



UNIVERSIDADE D  
COIMBRA

Rodrigo Gabriel Oliveira Paredes

**MONITORIZAÇÃO, DETEÇÃO E  
DIAGNÓSTICO DE FALHAS BASEADA EM  
REDES CAUSAIS**

Dissertação no âmbito do Mestrado Integrado em Engenharia Química, no ramo de Processo, Ambiente e Energia, orientada pelo Professor Doutor Marco Reis e pelo Professor Doutor Lino Santos, apresentada ao Departamento de Engenharia Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

Setembro de 2021



*Para a Aurora*

Fortunate who was able to know the causes of things

*Virgílio*



# Agradecimentos

Em primeiro lugar, quero agradecer aos meus pais, José e Ana. Obrigado pelos conselhos, pelo apoio ao longo destes anos, pelos valores transmitidos. Por todas as vezes que me deram na cabeça. E acima de tudo, pela confiança que depositaram em mim; devo-vos muito.

Ao meu irmão David. Sei que te posso confiar a minha vida. O passar dos anos só vieram provar o quão forte é o que nos une. Também és pai da menina mais linda do mundo, e isso também influencia este agradecimento!

A toda a minha família. Sempre me deram força, incentivo, e sempre me acompanharam em todas as etapas da minha vida. Quero-vos agradecer por tudo.

Aos fixes. Estes anos não seriam os mesmos sem vocês. Sem as ínfimas histórias que escrevemos e por todos os momentos que passamos: João “Olá, o meu nome é” Lopes, Sofia “Torta” Leão, Hugo “Marrocco” Ferreira, Vítor Segóvias, Paulita, Dani Gomes Pereira, Ruben “Tostas” Gariso, Beatriz “Erasmuuus” Marona, Vasco Bandido, Vanessinha, Jack&Son, Azeiteiro, Druida Coutinho, ChamiZé. Espero acima de tudo que não me tenha esquecido de mencionar ninguém, e que se lembrem dos momentos de quais alguns de nós não se recordam.

A todos os amigos que me acompanharam nesta jornada em Coimbra. Aos meus padrinhos e afilhados. A lista é infindável e por isso não vos menciono, mas vocês sabem quem são. Do Moelas ao Pintos. Da AAC até a um spot random. Tornaram este caminho definitivamente mais fácil.

Ao grupo da C16. Durante este semestre tive a oportunidade de crescer e trocar várias perspetivas com vocês. Joel, João, Paulo, Tiago, Ruben, Hugo, Eugeniu, Carolina: um obrigado.

A todas as pessoas que a música me trouxe em todos estes anos. Fazer música é o meu escape e fazê-la com vocês é dos melhores momentos que passei.

Agradeço aos professores do Departamento de Engenharia Química da FCTUC por todo o conhecimento que me deram. Em especial aos meus orientadores: Professor Marco Reis quero agradecer por me mostrar o mundo da causalidade e da *data science*, pelo acompanhamento e o aconselhamento ao longo do semestre; ao Professor Lino Santos pela preocupação, disponibilidade e empenho mesmo num tema que fugiu à sua área de conforto. Quero também deixar uma nota de agradecimento ao Tiago Rato que desde o início sempre se mostrou disponível para tudo o que eu precisasse, numa área que era desconhecida para mim.

Muito obrigado a todos!

# Resumo

O controlo estatístico de processos faz parte do quotidiano industrial desde 1930. Contudo, a evolução tecnológica permitiu que se conseguisse medir e analisar milhares de variáveis em simultâneo, o que levou a que novas metodologias fossem desenvolvidas para serem capazes de lidar com a quantidade de dados recolhidos. A Análise dos Componentes Principais (PCA do inglês *Principal Component Analysis*) tem sido vista como a principal resposta para monitorizar processos químicos a larga escala, bem como para detetar eventos especiais. Apesar das muitas vantagens do PCA, o diagnóstico da causa raiz pode ser inconclusivo e ambíguo, podendo o processo ficar fora de controlo durante um período de tempo prolongado. Uma das formas de aumentar a capacidade de diagnóstico é a incorporação da rede causal na metodologia de monitorização, por exemplo através de um pré-processamento que envolve a transformação das variáveis (SET-Hotelling-T<sup>2</sup>).<sup>1</sup> Nesta dissertação, são propostas duas metodologias de monitorização hierárquica que consistem na decomposição funcional da sua rede causal, de forma a melhorar a deteção e o diagnóstico de falhas.

As metodologias desenvolvidas consistem em encontrar os módulos funcionais da rede causal através da exploração da topologia do grafo e pela identificação das ligações entre as “comunidades” de variáveis. Tal permite reduzir a dimensionalidade dos sistemas a monitorar, aumentando, por sua vez, a sensibilidade à deteção de falhas de baixa magnitude e de falhas localizadas. A monitorização hierárquica é aplicada à rede causal completa mediante a agregação da informação dos módulos e das suas interações. É de salientar que a natureza causal destas metodologias facilita o diagnóstico da causa raiz. A diferença entre as duas metodologias propostas está na forma como se processa a informação vinda de cada módulo para a monitorização de falhas. Uma delas consiste em monitorizar cada módulo individualmente (CNET-D, *Causal Network-Distributed*). A outra envolve a concatenação de todas as estatísticas de monitorização numa só estatística (CNET-C, *Causal Network-Centralized*).

O estudo das metodologias propostas e da inferência de redes causais foi feito através de um simulador de um sistema de uma rede artificial, desenvolvido por Rato e Reis<sup>2</sup>, para a geração de dados, assim como para a simulação de falhas no processo, em sensores e na correlação entre variáveis.

A inferência de redes causais foi feita com recurso ao método das correlações parciais para a inferência de conectividade e à causalidade de Granger para a inferência da direccionalidade das associações diretas. A metodologia foi testada em dois sistemas, um linear

estático e outro linear dinâmico. Este estudo demonstra que a inferência da rede é mais precisa no sistema linear dinâmico e com um tamanho de conjunto de dados maior que 5000.

Em relação à detecção de falhas, as metodologias propostas, CNET-C e CNET-D, apresentaram maior sensibilidade face às metodologias que monitorizam a rede completa e ao PCA, demonstrando boas capacidades de detecção. O diagnóstico de falhas permitiu que se detetasse a causa raiz dos eventos de forma conclusiva e não ambígua, reduzindo o conjunto de variáveis a diagnosticar.

**Palavras-Chave:** Monitorização Estatística de Processos; Rede Causal; Detecção de Comunidades; Monitorização Hierárquica; Monitorização Centralizada; Monitorização Descentralizada; Detecção e Diagnóstico de Falhas.



# Abstract

Statistical Process Control has been part of everyday industrial life since 1930. However, the technological evolution has made it possible to measure and analyze thousands of variables simultaneously, which led to the development of new methodologies capable of handling the amount of data collected. Principal Component Analysis (PCA) has been seen as the main answer for monitoring large-scale chemical processes, in addition to detecting special events. Despite the added value of PCA, the root cause diagnosis can be inconclusive and ambiguous, which causes the process to go out of control for an extended period. One of the alternatives for increasing diagnostic capability is to incorporate the causal network into the monitoring methodology, where the variables go through a pre-processing transformation.<sup>1</sup> In this thesis, two hierarchical monitoring methodologies are proposed based on the functional decomposition of the system causal network to improve fault detection and diagnosis.

The proposal monitoring methodologies consist in finding the functional modules of the causal network, by exploring its graph topology and identifying the strongly linked “communities” of variables to reduce the dimensionality of the system model, increasing the sensitivity to the detection of low magnitude and localized faults. Hierarchical monitoring is applied to the complete system causal network, aggregating information from the functional modules and their interactions. In addition, the causal nature of these methodologies facilitates root-cause diagnosis. The difference between these two proposal methodologies resides in how the information coming from each module for fault monitoring is processed. One of them consists of monitoring each module individually (CNET-D, Causal Network-Distributed). The other involves the concatenation of all monitoring statistics into a single statistical metric (CNET-C, Causal Network-Centralized).

The study of the proposed methodologies and causal network inference was done using an artificial network simulator, developed by Rato and Reis<sup>2</sup>, for data generation as well as fault simulation (process, sensor, and correlation fault).

The system causal network inference was performed using the partial correlations method and Granger causality for connectivity and causality inferences, respectively. The study was conducted on two systems, static linear and dynamic linear systems, which demonstrated that the network inference is more accurate in the case of the dynamic linear system.

Regarding the fault detection, the proposed methodologies, CNET-C and CNET-D, presented higher sensitivity when compared to methodologies that monitor the complete system

causal network and the PCA, showing good detection capabilities. The diagnosis allowed the root cause to be detected conclusively and unambiguously.

**Keywords:** Statistical Process Monitoring; Causal Network; Communities Detection; Hierarchical Monitoring; Centralized Monitoring; Distributed Monitoring; Fault Detection and Diagnosis.

# Índice

1. INTRODUÇÃO .....	1
1.1 Motivação.....	1
1.2 Objetivos .....	2
1.3 Visão geral da dissertação.....	2
2. REDES CAUSAIS .....	5
2.1 Conectividade e causalidade .....	5
2.2 Métodos de inferência de conectividade.....	6
2.2.1 Métodos descritivos sem modelo .....	7
2.2.1.1 Correlação linear ou marginal.....	7
2.2.1.2 Correlação cruzada .....	8
2.2.1.3 Correlação parcial .....	9
2.2.1.4 Informação mútua parcial.....	10
2.2.1.5 Entropia conjunta e condicional .....	11
2.2.2 Métodos baseados em modelos generativos.....	12
2.3 Métodos de inferência de causalidade .....	12
2.3.1 Modelos contínuos.....	13
2.3.2 Modelos lógicos.....	14
2.3.3 Modelos probabilísticos.....	14
2.3.3.1 Redes bayesianas.....	15
2.3.3.2 Redes bayesianas dinâmicas.....	15
2.3.4 Modelos baseados na teoria da informação .....	16
2.3.4.1 Informação mútua condicional.....	16
2.3.4.2 Transferência de entropia.....	17
2.3.4.3 Entropia causal.....	17
2.4 Modularidade, detecção de comunidades e <i>Markov-blankets</i> .....	18
2.5 Algoritmos utilizados para a análise de redes.....	20
2.5.1 PCalg.....	21
2.5.2 Causalidade de Granger .....	22
2.5.3 Correlação cruzada.....	23
2.5.4 Detecção de comunidades.....	24
3. METODOLOGIAS MULTIVARIADAS PARA A MONITORIZAÇÃO ESTATÍSTICA DE PROCESSOS.....	27
3.1 Metodologias usadas como <i>benchmark</i> .....	27
3.1.1 Monitorização estatística de processos baseada na análise de componentes principais (PCA-MSPC).....	27

3.1.1.1	Deteção de falhas.....	29
3.1.1.2	Diagnóstico de falhas.....	30
3.1.2	Monitorização estatística de processos baseada na estatística $T^2$ de Hotelling considerando informação da rede (SET-Hotelling- $T^2$ ).....	31
<b>3.2</b>	<b>Metodologias propostas.....</b>	<b>33</b>
3.2.1	Metodologia de monitorização hierárquica descentralizada baseada na decomposição da rede causal com transformação de variáveis (CNET-D do inglês <i>Causal Network-Distributed</i> ).....	33
3.2.2	Metodologia de monitorização hierárquica centralizada baseada na decomposição da rede causal com transformação de variáveis (CNET-C do inglês <i>Causal Network-Centralized</i> ).....	35
4.	RESULTADOS DA INFERÊNCIA DE UMA REDE ARTIFICIAL .....	39
4.1	Sistema linear estacionário.....	40
4.2	Sistema linear dinâmico .....	43
4.2.1	Inferência de conectividade da rede artificial .....	43
4.2.2	Inferência da causalidade da rede artificial .....	45
5.	RESULTADOS DAS METODOLOGIAS DE MONITORIZAÇÃO .....	49
5.1	Metodologia de monitorização baseada na análise aos componentes principais <i>versus</i> $T^2$ de Hotelling com informação da rede .....	50
5.1.1	Deteção de falhas .....	50
5.1.2	Diagnóstico de falhas.....	52
5.2	Estudo comparativo das metodologias propostas: CNET-D e CNET-C.....	56
5.2.1	Deteção de falhas .....	57
5.2.2	Diagnóstico de falhas.....	60
6.	CONCLUSÃO E TRABALHO FUTURO .....	65
	Anexo I – Proposta de um algoritmo de inferência de conectividade baseado no método de LASSO.....	73
	Anexo II- Figuras da comparação das metodologias de monitorização benchmark para a deteção de falhas .	75
	Anexo III- Figuras da comparação das metodologias de monitorização propostas para a deteção de falhas ..	79

# Índice de tabelas

<i>Tabela 1- Resumo de métodos descritivos sem modelo baseados em estatística descritiva.</i> <sup>16</sup> .....	7
<i>Tabela 2-Resumo de métodos descritivos sem modelo baseados em conceitos de teoria da informação.</i> .....	7
<i>Tabela 3- Propriedades dos vários métodos de inferência causal abordados</i> <sup>40</sup> .....	13
<i>Tabela 4- Pseudo-código da construção do modelo SET.</i> .....	32
<i>Tabela 5- Resultados para a inferência de conectividade na rede artificial - sistema estacionário linear.</i>	41
<i>Tabela 6- Resultados para a inferência de conectividade na rede artificial - sistema dinâmico linear.</i> .....	44
<i>Tabela 7- Resultados para a inferência de causalidade na rede artificial - sistema dinâmico linear.</i> .....	45
<i>Tabela 8- Tipos e localização das falhas nos estudos comparativos realizados.</i> .....	49
<i>Tabela 9- Resultados da comparação da detecção de falhas nos vários cenários entre as metodologias de benchmark.</i> .....	52
<i>Tabela 10- Divisão da rede artificial através do algoritmo de detecção de comunidades e do conceito do markov-blanket.</i> .....	57
<i>Tabela 11-Resultados da comparação da detecção de falhas nos vários cenários entre as metodologias propostas.</i> .....	59
<i>Tabela 12- Resultados comparativos da primeira camada de diagnóstico para vários tipos e localizações de falha entre as metodologias propostas (TPR=0.75). A negrito constam os resultados mais importantes.</i> .....	62



# Índice de figuras

Figura 1- As várias etapas desta dissertação para se atingir os objetivos propostos. ....	2
Figura 2- Topologia de uma rede com 3 variáveis. ....	6
Figura 3- Exemplo da evolução do valor de duas variáveis para compreensão da detecção de padrões desfasados. ....	9
Figura 4- Causalidade entre variáveis em diversos instantes de tempo. ....	16
Figura 5- Representação de uma rede dividida em módulos disjuntos (a) e módulos sobrepostos (b). ....	19
Figura 6- Exemplo do Markov-blanket na variável aleatória $X$ , $MB(X)$ . ....	19
Figura 7- Algoritmo PCalg. ....	22
Figura 8- Algoritmo da CG para inferência da causalidade numa rede. ....	23
Figura 9- Aplicação do método da correlação cruzada entre $X$ e $Y$ , onde $Y$ sofre os desfasamentos de tempo. ....	24
Figura 10- Algoritmo de detecção de comunidades. ....	24
Figura 11- Etapas do algoritmo do PCA-MSPC. ....	29
Figura 12- Etapas do algoritmo da SET-Hotelling- $T^2$ . ....	33
Figura 13- Etapas do algoritmo da CNET-D. ....	35
Figura 14- Etapas do algoritmo da CNET-C. ....	37
Figura 15- Representação gráfica da estrutura da rede do caso de estudo <sup>2</sup> . ....	39
Figura 16- Inferência de conectividade no sistema estacionário pelo PCalg - 500 dados observacionais. ....	41
Figura 17- Inferência de conectividade no sistema estacionário pelo PCalg - 5000 e 10000 dados observacionais. ....	42
Figura 18- Inferência de conectividade no sistema dinâmico pelo PCalg - 500 dados observacionais. ....	44
Figura 19- Inferência de conectividade no sistema dinâmico pelo PCalg - 5000 e 10000 dados observacionais. ....	44
Figura 20- Inferência de causalidade no sistema dinâmico pelo algoritmo da CG - 500 dados observacionais. ....	46
Figura 21- Inferência de causalidade no sistema dinâmico pelo algoritmo da CG - 5000 e 10000 dados observacionais. ....	46
Figura 22- Inferência de causalidade no sistema dinâmico pelo algoritmo da Correlação Cruzada - 500, 5000 e 10000 dados observacionais. ....	47
Figura 23- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha no processo localizadas na variável 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%. ....	50
Figura 24- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha no sensor localizadas na variável 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%. ....	51
Figura 25- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha na correlação entre as variáveis 1 e 8. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%. ....	51
Figura 26- Contribuição de cada variável para as estatísticas de monitorização baseadas em PCA. Falha no processo na variável 1 com TPR=0.5. ....	53
Figura 27- Contribuição de cada variável para a estatística de monitorização da metodologia SET-Hotelling- $T^2$ . Falha no processo na variável 1 com TPR=0.5. ....	53
Figura 28- Contribuição de cada variável para as estatísticas de monitorização baseadas em PCA. Falha no sensor na variável 1 com TPR=0.5. ....	54
Figura 29- Contribuição de cada variável para a estatística de monitorização da metodologia SET-Hotelling- $T^2$ . Falha no sensor na variável 1 com TPR=0.5. ....	54
Figura 30- Contribuição de cada variável para as estatísticas de monitorização baseadas em PCA. Falha na correlação em $g_1 \leftarrow g_8$ com TPR=0.5. ....	55

<i>Figura 31- Contribuição de cada variável para a estatística de monitorização da metodologia SET-Hotelling-<math>T^2</math>. Falha na correlação em <math>g_1 \leftarrow g_8</math> com <math>TPR=0.5</math>.</i>	55
<i>Figura 32- Resultado da aplicação do algoritmo de deteção de comunidades.</i>	56
<i>Figura 33- True Positive Rate (TPR) das metodologias propostas e da metodologia benchmark a diferentes magnitudes de falha no processo localizadas na variável 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.</i>	57
<i>Figura 34- True Positive Rate (TPR) das metodologias propostas e da metodologia benchmark a diferentes magnitudes de falha no sensor localizadas na variável 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.</i>	58
<i>Figura 35- True Positive Rate (TPR) das metodologias propostas e da metodologia benchmark a diferentes magnitudes de falha na correlação entre as variáveis 1 e 8. Para magnitude de falha igual a 1 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.</i>	58
<i>Figura 36- Representação gráfica da primeira camada do diagnóstico para as metodologias propostas. Falha de processo na variável 1 com <math>TPR=0.75</math>.</i>	60
<i>Figura 37- Representação gráfica da primeira camada do diagnóstico para as metodologias propostas. Falha no sensor na variável 1 com <math>TPR=0.75</math>.</i>	61
<i>Figura 38- Representação gráfica da primeira camada do diagnóstico para as metodologias propostas. Falha na correlação entre as variáveis 1 e 8 com <math>TPR=0.75</math>.</i>	61
<i>Figura 39- Representação gráfica dos resultados da segunda camada de diagnóstico das metodologias propostas para uma falha no processo na variável 1 (<math>TPR=0.75</math>).</i>	63
<i>Figura 40- Representação gráfica dos resultados da segunda camada de diagnóstico das metodologias propostas para uma falha no sensor na variável 1 (<math>TPR=0.75</math>).</i>	63
<i>Figura 41- Representação gráfica dos resultados da segunda camada de diagnóstico das metodologias propostas para uma falha na correlação entre as variáveis 3 e 1 (<math>TPR=0.75</math>).</i>	64



# Siglas e acrónimos

CG- Causalidade de Granger.

CNET-C- Monitorização hierárquica centralizada baseada na decomposição da rede causal com transformação de variáveis (do inglês *Causal Network- Centralized*).

CNET-D- Monitorização hierárquica descentralizada baseada na decomposição da rede causal com transformação de variáveis (do inglês *Causal Network- Distributed*).

CP- Componentes Principais.

EC- Entropia Causal.

GAD- Grafo Acíclico Direto.

IMC- Informação Mútua Condicional.

LCI- Limite de Controlo Inferior.

LCS- Limite de Controlo Superior.

MSPC- Controlo Estatístico de Processos Multivariados, do inglês *Multivariate Statistical Process Control*.

NOC- Condições Normais de Operação, do inglês *Normal Operating Condition*.

OC- Ordem da Correlação parcial.

PCA- Análise dos Componentes Principais, do inglês *Principal Component Analysis*.

PCalg- Algoritmo de inferência de conectividade baseado no método das correlações parciais.

PID- Diagrama de Processo e Instrumentação, do inglês *Process & Instrumentation Diagram*.

RB- Redes Bayesianas.

RBD- Redes Bayesianas Dinâmicas.

RBool- Redes Booleanas.

SET- *Sensitivity Enhancing Transformation*.

SET-Hotelling- $T^2$ - Monitorização estatística de processos baseada na estatística  $T^2$  de Hotelling considerando informação da rede.

SPM- Monitorização Estatística de Processos, do inglês *Statistical Process Monitoring*.

SQR- Soma do Quadrado dos Resíduos.

TE- Transferência de Entropia.

TEP- Tennessee Eastman Process.

TFA- Taxa de Falsos Alarmes.

TPR- Taxa de Detecção de Falhas, do inglês *True Positive Rate*.



# Simbologia

$A_1, B_1$ - Coeficientes autorregressivos do modelo de séries temporais.

$cov(x,y)$ - Covariância entre duas variáveis aleatórias.

$c_{xy}(\tau)$ - Função de covariância cruzada.

$d_M^2$ - Distância de Mahalanobis ao quadrado.

$\hat{d}$ - Previsão do modelo SET.

$D_{n_{obs} \times m}$ - Matriz de um conjunto de dados.

$E_{n_{obs} \times m}$ - Matriz residual do PCA.

$g$ - Dados observacionais provenientes de uma variável aleatória.

$H(X,Y)$ - Entropia Conjunta entre duas variáveis aleatórias.

$H(X|Y)$  - Entropia Condicional entre duas variáveis aleatórias.

$H_0$ - Hipótese nula de um teste de hipóteses.

$I(X,Y)$ - Informação Mútua de duas variáveis aleatórias.

$I(X,Y|Z)$ - Informação Mútua Parcial.

$K$ - Fator multiplicativo para a simulação de falhas.

$\tilde{L}_{m \times (m-p)}$  - Matriz de carregamento dos resíduos do PCA.

$L_{m \times p}$ - Matriz de carregamento do PCA.

$m$ - Número de variáveis.

$MB(X)$ - *Markov-Blanket* de uma variável aleatória  $X$ .

$n_{obs}$ - Número de observações.

$N_{TC}$ - Número de estatísticas para comparação.

$p$ - Número de Componentes Principais.

$p(x,y)$ - Distribuição conjunta de duas variáveis aleatórias.

$p(x|y)$ - Distribuição condicional de  $x$  dado  $y$ .

$p_{ij,k}$ - Coeficiente de correlação parcial entre  $x_i$  e  $x_j$ , onde se controla o efeito da variável  $x_k$ .

$p_{x \rightarrow y}(\tau)$ - Coeficiente de correlação cruzada  $(\tau)$  entre duas variáveis aleatórias, para um dado defasamento temporal  $\tau$ .

$Q_{DG}$ - Função Qualidade de Densidade Global.

$Q_{DG}^e$ - Densidade Externa Global.

$Q_{DG}^i$ - Densidade Interna Global.

$Q_{PCA}$ - Estatística  $Q$ .

$r$ - Coeficiente de correlação de Pearson.

$S$ - Matriz de covariância amostral.

s- Ordem do modelo autorregressivo.

t- Instante de tempo.

$T^2_{SET}$ ,  $T^2_{PCA}$ - Estatística  $T^2$  de Hotelling aplicada em conjunto com a metodologia SET e PCA.

$T^2_{SET_{global}}$ - Estatística  $T^2_{SET}$  obtida pela concatenação da estatística  $T^2$  de Hotelling de cada comunidade.

$T_{nobs \times p}$ - Matriz de pontuações do PCA.

X, Y, Z- Variáveis Aleatórias.

$X_j$ - Vetor com as estatísticas  $T^2_{SET}$  de cada comunidade numa observação j.

$X_{NOC}$ - Matriz com as estatísticas  $T^2_{SET}$  de cada comunidade.

$Z_{nobs \times m}$ - Matriz de um conjunto de dados auto-escalados.

$Z_\alpha$ - Função Distribuição Cumulativa Inversa Normal

$\alpha$ - Nível de significância.

$\varepsilon$ - Resíduos.

$\Lambda$ - Matriz diagonal com os primeiros  $p$  valores próprios.

$\lambda$ - Valor próprio.

$\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ - Desvio-padrão de uma variável aleatória.

$\mu_{X_{noc}}$ - Média da estatística  $T^2_{SET}$  de cada comunidade.

$\tau$ - Desfasamento temporal.

$\chi^2$ - Chi-quadrado.





# 1. Introdução

“Só se nos detivermos a pensar nas  
pequenas coisas chegaremos a  
compreender as grandes”

*José Saramago*

## 1.1 Motivação

A aplicação de métodos estatísticos na melhoria da qualidade e controlo de processos ganhou notoriedade com Walter Shewhart<sup>3</sup> quando em 1924, na *Bell Telephone Laboratories*, introduziu o conceito de cartas de controlo. Esta ferramenta permitiu o início da discussão sobre a relevância da redução da variabilidade em qualquer processo, definindo limites de tolerância que indicam as fronteiras em que o processo está sob controlo. As cartas de controlo trouxeram também os conceitos de causas comuns e causas especiais.<sup>3</sup>

Desde então, a monitorização estatística de processos (SPM, do inglês *Statistical Process Monitoring*) ganhou um papel fulcral no funcionamento de qualquer indústria. A sua evolução contínua até aos dias de hoje, em que na era do *big data* e do avanço alucinante da digitalização, tornou a recolha de dados num procedimento fácil<sup>4</sup>, dando aos engenheiros cada vez mais informação sobre o estado do processo.<sup>5</sup>

Contudo, a complexidade e dimensionalidade dos processos químicos torna desafiantes a deteção e diagnóstico de falhas, e têm sido alvo de esforços contínuos para ultrapassar as limitações dos métodos existentes. Um aspeto fundamental para desenvolver técnicas de monitorização mais eficazes é compreender as relações causais entre as variáveis do processo.

A análise das relações causais já é tema de interesse na discussão filosófica desde a Grécia Antiga, com Aristóteles a associar a pergunta “Porquê?” às suas respostas e tipos de causa, estabelecendo a “causa” como o conteúdo fundamental da explicação.<sup>6</sup> Mais tarde várias áreas da ciência, como a economia<sup>7</sup>, neurociência<sup>8</sup> e epidemiologia<sup>9</sup>, adotaram esta análise para explicar diversos fenómenos e associações que os desencadeavam.

A indústria química moderna tem vindo a incorporar o conceito da causalidade<sup>10,11</sup> para melhorar o desempenho dos processos ao nível da qualidade dos produtos e estabilidade dos processos, com o conseqüente impacto financeiro.

A SPM beneficia da incorporação de modelos do processo baseados em redes causais. Tal permite, por exemplo, uma deteção e diagnóstico de falhas mais eficiente e eficaz<sup>12</sup>, levando

a que o processo permaneça fora das condições normais de operação (NOC- *Normal Operating Condition*) por um menor período de tempo.

## 1.2 Objetivos

Os objetivos desta dissertação, assentes nas motivações acima referidas, consistem em melhorar o desempenho da monitorização, deteção e diagnóstico de falhas através da incorporação e decomposição da informação contida nas redes causais de um processo. Para se atingir os objetivos propostos, delineararam-se as seguintes etapas (Figura 1):

- Utilização de um simulador desenvolvido por Rato e Reis<sup>2</sup> para a geração de dados e simulação de falhas;
- Inferência da rede causal de um processo (conectividade e causalidade);
- Incorporação da rede causal numa metodologia de monitorização de controlo estatístico de processos multivariada;
- Divisão funcional da rede causal em módulos baseada na topologia do grafo;
- Desenvolver uma metodologia de monitorização hierárquica descentralizada;
- Desenvolver uma metodologia de monitorização hierárquica centralizada;
- Simulação de falhas no processo, em sensores e na correlação entre variáveis.

