

**FAULT DETECTION AND ISOLATION IN INDUSTRIAL PROCESS USING
PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS (PCA)****DETECCION Y DIAGNOSTICO DE FALLAS EN PROCESOS INDUSTRIALES
UTILIZANDO ANALISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES (PCA)****Ing. Florelva Roza García, Ph.D. Rocco Tarantino Alvarado****Universidad de Pamplona**

Ciudadela Universitaria. Pamplona, Norte de Santander, Colombia.

Tel: 57-7-5685303 Ext. 144, Fax: 57-7-5685303.

E-mail: {ferg, roccot}@unipamplona.edu.co

Abstract: The Multivariate statistical process control is a very useful tool analyzes historical plant data obtained by the monitoring system. The objective of this article is detect faults using multivariate statistical techniques; specifically Principal Component Analysis (PCA).

Resumen: El control de procesos multivariables es muy importante, ya que permite trabajar con datos históricos de plantas obtenidos por un sistema de monitoreo a través del tiempo. El propósito de este artículo es detectar fallas en un proceso continuo utilizando técnicas estadísticas multivariadas, específicamente el Análisis de Componentes principales (PCA).

Keywords: Principal Component Analysis, Fault Detection, Multivariate control charts.

1. INTRODUCCIÓN

Durante las últimas décadas, la competencia a nivel industrial ha aumentando por efecto de la globalización y las normativas medioambientales ocasionando un esfuerzo ingente para perfeccionar la producción en sus procesos.

Las condiciones en que operan deben ser precisamente controladas para asegurar la alta calidad del producto. Cualquier anomalía en el funcionamiento de un proceso debería descubrirse en una fase temprana, he identificarse. El diagnóstico del componente dañado debe evidenciarse en el momento cuando las fallas todavía son pequeñas y su efecto no sea relevante al proceso.

Los métodos de supervisión pueden ser clasificados en dos categorías principales: los métodos basados en modelos físicos del proceso, y los métodos basados en modelos creados con los datos históricos. Los métodos basados en datos a menudo utilizan la reducción de la dimensionalidad de la data original. La condensación de los datos se logra eliminando información redundante incluida en las variables, al tiempo se busca conservar la mayor información posible que describa el proceso de la data original.

Las herramientas de PCA y estadística multivariante son útiles cuando se dispone de un volumen de históricos importante y de buena calidad. El análisis de los históricos con estas nuevas técnicas puede ayudar en múltiples facetas: control de calidad,

identificación de sistemas, determinación de causas en fallas del proceso, detección y prevención de fallas, modelización de sistemas, obtención de reglas y patrones de comportamiento, búsqueda de causas y relaciones entre variables, etc.

La ventaja de los métodos estadísticos esta en considerar que no se requiere un modelo preciso de la planta que en muchas ocasiones es muy complicado obtener.

2. ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES

La idea del método es transformar un conjunto de variables correlacionadas en un conjunto menor de variables no correlacionadas llamadas *componentes principales*.

Sea $X_{(N \times M)}$ una matriz de orden p -dimensional conformada por p variables con N observaciones para cada variable, correspondiente a la organización de los datos originales.

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1M} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{NM} \end{bmatrix} \quad (1)$$

Mediante Componentes Principales (PCA), pueden encontrarse hasta M componentes principales, es decir tantas como número de variables originales, pero el interés está en seleccionar un número k mucho menor de nuevas variables (conocidas como variables latentes) expresadas en una matriz resultante Z de orden k -dimensional, perdiendo lo menos posible de variabilidad existente en el conjunto de datos original.

$$Z = \begin{bmatrix} Z_{11} & Z_{12} & \dots & Z_{1k} \\ Z_{21} & Z_{22} & \dots & Z_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ Z_{N1} & Z_{N2} & \dots & Z_{Nk} \end{bmatrix} \quad (2)$$

El nuevo conjunto de variables define un espacio k -dimensional mucho más reducido que el original donde $k \ll M$.

