

# Componentes principales en detección de fallos: descomposición $(T^2, Q)$

Antonio Sala Piqueras

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

Presentación en vídeo en:

<http://personales.upv.es/asala/YT/V/fdpcagt1.html>

<http://personales.upv.es/asala/YT/V/fdpcagt2.html>



UNIVERSITAT  
POLITÀCNICA  
DE VALÈNCIA

# Presentación

## Motivación:

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

## Objetivos:

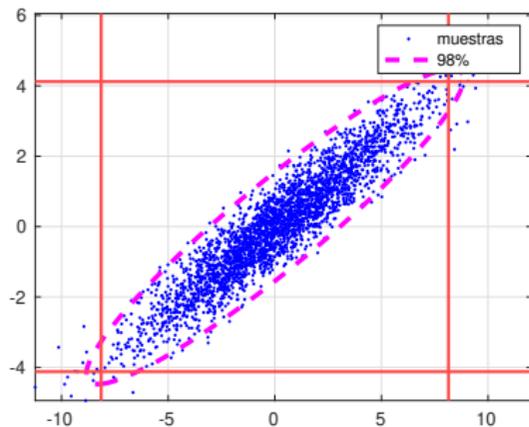
En detección de fallos, se considerará anormal aquella muestra que no “concuerde” con el modelo. En multivariable, una muestra son “muchos” números, correlados entre sí: conveniente generar uno o dos estadísticos “sencillos” no correlados (en vez de muchos umbrales no independientes).

## Contenidos:

Descomposición SVD, modelo de rango reducido. Estadístico  $Q$ . Estadístico  $T^2$ . Conclusiones.



## Ejemplo motivador



- ▶ Con correlación significativa, el **elipsoide de confianza** parece más indicado que los límites “marginales” para detección de muestras anormales (fallos).

Si el elipsoide es “muy estrecho”, realmente indica una alta correlación entre las variables (modelo  $y \approx \kappa x$  identificado, Total Least Squares).

¿Quizás se debería detectar fallos examinando  $\|e\|^2$ , con  $e = y - \kappa x$ ?

# Análisis con modelos reducidos

Tenemos  $N$  muestras de una variable aleatoria  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $N \gg n$ , tomados experimentalmente  $x_i \in \mathbb{R}^n$ , en la matriz de datos  $X = [x_1 \ x_2 \ \dots]_{n \times N}$ .

El SVD de  $X = USV^T$  (esto es, el PCA) obtiene un modelo de la relación entre los elementos de  $x$ . Si hacemos cero los valores singulares pequeños en  $S$  (causantes de “poca” varianza), podemos identificar un modelo **reducido** de  $q \leq n$  componentes, y una **varianza descartada** (error).

**Objetivo específico:** Generar “resíduos” para identificar qué muestras ya adquiridas eran anormales (fuera de línea) o para identificar muestras que no concuerden con el modelo y detectar fallos en línea.

Se generarán **dos residuos separados** para cada uno de los sub-modelos: modelo de varianza alta/ varianza descartada.



# SVD, PCA y modelos de rango reducido

De  $X = U_{n \times n} S_{n \times n} (V_{N \times n})^T$ , podemos descomponer la matriz de datos  $X$ :

$$X_{n \times N} = \underbrace{U_{n \times q}}_P \underbrace{S_{1:q} (V_{1:q}^T)}_{\Xi_{q \times N}} + \underbrace{U_{n \times (n-q)}}_{P^\perp} \underbrace{S_{(q+1):n} (V_{(q+1):n}^T)}_{\approx 0}_{E_{n \times N}}$$

que se corresponde con un modelo TLS identificado (muestra a muestra)

$$x = P\xi + e \quad \Leftrightarrow \quad (P^\perp)^T x \approx 0$$

- $P = U_{n \times q}$  es un trozo de matriz ortogonal (primeras columnas de  $U$ )  
 $P^T P = I_{q \times q}, \quad P^T P^\perp = 0, \quad (P^\perp)^T P^\perp = I_{(n-q) \times (n-q)}$
- $\xi$  son "factores causantes de la variabilidad", sin correlación entre ellos, de varianza  $\Lambda := S_{1:q}^2 / (N - 1)$ , o desv. típica  $\Lambda^{1/2} = S_{1:q} / \sqrt{N - 1}$ .
- $e$  es un término de error,  $e = P^\perp \epsilon$  siendo  $\epsilon$  componentes de varianza "residual"  
 $\Lambda_{\#} := S_{(q+1):n}^2 / (N - 1)$  que descartamos y no integramos en el modelo  $P\xi$ .

## Componentes normalizados a varianza /

La transp. anterior puede ser, equivalentemente, considerada como el resultado de un modelo:

$$x = P\Lambda^{1/2}\xi_{std1} + P^\perp\Lambda_{\#}^{1/2}\epsilon_{std1}$$

con  $\xi_{std1}$  y  $\epsilon_{std1}$  de **varianza unidad** (identidad), **no correlados**.