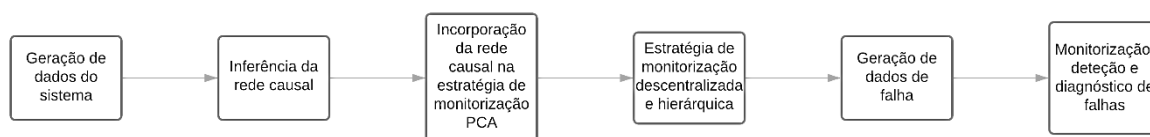


Figura 1- As várias etapas desta dissertação para se atingir os objetivos propostos.

## 1.3 Visão geral da dissertação

Esta dissertação está dividida em 6 capítulos e a sua estrutura reflete o percurso que foi feito ao longo do semestre.

O Capítulo 2 contém uma visão geral sobre redes causais, como podem ser inferidas e trabalhadas de forma a reduzir a complexidade de modelos de sistemas com milhares de variáveis.



O Capítulo 3 foca-se nas metodologias de *benchmark* de monitorização, nomeadamente a PCA-MSPC e a metodologia de monitorização onde se incorpora a informação contida nas redes causais, passando pela explanação das metodologias desenvolvidas e propostas nesta dissertação.

No Capítulo 4 introduz-se o caso de estudo, em que são comparados os resultados de métodos de inferência de redes e discutidos outros aspetos de análise de redes.

O Capítulo 5 apresenta os resultados dos desempenhos das metodologias de monitorização que foram abordadas e desenvolvidas, assim como a discussão dos resultados obtidos.

O Capítulo 6 destina-se às conclusões desta dissertação e possíveis trabalhos futuros a serem desenvolvidos.



## 2. Redes Causais

“Shallow men believe in  
luck or in circumstance.  
Strong men believe in  
cause and effect”  
*Ralph Waldo Emerson*

Neste capítulo, aborda-se a inferência de redes causais, a sua decomposição funcional, bem como a análise de redes causais. Uma relação causal define-se como uma relação na qual um fenómeno (efeito) é uma consequência de outro (causa).

### 2.1 Conectividade e causalidade

A conectividade pode ser enunciada como uma associação direta em que se relacionam variáveis (materiais, fluxos de informação) dentro ou entre unidades processuais, sensores e controladores. Esta relação de conectividade proporciona um conhecimento qualitativo do processo sem a necessidade de modelos baseados em primeiros princípios<sup>10</sup> e constitui *per si* uma forma para analisar como as diversas partes se interligam entre si.<sup>13</sup>

É de salientar que, por vezes, existe alguma confusão na interpretação do significado de conectividade e causalidade. Tal deve-se, em grande parte, à mente humana que encontra padrões mesmo quando eles não existem. Embora estas existam em simultâneo, a conectividade é apenas uma relação, não implicando que um evento cause necessariamente a ocorrência de outro, ou seja, não implica causalidade.

Para que exista causalidade entre duas variáveis X e Y é preciso que se verifique:<sup>10,14</sup>

- Uma ligação teórica ou de senso comum;
- Uma associação empírica;
- A eliminação de causas comuns: outra variável não deve influenciar a correlação (variáveis de confusão);
- Responsividade: uma alteração em X causa alterações em Y, ou vice-versa;
- Assimetria: X deve causar Y e não o contrário, ou vice-versa.

O exemplo da Figura 2 ilustra a distinção entre conectividade e causalidade, onde a vermelho se indicam as associações indiretas. A Figura 2(a) apresenta um exemplo típico de uma rede com uma topologia em que não se verifica uma relação de causalidade. Quando duas

variáveis possuem a mesma causa comum, claramente estas variáveis estão correlacionadas. Contudo, se a variável X (variável de confusão) for excluída então Y e Z são ambas condicionalmente independentes.<sup>10</sup> Por outro lado, na rede da Figura 2(b) é demonstrado que A causa B e que B causa C, o que leva a que A cause C indiretamente. Neste caso é possível apresentar algumas diferenças entre conectividade e causalidade: A causa B diretamente, ou seja, não existem outras variáveis no caminho, e A causa C indiretamente pois este caminho tem uma variável intermediária B. A conectividade apenas diz respeito a associações diretas entre variáveis e pode ser testada para qualquer par de variáveis na rede. A causalidade baseia-se no conceito de direccionalidade, que consiste na orientação da aresta (fluxo de informação) entre dois nodos (variáveis). Enquanto na conectividade não existe direccionalidade, na causalidade esta é necessária.<sup>15</sup>

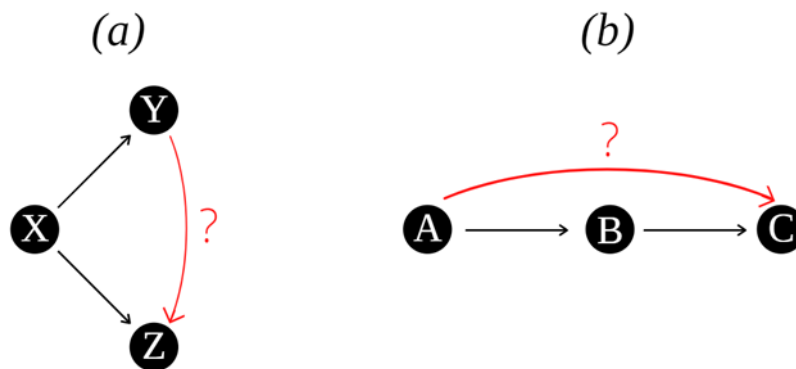


Figura 2- Topologia de uma rede com 3 variáveis.

## 2.2 Métodos de inferência de conectividade

Os métodos de inferência de conectividade, que também podem inferir simultaneamente direccionalidade (causalidade), podem ser geralmente divididos em duas classes: métodos descritivos sem modelo, que se baseiam em estatísticas descritivas sem assumir algum modelo gerador de dados, e os métodos baseados em modelos generativos, que assumem um determinado modelo matemático que gera os dados, inferindo os parâmetros e a estrutura do modelo.<sup>16,17</sup>

## 2.2.1 Métodos descritivos sem modelo

Na classe dos métodos descritivos sem modelo não se assume nenhum mecanismo para a geração dos dados observados. Estes métodos tendem a ser mais simples que os métodos baseados em modelos generativos. Estes métodos podem ser separados em duas categorias: métodos baseados em estatísticas descritivas (Tabela 1) e métodos baseados em conceitos de teoria da informação (Tabela 2).<sup>16,18</sup>

Tabela 1- Resumo de métodos descritivos sem modelo baseados em estatística descritiva.<sup>16</sup>

<b>Método</b>	<b>Princípio</b>	<b>Características</b>
Correlação linear	Relação linear	-Indicador não causal; -Não distingue os efeitos de variáveis de confusão; -Baixo custo computacional.
Correlação cruzada	Relação linear desfasada no tempo	-Indicador causal; -Baixo custo computacional.
Correlação parcial	Relação linear excluindo o efeito de outras variáveis	-Indicador não causal; -Distingue efeitos diretos/indiretos; -Solução baseada no algoritmo PCalg.

Tabela 2-Resumo de métodos descritivos sem modelo baseados em conceitos de teoria da informação.

<b>Método</b>	<b>Princípio</b>	<b>Características</b>
Informação mútua parcial	Dependência estatística	-Indicador não causal; -Distingue efeitos diretos/indiretos; -Computacionalmente intensivo.
Entropia conjunta e condicional	Entropia bivariada	-Indicador não causal; -Distingue efeitos diretos/indiretos.

### 2.2.1.1 Correlação linear ou marginal

A correlação, também designada como associação, é qualquer relação de dependência estatística (causal ou não causal) entre duas variáveis. Embora este método seja denotado como a medida da relação entre variáveis aleatórias, a correlação não implica causalidade, sendo por isso um método não causal.<sup>19,20</sup>

Existem várias abordagens a este método e diversos coeficientes de correlação para se estimar a associação entre variáveis.<sup>20, 21</sup> O procedimento mais tradicional consiste numa representação dos dados das duas variáveis sob formato de uma nuvem de pontos, de forma a

se mostrar essa associação, que pode ser traduzida numericamente pelo coeficiente de correlação amostral de *Pearson* ou pelo seu quadrado (coeficiente de determinação).<sup>22</sup> Este coeficiente é normalmente representado por  $r$  e é uma medida do grau com que duas variáveis se associam linearmente. Diz-se, por isso, que é um método descritivo sem modelo com uma correlação linear. Para duas variáveis  $x$  e  $y$ , este coeficiente é calculado a partir do quociente entre a covariância amostral das variáveis e o produto dos seus desvios padrões amostrais (Equação 1).<sup>21, 22</sup>

$$r = \frac{\widehat{Cov}(x,y)}{\widehat{\sigma}_x \widehat{\sigma}_y} \quad (1)$$

O valor do coeficiente  $r$  apresenta diversas características tais como: assume valores entre -1 e 1, e quanto maior for o seu valor absoluto, maior será a associação linear entre as variáveis<sup>21</sup>; se o seu valor é positivo então tem-se uma associação linear positiva, ou seja, quando o valor de uma variável aumenta existe uma tendência para que o valor da outra variável também aumente de forma linear; se o seu valor é negativo tem-se uma associação linear negativa e existe uma tendência para que os valores de uma das variáveis diminua quando os valores da outra variável aumentam. O seu valor pode sofrer influência pela presença de *outliers*, podendo a representação gráfica dos dados ser uma forma eficaz na identificação e interpretação destas observações.<sup>21</sup> A maior desvantagem para o uso deste método é ter apenas em conta as duas variáveis em questão, ou seja, o valor absoluto do coeficiente  $r$  pode ser elevado, mas a associação entre as duas variáveis não ser direta, pois sofre efeitos de uma terceira variável de confusão. Logo, a sua aplicação à inferência da conectividade da rede é muito limitada.

### 2.2.1.2 Correlação cruzada

A correlação cruzada indica o grau da relação linear desfasada entre duas variáveis.<sup>16</sup> A literatura sobre este método é extensa, no entanto pode-se assimilar a correlação cruzada como a covariância entre variáveis desfasadas no tempo.<sup>23</sup> Na Figura 3 pode observar-se um exemplo de um desfasamento entre padrões/picos nos valores de duas variáveis. A definição apresentada baseia-se na covariância cruzada: o método da correlação cruzada começa por estimar a função da covariância cruzada ( $c_{xy}(\tau)$ ), segundo a Equação 2, onde  $\bar{x}$  e  $\bar{y}$  representam a média amostral da série de  $X$  e  $Y$ , respetivamente. Para se avaliar quantitativamente a influência de  $X$  em  $Y$  num determinado período de tempo desfasado ( $p_{x \rightarrow y}(\tau)$ ), recorre-se à Equação 3.

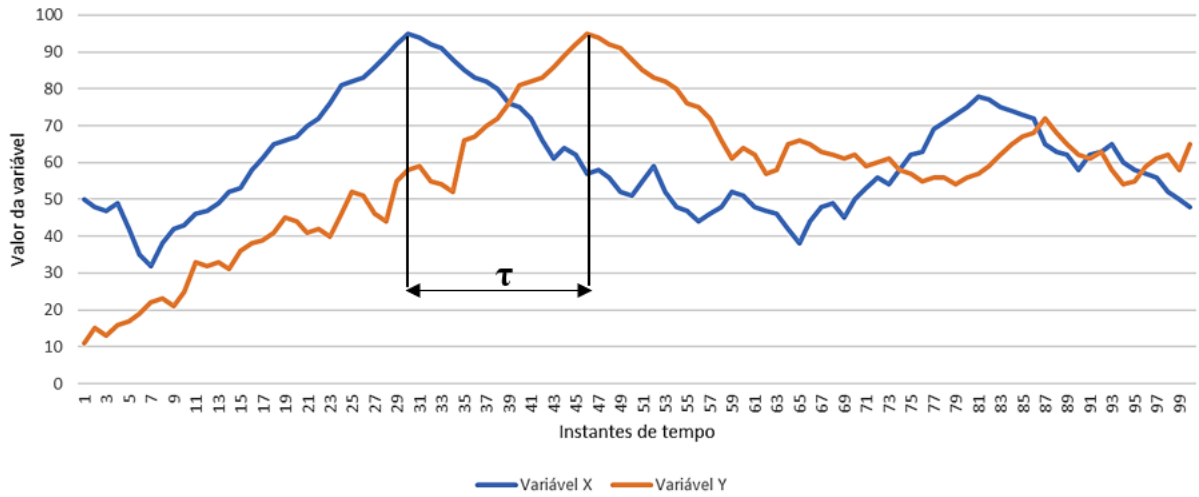


Figura 3- Exemplo da evolução do valor de duas variáveis para compreensão da detecção de padrões desfasados.

$$c_{xy}(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T-\tau} (x(t) - \bar{x})(y(t + \tau) - \bar{y}), \tau = 0, 1, 2, \dots \\ \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T+\tau} (y(t) - \bar{y})(x(t - \tau) - \bar{x}), \tau = 0, -1, -2, \dots \end{cases} \quad (2)$$

$$p_{x \rightarrow y}(\tau) = \frac{c_{xy}(\tau)}{\sigma_x \sigma_y} \quad (3)$$

A correlação cruzada também é um indicador causal capaz de indicar a direção da conexão entre as variáveis. Contudo, o desempenho da inferência da direccionalidade é afetado pela taxa de amostragem e da escolha do desfasamento de tempo  $\tau$  (podendo este ser diferente para cada par de variáveis). Este método também possui as mesmas limitações do método da correlação linear, no que diz respeito às conexões indiretas e às variáveis externas.<sup>16</sup>

Uma medida adotada para se ultrapassar a limitação da escolha do desfasamento, foi a introdução do conceito de índice de coincidência em que se utilizam diversas correlações cruzadas calculadas para diferentes desfasamentos num determinado horizonte denominado como intervalo de coincidência. Quanto maior for o intervalo de coincidência, maior é a reprodutibilidade do tempo de pico correlacionado.<sup>16,24</sup>

### 2.2.1.3 Correlação parcial

O método da correlação parcial permite quantificar a associação linear entre duas variáveis enquanto se controla a influência de outras variáveis aleatórias.<sup>25</sup> Pretendendo-se descobrir se há uma relação numérica, e com que grau, entre duas variáveis de interesse, o

coeficiente de correlação linear pode conduzir a resultados enganadores na presença de variáveis de confusão numericamente relacionadas com as variáveis de interesse. Estes resultados enganadores podem ser evitados pelo cálculo do coeficiente de correlação parcial.<sup>26</sup>

Por exemplo, suponha-se que se pretende discutir a influência de três variáveis (consumo energético, volume de fluido a tratar e tempo de operação) nos custos de operação de vários tipos de permutadores de calor. Para se verificar a existência de uma relação entre os dados do consumo energético e do volume de fluido a tratar, ao se ignorar os dados sobre o tempo de operação, através do método de correlação linear, obter-se-á resultados enganadores visto que o tempo de operação tem influência numérica no consumo energético e no volume de fluido a tratar. Assim, o método da correlação parcial evita este tipo de *contaminações* por outras correlações e quantifica o grau de associação direta entre duas variáveis.

Os coeficientes de correlação parcial ( $p$ ) podem ser de diversas ordens dependendo do objetivo e do número de variáveis em estudo. O cálculo destes coeficientes é feito por fórmulas próprias e pode ser obtido a partir dos coeficientes de ordem inferior. Na Equação 4 tem-se um exemplo do cálculo do coeficiente para duas variáveis  $x_i$  e  $x_j$  controladas por uma terceira variável  $x_k$  (correlação parcial de 1ª ordem), em que  $p_{ij.k}$  é o coeficiente de correlação parcial entre  $x_i$  e  $x_j$  mantendo o efeito de  $x_k$  controlado e  $r_{ij}, r_{ik}$  e  $r_{jk}$  são os coeficientes de correlação linear marginais entre os vários pares de duas variáveis. Esta forma de cálculo pode ser expandida para o número de ordens pretendidas.

$$p_{ij.k} = \frac{r_{ij} - r_{ik}r_{jk}}{\sqrt{(1-r_{ik}^2)(1-r_{jk}^2)}} \quad (4)$$

Este método constitui a coluna dorsal para métodos gráficos de inferência de conectividade, podendo os coeficientes de correlação parcial ser facilmente obtidos a partir do cálculo da inversa da matriz de covariância.<sup>25,27,28</sup>

#### **2.2.1.4 Informação mútua parcial**

Um dos métodos descritivos sem modelo baseado em conceitos da teoria da informação é o método da informação mútua parcial.

A medição das associações diretas entre variáveis é de grande importância em várias áreas da ciência, principalmente na era atual do *big data*. Embora a informação mútua seja amplamente utilizada na quantificação das associações entre variáveis, esta sofre dos mesmos



problemas da correlação marginal, tal como explicado anteriormente.<sup>29</sup> Para superar estas dificuldades, apresenta-se a informação mútua parcial que se baseia na teoria da informação e que pode quantificar com precisão as associações diretas não lineares entre variáveis medidas (analogamente à correlação parcial que identificam associações diretas lineares).<sup>18,29,30</sup>

Além de superar estes problemas, a informação mútua parcial mantém as propriedades de quantificação da informação mútua, tal como a não negatividade, sendo bastante usada para construir vários tipos de redes para as quais os modelos baseados em redes bayesianas falham.<sup>29</sup>

O indicador mensurável da informação mútua parcial é não-causal, apenas determinando a associação direta entre variáveis e pode ser calculado de diversas formas tais como a dependência estatística<sup>29,30</sup> ou baseada na entropia de Shannon.<sup>10,18,31</sup>

### 2.2.1.5 Entropia conjunta e condicional

O método baseado na entropia conjunta é uma extensão da entropia para o caso bivariado<sup>32</sup>, em que, para duas variáveis aleatórias X e Y, com uma distribuição conjunta  $p(x,y)$ , a entropia conjunta  $H(X,Y)$  é dada pela Equação 5.<sup>33</sup>

$$H(X,Y) = -\sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(x,y) \log p(x,y) \quad (5)$$

Por sua vez, a entropia condicional é dada pela Equação 6:<sup>33</sup>

$$H(X|Y) = -\sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(x,y) \log p(x|y) \quad (6)$$

em que  $p(x|y)$  é a distribuição condicional de X dado Y. Finalmente, a entropia conjunta é calculada em função da entropia condicional tal que:  $H(X,Y)=H(X)+H(X|Y)$ .<sup>34</sup> Reza<sup>35</sup>, demonstrou que  $H(X) \geq H(X|Y)$ . Isto significa que a entropia associada a uma variável aleatória é maior ou igual à entropia associada a essa variável condicionada por uma segunda variável aleatória, já que essa segunda variável pode trazer alguma informação sobre a primeira.<sup>34</sup> Se for válida a igualdade da expressão demonstrada por Reza, então as variáveis são estatisticamente independentes, não existindo associação entre elas, podendo então a entropia conjunta ser calculada por  $H(X,Y) = H(X) + H(Y)$ .<sup>32</sup>

Esta conjugação da entropia conjunta e condicional permite que sejam detetadas associações lineares e não lineares entre variáveis aleatórias e pode ser adaptada para mais que duas variáveis e séries temporais.<sup>36</sup>

### **2.2.2 Métodos baseados em modelos generativos**

Uma outra classe de métodos para a inferência de conectividade é a dos métodos baseados em modelos generativos. Um modelo generativo é um modelo usado para gerar valores de dados quando alguns parâmetros são desconhecidos.

O paradigma básico deste tipo de modelos consiste em se assumir um modelo generativo de dados e ajustar-se os parâmetros do modelo aos dados observados.<sup>16</sup> Contudo, não têm em conta todas as propriedades das redes reais, designadamente o grande número de fatores que afeta a estrutura e a função dos sistemas, sendo inviável contemplar todos estes parâmetros num único modelo.<sup>16,37</sup> Alguns exemplos deste tipo de métodos são os modelos autorregressivos<sup>16,37,38</sup> e os modelos probabilísticos.<sup>16,39</sup>

## **2.3 Métodos de inferência de causalidade**

Para a análise da causalidade entre duas variáveis, diversos métodos foram desenvolvidos e combinados de forma a obter-se o melhor desempenho na inferência causal. Geralmente, podem classificar-se estes métodos causais segundo o tipo de modelos que utilizam: modelos contínuos, modelos lógicos, modelos probabilísticos, modelos baseados na teoria da informação e modelos híbridos (combinação de dois ou mais métodos).<sup>40</sup> Na Tabela 3, apresenta-se algumas características dos grafos e do tipo de causalidade capturada em cada um dos métodos que irão ser abordados, baseados na teoria de grafos para a representação da rede.

Tabela 3- Propriedades dos vários métodos de inferência causal abordados<sup>40</sup>.

	Redes bayesianas (RB)	Redes bayesianas dinâmicas (RBD)	Redes booleanas (RBool)	Causalidade de Granger (CG)	Informação mútua condicional (IMC)	Transferência de entropia (TE)	Entropia causal (EC)
<b>Nodos</b>	Variáveis aleatórias	Variáveis aleatórias	Variáveis aleatórias	Variáveis aleatórias	Variáveis aleatórias	Variáveis aleatórias	Variáveis aleatórias
<b>Arestas</b>	Probabilidade conjunta	Probabilidade conjunta	Funções booleanas	Regressão linear	Interação de informação	Probabilidade de transição	Probabilidade condicional
<b>Parâmetros</b>	Multivariado	Vários pontos de tempo	Multivariado	Bivariado	Multivariado	Bivariado	Multivariado
<b>Causalidade</b>	Não linear	Não linear	Não linear	Linear	Linear	Não linear	Não linear

### 2.3.1 Modelos contínuos

Os métodos baseados em modelos contínuos utilizam variáveis contínuas para a inferência da causalidade, sendo que exigem um maior esforço computacional. As grandes vantagens destes modelos refletem-se numa menor perda de informação e a não sofrerem os efeitos da discretização. Um dos métodos mais relevantes e atual, é o método da causalidade de Granger (CG).<sup>40</sup>

A CG testa a relação causal entre duas variáveis para determinar a direção da causalidade e, em vez de encontrar as relações que melhor explicam o conjunto de dados, avalia quantitativamente cada relação pareada.<sup>40, 41</sup> Contudo, nem todas as relações encontradas por regressão têm causalidade atribuível. Por este motivo, este método também é utilizado para modelos de previsão.

A causalidade de Granger explica que se a incorporação de medidas anteriores de uma série temporal pode reduzir a variância do erro de predição autorregressiva de uma segunda série temporal, então a primeira série tem influência causal na segunda série.<sup>10, 42</sup>

Este método é menos propenso a sobreajuste do que as *redes bayesianas* e as *redes bayesianas dinâmicas* pois avalia as relações entre pares de variáveis individualmente, em vez de testar todos os caminhos da rede.<sup>41</sup> Todavia apresenta algumas desvantagens: se as duas variáveis forem efeito da mesma causa, pode não ser possível detetar uma causalidade verdadeira (esta desvantagem pode ser colmatada com um método de inferência de conectividade) e se o número de variáveis for muito maior que os pontos de amostragem no tempo, torna-se difícil obter a direccionalidade entre variáveis.<sup>40</sup>

### 2.3.2 Modelos lógicos

Os métodos baseados em modelos lógicos requerem uma discretização dos perfis das variáveis ao longo do tempo. Por conseguinte, estes métodos sofrem o efeito da discretização, o que implica que haja perda de informação.<sup>40</sup>

Uma das formulações resultantes da discretização são as redes Booleanas (RBool). Estas são comumente utilizadas para capturar padrões dos valores das variáveis aleatórias numa rede.<sup>43</sup>

Estas redes consistem numa *tuple* onde existe um vetor de variáveis booleanas e um conjunto de funções booleanas. Cada nodo da rede tem o valor de zero quando a variável correspondente não tem relevância sobre outra (caracterização por um limite) e toma o valor de 1 no caso contrário.<sup>40</sup> Os valores futuros destas variáveis no tempo  $t+1$  são calculados tendo por base os seus pais causais no tempo  $t$  (Pai causal ou *pai* é um nodo de uma rede que é causa direta de outro ou outros nodos) através das funções booleanas, denominando-se este cálculo por estado de transição.<sup>44</sup> O espaço do estado de transição consiste em todos os estados possíveis e tem o tamanho de  $2^n$ , sendo  $n$  o número de nodos.<sup>40</sup>

O estado estacionário de um modelo booleano pode refletir o estado estacionário de um modelo contínuo, enquanto o inverso não é totalmente verdadeiro, limitando o seu uso na inferência de redes causais.<sup>43</sup>

As RBool são um método simples de implementar computacionalmente, onde cada variável apenas toma o valor de 0 ou 1. No entanto, mapear uma rede com causalidade verdadeira é uma tarefa complexa e a existência de apenas dois valores atribuídos é uma simplificação exagerada.<sup>45</sup>

### 2.3.3 Modelos probabilísticos

Os modelos probabilísticos recorrem a funções de distribuição de probabilidade para prever a sua estrutura causal.<sup>40</sup> São de salientar os modelos baseados em redes bayesianas (RB) e, em particular, as redes bayesianas dinâmicas (RBD).

### 2.3.3.1 Redes bayesianas

As redes bayesianas são modelos gráficos probabilísticos que representam a estrutura de dependência de um conjunto de variáveis e a sua distribuição conjunta de forma eficiente.<sup>46</sup> Estas redes consistem num gráfico acíclico direto (GAD), onde os nodos na rede causal representam variáveis aleatórias e as arestas representam a associação entre elas, em que estas relações são inferidas através de testes de independência condicional. A cada variável aleatória da rede está associada uma distribuição de probabilidade condicional.<sup>40,47</sup>

Este método consegue capturar o conhecimento existente nos dados, podendo *aprender* as distribuições condicionais de cada variável aleatória a partir dos mesmos. Para tal, é preciso que sejam verificadas hipóteses para a inferência deste tipo de redes tais como a fidelidade, a condição causal de Markov e o conceito da *d-separação*.<sup>15,41,48,49</sup>

As RB proporcionam uma representação gráfica facilmente interpretável e informações estatísticas significativas. É de salientar que as relações capturadas entre variáveis são complexas, o que traz mais informação sobre o sistema em análise do que os modelos convencionais.<sup>46</sup> Contudo, a *aprendizagem* desta rede é um problema difícil. A sua resolução pode ser facilitada recorrendo a heurísticas, sem a garantia de se encontrar um ótimo global.<sup>40</sup> Para além disso, o espaço de pesquisa aumenta exponencialmente com o aumento do número de variáveis na rede. Assim, as RB são mais utilizadas para redes com um número de variáveis mais reduzido. É de salientar que este método não consegue lidar com ciclos de *feedback*.<sup>50</sup>

### 2.3.3.2 Redes bayesianas dinâmicas

O principal problema das RB são as restrições acíclicas que não permitem modelar ciclos de *feedback*, nem são capazes de *aprender* regulações de atraso (analisam o sistema num estado estacionário).<sup>40,51</sup>

As redes bayesianas dinâmicas (RBD) são uma extensão das RB com mecanismos adicionais que permitem modelar essas influências temporais bem como relações acíclicas.<sup>51</sup> usam um conjunto de RB para determinar como as variáveis num determinado instante de tempo podem influenciar as variáveis noutra instante de tempo (Figura 4).<sup>41</sup>

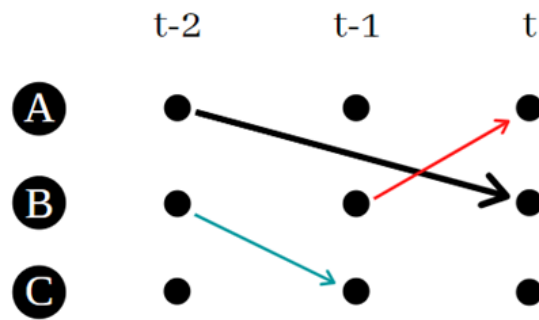


Figura 4- Causalidade entre variáveis em diversos instantes de tempo.

