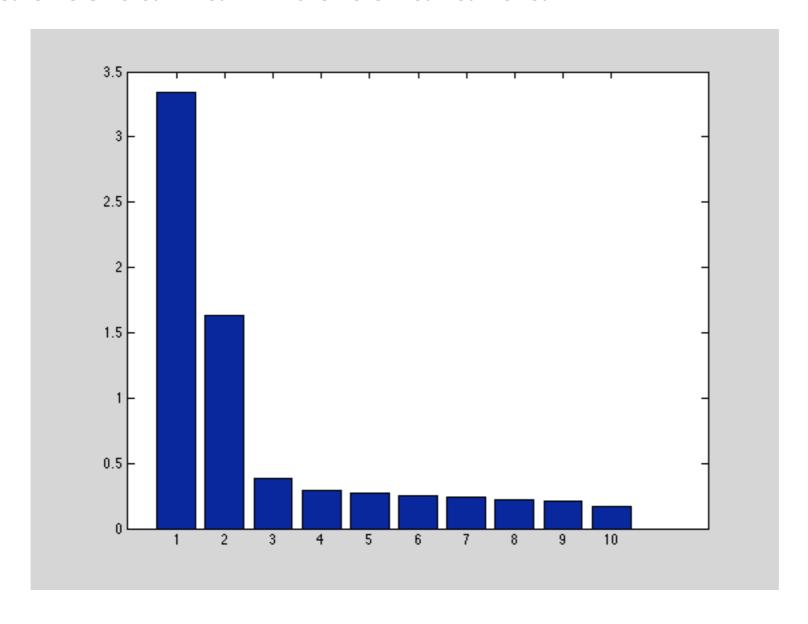
Variáveis medidas e estimadas usando uma componente principal



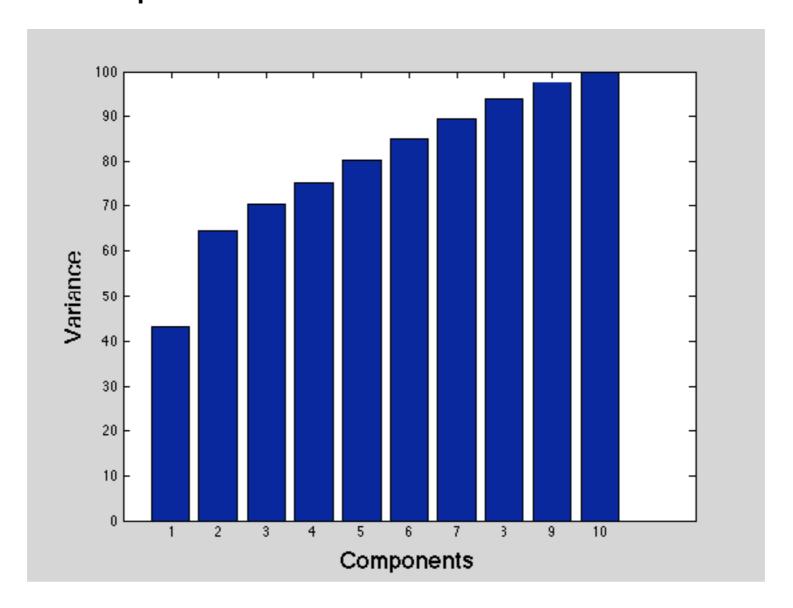
10 sinais



Autovalores da matriz de covariância



Variância retida pelos autovalores



P=V(:,1:2)