Primera componente

La primera de estas variables latentes o primera componente principal t_1 se obtiene buscando la combinación lineal de las variables originales

$$t_1 = p_1 x \quad (3)$$

Que tiene mayor varianza, esta se expresa para el conjunto total de individuos como

$$t_1 = X p_1 \quad (4)$$

Cargas (loads)

Donde p_1 es el vector propio correspondiente al mayor valor propio λ_1 de la matriz de covarianzas de X , S_x , o de la matriz de correlación R de X ; y define la dirección de mayor variabilidad en el espacio de las M variables.

Las componentes del vector p_1 son denominadas cargas (loads), definen la orientación del hiperplano obtenido, con respecto al espacio de las variables originales, igualmente indican la magnitud y sentido de la correlación de la componente considerada con cada una de las variables originales.

Puntuaciones (scores)

El vector t_1 de scores definido anteriormente, representa la proyección de cada observación sobre la dirección definida por p_1 . Además, la varianza del score t_1 es igual a λ_1 .

Segunda componente

La segunda componente principal o variable latente es una combinación lineal de las variables originales que se obtiene de forma tal que sea ortogonal a la primera, con la mayor varianza posible, inferior a la de t_1 . Siguiendo los mismos criterios pueden encontrarse las restantes componentes principales.

$$t_2 = X p_2 \quad (5)$$

Si se extraen todas las componentes principales,

$$T = X P \quad (6)$$

Donde T es la matriz $(N \times M)$, cuyas columnas son los p vectores de scores y P es la matriz $(M \times M)$ cuyas columnas son los p vectores propios que constituye una base ortogonal. Postmultiplicando por P' se tiene que:

$$X = T P' \quad (7)$$

Operando luego por bloques, la matriz X puede expresarse a partir de los scores t y de los autovectores p , de la siguiente forma:

$$X = \sum_{j=1}^J t_j p_j' = \sum_{j=1}^k t_j p_j' + \sum_{j=k+1}^J t_j p_j' = \hat{X} + E \quad (8)$$

Donde

$$Z = \hat{X} \quad (9)$$

Es la estimación de X utilizando solamente k componentes principales, asociadas a los k mayores valores propios, de las M posibles. Es decir, puede utilizarse un subconjunto k de componentes para reconstruir los valores originales con un cierto error.

$$E = (e_{ij}) \quad (10)$$

La ecuación (10) representa la matriz de residuales.

Se expresa entonces (8) en función de (9) como:

$$X = Z + E \quad (11)$$

Convirtiéndose este en el modelo estadístico generado por los datos del proceso bajo monitoreo y control.

El proceso de selección de componentes principales, en general, sigue los pasos que se indican a continuación:

1. Las componentes principales no han de estar correlacionadas.
2. La primera componente principal debe explicar la mayor variabilidad de los datos tanto como sea posible.

Cada componente principal subsiguiente debe tomar en cuenta tanta variabilidad en los datos como sea posible, inferior a las anteriores y deben cumplir el principio de ortonormalidad.

3. GRÁFICOS DE CONTROL ASOCIADOS A PCA

Los gráficos de control univariantes no aprovechan la potencialidad de la instrumentación del proceso, ya que no son capaces de monitorizar al mismo tiempo múltiples salidas o respuestas. Los gráficos de control multivariante proporcionan información adicional y son capaces de detectar situaciones fuera de control en estos casos.

Sabiendo que en la matriz X , cada fila representa las observaciones y cada columna una variable; esta puede ser descompuesta mediante un análisis de componentes en la matriz de scores y de loadings, a partir de ellas es posible calcular diferentes estadísticos para cada muestra.

3.1 Estadístico T^2 de Hotelling (Gráfico Shewhart multivariado)

Fue propuesto inicialmente por Hotelling y mide la variación de cada muestra dentro del modelo PCA. En general es una distancia estadística basada en la probabilidad que una nueva observación difiera una cierta distancia euclídea de la media del proceso y en una cierta dirección del espacio.

Se calcula como la suma de los cuadrados de los scores según la siguiente ecuación:

$$T_i^2 = X_i P_k I^{-1} P_k' X_i' \quad (12)$$

Donde:

X_i es el vector para la muestra i

P_k , es la matriz de loadings

I , es la matriz diagonal que contiene los valores propios asociados a los vectores propios incluidos en el modelo PCA.