Este método considera instantes de tempo consecutivos para modelar a rede, dando origem a uma rede de transição onde as interações entre variáveis são calculados em vários instantes de tempo. Para a modelação das interações entre variáveis em períodos de amostragem igual a 1 utilizam-se RBD de 1ª ordem. São utilizadas RBD de ordem mais elevada para modelar as interações entre variáveis com um período de amostragem superior a 1.<sup>40,51,52</sup>

As RBD apresentam uma dificuldade computacional acrescida devido à complexidade das interações entre variáveis. Ainda assim, são bastante utilizadas para modelos de diagnóstico de falhas e de inferência de redes neurais a partir de dados de treino.<sup>41</sup>

### 2.3.4 Modelos baseados na teoria da informação

Os modelos baseados na teoria da informação requerem uma discretização prévia dos dados contínuos, realizada num estágio de pré-processamento de dados. Na teoria de informação, os métodos abordados são a informação mútua condicional, transferência de entropia e entropia causal.

#### 2.3.4.1 Informação mútua condicional

A informação mútua condicional (IMC) é uma medida da quantidade de informação que uma variável detém sobre outra. A IMC é determinada usando testes de dependência condicional para obter a direccionalidade das relações.<sup>53</sup> Este método lista todos os tripletos de variáveis na rede e testa a IMC pela Equação 7 (exemplo com 3 variáveis X, Y e Z, onde  $I(X, Y)$  e  $I(X, Y/Z)$  corresponde à informação mútua e à informação mútua parcial, respetivamente).<sup>41</sup>

$$IMC(X, Y, Z) = I(X, Y) - I(X, Y|Z) \quad (7)$$

Pela Equação 7 e supondo o triplete X-Y-Z, se o valor de IMC for negativo então Z é um colisor, ou seja, Z é efeito comum das causas X e Y.<sup>41, 54</sup>

A IMC é um método simples para a inferência causal. Contudo, tem a desvantagem de não identificar causalidade em tripletos cuja IMC seja maior que zero, o que corresponde a uma rede direta parcialmente completa.<sup>41</sup> Neste método, foram introduzidos vários melhoramentos que permitem inferir os colisores mesmo com IMC maior que zero, de forma a contornar este problema.<sup>55</sup>

#### **2.3.4.2 Transferência de entropia**

A transferência de entropia (TE) é um método estatístico que mede a quantidade de informação que é transferida numa dada direção, entre duas variáveis, para a determinação da estrutura causal.<sup>31, 56, 57</sup> A quantidade de informação fornece uma medida das relações causais entre variáveis aleatórias e este teste é realizado para todos os pares de variáveis, onde existe um limite estatístico para os valores da TE em que as relações não são comprovadamente causais.<sup>41</sup>

A TE pode ser calculada tendo por base a entropia de Shannon, a partir da IMC<sup>58</sup>, onde o termo condicional é composto pelos valores no passado da variável condicionada. Também pode ser transformada no teste da causalidade de Granger sempre que o processo for autorregressivo e as variáveis sejam gaussianas. No caso de o sistema ser não-linear, torna-se mais vantajoso utilizar a TE.<sup>59</sup>

Como desvantagens tem-se que, mesmo para redes de tamanho moderado, este método é mais exigente computacionalmente sendo requerido o teste a todos os pares de variáveis. Muitas vezes leva a falsos positivos devido à transferência de informação indireta. Não é, portanto, apropriado na presença de influências indiretas, as quais são muito comuns em processos industriais<sup>12</sup>. De notar que a variação do limite de deteção de causalidade pode alterar significativamente a estrutura da rede causal.<sup>41</sup>

#### **2.3.4.3 Entropia causal**

Nos testes realizados aos pares de variáveis, a TE não distingue efeitos diretos ou indiretos, ou seja, a transferência de informação de X para Z pode ser consequência de uma

transferência de informação direta de  $X$  para  $Y$  e posteriormente de  $Y$  para  $Z$ .<sup>60</sup> Como tal, foi introduzida uma nova abordagem: a entropia causal (EC).<sup>40</sup>

O paradigma da EC é o seguinte: supondo duas variáveis  $X$  e  $Y$ , para além da informação que  $X$  recebe de outras variáveis, mede também a informação fornecida a  $X$  por  $Y$ . Por definição, a EC mede a transferência de informação de uma variável aleatória para outra, condicionada por um conjunto de outras variáveis aleatórias.<sup>60, 61</sup> Este método é uma ferramenta poderosa com a qual as interações dinâmicas de processos estocásticos podem ser inferidas e concatenadas a uma única métrica numérica.

No que diz respeito ao cálculo das relações causais, a EC sobrestima os valores da métrica prejudicando a inferência causal e, por conseguinte, dificultando a interpretação destes valores.<sup>62</sup>

## 2.4 Modularidade, deteção de comunidades e *Markov-blankets*

A deteção de comunidades refere-se ao procedimento de identificação e decomposição de uma rede complexa, possivelmente com centenas ou milhares de variáveis, em subgrupos de variáveis (comunidades ou módulos) com alto grau de interação entre si, tendo por base as suas propriedades estruturais tais como a densidade de associações locais e globais entre variáveis.<sup>63</sup> <sup>64</sup> Esta divisão pretende estruturar e reduzir a dimensionalidade dos sistemas. Contudo, a deteção destas comunidades depende fortemente da topologia da rede, visto que estas podem ser estáticas ou dinâmicas.

Com base nas propriedades topológicas das redes, os módulos ou comunidades, podem ser classificados em módulos sobrepostos e módulos disjuntos. Na Figura 5(a) está representada um exemplo de uma rede dividida em módulos disjuntos, em que cada nodo (variável) pertence apenas a um e um só módulo. A Figura 5(b) apresenta uma rede dividida em três módulos sobrepostos, onde existem nodos que pertencem a mais do que um módulo (nodos a vermelho).<sup>63, 65</sup>



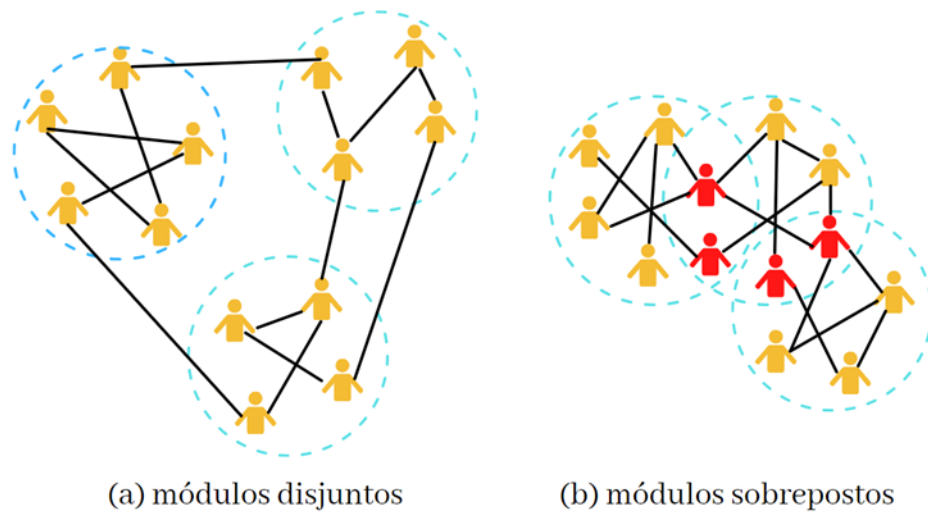


Figura 5- Representação de uma rede dividida em módulos disjuntos (a) e módulos sobrepostos (b).

A grande diversidade de redes existentes, provenientes de diferentes processos, levou a que fossem desenvolvidos diversos algoritmos para se obter o melhor desempenho na detecção de comunidades, em que os módulos estimados e de referência são comparados.<sup>63</sup> Existem diferentes medidas para a avaliação da desempenho desses algoritmos tais como: exploração dos limites de detecção do algoritmo por comparação com vários *benchmarks*<sup>66</sup>, avaliação e pesquisa de detecção de comunidades disjuntas e sobrepostas em redes de larga escala<sup>67</sup>, tempo computacional<sup>63</sup>, valor da função de otimização das relações *inter* e *intra* comunidades<sup>64</sup> e memória requerida por cada algoritmo.<sup>63,66,67</sup>

O conceito de *Markov-blanket* foi introduzido por Judea Pearl em 1988<sup>50</sup>. O *Markov-blanket* de um determinado nodo  $X$  numa rede, contém todos os nodos que ligam o nodo  $X$  à restante rede. Para uma melhor conceptualização, atente-se na Figura 6.

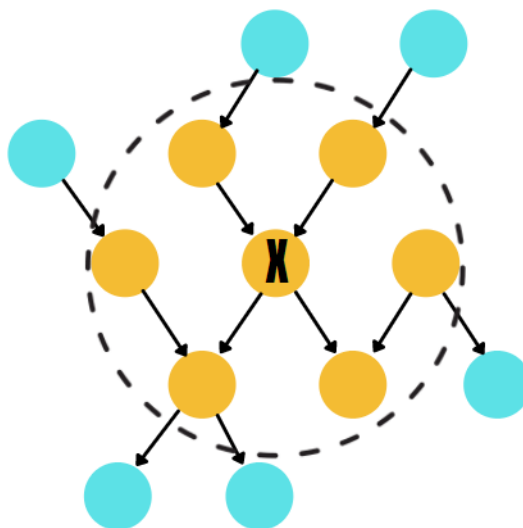


Figura 6- Exemplo do Markov-blanket na variável aleatória  $X$ ,  $MB(X)$ .

Na Figura 6, está representado o MB(X) (*Markov-blanket* da variável X) que representa o conjunto de nodos composto por todos os *pais* e *filhos* da variável X, e por os *pais* de todos os *filhos* da variável X (Filho causal ou *filho* é um nodo numa rede que é efeito direto de outro ou outros nodos).<sup>50</sup> Este conceito é importante pois os valores dos *pais* e *filhos* da variável X podem não ser suficientes para explicar essa variável. Por esse motivo, os *pais* dos *filhos* da variável X também são incluídos neste conjunto.

No senso estatístico, pode-se afirmar que, dados os nodos em MB(X), a variável X é condicionalmente independente de todas as outras variáveis da rede.

## 2.5 Algoritmos utilizados para a análise de redes

Esta secção destina-se a uma breve revisão bibliográfica de alguns métodos acima referidos, assim como uma breve explicação dos algoritmos que irão ser utilizados nesta dissertação.

Fan Yang *et al*<sup>10</sup> aplicaram os métodos da causalidade de Granger (CG), correlação cruzada e transferência de entropia (TE) ao *Tennessee Eastman Process* (TEP) para, através da inferência de causalidade, identificar os caminhos de propagação de oscilações em ciclos de controlo. Landman *et al*<sup>68</sup> combinaram a CG e o Diagrama de Processo e Instrumentação (PID-*Process and Instrumentation Diagram*) para executar uma análise de propagação de falhas na secção de secagem de uma máquina industrial de papel. Naghoosi *et al*<sup>69</sup>, através da TE e da informação mútua, estudaram a influência da dependência entre as variáveis de uma unidade final de tratamento de água (separador de água, cimento e minerais) nas condições de operação da mesma. Galagali<sup>70</sup> fez uso de Redes Bayesianas para inferir a estrutura da rede de um conjunto de reações químicas e respetivas espécies do *reforming* catalítico do metano. Rato e Reis<sup>1, 2, 12</sup> utilizaram o método das correlações parciais (PCalg) e CG/correlação cruzada para inferirem a rede causal, a qual foi usada para monitorização de processos e diagnóstico de falhas. Masoleeh *et al*<sup>64</sup> utilizou um algoritmo de otimização multiobjetivo para subdividir a rede causal do TEP em várias comunidades.

Os algoritmos aplicados nesta dissertação serão abordados nas secções seguintes.

### 2.5.1 PCalg

O algoritmo de inferência de conectividade baseado no método das correlações parciais é comumente denominado de PCalg. Neste algoritmo, a avaliação da significância dos coeficientes de correlação é feita tendo por base a Equação 8, em que  $n_{obs}$  corresponde ao número de observações,  $OC$  é a ordem da correlação parcial e  $Z_\alpha$  é o valor da função de distribuição cumulativa inversa normal para uma probabilidade  $\alpha$ .

$$cut - off_{OC} = \frac{e^{2Z_\alpha \sqrt{\frac{1}{n_{obs}-3-OC}-1}}}{e^{2Z_\alpha \sqrt{\frac{1}{n_{obs}-3-OC}+1}}} \quad (8)$$

Primeiramente, calculam-se as correlações marginais entre todos os pares de variáveis, segundo a Equação 1, onde se avalia o coeficiente de correlação pelo *cut-off* de ordem 0 (Equação 8).<sup>2</sup> Se o coeficiente de correlação marginal for menor que o *cut-off* de ordem 0, então a associação direta entre o par de variáveis é eliminada.

Posteriormente, para os pares de variáveis em que a associação foi dada como significativa no passo anterior, calculam-se as correlações parciais de primeira ordem entre todos os pares de variáveis controlando o efeito das restantes variáveis do sistema, uma de cada vez, pela Equação 4. Se o coeficiente de correlação parcial de ordem 1 for menor que o *cut-off* de ordem 1, para, pelo menos, uma variável controlada  $k$ , então a associação direta entre o par de variáveis é eliminada.

Por último, para os pares de variáveis em que a associação foi dada como significativa no passo anterior, calculam-se as correlações parciais de segunda ordem entre todos os pares de variáveis controlando o efeito das restantes variáveis do sistema, duas de cada vez, pela Equação 9. Se o coeficiente de correlação parcial de ordem 2 for menor que o *cut-off* de ordem 2, para, pelo menos, duas variáveis controladas  $k$  e  $t$ , então a associação direta entre o par de variáveis é eliminada; caso contrário a associação permanece na rede final inferida.

$$p_{ij.kt} = \frac{p_{i.jk} - p_{i.tk} p_{j.tk}}{\sqrt{(1-p_{i.tk}^2) - (1-p_{j.tk}^2)}} \quad (9)$$

Este procedimento poderia ser generalizado para  $OC$  ordens, repetindo os passos anteriores.<sup>2</sup> A ordem deve ser ajustada dependendo da dimensionalidade do sistema a estudar pois, numa rede com milhares de variáveis, pode não ser suficiente controlar-se apenas duas variáveis. Nesta tese, escolheu-se parar na segunda ordem da correlação parcial porque o sistema estudado tem 16 variáveis.

Na Figura 7 é apresentado um diagrama que esquematiza o algoritmo PCalg.

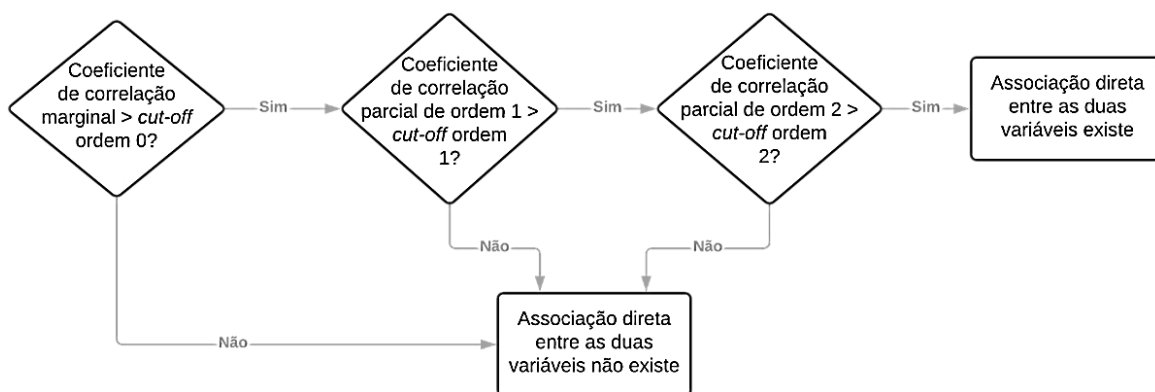


Figura 7- Algoritmo PCalg.

## 2.5.2 Causalidade de Granger

Para a aplicação da CG é necessário que a inferência de conectividade da rede esteja concluída, pois apenas serão testados os pares de variáveis em que se verificarem associações diretas.

De forma a se determinar a direccionalidade entre duas variáveis, segue-se o exemplo do teste da causalidade de Granger em que se supõe que  $X$  é *causa Granger* de  $Y$ . Se esta hipótese for verdadeira, então os valores passados de  $X$  acrescentarão informação relevante na previsão dos valores de  $Y$ .

Seja o modelo autoregressivo para  $Y$  de ordem  $s$  dada pela Equação 10: <sup>71</sup>

$$Y_t = \sum_{j=1}^s A_j Y_{t-j} + \varepsilon_1 \quad (10)$$

e o modelo de autoregressão para  $Y$ , incluindo os valores passados de  $X$ , de ordem  $s$  dada pela Equação 11,<sup>71</sup> em que  $A_j$  e  $B_j$  são coeficientes autorregressivos e  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  são os resíduos de cada modelo, tem-se que:

$$Y_t = \sum_{j=1}^s A_j Y_{t-j} + \sum_{j=1}^s B_j X_{t-j} + \varepsilon_2 \quad (11)$$

Por outras palavras, são testadas as hipóteses  $H_0: B_1=B_2=\dots=B_s=0$  versus  $H_1: B_j \neq 0$  através do teste estatístico- $F$ , segundo a Equação 12,<sup>68</sup> em que  $SQR_{Eq.10}$  e  $SQR_{Eq.11}$  são a soma do quadrado dos resíduos dos modelos das Equações 10 e 11, respetivamente.

$$F = \frac{SQR_{Eq.10} - SQR_{Eq.9}}{SQR_{Eq.9}} \times \frac{n_{obs} - 2s - 1}{s} \quad (12)$$

Na Figura 8 está representado o esquema do algoritmo para a inferência de causalidade numa rede através da causalidade de Granger.

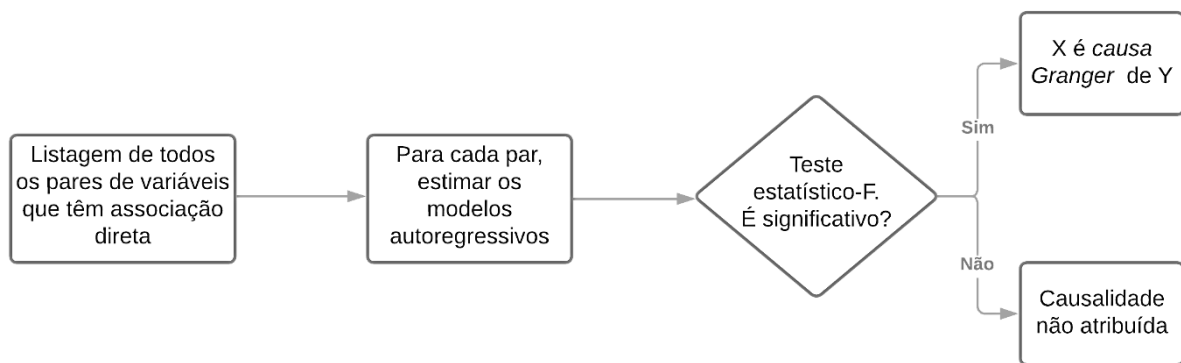


Figura 8- Algoritmo da CG para inferência da causalidade numa rede.

### 2.5.3 Correlação cruzada

No algoritmo da correlação cruzada calcula-se, através da Equação 2, a função de covariância cruzada em vários desfasamentos de tempo, calculando-se de seguida o coeficiente de correlação cruzada para cada um dos desfasamentos  $\tau$ .

Como já referido acima, a causa acontece sempre antes do efeito e por esse motivo pode-se avaliar a direccionalidade, entre duas variáveis  $X$  e  $Y$ , pelos coeficientes de correlação cruzada e pelo sinal de  $\tau$  em que ocorrem os maiores valores dos mesmos.

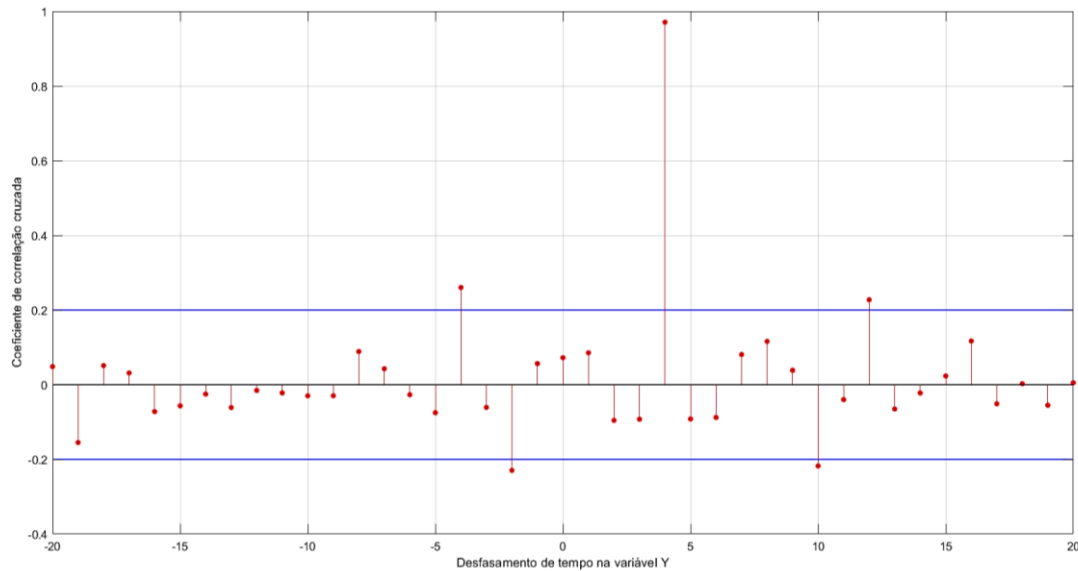


Figura 9- Aplicação do método da correlação cruzada entre X e Y, onde Y sofre os desfasamentos de tempo.

Nas Figuras 3 e 9 pode observar-se que os maiores valores do coeficiente de correlação cruzada ocorrem quando o desfasamento de tempo em Y é positivo, ou seja, a série temporal de Y é adiantada em relação à série temporal de X, e por isso é X quem causa Y. A avaliação da causalidade, além do descrito anteriormente, faz-se também pelo valor de prova da correlação (*p-value*) ou pelos limites de confiança (linhas a azul na Figura 9).

### 2.5.4 Detecção de comunidades

O algoritmo de deteção de comunidades compreende várias etapas para a escolha da melhor partição (nº de comunidades e nº de variáveis em cada comunidade). Para uma explicação mais clara, observe-se a Figura 10.

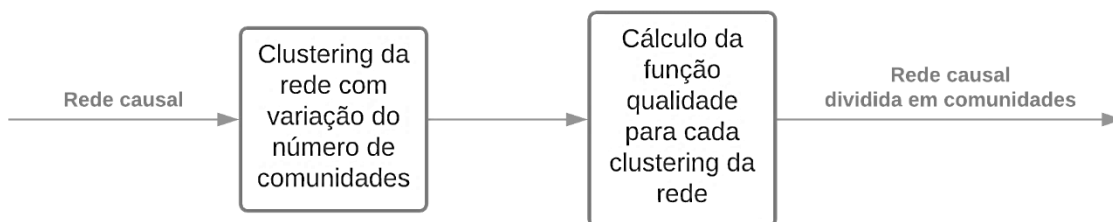


Figura 10- Algoritmo de deteção de comunidades.

Este algoritmo necessita da rede causal do sistema, para obter a matriz adjacência, procedendo à divisão da rede em comunidades.

Na primeira etapa do algoritmo, através do método espectral de maximização da modularidade<sup>72</sup>, são obtidas várias divisões da rede que diferem entre si no número de comunidades e nas variáveis que lhes pertencem. Na segunda etapa, todas estas redes são avaliadas por uma função qualidade de densidade global, que é baseada nas associações que cada variável tem<sup>73,74</sup>:

$$Q_{DG} = \frac{1}{2}(Q_{DG}^i + 1 - Q_{DG}^e) \quad (13)$$

A Equação 13 representa a função qualidade de densidade global utilizada, onde  $Q_{DG}^i$  representa a densidade interna global e  $Q_{DG}^e$  é a densidade externa global. Diz-se que a associação é de saída quando uma variável é causa de outra, e que a associação é de entrada quando a variável é efeito de outra. Assim, podemos definir  $Q_{DG}^i$  como a soma das associações de entrada, dado duas variáveis pertencentes à mesma comunidade, dividindo pela “área” total de todas as comunidades (todas as associações de entrada *possíveis*).  $Q_{DG}^e$  é definida de forma análoga.<sup>73</sup>

A partição que obtiver o maior valor na função qualidade, é a escolhida pelo algoritmo como *output* da divisão da rede causal.

### **Conclusão**

Depois de discutida a inferência de redes através de vários métodos, a divisão funcional da rede causal e os algoritmos a serem utilizados para esse efeito, segue-se a apresentação das abordagens às metodologias de monitorização onde se incorpora a informação contida nas redes causais.





# 3. Metodologias multivariadas para a monitorização estatística de processos

“If everything seems to be going well, you obviously don’t know what’s going on”

*Edward Murphy*

Este capítulo aborda quatro metodologias de monitorização de processos. Duas delas já estão estabelecidas na literatura, com aplicações em vários processos, e serão utilizadas como *benchmarks*. As outras duas são metodologias desenvolvidas e propostas nesta dissertação.

## 3.1 Metodologias usadas como *benchmark*

### 3.1.1 Monitorização estatística de processos baseada na análise de componentes principais (PCA-MSPC)

O PCA é uma das técnicas estatísticas multivariadas mais utilizada.<sup>75,76</sup> O objetivo desta técnica é reduzir a dimensão de um conjunto alargado de variáveis, obtendo um conjunto menor de novas variáveis designadas de Componentes Principais (CP), que explicam o essencial dos dados originais.<sup>77</sup>

Os CP são obtidos através de combinações lineares das variáveis originais, de forma a que estes sejam descorrelacionados entre si e maximizem a explicação da variância dos dados originais.<sup>75,77</sup>

Considerando uma matriz de dados  $\mathbf{D}_{n \times m}$  representativa das NOC (*Normal Operating Conditions*), com  $n$  observações e  $m$  variáveis, o primeiro passo para aplicação do PCA é, usualmente, o auto-escalonamento das variáveis, onde se remove os efeitos das diferentes ordens de grandeza dos dados observacionais das variáveis (quando as variáveis têm diferentes unidades).<sup>76,78</sup>

A partir da média amostral de cada variável (Equação 14), os dados são centrados, ficando assim com média igual a zero (Equação 15):

$$\bar{D}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_{ij} \quad (14)$$

$$D_{cij} = D_{ij} - \bar{D}_j \quad (15)$$

em que  $\bar{D}_j$  é a média dos dados observacionais de cada variável e  $D_{cij}$  são os dados centrados em média igual a 0.

De seguida, através do desvio-padrão amostral das variáveis (Equação 16), é obtida a matriz auto-escalada  $\mathbf{Z}_{n \times m}$  com média igual a 0 e desvio-padrão igual a 1, cujos elementos são calculados pela Equação 17.

$$\sigma_D = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{nobs} (d_i - \bar{d})^2}{nobs - 1}} \quad (16)$$

$$Z_{ij} = \frac{D_{cij}}{\sigma_{D_j}} \quad (17)$$

A matriz de covariância de  $\mathbf{Z}$ , que é igual à matriz de correlações de  $\mathbf{D}$ , é a fonte de informação a partir da qual se retiram os valores próprios e os respetivos vetores próprios, para se obter os resultados do modelo PCA.<sup>78, 79</sup> Os valores próprios são ordenados do maior para o menor valor, onde os maiores valores próprios representam a maior variabilidade dos dados, enquanto os menores representam o ruído.<sup>78</sup>

Por fim, a matriz  $\mathbf{Z}$  é decomposta da seguinte forma (Equação 18):<sup>12</sup>

$$\mathbf{Z} = \mathbf{T}\mathbf{L}^T + \mathbf{E} \quad (18)$$

em que  $\mathbf{T}_{n \times p}$  é a matriz de pontuações do PCA ( $p$  é o número de CP retidos),  $\mathbf{L}_{m \times p}$  é a matriz de carregamento do PCA e  $\mathbf{E}_{n \times m}$  é a matriz residual do PCA que contém a contribuição acumulada dos últimos CP, que é dada pela Equação 19,

$$\mathbf{E} = \mathbf{Z} - \hat{\mathbf{Z}} \quad (19)$$

em que  $\hat{\mathbf{Z}}$  é a matriz  $\mathbf{Z}$  reconstruída a partir das pontuações e carregamentos do PCA, com  $p$  componentes principais.

