



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



Escola Tècnica
Superior d'Enginyeria
Informàtica

Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Informàtica
Universitat Politècnica de València

Simulación de datos de sensores industriales

TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

Máster en Big Data Analytics

Autor: Pedro Henrique Mano Figueiredo Fernandes

Tutor: Francisco Sánchez Cid

Curso 2015-2016

Abstract

Los entornos industriales hacen uso de sensores para obtener mediciones de varios factores en su cadena de producción. En las fases iniciales, la cantidad de datos generados es muy reducida, por lo que no es significativa para permitir la aplicación de técnicas de Big Data. Estas técnicas pueden descubrir muchos patrones en los datos, útiles para detección de anomalías o predicción futura. El proyecto descrito en este documento busca simular nuevos datos a través de una pequeña cantidad de datos generados por sensores industriales. La aplicación de estas técnicas se extiende a todo el contexto de proyectos IoT (*Internet of Things*), donde los sensores representan la principal fuente de datos.

Palabras clave: Machine learning, Big Data, PCA

Abstract

The industrial environments make use of sensors for acquiring metrics on several variables in their production pipeline. In the initial phases, the generated data has very low volume, making it hard to apply Big Data techniques. These techniques can bring much insight over the data, useful for anomaly detection or future prediction. The project described in this document seeks the simulation of new data using a small amount of data generated by industrial sensors. The application of such techniques can be extended to the entire context of IoT (*Internet of Things*), where sensors represent the main source of data.

Key words: Machine learning, Big Data, PCA

Índice general

Índice general	V
Índice de figuras	VII
Índice de tablas	VII

Índice general	VII
1 Introducción	1
1.1 Estructura del documento	1
2 Descripción del problema	3
3 Estado del Arte	5
4 Solución propuesta	7
4.1 Reducción de dimensionalidad - PCA	7
4.1.1 Singular Value Decomposition	10
4.1.2 El método NIPALS	10
4.2 Series temporales - ARIMA	11
4.2.1 Estacionaridad	11
4.2.2 Parámetros del modelo y predicción	14
5 Experimentación y resultados	17
5.1 Dataset	17
5.1.1 Estructura	17
5.1.2 Transformación	18
5.1.3 Distribución de los datos	18
5.2 PCA	19
5.2.1 PCA iterativo - NIPALS	19
5.2.2 Test de hipótesis - Estadístico T-cuadrado de Hotelling	19
5.2.3 Simulación con distribución Gaussiana - hipótesis nula	20
5.3 ARIMA	20
5.3.1 Simulación con todo el dataset	20
5.3.2 Simulación con datos de 1 día	20
5.3.3 Simulación con búsqueda de puntos cercanos de la Gaussiana	20
6 Big Data	23
6.1 MongoDB	23
6.2 Spark	23
7 Conclusiones	25
8 Trabajos futuros	27
Bibliografía	29

Índice de figuras

4.1	Datos con distribución Gaussiana y las dos primeras componentes PCA. .	8
4.2	Proyección de puntos a una línea.	9
4.3	Ejemplo de serie estacionaria.	12
4.4	Ejemplo de serie no estacionaria.	12
4.5	Ejemplo de serie para aplicar el test de Dickey-Fuller.	13
4.6	Ejemplo de serie con diferenciación.	14
4.7	ARIMA iterativo: AR(1).	15
4.8	ARIMA iterativo: MA(1).	15
4.9	ARIMA iterativo: AR(1) y MA(1).	15
4.10	ARIMA iterativo: AR(2) y MA(2).	16
4.11	Predicciones del modelo ARIMA(2, 1, 2).	16
5.1	Datos originales para la variable <i>APVs</i>	19
5.2	Datos invertidos para la variable <i>APVs</i> , usando PCA con NIPALS.	20
5.3	Datos invertidos para la variable <i>APVs</i> , usando PCA con SVD.	20
5.4	Datos de la variable <i>H6x</i>	21
5.5	Datos invertidos para la variable <i>H6x</i> , usando PCA con NIPALS.	21
5.6	Datos invertidos para la variable <i>H6x</i> , usando PCA con SVD.	21
5.7	Three simple graphs	22

Índice de tablas

Índice general

CAPÍTULO 1

Introducción

Este proyecto tiene como fuente de datos uno o varios sensores de un mecanizado industrial de inyección de plástico. Los sensores efectúan mediciones de varios factores con una regularidad temporal, generando así muestras de datos en determinados intervalos de tiempo. Cuando se trata de sensores, es normal que los datos no tengan la calidad necesaria para aplicar técnicas matemáticas. Hay que tener en cuenta que la frecuencia de las mediciones no es necesariamente constante, que pueden existir interrupciones, ruido y redundancias. Además, en el ámbito de IoT (*Internet of Things*), se añade la inherente conectividad de los aparatos como factor de complejidad.

Las técnicas de Big Data, en particular *Machine Learning*, necesitan gran cantidad de datos para poder inducir modelos matemáticos que expliquen esos datos. Cuanto más datos mejor, para un aprendizaje más robusto y fiable. Sin embargo, al principio de los proyectos, la cantidad de datos recolectados suele ser pequeña y insuficiente para poder extraer conocimiento significativo de los mismos. El objetivo de este proyecto es aprender y simular el comportamiento de uno o varios sensores a través de una cantidad reducida de datos recolectados en los mismos.

Una vez preparado el *dataset*, es necesario aprender un modelo matemático que lo describa. Las técnicas usadas para ese efecto son del ámbito de *Machine Learning*.

1.1 Estructura del documento

Este documento se estructura de la siguiente forma: la descripción del problema; el estado del arte; un análisis sobre el *dataset* y respectivas transformaciones para adecuar los datos; las soluciones propuestas y respectiva base teórica; la experimentación, resultados y discusión; conclusiones del trabajo realizado y posibles mejoras; y termina con las fuentes bibliográficas que han servido de base del estudio.