El límite de Control se calcula a partir de

$$T_{k,m,a}^2 = \frac{k(m-1)}{m-k} F_{k,m-k,a} \quad (13)$$

Donde m es el número de análisis de la muestra de control que se ha utilizado para construir el modelo PCA, k el número de componentes principales incluidos en el modelo, $F_{k,m-k,a}$ el valor de la distribución F para k , $m-k$ los grados de libertad y una probabilidad a de cometer un error tipo I.

El gráfico T^2 monitoriza la distancia de una nueva medida al valor de referencia en el espacio reducido de los factores PCA. Permite detectar si la variación incluida en los componentes principales considerados es más grande que la que le correspondería si solo influyeran variaciones aleatorias. La interpretación de este gráfico es la misma que la de cualquier gráfico univariante; las muestras fuera de control poseen un valor de T^2 superior al límite, y aparecen más allá de la línea de control.

4. PCA COMO HERRAMIENTA DE DIAGNÓSTICO

PCA presenta interesantes herramientas de diagnóstico. Las cuales permiten detectar agrupamientos en las observaciones y en las variables así como tendencias, datos anómalos, etc.

4.1 Gráfica de loads

Permite visualizar las asociaciones entre las variables. La representación conjunta de observaciones y variables permite encontrar explicaciones sobre qué variables caracterizan los agrupamientos y tendencias hallados en las observaciones.

4.2 Graficar de scores

Graficar los scores en los planos definidos por las variables latentes, permitirá encontrar agrupamientos y detectar datos con anomalías severas (“*outliers*” severos). Al representar gráficamente los scores junto con la elipse definida por la T^2 de Hotelling, estos datos anómalos aparecen a una distancia del centro de la elipse mayor que cualquier punto de ella. Esta última comparación se propone a partir de la descomposición de la T^2 en la suma de los scores. Además una observación con aporte t_{ij}^2 elevado puede ser analizada observando a qué componente se debe ese aporte y adicionalmente, qué variables están relacionadas con tal componente.

Gráfica de scores normalizados

Los “scores” normalizados surgen de la posibilidad de descomponer la T^2 utilizando los autovalores λ_j , $j=1\dots J$ de la matriz de covarianza muestral S y combinaciones lineales de las variables z .

Sea

$$T^2 = (Z - \mathbf{m})' S^{-1} (Z - \mathbf{m}) \quad (17)$$

\mathbf{m} Es el vector de esperanzas

La matriz S puede diagonalizarse a partir de sus vectores propios como:

$$S = P D_1 P' \quad (18)$$

P es la matriz cuyas columnas son los vectores propios normalizados de S .

D_1 es la matriz diagonal cuyos elementos $d_{ii}=\lambda_i$ corresponde al valor propio de P .

P cumple con:

$$P^{-1} = P' \quad (19)$$

Entonces

$$S^{-1} = P D_1^{-1} P' \quad (20)$$

Con lo que T^2 puede ser escrito como:

$$T^2 = (Z - \mathbf{m})' P D_1^{-1} P' (Z - \mathbf{m}) \quad (21)$$

Tomando como scores t a

$$t = (z - \mu)' P \quad (22)$$

Puede escribirse:

$$T^2 = \sum_{j=1}^J \frac{t_j^2}{I_j} = \sum_{j=1}^J \frac{t_j^2}{s_j^2} \quad (23)$$

Esta descomposición es llamada “descomposición en componentes principales”.

La estadística T^2 de esta forma queda expresada como una suma de razones donde los denominadores λ_j , $i=1\dots J$ son todos los autovalores no nulos de la matriz de covariancias S y los numeradores t_i , llamados, scores. Se obtienen como combinaciones lineales de \mathbf{z} con coeficientes iguales a las componentes de los autovectores normalizados correspondientes a cada autovalor ($t_i = \mathbf{p}'_i \mathbf{z}$ donde \mathbf{p}'_i es el vector propio asociado a λ_i).

