

Una propuesta de pre-procesamiento basada en kernels para el diagnóstico de fallos en procesos industriales. ^{*}

JM. Bernal-Lázaro ^{*} O. Llanes-Santiago. ^{**}
A. Prieto-Moreno ^{**} A. Ríos-Bolívar ^{***} E. García-Moreno ^{****}

^{*} Centro de Ref. para la Educación Avanzada, Cujae, Habana, Cuba.

^{**} Dpto. de Automática y Computación, Cujae, Habana, Cuba.

^{***} Dpto. de Ing. de Control, ULA, Mérida, Venezuela

^{****} Dpto. de Ing. de Sist. y Automática, UPV, Valencia, España.

Resumen

En la industria actual se requieren de sistemas de diagnóstico que sean más robustos ante ruidos y perturbaciones y que logren altos niveles de desempeño durante la clasificación de los fallos. Una forma de lograr lo anterior es complementar estos sistemas con módulos de pre-procesamiento que faciliten reducir la dimensión del espacio de trabajo para eliminar información irrelevante que enmascare cualquier fallo en desarrollo y/o sobrecargue la operación del sistema.

En este trabajo se comparan las medidas de desempeño Alpha, Beta y Gamma, en el ajuste de una función kernel RBF utilizada con las herramientas de pre-procesamiento: KFDA y KPCA. Los mejores resultados se obtuvieron utilizando la técnica KFDA con la métrica α , al lograrse una reducción sensible del espacio de trabajo y elevados por cientos de clasificación correcta de los fallos. Para la clasificación posterior al pre-procesamiento fue utilizada una Red Neuronal Artificial (ANN) que diagnostica los fallos simulados en el proceso de prueba Tennessee Eastman Process (TEP).

Keywords: Fault diagnosis, Feature extraction, Kernel evaluation measures, PCA, FDA.

1. INTRODUCCIÓN

En las industrias modernas existe una marcada necesidad de mejorar el desempeño en los procesos, de producir con más calidad y de satisfacer las crecientes regulaciones medioambientales (Hwang et al., 2010). Las paradas no planificadas y los fallos en el equipamiento, pueden tener un impacto desfavorable en la disponibilidad de los sistemas, en la seguridad de los operadores y en el medio ambiente.

Un fallo puede definirse como una desviación no permitida de al menos una propiedad característica o variable de un sistema; de manera que éste ya no puede satisfacer la función para la cual fue diseñado (Isermann, 2011). El diagnóstico de estos estados de deterioro, puede reducir sensiblemente los costes de mantenimiento y reparación.

Los métodos de diagnóstico de fallos pueden ser clasificados en tres categorías: basados en modelos cuantitativos, basados en modelos cualitativos y basados en los históricos del proceso. Los métodos basados en modelos cuantitativos necesitan construir un modelo exacto del proceso lo cual limita su aplicación práctica, en especial para procesos industriales muy complejos. Los métodos basados en modelos cualitativos no tienen este problema, sin embargo obtener el conocimiento experto requerido

para el uso de estas herramientas puede ser en ocasiones muy complicado. Por su parte los métodos basados en datos (*data-driven*), solamente requieren de los históricos de operación que caracterizan el proceso (Chen and Yan, 2013). El conocimiento extraído de ellos, es el que se utiliza para llevar a cabo las tareas de diagnóstico de fallos en los procesos industriales.

El diagnóstico de fallos basado en datos históricos, puede ser visto como un procedimiento de reconocimiento de patrones que incluye el pre-procesamiento de los datos, la extracción de los patrones característicos y la clasificación de los mismos (Venkatasubramanian et al., 2003a).

El desarrollo de nuevas estrategias que mejoren los porcentajes de diagnóstico correcto de los fallos es un problema abierto a la investigación (Venkatasubramanian et al., 2003b; Hwang et al., 2010; Isermann, 2011). En los últimos tiempos el uso de métodos kernels en el pre-procesamiento de la información para obtener mejores resultados en el diagnóstico, se ha ido incrementando (Zhu and Song, 2011; Zhang, 2009; Prieto Moreno et al., 2013; Fan et al., 2014).

En este trabajo se comparan las medidas o métricas de desempeño Alfa, Beta y Gamma, en el ajuste de una función kernel de Base Radial (RBF) que es utilizada junto a las herramientas de pre-procesamiento kernel Análisis Discriminante de Fisher (KFDA) y Análisis de Componentes Principales (KPCA). Para la clasificación posterior al pre-

^{*} J.M. Bernal de Lázaro, (jbernal@crea.cujae.edu.cu)

procesamiento fue utilizada una Red Neuronal Artificial (ANN) que diagnostica los fallos simulados en el proceso de prueba Tennessee Eastman Process (TEP). Los resultados obtenidos al utilizar la combinación KFDA_α+ANN logra una reducción sensible del espacio de trabajo y elevados por cientos de clasificación correcta de los fallos, lo que la convierte en una excelente opción para ser utilizada en el diagnóstico de fallos basado en datos históricos.