CAPÍTULO 2

Descripción del problema

El paradigma de IoT (*Internet of Things*) tiene mucha presencia en la industria. Se utilizan sensores para controlar determinados factores en las cadenas de producción. Los datos generados son de gran importancia. Con el debido tratamiento y análisis, estos datos pueden ayudar descubrir conocimiento nuevo. En el entorno industrial, ese conocimiento se puede traducir en la anticipación de anomalías o mejoras de rendimiento de las máquinas, con todo el beneficio que eso conlleva.

La extracción de conocimiento de los datos se hace con técnicas estadísticas de *Machine Learning*. Estas técnicas están relacionadas con Big Data por la simple regla de que cuantos más datos mejor. Los modelos matemáticos que explican los datos son más robustos si hay mucho volumen de datos. Sin embargo, en las etapas iniciales de implementación de IoT no hay mucha cantidad de datos, lo que dificulta la aplicación de *Machine Learning*.

Hay que tener en cuenta que los datos de sensores suelen tener problemas de calidad, sobre todo relacionados con ruido, redundancias o frecuencia de muestro. Por ejemplo, si un sensor mide la temperatura de una máquina, esa medición sufre interferencias del ambiente, por lo que la medición no es completamente objetiva. Ese efecto se conoce por ruido. Cuanto a las redundancias, pueden suceder en casos de pérdida de conectividad, en que el sensor vuelve a dar una métrica aunque la haya dado ya anteriormente. Esto sería, también, un caso de cambio de la frecuencia de muestreo, que se traduce en irregularidades de la serie temporal asociada a los datos.

El objetivo de este proyecto es aprender y simular datos de sensores industriales. Los nuevos datos, de mucho mayor volumen, podrán ser usados para probar y depurar los algoritmos de detección de averías y de predicción desarrollados para entornos Big Data.

CAPÍTULO 3

Estado del Arte

Los problemas de ruido y redundancias en los datos son comunes y están bastante estudiados. Para solucionar ese problema, las técnicas de reducción de dimensionalidad, en que los datos son reducidos a lo esencial, suelen tener buenos resultados. PCA (*Principal Component Analysis*) es la técnica más usual. PCA se usa para descomponer un conjunto de datos multivariante en un grupo de componentes ortogonales que mejor explican la varianza. El ajuste a los datos es de tipo lineal.

Las primeras componentes son las que mayor varianza explican y por eso se llaman principales. El orden de las componentes es relevante, la primera es la más explicativa, la segunda la que más explica quitando la primera, y así sucesivamente. Así que es de esperar que lo que están explicando las últimas sea, realmente, el ruido de la señal. El artículo *A Tutorial on Principal Component Analysis* [1] deja patente esa evidencia en el objetivo de filtrar el ruido y redundancias para obtener la dinámica importante de los datos.

Aunque PCA no tenga capacidades de predicción (pertenece a la categoría de *unsupervised learning*), se puede usar para simular nuevos datos, como se defiende en el artículo 'The Truth About Principal Component and Factor Analysis'. Aparte de las componentes que explican los datos, PCA obtiene también las proyecciones a lo largo de las componentes. Se pueden aprender las series de los *scores* de las proyecciones, reemplazar por nuevos valores y luego transformar de vuelta a un vector de características originales.

Las observaciones de los sensores tienen una implícita ordenación cronológica (y así lo tendrán también las componentes principales). El estudio de esa relación se denomina análisis de series temporales. Con este análisis ahí se puede llegar a explicar mejor la serie y hacer predicciones sobre el futuro de la misma.

Los modelos *Exponential smoothing* y *AutoRegressive Integrated Moving Average* (ARIMA) son los más usados para predicción de series temporales. *Exponential smoothing* se basan en la descripción de tendencia y de variación estacional. Pero, en general, observaciones sucesivas suelen tener dependencia entre si, como se describe en el libro *Introduction to Time Series Analysis and Forecasting* [4]. Para incorporar esta dependencia se usan los modelos ARIMA. Los modelos ARIMA son un flexible y poderoso método para análisis de series temporales y predicción. A lo largo de los años, se vienen usando con éxito en varios problemas de investigación y en la práctica.

CAPÍTULO 4

Solución propuesta

La solución propuesta para la simulación de datos empieza con la proyección de los datos del espacio multivariante original a un espacio ortogonal más reducido. Esta técnica de *Machine Learning* se conoce por PCA (*Principal Component Analysis*). El nuevo espacio (con menos dimensiones) contiene las componentes que mejor explican los datos, por lo que se eliminan ruido y redundancias.

Para cada componente, se efectúa la generación de nuevos valores con distribución Gaussiana. Esta simulación puede ser de miles o millones de nuevos puntos - no es una tarea computacional exigente y además tendrá utilidad más adelante. La simulación Gaussiana servirá como base del estudio, una vez que, al ser invertida, genera una población que es idéntica a la original. La comprobación de dicha similitud de poblaciones se hace a través del estadístico T-cuadrado de Hotelling. Y esta será nuestra hipótesis nula.

Los datos originales tienen un determinado sentido temporal. Las componentes lo tendrán también, así que se procede al análisis de la serie temporal de esas componentes. El modelo propuesto es ARIMA (*Autoregressive Integrated Moving Average*). Los modelos de series temporales se ajustan a los datos para mejor comprensión de estos o para predicción de nuevos puntos en la serie. El objetivo es dotar la simulación de un patrón temporal aprendido previamente.

Teniendo en cuenta que el estudio se sustenta en la hipótesis nula de la simulación Gaussiana, para cada predicción de las varias componentes con marca temporal, se buscará el punto multi-dimensional más cercano en la simulación Gaussiana. El punto elegido se usará para re-alimentar el modelo ARIMA aprendido. Llegados aquí, tenemos nuevos valores simulados de las componentes y además con carácter temporal. Al re-proyectar este espacio al espacio original obtenemos nuevos valores (simulados) para las características originales.

La simulación Gaussiana debe tener gran volumen para que la simulación final sea efectiva. Cuantos más puntos tenga mejor, para que la búsqueda encuentre puntos más cercanos. Con un volumen de datos muy grande, los paradigmas de programación convencionales no tienen capacidad de respuesta. Se adoptan herramientas Big Data (*Spark* y *MongoDB*) para permitir escalar la parte de simulación Gaussiana, su almacenamiento y la búsqueda de puntos cercanos.

