

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PRODUÇÃO**

DANILO MARCONDES FILHO

**CARTAS DE CONTROLE MULTIVARIADAS
BASEADAS NO MÉTODO KERNEL-STATIS PARA
MONITORAMENTO DE PROCESSOS EM BATELADAS**

Porto Alegre
2009

DANILO MARCONDES FILHO

**CARTAS DE CONTROLE MULTIVARIADAS
BASEADAS NO MÉTODO KERNEL-STATIS PARA
MONITORAMENTO DE PROCESSOS EM BATELADAS**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção da Universidade Federal do Rio Grande do Sul como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Engenharia de Produção, na área de concentração em Sistemas de Qualidade.

Orientador: Flávio Sanson Fogliatto, Ph D.

Porto Alegre

2009

DANILO MARCONDES FILHO

**CARTAS DE CONTROLE MULTIVARIADAS BASEADAS NO MÉTODO
KERNEL-STATIS PARA MONITORAMENTO DE PROCESSOS EM
BATELADAS**

Esta tese foi julgada adequada para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Produção e aprovada na sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora designada pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Prof. Flávio Sanson Fogliatto, Ph.D.

PPGEP/UFRGS

Prof. Flávio Sanson Fogliatto, Ph.D.

Coordenador PPGEP/UFRGS

Banca Examinadora:

Carla Schwengber ten Caten, Dra. (PPGEP/UFRGS)

Luis Paulo Luna de Oliveira, Dr. (PIPCA/UNISINOS)

Eugênio Kahn Epprecht, Dr. (DEI/PUC-RJ)

AGRADECIMENTOS

Ao professor PhD. Flávio Sanson Fogliatto, pela sua orientação extremamente criteriosa e incentivadora.

Ao professor e colaborador Dr. Luiz Paulo Luna de Oliveira, pela grande ajuda em todas as etapas deste trabalho e pelos ensinamentos recebidos.

Ao professor Dr. Cláudio Rosito Jung e ao estudante de engenharia da UFRGS Rafael Duarte Alcoba, pelo imenso apoio computacional recebido.

Ao professor Ms. Ângelo Márcio Santanna, por ser além de um colega de pesquisa, um grande amigo e incentivador deste trabalho.

Aos professores, funcionários e alunos do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, pelos apoios recebidos.

À minha querida mãe, pela grande força que sempre me deu.

RESUMO

Processos industriais que ocorrem em bateladas são empregados com frequência na produção de alguns itens. Tais processos disponibilizam uma estrutura de dados bastante peculiar e, diante disso, existe um crescente interesse no desenvolvimento de cartas de controle multivariadas mais apropriadas para seu monitoramento. Destaca-se aqui uma abordagem recente que utiliza cartas de controle baseadas no método Statis. O Statis constitui-se numa técnica exploratória que permite avaliar similaridade entre matrizes de dados. Entretanto, esta técnica avalia a similaridade no contexto linear, isto é, investiga estruturas de correlação lineares nos dados. Propõe-se nesta tese a utilização de cartas de controle baseadas no Statis em conjunto com um kernel para monitoramento de processos com presença de não-linearidades fortes. Através dos kernels, definem-se funções não lineares dos dados para melhor representação da estrutura a ser caracterizada pelo método Statis. Esta nova abordagem, denominada Kernel-Statis, é desenvolvida e avaliada utilizando dados de um processo simulado.

Palavras-chave: Cartas de Controle. Processos em bateladas. Kernel. Método Statis.

ABSTRACT

Industrial batch processes are widely used in the production of some items. Such processes provide a peculiar data structure; therefore, there is a growing interest in the development of customized multivariate control charts for their monitoring. We investigate a recent approach that uses control charts based on the Statis method. Statis is an exploratory technique for measuring similarities between data matrices. However, the technique only assesses similarities in a linear context, i.e. investigating structures of linear correlation in the data. In this thesis we propose control charts based on the Statis method in conjunction with a kernel for monitoring processes in the presence of strong non-linearities. Through the kernels we define non-linear functions of data for better representing the structure to be characterized by the Statis method. The new approach, named Kernel-Statis, is developed and illustrated using simulated data.

Key words: Control Charts. Batch processes. Kernel. Statis method.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Exemplo de um algoritmo de classificação (adaptado de Scholkopf & Smola, 2002).....	22
Figura 2 - Estrutura de dados não linearmente separável (gráfico da esquerda) e estrutura linearmente separável (gráfico da direita)	26
Figura 3 - Esquema comparativo da KPCA e da PCA linear. Adaptado de Scholkopf & Smola, 2002	34
Figura 4 - Esquemática de uma batelada	36
Figura 5 - Trajetórias de três variáveis de processo observadas em 20 instantes, durante 30 bateladas consecutivas.....	37
Figura 6 - Arquitetura da rede neural auto-associativa.....	46
Figura 7 - (a) Primeiro PC linear representado por uma reta (b) Primeiro PC não linear representado por uma curva.....	49
Figura 8 - Arranjo de dados para análise via Statis	56
Figura 9 - Esquema geral da metodologia de análise da <i>inter-estrutura</i>	60
Figura 10 - Esquema geral da metodologia de análise da <i>intra-estrutura</i>	63
Figura 11 - Esquema geral para determinação da região de controle.....	72
Figura 12 - Trajetórias das duas variáveis de processo amostradas em 100 bateladas de referência	87
Figura 13 - (a) CCs CO_{f*} e (b) CCs kCO_{f*}	91

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Matriz X contendo a representação dos dados num processo em bateladas para análise via MPCA.....	38
Tabela 2 - Quadro comparativo do desempenho das CCs kIS e IS para $\alpha=0,01$	89

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	TEMA E SUA JUSTIFICATIVA.....	12
1.2	OBJETIVOS	13
1.2.1	Objetivo Geral	13
1.2.2	Objetivos Específicos.....	13
1.3	MÉTODO.....	14
1.3.1	Método de Pesquisa	14
1.3.2	Método de Trabalho	15
1.4	DELIMITAÇÕES	15
1.5	ESTRUTURA DO TRABALHO.....	16
2	REFERENCIAL TEÓRICO.....	18
2.1	KERNELS.....	18
2.1.1	Kernel como Medida de Similaridade	18
2.1.2	Um algoritmo simples de classificação escrito em função de Kernels	20
2.1.3	Kernel Polinomial	23
2.1.4	Fundamentação do Kernels	27
2.1.5	Kernels a Priori.....	29
2.1.6	Análise de Componentes Principais via Kernel (Kernel PCA)	29
2.2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	35
2.2.1	Processo em Bateladas	35
2.2.2	MPCA	38
2.2.3	MPCA não linear	43
2.2.3.1	NLPCA via rede neural auto-associativa.....	44
2.2.3.2	NLPCA via redes neurais e curvas principais	48
2.2.3.3	NLPCA via kernel PCA	50
2.2.4	Procedimentos para Diagnóstico.....	53
2.3	MÉTODO STATIS	55
2.3.1	Considerações Iniciais	55
2.3.2	Análise da Inter-Estrutura	57
2.3.3	Análise da Intra-Estrutura	61
2.3.4	Considerações Finais	63
3	METODOLOGIA.....	66
3.1	STATIS VIA KERNEL POLINOMIAL (INTER-ESTRUTURA).....	66
3.2	STATIS VIA KERNEL POLINOMIAL (INTRA-ESTRUTURA).....	69
3.3	CARTAS DE CONTROLE PARA A INTER E A INTRA-ESTRUTURAS	70
3.3.1	Carta kIS	70
3.3.1.1	Controle <i>Off-Line</i> através da $CC\ kIS$	72
3.3.2	Carta kCO_t	74

3.3.2.1	Controle <i>Off-Line</i> através das CCs kCO_t	75
3.3.3	Controle On-Line	76
3.3.4	Diagnóstico	79
3.4	CONSIDERAÇÕES FINAIS	84
4	ESTUDO DE CASO SIMULADO	86
4.1	SISTEMA E BARELADAS DE REFERÊNCIA	86
4.2	ANÁLISE DA INTER-ESTRUTURA VIA CCs kIS E IS	88
4.3	ANÁLISE DA INTRA-ESTRUTURA VIA CCs kCO_t E CO_t	89
4.4	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	92
5	CONCLUSÕES	94
5.1	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	95
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	96

1. INTRODUÇÃO

Processos industriais automatizados disponibilizam uma grande quantidade de informações sobre seu desempenho. Em tais processos são geradas medições simultâneas e em tempo real de diversas variáveis de processo. Obtêm-se então dados em quantidade suficiente para habilitar um monitoramento preciso do desempenho de operações industriais. Parte dessas indústrias conduz seus processos em bateladas.

Processos em bateladas apresentam uma série de operações e eventos complexos que provocam efeitos não lineares significativos nos dados, isto é, correlações não lineares entre as variáveis de processo. Frente a essa evidência, cartas de controle (CCs) multivariadas mais apropriadas para seu monitoramento foram desenvolvidas.

As abordagens lineares de controle de processos em bateladas propostas na literatura baseiam-se fundamentalmente na Análise de Componentes Principais Multidirecionais (MPCA, *Multiway Principal Component Analysis*). A MPCA consiste em aplicar a Análise de Componentes Principais (PCA, *Principal Component Analysis*) no arranjo de dados sugerido originalmente por Nomikos & MacGregor (1994). Através da PCA obtém-se uma representação resumida dos dados considerando correlações lineares entre as variáveis.

As principais abordagens não lineares de controle de tais processos baseiam-se em extensões não lineares da PCA, denominadas *Non-Linear PCA* (NLPCA). As CCs baseadas em NLPCA são obtidas a partir do uso da PCA em conjunto com modelos de redes neurais, algoritmo de curvas principais e kernels. Martin & Morris (1996) e Lee *et al.* (2004a;b), apresentam uma discussão comparativa de CCs baseadas em NLPCA.

Uma abordagem alternativa, denominada Statis, proposta recentemente, utiliza um arranjo de dados distinto em relação à MPCA, (LAVIT *et al.*, 1994). O Statis constitui-se em uma técnica exploratória que oferece uma representação sumária do grau de similaridade entre matrizes de dados através da utilização da PCA neste arranjo. As CCs baseadas no método Statis foram propostas originalmente por Scepi (2002) e formalizadas para o monitoramento *on-line* e *off-line* de processos em bateladas por Fogliatto & Niang (2008). A caracterização dos dados oferecida pelo Statis traz um acréscimo em relação ao arranjo usado na MPCA, pois permite a construção de CCs para avaliar o desempenho do processo explicitamente a cada instante. Entretanto, assim como as demais abordagens lineares, a

técnica avalia a similaridade no contexto linear, isto é, investiga apenas estruturas de correlação lineares nos dados.

Esta tese propõe o desenvolvimento de CCs baseadas em uma modificação do Statis que incorpore também não-linearidades presentes nos dados e que será denominada Kernel-Statis. Através dos kernels, definem-se funções não lineares dos dados para melhor representação da estrutura a ser caracterizada pelo método Statis.

1.1 TEMA E SUA JUSTIFICATIVA

Processos em bateladas ou semi-bateladas são utilizados, com frequência, na obtenção de produtos químicos, bioquímicos e alimentícios. Para uma caracterização suficiente destes processos, computadores e equipamentos supervisórios conectados *on-line* com a produção fornecem dados coletados rotineiramente sobre as variáveis de processo, tais como temperaturas, pressões e fluxos.

Tais processos tendem a apresentar características não lineares acentuadas (LEE *et al.*, 2004b), visto que: (i) não são estacionários e, conseqüentemente, a média das variáveis de processo não é constante (isto é, as variáveis apresentam uma trajetória não linear ao longo da batelada); (ii) e operam em diferentes estágios, aumentando assim a incidência de efeitos não lineares no sistema.

Segundo Ramaker *et al.* (2006), o monitoramento de processos gera um acréscimo de conhecimento sobre os mesmos e possibilita a melhoria da qualidade do que é produzido, dentre outros benefícios. Neste contexto, as CCs aqui propostas devem cumprir os seguintes objetivos:

1. Ser capazes de incorporar e representar de maneira resumida as informações oriundas de grandes massas de dados multivariados, considerando a complexa estrutura de correlação e autocorrelação não linear das variáveis de processo. Dessa forma, as cartas podem oferecer sinalizações mais precisas (isto é, com um menor número de alarmes falsos) sobre o estado do processo. Como decorrência, obtém-se um melhor conhecimento sobre o processo.

2. Ser capazes de oferecer diagnósticos precisos que permitam uma rápida ação corretiva quando o processo estiver fora de controle. Os diagnósticos são úteis para a melhoria do processo e conseqüente melhoria da qualidade do que é produzido. Decorrem também outros benefícios, tais como a diminuição de custos de produção (decorrente de um menor desperdício de recursos) e a redução do impacto de resíduos químicos no meio ambiente.

Diante desta realidade, pesquisadores com diferentes formações vêm concentrando esforços no desenvolvimento de estratégias de controle para processos com presença de efeitos não lineares dominantes. Destacam-se iniciativas precursoras baseadas em NLPCA através de redes neurais e curvas principais, propostas por Kramer (1991) e Dong & MacAvoy (1996a), e iniciativas recentes de NLPCA baseadas em Kernel PCA (KPCA), propostas por Lee *et al.* (2004a;b) e Yoo (2006), dentre outros.

A contextualização apresentada respalda a proposta desta tese de desenvolver uma modificação não linear para uma abordagem que utiliza CCs baseadas no método Statis (e que será denominada Kernel-Statis).

1.2 OBJETIVOS

Como decorrência do que foi exposto na seção anterior, justificam-se os objetivos apresentados a seguir.

1.2.1 Objetivo Geral

Desenvolver uma modificação não linear na metodologia Statis de controle de processos em bateladas, utilizando cartas de controle baseadas no Kernel-Statis.

1.2.2 Objetivos Específicos

- a) Apresentar o desenvolvimento das CCs não lineares baseadas no Kernel-Statis.
- b) Comparar o desempenho das CCs baseadas no Statis e das CCs baseadas no Kernel-Statis.

- c) Propor uma abordagem para diagnóstico do processo a partir das CCs baseadas no Kernel-
Statis.

1.3 MÉTODO

Uma vez definidos os objetivos deste trabalho, torna-se necessário estabelecer o método pelos quais os mesmos serão buscados.

1.3.1 Método de Pesquisa

O método de pesquisa a ser utilizado neste trabalho será caracterizado de acordo com a estrutura proposta por Silva e Menezes (2005). Segundo os autores, as formas clássicas de classificação são: do ponto de vista da sua natureza (aplicada e básica), da forma de abordagem do problema (quantitativa e qualitativa), de seus objetivos (descritiva, explicativa e exploratória) e dos procedimentos técnicos a serem adotados (bibliográfica, documental, estudo de caso, experimental, *expost-facto*, levantamento, participante e pesquisa-ação).

A partir da classificação proposta, este trabalho se caracteriza como:

- (i) uma pesquisa aplicada, uma vez que objetiva gerar conhecimentos para aplicação prática dirigidos à solução de problemas específicos, envolvendo verdades e interesses locais. A pesquisa aplicada é difundida no tempo e no espaço, mas é limitada no contexto da aplicação, pois se admite que os problemas possam ser entendidos e resolvidos apenas com o conhecimento;
- (ii) uma pesquisa quantitativa, pois requer o uso de técnicas estatísticas na análise de informações obtidas;
- (iii) uma pesquisa explicativa, pois visa identificar fatores, a partir de características de relação entre as variáveis, que determinam ou contribuem para explicar a razão de ocorrência do fenômeno. Quando utilizada nas ciências exatas, requer uso de métodos experimentais;

- (iv) uma pesquisa experimental, pois é definido um objeto de estudo e as variáveis que podem influenciá-lo.

Essa classificação sustenta o método de trabalho utilizado nesta tese.

1.3.2 Método de Trabalho

As principais etapas no desenvolvimento da tese compreendem:

1. Revisar a base teórica dos kernels, as principais abordagens não lineares de controle de processos em bateladas e a base teórica do método Statis.
2. Desenvolver uma modificação no Statis a partir da utilização de um kernel (Kernel-Statis).
3. Apresentar o desenvolvimento teórico das CCs baseadas no Kernel-Statis.
4. Validar o procedimento a partir de um processo em bateladas simulado. Os dados utilizados para análise serão gerados supondo-se que leis físicas que regem o processo são descritas por um sistema discreto de equações recorrentes com duas variáveis. Através desse sistema, são gerados dados do processo em controle estatístico e, posteriormente, dados do processo fora de controle com diferentes graus de descontrole impostos no sistema.
5. Comparar o desempenho das CCs baseadas no Statis e no Kernel-Statis a partir de dados gerados pelo mesmo sistema.
6. Propor uma abordagem para diagnóstico dos distúrbios detectados pelas CCs baseadas no Kernel-Statis.

1.4 DELIMITAÇÕES

A metodologia de controle proposta nesta tese apresenta algumas fronteiras técnicas e de implementação:

- a) As CCs baseadas no Kernel-Statís aqui propostas são apropriadas para processos em bateladas de tempo fixo e cujas causas de variabilidade não desejadas incidem uniformemente nos instantes. Processos em bateladas de tempo variável não fazem parte do escopo da tese. Assim, a investigação das modificações necessárias no Kernel-Statís diante de tais processos podem ser propostas em trabalhos subseqüentes.
- b) No caso exemplo apresentado no Capítulo 4, simulou-se um processo cujas leis físicas estavam descritas por um sistema onde foram impostas não-linearidades do tipo quadráticas. Neste caso, utilizou-se um kernel polinomial de segunda ordem (em combinação com o Statís) para caracterizar a estrutura dos dados gerados. Entretanto, em um processo real não se sabe, *a priori*, que tipo de estrutura não linear existe nos dados. Dessa forma, necessita-se de uma etapa de pré-processamento para investigar os dados e, a partir disso, propor um kernel adequado. Esta tese não contempla essa etapa.
- c) Esse trabalho apresentou o desenvolvimento teórico das CCs baseadas no Kernel-Statís. Entretanto, para viabilizar a efetiva execução desse controle, necessita-se de *software* que incorpore a teoria proposta. São necessárias ferramentas computacionais que forneçam aos operadores, em cada instante de tempo, informações sobre o processo através da geração e atualização das CCs propostas. O desenvolvimento dessas ferramentas computacionais transcende o escopo desta tese.
- d) Finalmente, é proposto um procedimento para diagnóstico de desconroles apontados pelas CCs kCO_t através das CCs CO_p . Entretanto, a validação dessa abordagem não está prevista neste texto.

1.5 ESTRUTURA DO TRABALHO

A tese é composta de cinco capítulos.

Neste capítulo, foi apresentada uma introdução sobre as CCs não lineares para monitoramento de processos em bateladas. Discutiram-se também a relevância do tema, os objetivos a serem alcançados, os métodos empregados, a estruturação da tese, bem como as limitações deste trabalho.

No segundo capítulo é apresentado o referencial teórico necessário para o entendimento da metodologia de controle aqui proposta. Esse referencial divide-se em três etapas: descrição da teoria dos kernels, apresentação das principais abordagens não lineares de controle de processos em bateladas e descrição da base teórica do Statis.

No terceiro capítulo é apresentado o desenvolvimento teórico do Kernel-Statis, das CCs baseadas no Kernel-Statis e de uma abordagem para diagnóstico de desconroles.

No quarto capítulo é apresentado um estudo de caso simulado para comparar o desempenho das CCs baseadas no Kernel-Statis e no Statis usual para detecção de desconroles.

No quinto capítulo são apresentadas as considerações finais obtidas com o desenvolvimento da tese e sugestões para futuros trabalhos.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Este capítulo apresenta uma revisão sobre o referencial teórico necessário para fundamentar o método de análise proposto no capítulo 3. Para tanto, o texto está organizado em três seções: a seção 2.1 traz a base teórica sobre kernels; a seção 2.2 traz uma revisão sobre as principais estratégias de controle multivariadas para monitoramento não linear de variáveis de processos em bateladas; e a seção 2.3 apresenta a fundamentação do método Statis para análise multivariada de dados.

2.1 KERNELS

Esta seção apresenta uma descrição da teoria dos kernels aplicada ao controle estatístico multivariado não linear. Neste contexto, a utilização dos kernels permitem a projeção dos dados em um espaço de maior dimensão em relação ao espaço original (denominado espaço dos atributos), de onde é possível extrair informações adicionais sobre a estrutura não linear das variáveis de um processo sob investigação. Esta análise é realizada sem acessar diretamente o espaço dos atributos através do uso de funções kernel desses dados de entrada. A seção 2.1.1 apresenta de maneira informal os kernels como medidas de similaridade entre dados. A seção 2.1.2 apresenta um algoritmo geral de classificação escrito como um kernel. A seção 2.1.3 apresenta a utilização de um kernel polinomial e uma aplicação em um problema de classificação não linear. A seção 2.1.4 apresenta algumas definições e teoremas que fundamentam os kernels. Na seção 2.1.5 são descritos alguns kernels comumente usados *a priori* para extrair a estrutura não linear de correlação entre dados de entrada. Finalmente, na seção 2.1.6 é apresentada a Análise de Componentes Principais (que se constitui em uma técnica de análise multivariada) como um algoritmo escrito em função de kernels para extração de não-linearidades no processo.

2.1.1 Kernel como Medida de Similaridade

Considere um problema de classificação aplicado a um processo industrial. As realizações de um processo organizadas em um histórico de M rodadas de produção, geram produtos conformes e não conformes. Admita que cada rodada do processo seja monitorada

através de informações contidas no vetor linha \mathbf{x}_i ($i=1,\dots,M$), de dimensão $(1 \times N)$, que representa uma realização de cada uma de N variáveis contínuas de processo, isto é, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^N$ (\mathbb{R}^N representa o conjunto dos reais no espaço de dimensão N). Para classificar uma nova rodada do processo, compara-se a informação \mathbf{x} a ela associada com os dados \mathbf{x}_i de referência. Para tanto, deve-se definir uma medida de similaridade entre esses dois conjuntos de dados. Considere a seguinte medida de similaridade:

$$k: \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$$

$$(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) \rightarrow k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}),$$

onde k é a função que gera um número real para representar a similaridade entre os vetores \mathbf{x}_i e \mathbf{x} , com $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$. A função k é denominada *Kernel* (GUYON *et al.*, 1993) e a sua justificativa é apresentada na seção 2.1.4.

As medidas de similaridade comumente usadas em análise multivariada de dados utilizam o produto interno canônico, dado por:

$$\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle = \sum_{w=1}^N [\mathbf{x}_i]_w [\mathbf{x}]_w, \quad (1)$$

onde $[\mathbf{x}_i]_w$ e $[\mathbf{x}]_w$ representam a $w^{\text{ésima}}$ coluna dos vetores linha \mathbf{x}_i e \mathbf{x} , respectivamente.

A medida de similaridade na eq. (1) permite trabalhar com construções geométricas formuladas em termos de ângulos, comprimentos e distâncias. Sabe-se que o produto interno na eq. (1) é a medida do co-seno do ângulo entre os vetores \mathbf{x}_i e \mathbf{x} . Adicionalmente, o comprimento (ou norma) de um vetor e a distância euclidiana entre dois vetores é obtido também em função do produto interno canônico: o primeiro é dado por $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}$, e a segunda por $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}\|^2 = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i \rangle + \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle - 2\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle$. Ressalta-se que as técnicas estatísticas clássicas de análise multivariada linear tais como Análise de Componentes Principais (PCA, *Principal Component Analysis*), Análise Discriminante (DA, *Discriminant Analysis*), Análise de Cluster (CA, *Cluster Analysis*), Análise de Regressão Linear (LRA, *Linear Regression Analysis*) e o método Statis, entre outras, utilizam estas construções.

Medidas de similaridade mais gerais podem ser obtidas a partir da construção de um mapa não linear Φ . Tem-se:

$$\begin{aligned} \Phi: \mathbb{R}^N &\rightarrow F \\ \mathbf{x} &\rightarrow \Phi(\mathbf{x}), \end{aligned} \tag{2}$$

onde F representa o *espaço dos produtos internos* ou *espaço dos atributos*, com dimensão (N_F) maior ou igual ao espaço de entrada \mathbb{R}^N . Note que o vetor $\Phi(\mathbf{x})$ é a representação do vetor \mathbf{x} no espaço dos atributos F .

A aplicação dos dados de entrada em F , através de Φ , permite construções geométricas baseadas em produtos internos modificados no espaço de entrada. Isto é realizado através da aplicação de uma função k (kernel) nos dados de entrada. Tem-se:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle. \tag{3}$$

A escolha do mapa Φ permite construir uma série de medidas alternativas de similaridade (tais como correlações e distâncias num contexto não linear), trabalhando apenas no espaço de entrada \mathbb{R}^N , via k . Por exemplo, Φ pode ser um mapa polinomial, com $\Phi(\mathbf{x}_i)$ e $\Phi(\mathbf{x})$ representando vetores contendo produtos entre os elementos dos vetores \mathbf{x}_i e \mathbf{x} , respectivamente. Neste caso, pode-se executar o produto interno $\langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle$ no espaço F , (sem acessá-lo) através de um produto interno modificado apropriado $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$ nos dados de entrada, para investigar não-linearidades entre \mathbf{x}_i e \mathbf{x} . Na seção 2.1.3 este exemplo é descrito em detalhes.

2.1.2 Um algoritmo simples de classificação escrito em função de Kernels

Considere novamente o exemplo citado no início da seção anterior, onde se desejava classificar o produto gerado em uma nova rodada do processo. Deseja-se então verificar a similaridade do vetor \mathbf{x} de informações da nova rodada com os vetores \mathbf{x}_i das M rodadas de referência. A partir dessas rodadas de referência, obtém-se o vetor \mathbf{c}_+ que traz a média das M_+ realizações conformes, e o vetor \mathbf{c}_- que traz a média das M_- realizações não conformes. Obtêm-se, então, duas classes de referência:

$$\mathbf{c}_+ = \frac{1}{M_+} \sum_{i=1}^{M_+} \mathbf{x}_i \quad \text{e} \quad \mathbf{c}_- = \frac{1}{M_-} \sum_{i=1}^{M_-} \mathbf{x}_i. \quad (4)$$

O algoritmo utilizado para classificar uma nova rodada \mathbf{x} (proposto em SCHOLKOPF & SMOLA, 2002) é baseado numa construção geométrica que utiliza o produto interno canônico. Primeiramente obtém-se o ponto médio entre \mathbf{c}_+ e \mathbf{c}_- , isto é, $\mathbf{c} = (\mathbf{c}_+ + \mathbf{c}_-)/2$. Determina-se a classe do vetor \mathbf{x} calculando o ângulo entre o vetor $\mathbf{x} - \mathbf{c}$ e o vetor que liga as duas classes $\mathbf{w} = \mathbf{c}_+ - \mathbf{c}_-$. Computa-se o produto interno entre $\mathbf{x} - \mathbf{c}$ e \mathbf{w} . Se o ângulo entre $\mathbf{x} - \mathbf{c}$ e \mathbf{w} for menor do que 90° , o seu co-seno será positivo e \mathbf{x} será designado à classe \mathbf{c}_- , isto é, será classificado como rodada não conforme. Caso contrário, \mathbf{x} será enquadrado na classe \mathbf{c}_+ , isto é, será classificado como rodada conforme. A Figura 1 apresenta um esquema geral do algoritmo proposto. Note que a linha pontilhada representa o plano de decisão onde o co-seno do ângulo entre $\mathbf{x} - \mathbf{c}$ e \mathbf{w} , dado pelo correspondente produto interno, muda de sinal.

A partir da estratégia apresentada no parágrafo anterior, formaliza-se a seguinte função de classificação:

$$Y = \text{SINAL}(\langle \mathbf{x} - \mathbf{c}, \mathbf{w} \rangle).$$

Substituindo \mathbf{c} e \mathbf{w} pelas suas expressões, tem-se:

$$Y = \text{SINAL}(\langle \mathbf{x}, \mathbf{c}_+ \rangle - \langle \mathbf{x}, \mathbf{c}_- \rangle + b), \quad (5)$$

onde

$$b = \frac{1}{2}(\|\mathbf{c}_-\|^2 - \|\mathbf{c}_+\|^2),$$

com norma dada por $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}$. Se os vetores \mathbf{c}_- e \mathbf{c}_+ apresentarem a mesma norma, isto é, se as médias das duas classes tiverem a mesma distância da origem, então $b=0$.