Es necesario aclarar que, como el objetivo del trabajo es analizar las técnicas de pre-procesamiento kernels y su efecto para la clasificación de los fallos, se trabaja bajo la suposición que existe un mecanismo de detección encargado de diferenciar el comportamiento del sistema en estado de funcionamiento normal y el resto de los estados. Este mecanismo, cuando detecta alguna desviación del comportamiento normal, inicia el mecanismo de clasificación utilizado como diagnosticador en este trabajo.

La estructura de este trabajo es la siguiente: la Sección 2 ofrece una visión general de los enfoques para la reducción de la dimensión e introduce los algoritmos kernel en el pre-procesamiento de datos, así como las principales métricas utilizadas para el ajuste de las funciones kernels. La Sección 3 se encarga del análisis teórico de los clasificadores y la discusión del problema de prueba TEP. Posteriormente, en la Sección 4 se presenta la discusión de los resultados. Por último, se presentan las conclusiones.

2. PRE-PROCESAMIENTO PARA REDUCIR LA DIMENSIÓN DEL ESPACIO DE TRABAJO

Para lograr reducir la dimensión de una matriz de datos históricos $\mathbf{X}_{\ell \times p}$ tal que $\mathbf{X}_{\ell \times p} \rightarrow \mathbf{X}_{\ell \times d} \in \mathbf{R}^d$ pueden utilizarse dos enfoques: la selección de características o la extracción de características. El primero de los dos enfoques selecciona únicamente los elementos más relevantes para las tareas de clasificación. Esto implica que las variables eliminadas no contribuyen al sistema de diagnóstico, con lo que se desecha la posibilidad de detectar fallos desconocidos que las puedan afectar. Contrario a esto, en la extracción de características no se eliminan variables y la selección de los elementos tiene lugar en un espacio de mediciones transformado. Esto permite mantener la contribución de todas las variables al sistema de diagnóstico, puesto que las características en el espacio transformado se obtienen como una combinación lineal de las variables originales.

2.1 Algoritmos de pre-procesamiento basados en kernels.

La idea básica detrás de cualquier Método Kernel puede ser explicada a partir de dos operaciones concatenadas. La primera de ellas dirigida a proyectar los datos de entrada hacia un espacio de dimensión superior \mathcal{H} . La segunda etapa enfocada en el uso de algún algoritmo de aprendizaje (ie: PCA, FDA) que cumple con determinados objetivos en el espacio mapeado. En este paso, el rendimiento alcanzado dependerá en gran medida de la estructura geométrica de los datos en \mathcal{H} .

Análisis de Componentes Principales kernel.

El Análisis de Componentes Principales con kernels (KPCA) es una extensión del Análisis de Componentes Principales (PCA). Esta técnica determina un conjunto de vectores de transformación ordenados por la cantidad de varianza explicada que garantiza una reducción de la dimensión

que es óptima en términos de capturar la variabilidad en los datos (Scholkopf and Smola, 2001). Para ello KPCA realiza una transformación no lineal mediante una función kernel que implícitamente proyecta los datos hacia un espacio de dimensión superior \mathcal{H} donde se realiza el PCA tradicional. La clave del éxito del KPCA está en lograr identificar las direcciones de máxima variabilidad en el espacio de las características y luego hacerlas corresponder con las direcciones (no lineales) de variabilidad de los datos en el espacio original.

KPCA resuelve el problema de autovalores:

$$\Sigma^{\Phi} \mathbf{v}^{\Phi} = \lambda \mathbf{v}^{\Phi} \quad (1)$$

donde Φ representa el mapeo no lineal de los datos y Σ^{Φ} es la matriz de covarianza en \mathcal{H} que corresponde a los datos $\tilde{\Phi}(x)$, suponiéndolos previamente centrados.

$$\Sigma^{\Phi} = \frac{1}{\ell} \mathbf{K}(x_i, x_j) \quad (2)$$

en la cual ℓ representa el número de datos del espacio de entrada y $\mathbf{K}(x_i, x_j) = \tilde{\Phi}(x_i) \cdot \tilde{\Phi}(x_j)'$ es la función kernel que realiza el mapeo implícito de los datos hacia \mathcal{H} . Los pasos que realiza KPCA se presentan en el Algoritmo 1 descrito por (Cristianini et al., 2001).