4.1 Reducción de dimensionalidad - PCA

PCA (*Principal Components Analysis*) pertenece a la familia de aprendizaje no supervisado (*unsupervised learning*), de *Machine Learning*, donde no existen etiquetas o clases

a predecir. Los datos de entrenamiento son simplemente observaciones, sin estar clasificados. Las técnicas de *unsupervised learning* se usan para descubrir grupos de similitud (clusters) en los datos; o para determinar la distribución de los datos en el espacio original; o también, que interesa a este estudio, para proyectar los datos en espacios de menos dimensiones.

Pocas dimensiones suelen ofrecer mejor *insight* sobre los datos. Como primera ventaja, permiten la aplicación de técnicas de visualización - resulta muy difícil visualizar datos en más de 3 dimensiones (incluso en 3 dimensiones puede ser difícil). Además, las componentes que no son principales (menos explicativas) suelen ser ruido o redundancia - con esta técnica se pueden atenuar los efectos de estos. La simulación de datos puede usar la ventaja de la eliminación de ruido y redundancia, generando así datos con mayor entidad.

PCA descompone un *dataset* multivariante en un determinado número de componentes ortogonales que son los que más explican la varianza de ese *dataset*. El número de componentes es menor o igual al número de características originales. Por ejemplo, si dos variables son directamente proporcionales, basta con una sola componente para explicar el comportamiento de las dos - esa correlación quedará representada en la matriz calculada por PCA. Si se convierte esa componente al espacio original de dos características, se obtienen los valores originales.

La dirección de la primera componente principal es aquella a lo largo de la cual las observaciones varían más.

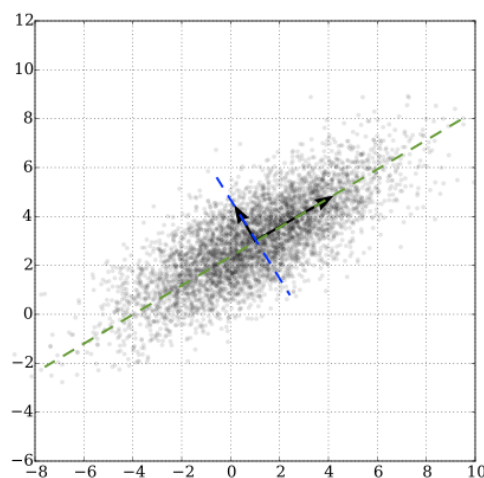


Figura 4.1: Datos con distribución Gaussiana y las dos primeras componentes PCA.

Por ejemplo, la Figura 4.1 representa un conjunto de datos de dos dimensiones con distribución Gaussiana. La flecha más grande representa la dirección de la primera componente principal de los datos. Se puede verificar a simple vista que esta es la dirección con mayor variabilidad en los datos. Si trazamos una línea imaginaria a lo largo de esa flecha (como la línea verde) y proyectamos en ella los datos, tendremos la proyección con mayor variabilidad.

La dirección de segunda componente está representada por la otra flecha. Al proyectar los datos en la línea imaginaria azul, podemos imaginar que el espectro de variabilidad es inferior al la primera.

La proyección de un punto a una línea es muy sencilla: basta con buscar el punto más cercano en esa línea. Los puntos azules en la Figura 4.2 representan la proyección de los puntos originales en la línea.



Figura 4.2: Proyección de puntos a una línea.

En términos matemáticos, PCA es una transformación lineal ortogonal. Consideremos la matriz X , constituida por n líneas de observaciones y m características. El objetivo es proyectar los datos a un espacio con dimensionalidad $d < m$, de forma que se maximice la varianza de los datos proyectados. La transformación de PCA se define por la ecuación:

$$Y = X \cdot w \quad (4.1)$$

Que se interpreta de la siguiente forma: una matriz $m \times k$ de pesos (*loadings*) w transforma la matriz $n \times m$ X en la matriz $n \times k$ de componentes principales (*scores*) Y .

Para obtener la primera componente, el primer vector de *loadings* w debe maximizar la varianza. Siguiendo el razonamiento del libro *Pattern Recognition and Machine Learning* [3], consideremos el vector w_1 , que, por conveniencia (y sin pérdida de generalización) debe ser un vector unitario de modo que $w_1^T w_1 = 1$. Cada punto de X , x_i , es proyectado para el escalar $w_1^T x_i$. La media de los datos proyectados es $w_1^T \bar{x}$, donde \bar{x} es la media dada por:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (4.2)$$

Y la varianza de los datos proyectados:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \{w_1^T \cdot x_i - w_1^T \cdot \bar{x}\} = w_1^T \cdot S \cdot w_1 \quad (4.3)$$

Donde S es la matriz de varianzas-covarianzas definida por:

$$S = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) \cdot (x_i - \bar{x})^T \quad (4.4)$$

Ahora maximizamos la varianza de los datos proyectados $w_1^T \cdot S \cdot w_1$ con respecto a w_1 . Hay que restringir la maximización para prevenir que tienda a infinito. La restricción viene de la normalización $w_1^T w_1 = 1$. Para forzar la restricción introducimos un

multiplicador de Lagrange λ_1 :

$$w_1^T \cdot S \cdot w_1 + \lambda_1(1 - w_1^T \cdot w_1) \quad (4.5)$$

Que tiene un punto estacionario cuando:

$$S \cdot w_1 = \lambda_1 \cdot w_1 \quad (4.6)$$

Esto define que w_1 es un vector propio de S . Si multiplicamos la parte izquierda por w_1^T , teniendo en cuenta que $w_1^T w_1 = 1$, vemos que la varianza es dada por:

$$w_1^T \cdot S \cdot w_1 = \lambda_1 \quad (4.7)$$

Así que la varianza será máxima cuando se defina w_1 igual al vector propio con el máximo valor propio λ_1 .