Para se avaliar o número de CP incluídos no modelo PCA, existem várias metodologias que podem ser aplicadas<sup>80</sup>, como o método de Kaiser, o teste de *scree* e a metodologia da fração de variância explicada. Qualquer uma destas metodologias é baseada na informação contida nos valores próprios.<sup>78,80</sup>

Depois de se escolher quantos CP usar no modelo PCA, as matrizes de carregamento e das pontuações devem ser analisadas. Os valores da matriz de carregamento indicam que variáveis contribuem mais para a variabilidade ao longo de um determinado CP.<sup>76, 78</sup> Através da visualização do ajuste das pontuações, pode-se observar os *clusters* formados que podem permitir a detecção de um evento especial que tenha como causa um fenómeno conhecido ou desconhecido.<sup>78</sup>

### 3.1.1.1 Detecção de falhas

A aplicação do PCA-MSPC na detecção de falhas é dividida em duas fases. Na primeira fase, o objetivo é, a partir de um conjunto de dados de treino representativos da NOC, verificar se o sistema é estável e obter o modelo PCA. Ainda nesta fase, faz-se uso de um conjunto de dados de validação para o cálculo das estatísticas MSPC.

Na segunda fase, efetua-se a detecção de falhas através de um conjunto de dados de teste e avalia-se o desempenho do modelo de monitorização. Na Figura 11 está representado um esquema das fases acima descritas.

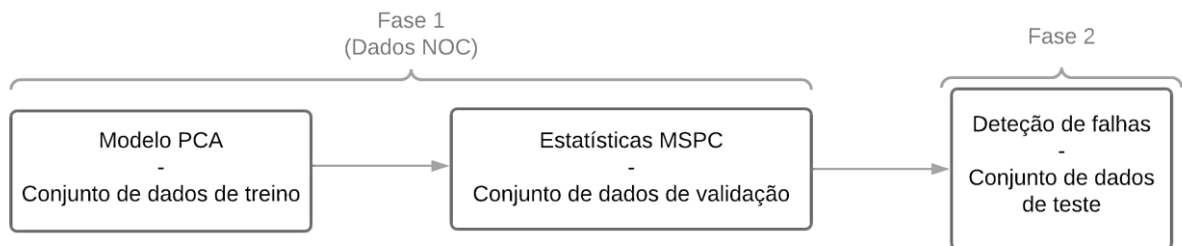


Figura 11- Etapas do algoritmo do PCA-MSPC.

As estatísticas utilizadas para monitorizar o processo são a estatística  $T^2$  de Hotelling e a estatística  $Q$  (ou erro quadrático preditivo).

A estatística  $T^2$  de Hotelling é uma generalização multivariada da estatística *t-student* e denota a distância estatística entre cada observação e a média de cada variável.<sup>12, 77</sup> Para os primeiros  $p$  pontuações do PCA, esta estatística toma a forma de,

$$T_{PCA}^2 = \sum_{i=1}^p \frac{t_i^2}{\lambda_i} \quad (20)$$

em que  $T_{PCA}^2$  é a estatística  $T^2$  de Hotelling aplicada para o PCA-MSPC,  $\mathbf{t}_i$  é o vetor de pontuações do modelo PCA e  $\lambda_i$  é o valor próprio.

Por definição, o Limite de Controlo Inferior (LCI) das duas estatísticas é zero. O Limite de Controlo Superior (LCS) para a  $T^2_{PCA}$  é dado pela Equação 21:<sup>77,81</sup>

$$LCS_{T^2_{PCA}} = \frac{p(n_{obs}-1)(n_{obs}+1)}{n_{obs}-n_{obs} \times p} \times F_{\alpha, n_{obs}, n_{obs}-p} \quad (21)$$

onde  $F_{\alpha, n_{obs}, n_{obs}-p}$  é o percentil superior  $\alpha$  da distribuição  $F$  com  $p$  e  $n_{obs}-p$  graus de liberdade.<sup>77</sup>

A estatística  $Q$  analisa a variabilidade não explicada pelo modelo PCA e pode ser definida como o somatório dos erros quadrados de previsão,<sup>78,82</sup>

$$Q_{PCA} = \sum_{i=1}^m e_i^2 \quad (22)$$

$$\mathbf{e}_i = (z_i - \widehat{z}_i) \quad (23)$$

em que  $Q_{PCA}$  é a estatística  $Q$  e  $\mathbf{e}_i$  é o vetor dos resíduos, definido pela Equação 23.

O LCS para a  $Q_{PCA}$  é definido como<sup>77</sup>

$$LCS_{Q_{PCA}} = \theta_1 \left( \frac{c_\alpha \sqrt{2\theta_2 h_0^2}}{\theta_1} + 1 + \frac{\theta_2 h_0 (h_0 - 1)}{\theta_1^2} \right)^{\frac{1}{h_0}} \quad (24)$$

em que,

$$\theta_i = \sum_{j=p+1}^n \lambda_j^i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (25)$$

$$h_0 = 1 - \frac{2\theta_1 \theta_3}{3\theta_2} \quad (26)$$

onde  $p$  é o número de CP retidos,  $c_\alpha$  é a variável normal padrão correspondente ao percentil superior  $1-\alpha$ .

No caso de estudo investigado nesta tese, a Taxa de Falsos Alarmes (TFA) nas NOC ficará em torno do nível de significância  $\alpha$ .

### 3.1.1.2 Diagnóstico de falhas

Quando uma falha é detetada pela metodologia de monitorização, o objetivo seguinte é descobrir qual a causa raiz (variável ou variáveis onde ocorreu a falha). No PCA, o diagnóstico de falhas é feito usualmente por gráficos de contribuições.<sup>12,83</sup> Neste trabalho de tese vai seguir-se a metodologia proposta por Qin *et al*, tal como descrito de seguida.<sup>83</sup>

Define-se aqui  $\check{\mathbf{L}}_{m \times (m-p)}$  como a matriz de carregamento dos resíduos do PCA,  $\mathbf{\Lambda}$  a matriz diagonal com os primeiros  $p$  valores próprios,  $\widehat{\mathbf{\Lambda}}$  a matriz diagonal com os valores próprios

residuais e  $\mathbf{S}$  a matriz covariância de  $\mathbf{z}_i$ . A contribuição da  $i$ -enésima variável para a  $T_{\text{PCA}}^2$  e  $Q_{\text{PCA}}$  é dada pelas Equações 27 e 28, respetivamente,<sup>12,83</sup>

$$T_i^2 = \|\Lambda^{-1/2} L_i^T \mathbf{z}_i\|^2 \quad (27)$$

$$Q_i = \|\mathbf{z}_i - \hat{\mathbf{z}}_i\|^2 \quad (28)$$

Desde que  $T_i^2$  e  $Q_i$  tenham uma forma quadrática, os seus limites de confiança podem ser obtidos a partir dos resultados de *George Box* (1954)<sup>12,84</sup>, aproximando a sua distribuição a  $g_i^T \chi^2(h_i^T)$  e  $g_i^Q \chi^2(h_i^Q)$ , respetivamente, onde

$$g_i^T = \text{tr}[(S_i L_i \Lambda^{-1} L_i^T)^2] / \text{tr}[S_i L_i \Lambda^{-1} L_i^T] \quad (29)$$

$$h_i^T = \left( \text{tr}[S_i L_i \Lambda^{-1} L_i^T] \right)^2 / \text{tr} \left[ \left( S_i L_i \Lambda^{-1} L_i^T \right)^2 \right] \quad (30)$$

$$g_i^Q = \text{tr} \left[ \left( \tilde{L}_i \Lambda \tilde{L}_i^T \right)^2 \right] / \text{tr}[\tilde{L}_i \Lambda \tilde{L}_i^T] \quad (31)$$

$$h_i^Q = \left( \text{tr}[\tilde{L}_i \Lambda \tilde{L}_i^T] \right)^2 / \text{tr} \left[ \left( S_i \tilde{L}_i \Lambda \tilde{L}_i^T \right)^2 \right] \quad (32)$$

Para ambas as estatísticas, os limites de controlo são estabelecidos através de uma seleção apropriada do nível de confiança  $\alpha$ .<sup>12</sup>

### 3.1.2 Monitorização estatística de processos baseada na estatística $T^2$ de Hotelling considerando informação da rede (SET-Hotelling- $T^2$ )

As metodologias baseadas no PCA modelam as associações marginais entre as variáveis do processo e por esse motivo não conseguem descrever com eficácia as associações diretas entre variáveis.<sup>1</sup>

Uma das soluções para contornar este problema passa por inferir a rede causal do processo, incorporá-la nas variáveis observadas e descorrelacionar essas variáveis através de uma Transformação de Intensificação de Sensibilidade (SET, do inglês *Sensitivity Enhancing Transformation*).<sup>2, 12, 85</sup> Este pré-processamento, que já foi testado e bem sucedido<sup>12</sup>, irá ser aplicado nesta tese a fim de se incorporar a estrutura causal do sistema numa metodologia de monitorização. Isto deverá permitir contornar as limitações tidas no diagnóstico de falhas, através de um processo mais simples mas que mantém o rigor da metodologias alternativas.<sup>12</sup>

A metodologia SET (*Sensitivity Enhancing Transformation*) faz uso das correlações parciais para fazer um modelo linear baseado na rede inferida, obtendo assim erros de previsão que não são correlacionados com as variáveis condicionadas.<sup>86</sup> A informação sobre os pais causais é usada no contexto da SET para construir um modelo de regressão para cada variável observada: para cada variável, os seus pais causais são tidos como regressores e é ajustado um modelo linear (abordagem *Markoviana*). O conjunto dos modelos de regressão de cada variável constitui o modelo SET.<sup>12</sup> Na Tabela 4 apresenta-se o pseudo-código para a construção do modelo SET.<sup>12</sup>

Tabela 4- Pseudo-código da construção do modelo SET.

- 
1. Inferência da rede causal;
  2. Para cada variável,  $y$ :
    - a. Definir  $y$  como a variável de resposta e  $x$  como o conjunto de pais de  $y$ ;
    - b. Ajustar um modelo de regressão com  $x$  como regressores e  $y$  como resposta;
    - c. Guardar o modelo na estrutura do modelo SET.
- 

Durante a monitorização, o modelo SET é usado para prever as observações com base nos seus pais. Se as relações causais ainda forem válidas, então os erros de previsão devem permanecer numa região de variabilidade normal, caso contrário está a ocorrer uma falha.

Para avaliar o estado de falha (deteção), é usada a estatística  $T^2$  de Hotelling com informação da rede para monitorizar simultaneamente todos os erros de previsão,

$$T_{SET}^2 = \sum_{i=1}^m \left( \frac{d_i - \hat{d}_i}{\sigma_i} \right)^2 \quad (33)$$

em que  $\hat{d}_i$  é a previsão do modelo SET e  $\sigma_i$  é o desvio-padrão dos erros de previsão.<sup>1</sup>

Assumindo que os resíduos da  $T_{SET}^2$  são aproximadamente distribuídos como uma distribuição  $\chi^2$  com  $m$  graus de liberdade, os limites de controlo podem ser estabelecidos pelo percentil superior da distribuição  $\chi^2$  com determinado nível de significância  $\alpha$ .<sup>12</sup>

Dado que os resíduos não são correlacionados, o diagnóstico de falhas também pode ser feito através dos erros de previsão. Assim, um erro de previsão com uma contribuição significativa para a  $T_{SET}^2$  indica que a variável original se desviou do valor esperado e não está em conformidade com a estrutura de correlação inferida. Tal como na deteção, os limites de

controlo das contribuições podem ser estabelecidos pelo percentil superior da distribuição  $\chi^2$  com determinado nível de significância  $\alpha$ .<sup>12</sup> Na Figura 12 está representado o algoritmo da metodologia de monitorização da  $T^2$  de Hotelling com informação da rede (SET-Hotelling- $T^2$ ).

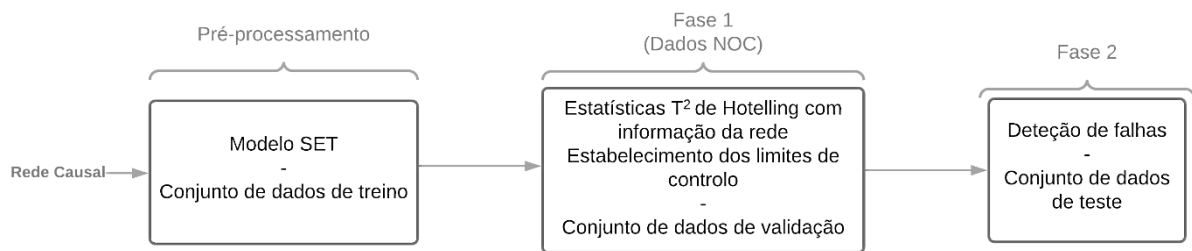


Figura 12- Etapas do algoritmo da SET-Hotelling- $T^2$ .

## 3.2 Metodologias propostas

De modo a se melhorar o desempenho da Taxa de Deteção de Falhas (TPR do inglês *True Positive Rate*) e de diagnóstico, desenvolveram-se nesta tese duas metodologias de monitorização hierárquica, descentralizada e centralizada, baseadas na decomposição funcional da rede causal com transformação de variáveis.

### 3.2.1 Metodologia de monitorização hierárquica descentralizada baseada na decomposição da rede causal com transformação de variáveis (CNET-D do inglês *Causal Network-Distributed*)

Numa primeira etapa desta metodologia de monitorização hierárquica descentralizada (CNET-D), a rede causal é inferida e dividida em comunidades através do algoritmo de deteção de comunidades, de forma a se reduzir a dimensionalidade do sistema.

De seguida, cada comunidade é monitorizada individualmente, através da metodologia SET-Hotelling- $T^2$  anteriormente descrita. Com esta abordagem, pretende-se ganhar mais sensibilidade na deteção e diagnóstico de falhas, subdividindo o sistema, em vários subsistemas (comunidades).

A utilização de uma só métrica na deteção de falhas, é conseguida através de um esquema em que apenas é necessário ser detetada a falha numa só comunidade para o alarme ser acionado (relação lógica “OR gate”), procedendo-se ao diagnóstico da comunidade em falha (1ª camada de diagnóstico) e ao diagnóstico da variável (2ª camada de diagnóstico) tal como nas contribuições da SET-Hotelling- $T^2$ .

Contudo, o nível de significância  $\alpha$  para os limites de controlo na deteção de falhas ao nível de cada comunidade deverá ser corrigido para se ter em conta as múltiplas comparações (múltiplas comunidades) e o controlo da TFA. Os testes de hipóteses estatísticos são baseados na rejeição da hipótese nula de normalidade, quando esta é verdadeira. Se várias hipóteses são testadas, a probabilidade de se observar um evento raro aumenta e, então, a probabilidade de se estar incorretamente a rejeitar a hipótese nula (Erro do Tipo I ou falso alarme) aumenta.<sup>87</sup>

Para tal, consideram-se duas correções com diferentes pressupostos: a Correção de Bonferroni (Equação 34) e a Correção de Šidák (Equação 35),

$$\alpha_{individual} = \frac{\alpha}{N_{tc}} \quad (34)$$

$$\alpha_{individual} = 1 - (1 - \alpha)^{\frac{1}{N_{tc}}} \quad (35)$$

em que  $\alpha_{individual}$  é o nível de significância para cada teste de hipóteses e  $N_{TC}$  é o número de estatísticas para comparação.<sup>88</sup> Um dos grandes problemas da aplicação destas correções é quando o  $N_{TC}$  é muito elevado, leva a que a taxa de deteção de falhas nas comunidades seja muito baixa, mesmo quando o sistema está fora das NOC, pois o  $\alpha_{individual}$  tenderá para 0.

Para uma melhor compreensão desta metodologia de monitorização, na Figura 13 pode observar-se as várias etapas da CNET-D.



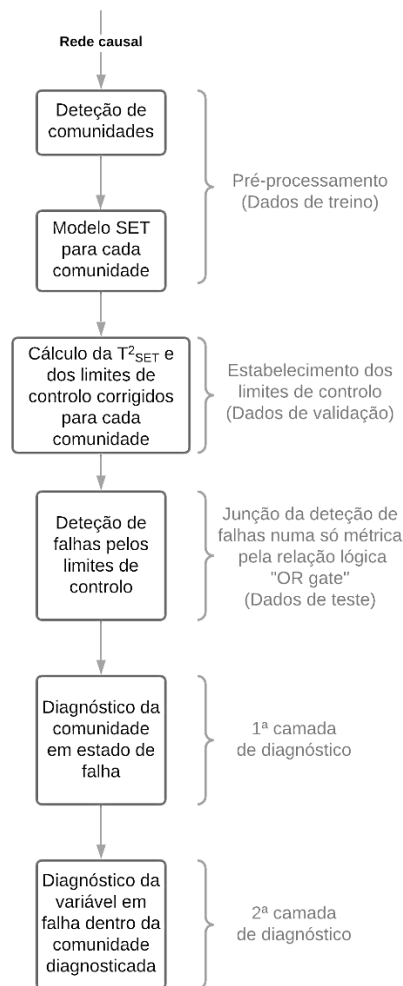


Figura 13- Etapas do algoritmo da CNET-D.

### 3.2.2 Metodologia de monitorização hierárquica centralizada baseada na decomposição da rede causal com transformação de variáveis (CNET-C do inglês *Causal Network-Centralized*)

A metodologia CNET-C comporta dois níveis de diagnóstico e foi elaborada para constituir uma só métrica (estatística), no nível superior, para a deteção de falhas, mesmo com várias comunidades.

Tal como na CNET-D, esta metodologia começa com a divisão da rede causal em várias comunidades. De seguida, através dos modelos SET para cada uma das comunidades, determina-se as estatísticas  $T^2_{SET}$  nas NOC e concatenam-se todas as estatísticas numa só estatística  $T^2$  de Hotelling global.<sup>89</sup>

Considerando que:

$$\mathbf{X}_{NOC} = [T_{SET_i}^2 \ T_{SET_{i+1}}^2 \ \dots \ T_{SET_{n_{comunidades}}}^2], i = 1, 2, \dots, n_{comunidades} \quad (36)$$

$$\mathbf{x}_j = [T_{SET_i}^2(j) \ T_{SET_{i+1}}^2(j) \ \dots \ T_{SET_{n_{comunidades}}}^2(j)], j = 1, 2, \dots, n_{obs} \quad (37)$$

em que  $\mathbf{X}_{NOC}$  é uma matriz que contém as estatísticas  $T^2$  de Hotelling de cada comunidade e  $\mathbf{x}_j$  é um vetor que contém as estatísticas  $T^2$  de Hotelling de cada comunidade no dado observacional  $j$ , temos que a  $T_{SET_{global}}^2$  é dada por:

$$T_{SET_{global}}^2 = (\mathbf{x}_j - \hat{\mu}_{X_{NOC}})^T \hat{\Sigma}_{X_{NOC}}^{-1} (\mathbf{x}_j - \hat{\mu}_{X_{NOC}}) \quad (38)$$

onde  $T_{SET_{global}}^2$  é a estatística concatenada das  $T^2$  de Hotelling de cada comunidade,  $\hat{\mu}_{X_{NOC}}$  é a média de cada uma das  $T_{SET}^2$  de cada comunidade e  $\hat{\Sigma}_{X_{NOC}}$  é a matriz covariância.<sup>89</sup> A detecção de falhas e os seus limites de detecção são calculados da mesma forma da SET-Hotelling- $T^2$ .

Depois de uma falha ser detetada, passa-se para a primeira *camada* do diagnóstico. Na primeira *camada*, à imagem do que é feito nas contribuições da SET-Hotelling- $T^2$ , diagnostica-se em que comunidade ocorreu a falha através das contribuições de cada comunidade na  $T_{SET_{global}}^2$ . Quando diagnosticada em que comunidade está a falha, entra-se na segunda camada do diagnóstico, onde, através da  $T_{SET_i}^2$ , se avalia em que variável está a falha através das contribuições de cada variável na estatística da comunidade diagnosticada.

Na Figura 14 está representada a esquematização do algoritmo da CNET-C.

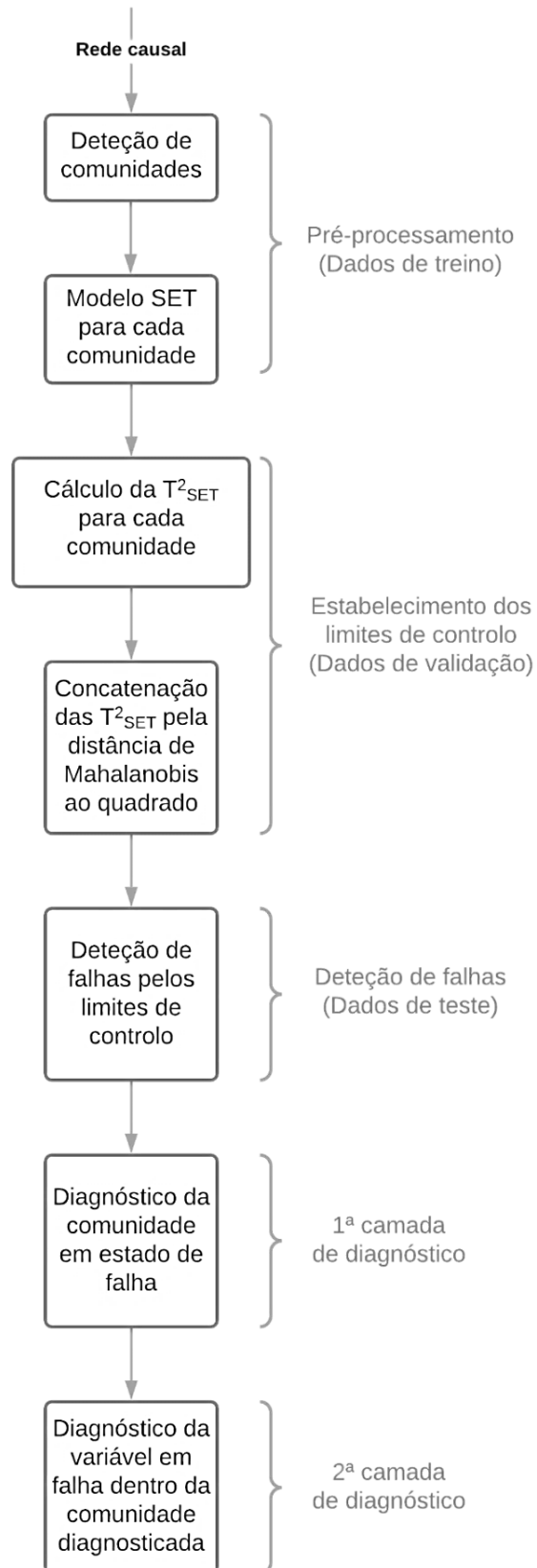


Figura 14- Etapas do algoritmo da CNET-C.



## 4. Resultados da inferência de uma rede artificial

“A teacher told my mother  
that I would never become  
successful, which  
illustrates the difficulty of  
long-run forecasting on  
inadequate data”  
*Clive Granger*

Para avaliar o desempenho da inferência de redes causais e das metodologias de monitorização propostas, utilizou-se um simulador de uma rede artificial com 16 variáveis, modificado por Rato e Reis<sup>2</sup>. A estrutura da rede causal conhecida à *priori* está representada na Figura 15.

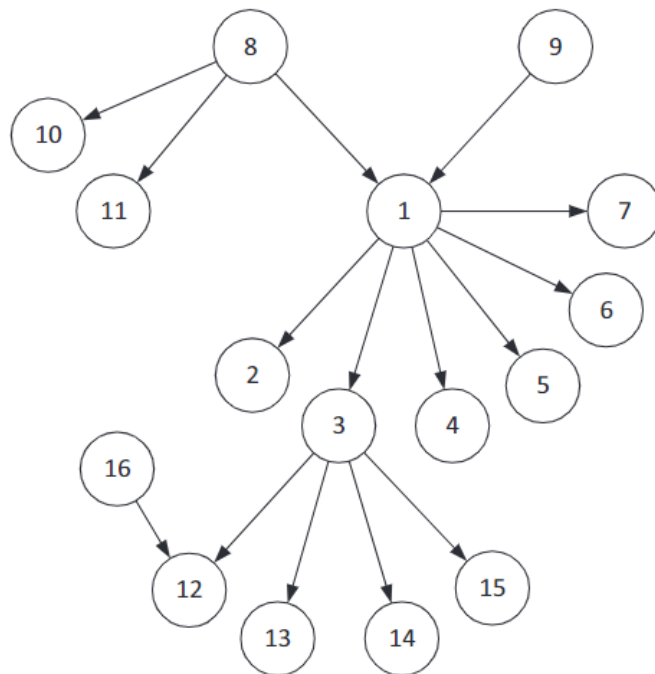


Figura 15- Representação gráfica da estrutura da rede do caso de estudo<sup>2</sup>.

No que diz respeito à inferência de redes causais baseada em dados, foram avaliados dois cenários: o sistema linear estacionário e o sistema linear dinâmico. Por outro lado, as metodologias de monitorização apenas foram testadas para o sistema linear estacionário. Por esse motivo, somente os resultados da inferência de redes constam neste capítulo.

## 4.1 Sistema linear estacionário

No caso do sistema linear estacionário, as relações entre as variáveis são dadas pelas Equações 39-52, onde  $\varepsilon$  corresponde a uma sequência de ruído branco com uma relação sinal-ruído de 10 decibéis (dB),  $K$  é um fator multiplicativo para a simulação de falhas ( $K$  é igual a 1 durante as NOC), e  $g$  corresponde aos dados provenientes da respectiva variável.<sup>2</sup>

$$g_8 = K_8\varepsilon_8, \quad g_9 = K_9\varepsilon_9, \quad g_{16} = K_{16}\varepsilon_{16} \quad (39)$$

$$g_{10} = 1 + 0.40K_{10}g_8 + \varepsilon_{10} \quad (40)$$

$$g_{11} = 0.56 + 0.15K_{11}g_8 + \varepsilon_{11} \quad (41)$$

$$g_1 = 1.2K_1g_8 + 0.80g_9 + \varepsilon_1 \quad (42)$$

$$g_2 = 0.60K_2g_1 + \varepsilon_2 \quad (43)$$

$$g_3 = 0.05 + 0.22K_3g_1 + \varepsilon_3 \quad (44)$$

$$g_4 = 1 + 0.40K_4g_1 + \varepsilon_4 \quad (45)$$

$$g_5 = 0.062 + 0.16K_5g_1 + \varepsilon_5 \quad (46)$$

$$g_6 = 0.60K_6g_1 + \varepsilon_6 \quad (47)$$

$$g_7 = 0.70K_7g_1 + \varepsilon_7 \quad (48)$$

$$g_{12} = 0.80K_{12}g_{16} + 0.51g_3 + \varepsilon_{12} \quad (49)$$

$$g_{13} = 1.30K_{13}g_3 + \varepsilon_{13} \quad (50)$$

$$g_{14} = 1 + 0.40K_{14}g_3 + \varepsilon_{14} \quad (51)$$

$$g_{15} = 0.028 + 1.30K_{15}g_3 + \varepsilon_{15} \quad (52)$$

A inferência de conectividade na rede artificial foi feita através do algoritmo PCalg e de um algoritmo baseado no método LASSO, proposto nesta dissertação. Contudo apenas serão apresentados os resultados do PCalg, visto que o algoritmo baseado no método LASSO não permite obter resultados satisfatórios por não conseguir lidar com as variáveis de confusão (uma breve explicação deste algoritmo é apresentada no Anexo I, bem como os resultados obtidos de uma aplicação).

A inferência da causalidade na rede artificial não foi feita no sistema linear estacionário pois, sem dinâmica, não é possível inferir a direccionalidade sem causar perturbações nas variáveis. Como não é objetivo desta dissertação inferir a causalidade tendo por base

perturbações e testes nas variáveis, apenas se inferiu a direccionalidade no sistema linear dinâmico.