Algoritmo 1 Variante kernel de PCA .

entrada	Datos $S = \{x_1, \dots, x_{\ell}\}$, dimensión p .
proceso	$\mathbf{K}_{ij} = \mathbf{K}(x_i, x_j), \quad i, j = 1, \dots, \ell$ $\mathbf{K} - \frac{1}{\ell} \mathbf{j} \mathbf{j}' \mathbf{K} - \frac{1}{\ell} \mathbf{K} \mathbf{j} \mathbf{j}' + \frac{1}{\ell^2} (\mathbf{j}' \mathbf{K} \mathbf{j}) \mathbf{j} \mathbf{j}'$ $[\mathbf{V}, \mathbf{\Lambda}] = \text{eig}(\mathbf{K})$ $\alpha^j = \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} \mathbf{v}_j, \quad j = 1, \dots, \ell$ $\tilde{x}_i = \left(\sum_{j=1}^{\ell} \alpha_j^j \mathbf{K}(x_i, x_j) \right)_{j=1}^p$
salida	Datos transformados $\tilde{S} = \{\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_{\ell}\}$

Recientemente, algunos autores han propuesto nuevas maneras de incorporar a KPCA la dinámica de los procesos para el diagnóstico de fallos. Entre las herramientas que más destacan se encuentra el KPCA recursivo (RKPCA) (Zhang et al., 2012), el KPCA adaptado (AKPCA) (Ding et al., 2010), el 2D-KPCA dinámico (2D-DKPCA) (Zhang et al., 2010) y las variantes para procesos por bloques o batch (BDKPCA) (Jia et al., 2010). En todas ellas el ajuste de la función kernel resulta determinante para el buen desempeño de las tareas de diagnóstico de fallos.

Análisis de Discriminante de Fisher kernel.

Este algoritmo es una generalización del Análisis Discriminante de Fisher para el caso en que existen relaciones no lineales entre las variables (Mika et al., 1999; Baudat and Anouar, 2000). Tal como lo hace su variante lineal, KFDA proporciona una representación reducida de los datos que es óptima en términos de maximizar la separabilidad entre las clases y minimizar la dispersión en cada una de ellas. KFDA determina un conjunto los vectores de transformación ordenados por la separabilidad entre las clases que se logra en la dirección de los mismos. Estos vectores ser calculados resolviendo el problema de optimización:

$$J(\alpha) = \max_{\alpha \neq 0} \frac{\alpha^T S_w^{\Phi} \alpha}{\alpha^T S_b^{\Phi} \alpha} \quad (3)$$

tal que $\alpha \in \mathcal{H}$ y S_w^{Φ} y S_b^{Φ} son las correspondientes matrices de dispersión inter-clase e intra-clase en \mathcal{H} , que pueden ser calculadas como:

$$S_b^\Phi = \sum_{i=1}^c (\mu_i - \mu)(\mu_i - \mu)^T, \quad S_w = \sum_{i=1}^c \sum_{j=c_i}^c \frac{1}{\ell_i} (\xi_i - \mu_j)(\xi_i - \mu_j)^T \quad (4)$$

en las cuales ℓ es la cantidad de observaciones de cada clase, μ representa la media total de todos los vectores kernels $\{\xi\}_{i=1}^\ell = [(k(x_1, x_i), k(x_2, x_i), \dots, k(x_\ell, x_i))]^T$ y μ_i la media individual de cada clase c que está presente en \mathcal{H} . En cualquier caso, μ_i puede ser determinada como:

$$\mu_i = \left(\frac{1}{\ell_i} \right) \left[\sum_{j \in c_i} (k(x_1, x_i), \dots, \sum_{j \in c_i} k(x_m, x_i)) \right]^T \quad (5)$$

Similar a kernel PCA, los datos transformados para KFDD pueden obtenerse como:

$$\tilde{x}_i = \sum_{i=1}^\ell \alpha_i K(x_i, x_j) \quad (6)$$

2.2 Ajuste y selección del kernel.

La función kernel más ampliamente utilizada y difundida en la literatura científica de métodos kernels, es el kernel gaussiano o RBF (Scholkopf and Smola, 2001; Yin et al., 2011; Chudzian, 2012). Éste es un ejemplo de kernel homogéneo cuyo espacio mapeado puede alcanzar dimensiones muy grandes y fue seleccionado para el estudio por su generalidad y resultados en múltiples aplicaciones. La función matemática que lo caracteriza está dada por:

$$K(x, y) = \exp \left(- \frac{\|x - y\|^2}{2\sigma^2} \right) \quad (7)$$

donde el parámetro ajustable σ indica el grado de suavidad de la función y su variación debe ser muy cuidadosa. Si σ está sobrestimada, la exponencial tiende a presentar un comportamiento lineal y la proyección en el espacio de alta dimensión pierde su capacidad para separar datos no lineales. Por otro lado, si σ está subestimado, el resultado será altamente sensible a ruido en los datos de entrenamiento. En este trabajo el proceso de estimación del parámetro σ se lleva a cabo con un algoritmo de optimización del tipo Quasi-Newton utilizando como función objetivo las medidas Alfa, Beta y Gamma, respectivamente.