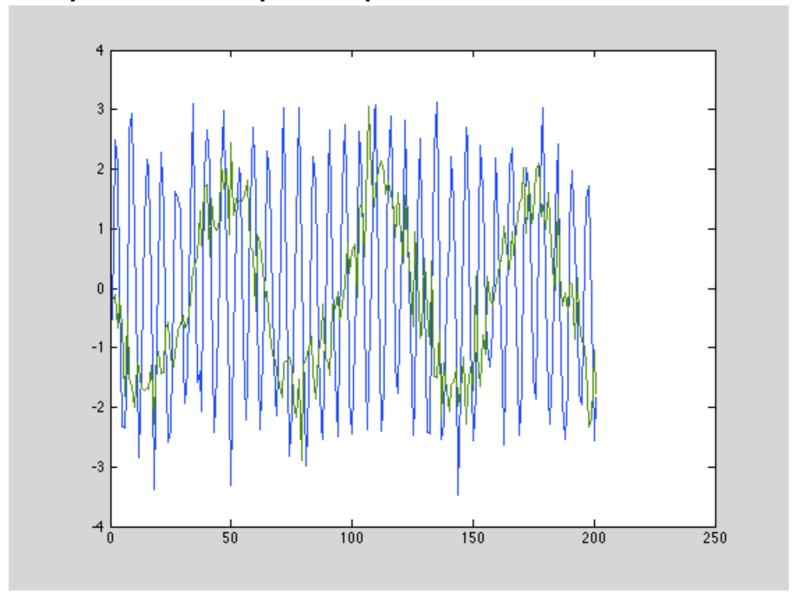
T=Y*P;

plot(T)

Ye=T*PT

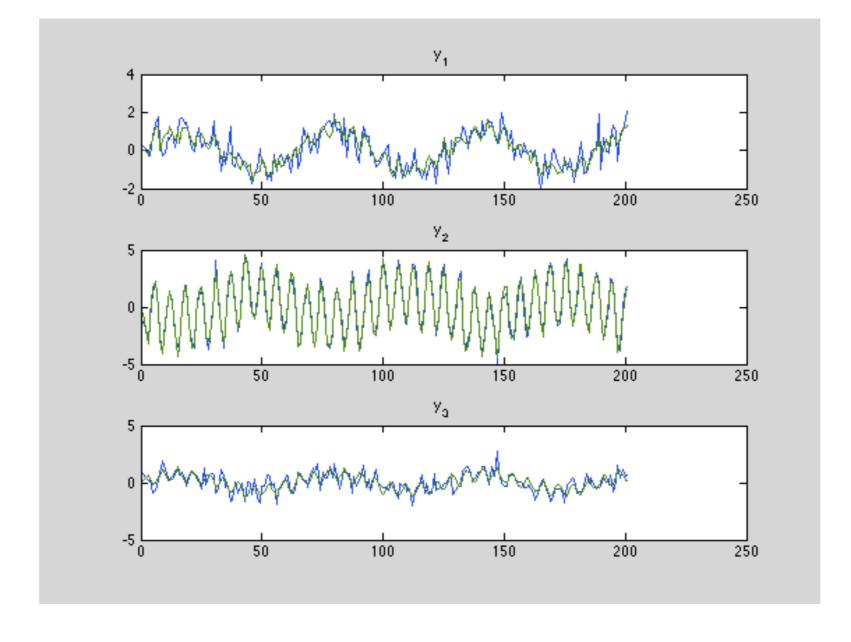
plot(Y-Ye)

Duas componentes principais



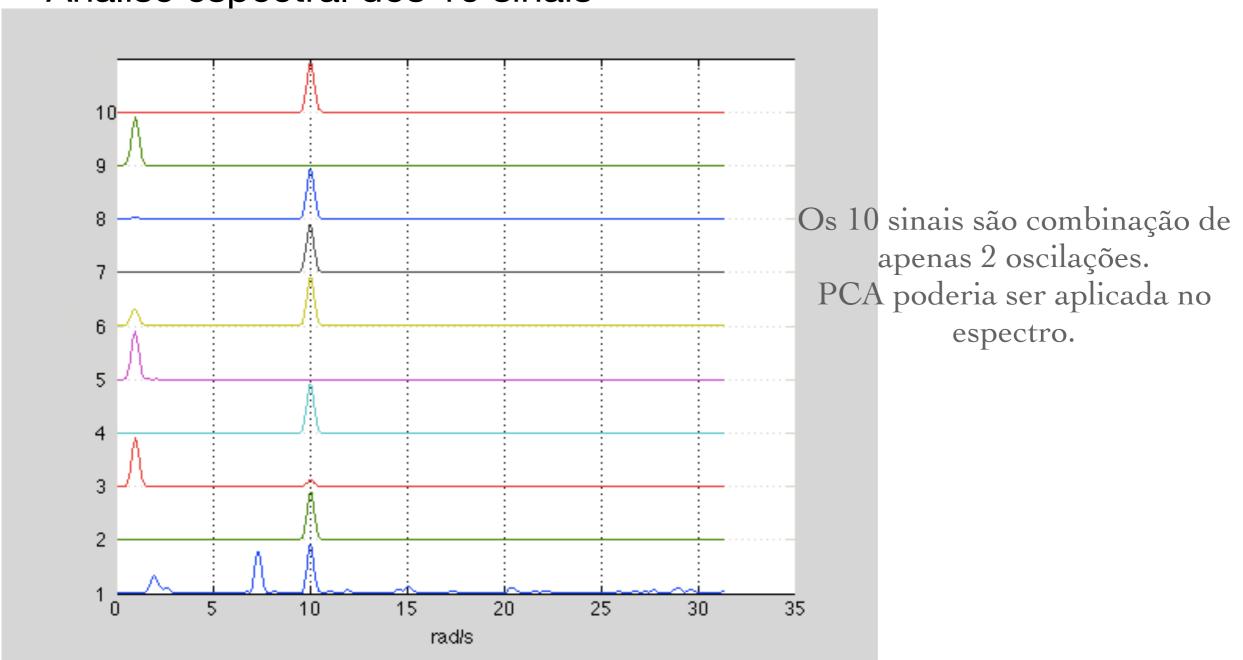
Estimação de 3 sinais usando apenas duas componentes