Para se estudar a variabilidade dos dados simulados, foram feitas 100 réplicas, da simulação do algoritmo para cada cenário estudado. Considerou-se que uma associação direta é detetada se se verificar em pelo menos 75% das réplicas. Além disso, foram utilizados diversos tamanhos de dados observacionais em condições normais de operação. Na Tabela 5 e nas Figuras 16 e 17 constam as características e resultados dos diferentes cenários simulados para a avaliação do desempenho do PCalg. O nível de significância usado nos *cut-offs* foi de 1%.

Falsos positivos (Equação 53) referem-se a associações diretas que foram detetadas pelo algoritmo, mas que de facto não existem, e falsos negativos (Equação 54) referem-se a associações diretas que não foram detetadas pelo algoritmo, mas que existem.

$$\text{Taxa de falsos positivos} = \frac{\text{Falsos positivos}}{\text{Falsos positivos} + \text{Verdadeiros negativos}} \quad (53)$$

$$\text{Taxa de falsos negativos} = \frac{\text{Falsos negativos}}{\text{Falsos negativos} + \text{Verdadeiros positivos}} \quad (54)$$

Tabela 5- Resultados para a inferência de conectividade na rede artificial - sistema estacionário linear.

Sistema	Nº de dados	Algoritmo	Taxa falsos positivos	Taxa falsos negativos
Estacionário	500	PCalg	0	0.13
Estacionário	5000	PCalg	0.0095	0
Estacionário	10000	PCalg	0.0095	0

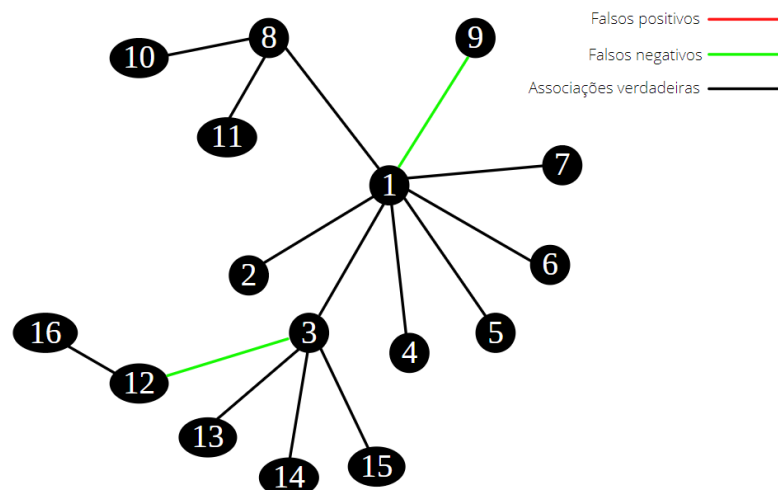


Figura 16- Inferência de conectividade no sistema estacionário pelo PCalg - 500 dados observacionais.

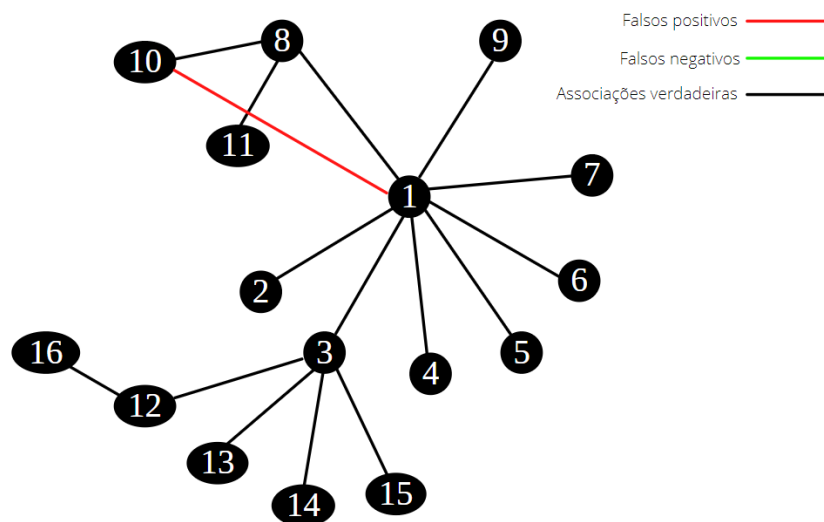


Figura 17- Inferência de conectividade no sistema estacionário pelo PCalg – 5000 e 10000 dados observacionais.

Pela análise dos resultados, pode-se verificar que o aumento do tamanho de dados observacionais na inferência de conectividade origina um melhor desempenho, isto é, consegue detetar todas as associações diretas verdadeiras (Taxa de Falsos Negativos é igual a 0) e deteta associações diretas inexistentes numa taxa muito baixa (Taxa de Falsos Positivos é 0.0095). Para uma interpretação mais clara, define-se a sensibilidade (Taxa de Verdadeiros Positivos = 1 - Taxa de Falsos Positivos) como a capacidade de o algoritmo detetar corretamente todas as associações diretas verdadeiras e especificidade (Taxa de Verdadeiros Negativos = 1 - Taxa de Falsos Negativos) como a capacidade de excluir corretamente todas as associações diretas inexistentes.

De forma a avaliar-se a probabilidade de se detetar uma associação direta quando de facto ela existe, comparando com a situação em que se deteta uma associação direta quando não existe, determina-se a Razão de Verosimilhança para um teste positivo (*positive likelihood ratio*) dada pela Equação 55.

$$positive\ likelihood\ ratio = \frac{sensibilidade}{1-especificidade} \quad (55)$$

Assim, obtém-se para os cenários de 5000 e 10000 dados observacionais, um *positive likelihood ratio* de 105 o que indica que é muito mais provável ser detetado um verdadeiro positivo do que um falso positivo.

Conclui-se, pelos resultados acima descritos, que o PCalg apresenta um desempenho bastante satisfatório na inferência da conectividade da rede artificial no sistema linear estacionário.



## 4.2 Sistema linear dinâmico

Uma análise semelhante foi realizada para uma versão dinâmica do sistema apresentado anteriormente, com a adição de uma dependência de séries temporais multivariadas entre as variáveis de acordo com as Equações 56-69, onde  $\varepsilon$  corresponde a uma sequência de ruído branco com uma relação sinal-ruído de 10 dB,  $K$  é um fator multiplicativo para a simulação de falhas ( $K$  é igual a 1 durante as NOC), e  $g$  corresponde aos dados provenientes da respectiva variável.<sup>2</sup>

$$g_{8,t} = K_8 \varepsilon_{8,t}, \quad g_{9,t} = K_9 \varepsilon_{9,t}, \quad g_{16,t} = K_{16} \varepsilon_{16,t} \quad (56)$$

$$g_{10,t} = 1 + 0.40K_{10}(g_{8,t} + 0.60g_{8,t-1} - 0.30g_{8,t-2}) + \varepsilon_{10,t} \quad (57)$$

$$g_{11,t} = 0.56 + 0.15K_{11}(g_{8,t} + 0.40g_{8,t-1} + 0.60g_{8,t-2}) + \varepsilon_{11,t} \quad (58)$$

$$g_{1,t} = 1.2K_1(g_{8,t} + 0.60g_{8,t-1} + 0.30g_{8,t-2}) + 0.80g_{9,t} + \varepsilon_{1,t} \quad (59)$$

$$g_{2,t} = 0.60K_2(g_{1,t} + 0.50g_{1,t-1} + 0.20g_{1,t-2}) + \varepsilon_{2,t} \quad (60)$$

$$g_{3,t} = 0.05 + 0.22K_3(g_{1,t} - 0.40g_{1,t-1} - 0.20g_{1,t-2}) + \varepsilon_{3,t} \quad (61)$$

$$g_{4,t} = 1 + 0.40K_4(g_{1,t} - 0.20g_{1,t-1} - 0.10g_{1,t-2}) + \varepsilon_{4,t} \quad (62)$$

$$g_{5,t} = 0.062 + 0.16K_5(g_{1,t} + 0.40g_{1,t-1} + 0.60g_{1,t-2}) + \varepsilon_{5,t} \quad (63)$$

$$g_{6,t} = 0.60K_6(g_{1,t} + 0.80g_{1,t-1} + 0.10g_{1,t-2}) + \varepsilon_{6,t} \quad (64)$$

$$g_{7,t} = 0.70K_7(g_{1,t} + 0.40g_{1,t-1} + 0.20g_{1,t-2}) + \varepsilon_{7,t} \quad (65)$$

$$g_{12,t} = 0.8K_{12}(g_{16,t} + 0.60g_{16,t-1} + 0.30g_{16,t-2}) + 0.51g_{3,t} + \varepsilon_{12,t} \quad (66)$$

$$g_{13,t} = 1.30K_{13}(g_{3,t} + 0.50g_{3,t-1} + 0.50g_{3,t-2}) + \varepsilon_{13,t} \quad (67)$$

$$g_{14,t} = 1 + 0.40K_{14}(g_{3,t} + 0.40g_{3,t-1} + 0.60g_{3,t-2}) + \varepsilon_{14,t} \quad (68)$$

$$g_{15,t} = 0.028 + 1.30K_{15}(g_{3,t} + 0.60g_{3,t-1} - 0.30g_{3,t-2}) + \varepsilon_{15,t} \quad (69)$$

### 4.2.1 Inferência de conectividade da rede artificial

Tal como na inferência de conectividade no sistema linear estacionário, neste caso recorreu-se ao PCalg, em que em cada cenário o algoritmo é replicado 100 vezes. Para determinação das associações diretas, foram considerados três desfasamentos no tempo em cada variável.

Na Tabela 6 e nas Figuras 18 e 19 constam as características e resultados dos diferentes cenários simulados para a avaliação do desempenho do PCalg. O nível de significância usado nos *cut-offs* foi de 1%.

Tabela 6- Resultados para a inferência de conectividade na rede artificial - sistema dinâmico linear.

Sistema	Nº de dados	Algoritmo	Taxa falsos positivos	Taxa falsos negativos
Dinâmico	500	PCalg	0	0.071
Dinâmico	5000	PCalg	0	0
Dinâmico	10000	PCalg	0	0

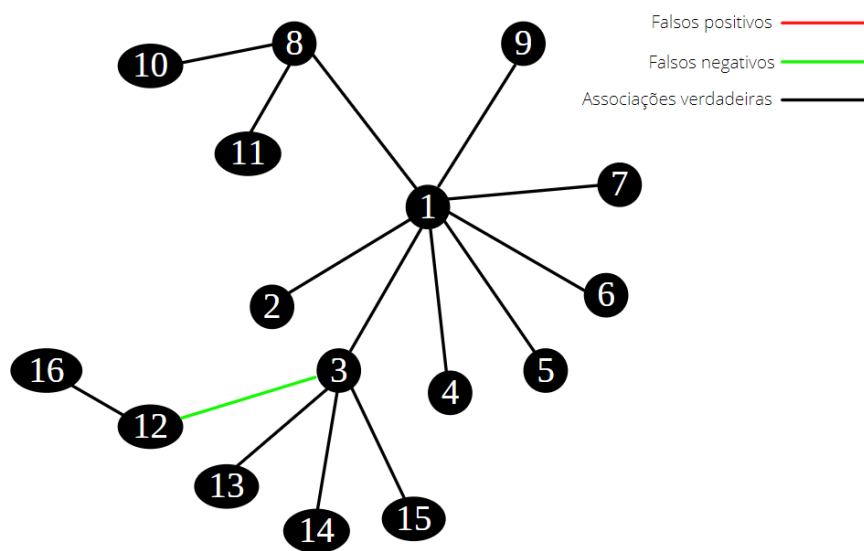


Figura 18- Inferência de conectividade no sistema dinâmico pelo PCalg - 500 dados observacionais.

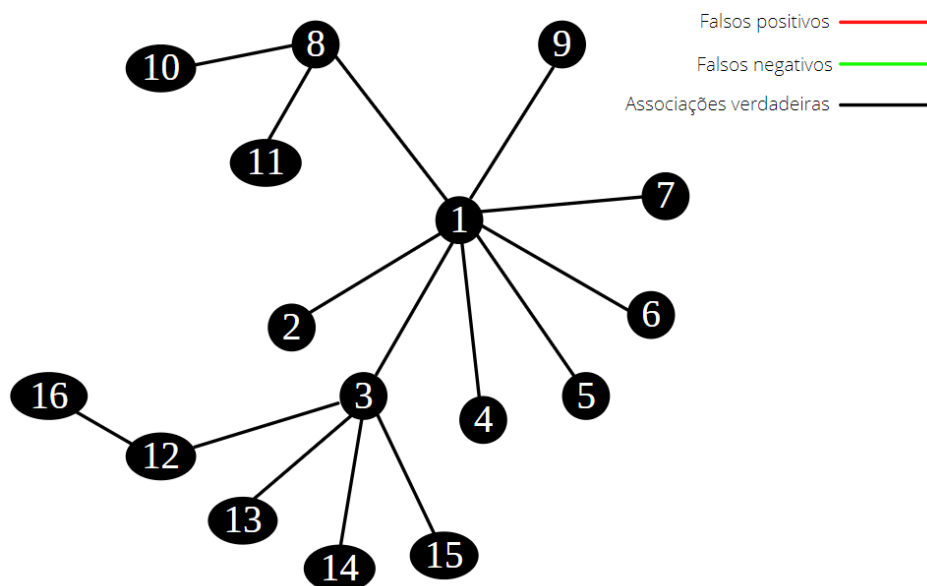


Figura 19- Inferência de conectividade no sistema dinâmico pelo PCalg - 5000 e 10000 dados observacionais.

Como se pode observar, o algoritmo melhorou o seu desempenho (sensibilidade e especificidade) em todos os cenários testados, em que para o tamanho de dados observacionais de 5000 e 10000 foi capaz de inferir a conectividade completa da rede artificial. Este facto pode dever-se à introdução de desfasamentos nas variáveis, onde as correlações são mais pronunciadas em certos instantes, à imagem do que acontece na correlação cruzada.

Conclui-se que no sistema linear dinâmico, a inferência de conectividade é feita de forma muito precisa.

#### 4.2.2 Inferência da causalidade da rede artificial

A inferência da causalidade da rede artificial foi feita através do algoritmo da CG e da correlação cruzada, tendo por base a conectividade apresentada na Figura 19.

De foram análoga à inferência de conectividade, também na inferência da causalidade fizeram-se 100 réplicas da simulação de cada algoritmo, em que a direção da associação direta consta no *output* do algoritmo se se verificar em pelo menos 75% das réplicas. O nível de significância utilizado é de 1%.

Na Tabela 7 e nas Figuras 20, 21 e 22 apresentam-se os cenários estudados e os resultados da inferência de causalidade através dos dois algoritmos, em que a percentagem de acerto é dada pela Equação 70.

$$\% \text{ acerto} = \frac{n^{\circ} \text{ de direções corretas inferidas}}{n^{\circ} \text{ total de associações diretas}} \times 100 \quad (70)$$

Tabela 7- Resultados para a inferência de causalidade na rede artificial - sistema dinâmico linear.

Sistema	Nº de dados	Algoritmo	% acerto
Dinâmico	500	CG	80.0
		Correlação cruzada	73.3
Dinâmico	5000	CG	100
		Correlação cruzada	73.3
Dinâmico	10000	CG	100
		Correlação cruzada	73.3

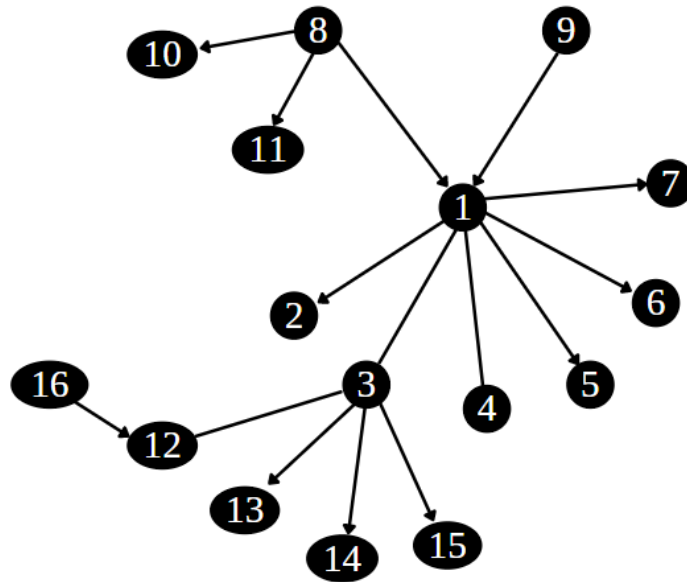


Figura 20- Inferência de causalidade no sistema dinâmico pelo algoritmo da CG - 500 dados observacionais.

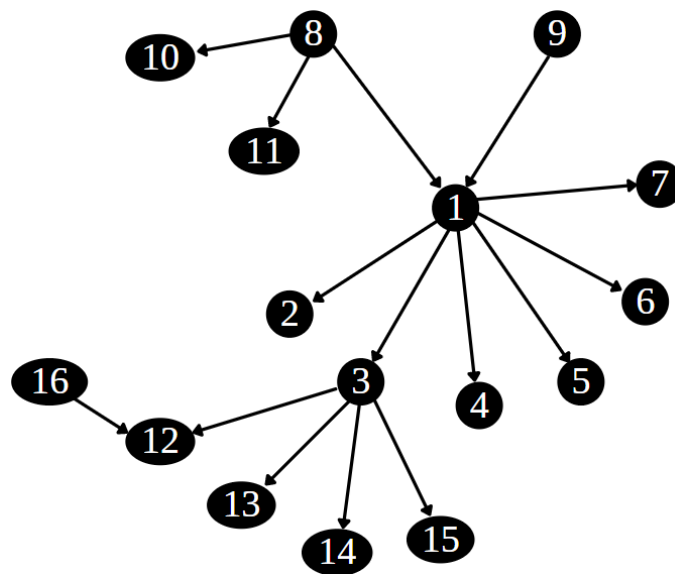


Figura 21- Inferência de causalidade no sistema dinâmico pelo algoritmo da CG - 5000 e 10000 dados observacionais.

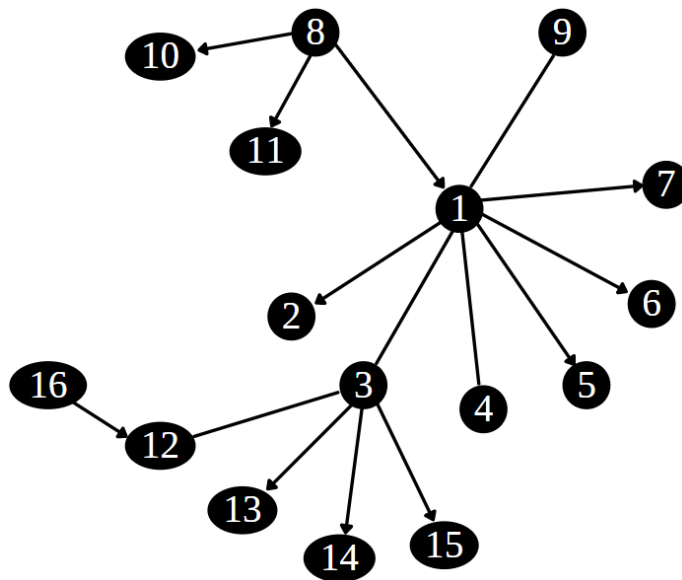


Figura 22- Inferência de causalidade no sistema dinâmico pelo algoritmo da Correlação Cruzada - 500, 5000 e 10000 dados observacionais.

Através dos resultados apresentados, pode-se relatar que a correlação cruzada tem um desempenho inferior à CG, a qual independentemente do tamanho do conjunto de dados observacionais obtém sempre o mesmo resultado, o que se deve às equações dinâmicas que simulam o sistema. Por exemplo, os dados provenientes da variável 1 são obtidos através das medições do passado e do presente da variável 8 e das medições presentes da variável 9, o que leva a que o algoritmo da correlação cruzada não consiga obter a direccionalidade entre a variável 1 e 9. Além disso, não capta direccionalidades importantes tal como a relação 1→3. No que diz respeito à CG, através da incorporação das séries temporais, consegue-se inferir a causalidade total da rede nos cenários de 5000 e 1000 dados observacionais.

Deste estudo e correspondente análise, é possível concluir que o algoritmo da CG é preferível em detrimento da correlação cruzada pois a incorporação das séries temporais nos modelos autorregressivos proporciona maior capacidade para capturar a direção do fluxo de informação entre as variáveis. Por outro lado, a correlação cruzada, por apenas se reger por correlações desfasadas no tempo, e sendo a escolha deste desfasamento um parâmetro fulcral, não é um método tão eficaz para a deteção da causalidade.



## 5. Resultados das metodologias de monitorização

“Without data you’re just  
another person with an  
opinion”

*W. Edwards Deming*

O caso de estudo para a avaliação das metodologias de monitorização é o sistema da rede artificial apresentada na Secção 4.1, onde os dados provenientes de uma variável são representados por  $g_i$ , em que  $i=1,2, 3,\dots,16$ .

Para a comparação das diversas metodologias de monitorização apresentadas teve-se em conta três tipos de falha recorrentes em cenários reais:

- Falhas no processo - falhas que correspondem a uma perturbação no valor das variáveis. Estas falhas propagam-se para outras variáveis;
- Falhas no sensor - falhas na medição de uma variável. Porém, o valor verdadeiro da variável não sofre perturbação. Estas falhas não se propagam para outras variáveis;
- Falha na correlação – falhas provocadas pela alteração da correlação entre variáveis.

Na Tabela 8 estão representados os cenários realizados para todos os estudos comparativos apresentados doravante.

*Tabela 8- Tipos e localização das falhas nos estudos comparativos realizados.*

<b>Tipo de falha</b>	<b>Localização da falha</b>
Processo	$g_1, g_3, g_{10}, g_{16}$
Sensor	$g_1, g_3, g_{10}, g_{16}$
Correlação	$g_1 \leftarrow g_8, g_3 \leftarrow g_1, g_{10} \leftarrow g_8$

A escolha do intervalo de magnitudes de falha foi feita tendo por base um estudo preliminar da sensibilidade das metodologias na deteção de falhas, onde cada magnitude de falha foi replicada 100 vezes de forma a se ter em conta a sua variabilidade. Para cada réplica utilizaram-se 5000 dados observacionais relativos às situações em falha. Todas as metodologias em comparação utilizaram o mesmo conjunto de dados.

## 5.1 Metodologia de monitorização baseada na análise aos componentes principais *versus* $T^2$ de Hotelling com informação da rede

A comparação entre as duas metodologias *benchmark* de monitorização, PCA e SET-Hotelling- $T^2$ , foi feita através do estudo dos cenários apresentados na Tabela 8.

### 5.1.1 Detecção de falhas

Para se avaliar qual das metodologias apresenta melhor desempenho na deteção de falhas em cada um dos cenários, recorreu-se a gráficos de TPR *vs* Magnitude de falha e a testes *t*-pareados onde a hipótese nula é a igualdade das médias das áreas abaixo do gráfico, representativas da sensibilidade em cada uma das metodologias, com um nível de significância de 5%. As Figuras 23 e 24 apresentam os resultados obtidos para o tipo de falha no processo e no sensor, respetivamente, localizadas na variável 1, em que a magnitude igual a 0 corresponde à TFA (Taxa de Falsos Alarmes) pretendida em NOC (1%). A Figura 25 apresenta os resultados do tipo de falha na correlação entre  $g_1 \leftarrow g_8$ , em que a magnitude igual a 1 corresponde à TFA pretendida em NOC (1%).

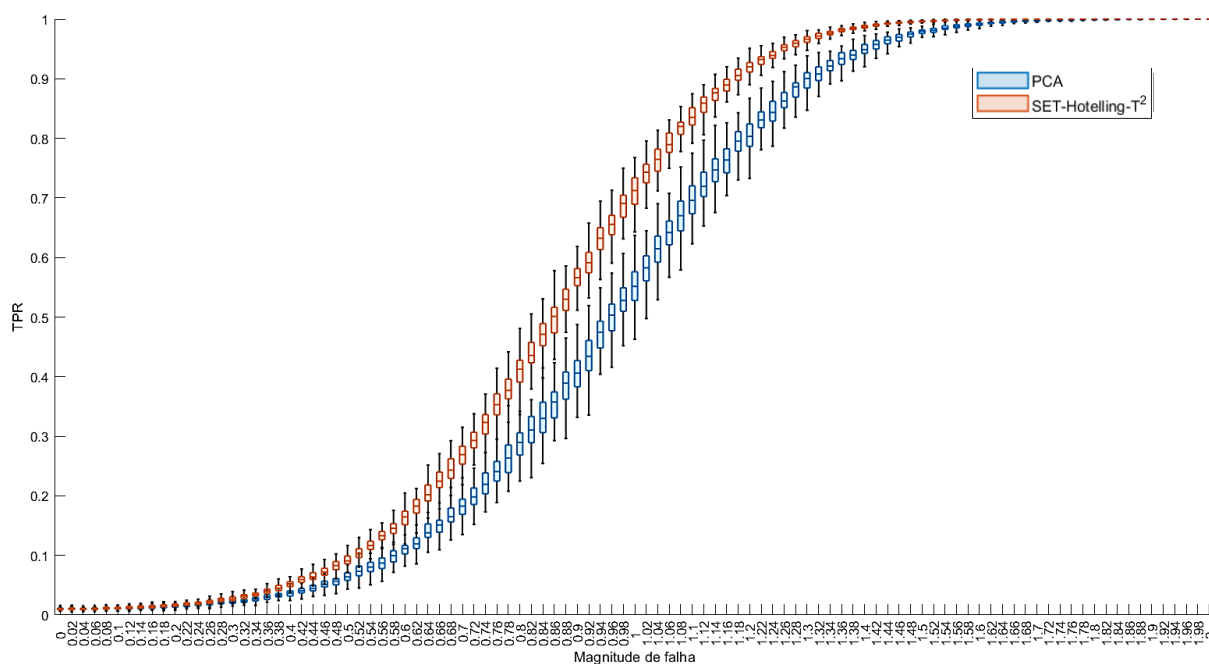


Figura 23- True Positive Rate (TPR) das metodologias *benchmark* a diferentes magnitudes de falha no processo localizadas na variável 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.