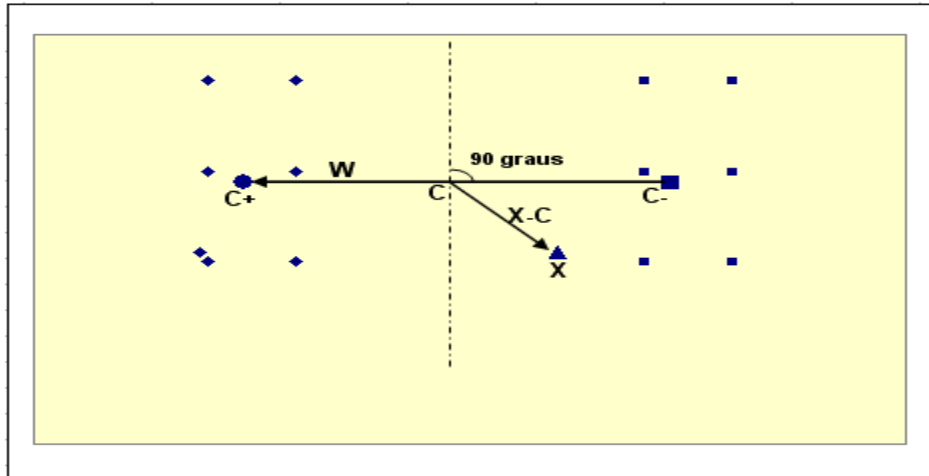


Figura 1 - Exemplo de um algoritmo de classificação
 Fonte – adaptada de Sholkopf & Smola (2002)

A expressão linear dada na eq. (5) pode ser escrita explicitamente com os dados de entrada \mathbf{x}_i usando o kernel k para calcular os produtos internos. Utilizando a informação na eq. (4), tem-se:

$$\begin{aligned}
 Y &= \text{SINAL}\left(\frac{1}{M_+} \sum_{i=1}^{M_+} \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle - \frac{1}{M_-} \sum_{i=1}^{M_-} \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle + b\right) \\
 &= \text{SINAL}\left(\frac{1}{M_+} \sum_{i=1}^{M_+} k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) - \frac{1}{M_-} \sum_{i=1}^{M_-} k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b\right),
 \end{aligned}$$

onde $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$, neste caso, representa o produto interno usual ou canônico. Dessa forma, o sinal de Y para classificar uma nova observação \mathbf{x} é obtido simplesmente calculando a soma ponderada dos produtos internos entre \mathbf{x} e \mathbf{x}_i , computados via k . Observe que para $\mathbf{x}_i \in M_+$ o valor de k é multiplicado por $1/M_+$, e para $\mathbf{x}_i \in M_-$ o valor de k é multiplicado por $1/M_-$. De uma maneira geral, o algoritmo de classificação apresentado na eq. (5) pode ser escrito da seguinte forma:

$$Y = \text{SINAL}\left(\sum_{i=1}^M \alpha_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b\right). \quad (6)$$

A função acima retorna o sinal da combinação linear dos k dado pelos coeficientes α , onde α_i representa o peso atribuído para o produto interno $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$, definido segundo algum

critério de ponderação das observações de referência (no exemplo simplificado apresentado, $\alpha_i = 1/M_+$ para $\mathbf{x}_i \in M_+$ e $\alpha_i = 1/M_-$ para $\mathbf{x}_i \in M_-$).

O algoritmo de classificação descrito acima é frequentemente usado para reconhecimento de padrões e faz parte de uma área denominada *Support Vector Machines* (*SMVs*). Os coeficientes α_i são encontrados através da resolução de um problema de programação quadrática (ver VAPNIK & CHERVONENKIS, 1979). Cabe salientar que qualquer algoritmo que pode ser escrito em função de produtos internos entre observações, como, por exemplo, a PCA (apresentada na seção 2.1.6), pode ser escrito em função de um kernel (SCHOLKOPF *et al.*, 1998).

Importante ressaltar que para $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle$, a eq. (6) apresenta o produto interno usual ou canônico entre \mathbf{x} e \mathbf{x}_i , conforme definido na eq. (1). Entretanto, através do mapa não linear Φ [descrito em (2)], pode-se definir um produto interno modificado $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$ dado na eq. (3). Um exemplo dessa modificação será dado na seção 2.1.3; a base teórica que fundamenta esta modificação é apresentada na seção 2.1.4.

2.1.3 Kernel Polinomial

A seção 2.1.1 apresentou o kernel como medida de similaridade através do produto interno canônico entre observações \mathbf{x}_i e \mathbf{x} [eq. (1)] e posteriormente definiu mapas não lineares Φ num espaço dos atributos F [eq. (2)], onde o kernel realiza um produto interno modificado das observações \mathbf{x}_i e \mathbf{x} através dos $\Phi(\mathbf{x}_i)$ e $\Phi(\mathbf{x})$ [eq. (3)]. Esta seção apresenta uma classe de kernels concebida para tratar estruturas de dados com determinado tipo de não linearidade: trata-se do *Kernel Polinomial*.

Sem perda de generalização, considere um vetor de observações \mathbf{x} , de dimensão (1×2) , isto é, com 2 valores, e uma função $\Phi(\mathbf{x})$ cujos elementos representam todos os monômios de ordem 2 obtidos para os valores em \mathbf{x} . Define-se um mapa não linear do tipo:

$$\Phi: \mathbb{R}^2 \rightarrow F = \mathbb{R}^3$$

$$\mathbf{x} = ([\mathbf{x}]_1, [\mathbf{x}]_2) \rightarrow \Phi(\mathbf{x}) = ([\mathbf{x}]_1^2, [\mathbf{x}]_2^2, [\mathbf{x}]_1[\mathbf{x}]_2). \quad (7)$$

Através desta função, as informações do vetor \mathbf{x} passam a ser analisadas no espaço dos produtos de ordem 2 de seus elementos. No espaço F , utilizar o produto interno canônico entre vetores $\Phi(\mathbf{x}_i)$ e $\Phi(\mathbf{x})$ equivale a multiplicar monômios de ordem 2 nos dados de entrada. Entretanto, podem-se computar esses produtos sem utilizar os vetores $\Phi(\mathbf{x}_i)$ e $\Phi(\mathbf{x})$ explicitamente, definindo um kernel apropriado, tal que $\langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$.

Considere o mapa apresentado na eq. (7) com uma modificação escrita da seguinte forma:

$$\Phi(\mathbf{x}) = ([\mathbf{x}]_1^2, [\mathbf{x}]_2^2, [\mathbf{x}]_1[\mathbf{x}]_2, [\mathbf{x}]_2[\mathbf{x}]_1). \quad (8)$$

Os monômios $([\mathbf{x}]_1[\mathbf{x}]_2)$ e $([\mathbf{x}]_2[\mathbf{x}]_1)$ são considerados distintos (isto é, monômios ordenados). Para monômios deste tipo, o produto interno no espaço dos atributos F entre os vetores $\Phi(\mathbf{x}_i)$ e $\Phi(\mathbf{x})$ é da seguinte forma:

$$\langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle = [\mathbf{x}_i]_1^2 [\mathbf{x}]_1^2 + [\mathbf{x}_i]_2^2 [\mathbf{x}]_2^2 + 2[\mathbf{x}_i]_1 [\mathbf{x}]_2 [\mathbf{x}_i]_2 [\mathbf{x}]_1,$$

ou

$$\langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle^2 = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}).$$

Conclui-se então que se pode obter os produtos internos entre monômios de ordem 2 no espaço dos atributos sem utilizar Φ diretamente, utilizando o kernel que calcula o quadrado do produto interno canônico entre as observações originais (isto é, do espaço de entrada). Dessa forma, através do kernel polinomial de segunda ordem, analisam-se estruturas não lineares quadráticas, tais como correlações de segunda ordem entre variáveis, por exemplo.

O resultado acima pode ser generalizado para os vetores \mathbf{x}_i e $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ e para um espaço F dos monômios ordenados de ordem d , aplicado aos elementos de \mathbf{x}_i e \mathbf{x} . Neste caso, o kernel que calcula o produto interno entre os vetores $\Phi(\mathbf{x}_i)$ e $\Phi(\mathbf{x})$ em F é dado por (POGGIO, 1975, Lema 1):

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle^d. \quad (9)$$

É importante notar que para determinada escolha de N e d , o espaço F tem dimensão muito superior ao espaço de entrada N , sendo dada por:

$$N_F = \binom{d+N-1}{d} = \frac{(d+N-1)!}{d!(N-1)!}.$$

Por exemplo, considere um processo industrial com observações periodicamente coletadas acerca de 20 variáveis de processo (isto é, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{20}$) e monômios de ordem $d=5$. Neste caso o espaço dos atributos F trabalha com vetores $\Phi(\mathbf{x})$ de dimensão (1×42504) e, portanto, computacionalmente difíceis de serem tratados. Entretanto, este mapa não é explicitamente acessado, e não-linearidades desta ordem entre as variáveis de processo podem ser analisadas no espaço dos dados \mathbf{x} entrada [de dimensão (1×20)] através do kernel na eq. (9).

O kernel polinomial também pode ser obtido através de uma modificação no mapa Φ (que será denotada por \mathbf{C}_d). Considere novamente $d=2$. O mapa na eq. (8) pode ser escrito apenas com monômios não-ordenados (isto é, sem considerar a ordem da multiplicação das entradas de \mathbf{x}_i) da seguinte forma:

$$\mathbf{C}_2(\mathbf{x}) = ([\mathbf{x}]_1^2, [\mathbf{x}]_2^2, \sqrt{2}[\mathbf{x}]_1[\mathbf{x}]_2). \quad (10)$$

Deve-se observar que como o vetor $\mathbf{C}_2(\mathbf{x})$ não considera a ordem dos elementos que representam produtos cruzados dos elementos de \mathbf{x} , o terceiro elemento de $\mathbf{C}_2(\mathbf{x})$ é multiplicado por $\sqrt{2}$. Dessa forma, o produto interno entre os vetores $\mathbf{C}_2(\mathbf{x}_i)$ e $\mathbf{C}_2(\mathbf{x})$ forma um quadrado perfeito, como na eq. (9); isto é, $\langle \mathbf{C}_2(\mathbf{x}_i), \mathbf{C}_2(\mathbf{x}) \rangle = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle^2$.

O kernel polinomial apresentado na eq. (9) possui formulações alternativas. Pode-se estar interessado em um mapa dos monômios de ordem até d , isto é, considerando também todas as ordens inferiores a d . Neste caso, define-se o kernel apropriado escrevendo-se $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = (\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle + 1)^d$.

Considere um exemplo simples de aplicação do kernel polinomial de segunda ordem a um problema de classificação não linear de dados contidos em vetores $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$. A Figura 2 (a) mostra a estrutura original dos dados de referência, onde existem dois padrões representados por pontos em forma de losangos e triângulos. A Figura. 2 (b) mostra no \mathbb{R}^2 a estrutura transformada através do mapa não linear da eq. (10), com $\mathbf{C}_2(\mathbf{x}) = ([\mathbf{x}]_1^2, [\mathbf{x}]_2^2, \sqrt{2}[\mathbf{x}]_1[\mathbf{x}]_2) = ([\mathbf{z}]_1, [\mathbf{z}]_2, [\mathbf{z}]_3)$. O terceiro elemento \mathbf{z}_3 de $\mathbf{C}_2(\mathbf{x})$ foi omitido no gráfico sem perda de informação.

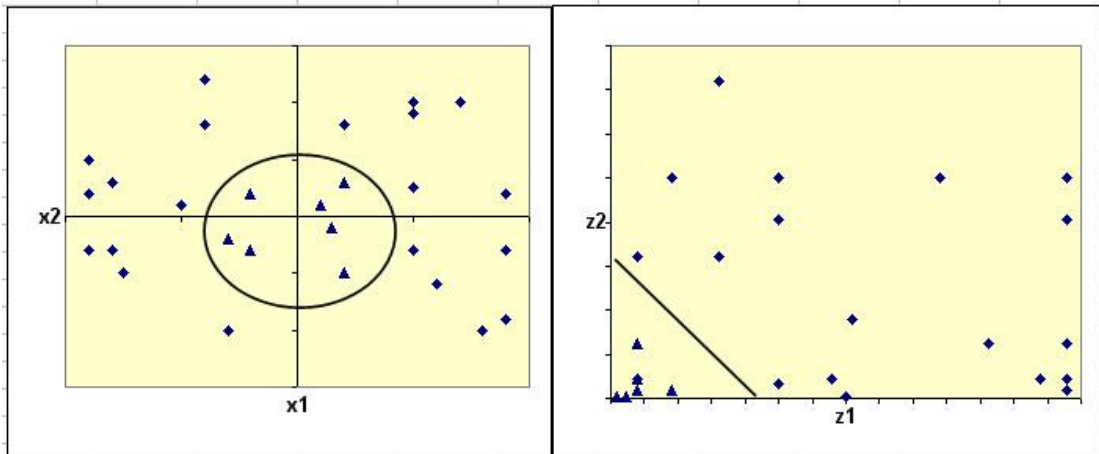


Figura 2 - (a) Estrutura de dados não linearmente separável. e (b) estrutura linearmente separável
 Fonte - adaptada de Sholkopf & Smola (2002)

Observa-se claramente que o mapa não linear C_2 oferece uma representação linearmente separável dos dois padrões. Dessa forma pode-se usar de ferramentas lineares para análise e classificação de futuras observações.

Ressalta-se que, através dos mapas não lineares, podem-se investigar estruturas não lineares através das técnicas lineares de classificação de dados (como por exemplo, a SVMs, anteriormente mencionada), e técnicas estatísticas clássicas (tais como PCA, DA, CA, LRA, Statis, entre outras), sem acessar diretamente este espaço, via utilização de kernels. Ratifica-se que as técnicas de análise citadas se constituem em algoritmos que podem ser escritos através de kernels (está no escopo deste trabalho descrever o algoritmo do método Statis via kernel). Adicionalmente, mesmo que a dimensionalidade aumente demasiadamente, o espaço dos atributos não é acessado, pois, através de um kernel apropriado, pode-se construir um produto interno modificado no \mathbb{R}^N que corresponda ao produto interno entre os Φ no espaço F (como foi exemplificado através de um kernel polinomial).

Uma questão relevante é a definição de uma classe de kernels que permita a representação $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle$. Em outras palavras, dado um kernel, deve-se identificar um mapa Φ no espaço dos atributos F , tal que a igualdade acima se verifique. Para tanto, é necessário entender algumas propriedades e teoremas que fundamentam um kernel, e que são apresentados a seguir.

2.1.4 Fundamentação do Kernels

Esta seção apresentada de maneira informal algumas propriedades e teoremas que fundamentam um kernel. Primeiramente, define-se uma classe de kernels que geram uma medida de similaridade bem definida (isto é, um produto interno bem definido). Num segundo momento, a questão levantada no final da seção anterior é esclarecida através da definição de uma classe de kernels que atuam como produto interno no espaço dos atributos, isto é, $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle$.

Considere M vetores de observações; sejam \mathbf{x}_i e \mathbf{x}_j dois vetores deste conjunto. Defina-se a matriz quadrada:

$$\mathbf{K}_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), \quad (11)$$

de ordem $(M \times M)$, cujas entradas representam produtos internos entre as observações, definidos por um kernel. Esta matriz é denominada *Matriz Kernel*. Este trabalho tem como foco a aplicação de funções kernel em matrizes simétricas. Dessa forma, considere a matriz na eq. (11) como sendo simétrica, ou seja, $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i)$.

O primeiro objetivo dessa seção é justificar a utilização de um kernel como medida de similaridade. A condição importante que justifica um produto interno como medida de similaridade é que ele seja positivo definido. Assim, o kernel que gera um produto interno modificado, mas que seja positivo definido, pode ser usado como medida de similaridade.

Inicialmente, define-se uma matriz positiva definida. A matriz simétrica com elemento $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \in \mathbb{R}$ é positiva definida se possui todos os autovalores não negativos. De posse dessa definição, pode-se conceituar um kernel positivo definido:

A função $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ que gera uma matriz kernel positiva definida, é positivo definido.

O termo kernel deriva da teoria de análise funcional na área de *operadores integrais*. Os kernels positivos definidos estão descritos na literatura com denominações distintas, tais como *Mercer Kernel*, *Support Vector Kernel*, *Função de Covariância*, etc.

A segunda questão colocada nesta seção agora pode ser explorada. Que classe de kernels atuam como produto interno no espaço F via um mapa não linear Φ ? O teorema de análise funcional denominado *Teorema de Mercer* (BOSER *et al.*, 1992) demonstra que se k é um kernel contínuo de um operador integral positivo então se pode construir um mapa Φ num espaço F onde k atua como produto interno (SCHOLKOPF & SMOLA, 2002). Em outras palavras, se k é positivo definido, existe um mapa Φ onde $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}_j) \rangle$.

Finalmente, como decorrência do *teorema de Mercer*, dado um algoritmo que é escrito em função de um kernel k positivo definido, pode-se construir uma versão alternativa escrita em função de um outro kernel k'' positivo definido. Este resultado é conhecido como *Kernel Trick* (SCHOLKOPF & SMOLA, 2002).

Este último resultado é de particular interesse, visto que boa parte das abordagens de controle de processos multivariados são baseadas na utilização da Análise de Componentes Principais (PCA). A PCA gera, a partir de um conjunto de variáveis, novas variáveis de análise não correlacionadas através da diagonalização da matriz de covariâncias (\mathbf{S}). Entretanto, essa matriz pode ser reescrita como uma matriz $\mathbf{K}_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ positiva definida, isto é, com os seus elementos representando produtos internos canônicos entre as observações \mathbf{x}_i e \mathbf{x}_j (resultado que será demonstrado na seção 2.1.6). A partir dessa nova representação (isto é, ao usar \mathbf{K} no lugar de \mathbf{S} na análise), definem-se diferentes kernels positivo definidos (ou seja, produtos internos não canônicos) para extração de estruturas não lineares nos dados.

Em outras palavras, essa modificação permite a escolha do kernel a ser usado em \mathbf{S} (escrita em função de \mathbf{K}), a partir do tipo de não linearidade a ser investigada. A seção 2.3.3 apresenta uma revisão sobre uma abordagem de controle não linear de processos utilizando a PCA descrita acima, denominado Kernel PCA.

Adicionalmente, o foco desse trabalho está na apresentação de uma modificação não linear no método Statis através do seu uso combinado com kernels. O método Statis de análise é revisado na seção 3 e constitui-se na aplicação da PCA em matrizes do tipo \mathbf{K} para avaliar de forma sumária a similaridade entre conjuntos de dados. Dessa forma, novamente o *Kernel Trick* permitirá a construção de uma versão não linear do Statis (resultado que será apresentado no capítulo 3).

2.1.5 Kernels a Priori

Esta seção apresenta alguns kernels que são utilizados com frequência na investigação de estruturas não lineares das variáveis de entrada (SCHOLKOPF *et al.*, 1998). Destaca-se o kernel polinomial (descrito na seção 2.1.3), apresentado como:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle^d, \text{ para } d \in \mathbb{N}, \quad (12)$$

ou através da forma alternativa $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle + 1)^d$.

Outros kernels utilizados com frequência são o Gaussiano, cuja forma é:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{\sigma^2}\right), \text{ para } \sigma > 0;$$

e o kernel Sigmóide, empregado com frequência em algoritmos de Redes Neurais, com forma dada por $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \tanh(w\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle + \Theta)$, para $w, \Theta \in \mathbb{R}$. Este último não é positivo definido, porém apresenta resultados interessantes em problemas tratados através da aplicação de Redes Neurais.

2.1.6 Análise de Componentes Principais via Kernel (Kernel PCA)

A PCA se constitui numa técnica estatística multivariada que busca capturar informação sobre a estrutura de correlação linear de um grupo de variáveis sob análise. Esta informação é condensada em um número menor de variáveis não correlacionadas denominadas Componentes Principais, que representam as projeções das variáveis originais em eixos ortogonais. Tais projeções são geradas através dos autovetores obtidos pela diagonalização da matriz de covariâncias ou de correlações. Os desenvolvimentos da PCA aplicada ao Controle Estatístico Multivariado de Processo (MSPC, do inglês *Multivariate Statistical Process Control*) devem-se a Jackson & Mudholkar (1979), Jackson (1991), Kourti & MacGregor (1996) e MacGregor (1997).

Esta seção apresenta uma generalização da PCA, denominada Kernel PCA (KPCA), que consiste na realização da PCA no *espaço dos atributos* F obtido através de um mapa não linear Φ , como da eq. (2). A partir deste mapa, capturam-se características não lineares relacionadas com as variáveis de entrada, como, por exemplo, correlações não lineares. Na KPCA, obtêm-se autovalores e autovetores através da diagonalização da matriz de covariâncias *modificada*, escrita em função de kernels das observações originais.

Inicialmente, define-se a matriz de covariâncias da maneira usual. Retornando ao exemplo introdutório apresentado na seção 2.1.1, considere N variáveis de entrada e M vetores linha de observações centradas \mathbf{x}_i ($\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^N$), para $i=1, \dots, M$. A matriz de covariâncias correspondente pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \mathbf{x}'_i \mathbf{x}_i, \quad (13)$$

onde \mathbf{x}'_i representa o vetor transposto de \mathbf{x}_i . A PCA consiste em diagonalizar a matriz (13), obtendo os autovalores e autovetores através da solução da seguinte equação:

$$\mathbf{u}' \lambda = \mathbf{S} \mathbf{u}', \quad (14)$$

onde $\lambda \geq 0$ (porque \mathbf{S} é positiva definida), \mathbf{u} é um vetor linha de dimensão $(1 \times N)$, e \mathbf{u}' representa o vetor transposto de \mathbf{u} .

No segundo momento, é mostrado que a matriz \mathbf{S} pode ser escrita em função de um produto interno entre as observações, isto é, em função de um kernel $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$. Substituindo a eq. (13) na eq. (14), tem-se:

$$\mathbf{u}' \lambda = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \mathbf{x}'_i \mathbf{x}_i \mathbf{u}'.$$

Assim,

$$\mathbf{u}' = \frac{1}{M\lambda} \sum_{i=1}^M \mathbf{x}'_i \mathbf{x}_i \mathbf{u}' = \frac{1}{M\lambda} \sum_{i=1}^M \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{u} \rangle \mathbf{x}'_i,$$

pois $\mathbf{x}'_i \mathbf{x}_i \mathbf{u}' = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{u} \rangle \mathbf{x}'_i$. Como $\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{u} \rangle$ gera para cada \mathbf{x}_i um escalar, entende-se que todas as soluções para \mathbf{u} , com $\lambda \neq 0$, estão no espaço gerado pelos vetores $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M$. Escreve-se então:

$$\mathbf{u}' = \sum_{k=1}^M \alpha_k \mathbf{x}'_k. \quad (15)$$

Substituindo as equações (13) e (15) na eq. (14), tem-se:

$$M\lambda \sum_{k=1}^M \alpha_k \mathbf{x}'_k = \sum_{i=1}^M \mathbf{x}'_i \mathbf{x}_i \sum_{k=1}^M \alpha_k \mathbf{x}'_k. \quad (16)$$

Multiplicando ambos os lados da equação (16) por \mathbf{x}_j , para $j=1, \dots, M$, tem-se:

$$\mathbf{x}_j M\lambda \sum_{k=1}^M \alpha_k \mathbf{x}'_k = \mathbf{x}_j \sum_{i=1}^M \mathbf{x}'_i \mathbf{x}_i \sum_{k=1}^M \alpha_k \mathbf{x}'_k,$$

que equivale a:

$$M\lambda \sum_{k=1}^M \alpha_k k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) = \sum_{k=1}^M \alpha_k k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k), \quad (17)$$

onde $k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) = \mathbf{x}_j \mathbf{x}'_k$ é o kernel que fornece o produto interno usual entre as observações \mathbf{x}_j e \mathbf{x}_k . A expressão (17) é então condensada em:

$$M\lambda \mathbf{a} \mathbf{K} = \mathbf{a} \mathbf{K}^2, \text{ ou,}$$

$$M\lambda \mathbf{a} = \mathbf{a} \mathbf{K}, \quad (18)$$

onde \mathbf{K} é a matriz kernel simétrica [definida na eq. (11)] cujos elementos são os produtos internos $k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k)$, e \mathbf{a} representa o vetor, de dimensão $(1 \times M)$, contendo os coeficientes α_k . Assim, o problema de diagonalização da matriz \mathbf{S} através da solução da equação (14), como se faz na PCA usual, pode ser resolvido através da diagonalização da matriz \mathbf{K} solucionando a equação (18). A matriz \mathbf{K} , assim como a matriz \mathbf{S} , é positiva definida (ver demonstração SCHOLKOPF *et al.*, 1998). Dessa forma esta irá gerar M autovalores λ_w não negativos, para $w=1, \dots, M$.

O passo seguinte consiste na normalização dos autovetores \mathbf{a}_w associados aos autovalores λ_w diferentes de zero. Considere que L ($L < M$) autovalores λ_s (para $s=1, \dots, L$) são diferentes de zero. Dessa forma, normalizam-se os referentes autovetores \mathbf{a}_s para obter a normalização dos correspondentes vetores \mathbf{u}_s , isto é,

$$1 = \langle \mathbf{u}_s, \mathbf{u}_s \rangle, \text{ para } s = 1, \dots, L.$$

A partir das equações (15) e (18), pode-se notar que a normalização de \mathbf{u}_s implica na normalização de \mathbf{a}_s , pois:

$$1 = \sum_{i,j=1}^M \alpha_{s,i} \alpha_{s,j} \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle = \sum_{i,j=1}^M \alpha_{s,i} \alpha_{s,j} \mathbf{K}_{ij} = \langle \mathbf{a}_s, \mathbf{K} \mathbf{a}_s \rangle$$

$$1 = \lambda_s \langle \mathbf{a}_s, \mathbf{a}_s \rangle.$$

O último passo consiste em obter as projeções de uma observação \mathbf{x} (que pode ser referente a um dos M vetores de referência \mathbf{x}_i ou a uma nova observação \mathbf{x}) nos novos eixos ortogonais através dos autovetores \mathbf{u}_s , para $s=1, \dots, L$. Tem-se então:

$$t_s = \langle \mathbf{u}_s, \mathbf{x} \rangle = \sum_{i=1}^M \alpha_{s,i} \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle, \text{ isto é,} \quad (19)$$

$$t_s = \langle \mathbf{u}_s, \mathbf{x} \rangle = \sum_{i=1}^M \alpha_{s,i} k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}), \quad (20)$$

onde t_s é o escore que representa a projeção de \mathbf{x} feita pelo autovetor \mathbf{u}_s . Note que a projeção é obtida através de uma combinação linear dos produtos internos de cada observação \mathbf{x}_i no espaço de entrada com a nova observação \mathbf{x} . Observe que a eq. (20) é semelhante à eq. (6); a diferença é que esta última foi obtida a partir de um problema de classificação, no contexto de *SMVs* (seção 2.1.2), e a eq. (20) é utilizada para extração de informação sobre as correlações entre as observações (*Feature Extraction*).

A nova base de análise descrita na eq. (20) permite a investigação de estruturas não lineares nos dados a partir de uma modificação no kernel $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle$, utilizado na matriz \mathbf{K} . Para o caso da aplicação do kernel polinomial de ordem d , as equações (19) e (20) são reescritas como:

$$t_s = \langle \mathbf{u}_s, \Phi(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{i=1}^M \alpha_{s,i} \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle^d,$$

onde $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle^d$, com $\Phi(\mathbf{x}_i)$ e $\Phi(\mathbf{x})$ obtidos através da eq. (8). Embora se esteja num espaço F de dimensões superiores em relação ao \mathbb{R}^N (neste caso, no espaço F dos monômios de ordem d das variáveis de entrada), a KPCA não trabalha diretamente neste espaço, mas sim computa os produtos internos neste espaço via $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle^d$ (produto interno modificado no \mathbb{R}^N). Isto é feito resolvendo a eq. (18), utilizando a matriz \mathbf{K} modificada com $\mathbf{K}_{ij} = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle^d$, para $i, j = 1, \dots, M$.

Considerando que o vetor de observações ampliado $\Phi(\mathbf{x})$ esteja centrado, t_s representa agora a projeção dessa observação na direção do vetor \mathbf{u}_s do espaço ampliado F dos monômios de ordem d dos elementos do vetor \mathbf{x} .

É importante destacar que a KPCA nada mais é do que a realização da PCA usual (linear) no espaço F através do mapa Φ , aonde Φ irá (no contexto desse trabalho) representar correlações não lineares entre as variáveis do espaço de entrada \mathbb{R}^N . Entende-se que F é o espaço de linearização do espaço original.

A Figura 3 ilustra a idéia da KPCA. O gráfico mais acima ilustra a projeção na maior direção de variabilidade, dada pelo autovetor (reta em negrito), num espaço bidimensional com comportamento não linear. Os dois gráficos na parte inferior da Figura 3 mostram a idéia da KPCA, que consiste em aplicar a PCA linear no espaço F , de dimensão acentuada (gráfico à direita). Como F representa a não linearidade das variáveis do espaço de entrada, via Φ , a projeção dada pelo autovetor (reta em negrito) neste espaço equivale a uma projeção não linear no espaço de entrada (gráfico à esquerda). Entretanto, efetivamente esta projeção não linear não existe, pois não existe um autovetor no espaço de entrada que corresponda a uma pré-imagem do autovetor no espaço F . Importante destacar que a KPCA captura as não-linearidades do espaço de entrada sem acessar F , apenas calculando os produtos internos neste espaço através de funções kernel do espaço de entrada. Na Figura 3, $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle^d$ representa o kernel polinomial [eq. (12)].