principais



Os 10 sinais podem ser representados aproximadamente por apenas 2 sinais e a matriz de carregamento.

Análise espectral dos 10 sinais



Sejam as n observações de m variáveis,

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix}$$

e a correspondente matriz de covariância amostral

$$S = \frac{X^T X}{n-1}$$

Fazendo a decomposição em valores singulares de X, a matriz S pode ser escrita como

$$S = V\Lambda V^T$$

e a estatística T^2 pode ser aplicada diretamente sobre a representação PCA,

$$T^2 = x^T V \Lambda^{-1} V^T x$$

A inversa pode produzir efeitos significativos caso S tenha autovalores pequenos.

Mantendo apenas os a maiores autovalores,

$$T^2 = x^T P \Lambda_a^{-1} P^T x$$

sendo a matriz P obtida das a colunas da matriz V associadas aos maiores autovalores, retidos em Λ_a .

O limiar para a estatística com nível de significância α pode ser obtido de $T_{\alpha}^2 = \chi_{\alpha}^2(a)$

De forma similar, com uso da matriz de covariância amostrada, a estatística T² é calculada

$$T_{\alpha}^{2} = \frac{a(n-1)(n+1)}{n(n-a)} F_{\alpha}(a, n-a)$$

Estatística Q

O subespaço das observações correspondentes aos m-a menores autovalores pode ser monitorado usando a estatística Q:

$$Q = r^T r, r = (I - PP^T)x$$

onde r é o vetor de resíduos

Esta estatística também é conhecida como predição de erro quadrático (SPE).

Limiar para estatística Q

$$\theta_i = \sum_{j=a+1}^{m} \lambda_j^i$$
 $h_0 = 1 - \frac{2\theta_1 \theta_3}{3\theta_2^2}$

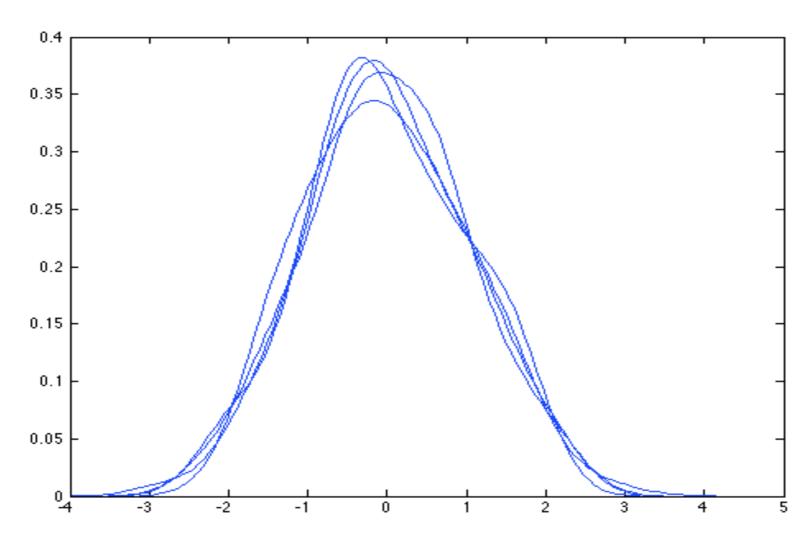
$$Q_{\alpha} = \theta_{1} \left[\frac{c_{\alpha} \sqrt{2\theta_{2}h_{0}^{2}}}{\theta_{1}} + 1 + \frac{\theta_{2}h_{0}(\theta_{0}-1)}{\theta_{1}^{2}} \right]^{1/h_{0}}$$