Medida Alfa.

Alfa (α) es una métrica alternativa que aparece en los trabajos de (Chudzian, 2012) y puede considerarse un caso particular de la medida KTA presentada por Cristianini et al. (2001). Los principios que fundamentan esta medida están basados en el coeficiente de la Correlación de Pearson obtenido para los valores del kernel (normalizado) y una matriz ideal que representa la similitud deseada entre cada una de las clases en \mathcal{H} . La medida α puede ser fácilmente calculada como:

$$\alpha(K, y) = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (K_{ij} - \bar{K})(S_{ij} - \bar{S})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (K_{ij} - \bar{K})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (S_{ij} - \bar{S})^2}} \quad (8)$$

$$\text{donde} \quad S_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{if } y_i = y_j \\ 0, & \text{if } y_i \neq y_j \end{cases} \quad (9)$$

Los valores medios de K y S son calculados utilizando la matriz triangular superior.

$$\bar{K} = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n K_{ij}, \quad \bar{S} = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n S_{ij} \quad (10)$$

Medida Beta.

La métrica Beta (β) está basada en la prueba t -student para la igualdad entre las medias de dos vectores (Chudzian, 2012). Con ella se intenta separar la matriz kernel en aquellos valores que representan la similitud de los patrones de una misma clase de los que representan la proximidad de dos clases diferentes en \mathcal{H} . Téngase en cuenta que para lograr una buena clasificación de los patrones de fallos se desea alejar espacialmente una clase de otra, haciendo que sus medias sean totalmente diferentes. Con esto es posible diferenciar dos fallos que corresponden a causas distintas pero cuyos síntomas son muy parecidos. La medida Beta puede ser calculada como:

$$\beta(K, y) = \left| \frac{\bar{k}_w - \bar{k}_b}{\sqrt{\frac{\sigma_w^2}{n_w} + \frac{\sigma_b^2}{n_b}}} \right| \quad (11)$$

donde \bar{k}_b y \bar{k}_w son la media de los vectores:

$$k_w = \{K_{ij} | i < j \wedge y_i \neq y_j\} \quad (12)$$

$$k_b = \{K_{ij} | i < j \wedge y_i = y_j\} \quad (13)$$

aquí σ_x^2 es la varianza de los vectores k_w and k_b cuando existen n_x valores en ellos.

Medida Gamma.

Con una idea similar a la anterior, la medida Gamma (γ) está basada en la prueba de Brown-Forsythe con la cual se evalúa la igualdad entre la varianza de dos muestras bajo el supuesto de que sus correspondientes distribuciones no cumplen el principio de normalidad. En (Chudzian, 2012), la medida Gamma es empleada con buenos resultados para el ajuste de los kernels de SVM utilizadas en la clasificación de un conjunto de clases balanceadas y no balanceadas. En este trabajo la métrica queda definida como:

$$\gamma(K, y) = (n-2) \frac{n_w(\bar{Z}_w - \bar{Z}_{wb})^2 + n_b(\bar{Z}_b - \bar{Z}_{wb})^2}{\sum_{i=1}^{n_w} (\bar{Z}_i - \bar{Z}_w)^2 + \sum_{i=1}^{n_b} (\bar{Z}_i - \bar{Z}_b)^2} \quad (14)$$

donde a partir de las ecuaciones 12 y 13 y considerando que $k_{wb} = \{k_w \cup k_b\}$ con $n_{wb} = n_w + n_b$ como la cantidad de valores en k_{wb} ; puede obtenerse que $\bar{Z}_x = kx - \bar{k}x$. Los valores medios \bar{Z}_w , \bar{Z}_b y \bar{Z}_{wb} son calculados utilizando las variables transformadas:

$$\bar{Z}_x = \frac{1}{n_x} \sum_{i=1}^{n_x} Z_{ix} \quad (15)$$

3. DIAGNÓSTICO DE FALLOS A PARTIR DE HERRAMIENTAS DE CLASIFICACIÓN

Con el objetivo de lograr diagnosticar el estado actual de un proceso es necesario realizar tareas de clasificación. Para ejecutar este procedimiento, lo ideal es que las propiedades físicas medidas se seleccionen de forma tal que todos los objetos de una clase formen un conjunto o agrupamiento (*cluster*) en el espacio de las mediciones (Han et al., 2006). Según Fukunaga (1990), lo anterior garantiza que no exista solapamiento con los *clusters* que son formados por las observaciones de otras clases. Si este es el caso, los vectores de mediciones contendrán la información necesaria para clasificar todos los objetos correctamente y

podrán asociarse con alguno de los posibles estados del proceso. Esto permitirá que el patrón de las variables que representa la operación actual, sea clasificado como: normal, defectuoso u operación desconocida.