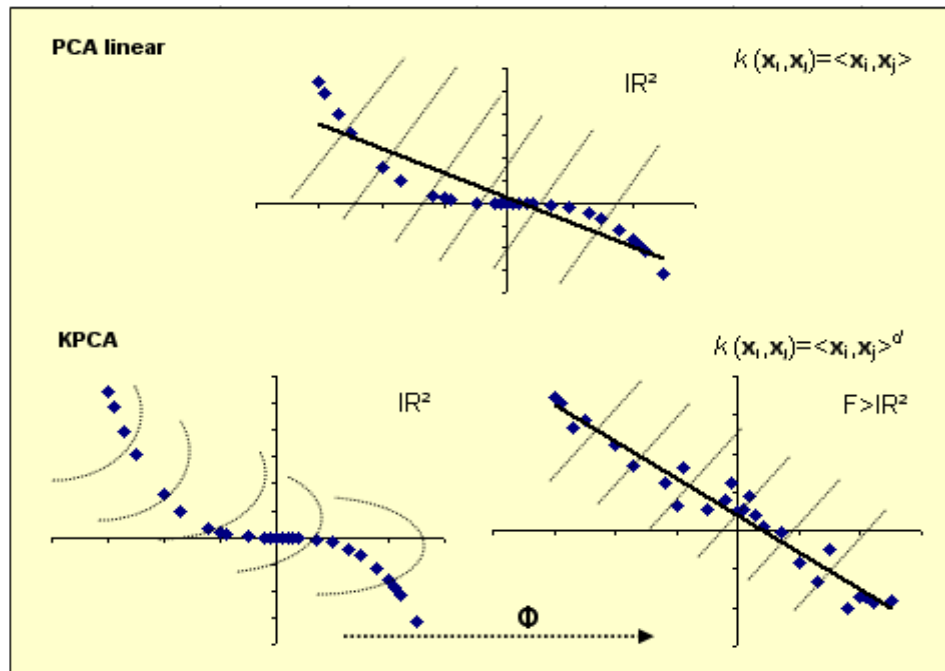


Figura 3 - Esquema comparativo da KPCA e da PCA linear
 Fonte – adaptada de Scholkopf & Smola (2002)

Quando se utiliza o produto interno canônico $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}_j) \rangle = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle$, com $\Phi(\mathbf{x}_i) = \mathbf{x}_i$ (*kernel identidade*), a KPCA, realizada através da eq. (18), gera os mesmos autovalores não negativos da PCA usual realizada através da eq. (14). Assim, realizar a KPCA no espaço característico F representa apenas uma *mudança de referencial de extração* (isto é, diagonalizar \mathbf{K} ao invés de \mathbf{S}) e equivale a realizar a PCA usual no \mathbb{R}^N , pois $F = \mathbb{R}^N$. Neste caso as projeções das observações \mathbf{x}_i são obtidas através da eq. (19).

É também importante destacar que como a KPCA diagonaliza a matriz \mathbf{K} [de dimensão $(M \times M)$], pode-se obter até M autovalores não negativos, dependendo do mapa não linear Φ utilizado; já a PCA usual pode gerar no máximo N autovalores não negativos [pois, diagonaliza a matriz \mathbf{S} , de dimensão $(N \times N)$]. Isso significa que, se $M > N$ (caso mais comum), o número de KPCs obtidos para análise poderá exceder a dimensionalidade do espaço de entrada \mathbb{R}^N . Dessa forma, a KPCA jamais poderia ser aplicada na matriz de covariâncias usual \mathbf{S} . Disso decorre que a KPCA apresenta um poder de extração da estrutura dos dados de entrada superior ao da PCA usual.

A KPCA, realizada com um kernel que satisfaça as condições apresentadas na seção 2.1.4, apresenta as mesmas propriedades matemáticas e estatísticas da PCA usual [apresentadas em Jolliffe (1986), entre outros]. Deve-se, entretanto, considerar essas

propriedades no espaço F das observações $\Phi(\mathbf{x})$, e não no espaço de entrada \mathbb{R}^N das observações \mathbf{x} . Considerando os autovalores em ordem decrescente e os respectivos autovetores, as seguintes propriedades se aplicam à KPCA:

- a) Os r primeiros KPCs (para $r=1,\dots,L$, onde L representa o número de autovalores diferentes de zero) capturam a maior parte da covariância dos dados $\Phi(\mathbf{x})$, isto é, as r maiores direções ortogonais comuns de variabilidade dos dados, mapeados via Φ no espaço F , são descritas pelas r primeiras projeções ortogonais.
- b) O erro quadrático médio de representação de uma observação $\Phi(\mathbf{x})$ pelos r KPCs retidos é mínimo.
- c) Os KPCs são não correlacionados. Assumindo que as observações $\Phi(\mathbf{x})$ apresentem distribuição Normal Multivariada, pode-se considerar que os KPCs são independentes.

2.2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesta seção é apresentada uma revisão das principais metodologias de análise multivariada não linear de variáveis observadas em um processo em bateladas. Na seção 2.2.1 é apresentada uma breve descrição sobre a estruturação de um processo em bateladas de tempo fixo, bem como uma discussão sobre alguns aspectos importantes que devem ser considerados para monitoramento de tais processos. A seção 2.2.2 apresenta uma descrição da Análise de Componentes Principais Multidirecionais (MPCA, *Multiway Principal Component Analysis*) que se constitui na principal abordagem de monitoramento linear de processos por bateladas. Finalmente, na seção 2.2.3, são apresentadas propostas de modificações na MPCA para processos em bateladas cujas variáveis apresentam correlações não lineares significativas.

2.2.1 Processo em bateladas

O cenário de interesse neste trabalho são indústrias químicas e de processos que conduzam processos em bateladas. Processos em batelada ou semi-bateladas são utilizados com frequência na obtenção de produtos químicos, bioquímicos, farmacêuticos e alimentícios.

Um processo em bateladas passa pelas seguintes etapas: (i) uma determinada combinação de matérias-primas é colocada em um recipiente (por exemplo, um reator); (ii) durante a batelada, estas matérias-primas sofrem uma série de transformações com vistas à obtenção do produto final; tais transformações são controladas através do monitoramento de trajetórias específicas das variáveis de processo, como, por exemplo, temperaturas, pressões e taxas de mistura; e (iii) ao término da batelada, o produto final é analisado em laboratório quanto às suas características de qualidade. A Figura 4 apresenta os elementos genéricos de um processo em batelada. As variáveis de qualidade Z são obtidas a partir de medições de qualidade feitas sobre as matérias-primas. As variáveis de processo X são observadas através de mensurações *on-line* do desempenho do processo, em pontos próximos no tempo. As variáveis de qualidade final do produto Y são mensuradas, no produto acabado, após o término da batelada.

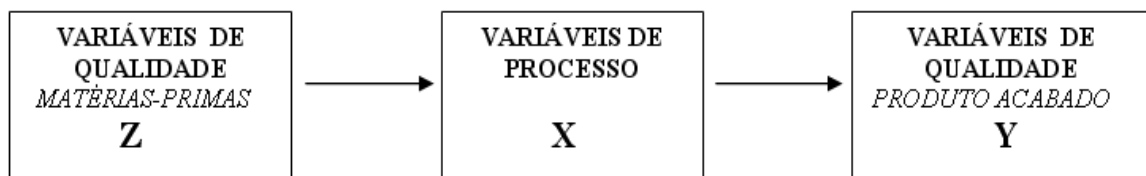


Figura 4 - Esquemática de uma batelada
Fonte – elaborada pelo autor

Destaca-se que o foco deste texto é a aplicação de técnicas para monitoramento do desempenho do processo que consideram apenas os dados acerca das variáveis de processo (X). Abordagens que consideram simultaneamente as informações contidas em Z , X e Y no monitoramento do processo podem ser encontradas em MacGregor *et al.* (1994) e Kourti *et al.* (1995), entre outros. Salienta-se também que o foco deste trabalho são os processos em bateladas com tempo fixo, isto é, todas as bateladas apresentam a mesma duração. O desenvolvimento de abordagens que consideram bateladas de tempo variável é encontrado em Kassidas *et al.* (1998), Kaistha *et al.* (2004) e Fogliatto & Niang (2008), dentre outros.

A estrutura dos dados obtidos em um processo em bateladas apresenta diferenças em relação a processos contínuos. Processos em bateladas normalmente não são estacionários; conseqüentemente, a média ou valor alvo das variáveis de processo não é constante (ou seja, ocupa diferentes patamares durante o decorrer de uma batelada), como exemplificado na

Figura 5. Quando o processo estiver sob controle estatístico, cada variável deve apresentar variações toleráveis em torno de sua trajetória padrão (ou trajetória média).

Para construção de uma distribuição de referência adequada e realização do monitoramento eficiente das novas bateladas, deve-se considerar não apenas a estrutura de correlação das variáveis de processo, mas também uma estrutura de autocorrelação de cada variável dentro das bateladas. Esta estrutura é extraída a partir de séries temporais amostrais que descrevem as trajetórias das variáveis de processo em bateladas bem sucedidas.

A Figura 5 apresenta as trajetórias de três variáveis de processo, observadas em 20 instantes dentro de cada batelada, durante 30 bateladas consecutivas bem sucedidas. As bandas vermelhas, azuis e roxas representam a magnitude da variação de cada variável (observada nas 30 bateladas amostradas) em cada instante, em torno de suas médias (ou em torno de suas trajetórias médias). Quando se analisa uma variável no tempo (isto é, analisando apenas as bandas de uma cor) observa-se claramente uma estrutura de autocorrelação. Quando se observa a posição das três bandas em um único instante, pode-se visualizar a estrutura de correlação apresentada pelas variáveis em cada instante.

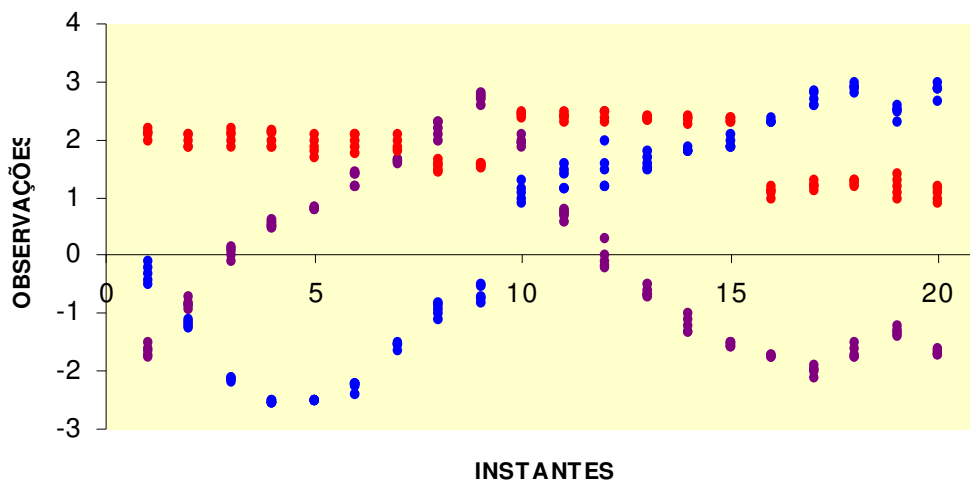


Figura 5 - Trajetórias de três variáveis de processo observadas em 20 instantes, durante 30 bateladas consecutivas

Fonte – elaborada pelo autor

2.2.2 MPCA

Nesta seção é apresentado de maneira breve o procedimento MPCA de monitoramento de processos em bateladas, considerando apenas correlações lineares entre as variáveis de processo. O MPCA foi proposto originalmente por Nomikos & MacGregor (1994).

Em um processo sob monitoramento, durante cada batelada são obtidas T amostras consecutivas de P variáveis de processo igualmente espaçadas no tempo. A partir de B bateladas de referência (bem sucedidas), têm-se uma estrutura tridimensional de dados contendo B bateladas \times P variáveis \times T instantes de tempo. Para analisar a variabilidade entre bateladas nas trajetórias das variáveis, decompõe-se essa estrutura de dados em um arranjo bidimensional, gerando uma matriz de dados \mathbf{X} , de dimensão $(B \times PT)$. Cada linha desta matriz traz os dados sobre as trajetórias das P variáveis de processo nos T instantes da $b^{\text{ésima}}$ batelada de referência (para $b=1, \dots, B$).

A Tabela 1 apresenta o arranjo proposto. A matriz \mathbf{X} contém B vetores linha de observações, de dimensão $(1 \times PT)$, dados por $\mathbf{x}_b = (x_{1,1}^b, x_{2,1}^b, \dots, x_{P,1}^b, x_{1,2}^b, x_{2,2}^b, \dots, x_{P,2}^b, \dots, x_{1,T}^b, x_{2,T}^b, \dots, x_{P,T}^b)$, que trazem as trajetórias padrão das P variáveis nos T instantes observados nas bateladas de referência, isto é, que geraram produto final dentro das especificações.

Bat. 1	$x_{1,1}^1$...	$x_{P,1}^1$...	$x_{1,T}^1$...	$x_{P,T}^1$
Bat. 2	$x_{1,1}^2$...	$x_{P,1}^2$...	$x_{1,T}^2$...	$x_{P,T}^2$
⋮	⋮	...	⋮	⋮
Bat. B	$x_{1,1}^B$...	$x_{P,1}^B$...	$x_{1,T}^B$...	$x_{P,T}^B$

Tabela 1 - Matriz X contendo a representação dos dados num processo em bateladas para análise via MPCA

Fonte – elaborada pelo autor

A MPCA baseia-se na aplicação da PCA na matriz de covariâncias \mathbf{S} [definida na eq. (13)], de dimensão $(PT \times PT)$, obtida a partir das colunas de \mathbf{X} . Dessa forma, a MPCA considera P variáveis observadas T vezes como PT variáveis de análise distintas e, por

consequência, correlacionadas. Os PCs são obtidos através de combinações lineares das variáveis de análise originais e representam suas projeções nas maiores direções comuns de variabilidade, apresentadas em novos eixos ortogonais. Estas projeções são realizadas através dos autovalores λ_i e autovetores \mathbf{u}_i associados à matriz \mathbf{S} .

Define-se o seguinte modelo:

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^L \mathbf{t}'_i \mathbf{u}_i + \mathbf{E}. \quad (21)$$

A matriz \mathbf{X} com dados padronizados (isto é, com a média subtraída e divididos pelo desvio-padrão da respectiva coluna da matriz \mathbf{X}) é reconstruída a partir da eq. (21). A matriz de resíduos \mathbf{E} , de dimensão $(B \times PT)$, traz o erro de representação de \mathbf{X} com PT variáveis, se um número $L < PT$ de PCs forem usados nesta representação. O vetor linha \mathbf{u}_i , de dimensão $(1 \times PT)$, corresponde ao $i^{\text{ésimo}}$ autovetor de \mathbf{S} . Para fins aplicados, cada vetor \mathbf{u}_i é normalizado, isto é, utiliza-se $\mathbf{u}_i / \|\mathbf{u}_i\|^2$. O vetor \mathbf{t}'_i , que representa o transposto do vetor linha \mathbf{t}_i , de dimensão $(1 \times B)$, traz os escores padronizados referentes ao $i^{\text{ésimo}}$ PC nas B bateladas, obtidos através de $\mathbf{t}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{X}'$, para $i=1, \dots, L$ (\mathbf{X}' representa a transposta da matriz \mathbf{X}).

Como cada PC representa uma combinação linear (dada pelo respectivo autovetor \mathbf{u}_i através de $\mathbf{t}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{X}'$) das PT variáveis de análise, pelo teorema do limite central (ver NOMIKOS & MACGREGOR, 1995), considera-se que o $i^{\text{ésimo}}$ PC siga uma distribuição Normal com média 0 (pois os dados de \mathbf{X} são padronizados) e desvio-padrão $\sqrt{\lambda_i}$ (onde λ_i representa o autovalor, e também a parcela da variância total representada pelo $i^{\text{ésimo}}$ PC).

A projeção do vetor de observações \mathbf{x}_b da matriz \mathbf{X} nos novos eixos ortogonais, definidos pelos L PCs, é obtida através de:

$$\mathbf{t}_b = \mathbf{x}_b \mathbf{U}, \quad b=1, \dots, B, \quad (22)$$

onde $\mathbf{t}_b = [t_{1,b}, t_{2,b}, \dots, t_{L,b}]$ é o vetor contendo os L escores referentes à $b^{\text{ésima}}$ batelada; a matriz $\mathbf{U} = [\mathbf{u}'_1 | \mathbf{u}'_2 | \dots | \mathbf{u}'_L]$ contém nas suas colunas os L autovetores associados. Assim, o vetor de observações \mathbf{x}_b pode ser reconstruído pelos L PCs retidos na análise através de:

$$\hat{\mathbf{x}}_b = \mathbf{t}_b \mathbf{U}', \quad b=1, \dots, B, \quad (23)$$

onde \mathbf{U}' representa a transposta da matriz \mathbf{U} . O erro de representação do vetor \mathbf{x}_b pelo modelo é dado por:

$$\mathbf{e}_b = \mathbf{x}_b - \hat{\mathbf{x}}_b, \quad b=1, \dots, B, \quad (24)$$

onde o vetor \mathbf{e}_b representa a $b^{\text{ésima}}$ linha da matriz \mathbf{E} . O modelo descrito na eq. (21) para um dado número L de PCs utilizados é o de mínimo erro, no sentido de que a norma euclidiana quadrada da matriz \mathbf{E} é mínima, isto é,

$$\|\mathbf{E}\|^2 = \sum_{b=1}^B \mathbf{e}_b \mathbf{e}'_b \quad (25)$$

é mínima.

Os escores \mathbf{t}_b e os autovetores \mathbf{u}_i referentes aos L PCs retidos, a partir das B bateladas bem sucedidas, compõem então a distribuição de referência do processo sob controle estatístico.

Deve-se entender que tipicamente existe redundância na caracterização do sistema, pois o número de fontes de variabilidade no processo é bastante inferior ao número PT de variáveis de processo monitoradas. Isto significa que cada variável em cada instante traz uma pequena quantidade de informação juntamente com uma grande quantidade de ruído. Dessa forma, poucos PCs devem ser suficientes para capturar as principais direções comuns de variabilidade do processo. Assim, seus autovetores \mathbf{u}_i trazem parte substancial da estrutura de correlação e autocorrelação lineares contida na matriz \mathbf{S} . A proporção da variabilidade em \mathbf{X} explicada pelos L PCs com os maiores autovalores associados λ_i retidos no modelo, é obtida

$$\text{por } \left(\sum_{i=1}^L \lambda_i / \sum_{i=1}^{PT} \lambda_i \right) \times 100.$$

O monitoramento de uma nova batelada, com dados organizados no vetor \mathbf{x}_{NEW} , é realizado através dos seguintes passos:

1. Projeção do vetor \mathbf{x}_{NEW} nos novos eixos ortogonais, de forma a obter um vetor de escores referentes aos L PCs. Ressalta-se que os elementos de \mathbf{x}_{NEW} são padronizados considerando a média e o desvio padrão das colunas correspondentes da matriz \mathbf{X} de referência. A eq. (22) é rescrita como:

$$\mathbf{t}_{NEW} = \mathbf{x}_{NEW} \mathbf{U}. \quad (26)$$

2. Os escores em \mathbf{t}_{NEW} são utilizados no cálculo da estatística de Hotelling, escrita em função dos L ($< PT$) PCs retidos no modelo (JACKSON, 1991):

$$T_{NEW}^2 = \mathbf{t}_{NEW} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{t}_{NEW}' , \quad (27)$$

onde \mathbf{C} representa a matriz de covariâncias, de dimensão ($L \times L$), dos PCs do modelo. Como os PCs representam projeções ortogonais, são não correlacionados por definição. Dessa forma, a matriz \mathbf{C} é diagonal, apresentando os L autovalores λ_i retidos na análise. A matriz inversa \mathbf{C}^{-1} é, assim, dada por:

$$\mathbf{C}^{-1} = \begin{pmatrix} 1/\lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 1/\lambda_L \end{pmatrix}.$$

A estatística T_{NEW}^2 representa a distância quadrada, no plano definido pelos L PCs retidos no modelo, entre a posição da nova batelada (dada pelos L escores do vetor \mathbf{t}_{NEW}) e a origem que representa o ponto de variação mínima das principais fontes de variabilidade do processo. Os limites de controle da estatística T_{NEW}^2 são dados por (MONTGOMERY, 2006):

$$\text{LSC} = [L(B^2 - 1/B(B-L))]F_{\alpha, L, B-L} \quad \text{e} \quad \text{LIC} = 0, \quad (28)$$

onde $F_{\alpha, 2, m-2}$ representa o percentil da distribuição F com L e $B-L$ graus de liberdade, obtido para uma probabilidade α de alarme falso adotada. Se $T_{NEW}^2 > \text{LSC}$, então, nesta batelada, algumas das principais fontes do processo apresentam variabilidade além do tolerado. Deve-

se entender então que algumas variáveis de processo apresentam desvios significativos em relação às suas trajetórias médias, obtidas a partir do modelo MPCA de referência.

3. A seguir monitora-se o resíduo \mathbf{e}_{NEW} , referente à nova batelada, através da estatística Q_{NEW} .

Inicialmente, a observação \mathbf{x}_{NEW} é estimada pelo modelo, através de eq. (23) rescrita como:

$$\hat{\mathbf{x}}_{NEW} = \mathbf{t}_{NEW} \mathbf{U}' \quad (29)$$

Obtém-se então o erro de representação dessa observação através da expressão (24) reescrita como:

$$\mathbf{e}_{NEW} = \mathbf{x}_{NEW} - \hat{\mathbf{x}}_{NEW} \quad (30)$$

Tem-se então:

$$Q_{NEW} = \mathbf{e}_{NEW} \mathbf{e}'_{NEW} \quad (31)$$

A estatística Q_{NEW} representa a distância perpendicular quadrada entre a observação original \mathbf{x}_{NEW} e a observação $\hat{\mathbf{x}}_{NEW}$, representada no plano descrito pelos L PCs do modelo. Os limites de controle são calculados a partir de uma aproximação pela distribuição *Qui-Quadrado* (χ_h^2), sugerida por Nomikos & MacGregor (1994). Tem-se:

$$\text{LSC} = g\chi_{\alpha,h}^2 \quad \text{e} \quad \text{LIC} = 0, \quad (32)$$

onde $\chi_{\alpha,h}^2$ representa o percentil da distribuição *Qui-Quadrado* com h graus de liberdade, obtidos para uma probabilidade α de alarme falso adotada, onde $g=v/2m$ e $h=2m^2/v$. Os valores de m e v representam respectivamente a média e o desvio padrão dos valores da estatística Q , obtidos a partir das B observações da matriz \mathbf{X} de referência.

Se um evento incomum incidir sobre o processo e alterar a estrutura de correlação linear das variáveis de processo, um alto valor de Q_{NEW} será obtido, pois a observação correspondente \mathbf{x}_{NEW} não será satisfatoriamente descrita pela eq. (29).

O monitoramento efetivo das novas bateladas é feito, assim, utilizando-se a estatística T_{NEW}^2 para controlar a variabilidade das principais fontes do processo [eqs. (26), (27) e (28)], e a estatística Q_{NEW} para monitorar os resíduos do modelo [eqs. (29), (30), (31) e (32)], detectando a presença de possíveis eventos atípicos durante a batelada.

Como mencionado anteriormente, a MPCA desdobra a estrutura tridimensional de dados através do modelo proposto na eq. (21). Dois modelos alternativos à MPCA, e menos populares (denominados PARAFAC e TUCKER3), estão disponíveis na literatura. Eles diferem da MPCA quanto ao desdobramento dos dados. Lowrse & Smilde (2000) apresentam uma discussão comparativa entre MPCA, PRAFAC e TUCKER3.

Finalmente, destaca-se o número grande de publicações apresentando a abordagem MPCA aplicada no monitoramento de processos industriais em bateladas. Ver, por exemplo, os trabalhos de Flores-Cerrilo & MacGregor (2002) e Kourti (2003). Marcondes Filho (2001) apresenta uma aplicação dessa abordagem no controle de um processo industrial.

2.2.3 MPCA não linear

A MPCA descrita na seção anterior considera apenas correlações e autocorrelações lineares entre as variáveis de processo. Entretanto, processos industriais modernos apresentam uma série de operações e eventos complexos que podem gerar efeitos não lineares não desprezíveis nas variáveis de processo, isto é, correlações não lineares entre as variáveis.

Adicionalmente, os processos por bateladas ainda apresentam características não lineares mais acentuadas em relação aos processos contínuos, visto que: (i) não são estacionários, isto é, as variáveis apresentam uma trajetória não linear ao longo da batelada (conforme exposto na seção 2.2.1) e (ii) operam em diferentes estágios, aumentando assim a incidência de efeitos não lineares no sistema.

Mesmo que os dados da matriz \mathbf{X} estejam padronizados para diminuir as não-linearidades do processo (pois através da padronização tem-se um processo estacionário, onde se monitoram os desvios em torno da média zero), ainda assim a MPCA clássica oferece uma descrição insatisfatória de tais processos. Neste caso, o monitoramento gera sinalizações

e diagnósticos imprecisos sobre o desempenho das variáveis de processo (ver, por exemplo, YOO *et al.*, 2006).

Alguns autores vêm investigando modificações na MPCA descrita acima diante de processos contínuos ou em bateladas com presença de efeitos não lineares dominantes. Existem basicamente três estratégias de controle de tais processos via PCA não linear (NLPCA, *Non-Linear Principal Component Analysis*) disponíveis na literatura, e que serão descritas nesta seção: (i) NLPCA através um modelo de rede neural auto-associativo de cinco camadas; (ii) NLPCA através de uma estratégia que combina dois modelos de redes neurais com o algoritmo de *curvas principais*; e (iii) NLPCA através de Kernel PCA (KPCA, *Kernel Principal Component Analysis*). Este último é conhecido como *Kernel Multiway Principal Component Analysis* (KMPCA) para o contexto específico de controle de processos em bateladas.

Aplicações das estratégias de NLPCA descritas acima são encontradas em Dong & McAvoy (1996a;b), Jia *et al.* (2001), Lee *et al.*, (2004a;b) e Yoo *et al.* (2006), dentre outros.

2.2.3.1 NLPCA via rede neural auto-associativa

O procedimento descrito nessa seção foi proposto inicialmente por Kramer (1991). Considere o modelo MPCA descrito na eq. (21). Os escores \mathbf{t}_b associados aos L PCs do modelo são obtidos através da projeção das observações \mathbf{x}_b da matriz \mathbf{X} , utilizando a eq. (22), que pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\mathbf{t}_b = \mathbf{x}_b \mathbf{F}, \quad b=1, \dots, B, \quad (33)$$

onde $\mathbf{F} = [\mathbf{f}'_1 | \mathbf{f}'_2 | \dots | \mathbf{f}'_L]$ representa a matriz que contém L vetores coluna, cada um representando uma função linear das observações \mathbf{x}_b . A MPCA realiza as projeções dos \mathbf{x}_b (dadas por \mathbf{t}_b) nos novos eixos ortogonais, via funções f . Observe que a MPCA tradicional define uma transformação linear de $IR^{PT} \rightarrow IR^L$ dada pelos autovetores \mathbf{u}_i , ou seja, $\mathbf{f}'_1 = \mathbf{u}'_1, \mathbf{f}'_2 = \mathbf{u}'_2, \dots, \mathbf{f}'_L = \mathbf{u}'_L$ (\mathbf{u}'_i é o vetor transposto do vetor linha \mathbf{u}_i).

Da mesma forma, a eq. (23), que reconstrói as observações originais $\hat{\mathbf{x}}_b$ no modelo da eq. (21) em função dos PCs, pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\hat{\mathbf{x}}_b = \mathbf{t}_b \mathbf{G}, \quad b=1, \dots, B. \quad (34)$$

onde $\mathbf{G} = [\mathbf{g}'_1 | \mathbf{g}'_2 | \dots | \mathbf{g}'_{PT}]$ representa a matriz que contém PT vetores coluna, cada um representando uma função linear dos L PCs (representados por \mathbf{t}_b). A MPCA reconstrói as observações \mathbf{x}_b (que passam a ser designadas por $\hat{\mathbf{x}}_b$) via funções \mathbf{g} . Define-se agora uma transformação linear inversa de $IR^L \rightarrow IR^{PT}$ realizada através dos vetores \mathbf{g}_q . O $q^{\text{ésimo}}$ elemento do vetor $\hat{\mathbf{x}}_b$ é formado pela multiplicação do vetor $\mathbf{t}_b = [t_{1,b}, t_{2,b}, \dots, t_{L,b}]$ pelo vetor coluna \mathbf{g}'_q , cujos elementos são formados pela $q^{\text{ésima}}$ entrada de cada autovetor \mathbf{u}_i e representam os pesos da combinação linear aplicada aos elementos de \mathbf{t}_b , para $q=1, \dots, PT$ e $i=1, \dots, L$.

