Utilização de RNNs para Predição de mudança de estado em compressor industrial

Fernanda Mickosz Villa Verde

CPE727 – Deep Learning

8 de dezembro de 2025

Sumário

Motivação e Objetivos do trabalho

Motivação:

- Compressores industriais são ativos críticos (segurança, disponibilidade, custo).
- Mudanças de regime operacional (estados) afetam: Desempenho energético; Risco de falha; Planejamento de manutenção.
- Predizer **quando** ocorrerá a próxima mudança de estado é útil para:
  - Detecção precoce de desvios;
  - Replanejamento operacional;
  - Suporte à decisão para operadores.

Objetivos do trabalho:

- Modelar séries temporais industriais (compressores) com amostragem irregular, dados faltantes e alta dimensionalidade utilizando arquiteturas recorrentes.
- Predição dos **estados** em janelas futuras;
- Predição do **tempo até a próxima mudança de estado**.

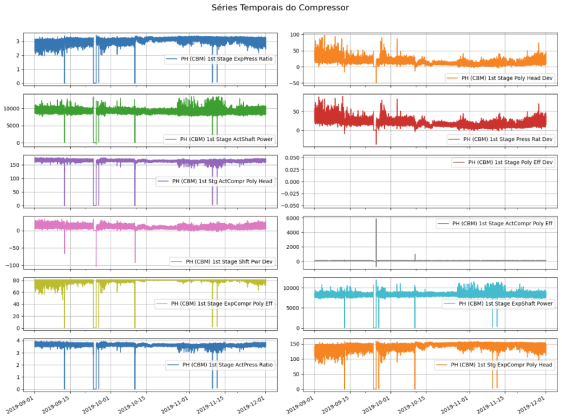
Comparar arquiteturas:

- Modelos DEEP, LSTM, GRU, BiLSTM e BiGRU com GRU fuser, todos com otimização Adam;
- Variações de treinamento (warmup, scheduler, RAdam, AdamW, variational dropout, difusão, log-likelihood e layernorm).

Base de dados e pré-processamento

Base de dados

Cognite — sinais reais de sensores de um compressor industrial offshore.



Pré-processamento

- Estados operacionais:
  - Estados originais: 6 (0 a 5);
  - Estados finais: 3 (normal, alerta, falha).
- Normalização robusta;
- Amostragem a cada 5 minutos;
- Janelas temporais:
  - $L = 40$ amostras ($\approx$ 3h20min);
  - Deslocamento de 40 amostras (janelas não sobrepostas).

Definição do problema

- Série multivariada: $x_t \in \mathbb{R}^d$, $t = 1, \ldots, T$, com $d = 11$ sensores.
- Estados discretos: $s_t \in \{0, 1, 4\}$ (após fusão dos 6 estados iniciais).
- Para cada janela $X = (x_{t-L+1}, \ldots, x_t)$, queremos:
  - Predizer a distribuição sobre estados futuros:

$$p(s_{t+\Delta} \mid X)$$

  - Predizer o tempo até a próxima mudança de estado:

$$\hat{\tau} = f_\theta(X)$$

- Problema multi-tarefa:
  - Classificação de estados (estado futuro) + regressão de tempo (tempo até a mudança).

A partir de janelas de histórico de sensores, o modelo aprende simultaneamente a prever o próximo regime operacional e o tempo restante até a próxima mudança de estado.

Função de custo

- Função de custo multi-tarefa:

$$\mathcal{L} = \lambda_m \mathcal{L}_{\text{miss}} + \lambda_v \mathcal{L}_{\text{vae}}$$

$$\mathcal{L}_{\text{miss}} = \text{BCE}(m, \hat{m}) \quad \text{com} \quad \hat{m} = \sigma(f_{\text{miss}}(h))$$

$\mathcal{L}_{\text{miss}}$: aprendizado explícito do padrão de dados ausentes.

$$\mathcal{L}_{\text{vae}} = \mathbb{E}_{q(z_\tau|x)}\big[-\log p(\tau \mid z_\tau)\big] + \beta\,\text{KL}\big(q(z_\tau)\,\|\,\mathcal{N}(0, I)\big)$$

$\mathcal{L}_{\text{vae}}$: **modelagem probabilística do tempo até falha**, penalizando mudanças próximas e calibrando incerteza.