Estos scores están distribuidos normalmente, por ser combinaciones lineales de variables normales con matriz de covariancias diagonal D_2 , es decir $D_1 = \{d_{ij}\}$ con $d_{ij} = d_{ij} I_j$, $j=1\dots M$ y $d_{ij}=1$ si $i=j$, y es 0 en otro caso.

Los scores normalizados, es decir divididos por su desviación típica $\sqrt{I_a}$, se representan en un gráfico de barras. Los que presenten valores altos son tenidos en cuenta para el estudio de causas. Una forma de establecer un límite indicativo para decidir qué valor es alto, es fijarlos según el criterio de *Bonferroni*, para mantener el nivel global de significación fijado, es decir contrastarlos con el valor de tabla que corresponde al nivel α/M , donde M es el número de scores.

Debido a que los scores son combinaciones lineales de las variables originales \mathbf{z} , cuando se pretenda interpretarlos con el fin de determinar que variables son responsables de la señal de falla, pueden presentarse dificultades. Se propone entonces graficar, para aquellas observaciones con scores altos, las contribuciones de las variables en la composición de los mismos.

Contribución de una variable original al score

La contribución de una variable z_j al score t_j' es

$$p_{j,j}(z_j - \mathbf{m}_j) \quad (24)$$

Las contribuciones grandes en valor absoluto y que llevan el mismo signo que el score considerado corresponde a las variables que afectan directamente a la T^2 , que permitió detectar la falla. Es usual encontrar más de un score con valor absoluto alto, por lo que se deben estudiar las contribuciones de cada variable en forma separada.

Para simplificar esta tarea y disponer de una herramienta para la rápida identificación, se hace el cálculo de las llamadas *contribuciones totales* de cada variable a todos los scores con valores altos, teniendo en cuenta solo aquellas variables con contribuciones de igual signo que el score obtenido.

Sabiendo que cada score, puede representarse por la siguiente ecuación análoga a (17)

$$t_j = p_j'(z - \mathbf{m}) = \sum_{k=1}^J p_{j,k}(z_k - \mathbf{m}_k) \quad (25)$$

Para los k scores altos

$$cont_{j,j} = \frac{t_j'}{s_j'} p_{j,j}(z_j - \mathbf{m}_j) \quad (26)$$

Calcular la contribución de una variable z_j al score normalizado $(t_j'/s_j')^2$

$Cont_{j,j}$ tomará el valor calculado si tiene el mismo signo que el score t_j' y será igual a 0 en caso contrario.

Luego, calcular la contribución de la variable z_j como:

$$CONT_j = \sum_{j=1}^J Cont_{j,j} \quad (27)$$

Esta cantidad es la que permite identificar aquellas variables con altas contribuciones a la falla.

5. RESULTADOS

Para aplicar la metodología expuesta se simuló un proceso continuo con el propósito de generar la matriz de datos X . El proceso consta de tres tanques interconectados y se desea controlar nivel en los tres tanques; el nivel se controla a través de 3 válvulas de control instaladas en la entrada de los tanques. Cada recipiente está 100% instrumentado con instrumentación de control de nivel. Por lo tanto se tienen datos provenientes de 3 sensores LT1, LT2, LT3. Adicionalmente se agregó ruido normal al proceso para representarlo en un escenario cercano a los procesos reales.

El modelo desarrollado se puede ver en la figura 1. Se tomaron los datos generados de esta simulación definiendo a $X = [LT1; LT2; LT3]$, 180 observaciones para cada variable.

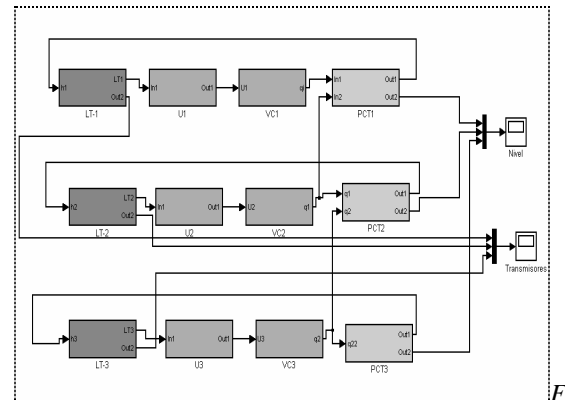


Fig. 1: Sistema de tres tanques interconectados

La figura 2 muestra la señal de los tres transmisores en condiciones normales de operación, con una muestra de 180 observaciones.