O procedimento descrito por Kramer (1991) usa uma rede neural auto-associativa para gerar PCs não lineares através da eq. (33), via funções \mathbf{f} não lineares dos dados de entrada. Posteriormente, as observações são reconstruídas através da eq. (34), via funções \mathbf{g} não lineares dos PCs. A arquitetura da rede neural proposta é apresentada na Figura 6.

A rede é composta de cinco camadas: (i) *camada de entrada*, contendo as observações $\mathbf{x}_b = [m_{1,b}, m_{2,b}, \dots, m_{PT,b}]$ da matriz \mathbf{X} (notação simplificada dos elementos do vetor \mathbf{x}_b em relação à notação usada na Tab. 1); (ii) *camada de projeção*, contendo $N (>L)$ nódulos com as funções de transferência \mathbf{f} não lineares; (iii) *camada de compressão* com os L PCs (representados por $\mathbf{t}_b = [t_{1,b}, t_{2,b}, \dots, t_{L,b}]$) que serão extraídos via funções \mathbf{f} da camada anterior; (iv) *camada de reconstrução*, contendo $M (>L)$ nódulos com as funções de transferência \mathbf{g} não lineares; e (v) *camada de saída*, contendo os vetores de observações reconstruídas $\hat{\mathbf{x}}_b$.

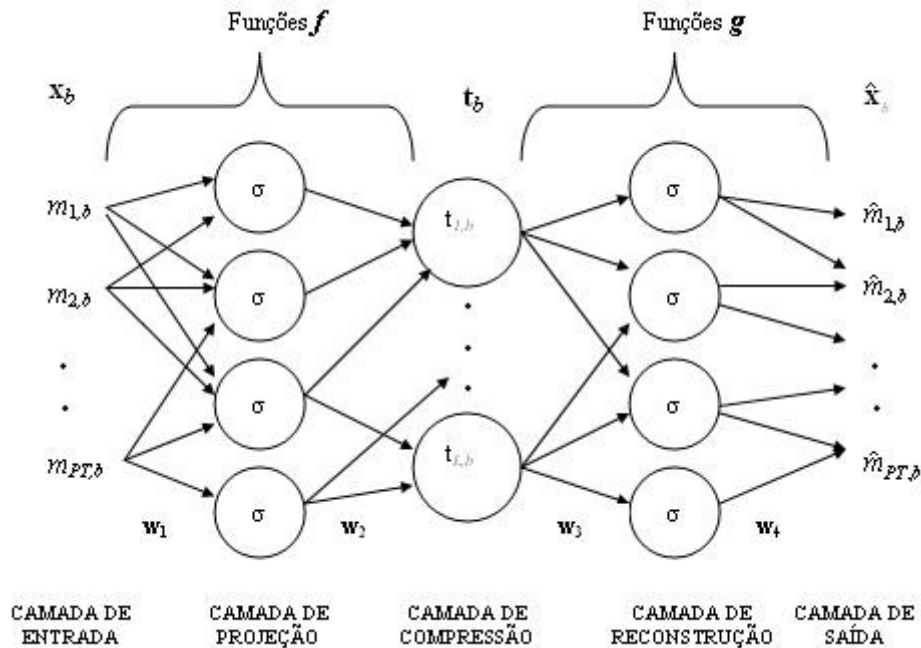


Figura 6 - Arquitetura da rede neural auto-associativa
Fonte – elaborada pelo autor

Existem diferentes tipos de não-linearidades de interesse para investigação. Dessa forma, diferentes funções f e g podem ser usadas dependendo da natureza da não linearidade entre as variáveis de determinado processo a ser monitorado. Cybenko (1989) demonstra que funções não lineares do tipo $y=f(x)$ ou $y=g(x)$ podem ser aproximadas com algum grau de precisão a partir da seguinte função base:

$$y_z = \sum_{v=1}^{N_2} w_{v,z,k+1} \sigma \left(\sum_{s=1}^{N_1} w_{s,v,k} x_s + \theta_s \right), \quad (35)$$

onde $\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$ (36)

representa a função *sigmóide*. Esta função apresenta um comportamento que permite convergência de resultados no treinamento da rede neural. As equações descritas em (35) e (36) compõem uma rede neural artificial (do inglês *feedforward artificial neural network*) contendo N_1 entradas; uma camada escondida de N_2 nódulos contendo funções de transferência do tipo sigmóide; e um nódulo linear de saída. Na eq. (35), $w_{s,v,k}$ representa o peso da conexão entre o $s^{\text{ésimo}}$ nódulo da camada k e o $v^{\text{ésimo}}$ nódulo da camada $k+1$; e θ_s

representa o parâmetro de viés associado a cada conexão, sendo estimado assim como os pesos $w_{s,v,k}$. Não existe conexão entre os nódulos de uma mesma camada.

Pode-se entender que o esquema descrito na Figura 6 é a união de duas redes neurais: a rede neural para *projeção* (com três camadas: *de entrada, de projeção e de compressão*), que gera os L PCs não lineares \mathbf{t}_b a partir dos dados de entrada \mathbf{x}_b , e a subsequente rede neural para *reconstrução* (com três camadas: *de compressão, de reconstrução e de saída*), que tem como entrada os L PCs encontrados na rede anterior, e, a partir de \mathbf{t}_b , reconstrói as observações de entrada \mathbf{x}_b , estimadas por $\hat{\mathbf{x}}_b$.

O modelo descrito na eq. (21) é definido com as equações (33) e (34), parametrizadas segundo a eq. (35). Tem-se, então:

$$t_{j,b} = \sum_{v=1}^N w_{v,j,2} \sigma \left(\sum_{s=1}^{PT} w_{s,v,1} m_{s,b} + \theta_s \right), \text{ para } j=1, \dots, L; \quad (37)$$

$$\hat{m}_{i,b} = \sum_{z=1}^M w_{z,i,4} \sigma \left(\sum_{v=1}^L w_{j,z,3} t_{j,b} + \theta_j \right), \text{ para } i=1, \dots, PT, \quad (38)$$

onde $t_{j,b}$ representa a $j^{\text{ésima}}$ entrada de \mathbf{t}_b e $\hat{m}_{i,b}$ representa a $i^{\text{ésima}}$ entrada de $\hat{\mathbf{x}}_b$.

A rede neural combinada descrita na Figura 6 é “supervisionada”, isto é, são conhecidas as entradas (que são os vetores \mathbf{x}_b) e as saídas desejadas (que também são as observações em \mathbf{x}_b , estimadas por $\hat{\mathbf{x}}_b$). Como as entradas são iguais às saídas, trata-se de um modelo de rede neural auto-associativa. O treinamento da rede é feito buscando a identidade $\mathbf{x}_b \rightarrow \mathbf{x}_b$ através do algoritmo de *retro-propagação* (do inglês *backpropagation*; ver RUMELHARD *et al.*, 1986). O critério de otimalidade usado no treinamento é o mesmo da PCA linear descrita na seção 2.2, isto é, buscam-se os valores dos parâmetros $w's$ e $\theta's$ que minimizam o quadrado da norma euclidiana da matriz \mathbf{E} dos resíduos. Isto é feito através da eq. (25), onde \mathbf{e}_b é encontrado utilizando a eq. (24).

Os números N e M de nódulos das camadas de *projeção* e de *reconstrução*, respectivamente, são determinados através de alguns critérios descritos em Ljung (1987). Kramer (1991) apresenta resultados simplificados com $N=M$. Ressalta-se que se forem usados um número reduzido de nódulos nestas camadas, pode-se obter uma caracterização

insuficiente das não-linearidades presentes no processo em análise. Dessa forma, o modelo obtido para monitoramento tende a apresentar a mesma imprecisão da MPCA linear. Em contrapartida, a utilização de um número demasiado de nódulos pode resultar em um sistema que modela, além das não-linearidades importantes, ruído aleatório (ou seja, variações aleatórias no processo passam a ser capturadas e interpretadas erroneamente pela rede neural como padrões importantes).

A partir da rede neural treinada, uma batelada nova \mathbf{x}_{NEW} é projetada nos eixos definidos pelos L PCs através dos \mathbf{t}_{NEW} , calculados a partir da eq. (37). Adicionalmente, a partir de \mathbf{t}_{NEW} , obtém-se a reconstrução $\hat{\mathbf{x}}_{NEW}$ da batelada nova, utilizando a eq. (38). O monitoramento dessa batelada é feito então através das estatísticas T_{NEW}^2 e Q_{NEW} [eqs. (27), (28), (31) e (32)].

Finalmente, destaca-se que o trabalho de Kramer (1991) representa a consolidação de alguns trabalhos anteriores que combinam PCA e redes neurais, aplicados a diferentes áreas de interesse. Dentre estes, ressalta-se o trabalho precursor de Oja (1982).

2.2.3.2 NLPCA via redes neurais e curvas principais

O procedimento aqui descrito foi proposto originalmente por Dong & MacAvoy (1996a), sendo semelhante à estratégia de análise apresentada na seção anterior. Entretanto, as duas redes neurais (de *projeção* e de *reconstrução*), consideradas conjuntamente no modelo auto-associativo (esquematizado na Figura 6), são agora treinadas separadamente. A rede neural para *projeção*, com três camadas, é treinada buscando a associação $\mathbf{x}_b \rightarrow \mathbf{t}_b$, enquanto que a rede neural para *reconstrução*, também com três camadas, é treinada buscando a associação $\mathbf{t}_b \rightarrow \mathbf{x}_b$. Para que haja um treinamento supervisionado, os valores de \mathbf{t}_b associados aos PCs não lineares são encontrados através do algoritmo de *curvas principais*, visto que na rede de *projeção* se conhece a entrada e não se conhece, *a priori*, a saída desejada; já na rede para *reconstrução* não se conhece, *a priori*, a entrada desejada, somente a saída.

O algoritmo de *curvas principais* foi proposto inicialmente por Hastie & Stuetzle (1989), sendo uma extensão não linear natural da PCA clássica. Na PCA, o primeiro PC

representa a reta que melhor se ajusta à direção principal de variabilidade comum dos dados, isto é, que minimiza a soma dos quadrados das distâncias ortogonais entre a reta e as observações \mathbf{x}_b ; ver Fig. 7 (a). Analogamente, a *curva principal*, que define o primeiro PC não linear, representa a mínima soma de quadrados das distâncias ortogonais entre as observações \mathbf{x}_b e a própria curva, isto é, a curva cuja $\|\mathbf{E}\| = \sum_{b=1}^B \mathbf{e}_b^T \mathbf{e}_b$ é mínima; ver Fig. 7 (b).

O algoritmo garante que cada ponto da curva representa a média (dada a distribuição de \mathbf{x}_b) de todos os pontos projetados nela. Essa propriedade é chamada de auto-consistência (ou *self-consistency*) e também vale para a PCA linear. A descrição do algoritmo pode ser encontrada em Hastie & Stuetzle (1989).

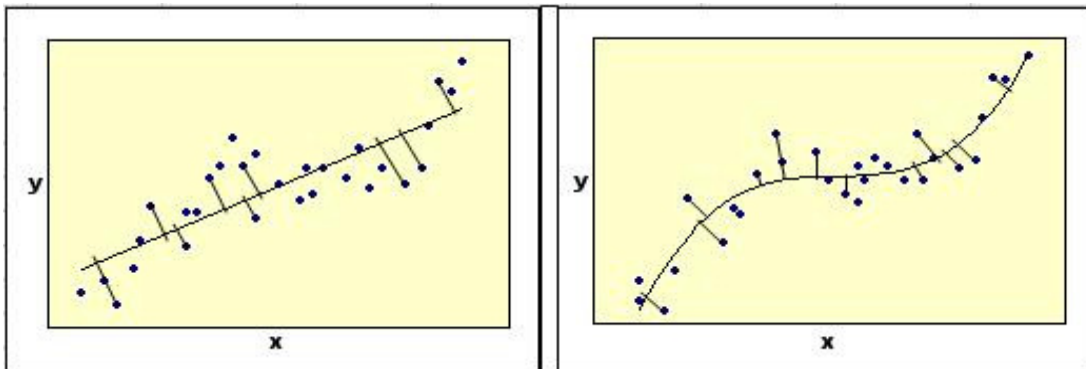


Figura 7 - (a) Primeiro PC linear representado por uma reta (b) Primeiro PC não linear representado por uma curva
Fonte – elaborada pelo autor

A *curva principal* é a extensão não linear do primeiro PC extraído na PCA linear. Alguns trabalhos propõem algoritmos de generalização das *curvas principais* para extração de mais de um PC não linear; ver LeBlanc & Tibshirani (1994) e Verbeek *et al.* (2002).

Ressalta-se que o algoritmo de *curvas principais* não pode ser usado isoladamente para monitoramento de processos através das estatísticas T_{NEW}^2 e Q_{NEW} , pois, a partir das observações \mathbf{x}_b , obtêm-se os escores \mathbf{t}_b sem uma ligação funcional paramétrica entre \mathbf{x}_b e \mathbf{t}_b , já que este último não foi gerado através da eq. (33). Dessa forma, não estão disponíveis as funções \mathbf{f} e \mathbf{g} necessárias para projetar uma nova batelada \mathbf{x}_{NEW} nos eixos ortogonais, definidos pelos L PCs através de \mathbf{t}_{NEW} . Por isso, os valores de \mathbf{t}_b encontrados pelo algoritmo de curvas principais são usados para treinamento das duas redes neurais que definirão os

parâmetros $w's$ e $\theta's$ das funções não lineares f e g (ambas as funções *sigmóides*). Novamente, \mathbf{t}_{NEW} e $\hat{\mathbf{x}}_{NEW}$ são obtidos através das equações (37) e (38), respectivamente.

Harkat *et al.* (2003) propõem uma estratégia de monitoramento semelhante ao que foi descrito acima. No entanto, os autores sugerem o uso de funções de ativação de *base radial* (*RBF*, *Radial Basis Functions*) nas camadas de *projeção* e de *reconstrução*. Neste caso a função *sigmoidal* da eq. (36) utilizada acima é substituída por uma *RBF gaussiana*. Tem-se:

$$\sigma(x) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_i\|^2}{2s_i^2}\right), \quad (39)$$

onde \mathbf{c}_i e s_i representam parâmetros de posição e dispersão, respectivamente, e são estimados a partir dos dados. Os autores mostram que o uso de funções *RBF* possibilita o treinamento mais rápido das duas redes neurais. Entretanto, na *camada de compressão* (isto é, de saída da rede de *projeção* e de entrada da rede de *reconstrução*), os autores usam apenas um nódulo, isto é, os parâmetros da rede são ajustados somente em função do primeiro PC não linear ($L=1$).

2.2.3.3 NLPCA via kernel PCA

Esta seção apresenta uma alternativa de controle não linear de processos em batelada através da utilização de Kernel PCA (KPCA) (a base teórica dos kernels foi descrita na seção 2.1.6). O procedimento aqui descrito foi proposto originalmente num trabalho de Scholkopf *et al.* (1998). Neste trabalho, os autores apresentam aplicações da KPCA a problemas de reconhecimento de padrões de escrita e eliminação de ruído (*denoising*). Lee *et al.* (2004a) foram os primeiros a propor o uso de cartas de controle multivariadas baseadas em KPCA no monitoramento de processos contínuos. Na seqüência, Lee *et al.* (2004b) propuseram cartas de controle baseadas em KMPCA (*Kernel Multiway Principal Component Analysis*) para o monitoramento de processos em bateladas.

A KPCA consiste na realização da PCA no espaço das funções não lineares dos dados \mathbf{x}_b . O mapa não linear apresentado na eq. (2) é então redefinido:

$$\Phi: \mathbb{R}^{PT} \rightarrow F$$

$$\mathbf{x}_b \rightarrow \Phi(\mathbf{x}_b),$$

onde F representa o *espaço dos atributos*, com dimensão (N_F) maior do que PT ; o vetor $\Phi(\mathbf{x}_b)$, de dimensão ($1 \times N_F$), é a representação do vetor \mathbf{x}_b , de dimensão ($1 \times PT$), no *espaço dos atributos* F , dada por alguma função não linear pré-definida $\Phi(\mathbf{x}_b)$ dos dados de entrada do vetor \mathbf{x}_b . A partir desse mapa, capturam-se características não lineares dos dados, tais como correlações não lineares entre as variáveis de processo.

Considere novamente o modelo PCA descrito na eq. (21). Os escores \mathbf{t}_b associados aos L KPCs (Kernel PCs) do modelo são obtidos projetando as observações \mathbf{x}_b da matriz \mathbf{X} , utilizando o mapa Φ [conforme apresentado nas eqs. (19) e (20)]. Assim, a eq. (33) é reescrita da seguinte forma:

$$\mathbf{t}_b = \Phi(\mathbf{x}_b)\mathbf{F}, \quad b=1,\dots,B. \quad (40)$$

Analogamente à PCA linear, $\mathbf{F} = [\mathbf{f}'_1 | \mathbf{f}'_2 | \dots | \mathbf{f}'_L]$ representa a matriz cujas colunas contêm L funções lineares dos vetores $\Phi(\mathbf{x}_b)$, onde $\Phi(\mathbf{x}_b)$ é uma função não linear de \mathbf{x}_b , definida a partir de um mapa-não linear Φ . O vetor coluna \mathbf{f}'_i (para $i=1,\dots,L$) representa o autovetor normalizado \mathbf{u}'_i da matriz de covariância *modificada* $\mathbf{K}_{b,b'} = K(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_{b'})$ [apresentada na eq. (11)], de dimensão ($B \times B$), onde $K(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_{b'})$ é um kernel das observações \mathbf{x}_b [ver eq. (20)].

A KPCA define uma transformação linear de $F \rightarrow \mathbb{R}^L$, dada pelos autovetores \mathbf{u}_i , onde F representa o espaço \mathbb{R}^{PT} aumentado através de uma função $\Phi(\mathbf{x}_b)$, obtida a partir do mapa Φ definido.

Da mesma forma, a expressão (34) é reescrita para permitir a reconstrução das observações originais no modelo (21) em função dos KPCs. Tem-se:

$$\hat{\Phi}(\mathbf{x}_b) = \mathbf{t}_b \mathbf{G}, \quad b=1,\dots,B, \quad (41)$$

onde $\mathbf{G} = [\mathbf{g}'_1 | \mathbf{g}'_2 | \dots | \mathbf{g}'_F]$ representa a matriz contendo F vetores coluna \mathbf{g}'_g , cada um representando uma função linear dos L PCs (representados por \mathbf{t}_b). A KPCA reconstrói

$\Phi(\mathbf{x}_b)$ [que passam a ser designadas por $\hat{\Phi}(\mathbf{x}_b)$] através das funções \mathbf{g} . Novamente, de maneira análoga à PCA linear, define-se uma transformação linear inversa de $\mathbb{R}^L \rightarrow F$, realizada através de vetores \mathbf{g}_q , cujos elementos são formados pela $q^{\text{ésima}}$ entrada de cada autovetor \mathbf{u}_i e representam os pesos da combinação linear aplicada aos elementos de \mathbf{t}_b , para $q=1,\dots,F$ e $i=1,\dots,L$.

Analogamente à PCA usual, o modelo descrito na eq. (21), para um dado número L de KPCs utilizados, é o que minimiza a matriz \mathbf{E} dos resíduos [dado pela eq. (25) com \mathbf{e}_b obtido através da eq. (24), utilizando $\hat{\Phi}(\mathbf{x}_b)$ e $\Phi(\mathbf{x}_b)$ no lugar de $\hat{\mathbf{x}}_b$ e \mathbf{x}_b , respectivamente].

O monitoramento de uma nova batelada \mathbf{x}_{NEW} é realizado através da projeção de $\Phi(\mathbf{x}_{NEW})$ nos eixos definidos pelos L KPCs através dos escores \mathbf{t}_{NEW} , calculados utilizando a eq. (40) via kernel $K(\mathbf{x}_{NEW}, \mathbf{x}_b)$ das observações originais [eq. (20)]. Adicionalmente, a partir de \mathbf{t}_{NEW} , obtém-se a reconstrução $\hat{\Phi}(\mathbf{x}_b)$ da nova batelada no espaço F , utilizando a eq. (41). Lee *et al.* (2004a) demonstram que os limites de controle das estatísticas T_{NEW}^2 e Q_{NEW} para monitoramento dos $\Phi(\mathbf{x}_{NEW})$ permanecem os mesmos em relação à PCA usual. O monitoramento novamente é feito através das equações (27), (28), (31) e (32).

Deve-se entender que a NLPCA através da KPCA difere das abordagens de NLPCA baseadas em redes neurais e curvas principais em alguns aspectos.

A KPCA consiste em aplicar uma PCA linear no espaço F (e não no espaço \mathbb{R}^{PT}) das funções não lineares Φ das observações \mathbf{x} . As funções para projeção (\mathbf{f}) e reconstrução (\mathbf{g}) são lineares e representadas pelos autovetores \mathbf{u}_i . Diferentemente, a NLPCA através de redes neurais e curvas principais utilizam funções \mathbf{f} e \mathbf{g} não lineares para projeção e reconstrução das observações [funções do tipo *sigmóide* ou do tipo *RBF*; ver equações (35), (36) e (39)].

Ressalta-se também que, ao contrário da PCA linear e da NLPCA via redes neurais e curvas principais, a KPCA pode gerar um número L de KPCs maior do que o espaço de entrada \mathbb{R}^{PT} . Apesar de $L < N_F$, dependendo da escolha do mapa não linear, o vetor $\Phi(\mathbf{x})$ pode ter dimensão muito superior à dimensão do vetor \mathbf{x} (conforme discutido na seção 2.1.3).

A KPCA apresenta algumas vantagens em relação às redes neurais pelo fato de que os KPCs não são obtidos através de algoritmos de otimização, mais sim apenas através de uma modificação na matriz de covariâncias, utilizando álgebra linear (conforme visto na seção 2.1.6). Outra vantagem reside no fato de que a KPCA, a exemplo da PCA linear, disponibiliza um número L , $L + 1$ ou $L - 1$ de KPCs de uma vez só. Diferentemente, as redes neurais são treinadas para um número L pré-definido de PCs, ou nódulos na *camada de compressão* (ver Figura 6). Para $L + 1$ PCs, por exemplo, inicia-se o processo de treinamento novamente.

Por outro lado, diferentemente dos modelos PCA e NLPCA via redes neurais, no modelo KPCA a eq. (41) reconstrói apenas as observações $\Phi(\mathbf{x})$ (isto é, a KPCA gera autovetores \mathbf{u}_i que representam a projeção dos dados $\Phi(\mathbf{x})$ nas principais direções de variabilidade comum no espaço F). Entretanto, para fins de interpretação, necessita-se de alguma forma reconstruir as observações originais \mathbf{x} , ou seja, obter as projeções nas direções de variabilidade comum no espaço de entrada \mathbb{R}^{PT} . Burges (1996) apresenta uma proposta para estimar autovetores \mathbf{u}_i''' do espaço \mathbb{R}^{PT} a partir dos vetores \mathbf{u}_i gerados em F .

Scholkopf & Smola (2002) apresentam uma análise comparativa do desempenho dos procedimentos NLPCA apresentados diante de problemas de reconhecimento de padrões de escrita e eliminação de ruído.

2.2.4 Procedimentos para Diagnóstico

A seção anterior apresentou uma revisão das principais abordagens de controle para NLPCA. As técnicas descritas permitem uma identificação do estado do processo (sob controle ou fora de controle) durante a realização de uma batelada nova. Em um segundo momento, necessita-se diagnosticar as causas de um eventual ponto fora de controle assinalado pelas CCs, identificando as variáveis que apresentaram maiores desvios em torno dos seus padrões.

Algumas abordagens de diagnósticos para NLPCA estão disponíveis e constituem procedimentos *a posteriori* em relação às CCs T^2 e Q baseadas na KPCA (descritas na seção 2.3.3). Destacam-se os trabalhos de Cho *et al.* (2005) e Choi *et al.* (2008).

Cho *et al.* (2005) propõem uma abordagem que permite verificar o peso de importância de cada variável nos valores das estatísticas T^2 e Q , computando o gradiente da função kernel através da técnica sugerida por Rakotomamonjy (2003).

Considere vetores linha de observações $\mathbf{x}_b \in IR^{PT}$, para $b=1, \dots, B$, e o vetor linha $\mathbf{x}_{NEW}=[x_{1,NEW}, x_{2,NEW}, \dots, x_{i,NEW}, \dots, x_{PT,NEW}]$, onde $x_{i,NEW}$ representa a observação da $i^{ésima}$ variável em uma nova batelada sob monitoramento. Resumidamente, adota-se o kernel *RDB*

Gaussiano $k(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_{b'}) = \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_{b'}\|^2}{\sigma^2}\right)$; define-se um fator de escala dado pelo vetor

linha $\mathbf{v}=[v_1, v_2, \dots, v_i, \dots, v_{PT}]$, onde v_i representa o valor do fator de escala referente à $x_{i,NEW}$; e

escreve-se a função kernel definida como $k(\mathbf{v} \cdot \mathbf{x}_b, \mathbf{v} \cdot \mathbf{x}_{b'}) = \exp\left(\frac{-\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{x}_b - \mathbf{v} \cdot \mathbf{x}_{b'}\|^2}{\sigma^2}\right)$.

Por outro lado, sabe-se que as estatísticas T^2 e Q podem ser escritas em função de kernels. Assim: $T_{NEW}^2 = \mathbf{t}_{NEW} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{t}'_{NEW}$ e $Q_{NEW} = k(\mathbf{x}_{NEW}, \mathbf{x}_{NEW}) - \mathbf{t}_{NEW} \mathbf{t}'_{NEW}$, com

$t_{s,NEW} = \sum_{i=1}^B \alpha_{s,i} k(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_{NEW})$ representando o $s^{ésimo}$ valor de \mathbf{t}_{NEW} , referente ao $s^{ésimo}$ PC

[eq. (20)].

A contribuição da $i^{ésima}$ variável em T_{NEW}^2 e Q_{NEW} é dada, respectivamente, por

$C_{T^2,NEW,i} = \left| \frac{\partial T_{NEW}^2}{\partial v_i} \right|$ e $C_{Q,NEW,i} = \left| \frac{\partial Q_{NEW}}{\partial v_i} \right|$, que representa a derivada da função kernel

$k(\mathbf{v} \cdot \mathbf{x}_i, \mathbf{v} \cdot \mathbf{x}_j)$ em relação à v_i . Os autores apresentam uma aplicação dessa abordagem de diagnóstico diante de um processo simulado com duas variáveis.

Choi *et al.* (2008) apresentam uma abordagem semelhante à proposta de Cho *et al.* (2005). Entretanto, numa fase de pré-processamento, extraem coeficientes de *wavelets* dos vetores \mathbf{x}_b e \mathbf{x}_{NEW} , gerando novos vetores $\tilde{\mathbf{x}}_b$ e $\tilde{\mathbf{x}}_{NEW}$. A análise da contribuição da $i^{ésima}$

variável em T_{NEW}^2 e Q_{NEW} é realizada novamente através de $C_{T^2,NEW,i} = \left| \frac{\partial T_{NEW}^2}{\partial v_i} \right|$ e

$$C_{Q,NEW,i} = \left| \frac{\partial Q_{NEW}}{\partial v_i} \right|, \text{ onde } T_{NEW}^2 = \mathbf{t}_{NEW} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{t}'_{NEW}, \quad Q_{NEW} = k(\tilde{\mathbf{x}}_{NEW}, \tilde{\mathbf{x}}_{NEW}) - \mathbf{t}_{NEW} \mathbf{t}'_{NEW},$$

$$\text{com } t_{s,NEW} = \sum_{i=1}^B \alpha_{s,i} k(\tilde{\mathbf{x}}_b, \tilde{\mathbf{x}}_{NEW}).$$

2.3 MÉTODO STATIS

Nesta seção é apresentado o método Statis para análise multivariada de dados. A exemplo do que foi feito na seção 2.1 em relação ao kernel, o objetivo aqui é a utilização de tal método no monitoramento de variáveis quantitativas de um processo industrial por bateladas. Através do método Statis são analisadas estruturas tridimensionais de dados utilizando-se medidas de similaridade baseada em produtos internos canônicos. Na seção 2.3.1 são feitas algumas considerações iniciais sobre o método, bem como a estruturação de dados necessária para sua aplicação no contexto deste trabalho. A seção 2.3.2 apresenta a análise da *inter-estrutura* dos dados. Na seção 2.3.3 é apresentada a análise da *intra-estrutura* dos dados. Por fim, a seção 2.3.4 apresenta as considerações finais com uma discussão comparativa entre as metodologias baseadas no Statis e na MPCA.