- Peso maior atribuído a instantes próximos à mudança de estado:

$$\log p(\tau \mid z_\tau) \;\propto\; w_t \cdot \|\hat{\tau} - \tau\|^2, \quad w_t \gg 1$$

- Permite estimar **incerteza**, **intervalos de confiança** e **cobertura probabilística**.

Arquiteturas avaliadas

- **TSDF_DEEP**:
  - Modelo feedforward sobre janelas (baseline não-recorrente).
- **TSDF_LSTM**:
  - RNN LSTM unidirecional;
  - Versão **BiLSTM**.
- **TSDF_GRU**:
  - RNN GRU unidirecional;
  - Versão **BiGRU**.

Arquitetura baseline: TSDF_DEEP (feedforward)

- Entrada: janela temporal $X = (x_1, \ldots, x_L)$, com $x_t \in \mathbb{R}^{11}$ e máscara $m_t \in \{0,1\}^{11}$.
- Codificação inicial por MLP (por timestep):

$$e_t = \phi\left(W_e[x_t \,\|\, m_t] + b_e\right), \quad t = 1, \ldots, L$$

  onde $\phi(\cdot)$ é uma ativação não linear (ReLU/GELU).
- Incorporação explícita do tempo:

$$e'_t = \mathrm{MLP}\left([e_t \,\|\, t_t]\right)$$

  com t_t o timestamp normalizado do instante t.
- Representação latente da janela:
  - Obtida independentemente por timestep (sem estados recorrentes);
  - Integra informação temporal apenas via timestamps explícitos.
- Cabeças de saída (multi-tarefa):

$$\hat{x}_t = f_\theta(e'_t) \quad \text{(reconstrução / difusão)}$$
$$\hat{\tau} = g_\theta(e'_t) \quad \text{(tempo até mudança de estado)}$$

- Treinamento:
  - Otimizador Adam;
  - Mesmas funções de perda usadas nos modelos recorrentes.

Arquitetura 1: LSTM

- Entrada: janela temporal $X = (x_1, \ldots, x_L)$, $x_t \in \mathbb{R}^{11}$.
- Codificação temporal com LSTM unidirecional:

$$(h_t, c_t) = \mathrm{LSTM}(x_t, h_{t-1}, c_{t-1}), \quad t = 1, \ldots, L$$

- Representação da janela:

$$z = h_L \in \mathbb{R}^H$$

- Cabeças de saída (multi-tarefa):

$$\hat{y}_{\text{state}} = \mathrm{softmax}(W_s z + b_s)$$
$$\hat{\tau} = W_\tau z + b_\tau$$

- Otimização:
  - Otimizador Adam, minimizando perda conjunta (classificação de estado + regressão de tempo).

Arquitetura 2: GRU

- Mesma entrada:

$$\mathrm{X} = (x_1, \ldots, x_L), \quad x_t \in \mathbb{R}^{11}$$

- Codificação temporal recorrente:

$$\{h_t\}_{t=1}^{L} = \mathrm{GRU}(\mathrm{X})$$

- Representação latente da janela:

$$z = h_L \in \mathbb{R}^H$$

- Cabeças de saída:

$$\hat{y}_{\text{state}} = \mathrm{softmax}(W_s z + b_s)$$
$$\hat{\tau} = W_\tau z + b_\tau$$

- Otimização:
  - Otimizador Adam, com os mesmos hiperparâmetros do baseline Deep (learning rate, batch, etc.).

Arquitetura 3: BiGRU + GRU fuser

- Codificação da janela com BiGRU:

$$h_t^{\rightarrow}, h_t^{\leftarrow} = \mathrm{BiGRU}(x_t, h_{t-1}^{\rightarrow}, h_{t+1}^{\leftarrow})$$

$$z_k = [h_L^{\rightarrow} \parallel h_1^{\leftarrow}] \in \mathbb{R}^{2H}$$

  onde z_k é o embedding da k-ésima janela.
- Fusão temporal entre janelas com GRU fuser:

$$m_k = \mathrm{GRU}_{\mathsf{fuser}}(z_k, m_{k-1}), \quad k = 1, \ldots, K$$

$m_K \in \mathbb{R}^{H_f}$ resume a história recente de janelas.

- Cabeças de saída a partir de m_K:

$$\hat{y}_{\mathsf{state}} = \mathrm{softmax}(W_s m_K + b_s)$$
$$\hat{\tau} = W_\tau m_K + b_\tau$$

- Otimização:
  - Adam sobre todos os parâmetros (BiGRU + GRU fuser + cabeças).