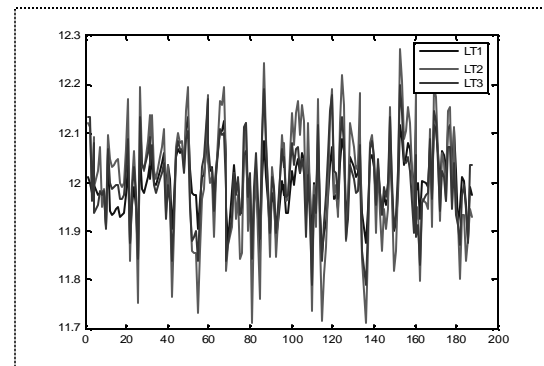


Fig. 3: Señal de los transmisores

El Análisis en Componentes Principales efectuado sigue el procedimiento expuesto en la primera parte de este artículo, se pudo establecer que el modelo puede ser reducido a 2 componentes. La tabla No. 1 resume el porcentaje de varianza explicado por cada componente, con dos componentes se retiene el 97.5541% de la variación total de los datos

Tabla 1: Varianza explicada por el modelo

PC. No.	% Varianza Explicada
Primera	91.05
segunda	6.5
Tercera	2.4

La proyección de las observaciones para las dos primeras componentes principales basado en la estadística Hotelling es mostrado en la figura 3, donde los observaciones al interior de la elipse muestran la región normal de operación del proceso, con una tolerancia del 95%. Igualmente la figura 4 representa el gráfico de control de barras para el estadístico T^2 . El umbral calculado o límite de control corresponde a 8.463 y es mostrado en la línea roja.

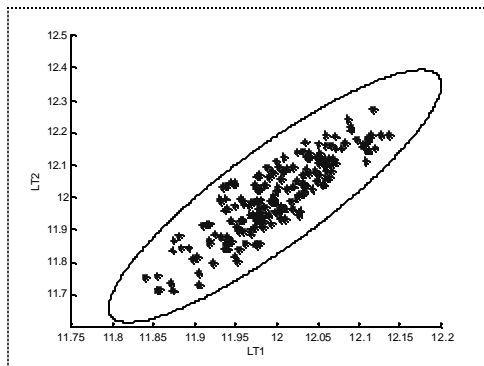


Fig. 3: Gráfico de control T2 elipsoidal.

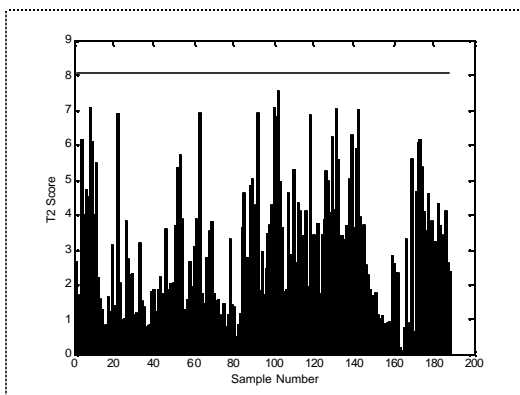


Fig. 4: Gráfico de control T2 diagrama de barras.

Posteriormente se adicionaron fallas al modelo específicamente a los transmisores, se simulon fallas por descalibración de cero, y fallas en la zona muerta del span de los instrumentos alrededor del 2%.

En todos los casos las fallas fueron detectadas a través de los gráficos de control T^2 .

La Figura 5 muestra una falla en la zona muerta del span en el transmisor LT3 por ser un sistema en cascada esta falla es propagada a los transmisores LT2, y LT3 siendo mayor impacto en LT3 seguido de LT2 y la variación más pequeña en LT1.