2.3.1 Considerações Iniciais

O método Statis permite a análise de estruturas tridimensionais de dados, avaliando a similaridade entre matrizes bidimensionais em um plano de dimensões reduzidas (ESCOUFIER, 1987; LAVIT *et al.*, 1994). Considerando que o interesse aqui é a análise de dados oriundos de processos em bateladas (conforme descrito na seção 2.2.1), a estrutura tridimensional neste contexto traz dados de referência acerca de B matrizes bidimensionais \mathbf{X}_b . Cada matriz \mathbf{X}_b , de dimensão $(T \times P)$, contém vetores linha \mathbf{x}_i^b padronizados (isto é, cada variável em \mathbf{X}_b está com os valores subtraídos da média e divididos pelo desvio padrão da sua coluna) que representam medições de P variáveis de processo durante T instantes de tempo, conforme esquematizado na Figura 8. Tem-se então uma estrutura com P variáveis $\times T$ instantes de tempo $\times B$ bateladas.

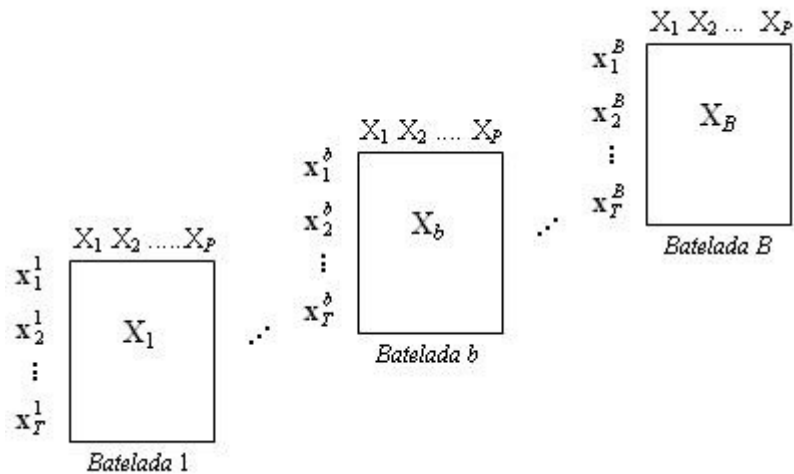


Figura 8 - Arranjo de dados para análise via Statis
Fonte – elaborada pelo autor

O método Statis foi proposto inicialmente por Escoufier (1973), e sua aplicação em MSPC de processos em bateladas foi proposta por Scepi (2002) e aprimorada por Fogliatto & Niang (2008). A estruturação de dados apresentada acima cumpre dois objetivos:

- Representar em um espaço de dimensões reduzidas a correlação entre as matrizes bidimensionais apresentadas na Fig. 8. Mais especificamente, verifica-se a correlação entre as P variáveis das matrizes X_b e $X_{b'}$, no conjunto dos T instantes. Esta análise permite verificar o comportamento global das variáveis de uma nova batelada em relação à estrutura de referência capturada entre as B bateladas. Este objetivo é alcançado através da análise da *inter-estrutura*.
- Representar em um espaço reduzido a correlação média (ou *de compromisso*) entre os T instantes, dois a dois, considerando todas as P variáveis de processo. Em outras palavras, obtém-se a correlação temporal média do conjunto das variáveis de processo, considerando as B bateladas na amostra de referência. Esta análise busca identificar, a cada instante de tempo transcorrido na nova batelada, possíveis desvios significativos em relação ao comportamento temporal de compromisso do conjunto das variáveis. Este objetivo é alcançado através da análise da *intra-estrutura*.

2.3.2 Análise da Inter-Estrutura

Para dar início à descrição da análise da *inter-estrutura*, define-se, para cada matriz \mathbf{X}_b , uma matriz $\mathbf{W}_b = \mathbf{X}_b \mathbf{X}'_b$, de dimensão $(T \times T)$, onde \mathbf{X}'_b indica a transposta da matriz \mathbf{X}_b . Genericamente, pode-se escrever essa matriz da seguinte forma:

$$\mathbf{W}_b = \begin{bmatrix} \ddots & & \ddots \\ & \langle \mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b \rangle & \\ \ddots & & \ddots \end{bmatrix}, \text{ para } t, t' = 1, \dots, T \text{ e } b=1, \dots, B. \quad (42)$$

Os elementos dessa matriz correspondem ao produto interno entre os vetores linha \mathbf{x}_t^b e $\mathbf{x}_{t'}^b$ de \mathbf{X}_b (Fig. 8), com medições das P variáveis nos instantes t e t' , respectivamente. Considerando que os dados estão padronizados, pode-se entender que a matriz \mathbf{W}_b traz uma medida de correlação do conjunto das variáveis entre instantes de tempo na $b^{\text{ésima}}$ batelada. A análise das informações desta batelada por esta matriz prioriza os instantes de tempo.

Importante observar que se a estratégia é priorizar uma descrição do comportamento das variáveis sobre todos os instantes, a análise através do método *Statis* é realizada utilizando uma matriz $\mathbf{V}_b = \mathbf{X}'_b \mathbf{X}_b$, de dimensão $(P \times P)$, isto é, uma matriz que representa a correlação entre as variáveis na $b^{\text{ésima}}$ batelada. Esta estratégia é denominada método *Statis Dual*. O objetivo principal aqui é explicitar uma caracterização resumida do comportamento conjunto de variáveis em cada instante de tempo. Entretanto, a metodologia de controle que será apresentada no capítulo 3, utiliza o *Statis Dual* como complemento do *Statis* para diagnosticar distúrbios nas variáveis de um processo sob investigação.

Calcula-se agora uma medida de similaridade entre pares de matrizes \mathbf{W}_b através produto interno canônico de Hilbert-Schmidt (ESCOUFIER, 1973), dado por:

$$\mathbf{S}_{bb'} = \langle \mathbf{W}_b | \mathbf{W}_{b'} \rangle_{HS} = Tr(\mathbf{D} \mathbf{W}_b \mathbf{D} \mathbf{W}_{b'}), \quad (43)$$

onde $Tr(\cdot)$ representa o operador de traço matricial, e \mathbf{D} é uma matriz diagonal, de dimensão $(T \times T)$, contendo os pesos de importância para os instantes de tempo. Tem-se então:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ 0 & \cdots & D_T \end{pmatrix}.$$

A diferenciação de pesos de importância para os instantes dentro de uma batelada é apropriada em algumas situações. Primeiro, quando em determinados instantes da batelada ocorrer mudanças relevantes no processo devido à troca de materiais, realimentação de algum sistema, adição de matérias primas, mudança de fase, etc. Essas potenciais fontes de desajustes das variáveis do processo devem promover uma intensificação do controle e os instantes de tempo em que elas ocorrem devem, assim, receber maior peso de importância em relação aos demais. Segundo, quando processos forem caracterizados por bateladas de tempo variável. Neste caso, nem todos os instantes de tempo são observados com a mesma frequência nas bateladas da amostra de referência e os pesos de importância dos instantes são proporcionais à sua frequência.

Este trabalho considera apenas processos por bateladas de tempo fixo e cujas causas de variabilidade não desejadas incidem uniformemente nos instantes. Mediante tais pressupostos, todos os instantes de tempo recebem mesmo peso, ou seja,

$$\mathbf{D} = \mathbf{I}/T. \quad (44)$$

O valor de $\mathbf{S}_{bb'}$ indica o grau de similaridade entre as P variáveis nas matrizes \mathbf{W}_b e $\mathbf{W}_{b'}$. Essa medida de similaridade entre matrizes é semelhante à medida de similaridade entre vetores, pois a eq. (43) é uma extensão do produto interno entre vetores quando estamos diante de matrizes quadradas.

Neste trabalho considera-se que as variáveis estão padronizadas e que as matrizes \mathbf{W}_b estão normalizadas (isto é utiliza-se $\mathbf{W}_b / \sqrt{\text{Tr}(\mathbf{D}\mathbf{W}_b\mathbf{D}\mathbf{W}_b)}$ no lugar de \mathbf{W}_b). Neste caso, a eq. (43) representa o coeficiente de correlação linear vetorial (coeficientes RV) entre as matrizes \mathbf{W}_b e $\mathbf{W}_{b'}$.

Esta medida representa o quadrado do coeficiente de correlação linear de Pearson entre as variáveis das matrizes \mathbf{X}_b e $\mathbf{X}_{b'}$ (ver em LAVIT *et al.*, 1994). Por exemplo, se $\mathbf{S}_{bb'} = 0$, então as P variáveis em \mathbf{X}_b apresentam correlação linear nula com as P variáveis em $\mathbf{X}_{b'}$. Isto indica que o perfil das variáveis ao longo dos instantes em \mathbf{X}_b e $\mathbf{X}_{b'}$ é diferente. Em

contrapartida, se $\mathbf{S}_{bb'} = 1$, a correlação linear entre as P variáveis de \mathbf{X}_b e $\mathbf{X}_{b'}$ é perfeita, indicando perfil igual das variáveis em ambas as matrizes.

As correlações lineares vetoriais entre \mathbf{W}_b e $\mathbf{W}_{b'}$ estão descritas na matriz

$$\mathbf{S}\mathbf{\Delta} = \begin{pmatrix} \ddots & & \ddots \\ & \pi_b \mathbf{S}_{bb'} & \\ \ddots & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (45)$$

onde

$$\mathbf{\Delta} = \begin{pmatrix} \pi_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ 0 & \cdots & \pi_B \end{pmatrix}$$

traz os pesos de importância π_b (para $b=1,\dots,B$) atribuídos às B bateladas. A matriz $\mathbf{\Delta}$ tem dimensão $(B \times B)$ e deve ser determinada a partir da análise da conformidade do produto final resultante de cada batelada em relação às suas especificações. Assim, bateladas com resultado mais próximo do alvo das especificações devem receber maior peso nesta matriz. Caso não se disponha dessa informação, considera-se todas as bateladas com o mesmo peso; isto é:

$$\mathbf{\Delta} = \mathbf{I}/B. \quad (46)$$

Importante destacar que os elementos na diagonal principal da matriz descrita na eq. (45) são iguais a $1/B$, pois, como as matrizes \mathbf{W}_b estão normalizadas, isto é, com $\mathbf{W}_b / \sqrt{\text{Tr}(\mathbf{W}_b \mathbf{W}_b)}$ no lugar de \mathbf{W}_b , então $\mathbf{S}_{bb} = 1$. Logo, $\pi_b \mathbf{S}_{bb} = 1/B$.

Para obter uma caracterização resumida da estrutura de correlação entre as B bateladas, aplica-se a PCA na matriz $\mathbf{S}\mathbf{\Delta}$. Isto é feito através da sua diagonalização para seleção dos maiores autovalores λ_i e respectivos autovetores \mathbf{u}_i (com $i=1,\dots,B$), que representam a localização das matrizes \mathbf{W}_b nas principais direções ortogonais de variabilidade comum em $\mathbf{S}\mathbf{\Delta}$.

Considerando que a correlação entre as B bateladas tende a ser significativa, já que se trata de bateladas de referência com comportamento similar, espera-se obter uma

representação suficiente da estrutura descrita em $\mathbf{S}\mathbf{\Lambda}$ com um número reduzido de eixos ortogonais. Neste caso, poucos PCs explicam parte substancial dessa estrutura.

O percentual da variância global contida em $\mathbf{S}\mathbf{\Lambda}$, explicada pelo $i^{\text{ésimo}}$ PC é dado por $(\lambda_i / \sum_{i=1}^B \lambda_i) \times 100$. Critérios para seleção do número de PCs suficientes para a representação da *inter-estrutura* estão disponíveis na literatura. Mingoti (2005) apresenta uma discussão sobre o assunto.

A representação das B bateladas nos novos eixos ortogonais é realizada utilizando os autovetores \mathbf{u}_i . Assim, cada elemento $u_{i,b}$ de \mathbf{u}_i ponderado pelo desvio padrão do PC correspondente (dado pela raiz quadrada do $i^{\text{ésimo}}$ autovalor) representa a posição da $b^{\text{ésima}}$ batelada no $i^{\text{ésimo}}$ eixo ortogonal. Tem-se então:

$$a_{i,b} = \sqrt{\lambda_i} u_{i,b}, \quad (47)$$

onde $a_{i,b}$ é a coordenada que representa essa posição. A Figura 9 apresenta, de maneira resumida, o esquema geral da análise da *inter-estrutura*.

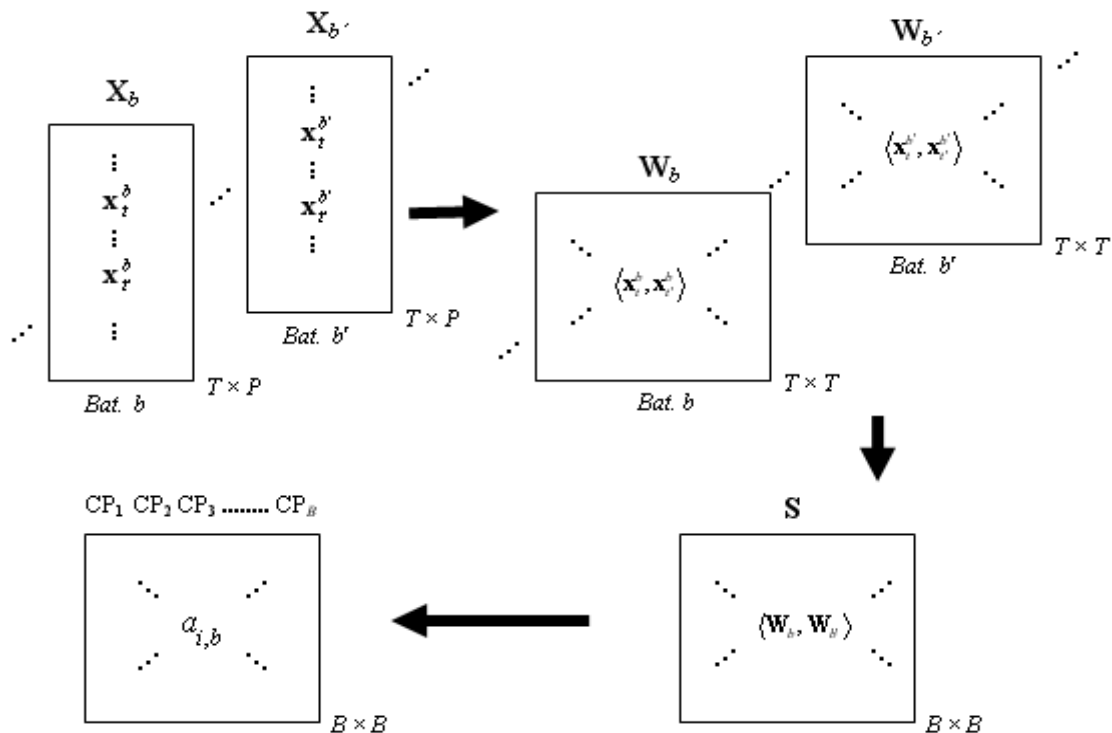


Figura 9 - Esquema geral da metodologia de análise da *inter-estrutura*
Fonte – adaptada de Fogliatto & Niang (2008)

2.3.3 Análise da Intra-Estrutura

A análise da *intra-estrutura* é realizada a partir da obtenção de uma matriz de compromisso \mathbf{W} , que representa a estrutura de correlação média em par (considerando as B bateladas de referência) entre os T instantes de tempo. Entende-se que a matriz \mathbf{W} apresenta o comportamento temporal do conjunto das variáveis nos instantes de uma batelada ideal, isto é, que transcorreu na média. A matriz \mathbf{W} é obtida através da soma ponderada das B matrizes de referência, utilizando a seguinte expressão:

$$\mathbf{W} = \sum_{b=1}^B \alpha_b \mathbf{W}_b,$$

ou, a partir da matriz mostrada na eq. (42), pode-se escrever explicitamente o elemento genérico da matriz \mathbf{W} . Tem-se:

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \ddots & & \ddots \\ \ddots & \sum_{b=1}^B \alpha_b \langle \mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b \rangle & \ddots \\ \ddots & & \ddots \end{bmatrix}, \text{ para } t, t' = 1, \dots, T. \quad (48)$$

Lavit *et al.* (1994) demonstram que a combinação linear que melhor relaciona as matrizes \mathbf{W}_b com \mathbf{W} está associada ao maior autovalor (λ_1) da matriz $\mathbf{S}\Delta$ e ao seu autovetor correspondente (\mathbf{u}_1). Assim, os pesos α_b são obtidos da seguinte forma:

$$\alpha_b = \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}} \frac{1}{B} u_{1,b}, \quad (49)$$

onde $u_{b,1}$ representa o $b^{\text{ésimo}}$ elemento do vetor \mathbf{u}_1 referente à $b^{\text{ésima}}$ batelada.

Para obter uma caracterização resumida da estrutura de correlação de compromisso das P variáveis nos T instantes de tempo, a exemplo do que foi feito na análise da *inter-estrutura*, aplica-se uma PCA na matriz $\mathbf{W}\mathbf{D}$. Isto é feito através da sua diagonalização para seleção dos maiores autovalores δ_i e respectivos autovetores $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ (com $i=1, \dots, T$), que descrevem a posição das observações \mathbf{x}_t^b médias, isto é, da matriz \mathbf{X}_b ideal, em um número reduzido de eixos, derivados das principais direções ortogonais de variabilidade comum em $\mathbf{W}\mathbf{D}$.

Assim como na análise da *inter-estrutura*, ressalta-se que nas B bateladas de referência, o comportamento temporal do conjunto das variáveis é similar. Dessa forma, poucos PCs devem ser suficientes para descrever de maneira satisfatória da estrutura contida em **WD**.

A representação da estrutura de compromisso (isto é, do agregado das variáveis em cada instante de tempo da batelada média) nos novos eixos ortogonais é realizada utilizando os autovetores $\boldsymbol{\varepsilon}_i$. Cada elemento $\varepsilon_{i,t}$ de $\boldsymbol{\varepsilon}_i$, ponderado pelo desvio padrão do PC correspondente (dado pela raiz quadrada do seu $i^{\text{ésimo}}$ autovalor), representa a posição do $i^{\text{ésimo}}$ instante de tempo de compromisso no $i^{\text{ésimo}}$ eixo ortogonal. Tem-se então:

$$z_{i,t} = \sqrt{\delta_i} \varepsilon_{i,t}, \quad (50)$$

onde $z_{i,t}$ é a coordenada que representa essa posição.

Para comparar, em cada instante, o comportamento do conjunto das P variáveis da $b^{\text{ésima}}$ batelada \mathbf{W}_b , em relação à batelada de compromisso \mathbf{W} , obtém-se a representação de cada matriz \mathbf{W}_b nos novos eixos ortogonais. Isto é feito modificando a eq. (50) da seguinte forma:

$$z_{i,t}^b = \frac{1}{\sqrt{\delta_i}} \frac{1}{T} \mathbf{w}_t^b \boldsymbol{\varepsilon}_i', \quad (51)$$

onde $\boldsymbol{\varepsilon}_i'$ é o vetor transposto do vetor linha $\boldsymbol{\varepsilon}_i$, \mathbf{w}_t^b representa a $t^{\text{ésima}}$ linha de \mathbf{W}_b e $z_{i,t}^b$ é o valor que representa a posição no $i^{\text{ésimo}}$ eixo ortogonal da $b^{\text{ésima}}$ batelada no $t^{\text{ésimo}}$ instante de tempo. A Figura 10 apresenta de maneira resumida o esquema geral da análise da *intra-estrutura*.

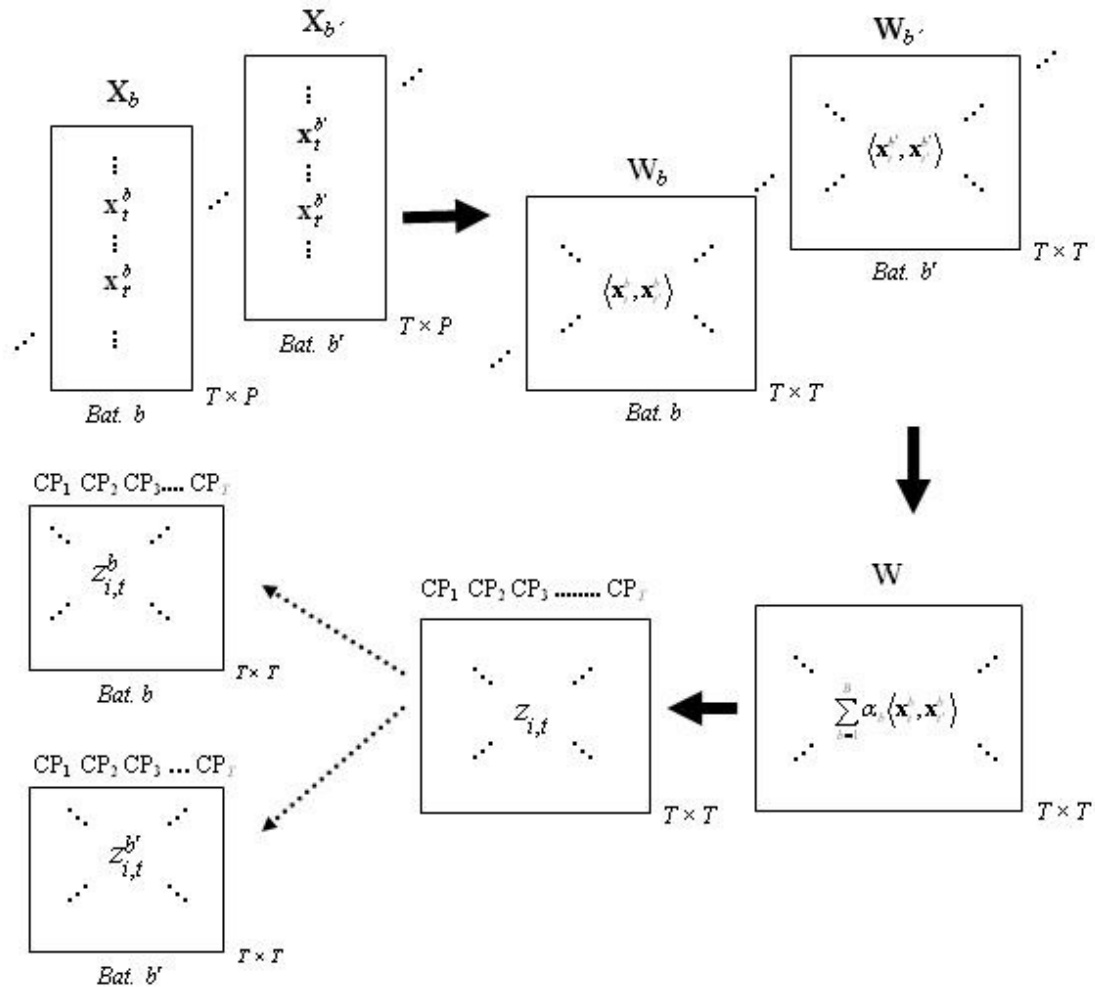


Figura 10 - Esquema geral da metodologia de análise da *intra-estrutura*
 Fonte – adaptada de Fogliatto & Niang (2008)

Em resumo, considerando uma nova batelada sob investigação, a análise da *inter-estrutura* permitirá comparar o comportamento global das P variáveis no conjunto dos T instantes de tempo dessa batelada, em relação à estrutura de correlação de referência entre as variáveis de W_b e $W_{b'}$, contidas na matriz SA . Em contrapartida, através da análise da *intra-estrutura* busca-se identificar, a cada instante de tempo, o comportamento das variáveis dessa nova batelada em relação ao comportamento de compromisso neste instante.

2.3.4 Considerações Finais

É importante destacar que a estrutura tridimensional de dados gerados a partir da observação de um processo em bateladas pode ser desdobrada em estruturas bidimensionais

com arranjos diferentes em relação ao esquema mostrado na Fig. 8, dependendo da estratégia de monitoramento de interesse das variáveis de processo.

O procedimento de controle de processos em bateladas consagrado denominado Análise de Componentes Principais Multidirecionais (MPCA, *Multiway Principal Component Analysis*), foi descrito na seção 2.2.2. A MPCA desdobra esta estrutura tridimensional descrita na Fig. 8 em uma única matriz bidimensional de dimensão $(B \times TP)$; ver Figura 6. Neste caso, cada uma das P variáveis de processo é tratada como uma variável de análise distinta, e, ao aplicar-se a PCA nas colunas dessa matriz, captura-se de alguma forma uma estrutura de correlação temporal das variáveis no agregado das B bateladas de referência.

As cartas de controle geradas por esta metodologia (*Carta de Hotelling* e *Carta Q para os resíduos*; descritas na seção 2.2.2) fornecem apenas um escore global para classificar uma nova batelada sob investigação, isto é, no agregado dos instantes de tempo. A MPCA também utiliza uma carta de controle auxiliar a estas duas (denominada *Gráfico de Contribuição*; ver Marcondes Filho, 2001) que permite de alguma forma verificar o comportamento das variáveis de processo dentro de cada instante de tempo.

Em contrapartida, a metodologia proposta neste trabalho (utilizando a técnica Statis) permite, através da análise da *intra-estrutura*, a utilização de cartas de controle para investigar o comportamento de uma nova batelada explicitamente em cada instante de tempo. Dessa forma, obtém-se T cartas, uma para cada instante.

Ressalta-se outra diferença importante entre a MPCA e o Statis. A MPCA define cartas de controle a partir de um modelo estatístico $(\mathbf{X} = \sum_{i=1}^L \mathbf{t}'_i \mathbf{u}_i + \mathbf{E})$; a carta de *Hotelling* trabalha com um número reduzido de variáveis (ou PCs, representados por $t_{i,b}$), obtidos através das projeções das bateladas \mathbf{x}_b (realizadas através de $t_{i,b} = \mathbf{x}_b \mathbf{u}'_{i,b}$); e a carta *Q* monitora o erro de representação (dado por \mathbf{E}) do processo através dos PCs.

O método Statis constitui-se em uma técnica exploratória para representar dados multivariados descritos em matrizes \mathbf{X}_b (conforme Fig. 8) em um número reduzido de eixos ortogonais. Entretanto, estes eixos não se constituem em novas variáveis de análise (ou PCs), mas apenas uma nova base para posicionar os dados da batelada \mathbf{X}_b , utilizando um número i

menor de coordenadas, e que são dadas pelos elementos $u_{i,b}$ dos autovetores \mathbf{u}_i gerados pela PCA.

Como o Statis, dessa forma, não se configura em um modelo, não existe uma medida de ajuste derivado do erro de projeção em um número deduzido de PCs, pois a projeção não é realizada. Neste caso, utiliza-se apenas uma medida de erro de representação de cada batelada em um número menor de coordenadas. Essa medida é apresentada no capítulo 3.

Finalmente, a metodologia de controle a ser apresentada no próximo capítulo combina os procedimentos de análise descritos acima (análise da *inter-estrutura* e da *intra-estrutura*) com a utilização de um kernel polinomial (descrito na seção 2.1.3). Esta abordagem será proposta para monitoramento do comportamento de bateladas geradas através de um sistema com não-linearidades presentes.

3 METODOLOGIA

Este capítulo apresenta uma metodologia de controle para o monitoramento de variáveis de um processo em bateladas. Tal metodologia baseia-se na utilização do método de análise Statis em combinação com um kernel polinomial para capturar a correlação não linear entre as variáveis sob investigação. Nas seções que se seguem, são apresentados os subsídios necessários para entendimento da proposta metodológica. A seção 3.1 apresenta a descrição da análise da *inter-estrutura* combinada com o kernel polinomial. A seção 3.2 apresenta a descrição da análise da *intra-estrutura* combinada com o kernel polinomial. A seção 3.3 apresenta a base teórica das Cartas de Controle para monitorar a *inter-estrutura* dos dados [denominada CC *kIS* (*Kernel Inter Structure*)] e das Cartas de Controle para monitorar a *intra-estrutura* dos dados [denominadas CCs *kCO_t* (*Kernel Compromise*)]. Adicionalmente, é proposta uma abordagem para diagnóstico de descontroles apontados pelas CCs *kCO_t*. Finalmente, na seção 3.4 são apresentadas algumas considerações finais sobre a metodologia proposta.

3.1 STATIS VIA KERNEL POLINOMIAL (INTER-ESTRUTURA)

Na seção 3.2 foi apresentada a base teórica do método Statis para análise da *inter-estrutura*, num contexto de correlações lineares entre variáveis. Propõe-se agora uma modificação nesta análise, redefinindo as estatísticas que passam a ser descritas em função de um kernel polinomial. Este procedimento será denominado Kernel-Statis.

Considere novamente os dados referentes a B bateladas. Têm-se então B matrizes \mathbf{X}_b , de dimensão $(T \times P)$, compostas por vetores linha \mathbf{x}_t^b , de dimensão $(1 \times P)$, de dados padronizados representando medições das P variáveis de processo no $t^{\text{ésimo}}$ instante da $b^{\text{ésima}}$ batelada (conforme apresentado na Fig. 8). Define-se um mapa não linear Φ , como proposto na eq. (2). Tem-se então:

$$\Phi: \mathbb{R}^P \rightarrow F$$

$$\mathbf{x}_t^b \rightarrow \Phi(\mathbf{x}_t^b).$$

O vetor $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$, de dimensão $(1 \times N_F)$, onde $N_F = \frac{(d + N - 1)!}{d!(N - 1)!}$, está no *espaço de atributos* F e representa o vetor \mathbf{x}_t^b ampliado, cujos elementos representam todos os monômios de ordem d dos elementos do vetor \mathbf{x}_t^b .