onde:

 c_{α} é limiar da distribuição normal padrão com nível de confiança $1-\alpha$ λ_i é o autovalor associado ao jth vetor de V.

```
>> Y=randn(100,2);
M = 1.0000
            0 1.0000 1.0000
            1.0000 1.0000 0.2000
        0
>> e=0.5*randn(100,2);
>> X=Y*M;
>> X=X+[e*0 e];
>> X=detrend(X); X(:,i)=X(:,i)/std(X(:,i));
```

pdf dos 4 sinais

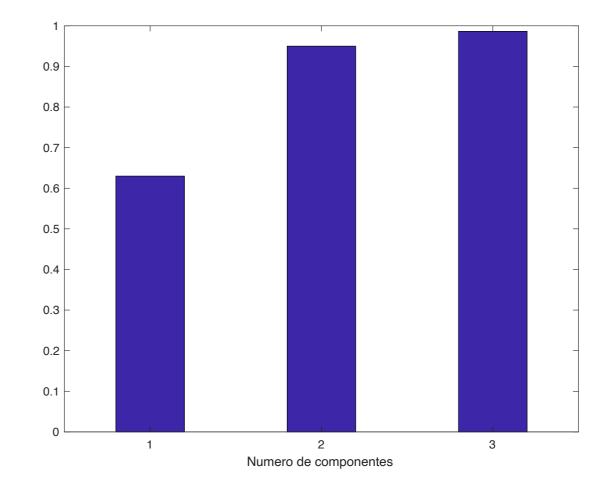


```
S = 1.0000 -0.0896
                              0.6542
                                        0.8952
   -0.0896
             1.0000
                       0.5984
                                 0.0295
    0.6542
             0.5984
                                 0.6504
                       1.0000
    0.8952
             0.0295
                       0.6504
                                 1.0000
>> [V,D]=eig(S)
V = 0.6864
            -0.2943
                        0.3530
                                  0.5636
             0.3271 -0.8306
    0.4050
                                 0.1978
   -0.5226
            -0.5463
                     -0.3361
                                 0.5617
   -0.3029
             0.7128
                       0.2693
                                 0.5724
       0.0540
             0.1455
                            0
         0
                       1.2706
                                      0
                  0
                            0
                                 2.5298
```

>> S=X'*X/99

>> S=X'*X/99

J 11 11, 3				
S =	1.0000	-0.0896	0.6542	0.8952
-0.0896	1.0000	0.5984	0.029	5
0.6542	0.5984	1.0000	0.650	4
0.8952	0.0295	0.6504	1.000	0
>> [V,D]=ei	lg(S)			
V = 0.6864	-0.294	3 0.353	0.56	36
0.4050	0.3271	-0.8306	0.197	8
-0.5226	-0.5463	-0.3361	0.561	7
-0.3029	0.7128	0.2693	0.572	4
D = 0.05	540	0	0	0
0	0.1455	0)	0
0	0	1.2706	i	0
0	0	0	2.529	8