Según la revisión bibliográfica realizada, muchas son las herramientas que en el diagnóstico de fallos han sido aplicadas para discriminar patrones. Entre ellas destacan los clasificadores basados en la teoría de Bayes, las Redes Neuronales Artificiales (ANN) y las Máquinas de Soporte Vectorial (SVM). De ellas, el clasificador ANN presenta gran habilidad para aprender y generalizar relaciones no-lineales entre variables de entrada y salida.

En el diagnóstico de fallos algunas arquitecturas de redes neuronales como la Perceptrón Multicapa (MPL) (Monroy et al., 2012), la de Base Radial y la de Kohonen han sido utilizadas (Chen and Yan, 2013). En presente estudio una red neuronal *feed-forward* de tres capas, con una función de activación tan-sigmoid en la capa oculta y capa de salida lineal es utilizada. El número de neuronas en las capas de entrada y salida está determinado de acuerdo con las tareas de clasificación impuestas. La salida de la red diseñada puede ser obtenida a partir de la expresión:

$$y_k = \tilde{g} \left[\sum_{j=0}^M w_{kj} g \left(\sum_{i=0}^d w'_{ji} x_i \right) \right] \quad (16)$$

donde x_i son las entradas de la red, w'_{ij} son los pesos entre la entrada y la capa oculta y w_{kj} son los pesos entre la capa oculta y la salida. El algoritmo usado para el entrenamiento de esta red fue Levenberg-Marquardt (LMA), disponible en el asistente matemático Matlab2013a.

3.1 Caso de estudio: Tennessee Eastman Process

El Tennessee Eastman Proces (TEP) fue desarrollado por la compañía Eastman Chemical para proporcionar un modelo de un proceso industrial realista. TEP ha sido ampliamente utilizado para probar el diseño de diferentes alternativas de control, estrategias de optimización y métodos de supervisión y diagnóstico. El proceso consiste en 5 unidades de operación interconectadas: un reactor, un compresor, un limpiador de impurezas, un separador y un condensador.

Para desarrollar el diagnóstico de los fallos del TEP, en este trabajo se utilizan las 33 variables que están en línea y el conjunto de datos usado para probar los procedimientos propuestos es el presentado por Downs J. J. (1993). De ellos se escogieron los fallos descritos en la Tabla 1 a partir de la muestra 160 donde se inicia la simulación de los fallos.

Tabla 1. Fallos del TEP empleados.

No.	Descripción
1	Paso escalón en la relación de flujos A/C, con la composición de B constante
2	Paso escalón en la temperatura de entrada del agua de enfriamiento en el reactor
3	Paso escalón en la temperatura de entrada del agua de enfriamiento en el condensador
4	Variación aleat. en la composición de los flujos A, B, C
5	Variación aleat. en la temperatura del flujo C
6	Variación aleat. en la temperatura de entrada del agua de enfriamiento en el reactor

4. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS.

En este trabajo se emplean dos técnicas que basadas en métodos kernels, permiten reducir la dimensión del espacio de trabajo: KPCA y KFDA. Ambos enfoques se implementan utilizando el kernel Gaussiano, el cual, además de las bondades típicas de las funciones kernel, puede ser visto como un estimador de densidad en el espacio de entrada. Para ajustar el kernel RBF, se exploran tres métricas con las cuales se intenta obtener una estructura de los datos cuya geometría en \mathcal{H} maximice la separabilidad de los fallos. Esto equivale a minimizar los errores de clasificación y por tanto, reducir el número de falsas alarmas que produce el sistema de diagnóstico de fallos.

4.1 Análisis comparativo

Para realizar el estudio comparativo entre KPCA y KFDA se decidió utilizar 6 componentes, reduciéndose de ésta manera la dimensión de espacio de trabajo de $\mathbf{R}^{33} \rightarrow \mathbf{R}^6$. La selección de este valor está asociado con la dimensión máxima $d_{max} = c - 1$ para la cual KFDA logra reducir el espacio de trabajo de c clases. Es necesario destacar en ambos casos, la etapa de pre-procesamiento incluye los datos de fallo y los datos de operación en funcionamiento normal, por lo que para la etapa de pre-procesamiento se tienen un total de 7 clases o estados de operación. Esta particularidad se debe a que en un proceso real todas las observaciones son tratadas y luego, se lleva a cabo la detección y el diagnóstico de los fallos según corresponda.