Decorre disso que, no espaço F , a matriz \mathbf{X}_b passa a ter dimensão $(T \times N_F)$, contendo assim T vetores linha $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$. Através da eq. (42) obtém-se a matriz quadrada \mathbf{W}_b , de dimensão $(T \times T)$, onde cada elemento representa o produto interno canônico entre os vetores $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$, dois a dois. Entretanto, esses produtos internos entre os $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$ no espaço F podem ser realizados em função das observações originais, através do produto interno modificado entre as observações \mathbf{x}_t^b . Utiliza-se, nesta proposta, o kernel polinomial $k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b) = \langle \mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b \rangle^d$, descrito na seção 2.1.3.

Obtém-se, então, a matriz *kernel* \mathbf{W}_b (designada por ${}^k\mathbf{W}_b$) a partir das matrizes \mathbf{X}_b no espaço original das observações \mathbf{x}_t^b [isto é, \mathbf{X}_b novamente com dimensão $(T \times P)$]. A matriz apresentada na eq. (42) é então reescrita como segue:

$${}^k\mathbf{W}_b = \mathbf{X}_b \mathbf{X}_b',$$

onde \mathbf{X}_b' representa a matriz transposta de \mathbf{X}_b , ou, explicitamente, como:

$${}^k\mathbf{W}_b = \begin{bmatrix} \ddots & & & \ddots \\ & k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b) = \langle \mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b \rangle^d & & \\ & & \ddots & \\ \ddots & & & \ddots \end{bmatrix}, \text{ para } t, t' = 1, \dots, T \text{ e } b = 1, \dots, B, \quad (52)$$

Cada elemento da matriz ${}^k\mathbf{W}_b$ descreve uma medida de correlação temporal de ordem d entre os instantes t e t' , do conjunto das P variáveis de processo, na $b^{\text{ésima}}$ batelada.

No passo seguinte as matrizes ${}^k\mathbf{W}_b$ devem ser normalizadas (assim como foi feito com as matrizes \mathbf{W}_b). Para tanto, no lugar de \mathbf{W}_b reescreve-se ${}^k\mathbf{W}_b / \sqrt{\text{Tr}(\mathbf{D} \times {}^k\mathbf{W}_b \times \mathbf{D} \times {}^k\mathbf{W}_b)}$, onde \mathbf{D} representa a matriz de pesos definida na eq. (44).

A seguir obtém-se a medida de similaridade entre as matrizes ${}^k\mathbf{W}_b$ e ${}^k\mathbf{W}_{b'}$, descrita na eq. (43), em função do produto modificado dado pelo kernel $k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_t^{b'}) = \langle \mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_t^{b'} \rangle^d$. A expressão $\mathbf{S}_{bb'} = \text{Tr}(\mathbf{D} \times {}^k\mathbf{W}_b \times \mathbf{D} \times {}^k\mathbf{W}_{b'})$ é, então, reescrita como:

$$\begin{aligned} \text{kernel}\mathbf{S}_{bb'} = & \frac{1}{T} [k(\mathbf{x}_1^b, \mathbf{x}_1^b)k(\mathbf{x}_1^{b'}, \mathbf{x}_1^{b'}) + k(\mathbf{x}_2^b, \mathbf{x}_2^b)k(\mathbf{x}_2^{b'}, \mathbf{x}_2^{b'}) + \dots + k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_t^b)k(\mathbf{x}_t^{b'}, \mathbf{x}_t^{b'}) + \dots \\ & \dots + k(\mathbf{x}_T^b, \mathbf{x}_T^b)k(\mathbf{x}_T^{b'}, \mathbf{x}_T^{b'}) + 2 \sum_{t,u} k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_u^b)k(\mathbf{x}_t^{b'}, \mathbf{x}_u^{b'})], \text{ para } t, u=1, \dots, T \text{ e } t \neq u \end{aligned} \quad (53)$$

Conforme discutido na seção 2.3.2, quando se utiliza o produto interno usual [isto é, $k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_t^{b'}) = \langle \mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_t^{b'} \rangle$] nos elementos de \mathbf{W}_b , $\mathbf{S}_{bb'}$ representa o quadrado do coeficiente de correlação linear de Pearson entre as P variáveis das matrizes \mathbf{X}_b e $\mathbf{X}_{b'}$. A utilização da matriz ${}^k\mathbf{W}_b$, definida na eq. (52), gera uma medida $\text{kernel}\mathbf{S}_{bb'}$ (aqui designada por ${}^k\mathbf{S}_{bb'}$) que representa o quadrado da correlação não linear (de ordem d) entre as variáveis das matrizes \mathbf{X}_b e $\mathbf{X}_{b'}$. Em outras palavras, deve-se entender que o valor de ${}^k\mathbf{S}_{bb'}$ indica o grau de semelhança (agora no contexto não linear) no perfil das P variáveis, no conjunto dos instantes, em \mathbf{X}_b e $\mathbf{X}_{b'}$.

O resultado da análise da *inter-estrutura* das B matrizes \mathbf{X}_b é armazenado na matriz $\mathbf{S}\mathbf{\Delta}$ [eq. (45)], reescrita da seguinte forma:

$${}^k\mathbf{S}\mathbf{\Delta} = \begin{pmatrix} \ddots & & \ddots \\ & \frac{1}{B} \times {}^k\mathbf{S}_{bb'} & \\ \ddots & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (54)$$

onde $\mathbf{\Delta} = \mathbf{I}/B$, como definido na eq. (46).

Na etapa seguinte, obtém-se uma representação resumida da *inter-estrutura*, aplicando a PCA na matriz ${}^k\mathbf{S}\mathbf{\Delta}$. A representação das bateladas \mathbf{X}_b em um número reduzido de eixos ortogonais é realizada através dos respectivos autovetores \mathbf{u}_i e autovalores λ_i associados, conforme descrito na seção 2.3.2.

3.2 STATIS VIA KERNEL POLINOMIAL (INTRA-ESTRUTURA)

Analogamente ao que foi exposto na seção 3.1, esta seção apresenta a análise da *intra-estrutura* descrita na seção 2.3.3, acrescida de um kernel polinomial.

A análise *intra-estrutura* é realizada a partir da obtenção de uma matriz compromisso \mathbf{W} que descreve uma medida de correlação temporal entre os instantes t e t' , do conjunto das P variáveis de processo numa batelada de referência., isto é, descreve o comportamento temporal padrão do conjunto das variáveis.

A matriz de compromisso \mathbf{W} é obtida através de uma combinação linear das matrizes \mathbf{W}_b , conforme descrito nas eqs. (48) e (49). Considerando novamente a matriz ${}^k\mathbf{W}_b$ definida na eq. (52), a matriz \mathbf{W} pode ser então redefinida em função do kernel polinomial, da seguinte forma:

$${}^k\mathbf{W} = \sum_{b=1}^B \alpha_b \times {}^k\mathbf{W}_b ,$$

ou, explicitamente, como:

$${}^k\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \ddots \\ \cdot & \sum_{b=1}^B \alpha_b k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b) = \sum_{b=1}^B \alpha_b \langle \mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b \rangle^d & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ \ddots & & & \ddots \end{bmatrix}, \text{ para } t, t' = 1, \dots, T, \quad (55)$$

onde ${}^k\mathbf{W}$ é a matriz *kernel* de compromisso e α_b são os pesos da combinação linear, dados pelos respectivos elementos do autovetor \mathbf{u}_1 (referente ao maior autovalor λ_1) da matriz ${}^k\mathbf{S}\mathbf{\Lambda}$.

A etapa seguinte consiste em buscar uma representação resumida da *intra-estrutura*, aplicando a PCA na matriz ${}^k\mathbf{W}$. Dessa forma, a representação da correlação temporal (no contexto não linear) entre os instantes t e t' da batelada “padrão” é obtida em um número reduzido de eixos ortogonais, realizada através dos respectivos autovetores $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ e autovalores δ_i associados, conforme descrito na seção 2.3.3.

3.3 CARTAS DE CONTROLE PARA INTER E INTRA-ESTRUTURAS

Esta seção apresenta a construção das cartas de controle (CCs) contendo uma representação resumida das bateladas \mathbf{X}_b a partir do método Statis combinado com kernels (Kernel-Statis apresentado acima). As CCs kIS e kCO_t representam uma complementação das CCs propostas por Fogliatto & Niang (2008), permitindo a análise não linear, via kernels, dos dados contidos em \mathbf{X}_b . A seção 3.3.1 descreve a carta kIS , derivada da análise da *inter-estrutura*, e a seção 3.3.2 descreve a carta kCO_t , derivada da análise da *intra-estrutura*.

3.3.1 Carta kIS

A CC kIS proposta apresenta a estrutura descrita em ${}^k\mathbf{S}\mathbf{\Lambda}$ no primeiro plano fatorial resultante da aplicação da PCA nesta matriz. Dessa forma, a representação das B bateladas de referência \mathbf{X}_b neste plano é feita pelos dois autovetores \mathbf{u}_i associados aos dois maiores autovalores λ_i de ${}^k\mathbf{S}\mathbf{\Lambda}$.

Considere, então, λ_1 e λ_2 representando os dois maiores autovalores e \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 seus respectivos autovetores associados. Através da eq. (47) obtêm-se as coordenadas da $b^{ésima}$ batelada no primeiro plano fatorial da CC kIS , que são dadas por:

$$\mathbf{a}_b = (a_{1,b}, a_{2,b}) = (\sqrt{\lambda_1}u_{1,b}, \sqrt{\lambda_2}u_{2,b}), \quad \text{para } b=1, \dots, B. \quad (56)$$

A CC kIS descreve no primeiro plano fatorial a configuração de referência em B bateladas \mathbf{X}_b obtidas num processo sob controle estatístico, ou seja, tem-se a correlação não linear de referência entre as P variáveis de \mathbf{X}_b e \mathbf{X}_b . O erro relativo de representação da *inter-estrutura* é dado pela seguinte função perda:

$$FP_{INTER} = \frac{\sum_{i=3}^B \lambda_i}{\sum_{i=1}^B \lambda_i} \times 100. \quad (57)$$

O passo seguinte consiste em obter uma região de controle para a CC kIS que estabeleça um limite de variação da correlação (não linear) padrão entre as variáveis de \mathbf{X}_b e

\mathbf{X}_b . Diferentemente do que usualmente é feito nas CCs multivariadas, a região de controle será determinada através de um procedimento onde nenhuma distribuição de probabilidade é assumida como geradora, *a priori*, do conjunto completo de dados. O procedimento que será apresentado constitui-se numa adaptação proposta por Fogliatto & Niang (2008), para o contexto de CCs, do que está descrito em Zani *et al.* (1998).

Inicialmente, calcula-se o ponto que representa o vetor média (\bar{a}_1, \bar{a}_2) dos vetores $(a_{1,b}, a_{2,b})$, para $b=1, \dots, B$, onde $\bar{a}_1 = (\sum_{b=1}^B a_{1,b} / B)$ e $\bar{a}_2 = (\sum_{b=1}^B a_{2,b} / B)$. A seguir, obtém-se a distância de Mahalanobis entre os vetores $\mathbf{a}_b = (a_{1,b}, a_{2,b})$ e $\bar{\mathbf{a}} = (\bar{a}_1, \bar{a}_2)$. Tem-se então (RENCHE, 1995):

$$D_b = (\mathbf{a}_b - \bar{\mathbf{a}})\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{a}_b - \bar{\mathbf{a}})', \text{ para } b=1, \dots, B, \quad (58)$$

onde $(\mathbf{a}_b - \bar{\mathbf{a}})$ representa o vetor linha de diferenças entre os vetores \mathbf{a}_b e $\bar{\mathbf{a}}$, cujo vetor transposto é dado por $(\mathbf{a}_b - \bar{\mathbf{a}})'$, e \mathbf{H}^{-1} é a matriz inversa da matriz \mathbf{H} de covariâncias entre os $a_{1,b}$'s e os $a_{2,b}$'s.

A seguir, as B distâncias D_b são ordenadas em ordem crescente e as 50% menores distâncias são retidas. Os vetores \mathbf{a}_b correspondentes formarão o *convex hull* (polígono) de abrangência 50% no primeiro plano fatorial. A Figura 11 apresenta um exemplo deste procedimento com 40 vetores \mathbf{a}_b representados em um plano fatorial. Observa-se que as arestas do polígono interno (descrito em verde) são compostas por oito pontos limítrofes, formando, uma região contendo apenas os 20 pontos de menor valor D_b no seu interior. Definiu-se, assim, o *convex hull* de abrangência 50%.

Neste momento, obtém-se a expansão da região formada pelo *convex hull* a partir de um fator de escala. Para tanto, define-se um múltiplo l da distância D_b entre o centróide (representado pelo vetor $\bar{\mathbf{a}}$, obtido a partir dos vetores representados pelos pontos internos do polígono) e os pontos limítrofes do polígono de abrangência 50%. O valor de l é determinado a partir da probabilidade de alarme falso α (ou erro do tipo I) desejada para a CC, com a suposição de que os dados \mathbf{a}_b do interior do polígono (isto é, apenas os 50% de menor valor

D_b) sigam uma distribuição normal bivariada; ver detalhes em *Zani et al.* (1998). A Fig. 11 apresenta o polígono interno expandido, formando o polígono externo descrito em vermelho. Neste caso, utilizou-se o valor $l=1,68$, para $\alpha=0,10$.

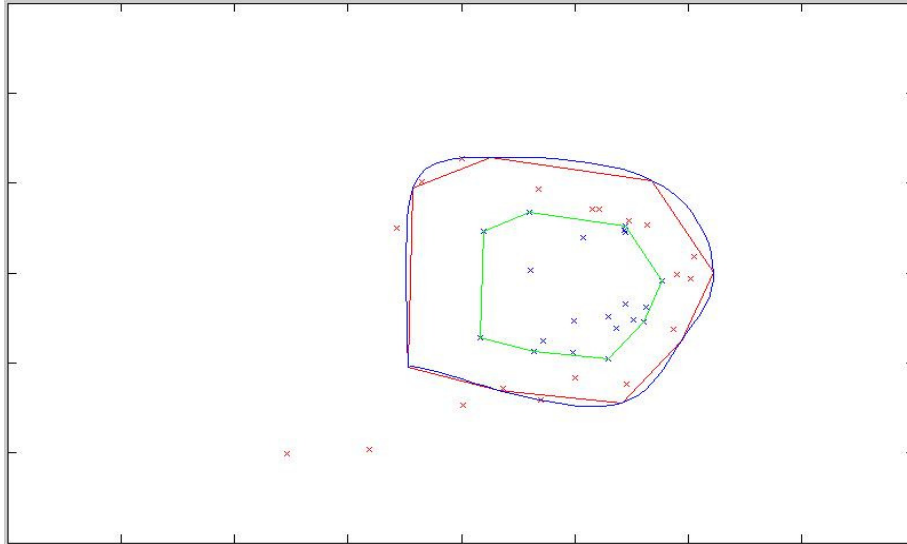


Figura 11 - Esquema geral para determinação da região de controle
Fonte – elaborada pelo autor

Finalmente, uma curva do tipo *B-spline* é ajustada aos novos pontos limítrofes, isto é, que formam as arestas do polígono externo (uma descrição sobre *B-splines* é encontrada em *HASTIE et al.*, 2001). Busca-se unir os novos pontos limítrofes criando um contorno suavizado ao invés de simplesmente unir os pontos por retas. A Fig. 11 mostra a região de controle da carta delimitada pelo contorno descrito em azul. Deve-se notar que 4 pontos (dentre 40) ficaram fora da região de controle. Este resultado está dentro do esperado, dada a probabilidade de alarme falso $\alpha=0,10$ adotada na carta.

3.3.1.1 Controle *Off-Line* através da CC *kIS*

Através da região de controle, determinada a partir das B bateladas \mathbf{X}_b de referência, e com probabilidade α de alarme falso, procede-se o monitoramento da batelada nova, aqui denotada por \mathbf{X}_{B+1} . A matriz \mathbf{X}_{B+1} tem dimensão $(T \times P)$, assim como \mathbf{X}_b , e contém em cada linha vetores \mathbf{x}_t^{B+1} com medições de P variáveis de processo no $t^{\text{ésimo}}$ instante da batelada $B+1$.

Primeiramente, a exemplo do que foi feito em \mathbf{X}_b , padronizam-se as observações \mathbf{x}_t^{B+1} da matriz \mathbf{X}_{B+1} .

No passo seguinte, obtém-se a matriz ${}^k \mathbf{W}_{B+1}$ através da eq. (52) e, após, normaliza-se esta matriz (isto é, utiliza-se ${}^k \mathbf{W}_{B+1} / \sqrt{\text{Tr}(\mathbf{D} \times {}^k \mathbf{W}_{B+1} \times \mathbf{D} \times {}^k \mathbf{W}_{B+1})}$ no lugar de ${}^k \mathbf{W}_{B+1}$).

Cada elemento da matriz ${}^k \mathbf{W}_{B+1}$ descreve uma medida de correlação temporal (não linear) entre os instantes t e t' , do conjunto das P variáveis na batelada nova \mathbf{X}_{B+1} .

A seguir, calcula-se a medida de similaridade entre a batelada nova \mathbf{X}_{B+1} e as bateladas de referência \mathbf{X}_b . Assim, através da eq. (53) obtém-se o valor $\mathbf{D} \times {}^k \mathbf{S}_{b,B+1}$, para $b=1, \dots, B$ e $\mathbf{D}=\mathbf{I}/T$ [eq. (44)].

Finalmente, obtém-se a representação da batelada \mathbf{X}_{B+1} no primeiro plano fatorial da CC IS aplicando a PCA na matriz descrita na eq. (54), com a inclusão dos valores ${}^k \mathbf{S}_{b,B+1}$. Em outras palavras, diagonaliza-se a seguinte matriz:

$${}^k \mathbf{S} \mathbf{\Delta}_{B+1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{11} & & & \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{1B} & \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{1B+1} \\ & \ddots & & \vdots & \\ & & \ddots & \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{bB} & \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{bB+1} \\ & & & \vdots & \\ & & & \vdots & \\ & & & \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{BB} & \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{BB+1} \\ \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{(B+1)1} & \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{(B+1)b'} & & \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{(B+1)B} & \frac{1}{B} \times {}^k \mathbf{S}_{(B+1)(B+1)} \end{pmatrix}, \quad (59)$$

para $b, b' = 1, \dots, B$. A matriz $\mathbf{\Delta}$, agora de dimensão $[(B+1) \times (B+1)]$, é reescrita da seguinte forma:

$$\Delta = \begin{pmatrix} 1/B & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1/B & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/B & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1/B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (60)$$

Esta matriz corresponde à matriz da eq. (46), de dimensão $(B \times B)$, com a inclusão da $B^{\text{ésima}} + 1$ linha e $B^{\text{ésima}} + 1$ coluna, com todos os elementos iguais a zero. Dessa forma, a diagonalização da matriz ${}^k\mathbf{S}\Delta_{B+1}$ irá gerar os valores para representação da batelada nova \mathbf{X}_{B+1} no mesmo plano fatorial onde as observações \mathbf{X}_b estão representadas na CC k IS [ou seja, no mesmo par de eixos ortogonais obtidos na diagonalização da matriz ${}^k\mathbf{S}\Delta$, descrita na eq. (54)].

O par de valores que representa a projeção da batelada nova na CC k IS é dado pela eq. (56), reescrita como:

$$\mathbf{a}_{B+1} = (a_{1,B+1}, a_{2,B+1}) = (\sqrt{\lambda_1}u_{1,B+1}, \sqrt{\lambda_2}u_{2,B+1}), \quad (61)$$

onde $u_{1,B+1}$ e $u_{2,B+1}$ representam, respectivamente, o $B^{\text{ésimo}} + 1$ elemento dos autovetores \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 , e λ_1 e λ_2 os seus autovalores associados.

Essa representação indica o grau de correlação no contexto não linear entre as P variáveis da nova batelada \mathbf{X}_{B+1} e das bateladas de referência \mathbf{X}_b , par a par. A CC k IS irá sinalizar um indício de que o processo está fora de controle estatístico quando um ponto \mathbf{a}_{B+1} estiver fora da região estabelecida. Essa situação indica evidências de que, nesta batelada, pelo menos uma dentre as P variáveis apresentou correlação não linear com as variáveis das bateladas de referência significativamente diferente do esperado.

3.3.2 Carta $k\text{CO}_t$

As CCs $k\text{CO}_t$ propostas apresentam a estrutura de compromisso das matrizes ${}^k\mathbf{W}_b$, descrita na matriz ${}^k\mathbf{W}$ [eq. (55)], no primeiro plano fatorial resultante da aplicação da PCA

nesta matriz. A representação das B matrizes de referência ${}^k \mathbf{W}_b$ (que trazem uma correlação padrão não linear entre os instantes t e t' do conjunto das P variáveis das bateladas \mathbf{X}_b) no primeiro plano fatorial referente ao $t^{\text{ésimo}}$ instante é feita pelos dois autovetores $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ associados aos dois maiores autovalores δ_i de ${}^k \mathbf{W}$.

Considere então δ_1 e δ_2 representando os dois maiores autovalores e $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_2$ seus respectivos autovetores associados. Através da equação eq. (51), obtêm-se então as coordenadas do $t^{\text{ésimo}}$ instante da $b^{\text{ésima}}$ batelada no primeiro plano fatorial das CCs $k\text{CO}_t$, que são dadas por:

$$\mathbf{c}_t^b = (c_{1,t}^b, c_{2,t}^b) = \left(\frac{1}{\sqrt{\delta_1}} \frac{1}{T} {}^k \mathbf{w}_t^b \boldsymbol{\varepsilon}_1, \frac{1}{\sqrt{\delta_2}} \frac{1}{T} {}^k \mathbf{w}_t^b \boldsymbol{\varepsilon}_2 \right), \text{ para } t=1, \dots, T, \quad (62)$$

onde ${}^k \mathbf{w}_t^b$ representa a $t^{\text{ésima}}$ linha da matriz ${}^k \mathbf{W}_b$.

As CCs $k\text{CO}_t$ descrevem, no primeiro plano fatorial, a configuração de referência das b bateladas ${}^k \mathbf{W}_b$, obtidas num processo sob controle estatístico, ou seja, o comportamento temporal padrão do conjunto das P variáveis em uma batelada conforme. O erro relativo de representação da *intra-estrutura* é dado pela seguinte *função perda*:

$$FP_{\text{INTRA}} = \frac{\sum_{i=3}^T \delta_i}{\sum_{i=1}^T \delta_i} \times 100. \quad (63)$$

O procedimento para a obtenção da região de controle para as CCs $k\text{CO}_t$ é análogo ao da CC IS. Inicialmente, calculam-se as distâncias $D_{d,t}$, utilizando a eq. (58) em relação aos vetores \mathbf{c}_t^b . A seguir, utiliza-se o procedimento descrito na seção anterior e obtém-se, assim, uma região de controle a partir do ajuste de curvas do tipo *B-spline*.

3.3.2.1 Controle *Off-Line* através das CCs $k\text{CO}_t$

Analogamente à CC $k\text{IS}$, determina-se a região de controle das CCs CO_t a partir das bateladas de referência, com probabilidade α de alarme falso. Considere novamente a matriz

\mathbf{X}_{B+1} , cujos dados foram padronizados e a matriz ${}^k\mathbf{W}_{B+1}$ (com ${}^k\mathbf{W}_{B+1} / \sqrt{\text{Tr}(\mathbf{D} \times {}^k\mathbf{W}_{B+1} \times \mathbf{D} \times {}^k\mathbf{W}_{B+1})}$ no lugar de ${}^k\mathbf{W}_{B+1}$).

A representação, no $t^{\text{ésimo}}$ instante, do comportamento temporal das P variáveis em \mathbf{X}_{B+1} na carta $k\text{CO}_t$ é obtida através da eq. (62), reescrita da seguinte forma:

$$\mathbf{c}_t^{B+1} = (c_{1,t}^{B+1}, c_{2,t}^{B+1}) = \left(\frac{1}{\sqrt{\delta_1}} \frac{1}{T} {}^k\mathbf{w}_t^{B+1} \boldsymbol{\varepsilon}_1, \frac{1}{\sqrt{\delta_2}} \frac{1}{T} {}^k\mathbf{w}_t^{B+1} \boldsymbol{\varepsilon}_2 \right), \text{ para } t=1, \dots, T, \quad (64)$$

onde ${}^k\mathbf{w}_t^{B+1}$ representa a $t^{\text{ésima}}$ linha da matriz ${}^k\mathbf{W}_{B+1}$.

As CCs $k\text{CO}_t$ irão indicar que o processo está fora de controle estatístico quando um ponto \mathbf{c}_t^{B+1} , para $t=1, \dots, T$, estiver fora da região estabelecida. Essa situação indica evidências de que, no transcurso da nova batelada, o comportamento temporal não linear do conjunto das P variáveis diferiu significativamente em relação ao esperado (isto é, em relação ao descrito na matriz de compromisso ${}^k\mathbf{W}$).

3.3.3 Controle On-Line

O controle *on-line* de uma batelada nova é realizado durante sua progressão no tempo a cada instante $t^* \leq T$, onde t^* corresponde ao mais recente instante de tempo no qual as P variáveis de processo foram amostradas. Assim, apenas uma parte da matriz de dados \mathbf{X}_{B+1} está disponível, e as informações faltantes devem ser estimadas de alguma maneira. O critério que será usado é análogo ao que foi proposto por Fogliatto & Niang (2008).

Inicialmente, define-se a matriz incompleta de dados $\tilde{\mathbf{X}}_{B+1}$ da seguinte forma:

$$\tilde{\mathbf{X}}_{B+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^{B+1} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_g^{B+1} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{t^*}^{B+1} \\ \mathbf{x}_{t^*+1}^{B+1} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_q^{B+1} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_T^{B+1} \end{bmatrix}, \quad (65)$$

onde os vetores linha \mathbf{x}_g^{B+1} , de dimensão $(1 \times P)$, para $1 \leq g \leq t^*$, contém observações disponíveis das P variáveis até o instante atual t^* da batelada; e \mathbf{x}_q^{B+1} , para $t^*+1 \leq q \leq T$, representam vetores de observações ainda não disponíveis, relativas aos instantes futuros da batelada em curso.

No passo seguinte, obtém-se a matriz ${}^k \tilde{\mathbf{W}}_{B+1} = \tilde{\mathbf{X}}_{B+1} (\tilde{\mathbf{X}}_{B+1})'$, de dimensão $(T \times T)$, contendo os produtos internos entre os vetores linha de $\tilde{\mathbf{X}}_{B+1}$ dados pelo kernel escolhido. Entretanto, diferentemente da matriz ${}^k \mathbf{W}_{B+1}$ obtida a partir da matriz completa \mathbf{X}_{B+1} , descrita na expressão (52), a matriz ${}^k \tilde{\mathbf{W}}_{B+1}$ apresenta apenas uma sub-matriz, de dimensão $(t^* \times t^*)$, trazendo as informações disponíveis na matriz $\tilde{\mathbf{X}}_{B+1}$. Os elementos das demais sub-matrizes de ${}^k \tilde{\mathbf{W}}_{B+1}$ dependem de \mathbf{x}_q^{B+1} e são estimados a partir da matriz de compromisso ${}^k \mathbf{W}$, apresentada na expressão (55). A idéia é verificar o comportamento temporal da batelada nova até o instante atual t^* , assumindo que nos próximos instantes da batelada as variáveis tenham um comportamento dentro do padrão apresentado nas B bateladas de referência.

Explicitamente, pode-se escrever a matriz ${}^k \tilde{\mathbf{W}}_{B+1}$ particionada como se segue:

$${}^k \tilde{\mathbf{W}}_{B+1} = \begin{pmatrix} \begin{matrix} \ddots & & & \\ & k(\mathbf{x}_g^{B+1}, \mathbf{x}_{g'}^{B+1}) & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots \end{matrix} & \begin{matrix} \ddots & & & \\ & \sum_{b=1}^B \alpha_b k(\mathbf{x}_g^b, \mathbf{x}_q^b) & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots \end{matrix} \\ \begin{matrix} \ddots & & & \\ & \sum_{b=1}^B \alpha_b k(\mathbf{x}_q^b, \mathbf{x}_g^b) & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots \end{matrix} & \begin{matrix} \ddots & & & \\ & \sum_{b=1}^B \alpha_b k(\mathbf{x}_q^b, \mathbf{x}_{q'}^b) & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots \end{matrix} \end{pmatrix} \quad (70)$$

Observa-se que os elementos das sub-matrizes que deveriam ser obtidos pelos produtos internos $k(\mathbf{x}_g^{B+1}, \mathbf{x}_q^{B+1})$, $k(\mathbf{x}_q^{B+1}, \mathbf{x}_g^{B+1})$ e $k(\mathbf{x}_q^{B+1}, \mathbf{x}_{q'}^{B+1})$ não estão disponíveis, e, portanto, são estimados através da média dos produtos internos $k(\mathbf{x}_g^b, \mathbf{x}_q^b)$ e $k(\mathbf{x}_q^b, \mathbf{x}_{q'}^b)$, respectivamente, descritos na matriz de compromisso ${}^k \mathbf{W}$.