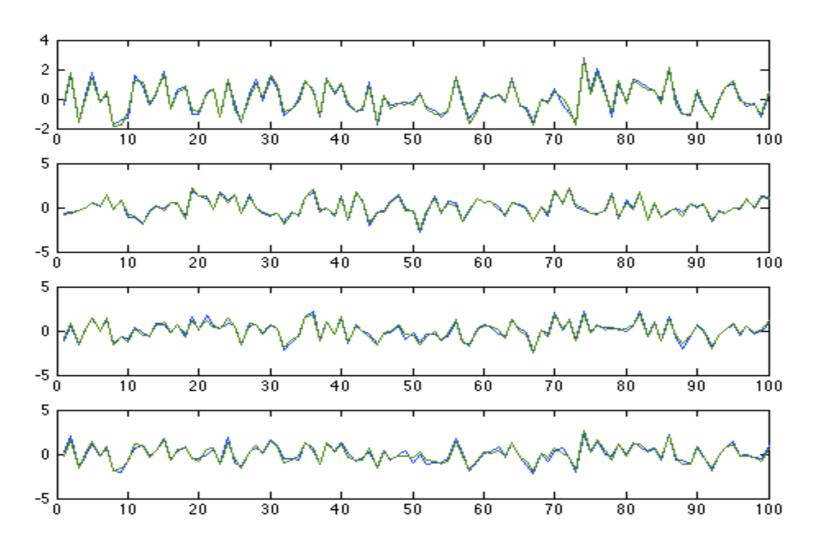


Mantendo apenas as 2 componentes principais

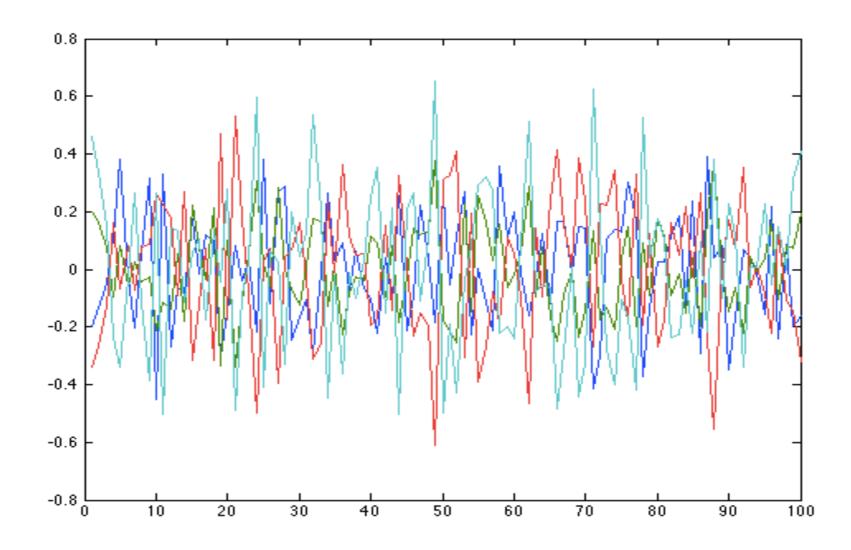
Resíduo:

$$E=X(I-PP^T)$$

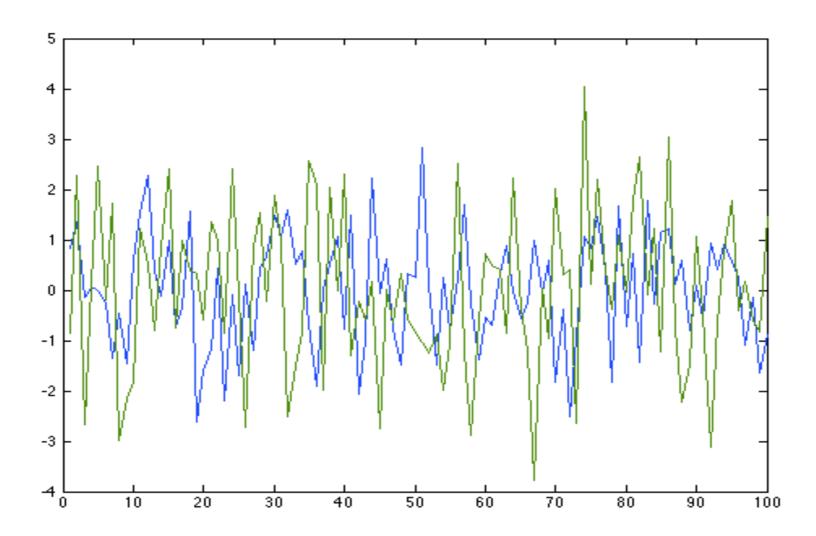
4 sinais usando apenas 2 componentes



Resíduos



Vetor de scores T = XP



Distribuição F com graus de liberdade a=2 e n-a=98

$$z=finv(0.95,2,98)=3.08$$

$$T^2 = x^T P \Lambda_a^{-1} P^T x < 6.3035$$

$$T^2 = \frac{2(100 - 1)(100 + 1)}{100(100 - 2)}3.089 = 6.3035$$

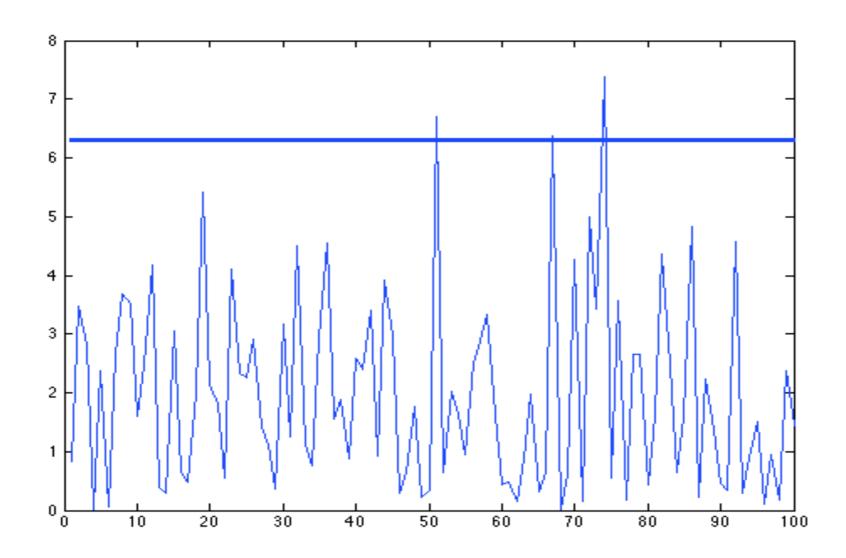
Usando
$$T^2 = x^T P \Lambda_a^{-1} P^T x < 6.3035$$

$$com\lambda_a = \begin{bmatrix} 1.27 & 0\\ 0 & 2.52 \end{bmatrix}$$

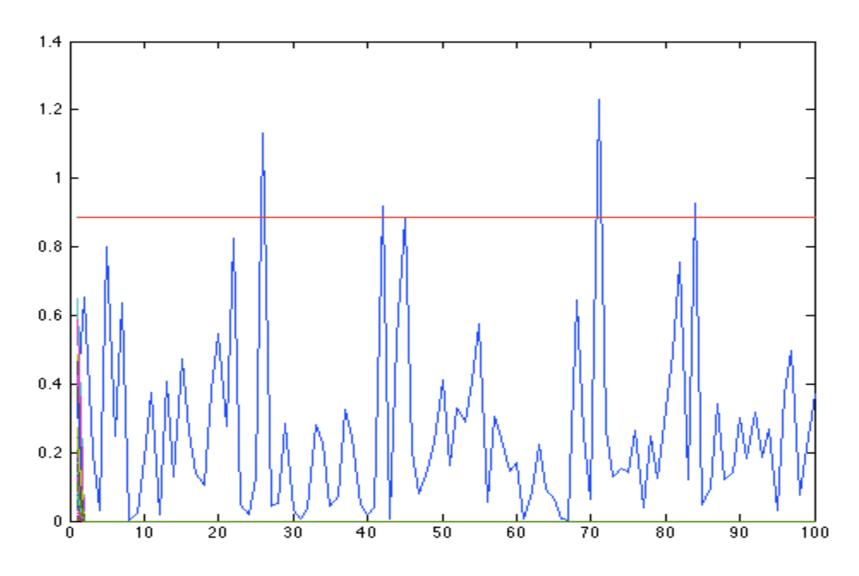
A equação t = xP converte esta região em uma elipse $t^T \Lambda_a^{-1} t^T < 6.3035$

$$\frac{t_1^2}{1.27} + \frac{t_2^2}{2.52} \le 6.3035 \qquad t = \begin{bmatrix} t_1 & t_2 \end{bmatrix}$$

Estatística T^2 e limiar



Estatística Q e limiar



Uma vez detectada a falha, o próximo passo é determinar sua causa.

Problemas:

- Grande número de variáveis
- Processo com reciclos e realimentações
- Variáveis se desviam do setpoint durante pequenos períodos (as malhas de controle trazem as variáveis de volta ao setpoint)

Abordagem não supervisionada

Identificar as variáveis monitoradas associadas a falha.