Con el objetivo de comparar las métricas Alfa, Beta y Gamma se realizaron dos pruebas. La primera de ellas dirigida a determinar el poder discriminante de cada una de las medidas en combinación con el algoritmo de clasificación. La segunda para medir el poder de generalización bajo el mismo principio que la anterior pero utilizando datos históricos que no fueron vistos en el entrenamiento de los algoritmos anteriores. En ambos casos la estimación del error de clasificación se realiza a partir de validación cruzada con k -fold igual a 10.

Para llevar a cabo la clasificación de los fallos se seleccionó una red neuronal del tipo perceptrón multicapa cuyos parámetros de entrada y salida dependen del número de componentes retenidas y la cantidad de fallos, respectivamente. En este caso, la red diseñada posee 6 entradas y 6 salidas. Para este tipo de arquitectura se ha demostrado que con un buen proceso de entrenamiento, los incrementos en el número de capas ocultas no producen diferencias significativas en el desempeño de la red (Kecman, 2001). Es por esta razón que se desarrolla una arquitectura con una sola capa oculta en la cual se prueban cantidades de neuronas que van desde 6 a 12. Las Figuras 1 y 2 muestran las tasas de aciertos obtenidas con la ANN durante la prueba de clasificación/entrenamiento.

En el caso de KPCA los resultados que se obtienen durante la etapa de entrenamiento con las métricas Alfa y Beta son similares. Para estas dos medidas los índices de desempeño alcanzados superan el valor máximo obtenido por la red neuronal cuando se realiza la clasificación sin pre-procesamiento (ANN₃₃). Sin embargo para la medida Gamma los resultados se quedan por debajo de los obtenidos por ANN₃₃. Similarmente en KFDA, las medidas α y β superan con creces las tasas de clasificación alcanzadas por la red neuronal sin pre-procesamiento. Esto refleja que

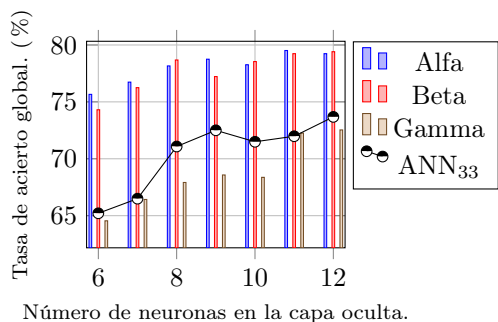


Figura 1. Desempeño de KPCA+ANN (entrenamiento).

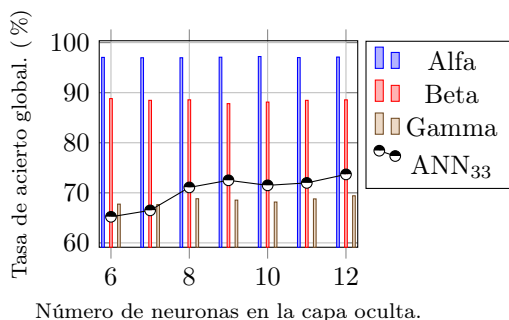


Figura 2. Desempeño de KFDA+ANN (entrenamiento).

el tratamiento previo realizado a partir de estas medidas logra no sólo reducir la dimensión del espacio de trabajo a 6 componentes, sino que además destaca características discriminantes que estaban latentes en los datos y que el clasificador por sí mismo no era capaz de explotar. Tal es así, que en el caso particular de la medida α , el desempeño alcanzado con KFDA supera el 95% de certeza durante la prueba de entrenamiento.

Para seleccionar la cantidad de neuronas en la capa oculta de la red se realizó un estudio estadístico de 10 corridas o experimentos. A esta información se le aplicó la prueba de hipótesis $H_0 : \mu_1 = \mu_2$, en la cual se analiza si existen diferencias estadísticamente significativas en el desempeño alcanzado por la red cuando se incrementan las neuronas de la capa oculta. El procedimiento anterior comienza con una cantidad de neuronas igual al número de fallos que se va incrementando mientras existan diferencias en el desempeño de la red. Cuando se acepta H_0 se deja de repetir el procedimiento y se analiza el resultado teniendo en cuenta garantizar un compromiso entre desempeño y cantidad de neuronas en la capa oculta. La Tabla 2 refleja la cantidad de neuronas que como resultado de este procedimiento fue utilizada para efectuar la prueba de generalización.

Tabla 2. Neuronas en la capa oculta.