4.1.1. Singular Value Decomposition

PCA está muy relacionado con una técnica matemática llamada *Singular Value Decomposition* (SVD), tanto que muchas veces los nombres se usan intercambiados. De hecho, el algoritmo de PCA de `scikit-learn` usa la descomposición SVD de `numpy`. SVD es un método más general de entender el cambio de base.

La representación de la descomposición en valores singulares es:

$$X = U \Sigma W^T \quad (4.8)$$

Donde:

- U es una matriz $n \times n$, en que las columnas son vectores unitarios ortogonales de tamaño n .
- Σ es una matriz diagonal $n \times m$ de números positivos σ_i , llamados valores singulares de X .
- W es una matriz $m \times m$, cuyas columnas son vectores unitarios ortogonales de tamaño p .

La ecuación 4.2 indica que una matriz X puede ser convertida en una matriz ortogonal, una matriz diagonal y otra matriz ortogonal. O, dicho de otra forma, corresponde a una rotación, un estiramiento y otra rotación.

4.1.2. El método NIPALS

SVD es el método general para cálculo de PCA. Pero si lo aplicamos a un *dataset* multidimensional muy grande puede tener problemas, porque calcula todas las componentes de una vez (calcula toda la matriz de varianzas-covarianzas de X). Esto implica un gran consumo de memoria y CPU. NIPALS significa *Non-linear Iterative Partial Least Squares* y es un algoritmo iterativo que solo calcula las primeras componentes principales.

Para cada componente, el algoritmo NIPALS itera hasta que el *score* y_1 tenga convergencia. Antes de la iteración, se atribuye un valor aleatorio al *score* y_1 . La convergencia se detecta cuando la variación del *score* y_1 respecto a la iteración anterior es muy pequeña.

En cada iteración, para encontrar el *loading* w_1 se proyecta X hacia y_1 - regresión del *score* respecto a cada columna de X - y se guarda el coeficiente de regresión en el *loading*. Luego se proyecta X hacia w_1 para encontrar el *score* y_1 - regresión del *loading* respecto a cada línea de X - y se guarda el coeficiente de regresión en el *score*.

Una vez convergido, para calcular la siguiente componente se resta el producto $y_1 \cdot w_1$ a X . Esto corresponde a restar a X la parte de los datos explicada por y_1 y w_1 .

TODO: Hotelling T2?

4.2 Series temporales - ARIMA

Las series temporales surgen frecuentemente en la monitorización de procesos industriales. Cada observación de un sensor tiene una marca temporal asociada. El conjunto de las observaciones ordenadas de forma cronológica se denomina serie temporal. En este capítulo se demostrará el importante valor que tiene esa marca temporal en el análisis de las señales.

El análisis de series temporales asienta en la suposición de que los datos tomados en determinados puntos en el tiempo tienen una estructura interna (correlación, tendencia o variación estacional) que hay que tener en cuenta. El objetivo del análisis de series temporales es extrapolar datos futuros a través de los datos pasados.

ARIMA significa (*Autoregressive Integrated Moving Average*) y, junto con (*Exponential Smoothing*), es uno de los métodos más populares de análisis de series temporales. ARIMA incorpora formalmente la dependencia entre observaciones sucesivas en el modelo, mientras *Exponential Smoothing* no lo hace de forma tan eficiente.

La componente AR (*Autoregressive* - auto-regresiva) del modelo ARIMA se refiere al uso de observaciones anteriores en una ecuación regresiva para predecir valores futuros. A esta componente se asocia un parámetro p , que corresponde al número de puntos anteriores a incluir en el modelo. La componente MA (*Moving Average* - media móvil) representa el error del modelo como combinación de términos de error anteriores. El parámetro asociado es q y corresponde al número de términos de error anteriores a usar. La componente I (*Integrated*) indica la diferenciación de los datos, que corresponde a calcular la diferencia entre los valores y sus antecesores. El parámetro d es el número de diferenciaciones a aplicar en el modelo. De esta forma, los modelos ARIMA son generalmente definidos por $ARIMA(p, d, q)$.

Es importante resaltar que el modelo $ARIMA(p, d, q)$ asume que la serie no tiene variación estacional y tendencia. Potencialmente es necesario eliminar esas características antes de crear el modelo. Esto nos lleva al concepto de *stationarity* (estacionaridad).

4.2.1. Estacionaridad

Las series temporales son diferentes de un problema de regresión normal porque son dependientes del tiempo. Así que el supuesto básico de la regresión lineal de que las observaciones son independientes no se verifica en este caso. Para poder aplicar el modelo ARIMA es necesario que la serie sea estacionaria. Una serie es estacionaria cuando la media y varianza, si existen, no cambian en función del tiempo. Como ARIMA usa los periodos anteriores para modelar el comportamiento de la serie, es importante que esta sea estable para tener más acierto. Muchas veces la estacionaridad se puede detectar visualmente, como se presenta en los ejemplos siguientes.

La Figura 4.3 es un ejemplo de una serie estacionaria, donde los valores oscilan con una varianza constante alrededor de una media de aproximadamente 69,0.

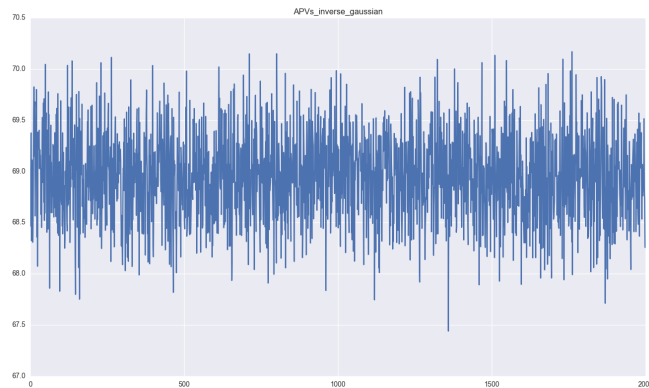


Figura 4.3: Ejemplo de serie estacionaria.