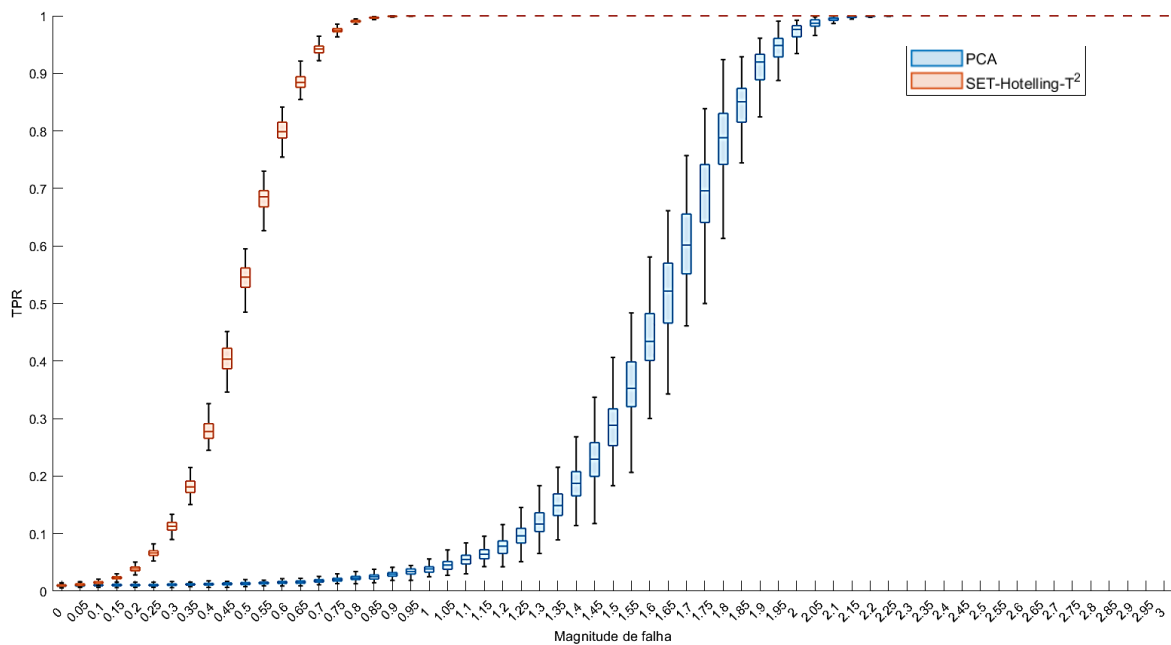


Figura 24- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha no sensor localizadas na variável 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

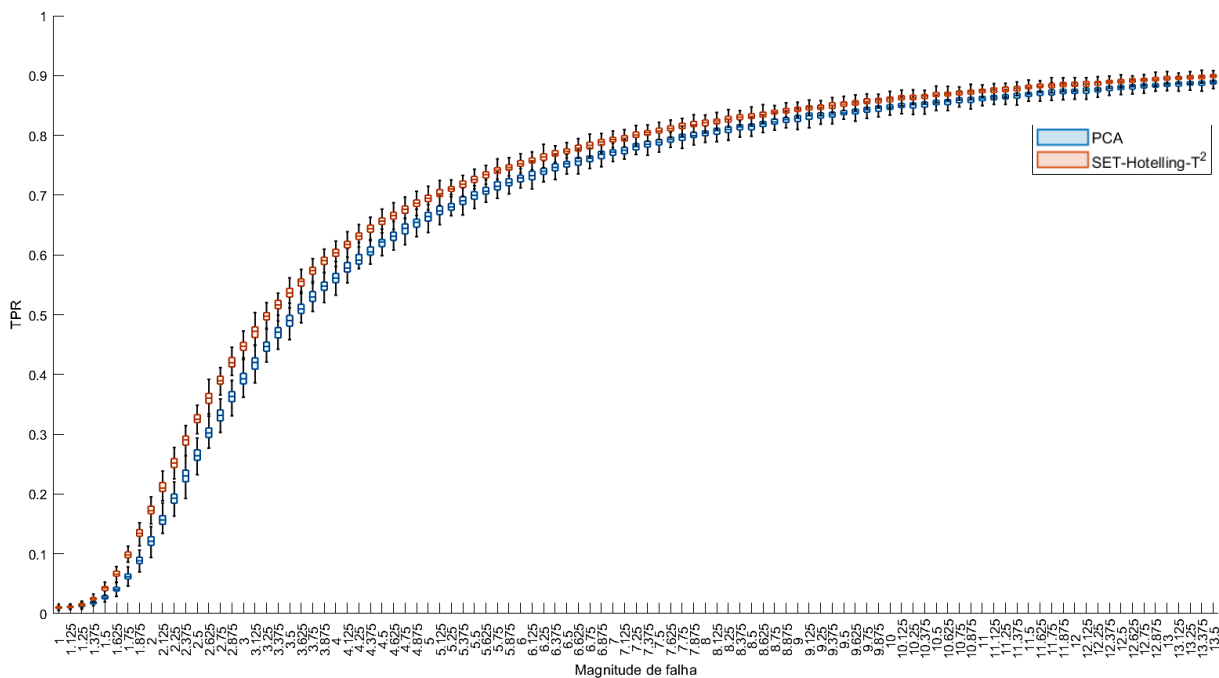


Figura 25- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha na correlação entre as variáveis 1 e 8. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

Tabela 9- Resultados da comparação da deteção de falhas nos vários cenários entre as metodologias de benchmark.

Tipo de falha	Localização da falha	Intervalo de magnitudes de falha	Valor de prova do teste <i>t</i> -pareado	Valor da estatística <i>t</i> do teste <i>t</i> -pareado (SET-Hotelling-T <sup>2</sup> /PCA)	Metodologia com maior sensibilidade
Processo	g <sub>1</sub>	0-2	<10 <sup>-10</sup>	244.7	SET-Hotelling-T <sup>2</sup>
	g <sub>3</sub>	0-5	<10 <sup>-10</sup>	-439.0	PCA
	g <sub>10</sub>	0-8	<10 <sup>-10</sup>	617.4	SET-Hotelling-T <sup>2</sup>
	g <sub>16</sub>	0-3	<10 <sup>-10</sup>	-385.8	PCA
Sensor	g <sub>1</sub>	0-3	<10 <sup>-10</sup>	1060	SET-Hotelling-T <sup>2</sup>
	g <sub>3</sub>	0-3	<10 <sup>-10</sup>	1046	SET-Hotelling-T <sup>2</sup>
	g <sub>10</sub>	0-3	<10 <sup>-10</sup>	532.6	SET-Hotelling-T <sup>2</sup>
	g <sub>16</sub>	0-3	<10 <sup>-10</sup>	794.1	SET-Hotelling-T <sup>2</sup>
Correlação	g <sub>1</sub> ← g <sub>8</sub>	1-13.5	<10 <sup>-10</sup>	205.9	SET-Hotelling-T <sup>2</sup>
	g <sub>3</sub> ← g <sub>1</sub>	1-9	<10 <sup>-10</sup>	-315.0	PCA
	g <sub>10</sub> ← g <sub>8</sub>	1-10	<10 <sup>-10</sup>	679.9	SET-Hotelling-T <sup>2</sup>

Na Tabela 9 resumem-se os resultados de todos os cenários testados. As figuras relativas aos restantes cenários encontram-se no Anexo II. Pela análise dos resultados, pode concluir-se que a metodologia da SET-Hotelling-T<sup>2</sup> exibe, na maior parte dos cenários, maior sensibilidade na deteção de falhas. Isto corrobora os resultados já publicados na literatura, em que a introdução da rede causal na metodologia de monitorização melhora a sensibilidade do algoritmo à deteção de falhas.<sup>12</sup>

### 5.1.2 Diagnóstico de falhas

Contudo, por si só, o ganho de sensibilidade à deteção de falhas pode não ser representativo de uma melhoria na monitorização de falhas. Isto é, poder-se-á ter um ganho na sensibilidade, mas o diagnóstico da causa raiz não ter um bom desempenho. Este facto é de

extrema relevância pois um diagnóstico que detete várias causas raiz leva a que seja despendido mais tempo, e mais dinheiro, até se conseguir por o sistema de novo sob controlo. Tal pode ser observado a partir dos diagnósticos obtidos pelas duas metodologias de *benchmark* nos três tipos de falha. Neste cenário, a falha no processo e no sensor está localizada em  $g_1$  e a falha na correlação está localizada entre  $g_1$  e  $g_8$  (mas é provocada em  $g_1$ ). A magnitude foi escolhida de modo a se detetar metade dos dados observacionais em falha (TPR=0.5).

### Falha no processo

Nas Figuras 26 e 27 estão representados os diagnósticos das duas metodologias para uma falha no processo. É possível concluir-se que a metodologia baseada em PCA não consegue detetar a causa raiz em nenhuma das estatísticas de monitorização, enquanto a metodologia da SET-Hotelling- $T^2$  consegue detetar unicamente a variável onde foi incutida a falha (99.7% de contribuição da variável 1), devido à estrutura causal presente no algoritmo de monitorização.

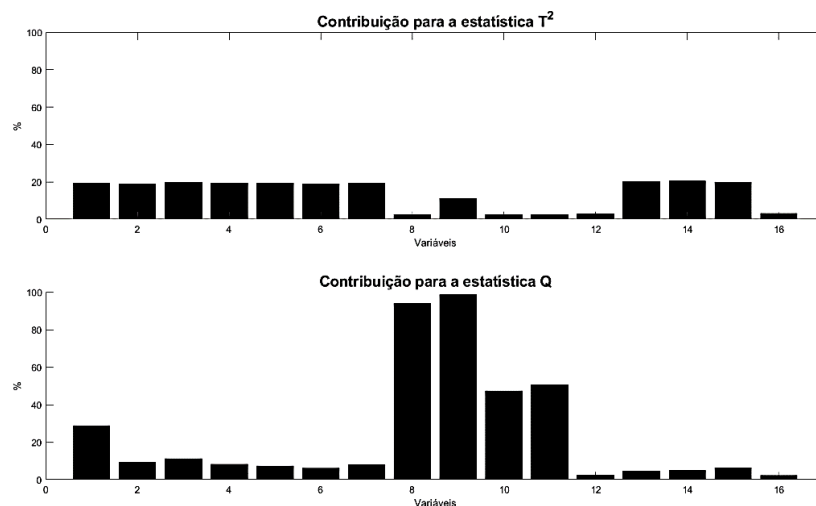


Figura 26- Contribuição de cada variável para as estatísticas de monitorização baseadas em PCA. Falha no processo na variável 1 com TPR=0.5.

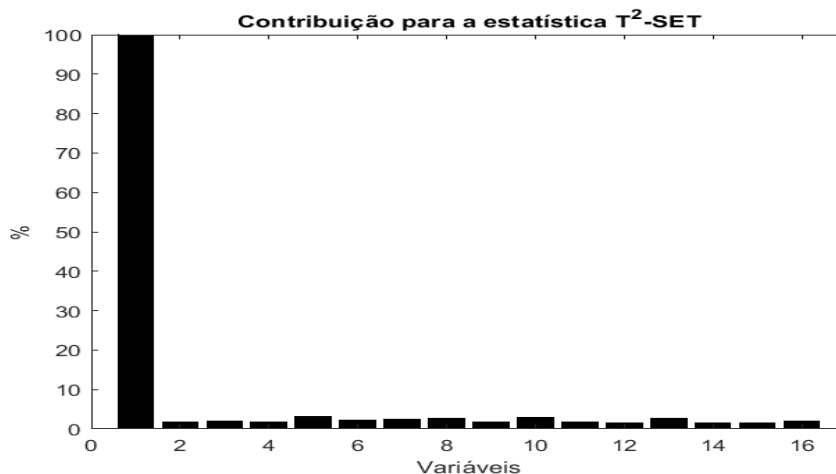


Figura 27- Contribuição de cada variável para a estatística de monitorização da metodologia SET-Hotelling- $T^2$ . Falha no processo na variável 1 com TPR=0.5.

## Falhas no sensor

Pelas Figuras 28 e 29, onde estão representadas as falhas no sensor localizadas na variável 1, pode observar-se que ambas as metodologias conseguem detetar a causa raiz. Contudo, existe uma peculiaridade no que diz respeito ao diagnóstico através da SET-Hotelling- $T^2$ : além de ser diagnosticada a variável onde a falha ocorre, também são diagnosticadas todas as variáveis que são filhas causais dessa mesma variável, como se pode comprovar pelas Figuras 21 e 29. O PCA, pela estatística  $Q$ , diagnostica a contribuição da variável 1 em 99.5%, e a SET-Hotelling- $T^2$  diagnostica a contribuição da variável 1 e de todos os seus filhos causais, aproximadamente, em 40%.

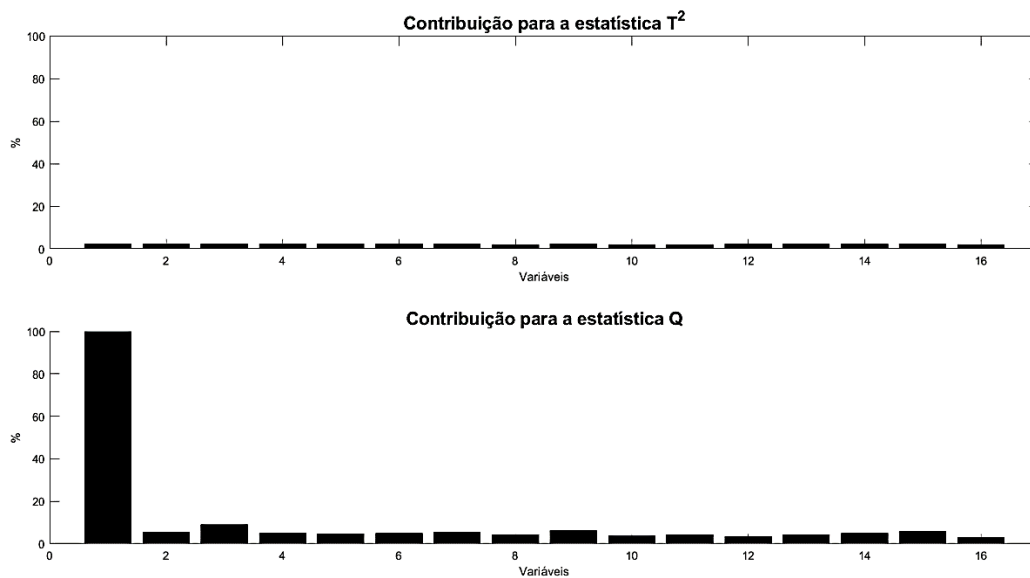


Figura 28- Contribuição de cada variável para as estatísticas de monitorização baseadas em PCA. Falha no sensor na variável 1 com TPR=0.5.



Figura 29- Contribuição de cada variável para a estatística de monitorização da metodologia SET-Hotelling- $T^2$ . Falha no sensor na variável 1 com TPR=0.5.

## Falha na correlação

Por fim, apresenta-se o diagnóstico das duas metodologias para uma falha na correlação  $g_1 \leftarrow g_8$ . Os resultados estão representados nas Figuras 30 e 31. Como já era expectável, a metodologia baseada na SET-Hotelling- $T^2$ , como tem acesso à estrutura causal, consegue diagnosticar perfeitamente a causa raiz (100% de contribuição da variável 1), enquanto a metodologia baseada no PCA não consegue estabelecer um diagnóstico preciso, obtendo resultados inconclusivos e ambíguos.

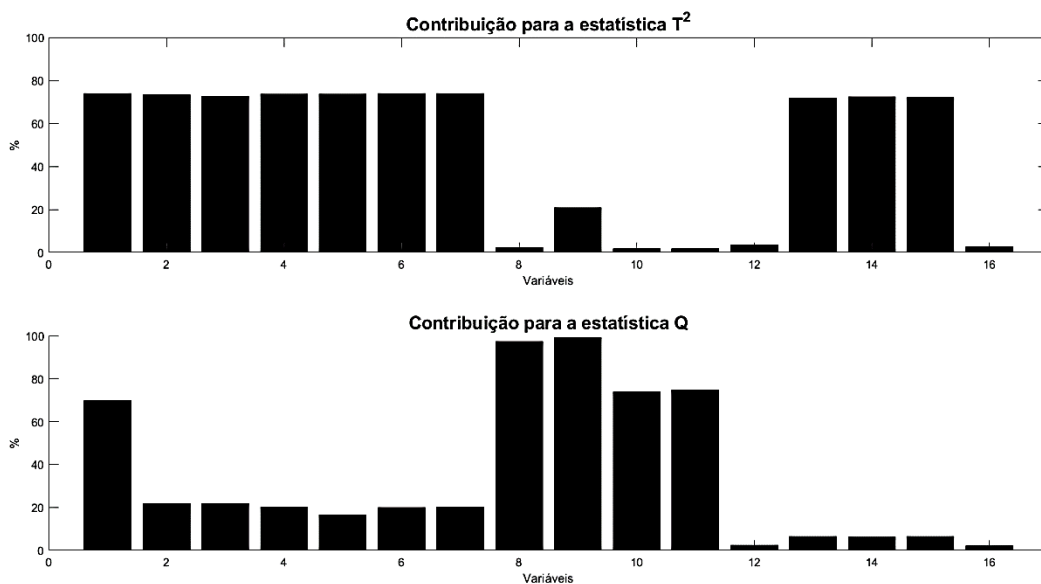


Figura 30- Contribuição de cada variável para as estatísticas de monitorização baseadas em PCA. Falha na correlação em  $g_1 \leftarrow g_8$  com  $TPR=0.5$ .

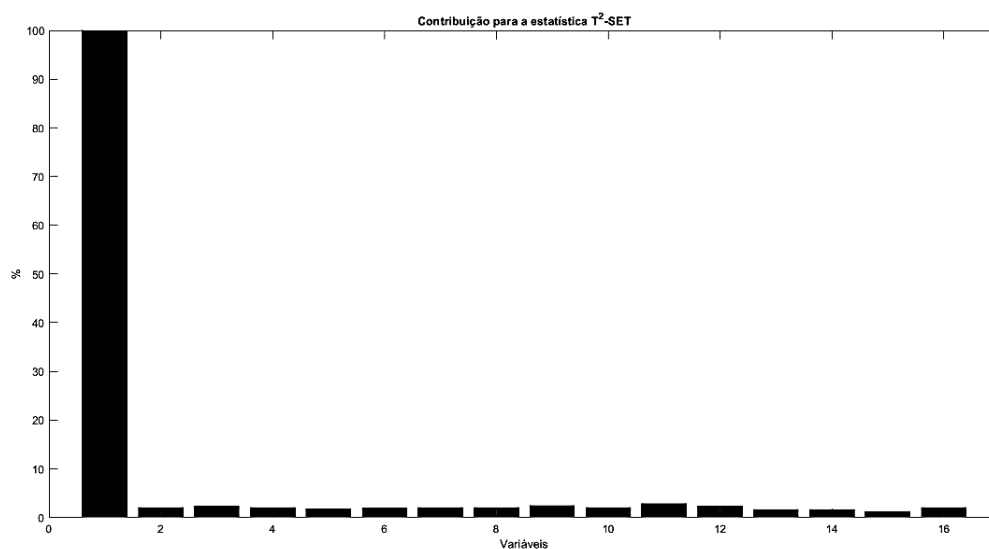


Figura 31- Contribuição de cada variável para a estatística de monitorização da metodologia SET-Hotelling- $T^2$ . Falha na correlação em  $g_1 \leftarrow g_8$  com  $TPR=0.5$ .

As duas metodologias de monitorização também foram testadas com um conjunto de dados às NOC, onde a TFA ronda em todos os casos 1%, tal como era desejado.

Em suma, pode-se concluir que a metodologia de monitorização SET-Hotelling- $T^2$  tem um melhor desempenho, tanto a nível de deteção (maior sensibilidade) como de diagnóstico de falhas (diagnosticar só as causas raiz).

## 5.2 Estudo comparativo das metodologias propostas: CNET-D e CNET-C

Para a comparação entre as metodologias propostas, CNET-C e CNET-D, e a metodologia *benchmark* SET-Hotelling- $T^2$ , começou-se por aplicar o algoritmo de deteção de comunidades à rede artificial. O resultado da aplicação deste algoritmo é a rede dividida ilustrada na Figura 32.

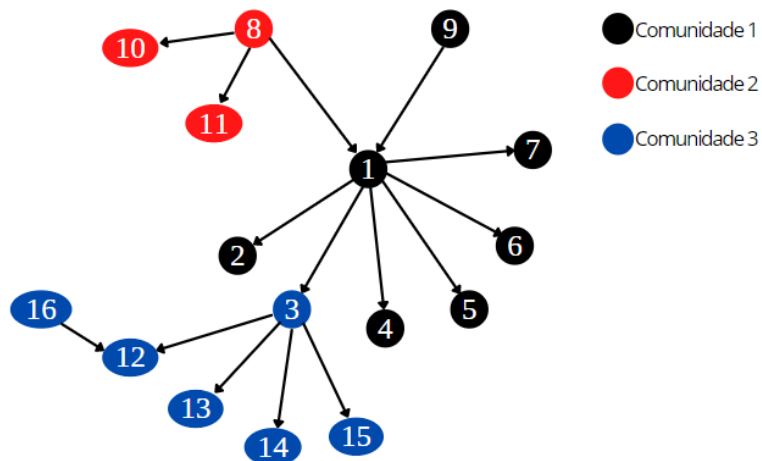


Figura 32- Resultado da aplicação do algoritmo de deteção de comunidades.

Contudo, devido ao algoritmo devolver a rede em comunidades disjuntas, não são contempladas as correlações inter-comunidades. Este facto leva a que haja um mau desempenho na deteção de falhas em alguns casos, nomeadamente de falhas localizadas nos nodos de ligação entre comunidades. Para superar este aspeto, cada comunidade foi estendida com o *Markov-blanket* dos pais causais que a constituem, originando as comunidades estendidas presentes na Tabela 10.

Tabela 10- Divisão da rede artificial através do algoritmo de detecção de comunidades e do conceito do markov-blanket.

Comunidade	Variáveis
#1	g <sub>1</sub> , g <sub>2</sub> , g <sub>3</sub> , g <sub>4</sub> , g <sub>5</sub> , g <sub>6</sub> , g <sub>7</sub> , g <sub>8</sub> , g <sub>9</sub>
#2	g <sub>1</sub> , g <sub>8</sub> , g <sub>9</sub> , g <sub>10</sub> , g <sub>11</sub>
#3	g <sub>1</sub> , g <sub>3</sub> , g <sub>12</sub> , g <sub>13</sub> , g <sub>14</sub> , g <sub>15</sub> , g <sub>16</sub>

### 5.2.1 Detecção de falhas

Para a comparação das metodologias propostas e da SET-Hotelling-T<sup>2</sup>, e para avaliação do desempenho na detecção de falhas, atuou-se de forma análoga à Secção 5.1. As Figuras 33 e 34 apresentam os resultados obtidos para o tipo de falha no processo e no sensor, respetivamente, localizadas na variável 1, em que a magnitude igual a 0 corresponde à TFA pretendida em NOC (1%). A Figura 35 apresenta os resultados do tipo de falha na correlação entre  $g_1 \leftarrow g_8$ , em que a magnitude igual a 1 corresponde à TFA pretendida em NOC (1%).

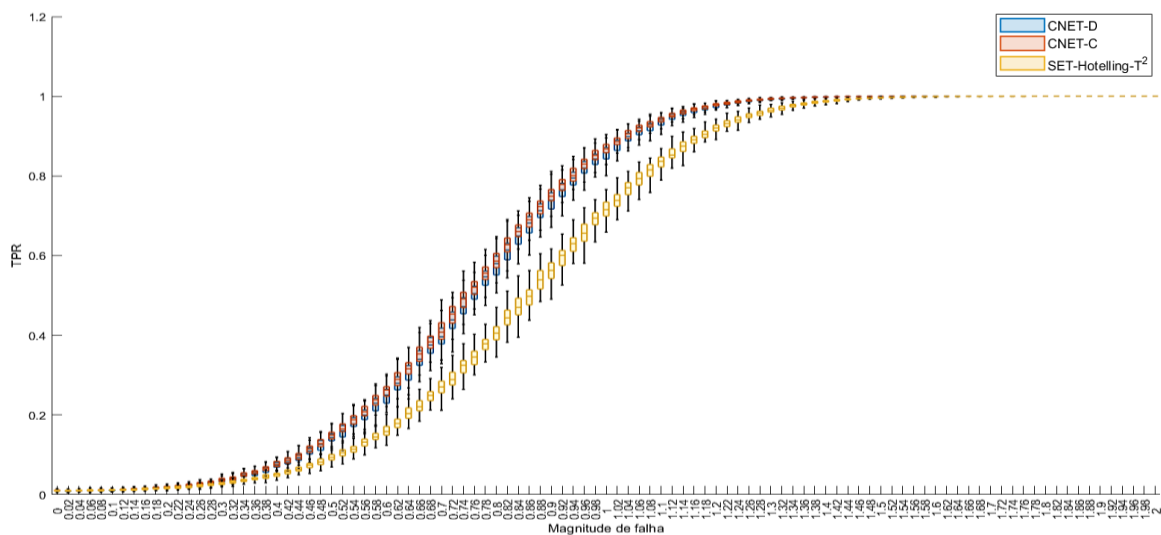


Figura 33- True Positive Rate (TPR) das metodologias propostas e da metodologia benchmark a diferentes magnitudes de falha no processo localizadas na variável 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

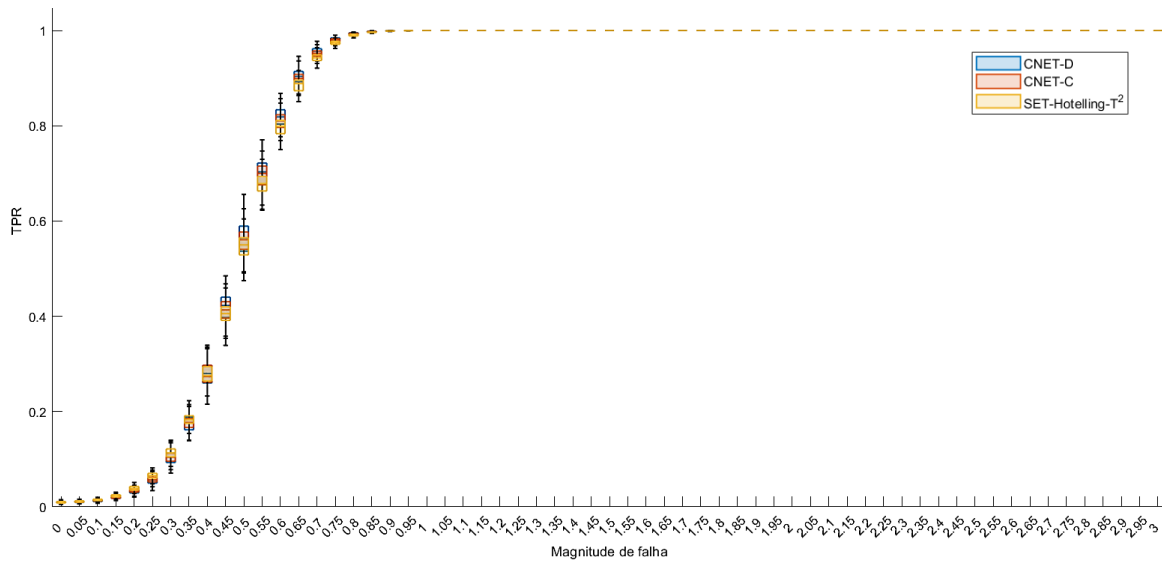


Figura 34- True Positive Rate (TPR) das metodologias propostas e da metodologia benchmark a diferentes magnitudes de falha no sensor localizadas na variável 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

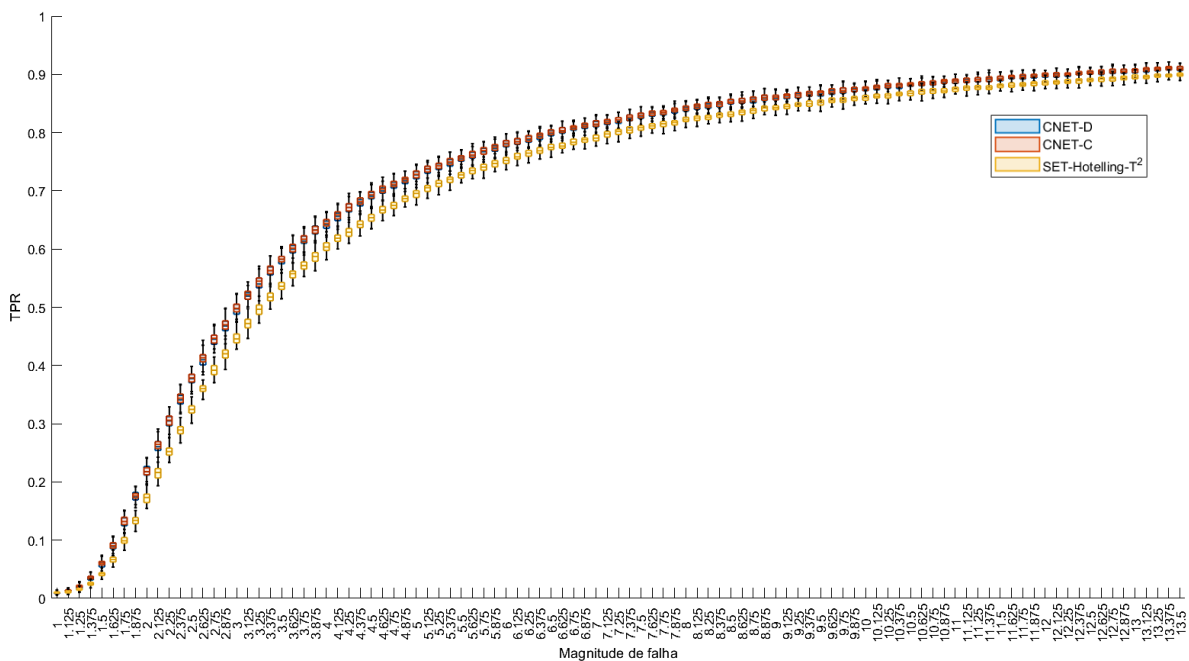


Figura 35- True Positive Rate (TPR) das metodologias propostas e da metodologia benchmark a diferentes magnitudes de falha na correlação entre as variáveis 1 e 8. Para magnitude de falha igual a 1 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

Em todos os cenários estudados, as metodologias propostas exibem sempre maior sensibilidade na detecção de falhas do que a SET-Hotelling-T<sup>2</sup> e, por esse motivo, na Tabela 11 só se apresentam os resultados dos testes *t*-pareados entre a CNET-C e a CNET-D de forma a avaliar o seu desempenho nos vários tipos de falha. As figuras dos restantes cenários constam do Anexo III.