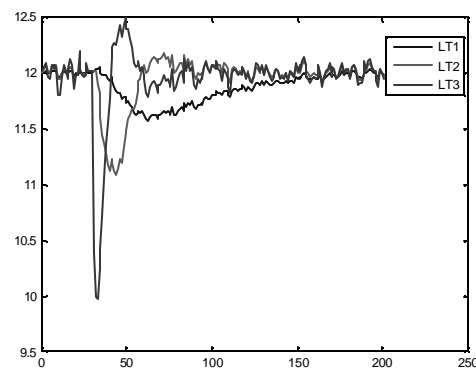


Fig. 5: Falla en zona muerta del span TL3.

Se introdujeron las observaciones en condición de falla al modelo original y proyectadas sobre el gráfico de control T^2 , esto se muestra en la gráfica 6, donde se observa la salida de control del proceso, al igual que en la figura 7, se aprecia que las observaciones caen fuera de la región elíptica.

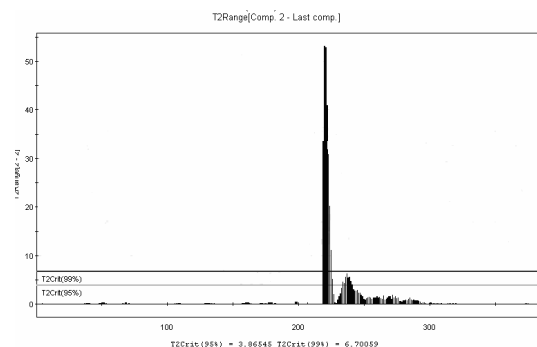


Fig. 6: Gráfico de control de Hotelling T^2 , detección de falla

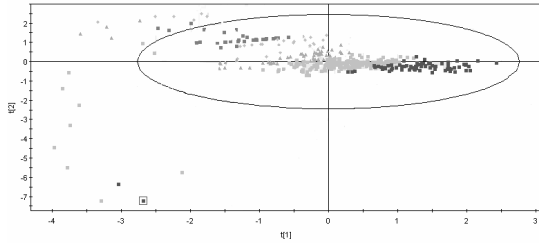


Fig. 7: Gráfico de control de Hotelling T^2 , representación elipsoidal.

Una vez detectada la falla se requiere estimar cuales son las variables responsables de la salida de control para esto se construyo la gráfica de barras de scores normalizados mostrada en la Figura 8, pudiéndose identificar que el mayor aporte a la salida del proceso lo produjo la señal LT3 como era de esperarse, como fue una falla propagada se muestra un menor aporte de LT2 y LT1 a la salida de control.

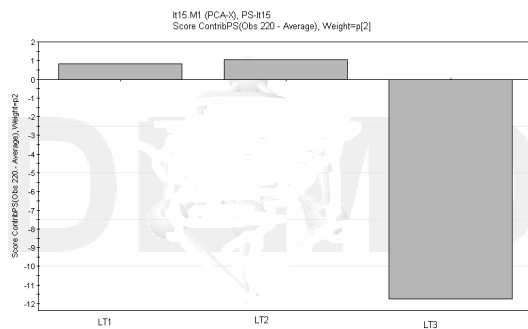


Fig. 8 Gráfico de barras contribución de scores

6. CONCLUSIONES

En este artículo se propone un enfoque, mediante el uso de Análisis de Componentes Principales para efectuar tareas de Detección y Diagnóstico de Fallas

En este trabajo, se ha intentado demostrar que el uso de PCA puede ayudar considerablemente a determinar las causas de las fallas en los procesos industriales multivariantes.

Cuando el número de variables de proceso es considerable, se encuentran múltiples dificultades debido a la alta dimensionalidad, aumentando el costo computacional, necesidad de memoria entre otras, una alternativa a este problema ha sido presentada en este artículo; descubrir la verdadera dimensionalidad del proceso bajo monitoreo es una aplicación importante de PCA

Para realizar un modelo mediante PCA debe tenerse en cuenta que las variables que intervienen deben estar medidas en las mismas unidades, de lo contrario estas deben ser estandarizadas previo análisis de PCA.