La Figura 4.4, sin embargo, no presenta señales de media y varianza constantes. De hecho se detecta una ligera tendencia decreciente, lo que la hace no estacionaria.

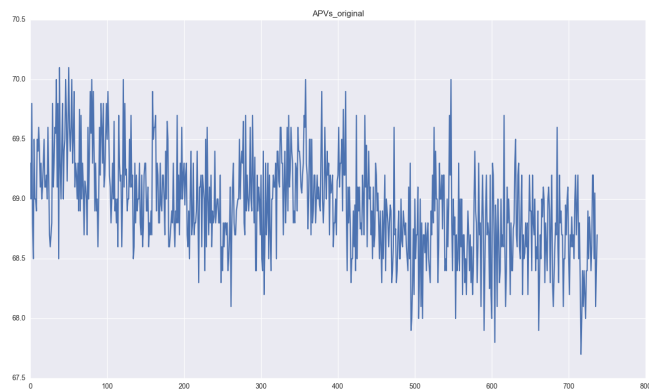


Figura 4.4: Ejemplo de serie no estacionaria.

Otra propiedad importante para que ARIMA sea efectivo es que la serie tenga periodos fijos. Cada observación debe ser dada a una frecuencia constante. Una vez los puntos sean equidistantes entre si, la variable tiempo, o índice, ya no necesita existir explícitamente. Muchas veces se usa el tiempo para la representación gráfica, sin embargo esa variable no se usa en el modelo en si. En los gráficos anteriores no se usa la marca de tiempo en el eje x , simplemente un índice numerico.

Hay casos donde la estacionaridad es más difícil de determinar a simple vista. Además el análisis necesita una prueba formal de la estacionaridad. Para eso se usa el test estadístico de Dickey-Fuller, conocido por *augmented Dickey-Fuller test* (ADF). La hipótesis nula asume que la serie es no estacionaria. Valores altos del p-valor indican que el test no rechaza la hipótesis nula y, por lo tanto, la serie es no estacionaria. Por otro lado, valores bajos de p-valor indican que la serie es estacionaria. En general, tomando el 5 % de confianza, si el p-valor es mayor que 0.05 la serie es no estacionaria. Se demuestra en el ejemplo siguiente.



Figura 4.5: Ejemplo de serie para aplicar el test de Dickey-Fuller.

La serie de la Figura 4.5 tiene una tendencia creciente, por lo que no debería ser estacionaria. Apliquemos el test de Dickey-Fuller, presente en módulo statsmodels de Python:

```
from statsmodels.tsa.stattools import adfuller
dfctest = adfuller(ts)
print('Test Statistic', dfctest[0])
print('p-value', dfctest[1])
print('Confidence levels', dfctest[4])
```

Listing 4.1: Test de Dickey-Fuller de statsmodels de Python.

```
Test Statistic 0.815368879206
p-value 0.991880243438
Confidence levels {'1%': -3.4816817173418295, '5%':
-2.8840418343195267, '10%': -2.5787700591715979}
```

Listing 4.2: Resultados del test de Dickey-Fuller de statsmodels de Python.

Los resultados del Listing 4.1 demuestran que la hipótesis nula no puede ser descartada, una vez que *p-value* es cercano a 1. El resultado del estadístico lo confirma también: para que se descarte la hipótesis nula, el valor del estadístico debe ser inferior a alguno de los valores de los intervalos de confianza.

La serie tendrá que ser transformada hasta ser estacionaria. Una de las técnicas más comunes para conseguirlo es la diferenciación, que consiste en calcular las diferencias entre observaciones consecutivas. La diferenciación ayuda a estabilizar la media de la serie, eliminando la tendencia y la estacionalidad. El primer nivel de diferenciación de la serie y se define por:

$$y_t - y_{t-1} \quad (4.9)$$

Siendo t un determinado punto en el tiempo. Se pueden aplicar más niveles de diferenciación, pero con un solo nivel suele ser suficiente.

Aplicando diferenciación a la serie anterior obtenemos la serie transformada representada en la Figura 4.6 y respectivos resultados en Listing 4.3.

```
Test Statistic -2.82926682417
p-value 0.0542132902838
Confidence levels {'1%': -3.4816817173418295, '5%':
-2.8840418343195267, '10%': -2.5787700591715979}
```

Listing 4.3: Resultados del test de Dickey-Fuller de statsmodels de Python.

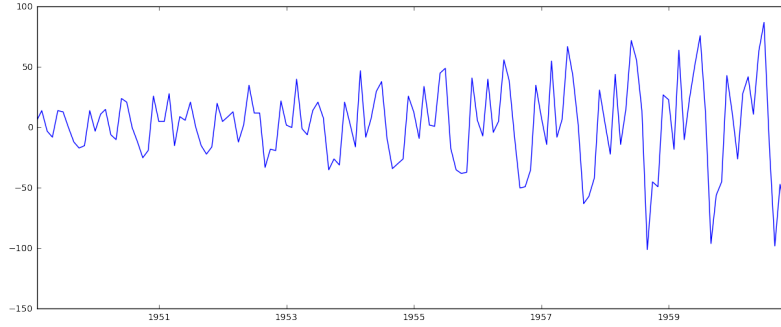


Figura 4.6: Ejemplo de serie con diferenciación.

El test de Dickey-Fuller demuestra que el p-valor ha bajado considerablemente, para valores casi inferiores a 0,05, por lo que podemos decir con un 95 % de confianza que la serie es estacionaria ahora. El análisis visual también permite verificar que la tendencia se ha eliminado.

4.2.2. Parámetros del modelo y predicción

Como mencionado anteriormente, el modelo ARIMA es una ecuación lineal que depende de los parámetros p, d, q , correspondientes a las partes autoregresiva (AR), integración (I) y de medias móviles (MA) del modelo, respectivamente.

El paso de diferenciación es aplicado internamente por el modelo, a través del parámetro d , que corresponde a la parte I (*Integrated*) de ARIMA. No hace falta pasar los datos diferenciados al modelo. Para la determinación de los parámetros p y q óptimos se usan formalmente los gráficos de correlación ACF (*Auto-Correlation Function*) y PACF (*Partial Auto-Correlation Function*). Estos gráficos se han usado en fases iniciales de este estudio, pero salen del ámbito de investigación.