Tabela 11-Resultados da comparação da detecção de falhas nos vários cenários entre as metodologias propostas.

Tipo de falha	Localização da falha	Intervalo de magnitudes de falha	Valor de prova do teste $t$ -pareado	Valor da estatística $t$ do teste $t$ -pareado (CNET-C/CNET-D)	Metodologia com maior sensibilidade
Processo	g <sub>1</sub>	0-2	$<10^{-10}$	20.45	CNET-C
	g <sub>3</sub>	0-5	$<10^{-10}$	126.3	CNET-C
	g <sub>10</sub>	0-8	$<10^{-10}$	82.36	CNET-C
	g <sub>16</sub>	0-3	$<10^{-10}$	-10.83	CNET-D
Sensor	g <sub>1</sub>	0-3	0.0032	-2.990	CNET-D
	g <sub>3</sub>	0-3	$<10^{-10}$	-8.761	CNET-D
	g <sub>10</sub>	0-3	$<10^{-10}$	68.07	CNET-C
	g <sub>16</sub>	0-3	$<10^{-10}$	-11.20	CNET-D
Correlação	g <sub>1</sub> ← g <sub>8</sub>	1-13.5	$<10^{-10}$	12.63	CNET-C
	g <sub>3</sub> ← g <sub>1</sub>	1-9	$<10^{-10}$	100.0	CNET-C
	g <sub>10</sub> ← g <sub>8</sub>	1-10	$<10^{-10}$	114.9	CNET-C

Destes resultados, pode concluir-se que ambas as metodologias que se baseiam na divisão do sistema em comunidades têm melhor desempenho que a SET-Hotelling- $T^2$  na detecção de falhas. Por comparação da CNET-C com a CNET-D, pode concluir-se que estas têm desempenhos semelhantes. Contudo, nas falhas de processo e na correlação, a CNET-C tem um desempenho tendencialmente melhor. Por outro lado, nas falhas no sensor, a CNET-D tem, na maior parte das vezes, melhor desempenho.

Em suma, conclui-se que na detecção de falhas, a divisão da rede causal em comunidades confere uma maior sensibilidade às metodologias de SPM. De salientar que a TFA se manteve em torno de 1% para um conjunto de dados às NOC, tal como esperado.

## 5.2.2 Diagnóstico de falhas

No diagnóstico de falhas, o que difere as metodologias CNET-C e CNET-D é a primeira *camada* do diagnóstico, na qual se concatenam as métricas para a detecção de falhas de forma diferente, sendo que a segunda *camada* do diagnóstico é igual para ambas.

Neste âmbito, estudaram-se alguns cenários de relevância, onde se demonstra a primeira *camada* de diagnóstico (diagnóstico da comunidade) e a segunda *camada* de diagnóstico (diagnóstico da variável em falha). A avaliação do desempenho dos diagnósticos é feita através da introdução de 5000 dados observacionais em falha, com uma magnitude de forma a se ter um TPR de 0.75. Posteriormente, faz-se um levantamento de todos os dados observacionais que foram assinalados como dados em falha pelos algoritmos e apresenta-se a percentagem de vezes que as comunidades e as variáveis foram classificadas como tendo uma contribuição significativa. Na Tabela 12 são apresentados os cenários estudados e os resultados relativos à primeira camada de diagnóstico. Nas Figuras 36,37 e 38 são apresentados graficamente alguns destes resultados.

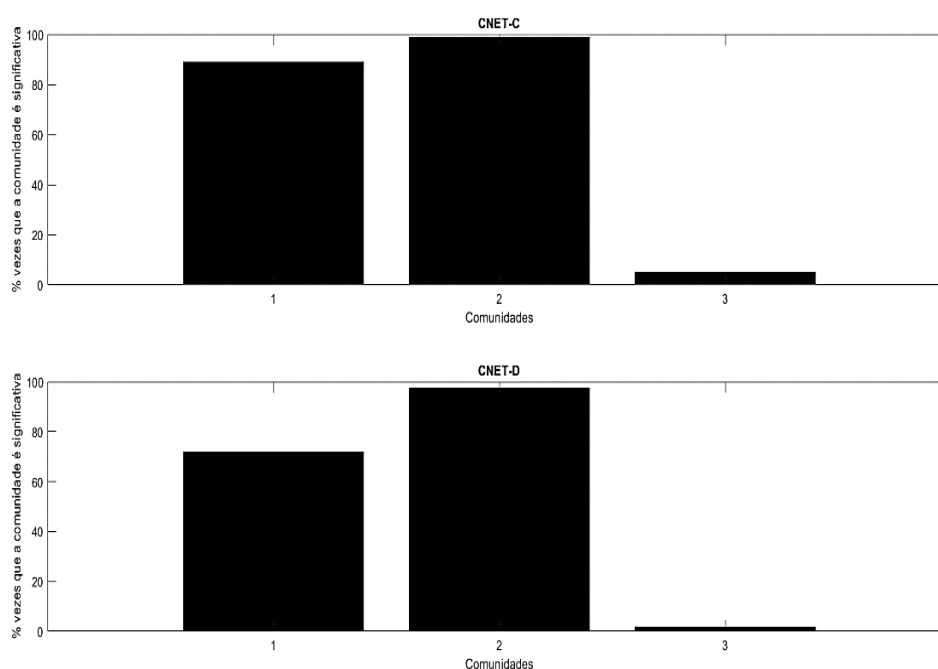


Figura 36- Representação gráfica da primeira camada do diagnóstico para as metodologias propostas. Falha de processo na variável 1 com TPR=0.75.

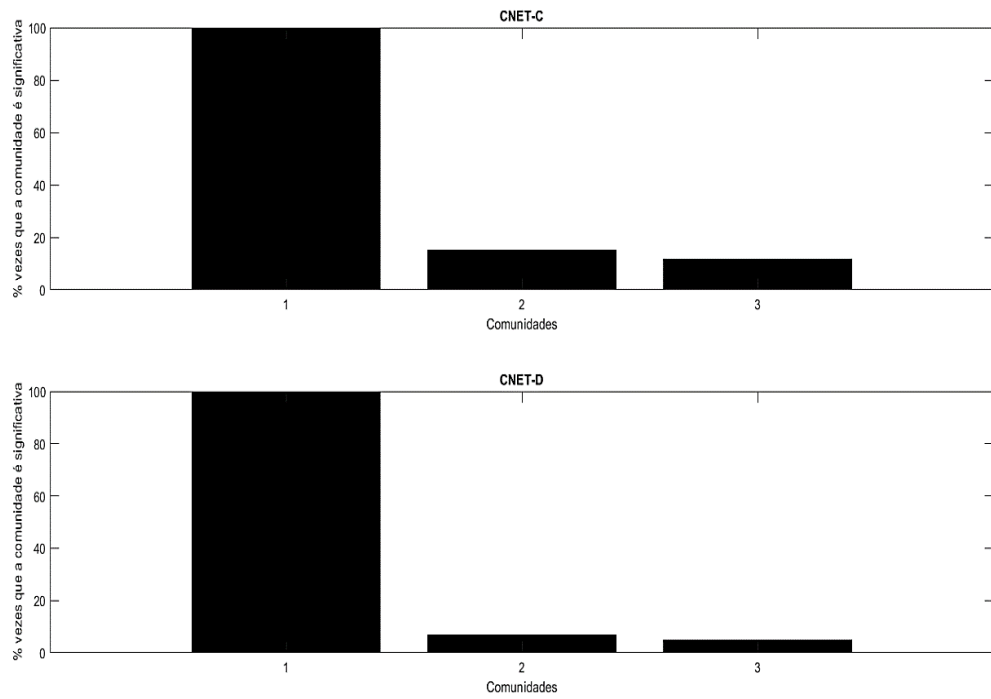


Figura 37- Representação gráfica da primeira camada do diagnóstico para as metodologias propostas. Falha no sensor na variável 1 com  $TPR=0.75$ .

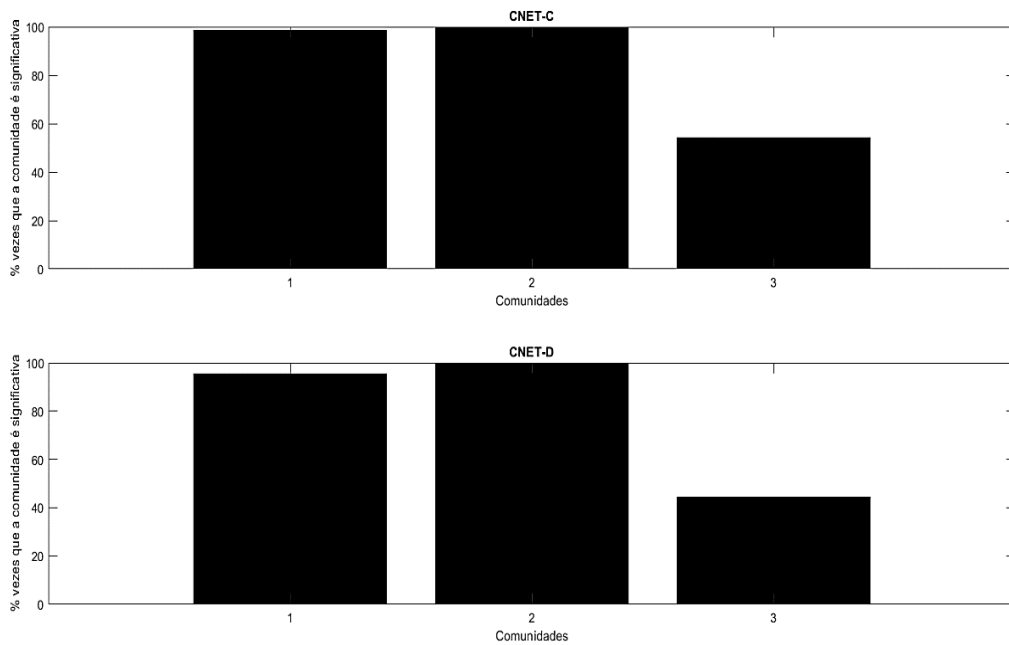


Figura 38- Representação gráfica da primeira camada do diagnóstico para as metodologias propostas. Falha na correlação entre as variáveis 1 e 8 com  $TPR=0.75$ .

Tabela 12- Resultados comparativos da primeira camada de diagnóstico para vários tipos e localizações de falha entre as metodologias propostas (TPR=0.75). A negrito constam os resultados mais importantes.

Tipo de falha	Localização da falha	Metodologia de monitorização	% vezes que uma comunidade foi dada como significativa			
			#1	#2	#3	
Processo	g <sub>1</sub>	CNET-C	<b>91.07</b>	<b>99.50</b>	5.460	
		CNET-D	74.38	<b>97.34</b>	2.490	
	g <sub>3</sub>	CNET-C	<b>90.13</b>	1.485	<b>97.42</b>	
		CNET-D	77.06	0.3563	<b>95.99</b>	
	g <sub>10</sub>	CNET-C	1.054	<b>99.31</b>	1.208	
		CNET-D	0.4233	<b>99.89</b>	0.3386	
	g <sub>16</sub>	CNET-C	1.237	1.658	<b>99.92</b>	
		CNET-D	0.2351	0.5225	<b>99.95</b>	
	Sensor	g <sub>1</sub>	CNET-C	<b>99.71</b>	14.46	14.46
			CNET-D	<b>99.56</b>	7.442	7.246
g <sub>3</sub>		CNET-C	19.92	1.605	<b>99.69</b>	
		CNET-D	8.645	0.5561	<b>99.77</b>	
g <sub>10</sub>		CNET-C	1.462	<b>98.82</b>	1.385	
		CNET-D	0.5744	<b>99.97</b>	0.3733	
g <sub>16</sub>		CNET-C	1.2571	1.3340	<b>99.90</b>	
		CNET-D	0.2235	0.4968	<b>99.85</b>	
Correlação		g <sub>1</sub> ← g <sub>8</sub>	CNET-C	<b>98.56</b>	<b>99.81</b>	66.22
			CNET-D	<b>97.61</b>	<b>99.53</b>	62.65
	g <sub>3</sub> ← g <sub>1</sub>	CNET-C	<b>97.82</b>	1.764	<b>98.91</b>	
		CNET-D	<b>97.17</b>	0.3962	<b>98.47</b>	
	g <sub>10</sub> ← g <sub>8</sub>	CNET-C	0.9686	<b>99.72</b>	1.283	
		CNET-D	0.3780	<b>99.97</b>	0.2160	

Ambas as metodologias são bastante eficazes e não ambíguas na primeira camada do diagnóstico, quando a falha se localiza numa variável que apenas consta numa só comunidade, como é o exemplo da variável 10 e 16. Contudo, ainda existem outros tipos de falha, como a falha no sensor, em que a primeira camada do diagnóstico também diagnostica apenas uma comunidade em falha. Pode-se concluir então que ambas as metodologias de monitorização propostas têm um excelente desempenho no diagnóstico da comunidade em falha.

Para efeitos de visualização e de esclarecer os cenários em que os algoritmos detetam mais do que uma comunidade em falha, representam-se nas Figuras 39, 40 e 41 exemplos dos resultados da segunda camada do diagnóstico, onde as metodologias diagnosticam a variável em falha.

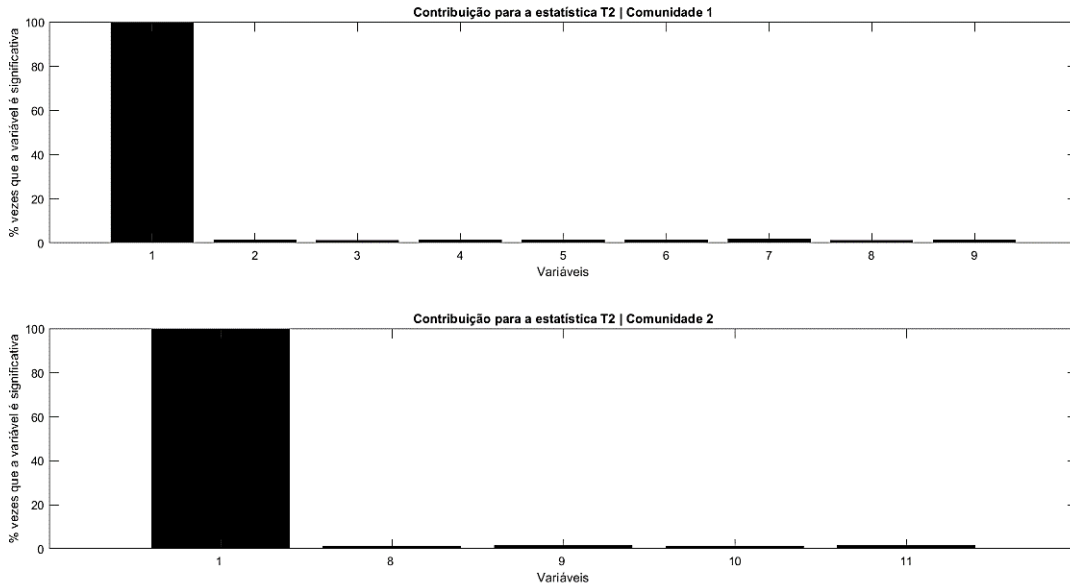


Figura 39- Representação gráfica dos resultados da segunda camada de diagnóstico das metodologias propostas para uma falha no processo na variável 1 (TPR=0.75).

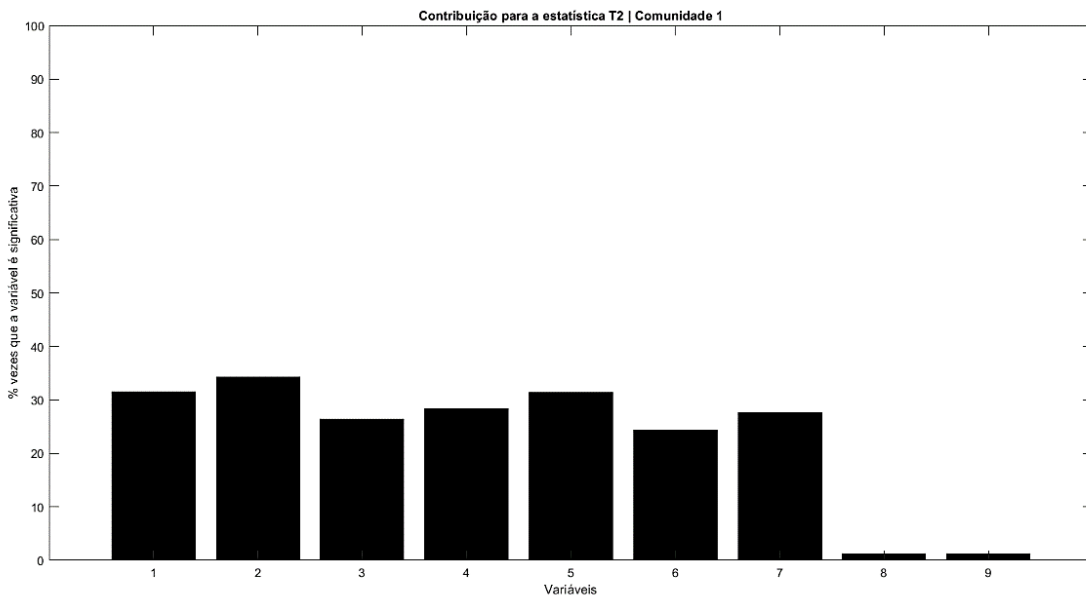


Figura 40- Representação gráfica dos resultados da segunda camada de diagnóstico das metodologias propostas para uma falha no sensor na variável 1 (TPR=0.75).

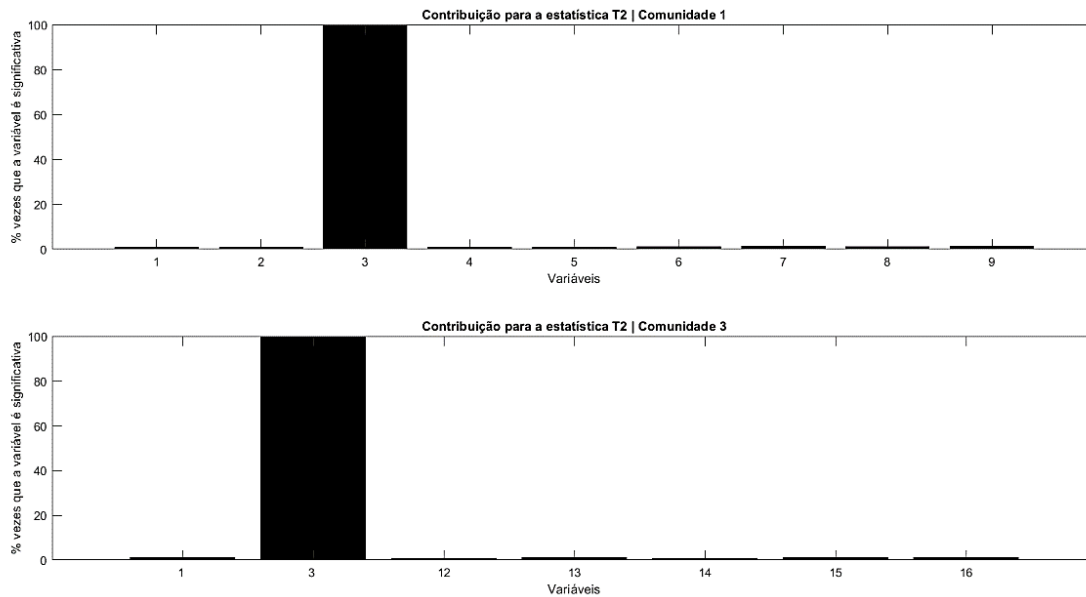


Figura 41- Representação gráfica dos resultados da segunda camada de diagnóstico das metodologias propostas para uma falha na correlação entre as variáveis 3 e 1 (TPR=0.75).

Através dos resultados apresentados da segunda camada de diagnóstico, conclui-se que este é feito de forma precisa, diagnosticando uma e só uma variável em falha. No caso das falhas no sensor, as metodologias não diagnosticam apenas a variável onde foi simulada a falha, mas também os seus filhos causais.

## 6. Conclusão e trabalho futuro

“The best way to predict  
the future is to create it”

*Abraham Lincoln*

No âmbito dos objetivos propostos no início desta dissertação, podem-se retirar diversas conclusões.

A rede causal contém informações sobre o sistema que, normalmente, não é utilizada no âmbito de processos químicos. É possível inferir a rede causal apenas com os dados das variáveis medidas, sendo que quanto maior o tamanho do conjunto de dados utilizado, mais precisa é a inferência da rede. Os maiores problemas na inferência das associações diretas entre variáveis devem-se às variáveis de confusão. No PCalg, deve ter-se em conta a escolha da ordem máxima da correlação parcial dependendo da dimensionalidade do sistema em estudo, para se evitar controlar demasiadas variáveis, o que leva a perda de informação.

Na maior parte dos cenários, a introdução da estrutura causal na metodologia de monitorização permite que haja um ganho de sensibilidade na deteção de falhas face à metodologia de monitorização baseada em PCA. No problema de diagnóstico de falhas, a causa raiz é isolada nos três tipos de falha testados, enquanto o PCA tem diagnósticos ambíguos e frequentemente inconclusivos.

A divisão da rede causal em diversas comunidades reduz a dimensionalidade do sistema, aumentando a sensibilidade da deteção de falhas face às estratégias de monitorização da rede completa. Por sua vez, o diagnóstico também é feito num conjunto de variáveis reduzido, isolando a causa raiz. Estas afirmações são sustentadas pelas metodologias desenvolvidas nesta dissertação: a CNET-C e a CNET-D. Contudo, a taxa de falsos alarmes global tem de ser controlada na CNET-D, o que pode levar a alguma perda de sensibilidade em sistemas de grande dimensionalidade. Este último facto, não se verificou no caso de estudo abordado.

A aplicação do conceito de *Markov-blanket* nos pais causais de cada comunidade, permitiu introduzir nos modelos as associações inter-comunidades, melhorando o desempenho das metodologias propostas.

### **Trabalho futuro**

Em termos de trabalho futuro é proposto:

- Testar a inferência de redes causais para sistemas de maior dimensionalidade, onde a rede causal seja conhecida à *priori*. Este estudo servirá para consolidar

as conclusões desta dissertação, tendo por base um processo químico mais complexo;

- Refinar a inferência de redes causais com modelos de primeiro princípio e Diagramas de Processo e Instrumentação;
- Aplicar a CNET-C e CNET-D em sistemas de maiores dimensões, tal como o *Tennessee Eastman Process*, para se estudar o efeito de um número elevado de comunidades na deteção e diagnóstico de falhas;
- Estudar a etapa do prognóstico de falhas nas metodologias propostas;
- Estudar a etapa da resolução ativa de falhas nas metodologias propostas.



# Bibliografia

- [1]- T. J. RATO and M. S. REIS, “Sensitivity enhancing transformations for monitoring the process correlation structure,” *J. Process Control*, vol. 24, no. 6, pp. 905–915, 2014.
- [2]- T. J. RATO and M. S. REIS, “Non-causal data-driven monitoring of the process correlation structure: A comparison study with new methods,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 71, pp. 307–322, 2014.
- [3]- W. SHEWHART, *Economic Control Of Quality Of Manufactured Product*, 7<sup>a</sup> Edição. Nova Iorque: Van Nostrand Company, Inc, 1931.
- [4]- I-SCOOP, “Industry 4.0 – is it all about industrial data and analytics?” <https://www.i-scoop.eu/industry-4-0/industrial-data-analytics/> (accessed Aug. 05, 2021).
- [5]- M. S. REIS and G. GINS, “Industrial process monitoring in the big data/industry 4.0 era: From detection, to diagnosis, to prognosis,” *Processes*, vol. 5, no. 3, 2017.
- [6]- ANDREA FALCON, “Aristotle on Causality,” 2019. <https://plato.stanford.edu/cgi-bin/encyclopedia/archinfo.cgi?entry=aristotle-causality> (accessed Aug. 05, 2021).
- [7]- K. D. HOOVER, “Causality in Economics and Econometrics,” *SSRN Electron. J.*, no. June, 2011.
- [8]- B. BERNINGER, “Environment, Culture, and the Brain: New Explorations in Neurohistory,” no. 6, pp. 23–25, 2012.
- [9]- G. MCGWIN, “Causation in epidemiology,” *Am. J. Ophthalmol.*, vol. 150, no. 5, pp. 599–601, 2010.
- [10]- F. YANG, P. DUAN, S. L. SHAH, and T. CHEN, *Capturing connectivity and causality in complex industrial processes*, Primeira E. Nova Iorque, 2014.
- [11]- B. LINDNER, L. AURET, and M. BAUER, “Investigating the Impact of Perturbations in Chemical Processes on Data-Based Causality Analysis. Part 1: Defining Desired Performance of Causality Analysis Techniques,” *IFAC-PapersOnLine*, vol. 50, no. 1, pp. 3269–3274, 2017.
- [12]- T. J. RATO and M. S. REIS, “Markovian and Non-Markovian sensitivity enhancing transformations for process monitoring,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 163, pp. 223–233, 2017.
- [13]- TECHNOPEdia, “Network Connectivity,” 2021. <https://www.techopedia.com/definition/12937/network-connectivity> (accessed Mar. 08, 2021).
- [14]- AMPLITUDE, “Correlation vs Causation: Understand the Difference for Your Product,” 2020. <https://blog.amplitude.com/causation-correlation> (accessed Mar. 08, 2021).
- [15]- J. PEARL, *Causality: Models, reasoning, and inference, second edition*, Segunda ed.

Cambridge: Cambridge University Press, 2009.

- [16]- I. MAGRANS DE ABRIL, J. YOSHIMOTO, and K. DOYA, “Connectivity inference from neural recording data: Challenges, mathematical bases and research directions,” *Neural Networks*, vol. 102, pp. 120–137, 2018.
- [17]- C. GUO and F. YANG, “A Causality Capturing Method for Diagnosis Based on Entropy by Analyzing Trends of Time Series,” *IFAC-Papers OnLine*, vol. 48, no. 21, pp. 778–783, 2015.
- [18]- R. J. MAY, H. R. MAIER, G. C. DANDY, and T. M. K. G. FERNANDO, “Non-linear variable selection for artificial neural networks using partial mutual information,” *Environ. Model. Softw.*, vol. 23, no. 10–11, pp. 1312–1326, 2008.
- [19]- P. A. MORETTIN, *Estatística básica*, Quinta edi. São Paulo, 2004.
- [20]- DIETRICH, *Uncertainty, Calibration and Probability: The Statistics of Scientific and Industrial Measurement*, Segunda ed. CRC Press, 1991.
- [21]- J. RODGERS, N. L E E, and A. W, “Thirteen Ways to Look at the Correlation Coefficient,” vol. 42, no. I, pp. 59–66, 1988.
- [22]- M. R. COHEN and A. KOHN, “Measuring and interpreting neuronal correlations,” *Nat. Neurosci.*, vol. 14, no. 7, pp. 811–819, 2011.
- [23]- C. KNOX, “Detection of neuronal interactions using correlation analysis,” *Trends Neurosci.*, vol. 4, pp. 222–225, 1981.
- [24]- M. SHIMONO and J. M. BEGGS, “Functional Clusters, Hubs, and Communities in the Cortical Microconnectome,” *Cereb Cortex*, vol. 4, no. 10, pp. 3743–3757, 2015.
- [25]- I. ERB, “Partial correlations in compositional data analysis,” *CoDaWork*, vol. 6, no. April, 2019.
- [26]- L. STATISTICS, “Partial Correlation using SPSS Statistics,” 2020.  
<https://statistics.laerd.com/spss-tutorials/partial-correlation-using-spss-statistics.php> (accessed Mar. 15, 2021).
- [27]- M. DADGOSTAR, S. K. SETAREHDAN, S. SHAHZADI, and A. AKIN, “Functional connectivity of the PFC via partial correlation,” *Optik (Stuttg.)*, vol. 127, no. 11, 2016.
- [28]- T. CHEN, S. RYALI, S. QIN, and V. MENON, “NeuroImage Estimation of resting-state functional connectivity using random subspace based partial correlation : A novel method for reducing global artifacts,” *Neuroimage*, vol. 82, pp. 87–100, 2013.
- [29]- J. ZHAO, Y. ZHOU, X. ZHANG, and L. CHEN, “Part mutual information for quantifying direct associations in networks,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, vol. 113, no. 18, pp. 5130–5135, 2016.

