Componentes principales en detección de fallos: elipsoide de confianza

Antonio Sala Piqueras

Dept. Ing. Sistemas y Automática (DISA)
Universitat Politècnica de València (UPV)

Video-presentación disponible en:

personales.upv.es/asala/videos/**fdpca1**.html

Presentación

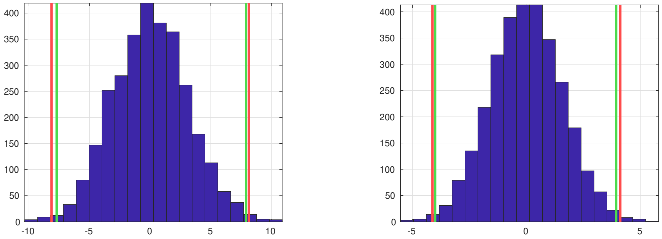
Motivación:
Con análisis de componentes principales / TLS pueden estimarse modelos reducidos (aproximados) de la variabilidad de un sistema.

Objetivos:
En detección de fallos, se considerará anormal aquella muestra que no "concuerde" con el modelo. En multivariable, una muestra son "muchos" números, correlados entre sí: conveniente generar uno o dos estadísticos "sencillos" no correlados (en vez de muchos umbrales no independientes).

Contenidos:
Elipsoide de confianza. Estadístico χ^2 (T^2) asociado. Conclusiones.

Ejemplo motivador

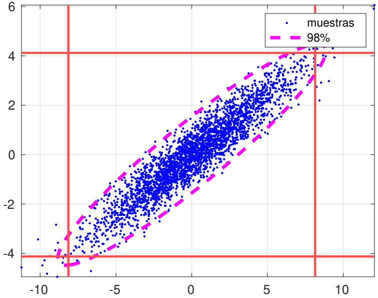
Se tiene un conjunto de 3000 datos de 2 variables. Sus histogramas (marginales) son:



Las lineas rojas indican umbrales (conf. 99%) que una aproximación a distribución normal propondría. Las lineas verdes, los cortes 0.5% inferior y superior del histograma "experimental".

Ejemplo motivador (2)

Podría pensarse en disparar una alarma ("detección" de fallo) en cada variable si se supera dicho umbral. Pero no tiene en cuenta la **correlación** entre ambas:



La alarma se dispararía cuando las muestras estén fuera del cuadrado.

*No detectaría puntos claramente anormales en las zonas superior izquierda / inferior derecha dentro del cuadrado.

- El **elipsoide de confianza** parece más indicado para detección de muestras anormales (fallos).

Objetivos de la detección de fallos basada en PCA

Generar "resíduos" para identificar:

1. qué muestras ya adquiridas eran anormales (fuera de línea, **a posteriori**)
2. para identificar "en linea" muestras que no concuerden con el modelo y detectar fallos lo más rápidamente posible.

Dos tipos de enfoque:

1. Análisis "completo": elipsoide de confianza a partir de $X = USV^T$.
2. Análisis "disgregado": de $X = U_{n\times n}S_{n\times n}(V_{n\times N})^T$, podemos descomponer la matriz de datos

$$X_{n\times N} = \underbrace{U_{n\times q}S_{1:q}V_{q\times N}}_{\text{mucha vza.}} + \underbrace{U_{n\times(n-q)}\overbrace{S_{(q+1):n}}^{\approx 0}V_{(n-q)\times N}}_{\text{vza. residual descartada}}$$

donde el componente izquierdo tiene "mucha variabilidad" y el derecho tiene "poca" (ruido fuera de modelo, varianza descartada).

SVD y PCA completo

De $X = U_{n\times n}S_{n\times n}(V_{n\times N})^T$, la matriz VC es $\Sigma = \frac{1}{N-1}XX^T = U\frac{S^2}{N-1}U^T$. Podemos entender que los datos han sido originados, muestra a muestra como

$$x = U_{n\times n}\psi$$

donde ψ es un vector de "fuentes de variabilidad" con desv. típ. muestral de ψ_i igual a $s_{ii}/\sqrt{N-1}$, esto es $E(\psi\psi^T) = \frac{1}{N-1}SV^TVS = \frac{1}{N-1}S^2 := \Lambda$.

Equivalentemente, $x = U\Lambda^{1/2}z$, siendo z un vector de componentes "normalizado" de varianza (muestral) identidad, con $\psi = \Lambda^{1/2}z$.

Si hay muuuchas muestras ($N \to \infty$), $\|z\|^2$ debería ser una χ^2 de n grados de libertad (o menos, si hay elementos de $diag(S)$ exactamente cero, que no ocurre con ruido de medida en la práctica. Elementos "muy pequeños" de S se discutirán en otros materiales).

Umbrales para PCA completo

A partir de los datos, como $x = U\Lambda^{1/2}z$, tenemos $z = \Lambda^{-1/2}U^T x$. Entonces $\|z\|^2 = x^T U\Lambda^{-1}U^T x = x^T\Sigma^{-1}x$.

- Existe un 95% de probabilidad que $x^T\Sigma^{-1}x \leq$`chi2inv(0.95,n)`. Esto puede ser usado de umbral para detección de algún "fallo" o "muestra irregular".

*Con pocas muestras, existe "incertidumbre" en el estimado muestral de Σ; el umbral debe ser cambiado usando la distribución T^2 de Hottelling. $x^T\Sigma^{-1}x \leq$`t2inv(0.95,N,n)`.

*Los umbrales pueden ser adaptados a la "media de m muestras", para filtrar mejor outliers esporádicos.

- Todo esto es una reescritura del "test de medias multivariables", vídeo [THMMV].

Conclusiones

- Con muestras de distrib. normal, matriz VC Σ, el PCA (SVD) me permite calcular cotas χ^2 o T^2 de $x^T \Sigma^{-1} x$.
- Realmente, es renombrar los conceptos de "elipsoide de confianza" o "test de hipótesis sobre media multivariable" y llamarle "umbrales de detección de fallos".
- En modelos reducidos (descartando valores singulares pequeños), tiene interés poder detectar:
  1. Cambios "dentro de modelo": algún componente de gran varianza tiene un valor anormal, pero la correlación se mantiene.
  2. Cambios "fuera de modelo": la correlación entre las variables no es la misma que con los datos de entrenamiento.

Ello se verá en otros materiales.