El residuo  $\|z\|^2 := x^T \Sigma^{-1} x$  del PCA completo, realmente sería  $\|z\|^2 = \|\xi_{std1}\|^2 + \|\epsilon_{std1}\|^2$ .

Con muchas muestras distr. normal,  $\|z\|^2$  tendría una distr. de probabilidad  $\chi^2$  de  $n$  grados de libertad: suma de (1)  $\|\xi_{std1}\|^2$ , que sería  $\chi^2$  de  $q$  grados de libertad, y (2)  $\|\epsilon_{std1}\|^2$ , una  $\chi^2$  de  $n - q$  grados de libertad.

# Umbrales

A partir de  $x$ , como  $P^T P^\perp = 0$ , tendríamos

$$\begin{aligned} \xi_{std1} &= \Lambda^{-1/2} P^T x & \|\xi_{std1}\|^2 &= x^T P \Lambda^{-1} P^T x \\ \epsilon_{std1} &= \Lambda_{\#}^{-1/2} (P^\perp)^T x & \|\epsilon_{std1}\|^2 &= x^T P^\perp \Lambda_{\#}^{-1} (P^\perp)^T x \end{aligned}$$

los adecuados umbrales  $\chi^2$  (muchas muestras) o  $T^2$  (pocas muestras) podrían ser establecidos.

**Problema:**  $S_{1:q}$  contiene elementos “grandes”, y posibles errores debido a muestras finitas son **porcentualmente pequeños**, pero  $\Lambda_{\#}$  contiene elementos “pequeños” y esos errores son más importantes porcentualmente (aparte de errores por no normalidad, no linealidad, etc.).

► Umbrales  $T^2$  sobre  $\|\epsilon\|^2$  POCO CONFIABLES en muchas aplicaciones prácticas ◀

# Evitar invertir matriz con elementos pequeños: residuo Q

Con el modelo:

$$x = P\Lambda^{1/2}\xi_{std1} + \overbrace{P^\perp\Lambda_{\#}^{1/2}\epsilon_{std1}}^e$$

no utilizamos la estructura de la derecha. Como  $\xi_{std1} = \Lambda^{-1/2}P^T x$ , tenemos

$$x = P\Lambda^{1/2}\Lambda^{-1/2}P^T x + e = \underbrace{PP^T}_{\text{matr. de proyección}} \cdot x + e$$

En la literatura sobre diagnóstico usando modelos “reducidos” a partir de PCA, se establecen umbrales para el “residuo fuera de modelo”:

$$e = (I - PP^T)x$$



## Estadístico $Q$ , *out-of-model*

Para cada muestra  $x_i$ , el estadístico  $Q \in \mathbb{R}$  se define como

$$\begin{aligned} Q_i &:= \|e_i\|^2 = e_i^T e_i \\ &= x_i^T (I - PP^T)(I - PP^T)x_i = x_i^T (I - 2PP^T + \underbrace{PP^T PP^T}_I)x_i \\ &= x_i^T (I - PP^T)x_i \end{aligned}$$

- El estadístico  $Q$  se interpreta como residuo **“fuera de modelo”**.  
**¿Umbral de  $Q$ ?** Al no normalizar a comp. indep. vza 1, la distribución de  $Q$  es más “rara” ... en la práctica, hacer histograma para poner un umbral.  
 Umbrales aproximados en <http://dx.doi.org/10.1080/00401706.1979.10489779>.
- El estadístico  $T^2 := \|\xi\|^2 = x^T P \Lambda^{-1} P^T x$  se interpreta como residuo **“dentro de modelo”** causado porque algún **“input”**  $\xi$  toma un valor poco probable, sin que el error  $e = (P^\perp)^T x$  crezca mucho (correlación con otras vbles. se mantiene).

# Conclusiones

- Con muestras de distrib. normal,  $\text{cov}(X) = \Sigma$ , el PCA (SVD) me permite calcular cotas  $\chi^2$  o  $T^2$  de  $x^T \Sigma^{-1} x$  (análisis “completo”).
- En modelos reducidos, tiene interés en descomponer la varianza en dos residuos sin correlación entre ellos:
  - 1 Varianza “dentro de modelo”, acotar  $x^T P \Lambda^{-1} P^T x$  por  $\chi^2$  o  $T^2$ .
  - 2 Varianza “fuera de modelo”, acotar  $x^T P^\perp \Lambda_\#^{-1} (P^\perp)^T x$  por  $\chi^2$  o  $T^2$ .
- Los estimados del segundo caso (inversa matriz casi singular) son bastante poco confiables. Se suele acotar  $Q = x^T (I - PP^T) x$ , en unidades “crudas” de  $x^2$ , no normalizadas.