A operacionalização do controle *on-line* via CC *kIS* é realizada através da matriz ${}^k \mathbf{S}\mathbf{\Delta}_{B+1}$ [expressões (53), (59) e (60)], obtida a partir da matriz apresentada na expressão (66). Após realizar a PCA em ${}^k \mathbf{S}\mathbf{\Delta}_{B+1}$, a representação da batelada nova nas coordenadas $(a_{1,B+1}, a_{2,B+1})$ é obtida através da expressão (61). Monitora-se, dessa forma, a correlação no contexto não linear entre as P variáveis da nova batelada $\tilde{\mathbf{X}}_{B+1}$ e das bateladas de referência até o instante t^* .

O controle *on-line* via CCs $k\text{CO}_t$ (que passam agora a ser denominadas por CCs $k\text{CO}_{t^*}$) é realizado utilizando os vetores linha ${}^k \tilde{\mathbf{w}}_t^{B+1}$ da matriz ${}^k \tilde{\mathbf{W}}_{B+1}$ descrita na expressão (66). Após aplicar a PCA na matriz de compromisso ${}^k \tilde{\mathbf{W}}$, obtêm-se as coordenadas $(c_{1,t}^{B+1}, c_{2,t}^{B+1})$ para representação da batelada nova através da expressão (64), reescrita da seguinte forma:

$$\mathbf{c}_t^{B+1} = (c_{1,t}^{B+1}, c_{2,t}^{B+1}) = \left(\frac{1}{\sqrt{\delta_1}} \frac{1}{T} {}^k \tilde{\mathbf{w}}_t^{B+1} \boldsymbol{\varepsilon}_1, \frac{1}{\sqrt{\delta_2}} \frac{1}{T} {}^k \tilde{\mathbf{w}}_t^{B+1} \boldsymbol{\varepsilon}_2 \right), \text{ para } t=1, \dots, T, \quad (67)$$

onde ${}^k \tilde{\mathbf{w}}_t^{B+1}$ representa a $t^{\text{ésima}}$ linha da matriz ${}^k \tilde{\mathbf{W}}_{B+1}$. Monitora-se dessa forma o comportamento temporal não linear das P variáveis no transcurso da batelada até o instante t^* .

3.3.4 Diagnóstico

Na seção 2.2.4 foram citados alguns procedimentos *a posteriori* para diagnóstico de distúrbios no processo (isto é, de causas especiais de variação) em relação às CCs baseadas em KMPCA. Esta seção apresenta uma abordagem de diagnóstico em relação às CCs baseadas no Kernel-Statist, descritas acima. Dada uma causa especial de variação assinalada pelas CCs kCO_t (ou kCO_{t^*} no controle *on-line*), as variáveis que apresentaram maiores desvios em relação ao padrão preestabelecido (descrito na matriz ${}^k \mathbf{W}$ de compromisso) são identificadas através do emprego do *Statis Dual*.

O *Statis Dual* (citado na seção 2.3.2) consiste na análise Statist das matrizes $\mathbf{V}_b = \mathbf{X}_b' \mathbf{X}_b$ no lugar de $\mathbf{W}_b = \mathbf{X}_b \mathbf{X}_b'$ (ou ${}^k \mathbf{W}_b$ no Kernel-Statist), onde \mathbf{X}_b representa a conhecida matriz de dados, de dimensão $T \times P$, da $b^{\text{ésima}}$ batelada. A partir dessa análise obtêm-se as CCs CO_p para auxiliar no diagnóstico de desconcontroles apontados pelas CCs kCO_t .

Considerando novamente que os dados da matriz \mathbf{X}_b estão padronizados, a matriz \mathbf{V}_b , de dimensão $P \times P$, traz as correlações em par entre as variáveis p e p' , para $p=1, \dots, P$. As matrizes \mathbf{V}_b são usadas para obter uma caracterização do desempenho padrão de cada variáveis no conjunto dos instantes através da matriz de compromisso \mathbf{V} (semelhante a análise da *intra-estrutura* realizada a partir das matrizes \mathbf{W}_b , descrita na seção 2.3.3).

Primeiramente, obtêm-se a matriz $\mathbf{R}\mathbf{\Lambda}$ dos produtos internos entre as matrizes \mathbf{V}_b . Analogamente ao que foi descrito na expressão (43), tem-se $\mathbf{R}_{bb'} = \langle \mathbf{V}_b | \mathbf{V}_{b'} \rangle_{HS} = Tr(\mathbf{D}\mathbf{V}_b \mathbf{D}\mathbf{V}_{b'})$, onde $\mathbf{R}_{bb'}$ representa o produto interno canônico de Hilbert-Schmidt. Admite-se que as variáveis tenham mesmo peso de importância na análise, $\mathbf{D}=\mathbf{I}/P$ [eq. (44) adaptada para o *Statis Dual*]. Considera-se também que as bateladas de referência tenham mesmo peso de importância, $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{I}/B$ [eq. (46)]. Dado que as matrizes \mathbf{V}_b estão normalizadas (isto é, com $\mathbf{V}_b / \sqrt{Tr(\mathbf{D}\mathbf{V}_b \mathbf{D}\mathbf{V}_b)}$ no lugar de \mathbf{V}_b) a diagonal principal de $\mathbf{R}\mathbf{\Lambda}$ é dada por $1/B$.

Em seguida, aplica-se a PCA na matriz $\mathbf{R}\Delta$ para obter o autovetor \mathbf{h}_1 de maior autovalor ζ_1 . A partir disso, define-se a matriz de compromisso $\mathbf{V} = \sum_{b=1}^B \beta_b \mathbf{V}_b$, onde $\beta_b = \frac{1}{\sqrt{\zeta_1}} \frac{1}{B} h_{1,b}$, com $h_{1,b}$ representando o $b^{\text{ésimo}}$ elemento do vetor \mathbf{h}_1 , referente à $b^{\text{ésima}}$ batelada. A matriz \mathbf{V} contém a estrutura de correlação média ou de compromisso entre as variáveis no conjunto dos instantes.

Para obter uma caracterização desta estrutura em um número reduzido de eixos ortogonais, aplica-se a PCA na matriz $\mathbf{V}\mathbf{D}$ para gerar os maiores autovalores θ_i e respectivos autovetores \mathbf{g}_i (com $i=1,\dots,P$). A estrutura de correlação das variáveis contidas em \mathbf{V}_b é representada em novos eixos ortogonais de maneira semelhante ao descrito na expressão (51). Obtém-se então $y_{i,p}^b = \frac{1}{\sqrt{\theta_i}} \frac{1}{P} \mathbf{v}_p^b \mathbf{g}'_i$, onde \mathbf{g}'_i é o vetor transposto do vetor linha \mathbf{g}_i , v_p^b representa a $p^{\text{ésima}}$ linha de \mathbf{V}_b e $y_{i,p}^b$ é o valor que representa a posição no $i^{\text{ésimo}}$ eixo ortogonal da $p^{\text{ésima}}$ variável na $b^{\text{ésima}}$ batelada.

As CCs CO_p são então construídas contendo a estrutura de correlação padrão das variáveis no primeiro plano fatorial resultante da aplicação da PCA na matriz $\mathbf{V}\mathbf{D}$.

Considere θ_1 e θ_2 representando os dois maiores autovalores, e \mathbf{g}_1 e \mathbf{g}_2 seus respectivos autovetores associados. Analogamente ao que foi descrito na expressão (62), entretanto sem a utilização de kernels, obtêm-se então as coordenadas da $p^{\text{ésima}}$ variável da $b^{\text{ésima}}$ batelada no primeiro plano fatorial da CC CO_p , que são dadas por:

$$\mathbf{c}_p^b = (c_{1,p}^b, c_{2,p}^b) = \left(\frac{1}{\sqrt{\theta_1}} \frac{1}{P} \mathbf{v}_p^b \mathbf{g}_1, \frac{1}{\sqrt{\theta_2}} \frac{1}{P} \mathbf{v}_p^b \mathbf{g}_2 \right), \text{ para } p=1,\dots,P, \quad (68)$$

onde \mathbf{v}_p^b representa a $p^{\text{ésima}}$ linha da matriz \mathbf{V}_b .

O procedimento para determinação da região de controle das CCs CO_p é o mesmo das CCs $k\text{CO}_t$ descrito na seção 3.3.1. Resumidamente, a partir dos pontos \mathbf{c}_p^b , obtém-se uma região de controle ajustando uma curva do tipo *spline* ao *convex hull* gerado a partir das b bateladas de referência.

O diagnóstico *off-line* de uma nova batelada \mathbf{X}_{B+1} é realizado comparando a estrutura de correção das variáveis contida na matriz \mathbf{V}_{B+1} com a estrutura de referência contida nas CCs CO_p . A representação da $p^{\text{ésima}}$ variável em \mathbf{X}_{B+1} na carta é obtida através da expressão (68), reescrita da seguinte forma:

$$\mathbf{c}_p^{B+1} = (c_{1,p}^{B+1}, c_{2,p}^{B+1}) = \left(\frac{1}{\sqrt{\theta_1}} \frac{1}{P} \mathbf{v}_p^{B+1} \mathbf{g}_1, \frac{1}{\sqrt{\theta_2}} \frac{1}{P} \mathbf{v}_p^{B+1} \mathbf{g}_2 \right), \text{ para } p=1, \dots, P, \quad (69)$$

onde \mathbf{v}_p^{B+1} representa a $p^{\text{ésima}}$ linha da matriz \mathbf{V}_{B+1} .

O controle *off-line* efetivamente é realizado através do uso combinado das CCs $k\text{CO}_t$ e CO_p . Através das CCs $k\text{CO}_t$, verifica-se se o comportamento temporal do conjunto das variáveis transcorreu dentro do padrão esperado; enquanto que nas CCs CO_p verifica-se as variáveis que apresentaram comportamento diferente do esperado no conjunto dos instantes. Entretanto, o diagnóstico fica comprometido, pois, por exemplo, dado um sinal de processo fora de controle apontado nas CC $k\text{CO}_{t^*}$ para $t=7$ (isto é, no instante 7 da batelada nova), não se sabe se um eventual desvio atípico apontado pela CC CO_p para $p=3$ (isto é, na variável x_3) aconteceu naquele instante (isto é, no instante 7). Este problema é minimizado através do diagnóstico *on-line*.

O diagnóstico *on-line* é realizado através das CCs CO_p adaptadas para o monitoramento *on-line* realizado pelas CCs $k\text{CO}_{t^*}$, descritas na seção 3.3.3, onde $t^* \leq T$ representa o mais recente instante de tempo da batelada nova em curso. As CCs CO_p adaptadas (que neste caso são denominadas por CO_{p^*}) são obtidas utilizando a matriz $\tilde{\mathbf{V}}_{B+1} = (\tilde{\mathbf{X}}_{B+1})' \tilde{\mathbf{X}}_{B+1}$ no lugar de \mathbf{V}_{B+1} , onde $\tilde{\mathbf{X}}_{B+1}$ representa a matriz incompleta de dados definida na expressão (65).

A matriz $\tilde{\mathbf{V}}_{B+1}$ traz as correlações em par entre as P variáveis no conjunto dos instantes, obtidas até o instante t^* . A estrutura contida na matriz \mathbf{V}_{B+1} é comparada através das CCs CO_{p^*} com a estrutura de correlação de referência das variáveis até o instante t^* , obtida a partir das matrizes $\tilde{\mathbf{V}}_b$ das bateladas de referência. As regiões de controle das CCs CO_{p^*} são determinadas analogamente ao que foi descrito para as CCs $k\text{CO}_{t^*}$.

A representação da $p^{\text{ésima}}$ variável em $\tilde{\mathbf{X}}_{B+1}$ na carta é obtida através da expressão (69), reescrita da seguinte forma:

$$\mathbf{c}_p^{B+1} = (c_{1,p}^{B+1}, c_{2,p}^{B+1}) = \left(\frac{1}{\sqrt{\theta_1}} \frac{1}{P} \tilde{\mathbf{v}}_p^{B+1} \mathbf{g}_1, \frac{1}{\sqrt{\theta_2}} \frac{1}{P} \tilde{\mathbf{v}}_p^{B+1} \mathbf{g}_2 \right), \quad (70)$$

onde $\tilde{\mathbf{v}}_p^{B+1}$ representa a $p^{\text{ésima}}$ linha da matriz $\tilde{\mathbf{V}}_{B+1}$.

É importante entender que o procedimento de controle via CCs $k\text{CO}_t$ (ou $k\text{CO}_{t^*}$ para o controle *on-line*) considera correlações não lineares das P variáveis tempo a tempo, pois utilizam as matrizes \mathbf{W}_b (ou $\tilde{\mathbf{W}}_b$) modificadas com a inclusão de uma função não linear $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$ dos dados (matrizes ${}^k\mathbf{W}_b$ ou ${}^k\tilde{\mathbf{W}}_b$). Ressalta-se que essas matrizes são originalmente do tipo \mathbf{K} [como definido na eq. (11)], onde cada elemento representa o produto interno entre observações, modificado por um kernel $k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b) = \langle \Phi(\mathbf{x}_t^b), \Phi(\mathbf{x}_{t'}^b) \rangle$. Entretanto, o procedimento de diagnóstico apresentado acima via CCs CO_p (ou CO_{p^*} para controle *on-line*) considera apenas correlações lineares entre as variáveis, visto que utiliza a clássica matriz de correlação linear \mathbf{V}_b (ou $\tilde{\mathbf{V}}_b$). Diferentemente das matrizes \mathbf{W}_b , as matrizes \mathbf{V}_b são do tipo \mathbf{S} [como definido na eq. (13)], isto é, cujos elementos representam produtos internos entre vetores de variáveis, e não entre vetores de observações. A seção 2.1.6 apresentou uma modificação algébrica na matriz \mathbf{S} , escrevendo esta matriz como uma matriz \mathbf{K} para a KPCA. Tal como foi feito para KPCA, deve ser desenvolvida uma modificação nas matrizes \mathbf{V}_b que permita a inclusão de funções kernels $k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b)$ das observações para diagnóstico não linear através do Kernel-Statist (matrizes ${}^k\mathbf{V}_b$, assim como ${}^k\mathbf{W}_b$). O desenvolvimento de CCs $k\text{CO}_p$ (*kernel* CO_p) que considerem correlações não lineares entre as variáveis devem ser propostas em trabalhos futuros.

Este trabalho propõe uma abordagem para diagnóstico não linear que trabalha diretamente no espaço característico F dos vetores de observações $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$, definidos a partir do mapa Φ polinomial (descrito na seção 2.1.3).

Sem perda de generalidade, suponha duas variáveis de análise Z_1 e Z_2 ($P=2$). Obtém-se então, para cada vetor $\mathbf{x}_t^b = ([\mathbf{x}_t^b]_1, [\mathbf{x}_t^b]_2)$, o vetor

$\Phi(\mathbf{x}_t^b) = ([\mathbf{x}_t^b]_1, [\mathbf{x}_t^b]_2, [\mathbf{x}_t^b]_1^2, [\mathbf{x}_t^b]_2^2, [\mathbf{x}_t^b]_1[\mathbf{x}_t^b]_2)$, contendo todos os produtos de segunda ordem dos elementos de \mathbf{x}_t^b . Observe que o vetor $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$ é obtido a partir do mapa polinomial de segunda ordem [descrito na eq. (7)], com a inclusão dos elementos $[\mathbf{x}_t^b]_1, [\mathbf{x}_t^b]_2$ do vetor \mathbf{x}_t^b . Ressalta-se que o kernel polinomial de ordem d [eq. (8)] proposto para confecção das CCs kIS e kCO_t é definido a partir desse mapa para $d=2$.

A partir daí, redefine-se a matriz \mathbf{X}_b , de dimensão $T \times N_F$ (com $N_F=5$, para $P=2$ e $d=2$), contendo em suas linhas T vetores $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$. Tem-se então explicitamente a seguinte matriz:

$$\mathbf{X}_b = \begin{array}{c} \Phi(\mathbf{x}_1^b) \\ \vdots \\ \Phi(\mathbf{x}_t^b) \\ \vdots \\ \Phi(\mathbf{x}_T^b) \end{array} \begin{array}{ccccc} & \mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_2 & \underbrace{\mathbf{z}_3}_{\langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_1 \rangle} & \underbrace{\mathbf{z}_4}_{\langle \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_2 \rangle} & \underbrace{\mathbf{z}_5}_{\langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2 \rangle} \\ \left[\begin{array}{ccccc} [\mathbf{x}_1^b]_1 & [\mathbf{x}_1^b]_2 & [\mathbf{x}_1^b]_1^2 & [\mathbf{x}_1^b]_2^2 & [\mathbf{x}_1^b]_1[\mathbf{x}_1^b]_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ [\mathbf{x}_t^b]_1 & [\mathbf{x}_t^b]_2 & [\mathbf{x}_t^b]_1^2 & [\mathbf{x}_t^b]_2^2 & [\mathbf{x}_t^b]_1[\mathbf{x}_t^b]_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ [\mathbf{x}_T^b]_1 & [\mathbf{x}_T^b]_2 & [\mathbf{x}_T^b]_1^2 & [\mathbf{x}_T^b]_2^2 & [\mathbf{x}_T^b]_1[\mathbf{x}_T^b]_2 \end{array} \right] \end{array} \quad (71)$$

Obtém-se então a matriz $\mathbf{V}_b = \mathbf{X}_b' \mathbf{X}_b$, de dimensão $N_F \times N_F$ (neste caso restrito, 5×5), contendo em seus elementos os produtos internos entre os vetores \mathbf{z}_p , para $p=1, \dots, 5$, onde \mathbf{z}_1 traz os dados da variável Z_1 , \mathbf{z}_2 traz os dados da variável Z_2 , e $\mathbf{z}_3, \mathbf{z}_4, \mathbf{z}_5$ são vetores que trazem os termos quadráticos dos vetores \mathbf{z}_1 e \mathbf{z}_2 . Explicitamente, tem-se:

$$\mathbf{V}_b = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_1 \rangle & \langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2 \rangle & \langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_3 \rangle & \langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_4 \rangle & \langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_5 \rangle \\ \langle \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_1 \rangle & \langle \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_2 \rangle & \langle \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_3 \rangle & \langle \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_4 \rangle & \langle \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_5 \rangle \\ \langle \mathbf{z}_3, \mathbf{z}_1 \rangle & \langle \mathbf{z}_3, \mathbf{z}_2 \rangle & \langle \mathbf{z}_3, \mathbf{z}_3 \rangle & \langle \mathbf{z}_3, \mathbf{z}_4 \rangle & \langle \mathbf{z}_3, \mathbf{z}_5 \rangle \\ \langle \mathbf{z}_4, \mathbf{z}_1 \rangle & \langle \mathbf{z}_4, \mathbf{z}_2 \rangle & \langle \mathbf{z}_4, \mathbf{z}_3 \rangle & \langle \mathbf{z}_4, \mathbf{z}_4 \rangle & \langle \mathbf{z}_4, \mathbf{z}_5 \rangle \\ \langle \mathbf{z}_5, \mathbf{z}_1 \rangle & \langle \mathbf{z}_5, \mathbf{z}_2 \rangle & \langle \mathbf{z}_5, \mathbf{z}_3 \rangle & \langle \mathbf{z}_5, \mathbf{z}_4 \rangle & \langle \mathbf{z}_5, \mathbf{z}_5 \rangle \end{bmatrix} \quad (72)$$

A matriz \mathbf{V}_b definida na eq. (72), permite a investigação de correlações não lineares (quadráticas) entre as variáveis Z_1 e Z_2 . Ressalta-se que a matriz \mathbf{V}_b não contém produtos internos do tipo $\langle \Phi(\mathbf{x}_t^b), \Phi(\mathbf{x}_t^b) \rangle$ nos seus elementos, pois essa matriz é do tipo \mathbf{S} e não do tipo

K. Dessa forma, não se pode incluir, por exemplo, um kernel polinomial $k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b) = \langle \Phi(\mathbf{x}_t^b), \Phi(\mathbf{x}_{t'}^b) \rangle = \langle \mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b \rangle^d$ nesta matriz.

Considere novamente uma batelada nova sob investigação. Tem-se dessa forma uma matriz \mathbf{X}_{B+1} , de dimensão $T \times 5$, tal como definido na eq. (71).

O diagnóstico *off-line* para pontos fora de controle de \mathbf{X}_{B+1} apontados pelas cartas CCs kCO_t é realizado através das CCs CO_p apresentadas acima, utilizando a eq. (69), substituindo P por N_F (neste caso restrito, $N_F = 5$). As CCs CO_1 e CO_2 refletem a estrutura de correlação linear entre Z_1 e Z_2 , e as CCs CO_3 , CO_4 e CO_5 trazem as correlações quadráticas entre as variáveis Z_1 e Z_2 .

Analogamente, o diagnóstico *on-line* para descontroles em $\tilde{\mathbf{X}}_{B+1}$ (matriz incompleta definida nesta seção) apontados pelas CCs kCO_{t^*} é realizado através das CCs CO_{p^*} apresentadas acima, utilizando a eq. (70), substituindo P por N_F (aqui, $N_F = 5$).

3.4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este capítulo apresentou uma metodologia de controle para monitoramento de processos em bateladas que utiliza CCs baseadas no Kernel-Statís. O método consiste na utilização das CCs kIS e kCO_t para monitorar o desempenho de variáveis de processo a partir de funções $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$ das observações \mathbf{x}_t^b (descritas nas matrizes \mathbf{X}_b), definidas através do mapa não linear Φ polinomial. As observações $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$, neste contexto, representam o vetor \mathbf{x}_t^b aumentado em um espaço F contendo os produtos de ordem d dos seus elementos. Entretanto, conforme visto, os dados $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$ estão sendo analisados sem acessar diretamente o espaço F , através da utilização do kernel polinomial $k(\mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b) = \langle \Phi(\mathbf{x}_t^b), \Phi(\mathbf{x}_{t'}^b) \rangle = \langle \mathbf{x}_t^b, \mathbf{x}_{t'}^b \rangle^d$.

Finalmente, ressalta-se que a utilização das CCs baseadas no Statís (CCs IS e CO_t) já estão descritas na literatura. A proposta original é de Scepi (2002). Fogliatto & Niang (2008) acrescentaram à proposta o monitoramento de *processos em bateladas de tempo variável* e o monitoramento *on-line*. Diante disso, a contribuição apresentada nesta seção está relacionada

à inclusão de kernels (kernel polinomial, proposto aqui) para análise não linear, e ao desenvolvimento de procedimentos para diagnóstico não linear através das CCs CO_p .

4 ESTUDO DE CASO SIMULADO

Este capítulo apresenta uma aplicação da metodologia Kernel-Stats em um processo por bateladas, simulado a partir de um sistema não linear de equações com duas variáveis. A seção 4.1 descreve o sistema e suas peculiaridades, e apresenta a configuração de parâmetros utilizada para gerar as bateladas de referência. A seção 4.2 apresenta a análise da *inter-estrutura* dos dados, comparando o desempenho das CCs kIS e IS em relação a probabilidade de alarme falso; a primeira utiliza kernels e a segunda utiliza a abordagem tradicional. Analogamente, a seção 4.3 apresenta a análise de *intra-estrutura* dos dados, comparando o desempenho das CCs kCO_t e CO_t no monitoramento *on-line* de bateladas contendo descontroles impostos no sistema. A seção 4.4 apresenta algumas considerações finais.

4.1 SISTEMA E BATELADAS DE REFERÊNCIA

Considere um processo industrial em bateladas fictício, cujo desempenho pode ser avaliado através de duas variáveis correlacionadas X_1 e X_2 . Suponha que as leis físicas que regem esse processo são descritas pelo seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = a(x_1 - c_1) - b(x_2 - c_2) \\ \dot{x}_2 = b(x_1 - c_1) + a(x_2 - c_2) + nl(x_1 - c_1)(x_2 - c_2) \end{cases}, \quad (73)$$

onde a , b e nl são constantes reais e os pontos sobre as variáveis denotam derivadas temporais de X_1 e X_2 . Note que o sistema da eq. (73) é uma perturbação não linear do sistema linear abaixo,

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = a(x_1 - c_1) - b(x_2 - c_2) \\ \dot{x}_2 = b(x_1 - c_1) + a(x_2 - c_2). \end{cases} \quad (74)$$

O sistema na eq. (74) tem o ponto (c_1, c_2) como ponto de equilíbrio. Os dois autovalores associados são números complexos; i.e., $\lambda_{1,2} = a \pm ib$. Assim, tem-se um comportamento oscilatório em torno do ponto de equilíbrio (c_1, c_2) , que é estável se $a < 0$ e instável se $a > 0$. O coeficiente nl define o grau de perturbação na não linearidade.

Para transformar a eq. (74) numa forma iterativa, adotou-se o esquema de Euler (PATEL, 1993), o que as transforma em:

$$\begin{cases} x_{1t+1} = x_{1t} + [a(x_{1t} - c_1) - b(x_{2t} - c_2)]\Delta t \\ x_{2t+1} = x_{2t} + [(bx_{1t} - c_1) + (ax_{2t} - c_2) + nl(x_{1t} - c_1)(x_{2t} - c_2)]\Delta t. \end{cases} \quad (75)$$

Para as simulações das bateladas de referência, foram adotados os seguintes valores para os coeficientes da eq. (75): $a = -1$, $b = 2$, $c_1=10$, $c_2=20$ e diferentes valores para nl (que serão descritos mais adiante). Neste trabalho, Δt é suficientemente pequeno, tal que a eq. (75) seja uma aproximação do sistema contínuo (73). Esta configuração gerou as duas variáveis de processo com trajetórias similares às trajetórias de variáveis observadas em processos industriais.

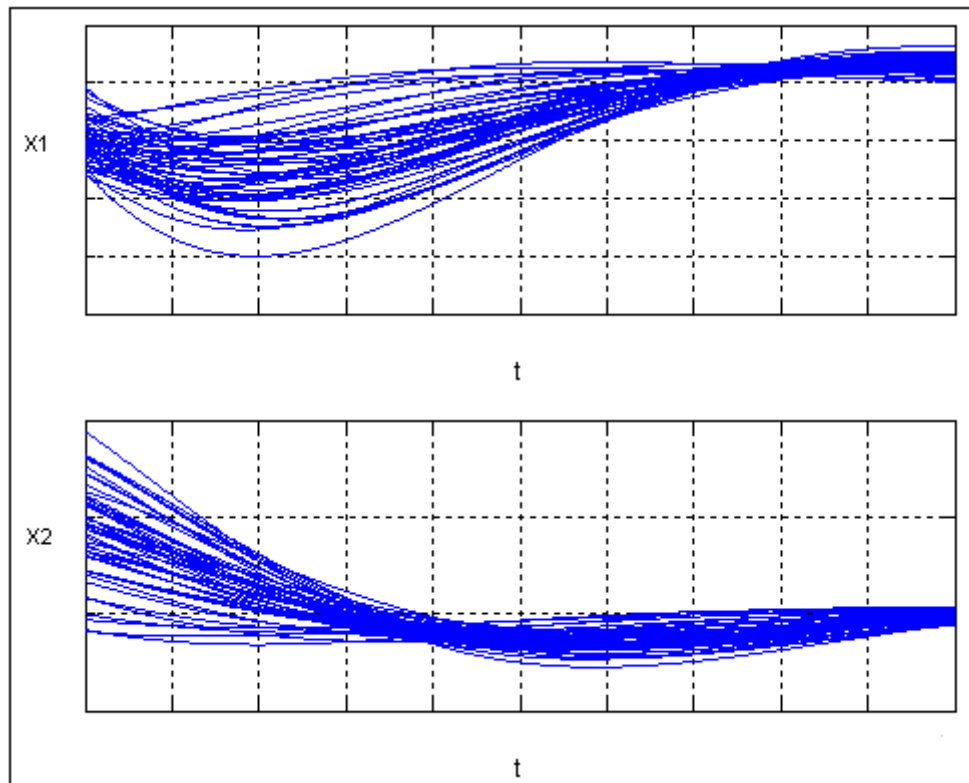


Figura 12 - Trajetórias das duas variáveis de processo amostradas em 100 bateladas de referência
Fonte – elaborada pelo autor

As trajetórias das duas variáveis envolvidas foram amostradas em $T=20$ instantes, igualmente espaçados, em bateladas distintas a partir do sistema descrito na eq. (75). Pequenas variações foram impostas nas condições iniciais, de batelada para batelada, obtendo-se assim bateladas representativas do processo sob controle estatístico. A Figura 12

apresenta as séries temporais trazendo as trajetórias das duas variáveis de processo em 100 bateladas simuladas ($B=100$), para $nl=0$.