Arquitetura 4: BiLSTM + GRU fuser

- Codificação da janela com BiLSTM:

$$(h_t^{\rightarrow}, c_t^{\rightarrow}), (h_t^{\leftarrow}, c_t^{\leftarrow}) = \mathrm{BiLSTM}(x_t, \dots)$$

$$z_k = [h_L^{\rightarrow} \parallel h_1^{\leftarrow}] \in \mathbb{R}^{2H}$$

- Fusão temporal entre janelas com GRU fuser:

$$m_k = \mathrm{GRU}_{\mathsf{fuser}}(z_k, m_{k-1}), \quad k = 1, \dots, K$$

- Cabeças de saída:

$$\hat{y}_{\mathsf{state}} = \mathrm{softmax}(W_s m_K + b_s)$$
$$\hat{\tau} = W_\tau m_K + b_\tau$$

- Otimização:
  - Treino conjunto com Adam, mesma função de perda multi-tarefa.

Variações de treinamento - Otimização

- **BiLSTM + Warmup & Scheduler**
  - Aumenta gradualmente a taxa de aprendizado no início do treino, evitando instabilidades e melhorando a convergência inicial.
  - `warmup_steps = 50`, `min_lr_factor = 0.01`
- **BiLSTM + RAdam**
  - Reduz a variância adaptativa do Adam nos primeiros passos, tornando o treinamento mais estável.
  - `optimizer_name = 'radam'`

Variações de treinamento — Regularização

- **BiLSTM + Variational Dropout**
  - Regularização explícita no tempo, reduzindo overfitting sem quebrar dependências temporais.
  - `variational_dropout = 0.2`
- **BiLSTM + Difusão (missingness)**
  - Regularização implícita via objetivos probabilísticos, forçando robustez a dados ausentes.
  - `lam = [0., 0.0, 0.0, 0.05, 0.0, 0.95]`, `rebuild=True`
- **BiLSTM + LayerNorm**
  - Estabiliza as ativações internas, com efeito regularizante indireto.
  - `use_layernorm = True`
- **BiLSTM + AdamW (Weight Decay)**
  - Regularização explícita dos pesos, melhorando generalização.
  - `optimizer_name = 'adamw'`, `weight_decay = 1e-4`

Configuração Experimental

- Divisão treino/validação/teste: 60% / 20% / 20%.
- Treinamento por 500 épocas, batch size 256.
- Paciênica de 50 épocas para early stopping.
- Função de perda multi-tarefa conforme descrito.
- Otimizador: Adam (exceto variações).
- Taxa de aprendizado inicial: 1×10^{-3}.
- Early stopping baseado em MSE de validação.
- Avaliação final no conjunto de teste.

Figuras de Mérito utilizadas

- **NELBO** (Negative Evidence Lower Bound):
  - Loss probabilística minimizada no treinamento;
  - Maximiza implicitamente a verossimilhança (ELBO);
  - Balanceia reconstrução e regularização latente (KL).
- **MSE** (Mean Squared Error):
  - Mede o erro médio quadrático na predição do tempo até a próxima mudança;
  - Avalia precisão pontual das estimativas.
- **NLL** (Negative Log-Likelihood):
  - Avalia a qualidade probabilística das previsões;
  - Penaliza incertezas mal calibradas (sub ou superestimação).
- **Cobertura 90%** (`cov_90`):
  - Fração de observações reais contidas no intervalo preditivo de 90%;
  - Mede a calibração do modelo.
- **Largura do intervalo 90%** (`width_90`):
  - Largura média dos intervalos preditivos de 90%;
  - Reflete o compromisso entre precisão e incerteza (sharpness).