Otra solución es la minimización del error, o valor residual, de la predicción. La diferencia entre la observación y_t y el valor obtenido a través del ajuste del modelo a los datos (o valor ajustado y'_t) se llama valor residual, y es definido por:

$$e_t = y_t - y'_t \quad (4.10)$$

A través de los residuales se puede calcular el *root mean squared error* (RMSE). El modelo con menor RMSE es el mejor. Así que la solución consiste en iterar, probando todas las combinaciones de los parámetros (p, d, q) de ARIMA, para obtener el modelo con menor RMSE. Se ejemplifica el proceso a continuación.

Se ha comprobado antes que la serie necesita un nivel de diferenciación para ser estacionaria: $d = 1$. La componente I de ARIMA será tendrá, así, valor 1.

Empezamos la iteración con un nivel para la componente auto-regresiva: $p = 1$, que corresponde a $AR(1)$. El resultado del ajuste del modelo se puede ver en la Figura 4.7. La línea azul representa los datos de la serie diferenciada y la línea roja es el ajuste del modelo a esos datos. El RMSE es de $\approx 32,04$.

Pasamos a probar la componente de media móvil: $q = 1$, o $MA(1)$. El RMSE ha bajado un poco, ahora es $\approx 31,52$ (Figura 4.8).

Combinando los dos modelos anteriores es cuando tenemos realmente un modelo ARIMA completo, con las tres componentes: $ARIMA(p, d, q) = ARIMA(1, 1, 1)$. Se



Figura 4.7: ARIMA iterativo: AR(1).



Figura 4.8: ARIMA iterativo: MA(1).

puede verificar que el RMSE ha bajado mínimamente respecto al modelo anterior (Figura 4.9).



Figura 4.9: ARIMA iterativo: AR(1) y MA(1).

Obviando algunas iteraciones intermedias, pasamos al modelo con dos niveles de *AR* y de *MA*: $ARIMA(p, d, q) = ARIMA(2, 1, 2)$. El RMSE obtenido es de $\approx 25,06$, que corresponde al menor valor. Si paramos la iteración, este sería el modelo con mejor ajuste. En la Figura 4.10 podemos verificar ese ajuste visualmente: la línea roja se ajusta mejor a los datos que en los gráficos anteriores.

estadísticas, incluyendo modelos de series temporales. Particularmente útil es la funcionalidad de generar gráficas de predicción automáticamente, sin necesidad de volver los datos a la escala original (sin diferenciación), usando `plot_predict`.

Una vez ajustado el modelo a los datos, se pueden hacer predicciones futuras. Se define el periodo de predicción y el modelo aprendido generará esos pronósticos. La Figura 4.11 da un ejemplo de los resultados que se pueden obtener.

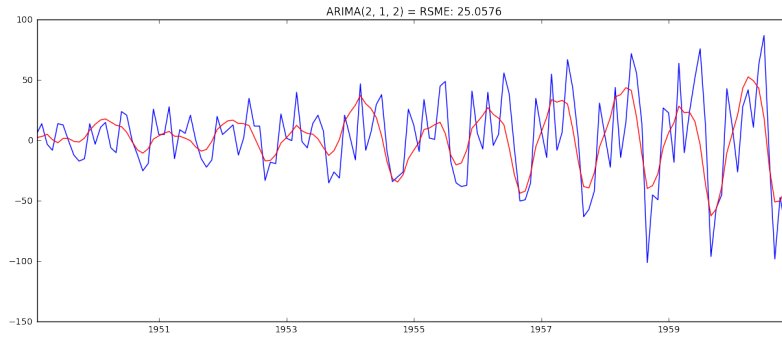


Figura 4.10: ARIMA iterativo: AR(2) y MA(2).

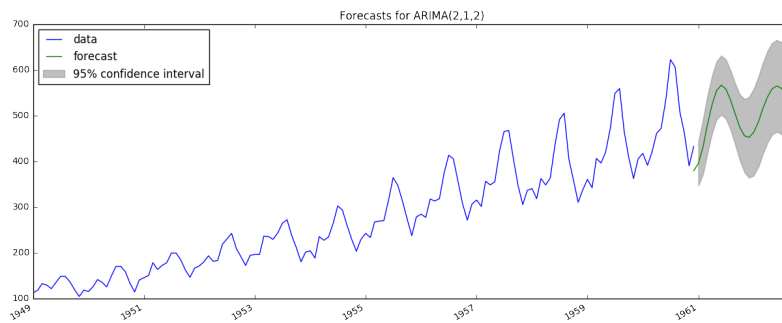


Figura 4.11: Predicciones del modelo ARIMA(2, 1, 2).

La línea azul de la Figura 4.11 representa los datos, ahora sin diferenciación. La línea verde representa la predicción después del final de la serie (llamada predicción *out-of-sample*). El área sombreada representa el intervalo de confianza de 5 % de la predicción. Se puede comprobar visualmente que la predicción sigue aproximadamente la tendencia de la serie. Predicciones con mayor horizonte futuro tendrán mayor incertidumbre, una vez que el modelo hará regresión de los valores futuros con los valores predichos.

El modulo `statsmodels` de Python tiene un conjunto de herramientas estadísticas, incluyendo modelos de series temporales. Particularmente útil es la funcionalidad de generar gráficas de predicción automáticamente, sin necesidad de volver los datos a la escala original (sin diferenciación en este caso), usando `plot_predict`. El Listing 4.4 es el código que genera el gráfico de la Figura 4.11. El periodo de predicción está aquí definido en los parámetros `start` y `end`, en un total de 20 nuevos puntos desde el final de la serie (`len(ts)`).

```
from statsmodels.tsa.arima_model import ARIMA
model = ARIMA(ts, order=(2, 1, 2))
results = model.fit(dispatch=-1)
fig, ax = plt.subplots()
plt.plot(ts)
fig = results.plot_predict(start=len(ts)-1, end=len(ts)+20, dynamic
                           =True, ax=ax, plot_insample=False)
```

Listing 4.4: `plot_predict` de `statsmodels` de Python.