En los procesos industriales se pueden establecer las condiciones normales de operación estadísticamente, y el comportamiento probabilístico de las mismas estableciendo límites de control; una aplicación de este es el estadístico T^2 de Hotelling a partir de la descomposición de PCA. Un valor observado superior al fijado como límite de control indicará una falla.

La disponibilidad de una gran cantidad de información *on-line* hace que, actualmente, los métodos tradicionales del control estadístico de procesos sean insuficientes. En estas situaciones los métodos de control multivariado entre ellos el Análisis de Componente Principales (PCA); pueden aprovechar toda la información disponible y permitir la construcción de modelos para el análisis de procesos y la detección incipiente de fallas.

REFERENCIAS

- Gregory A. Cherry and S. Joe Qin. Multiblock Principal Component Analysis Based on a Combined Index for Semiconductor Fault Detection and Diagnosis, IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing, Vol. 19, No. 2, May 2006.
- Isermann, R.; Ballé P. (1997). Trends in the Application of Model-based Fault Detection and Diagnosis of Technical Processes. *Control Engineering Practise*, **5**, pp. 709-719.
- Famili, A.; Shen, W.-M. "Data Preprocessing and Intelligent Data Analysis". Rev: Intelligent Data Analysis. Vol. 1, n° 1, pp 3-23 (1997).
- Fayyad, Usama; Grinstein, Georges G.; Wierse, Andreas. "Information Visualization in Data Mining and Knowledge Discovery". Academic Press, UK, (2002)
- Ke Zhao and Belle R. Upadhyaya. Model Based Approach for Fault Detection and Isolation of Helical Coil Steam Generator Systems Using Principal Component Analysis. IEEE Transactions On Nuclear Science, Vol. 53, No. 4, August 2006.

- L. Kelly y B.F.J. Manly, "Multivariate Statistical Methods", Ed.CRC Press. (2005) Castejón, M.,Ordieres, J.B.; De Cos, F.J.; Mtnez de Pisón, F.J. "Control de Calidad.
- Martínez de Pisón, F.J.; Pernía Espinoza, A.; Castejón Limas, M.; González Marcos, A. "Minería de Datos: Herramientas, Técnicas y Metodologías". Proceeding VI International Congress on Project Engineering. Barcelona.
- Misra, Manish; Henry Yue, H.; Qin, S. Joe.; Ling, Cheng. "Multivariate process monitoring and fault diagnosis by multiscale". Computer & Chemical Engineering. Elsevier. 26, 1281-1293.(2002)
- Patton, R.J.; Uppal, F.J.; Lopez-Toribio, C.J. (2000). Soft Computing Approaches to Fault Diagnosis for Dynamic Systems: A Survey. *Proceedings of IFAC Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes*, Budapest, Hungary pp. 298-311.
- Wang, J. and Qin, J., (2002) A new subspace identification approach based on principal component analysis, *Journal of Process Control*, 12, pp. 841-855.
- Wang, Xue Z. "Data Mining and Knowledge Discovery For Process Monitoring and Control". *Advances in Industrial Control*. Ed. Springer. London, (1999).
- Zheng Niu, Ji-Zhen Liu, Yu-Guang Niu, Rbf Networks-Based Nonlinear Principal Component Analysis For Process Fault Detection. *Proceedings of the Fourth International Conference on Machine Learning and Cybernetics*, Guangzhou, 18-21, August 2005
- Metodología para el análisis previo a la modelización de datos en procesos industriales. Fundamentos teóricos y aplicaciones prácticas con R". Logroño: Universidad de La Rioja. Servicio de Publicaciones. (2001)
- Gregory A. Cherry and S. Joe Qin, Multiblock Principal Component Analysis Based on a Combined Index for Semiconductor Fault Detection and Diagnosis, *IEEE Transactions On Semiconductor Manufacturing*, Vol. 19, No. 2, May 2006.
- Doan X. Tien, Khiang-Wee Lim, and Liu Jun. Comparative Study of PCA Approaches in Process Monitoring and Fault Detection. *The 30 Annual Conference of the IEEE Industrial Electronic Society*, November 2-6, 2006 Busan, Korea.