Estrategia de clasificación	Medidas		
	α	β	γ
KFDA+ANN	6	6	8
KPCA+ANN	8	11	11

Para cada uno de estos algoritmos, la Tabla 3 registra el valor estimado para el parámetro de ajuste del kernel RBF durante el pre-procesamiento de los datos con las métricas α , β y γ .

Tabla 3. Parámetro estimado para el kernel.

	α	β	γ
Kernel RBF (σ)	6.5270	10.7331	100

Las Figuras 3(a)-(b) muestran la media y desviación estándar de la prueba de generalización realizada para las 10 corridas utilizando KPCA y KFDA como herramientas de pre-procesamiento. En cada una de estas corridas se utilizó un procedimiento de validación cruzada con k -fold igual a 10 con el objetivo de obtener el desempeño del diagnosticador en cada uno de los experimentos.

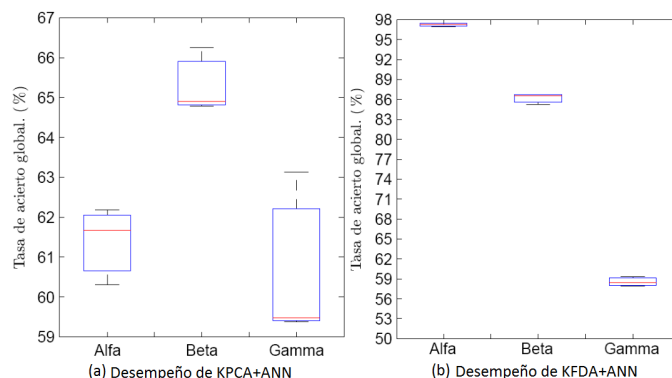


Figura 3. Desempeño durante la prueba de generalización.

Nótese que a diferencia de lo ocurrido en la prueba anterior, los mejores resultados para KPCA+ANN se obtienen ahora utilizando la medida β . Con $KPCA_{\beta}$ +ANN se logra reducir la dimensión del espacio de trabajo pero el desempeño alcanzado se mantiene muy similar al obtenido sin el pre-procesamiento de los datos. Por otro lado, la Figura 3(b) muestra que con la variante $KFDA_{\alpha}$ +ANN se obtienen los mejores resultados para la prueba de generalización, alcanzando una tasa de acierto superior al 95%. Se debe destacar que en ambas variantes de pre-procesamiento, la métrica γ tiene los menores indicadores de desempeño.

Al analizarse estos resultados se debe tener en cuenta que sólo se utilizan 6 componentes lográndose una reducción en la dimensión del espacio de trabajo de $\mathbf{R}^{33} \rightarrow \mathbf{R}^6$. Esto es una ventaja para el diagnóstico de fallos, principalmente si se obtienen bajos índices de error en la clasificación.

La Tabla 4 muestra el desempeño global alcanzado por las mejores estrategias de clasificación que fueron utilizadas en el diagnóstico de los fallos del TEP.

Tabla 4. Desempeño de las mejores estrategias.

Classification strategy	Train (%)	Test (%)	G/C
ANN ₃₃	72.50±1.03	64.44±0.99	0.887
KFDA $_{\alpha}$ + ANN	97.05±0.22	97.19±0.26	1
KPCA $_{\beta}$ + ANN	78.68±0.52	65.32±0.81	0.820

Para todos ellos se determinó la relación entre la capacidad de clasificación y el poder de generalización, detectándose que el uso de $KPCA_{\beta}$ permite un desempeño similar al obtenido sin pre-procesamiento pero con menor número de componentes, lo cual reduce el tiempo de cómputo y facilita la visualización del estado de la planta. Asimismo

para $KFDA_\alpha$ con la cual no sólo se reduce la dimensión sino que además, dado el principio de operación de FDA, se logra un alto índice de desempeño en la clasificación. Como valor agregado, en esta última la relación \mathbf{G}/\mathbf{C} es 1 lo cual significa que se obtuvieron resultados equiparables entre la prueba de clasificación y la de generalización.

CONCLUSIONES

El estudio realizado mostró la conveniencia de usar técnicas de pre-procesamiento basadas en métodos kernels como paso intermedio en el proceso de diagnóstico de fallos con datos históricos. Se demostró que a pesar de que KPCA y KFDA logran reducir la dimensión de el espacio de trabajo y mantener el desempeño del sistema, el enfoque basado en Análisis Discriminante de Fisher favorece el proceso de clasificación puesto que permite maximizar la separabilidad geométrica de los patrones que representan cada uno de los estados de fallos.