- a) Um menor grupo de variáveis pode permitir identificar a falha.
- b) Usar algoritmos de detecção de causalidade para encontrar a causa raiz

Abordagem supervisionada

Treinar algoritmos de classificação com dados de falha.

Exemplos: redes neurais, kNN, árvore de decisão

Comparação das abordagens:

Supervisionada: requer dados de treinamento de todas as falhas. Porém dá o diagnóstico da falha

Não supervisionada: não requer dados de falhas. Porém, requer em geral conhecimento de especialista para produzir o diagnóstico

Determina-se que variáveis escore são afetadas pela violação do limiar testando a hipótese alternativa das variáveis escore normalizadas:

$$\frac{t_i}{\sqrt{\lambda_i}} \qquad i \in [1, 2, \dots n]$$

$$H_1$$
: $n\frac{t_i^2}{\lambda_i} > T_\alpha^2$

Este teste fornece as n*≤n variáveis que são afetadas pela falha.

Justificativa para a divisão do limiar por n. Lembrando o caso de duas variáveis,

$$\frac{t_1^2}{1.27} + \frac{t_2^2}{2.52} \le 6.3035$$

As variáveis t_1 e t_2 têm a mesma contribuição para a estatística T^2 .

Para cada escore t_i violado, calcula-se a contribuição de cada variável:

$$C_{i,j} = \frac{t_i}{\lambda_i} P_{i,j} x_{0j}$$

onde $P_{i,j}$ são elementos da matriz de pesos P, x_{0j} é a medida da variável j normalizada.

Fazer
$$C_{i,j} = 0$$
 caso $C_{i,j} < 0$.

Contribuição total da variável j a todos r escores violados:

$$C_j = \sum_{i=1}^{r} C_{i,j}$$

Por quê remover os valores negativos?

$$\sum_{i=1}^{r} \frac{t_i^2}{\lambda_i} = \sum_{i=1}^{r} \frac{t_i}{\lambda_i} \left(\sum_{j=1}^{m} P_{i,j} x_{0j} \right)$$

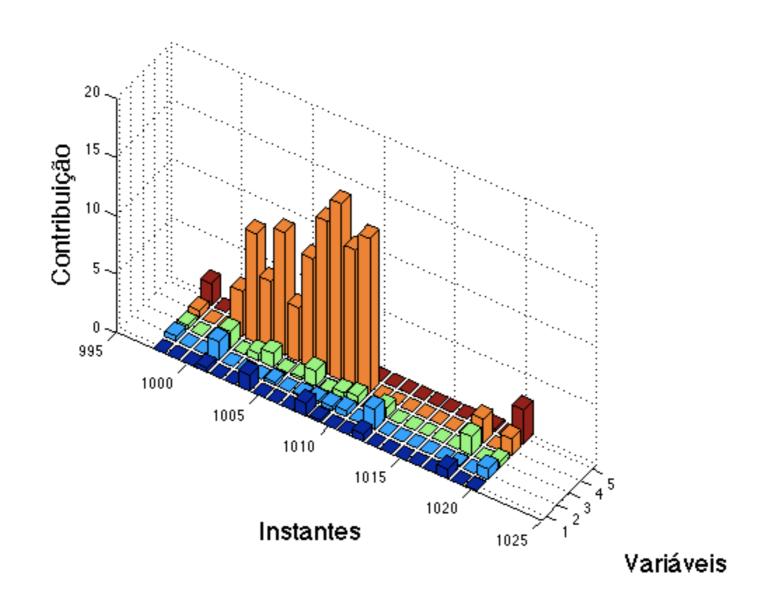
A contribuição da variável j sobre T^2 é

$$C_j = x_{0j} \sum_{i=1}^r \frac{t_i}{\lambda_i} P_{i,j}$$

A inclusão de termos negativos nesta soma reduz o valor global da j-ésima variável.