CAPÍTULO 5

Experimentación y resultados

TODO

5.1 Dataset

El dataset proporcionado es de reducida dimensión, tiene tan solo 5MB, por lo que la tarea de ingestión no es intensiva. Sin embargo, hay que tratar los datos en bruto antes de empezar a usarlos. El fichero de datos es de texto, así que hay que hacer determinadas conversiones para poder usar tipos más específicos, como sean fechas y números. El primer problema tiene que ver con los formatos de fecha, que no son correctos para el *locale* España en *Windows*, lo que exige una adaptación de los algoritmos de *parsing*, como se describe en el apartado 'Transformación'.

5.1.1. Estructura

Un breve análisis del *dataset* en un editor de texto muestra que tiene un formato de campos separados por espacios y tabulaciones. La cantidad de espacios es variable:

```

TiempoinicioAPHuAPVs
...

06-oct-2015 21:57:03.44.669.3...
06-oct-2015 21:57:12.45.169.0...
06-oct-2015 21:57:21.44.869.8...
...

```

Listing 5.1: Ejemplo del *dataset*.

La primera línea contiene un *header* (cabecera), con 15 nombres:

```
Tiempoinicio APHu APVs ACPv ZSx ZUs H7x H1x H2x H6x H3x H4x H5x ACPx Svo
```

Listing 5.2: *Header* del *dataset*.

Se puede verificar también que hay una línea vacía después del *header*. El primer campo tiene un formato de fecha/hora y los demás campos tienen formato decimal.

5.1.2. Transformación

Para la ingestión y transformación de los datos se han usado librerías muy útiles y con muchas funcionalidades que facilitan bastante esas tareas: en los scripts Python se ha usado el paquete *Pandas* y en R la función *read.csv2* del paquete *utils*.

Las 14 variables decimales no ofrecen problemas en la ingestión del *dataset*. Para asegurar el formato decimal, es conveniente definir el separador decimal como punto ('.'). Con eso es suficiente para un em parsing correcto.

Las fechas son más complejas de procesar. El formato de mes da indicios de estar escrito en castellano: oct, dic, mar, abr, may, jun. Sin embargo, en *Windows*, el *locale* España usa un punto ('.') como *standard* en la abreviación de mes, por ejemplo 'oct.'. Así que el *parsing* de fechas tiene que ser ajustado si el sistema operativo es *Windows*. La estrategia ha sido el uso de una expresión regular para añadir el punto ('.') necesario en las abreviaciones de meses, como se puede ver en los siguientes *snippets* Python y R:

```
def parse_date(date_string):
    locale_date_string = re.sub("(.-)(.)(.-)", "\\1\\2.\\3",
                                date_string)
    return datetime.strptime(locale_date_string, "%d-%b-%Y_%H:%M:%S")
```

Listing 5.3: *Parsing* de fechas en Python.

```
data$Tiempoinicio <- sub("(\\d+)(\\w+)(-\\d+\\s\\d+:\\d+:\\d+)",
                        "\\1\\2.\\3", data$Tiempoinicio)
data$Tiempoinicio <- as.POSIXct(data$Tiempoinicio, format="%d-%b-%Y_
%H:%M:%S")
```

Listing 5.4: *Parsing* de fechas en R.

En este caso particular de las fechas, el problema no está en el *dataset* realmente. Los *standards* de fechas varían en cada sistema operativo. La idea de exponer este caso no es más que transmitir la necesidad de ajustar y normalizar los datos cuando provienen de sensores.

El resultado final es un *dataset* estructurado con una marca temporal como índice y 14 características: *APHu*, *APVs*, *ACPv*, *ZSx*, *ZUs*, *H7x*, *H1x*, *H2x*, *H6x*, *H3x*, *H4x*, *H5x*, *ACPx* y *Svo*.

5.1.3. Distribución de los datos

Las mediciones de los sensores se distribuyen por varios días, no siempre consecutivos. Los días con mediciones son algunos

- 6-9, 12 de octubre de 2015
- 14 de diciembre de 2015
- 7, 8, 11, 14 de marzo de 2016
- 6, 29 de abril de 2016
- 2, 26 de mayo de 2016
- 8, 17, 20 de junio de 2016

En cada día las muestras son dispares y en momentos distintos del día, probablemente por corresponder a distintas pruebas. Así, también las frecuencias de muestreo son variables - en algunos días parece indicar una frecuencia de 10 segundos pero hay otros donde son de 1 minuto.

5.2 PCA

TODO

5.2.1. PCA iterativo - NIPALS

Para *datasets* grandes, el algoritmo iterativo NIPALS ofrece mejor rendimiento, al determinar solamente el número de componentes definido. SVD calcularía la matriz de varianzas-covarianzas para todos los componentes, lo que exigiría mucha memoria y CPU. Aunque en este caso el *dataset* es pequeño, usaremos el algoritmo iterativo NIPALS.

Empezamos por analizar visualmente los datos de sensores para un día determinado. Observemos el comportamiento de la variable *APVs* para ese día, representado en la Figura 5.1.



Figura 5.1: Datos originales para la variable *APVs*.

Aplicamos el algoritmo iterativo NIPALS para calcular las 5 componentes principales, proyectando de esta forma el espacio original de 14 dimensiones (características) en un espacio más reducido de solamente 5 dimensiones. Al invertir este espacio de vuelta al espacio original se obtienen datos muy similares a los originales, como se puede comprobar informalmente en la Figura 5.2, que representa los datos invertidos para la variable *APVs*.

Obviamente se podría usar la descomposición SVD para el cálculo de las componentes principales. Usando SVD de *numpy* se obtienen los mismos resultados, que se pueden analizar informalmente en la Figura 5.3.