Como aporte adicional, este trabajo presentó un estudio comparativo entre tres medidas de desempeño para el ajuste de un kernel RBF, las medidas Alfa, Beta y Gamma en el caso de prueba Tennessee Eastman process. Los resultados muestran que para tareas de pre-procesamiento la combinación $KFDA_\alpha$ permiten explotar en mayor grado las características discriminantes de los datos, lo cual implica mayores tasas de acierto en la clasificación y por tanto un diagnóstico de fallos más seguro.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero de FAPERJ (N^o101.231/2014), que ha contribuido a llevar a cabo estas investigaciones. Los autores también desean agradecer todas las recomendaciones recibidas por los revisores del XVI Congreso Latinoamericano de Control Automático.

REFERENCIAS

- Baudat, G. and Anouar, F. (2000). Generalized discriminant analysis using a kernel approach. *Neural computation*, 12(10), 2385–2404.
- Chen, X. and Yan, X. (2013). Fault diagnosis in chemical process based on self-organizing map integrated with fisher discriminant analysis. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 21(4), 382–387.
- Chudzian, P. (2012). Evaluation measures for kernel optimization. *Pattern Recognition Letters*, 33, 1108–1116.
- Cristianini, N., Shawe-Taylor, J., Elisseeff, A., and Kaudola, J. (2001). On kernel target alignment. In *NIPS*, volume 2, 4.
- Ding, M., Tian, Z., and Xu, H. (2010). Adaptive kernel principal component analysis. *Signal Processing*, 90(5), 1542–1553.
- Downs J. J., V.E. (1993). A plant-wide industrial process control problem. *Computers & Chemical Engineering*, 17(3), 245–255.
- Fan, J., Qin, S.J., and Wang, Y. (2014). Online monitoring of nonlinear multivariate industrial processes using filtering kica-pca. *Control Engineering Practice*, 22, 205–216.
- Fukunaga, K. (1990). *Introduction to statistical pattern recognition*. Academic press.
- Han, J., Kamber, M., and Pei, J. (2006). *Data mining: concepts and techniques*. Morgan kaufmann.
- Hwang, I., Kim, S., Kim, Y., and Seah, C.E. (2010). A survey of fault detection, isolation, and reconfiguration methods. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 18(3), 636–653.
- Isermann, R. (2011). *Fault-diagnosis applications: model-based condition monitoring: actuators, drives, machinery, plants, sensors, and fault-tolerant systems*. Springer.
- Jia, M., Chu, F., Wang, F., and Wang, W. (2010). Online batch process monitoring using batch dynamic kernel principal component analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 101(2), 110–122.
- Kecman, V. (2001). *Learning and soft computing: support vector machines, neural networks, and fuzzy logic models*. MIT press.
- Mika, S., Ratsch, G., Weston, J., Scholkopf, B., and Mullert, K.R. (1999). Fisher discriminant analysis with kernels.
- Monroy, I., Villez, K., Graells, M., and Venkatasubramanian, V. (2012). Fault diagnosis of a benchmark fermentation process: a comparative study of feature extraction and classification techniques. *Bioprocess Biosyst Eng*, 35, 689–704.
- Prieto Moreno, A., Llanes Santiago, O., Bernal de Lázaro, J., and García Moreno, E. (2013). Comparative evaluation of classification methods used in fault diagnosis of industrial processes. *Latin America Transactions, IEEE*, 11(2), 682–689.
- Scholkopf, B. and Smola, A.J. (2001). *Learning with kernels: support vector machines, regularization, optimization, and beyond*. MIT press.
- Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Kavuri, S.N., and Yin, K. (2003a). A review of process fault detection and diagnosis: Part iii: Process history based methods. *Computers & chemical engineering*, 27(3), 327–346.
- Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Yin, K., and Kavuri, S.N. (2003b). A review of process fault detection and diagnosis: Part i: Quantitative model-based methods. *Computers & chemical engineering*, 27(3), 293–311.
- Yin, J.B., Li, T., and Shen, H.B. (2011). Gaussian kernel optimization: Complex problem and a simple solution. *Neurocomputing*, 74(18), 3816–3822.
- Zhang, Y. (2009). Enhanced statistical analysis of nonlinear processes using kpca, kica and svm. *Chemical Engineering Science*, 64(5), 801–811.
- Zhang, Y., Li, S., and Teng, Y. (2012). Dynamic processes monitoring using recursive kernel principal component analysis. *Chemical Engineering Science*, 72, 78–86.
- Zhang, Y., Li, Z., and Zhou, H. (2010). Statistical analysis and adaptive technique for dynamical process monitoring. *Chemical Engineering Research and Design*, 88(10), 1381–1392.
- Zhu, Z.B. and Song, Z.H. (2011). A novel fault diagnosis system using pattern classification on kernel fda subspace. *Expert Systems with Applications*, 38(6), 6895–6905.