4.2 ANÁLISE DA INTER-ESTRUTURA VIA CCs KIS E IS

Inicialmente, para mostrar que o Kernel-Statís oferece uma melhor caracterização da estrutura não linear de dados obtida do sistema em relação ao Statís tradicional, realizou-se a análise da *inter-estrutura* nos dados gerados. Sabe-se que a CC IS (derivada da análise da *inter-estrutura* tradicional) descreve resumidamente o quadrado da estrutura de correlação (no contexto estritamente linear) entre as variáveis de diferentes pares de bateladas. A correlação não linear presente nos dados é representada resumidamente nas CCs *kIS*, construídas com a utilização do kernel polinomial de segunda ordem. Nesse contexto, conforme já visto, as CCs *kIS* trazem uma caracterização resumida do quadrado da correlação não linear (quadrática) entre as variáveis de diferentes bateladas, par a par.

Os dados gerados por simulação foram analisados utilizando a abordagem tradicional (descrita na seção 2.3.2) e a abordagem que utiliza o kernel polinomial (descrita na seção 3.1) para análise dos dados gerados. Simularam-se 100 bateladas para cada valor de nl (mantendo os valores definidos acima para os demais parâmetros). A seguir, para cada valor de nl , foram construídas as CCs *kIS* utilizando a eq. (56) descrita na seção 3.3.1 (isto é, utilizando o kernel polinomial de segunda ordem, a partir de matrizes ${}^k \mathbf{W}_b$) com probabilidade nominal de alarme falso $\alpha=0,01$. No passo seguinte, as mesmas bateladas foram consideradas sob monitoramento e projetadas nas respectivas CCs *kIS* [eq. (61)]

O mesmo procedimento foi repetido para a análise Statís tradicional. Analogamente, para cada nl , a partir das 100 bateladas de referência, a CC IS foi obtida através da eq. (56), utilizando o produto interno usual (isto é, o kernel identidade, a partir de matrizes \mathbf{W}_b). Posteriormente, para cada nl , as bateladas foram projetadas nas respectivas CCs IS [eq. (61) utilizando o kernel identidade]. A Tabela 2 apresenta o quadro comparativo do desempenho das duas abordagens.

Nl	CCs kIS		CCs IS	
	Bateladas mal classificadas	Função Perda (FP_{inter})	Bateladas mal classificadas	Função Perda (FP_{inter})
0	2/100	0,002	3/100	0,0025
1	3/100	0,0024	5/100	0,0030
2	4/100	0,0027	8/100	0,0053
3	3/100	0,0030	9/100	0,0067

Tabela 2 - Quadro comparativo do desempenho das CCs kIS e IS para $\alpha=0,01$

Fonte - elaborada pelo autor

Sabe-se que o valor de nl representa o peso que é dado ao termo não linear quadrático do sistema (75). Através da Tab. 2, nota-se que para $nl=0$, isto é, sistema estritamente linear, a frequência relativa de bateladas conformes mal classificadas não difere muito do valor nominal ($\alpha=0,01$), tanto nas CCs kIS (2/100) quanto nas CCs IS (3/100). Em contrapartida, para $nl \neq 0$ pode-se observar um aumento estimado na frequência relativa de alarme falso nas CCs IS, enquanto que nas CCs kIS o valor se mantém no mesmo patamar. Isto evidencia a caracterização mais completa dos dados através da inclusão do kernel polinomial de segunda ordem na análise Statis tradicional.

Mais especificamente, a inclusão dos batimentos (produtos) de ordem 2 das variáveis X_1 e X_2 capturam, em algum grau, as não-linearidades geradas pelo termo de batimento $nlx_{1t}x_{2t}$, contido no sistema. Adicionalmente, à medida que o termo de batimento se faz mais presente (isto é, à medida que nl cresce), o ganho de precisão da CC kIS em relação a CC IS se torna mais destacado, conforme descrito pela Função Perda [eq. (57)].

4.3 ANÁLISE DA INTRA-ESTRUTURA VIA CCs kCO_t E CO_t

Nesta etapa, utilizou-se as CCs kCO_{t^*} e CO_{t^*} , derivadas da análise da *intra-estrutura*, para comparar, respectivamente, o desempenho do Kernel-Statis e do Statis

tradicional na detecção de descontroles simulados através do sistema proposto na eq. (75). Sabe-se que através das CCs CO_{t^*} obtém-se uma caracterização resumida do comportamento temporal do conjunto das variáveis. As CCs kCO_{t^*} (utilizando novamente o kernel polinomial de segunda ordem) descrevem resumidamente o comportamento temporal, no contexto não linear (quadrático) do conjunto das variáveis.

Utilizou-se então a abordagem tradicional (descrita na seção 2.3.3) e via kernel polinomial (descrita na seção 3.2) para análise dos dados gerados. Novamente, 100 bateladas de referência foram geradas, utilizando a mesma configuração de parâmetros descrita na seção 4.1, com o termo não linear $nl=0$. A partir daí, foram construídas as CCs kCO_{t^*} [utilizando a eq. (62), descrita na seção 3.3.2] com $\alpha=0,01$. Analogamente, as CCs CO_{t^*} também foram obtidas através da eq. (62) com produto interno usual (kernel identidade).

Em seguida, 10 bateladas foram simuladas com perturbações impostas na não linearidade a partir do instante 10 até o instante 14. Durante esses instantes, o valor de $nl=0$ foi substituído por $nl=3$. As bateladas foram projetadas de maneira *on-line* nas CCs kCO_{t^*} e CO_{t^*} através da eq. (67) com kernel polinomial (isto é, utilizando matrizes ${}^k\mathbf{W}_b$) e com kernel identidade (isto é, utilizando matrizes \mathbf{W}_b), respectivamente. A Figura 13 apresenta o monitoramento simultâneo das 10 bateladas via CCs CO_{t^*} e kCO_{t^*} , respectivamente.

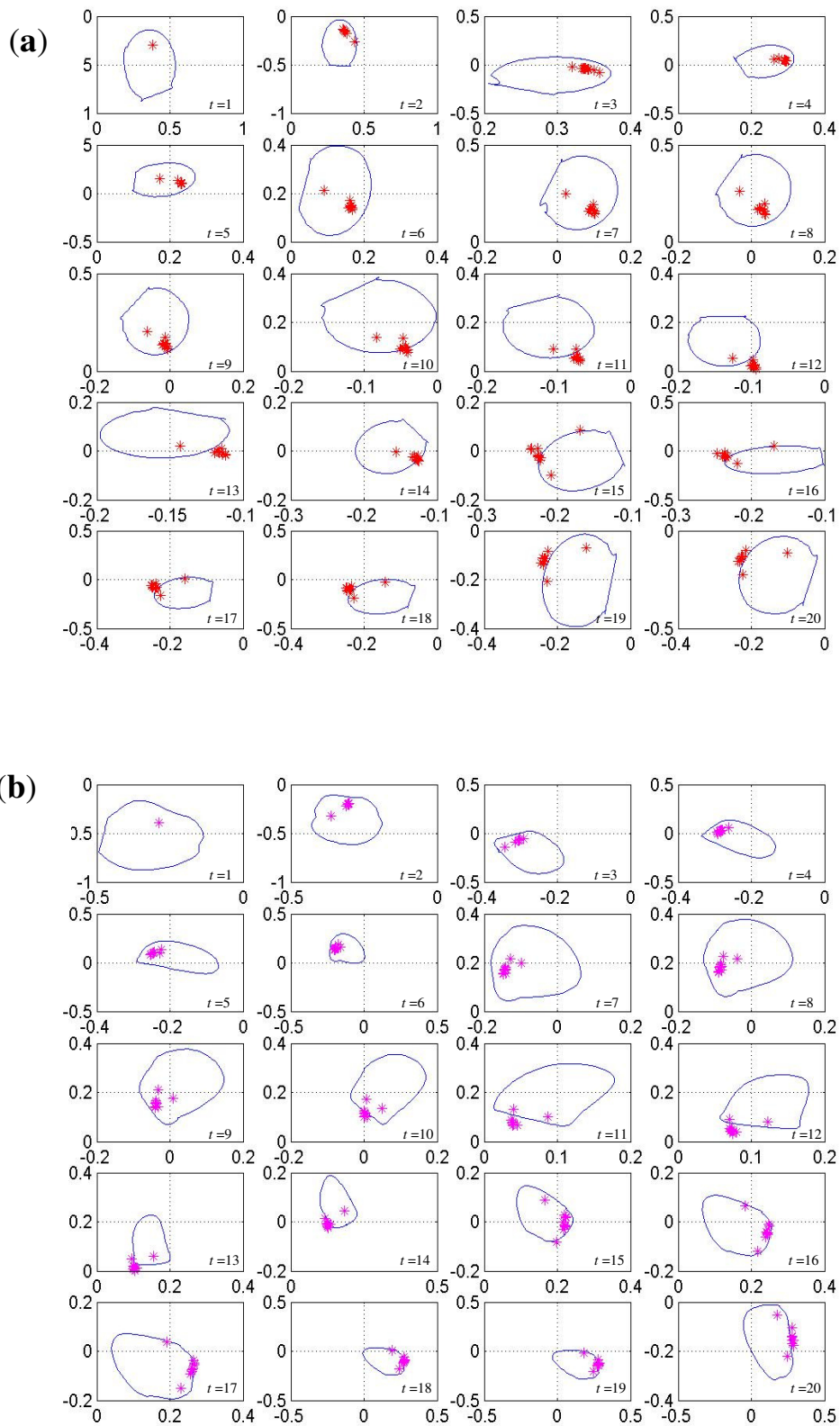


Figura 13 - **(a)** CCs CO_{t^*} e **(b)** CCs kCO_{t^*}

Fonte - elaborada pelo autor

As CCs CO_{t^*} [Fig. 13 (a)] e kCO_{t^*} [Fig. 13 (b)] apresentam a projeção das bateladas novas em ordem cronológica, ao longo das linhas, representadas por pontos em vermelho e lilás, respectivamente. Observa-se que, em ambas as abordagens, o descontrole é acusado corretamente a partir do instante 10. Entretanto, observa-se a pouca precisão nas CCs CO_{t^*} para detectar que o processo retornou ao estado sob controle no instante 15, visto que as bateladas aparecem em sua maioria fora da região de controle após esse instante. Diferentemente, as CCs kCO_{t^*} identificam que o processo está sob controle a partir do instante 15 em todas as bateladas verificadas (quando, de fato, cessaram as perturbações), exceto no último instante quando também gerou alguns alarmes falsos (isto é, bateladas mal classificadas). Estes resultados evidenciam novamente um ganho na caracterização do sistema com a utilização do kernel polinomial quando o termo $nlx_{1t}x_{2t}$ se faz presente em algum grau (neste caso, com $nl=3$). A Função Perda associada [eq. (63)] ratifica os resultados obtidos, pois $FP_{INTRA}=0,0024$ para as CCs kCO_{t^*} e $FP_{INTRA}=0,0059$ para as CCs CO_{t^*} .

4.4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Através do estudo de caso apresentado acima, verificou-se o ganho de precisão das CCs derivadas do Kernel-Statís em relação às CCs obtidas através do Statís, diante do sistema não linear apresentado. Observou-se com mais destaque nas CCs kIS , derivadas da análise da *inter-estrutura*, um ganho sobre as CCs IS na representação das não-linearidades impostas nas bateladas geradas pelo sistema. Isto se deve ao fato de que esta análise é realizada na matriz $S\Delta$ [eq. (45)] que representa diretamente a correlação entre as variáveis no agregado do tempo. Dessa forma, o kernel polinomial de segunda ordem utilizado na análise da matriz ${}^kS\Delta$ [eq. (54)] captura de fato uma estrutura de correlação não linear (quadrática) entre X_1 e X_2 através do mapa Φ , onde $\Phi(\mathbf{x}_t^b) = ([\mathbf{x}_t^b]_1, [\mathbf{x}_t^b]_2, [\mathbf{x}_t^b]_1^2, [\mathbf{x}_t^b]_2^2, [\mathbf{x}_t^b]_1[\mathbf{x}_t^b]_2)$ traz os termos de segunda ordem dos vetores das observações \mathbf{x}_t^b de X_1 e X_2 .

Através das CCs kCO_{t^*} , derivadas da análise da *intra-estrutura*, também foi observado um ganho em relação às CCs CO_{t^*} na detecção de descontroles não lineares. Entretanto, este ganho foi menos pronunciado pelo fato de que esta análise prioriza uma estrutura de correlação temporal (isto é, entre os instantes) do conjunto das variáveis (matrizes

$\mathbf{W}_b = \mathbf{X}_b \mathbf{X}_b'$). Esta estrutura é de certa forma (porém, não diretamente) capturada pelos termos $[\mathbf{x}_t^b]_1^2, [\mathbf{x}_t^b]_2^2, [\mathbf{x}_t^b]_1[\mathbf{x}_t^b]_2$, que representam produtos entre as variáveis, mas não entre instantes de tempo. Visto que as CCs $k\text{CO}_{t^*}$ têm importante papel no monitoramento, pois oferecem uma representação *on-line*, a cada instante, do conjunto das variáveis, sugere-se aqui seu uso em conjunto com a procedimento de diagnóstico apresentado na seção 3.3.4 para maior acurácia na análise de estruturas de correlação temporais não lineares nos dados.

O procedimento apresentado permite a construção de cartas CO_{p^*} a partir de matrizes $\mathbf{V}_b = \mathbf{X}_b' \mathbf{X}_b$ [eq. (72)], representando diretamente o produto entre variáveis até o instante mais atual t^* . A estrutura de correlação não linear é novamente capturada pelos termos de segunda ordem $[\mathbf{x}_t^b]_1^2, [\mathbf{x}_t^b]_2^2, [\mathbf{x}_t^b]_1[\mathbf{x}_t^b]_2$ adicionados na análise. Apesar de não oferecer uma representação em cada instante como nas CCs $k\text{CO}_{t^*}$, as CCs CO_{p^*} permitem uma representação de cada variável (isto é, de X_1 , X_2 e das variáveis de análise compostas pelos termos de segunda ordem de X_1 e X_2 , conforme descrito na seção 3.3.4) até o instante mais atual. A utilização conjunta das CCs $k\text{CO}_{t^*}$ e CO_{p^*} deve, assim, melhorar a representação de correlações não-linearidades temporais incluídas nos dados. A validação da abordagem de diagnóstico proposta não está apresentada neste trabalho e deve ser realizada em trabalhos subsequentes.

5 CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou CCs de controle baseadas no Kernel-Statís para monitoramento de processos em bateladas com variáveis apresentando correlações não lineares (do tipo quadráticas).

O primeiro objetivo deste trabalho foi apresentar o desenvolvimeto das CCs não lineares baseadas no Kernel-Statís. Para tanto, inicialmente, foi descrito o método Statís usual em estruturas de dados oriundas de processos em bateladas. O Statís avalia, no contexto linear, a similaridade entre matrizes bidimensionais \mathbf{X}_b , utilizando produtos internos canônicos entre vetores de observações \mathbf{x}_t^b , descritos em matrizes $\mathbf{W}_b = \mathbf{X}_b \mathbf{X}_b'$, onde \mathbf{X}_b contém dados disponíveis de uma batelada completa. Através da análise da *inter-estrutura*, captura-se resumidamente a estrutura de correlação linear entre as P variáveis, em todos os instantes, nas diferentes bateladas, par a par; através da análise da *intra-estrutura*, captura-se a estrutura de correlação linear temporal em T instantes de tempo das variáveis.

Em seguida, foi proposta a abordagem para o Statís no contexto não linear através da utilização de kernels, descritos preliminarmente no trabalho. Através dos kernels, definiram-se funções não lineares de segunda ordem dos dados a partir de um mapa polinomial não linear de segunda ordem Φ . Dessa forma, utilizaram-se funções $\Phi(\mathbf{x}_t^b) = ([\mathbf{x}_t^b]_1, [\mathbf{x}_t^b]_2, [\mathbf{x}_t^b]_1^2, [\mathbf{x}_t^b]_2^2, [\mathbf{x}_t^b]_1 [\mathbf{x}_t^b]_2)$ das observações \mathbf{x}_t^b e, através da teoria de kernels, trabalhou-se com produtos internos modificados dos dados originais \mathbf{x}_t^b sem a utilização direta dos vetores $\Phi(\mathbf{x}_t^b)$.

Finalmente, cumpriu-se o primeiro objetivo construindo-se uma versão não linear do Statís, denominada Kernel-Statís. Foram redefinidas as estatísticas utilizadas na análise da *inter-estrutura* e da *intra-estrutura* para caracterizar correlações não lineares quadráticas dos dados. Foram apresentadas as CCs não lineares derivadas do Kernel-Statís, denominadas CCs kIS e kCO_t .

O objetivo seguinte deste trabalho era comparar o desempenho das CCs baseadas no Statís e no Kernel-Statís. A partir de um processo com dados simulados de um sistema não linear de duas variáveis, validou-se o Kernel-Statís e verificou-se o ganho de acurácia de tal

procedimento em relação ao Statis usual no monitoramento de bateladas futuras. Verificou-se que as CCs kIS e kCO_t ofereceram uma caracterização do processo superior as CCs IS e CO_t (derivadas do Statis usual), na medida em que as não-linearidades quadráticas apareceram de forma mais pronunciada no sistema proposto.

Finalmente, como terceiro objetivo do trabalho, um procedimento para diagnóstico de descontroles apontados pelas CCs kCO_t foi proposto. Este procedimento baseia-se na utilização de CCs CO_p derivadas da análise da *intra-estrutura* em matrizes $\mathbf{V}_b = \mathbf{X}'_b \mathbf{X}_b$. A validação dessa abordagem não foi contemplada neste trabalho.

5.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho apresentou CCs de controle baseadas no Kernel-Statis para monitoramento não linear de processos em bateladas. A partir da abordagem proposta, surgem algumas questões pertinentes que devem ser investigadas em trabalhos subseqüentes:

- a) O procedimento foi validado a partir de um processo simulado com não-linearidades do tipo quadráticas presentes. Dessa forma, utilizou-se um kernel polinomial de segunda ordem para verificar o ganho de acurácia das CCs do método proposto sobre o método original. Em várias situações, não se conhece *a priori* o tipo e o grau da não linearidade dos dados do processo. Torna-se interessante a investigação de técnicas de pré-processamento dos dados que permitam estimar o tipo de não linearidade existente nos dados. A partir disso, define-se o kernel conveniente.
- b) As CCs apresentadas baseadas no Kernel-Statis permitem o monitoramento de processos em bateladas de tempo fixo. Tais CCs devem ser adaptadas diante de processos em bateladas de duração variável.
- c) Este trabalho propôs um procedimento para diagnóstico de descontroles apontados pelas CCs kCO_t através das CCs CO_p . Entretanto, a validação dessa abordagem não foi contemplada neste texto, sendo assim pertinente que esta etapa seja cumprida em trabalhos futuros.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BOSER, B. E.; GUYON, I. M. & VAPNIK, V. A training algorithm for optimal margin classifiers. In: Proceedings of the 15th Annual Workshop on Computational Learning Theory. **Anais...** ACM. Pittsburgh, 1996.
- BURGES, C. J. C. Simplified support vector decision rules. In: Proceedings of the 13th International Conference on Machine Learning. **Anais...**, Pittsburgh, 1996.
- CHO, J. H.; LEE, J. M.; CHOI, S. W.; LEE, D. & LEE, I. B. Fault identification for process monitoring using kernel principal component analysis. **Chemical Engineering Science**, New York, v. 60, p. 279-288, 2005.
- CHOI, S. W.; MORRIS, M. & LEE, I. B. Nonlinear multiscale modelling for fault detection and identification. **Chemical Engineering Science**, New York, v. 63, p. 2252-2266, 2008.
- DONG, D. & MACAVOY, T. J. Nonlinear principal component analysis based on principal curves and neural networks. **Computer & Chemistry Engineering**, Lyngby, v. 20, p. 65-78, 1996a.
- DONG, D. & MACAVOY, T. J. Batch Tracking via nonlinear principal component analysis. **AIChE Journal**, Montreal, v. 42, p. 2199-2208, 1996b.
- ESCOUFIER, Y. Le traitement des variables vectorielles. **Biometrics**, New York, v. 29, p. 751-760, 1973.
- ESCOUFIER, Y. Three-mode data analysis: the STATIS method. In Methods for multidimensional data analysis. **ECAS**, Fichet B. & Lauro N. C. (eds), p. 259-272, 1987.
- FLORES-CERRILO, J. & MACGREGOR, J. F. Control of particle size distribution in emulsion semibatch polymerization using mid-course correction policies. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, Austin, v. 41, p. 1805-1814, 2002.
- FOGLIATTO, F. S. & NIANG. Controle multivariado de processos em batelada com duração variada. **Produção**, São Paulo, v. 18, p. 240-259, 2008.
- GUYON, I.; BOSER, B. & VAPNIK, V. Automatic capacity tuning of very large VC-dimension classifiers. In Hanson, S. J., Cowan, J. D. & Lee Giles, C., editors, In: Proceedings of the Advances in Neural Information Processing Systems, San Mateo, CA, v. 5, p. 147-155, 1993. **Anais..**, 1993.
- HARKAT, M. F.; MOUROT, G. & RAGOT, J. Nonlinear PCA combining principal curves and RDB-networks for process monitoring. In: Proceedings of the 42nd IEEE. Conference on Decision and Control, Hawaii, USA. **Anais..**, 2003.
- HASTIE, T. J. & STUETZLE, W. Principal Curves. **Journal of American Statistical Association**, New York, v. 84, p. 502-516, 1989.
- HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R. & FRIEDMAN, J. **The elements of statistical learning – Data mining, inference, and prediction**. New York: Springer Science, 2001.

JACKSON, J. E. **A User's Guide to Principal Components**. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1991.

JACKSON, J. E. & MUDHOLKAR, G. S. Control Procedures for Residuals Associated with Principal Component Analysis. **Technometrics**, Washington, v. 21, n. 3, p. 341-349, 1979.

JIA, F.; MARTIN, E. B. & MORRIS, A. J. Nonlinear principal component analysis with application to process fault detection. **International Journal of Systems Science**, New York, v. 31, p. 1473-1487, 2001.

JOLLIFFE, I. T. **Principal Component Analysis**. New York: Springer Verlag, 1986.

KAISTHA, N.; MOORE, C. F. & LEITNAKER, M. G. A statistical process control framework for the characterization of variation in batch profiles. **Technometrics**, Washington, v. 46, p. 53-68, 2004.

KASSIDAS, A.; MACGREGOR, J. F. & TAYLOR, P. A. Synchronization of batch trajectories using dynamic time warping. **AIChE Journal**, Montreal, v. 44, p. 864-875, 1998.

KOURTI, T. Multivariate dynamic data modeling for analysis and statistical process control of batch process, start-ups and grade transitions. **Journal of Chemometrics**, Ontário, v. 17, p. 93-109, 2003.

KOURTI, T. & MACGREGOR, J. F. Multivariate SPC Methods for Process and Product Monitoring. **Journal of Quality Technology**, New York, v 28, n. 4, p. 409-428, 1996

KOURTI, T.; NOMIKOS, P. & MACGREGOR, J. F. Analysis, monitoring and fault diagnosis of batch processes using multiblock and multiway PLS. **Journal of process Control**, New York, v. 5, n. 4, 1995.

KRAMER, M. A. Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks. **AIChE Journal**, Montreal, v. 37, p. 233-243, 1991

LAVIT, C.; ESCOUFIER, Y.; SABATIER, R. & TRAISSAC, P. The ACT (STATIS method). **Computational Statistics & Data Analysis**, New York, v. 19, p. 97-119, 1994.

LEBLANC, M. & TIBSHIRANI, R. Adaptive principal surfaces. **Journal of American Statistical Association**, New York, v. 89, p. 53-64, 1994.

LEE, J.; YOO, C. K., & LEE, I.-B. Nonlinear process monitoring using kernel principal component analysis, **Chemistry & Engineering Science**, New York, v. 59, p. 223-234, 2004a (in press).

LEE, J.; YOO, C. K.; CHOI, S. W., & LEE, I.-B. Fault detection of batch processes using multiway kernel principal component analysis, **Computer & Chemistry Engineering**, Lyngby, v. 28, p. 1837-1847, 2004b (in press).

LJUNG, L. **System Identification - Theory for the User**, New Jersey: Prentice Hall, 1987.

LOWERSE, D. J. & SMILDE, A. K. Multivariate statistical process control of batch processes based on three-way models. **Chemical Engineering Science**, New York, v. 55, p. 1225-1235, 2000.

MACGREGOR, J.F. Using on-line process data to improve quality: challenges for statisticians. **International Statistical Review**, New York, v. 65, p. 309-323, 1997.

MACGREGOR, J.F.; JAECKLE, C.; KIPARISSIDES, C. & KOUTOUDI, M. Process Monitoring and Diagnosis by Multi-Block PLS Methods. **Journal of the American Institute of Chemical Engineers**, New York, v. 40, n. 5, p. 826-838, 1994.

MARCONDES FILHO, D. **Monitoramento de Processos em Bateladas através de Cartas de Controle Multivariadas utilizando Análise de Componentes Principais Multidirecionais**. Dissertação de Mestrado em Engenharia de Produção, PPGEF – UFRGS, 2001.

MARTIN, E. B. & MORRIS, A. J. An overview of multivariate statistical process control in continuous and batch process performance monitoring. **Trans Inst MC**, New York, v. 18, n. 1, p. 51-60, 1996.

MATLAB Programming Technique. Disponível em <<http://www.mathworks.com>> Acesso em: 15 de dez. 2008.

MINGOTI, S. A. **Análise de dados através de métodos de estatística multivariada – uma abordagem aplicada**. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2005.

MONTGOMERY, D. C. **Introduction to Statistical Quality Control**. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2006.

NOMIKOS, P. & MACGREGOR, J. F. Monitoring Batch Processes Using Multiway Principal Component Analysis. **Journal of the American Institute of Chemical Engineers**, New York, v. 40, n. 8, p. 1361-1375, 1994.

NOMIKOS, P. & MACGREGOR, J. F. Multivariate SPC Charts for Monitoring Batch Processes. **Technometrics**, Washington, v. 37, n° 1, p. 41-59, 1995.

OJA, E. A simplified neuron model as a principal component analyzer. **Journal of Math. Biology**, New York, v. 15, p. 267-273, 1982.

PATEL, V. A. A. **Numerical Analysis**. New York: Saunders College Publishing, 1993.

POGGIO, T. On optimal nonlinear associative recall. **Biological Cybernetics**, New York, v. 19, p. 201-209, 1975.

RAKOTOMAMONJY, A. Variable selection using SVM-based criteria. **Journal of Machine Learning Research**, New York, v. 3, p. 1357-1370, 2003.

RAMAKER, H.-J.; VAN SPRANG, E. N. M.; WESTERHUIS, J. A. & VAN DER MEULEM, F. H. Performance assessment and improvement of control charts for statistical batch process monitoring. **Statistica Neerlandica**, Nederland, v. 60, p. 339-360, 2006.

RENCHER, A. C. **Methods of Multivariate Analysis**. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1995.

RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E. & WILLIAMS, R. J. “**Learning Internal Representations by Error Propagation**”, **Parallel Distributed Processing**. Cambridge: MIT Press, 1986.

SAS (Statistical Analysis of System). SAS Institute. Disponível em <<http://www.sas.com>> Acesso em: 15 de dez. 2008.

SCEPI, G. Parametric and non parametric multivariate quality control charts. In *Multivariate Total Quality Control*, **Physica-Verlag**, Lauro C. *et. al.* (eds), p. 163-189, 2002.

SCHJOLKOPF, B.; SMOLA, A. J. & MULLER, K. Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem. **Neural Computation**, New York, v. 10, p. 1299-1399, 1998.

SCHOLKOPF, B. & SMOLA, J. **Learning with kernels**. England: The MIT Press, 2002.

SILVA, E.L. & MENEZES, E.M. **Metodologia de pesquisa e elaboração de dissertação**, Florianópolis: Laboratório de ensino da Universidade Federal de Santa Catarina, 2005.

VAPNIK, V. & CHERVONENKIS, A. **Theory of Pattern Recognition**. Berlim: Akademie Verlag, 1979.

VERBEEK, J. J.; VLASSIS, N. & KROSE, B. A k-segments algorithm for finding principal curves. **Pattern Recognition Letters**, New York, v. 23, p. 1009-1017, 2002.

YOO C. K.; LEE, I.-B. & VANROLLEGHEM, P. A. On-line adaptative and nonlinear process monitoring of a pilot-scale sequencing batch reactor. **Springer**, New York, v. 119, p. 349-366, 2006.

ZANI, S.; RIANI, M. & CORBELLINI, A. Robust bivariate boxplots and multiple outlier detection. **Computational Statistics & Data Analysis**, New York, v. 28, p. 257-270, 1998.