5.2.2. Test de hipótesis - Estadístico T-cuadrado de Hotelling

TODO

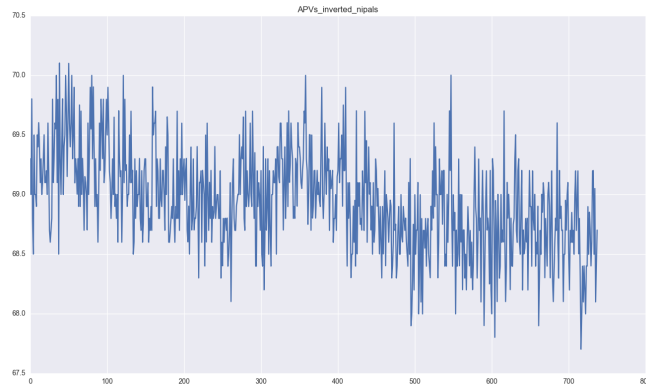


Figura 5.2: Datos invertidos para la variable *APVs*, usando PCA con NIPALS.

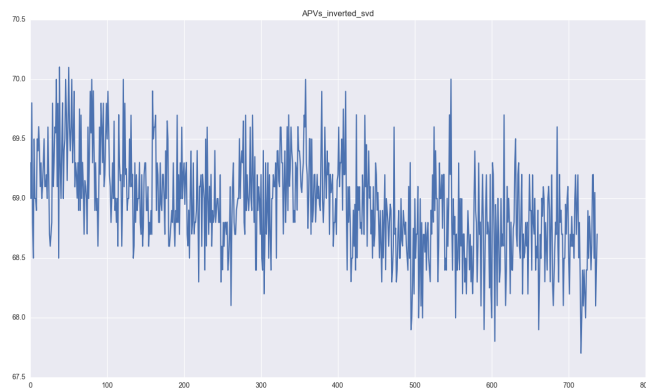


Figura 5.3: Datos invertidos para la variable *APVs*, usando PCA con SVD.

5.2.3. Simulación con distribución Gaussiana - hipótesis nula

TODO

5.3 ARIMA

TODO

5.3.1. Simulación con todo el dataset

TODO

5.3.2. Simulación con datos de 1 día

TODO

5.3.3. Simulación con búsqueda de puntos cercanos de la Gaussiana

TODO

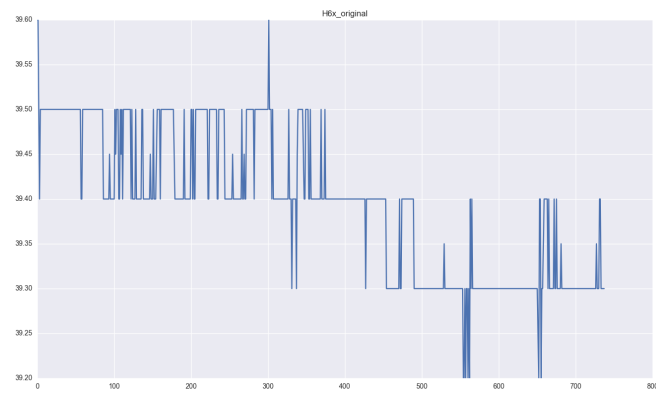


Figura 5.4: Datos de la variable $H6x$.

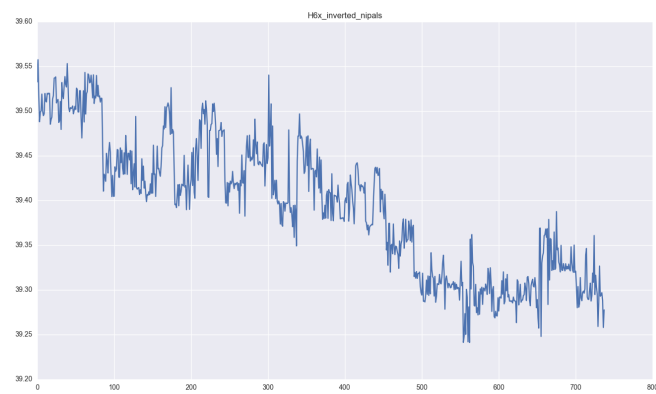
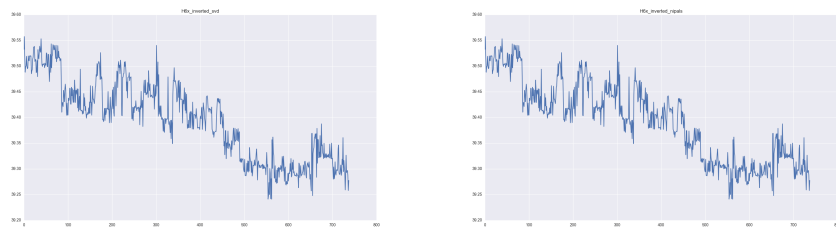


Figura 5.5: Datos invertidos para la variable $H6x$, usando PCA con NIPALS.



Figura 5.6: Datos invertidos para la variable $H6x$, usando PCA con SVD.



(a) Datos invertidos para la variable $H6x$, usando PCA con SVD. (b) Datos invertidos para la variable $H6x$, usando PCA con NIPALS

Figura 5.7: Three simple graphs

CAPÍTULO 6

Big Data

TODO

6.1 MongoDB

TODO

6.2 Spark

TODO

CAPÍTULO 7

Conclusiones

TODO

CAPÍTULO 8

Trabajos futuros

Bibliografía

- [1] Jon Shlens. *A TUTORIAL ON PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS. Derivation, Discussion and Singular Value Decomposition.* Version 1, 25 March, 2003.
- [2] Unknown Authors. *The Truth about Principal Components and Factor Analysis.* 28 September, 2009.
- [3] Christopher M. Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning.* Springer, 2006.
- [4] Montgomery, Douglas C. Jennings, Cheryl L. Kulahci, Murat *Introduction to Time Series Analysis and Forecasting.* Springer, 2006.
- [5] *Principal component analysis (PCA).* Consultar <http://scikit-learn.org/stable/modules/decomposition.html#principal-component-analysis-pca>.