A quantificação dos principais contribuintes para o valor absoluto da variável j requer a remoção dos valores negativos de $\frac{t_i}{\lambda_i} P_{i,j} X_{oj}$

Exemplo: contribuições para a estatística T2:



Contribuições da estatística Q

A estatística Q é baseada na soma dos resíduos de cada variável. A contribuição é simplesmente

$$C_j = g_j$$
$$g = x_0 - Pt = [I - PP^T]x_0$$

Como a variância destes resíduos pode variar, melhor normalizar g_j $c_j = \frac{g_j}{\sqrt{E\{g_j^2\}}}$

Diagnóstico de falhas usando classificadores

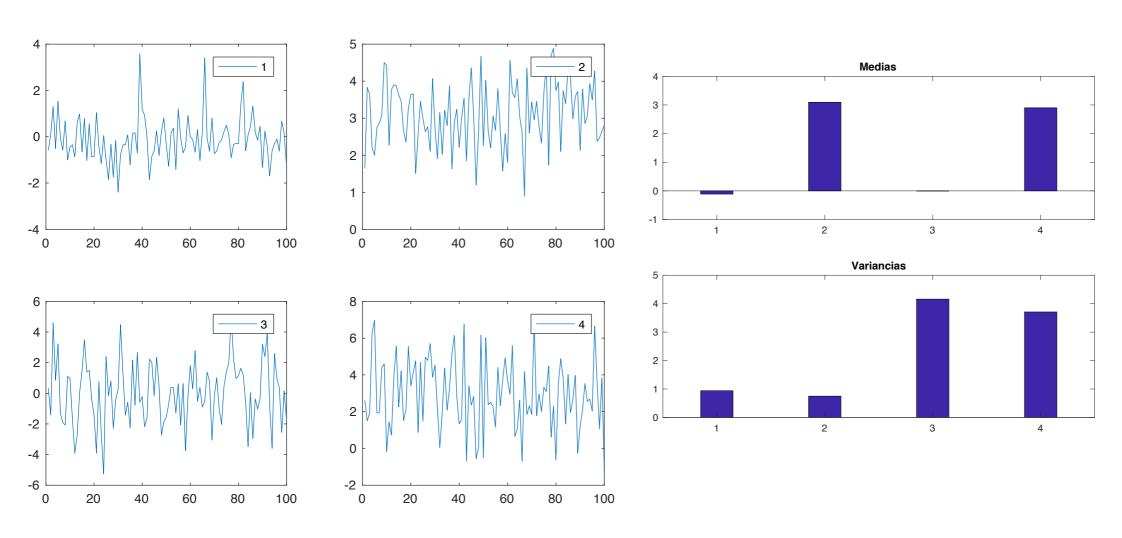
São armazenados dados de falha e calculadas características que permitam discriminá-las.

Exemplos de características:

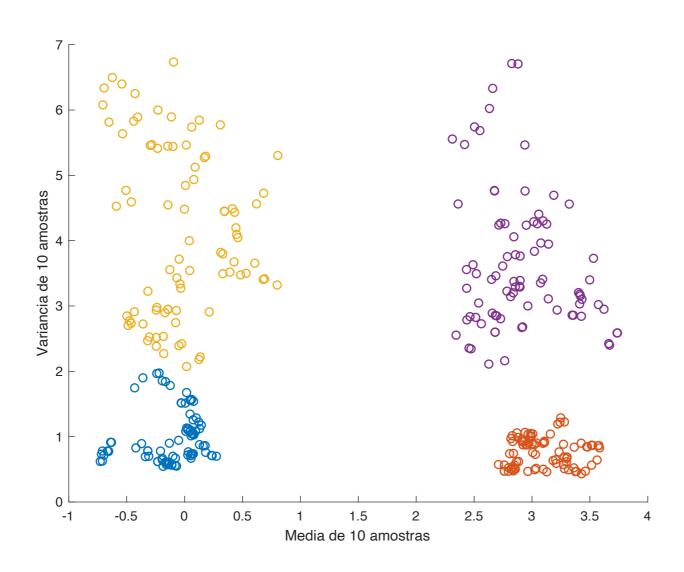
média, desvio padrão, curtose, assimetria, máxima variação, desvio padrão das diferenças

Diagnóstico de falhas usando classificadores

4 sinais com suas médias e variâncias



Diagnóstico de falhas usando classificadores



Exemplo de Diagnóstico de falhas usando classificadores

Detecção de cavitação em uma válvula de controle usando os 4 primeiros momentos estatísticos da emissão acústica medida na válvula