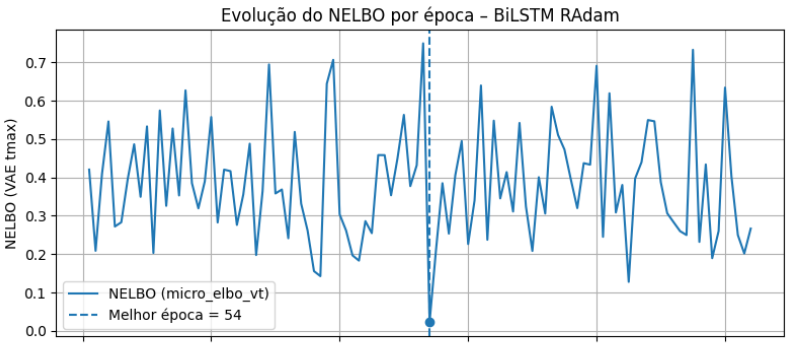
Resultados quantitativos

Modelo	NELBO ↓	MSE (micro) ↓	NLL ↓	Cov90 → 0.90	Width90 ↓
BiLSTM RAdam	**0.023**	0.002 ± 0.000	0.023	0.946	0.270
BiLSTM Warmup/Sched.	0.033	0.002 ± 0.000	0.033	0.946	0.270
LSTM	0.064	0.002 ± 0.000	0.063	0.937	0.270
BiLSTM	0.150	0.002 ± 0.000	0.150	0.920	0.270
BiGRU	0.203	0.001 ± 0.000	0.202	0.875	0.270
BiLSTM AdamW	0.230	0.001 ± 0.001	0.229	0.866	0.270
BiLSTM Difusão	0.329	0.002 ± 0.001	0.328	0.839	0.270
BiLSTM LayerNorm	0.383	0.054 ± 0.001	0.332	0.839	0.270
GRU	0.464	0.003 ± 0.001	0.463	0.812	0.270
BiLSTM VarDrop 0.2	0.992	0.002 ± 0.001	0.991	0.705	0.270
DEEP	8016.760	0.819 ± 0.011	33.711	0.250	0.270

Tabela: Comparação de desempenho entre modelos e variações.

Curva de treinamento — Modelo **BiLSTM RAdam**

- Curva de NELBO bastante oscilatória, refletindo o desbalanceamento entre grupos e a raridade de mudanças de estado;
- Após as primeiras dezenas de épocas, o modelo passa a operar em um patamar de NELBO baixo, com mínimos recorrentes;
- A melhor época (**epoch 54**) atinge o menor NELBO entre as épocas avaliadas, sendo o melhor compromisso entre ajuste e complexidade para a tarefa de mudança de estado.



Discussão dos resultados — Mudança de estado

- **Qualidade probabilística**:
  - O **BiLSTM RAdam** apresenta o menor NELBO, indicando melhor ajuste probabilístico global;
  - Bons valores de NLL e MSE micro confirmam alta precisão na predição de mudanças de estado raras.
- **Calibração das incertezas**:
  - Cobertura próxima de 0.90 nos melhores modelos indica boa calibração probabilística;
  - Width90 constante sugere intervalos estáveis e comparáveis entre arquiteturas.
- **Impacto arquitetural**:
  - Modelos bidirecionais superam LSTM/GRU unidirecionais;
  - Em cenários fortemente desbalanceados, o principal desafio é a **otimização sob gradientes raros**, e não o overfitting;
  - Otimizadores adaptativos (RAdam, warmup) estabilizam o treinamento e facilitam a captura de eventos de mudança raros, enquanto regularização excessiva tende a diluir esses sinais.

Conclusões — Mudança de estado

- A predição de mudanças de estado é um problema fortemente desbalanceado e sensível à calibração probabilística.
- Arquiteturas recorrentes probabilísticas são essenciais:
  - Capturam dependências temporais longas;
  - Modelam explicitamente incertezas associadas ao evento de transição.
- O **BiLSTM RAdam** é o modelo mais adequado:
  - Menor NELBO entre os modelos avaliados;
  - Boa calibração (Cov90 ≈ 0.95) e baixo erro micro.
- Esses resultados indicam potencial para:
  - Detecção antecipada de mudanças de regime;
  - Suporte a sistemas de monitoramento e alerta industrial.

Referências

- Kingma, D. P.; Welling, M. *Auto-Encoding Variational Bayes*. ICLR, 2014.
- Hochreiter, S.; Schmidhuber, J. *Long Short-Term Memory*. Neural Computation, 1997.
- Cho et al. *Learning Phrase Representations using RNN Encoder–Decoder*. EMNLP, 2014.
- Ho, J.; Jain, A.; Abbeel, P. *Denoising Diffusion Probabilistic Models*. NeurIPS, 2020.
- Che et al. *Recurrent Neural Networks for Multivariate Time Series with Missing Values*. Sci Rep, 2018.