- [30]- S. FRENZEL and B. POMPE, “Partial Mutual Information for Coupling Analysis of Multivariate Time Series,” no. November, pp. 1–4, 2007.
- [31]- C. . SHANNON, “A Mathematical Theory of Communication\*,” vol. 5, no. I, pp. 3–55, 1948.
- [32]- A. Q. BARBI, “A informação mútua como medida de dependência não linear na estrutura de rede do mercado brasileiro de ações,” Universidade de São Paulo, 2017.
- [33]- T. COVER and J. THOMAS, *Elements of information theory*, Segunda ed. 2005.
- [34]- R. R. F. ATTUX, “Fundamentos da Teoria de Informação.”
- [35]- F. REZA, *An Introduction To Information Theory*, Primeira E. Nova Iorque, 2012.
- [36]- S. YVES, “Information-Theoretic Alternatives To Pearson’s Correlation,” 2018.  
<https://towardsdatascience.com/the-black-swans-in-your-market-neutral-portfolios-part-ii-20dc2299374a> (accessed Mar. 21, 2021).
- [37]- M. GILSON *ET AL.*, “Model-based whole-brain effective connectivity to study distributed cognition in health and disease,” *Netw. Neurosci.*, vol. 4, no. 2, pp. 338–373, 2019.
- [38]- K. SAMESHIMA and L. A. BACCALÁ, *Methods in brain connectivity inference through multivariate time series analysis*, Primeira e. 2014.
- [39]- I. H. STEVENSON, J. M. REBESCO, N. G. HATSOPOULOS, Z. HAGA, L. E. MILLER, and K. P. KORDING, “Bayesian inference of functional connectivity and network structure from spikes,” *IEEE Trans. Neural Syst. Rehabil. Eng.*, vol. 17, no. 3, pp. 203–213, 2009.
- [40]- S. S. AHMED, S. ROY, and J. KALITA, “Assessing the Effectiveness of Causality Inference Methods for Gene Regulatory Networks,” *IEEE/ACM Trans. Comput. Biol. Bioinforma.*, 2018.
- [41]- S. KLEINBERG and G. HRIPCSAK, “A review of causal inference for biomedical informatics,” *J. Biomed. Inform.*, vol. 44, no. 6, pp. 1102–1112, 2011.
- [42]- Y. LIU, H. CHEN, H. WU, Y. DAI, Y. YAO, and Z. YAN, “Simplified Granger causality map for data-driven root cause diagnosis of process disturbances,” *J. Process Control*, vol. 95, pp. 45–54, 2020.
- [43]- L. GLASS and S. A. KAUFFMAN, “The Logical Analysis of Continuous, Non-linear Biochemical Control Networks,” *J.theor.Biol*, no. 39, pp. 103–129, 1973.
- [44]- Y. XIAO, “A Tutorial on Analysis and Simulation of Boolean Gene Regulatory Network Models,” *Curr. Genomics*, vol. 10, no. 7, pp. 511–525, 2009.
- [45]- L. KADERALI and N. RADDE, “Inferring Gene Regulatory Networks from Expression Data,” Heidelberg, 2008.
- [46]- “Causal Inference with Bayesian Networks,” 2020.  
[https://causalnex.readthedocs.io/en/latest/04\\_user\\_guide/04\\_user\\_guide.html](https://causalnex.readthedocs.io/en/latest/04_user_guide/04_user_guide.html) (accessed Mar.

26, 2021).

- [47]- D. TALBOT, G. LEFEBVRE, and J. ATHERTON, “The Bayesian Causal Effect Estimation Algorithm,” *J. Causal Inference*, vol. 3, no. 2, pp. 207–236, 2015.
- [48]- J. PEARL and R. DECHTER, “Identifying Independencies In Causal Graphs with Feedback,” no. 1, pp. 420–426, 1988.
- [49]- F. JENSEN and T. NIELSEN, *Bayesian Networks and Decisions Graphs*, Segunda ed. Nova Iorque: Springer, 2007.
- [50]- J. PEARL, *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems: Networks of Plausible Inference*, Segunda ed. Los Angeles: Morgan Kaufmann, 1988.
- [51]- O. KAMMOUH, P. GARDONI, and G. PAOLO, “Probabilistic framework to evaluate the resilience of engineering systems using Bayesian and dynamic Bayesian networks,” *Reliab. Eng. Syst. Saf.*, no. 3, 2020.
- [52]- H. ZHANG, C. YANG, X. SHI, and H. LIU, “Effluent quality prediction in papermaking wastewater treatment processes using dynamic Bayesian networks,” *J. Clean. Prod.*, vol. 282, 2021.
- [53]- C. OLSEN, P. E. MEYER, and G. BONTEMPI, “Inferring causal relationships using information-theoretic measures,” Bruxelles, 2009.
- [54]- D. JANZING, D. BALDUZZI, M. GROSSE-WENTRUP, and B. SCHÖLKOPF, “Quantifying causal influences,” *Ann. Stat.*, vol. 41, no. 5, pp. 2324–2358, 2013.
- [55]- K. HLAVÁČKOVÁ-SCHINDLER, M. PALUŠ, M. VEJMEĽKA, and J. BHATTACHARYA, “Causality detection based on information-theoretic approaches in time series analysis,” *Phys. Rep.*, vol. 441, no. 1, pp. 1–46, 2007.
- [56]- T. SCHREIBER, “Measuring information transfer,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, no. 2, pp. 461–464, 2000.
- [57]- H. LEE, C. KIM, S. LIM, and J. M. LEE, “Data-driven fault diagnosis for chemical processes using transfer entropy and graphical lasso,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 142, p. 107064, 2020.
- [58]- A. D. WYNER, “A definition of conditional mutual information for arbitrary ensembles,” *Inf. Control*, vol. 38, no. 1, pp. 51–59, 1978.
- [59]- L. BARNETT, A. B. BARRETT, and A. K. SETH, “Granger causality and transfer entropy are equivalent for gaussian variables,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, no. 23, pp. 2–5, 2009.
- [60]- J. SUN and E. M. BOLLT, “Causation entropy identifies indirect influences, dominance of neighbors and anticipatory couplings,” *Phys. D*, vol. 267, pp. 49–57, 2014.
- [61]- P. KIM, J. ROGERS, J. SUN, and E. BOLLT, “Causation Entropy Identifies Sparsity Structure for

- Parameter Estimation of Dynamic Systems,” *J. Comput. Nonlinear Dyn.*, vol. 12, no. 1, pp. 1–14, 2017.
- [62]- R. G. JAMES, N. BARNETT, and J. P. CRUTCHFIELD, “Information Flows? A Critique of Transfer Entropies,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 116, no. 23, pp. 1–6, 2016.
- [63]- M. A. JAVED, M. S. YOUNIS, S. LATIF, J. QADIR, and A. BAIG, “Community detection in networks: A multidisciplinary review,” *J. Netw. Comput. Appl.*, vol. 108, no. September 2017, pp. 87–111, 2018.
- [64]- L. SAMANDARI MASOOLEH, J. E. ARBOGAST, W. D. SEIDER, U. OKTEM, and M. SOROUGH, “An efficient algorithm for community detection in complex weighted networks,” *AIChE J.*, vol. 67, no. 7, pp. 1–15, 2021.
- [65]- S. FORTUNATO and D. HRIC, “Community detection in networks: A user guide,” *Phys. Rep.*, vol. 659, pp. 1–44, 2016.
- [66]- R. ALDECOA and I. MARÍN, “Exploring the limits of community detection strategies in complex networks,” *Sci. Rep.*, vol. 3, 2013.
- [67]- S. HARENBERG *ET AL.*, “Community detection in large-scale networks: A survey and empirical evaluation,” *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Stat.*, vol. 6, no. 6, pp. 426–439, 2014.
- [68]- R. LANDMAN, J. KORTELA, Q. SUN, and S. L. JÄMSÄ-JOUNELA, “Fault propagation analysis of oscillations in control loops using data-driven causality and plant connectivity,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 71, pp. 1–11, 2014.
- [69]- E. NAGHOOSI, B. HUANG, E. DOMLAN, and R. KADALI, “Information transfer methods in causality analysis of process variables with an industrial application,” *J. Process Control*, vol. 23, no. 9, pp. 1296–1305, 2013.
- [70]- N. GALAGALI, “Bayesian inference of chemical reaction networks,” MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY, 2016.
- [71]- C. W. J. GRANGER, “Investigating Causal Relations by Econometric Models and Cross-Spectral Methods,” *Econom. Soc.*, vol. 37, no. 3, pp. 424–438, 1969.
- [72]- J. P. HESPANHA, “An efficient matlab algorithm for graph partitioning,” pp. 1–8, 2004.
- [73]- M. MITALIDIS and L. PITSOULIS, “Manual for the Community Detection Toolbox v . 0 . 9,” 2014.
- [74]- L. DANON, A. DÍAZ-GUILERA, J. DUCH, and A. ARENAS, “Comparing community structure identification,” *J. Stat. Mech. Theory Exp.*, no. 9, pp. 1–10, 2005.
- [75]- H. WANG, Z. SONG, and H. WANG, “Statistical process monitoring using improved PCA with optimized sensor locations,” *J. Process Control*, vol. 12, no. 6, pp. 735–744, 2002.

- [76]- R. BRO and A. K. SMILDE, “Principal component analysis,” *Anal. Methods*, vol. 6, no. 9, pp. 2812–2831, 2014.
- [77]- T. J. RATO and M. S. REIS, “Fault detection in the Tennessee Eastman benchmark process using dynamic principal components analysis based on decorrelated residuals (DPCA-DR),” *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, vol. 125, pp. 101–108, 2013.
- [78]- J. SANSANA, “Simulation, monitoring and diagnosis of faults and equipment degradation,” Universidade de Coimbra, 2018.
- [79]- R. A. JOHNSON and D. W. AND OTHERS WICHERN, *Applied Multivariate Statistical Analysis*, Sexta ediç. New Jersey: Pearson Prentice Hall, 2007.
- [80]- I. JOLLIFFE, *Principal components analysis*, Segunda ed. Nova Iorque: Springer, 2002.
- [81]- W. KU, R. H. STORER, and C. GEORGAKIS, “Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis,” *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, vol. 30, no. 1, pp. 179–196, 1995.
- [82]- J. F. MACGREGOR and T. KOURTI, “Statistical process control of multivariate processes,” *Control Eng. Pract.*, vol. 3, no. 3, pp. 403–414, 1995.
- [83]- S. J. QIN, S. VALLE, and M. J. PIOVOSO, “On unifying multiblock analysis with application to decentralized process monitoring,” *J. Chemom.*, vol. 15, no. 9, pp. 715–742, 2001.
- [84]- G. E. P. BOX, “Some Theorems on Quadratic Forms Applied in the Study of Analysis of Variance Problems, I. Effect of Inequality of Variance in the One-Way Classification,” *Ann. Math. Stat.*, vol. 25, no. 2, pp. 290–302, 1954.
- [85]- J. WANG and Q. P. HE, “Multivariate Statistical Process Monitoring Based on Statistics Pattern Analysis,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 49, no. 17, pp. 7858–7869, 2010.
- [86]- A. REVERTER and E. K. F. CHAN, “Combining partial correlation and an information theory approach to the reversed engineering of gene co-expression networks,” *Bioinformatics*, vol. 24, no. 21, pp. 2491–2497, 2008.
- [87]- M. KUTNER, C. NACHTSHEIM, J. NETER, and W. LI, *Applied Linear Statistical Models*, Quinta edi., vol. 29, no. 2. Nova Iorque: The McGraw-Hill Companies, 2005.
- [88]- H. ABDI, “The Bonferonni and Šidák Corrections for Multiple Comparisons,” *Encycl. Meas. Stat.*, pp. 103–107, 2007.
- [89]- F. HADDAD, “Modified hotelling’s T2 control charts using modified mahalanobis distance,” *Int. J. Electr. Comput. Eng.*, vol. 11, no. 1, pp. 284–292, 2021.
- [90]- T. HASTIE, R. TIBSHIRANI, and J. FRIEDMAN, *The Elements of Statistics Learning: Data Mining, Inference and Prediction*, Segunda Ed. Nova Iorque: Springer, 2009.

## Anexos

### Anexo I – Proposta de um algoritmo de inferência de conectividade baseado no método de LASSO

O *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator* (LASSO) é um método de análise de regressão que realiza a seleção e regularização de variáveis aprimorando o *trade-off* bias-variância do modelo resultante<sup>90</sup>. Este método centra-se no cálculo dos coeficientes de regressão de LASSO,  $\hat{\beta}_j$ , tendo por base o método dos mínimos quadrados com a adição da penalização  $L_1$ , segundo a Equação A.1.

$$\hat{\beta}_j = \underset{\beta}{\operatorname{argmin}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^p x_{ij} \beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p |\beta_j| \right\} \quad (\text{A. 1})$$

A penalização aplicada neste método leva a que existam coeficientes com o valor de 0, excluindo assim as variáveis predictoras ( $x_{ij}$ ) que não acrescentam precisão na previsão dos valores de  $y_i$ , reduzindo a variância do modelo e as colinearidades.

O hiperparâmetro  $\lambda$  representa o grau de *shrinkage* do método LASSO sendo diretamente proporcional ao *bias* e inversamente proporcional à variância, tornando de extrema importância o *trade-off* entre estas duas medidas; para a escolha de  $\lambda$  recorre-se, normalmente, à validação cruzada onde é promovido o melhor *trade-off* de forma a se minimizar o valor do erro quadrático médio, testando diversos valores de  $\lambda$ . Na validação cruzada também é feito o escalonamento de variáveis para se evitar o sobreajuste, onde todos os conjuntos de dados observacionais têm média de 0 e desvio-padrão de 1.

A aplicação deste método para a inferência de conectividade de uma rede é testada para todos os pares de variáveis. Para um par de variáveis, realiza-se a regressão de cada uma das variáveis em que no conjunto de variáveis regressoras não constam o par de variáveis a ser testado. De seguida, aplica-se a correlação marginal entre os resíduos das previsões dessas variáveis. Os coeficientes de correlação são avaliados pelo valor de prova (nível de significância 5%), onde se se rejeitar a hipótese nula a associação direta existe.

Contudo, este método não lida com as variáveis de confusão pois baseia a escolha das variáveis regressoras no aumento de precisão na previsão das variáveis.

Esta metodologia foi testada no sistema linear estacionário da Secção 4.1. A rede inferida com este método é apresentada na Figura A.1.

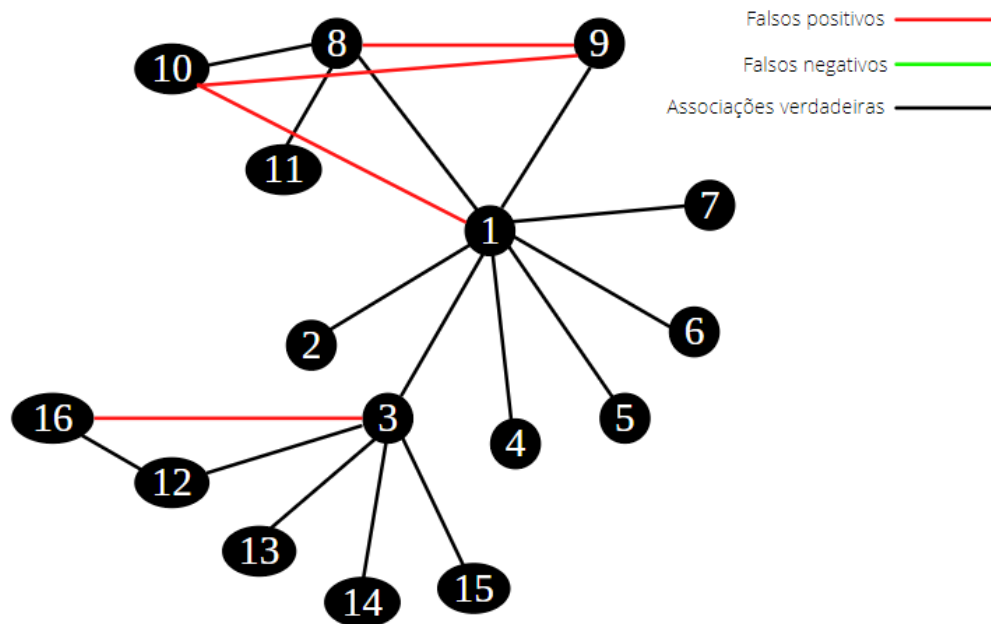


Figura A. 1- Inferência da conectividade da rede no sistema linear estacionário através da metodologia baseada no método de LASSO- 500, 5000 e 10000 dados observacionais.

A partir deste resultado, e através de alguns testes feitos nos tripletos onde ocorrem os falsos positivos, pode concluir-se que quando o método LASSO utiliza as variáveis de confusão para prever o par de variáveis que está a ser testado, *contamina* a correlação que é feita através dos resíduos, levando a que o algoritmo detete uma associação direta.

No sistema linear dinâmico apresentado na Secção 4.2, o método inferiu associações diretas entre quase todos os pares de variáveis, o que se deve à introdução dos desfasamentos de tempo em cada variável. Este resultado é pouco preciso e exato. É de salientar que o tempo computacional aumentou consideravelmente em comparação com o caso do sistema linear estacionário.



## Anexo II- Figuras da comparação das metodologias de monitorização benchmark para a deteção de falhas

As figuras apresentadas neste anexo, representam os resultados gráficos dos cenários comparativos estudados na Secção 5.1.

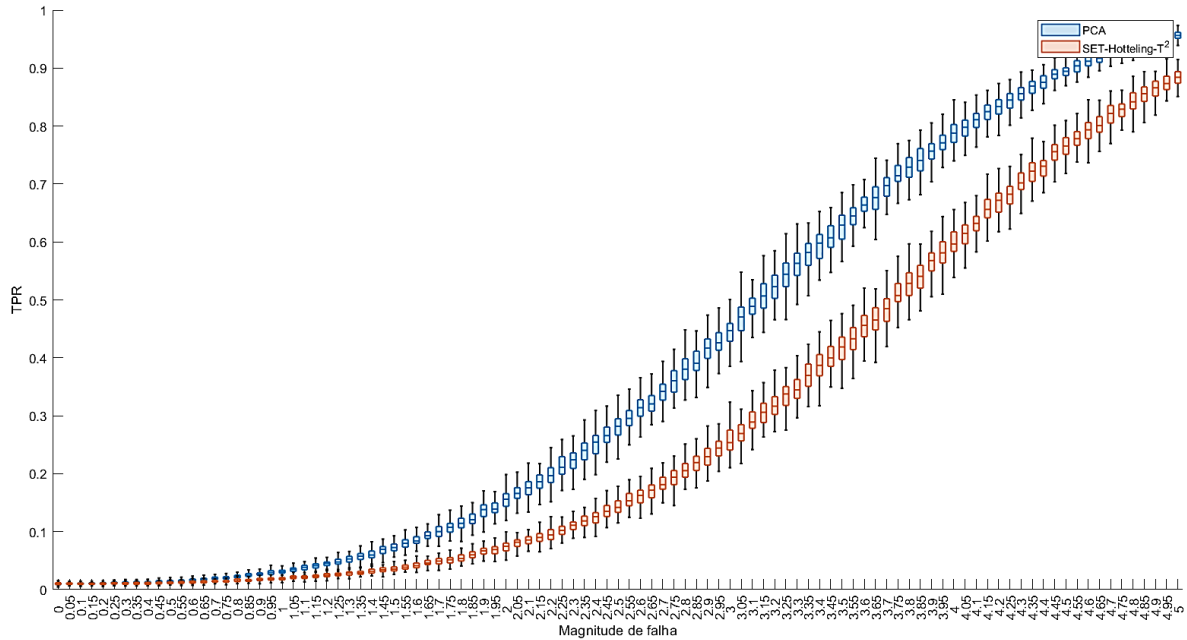


Figura A. 2-True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha no processo localizadas na variável 3. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

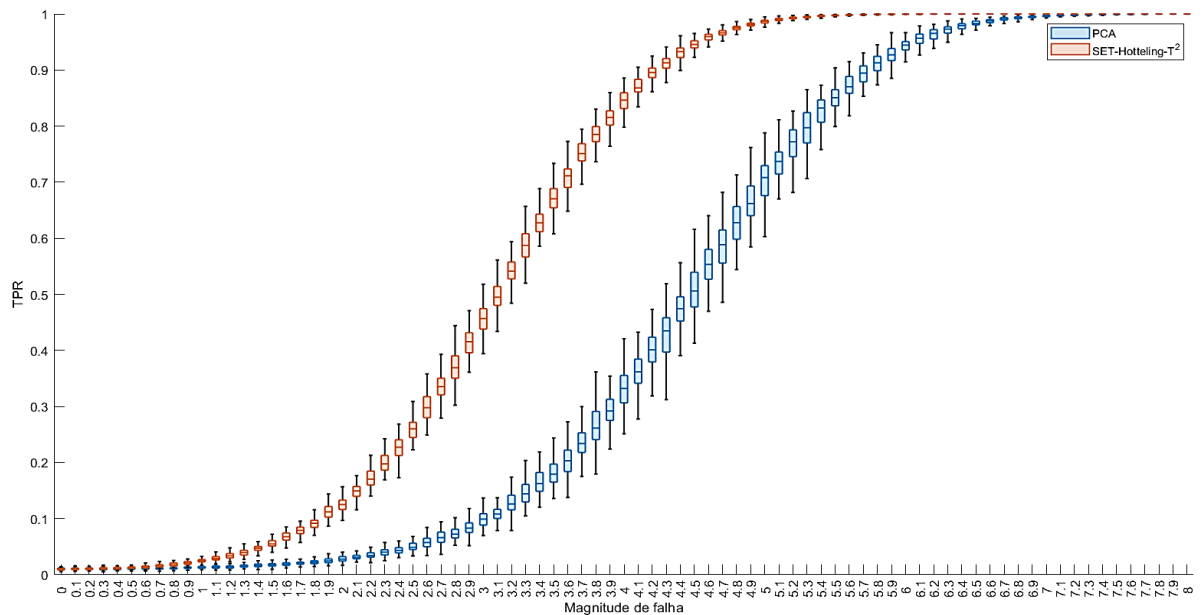


Figura A. 3-True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha no processo localizadas na variável 10. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

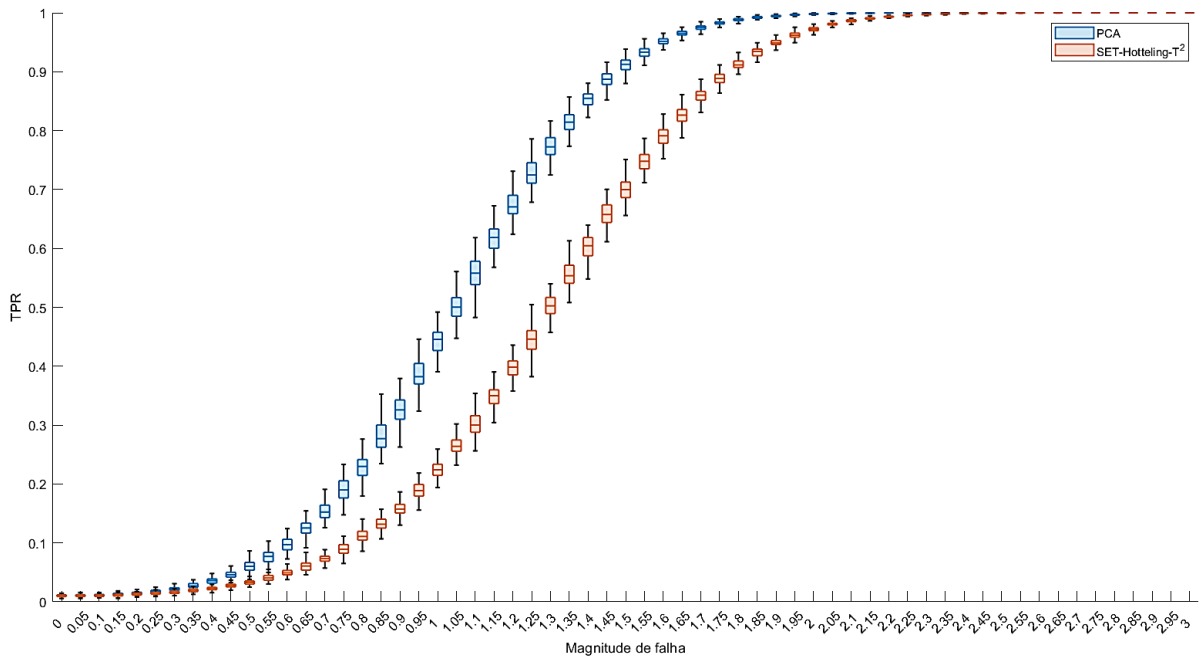


Figura A. 4- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha no processo localizadas na variável 16. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

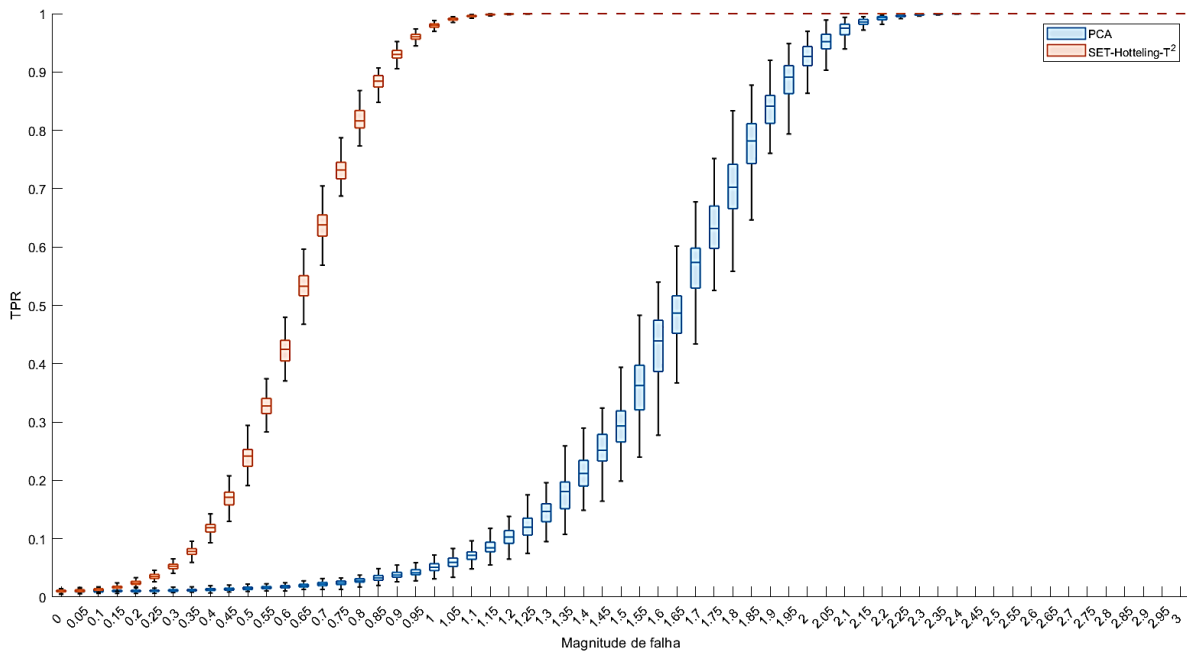


Figura A. 5- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha no sensor localizadas na variável 3. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

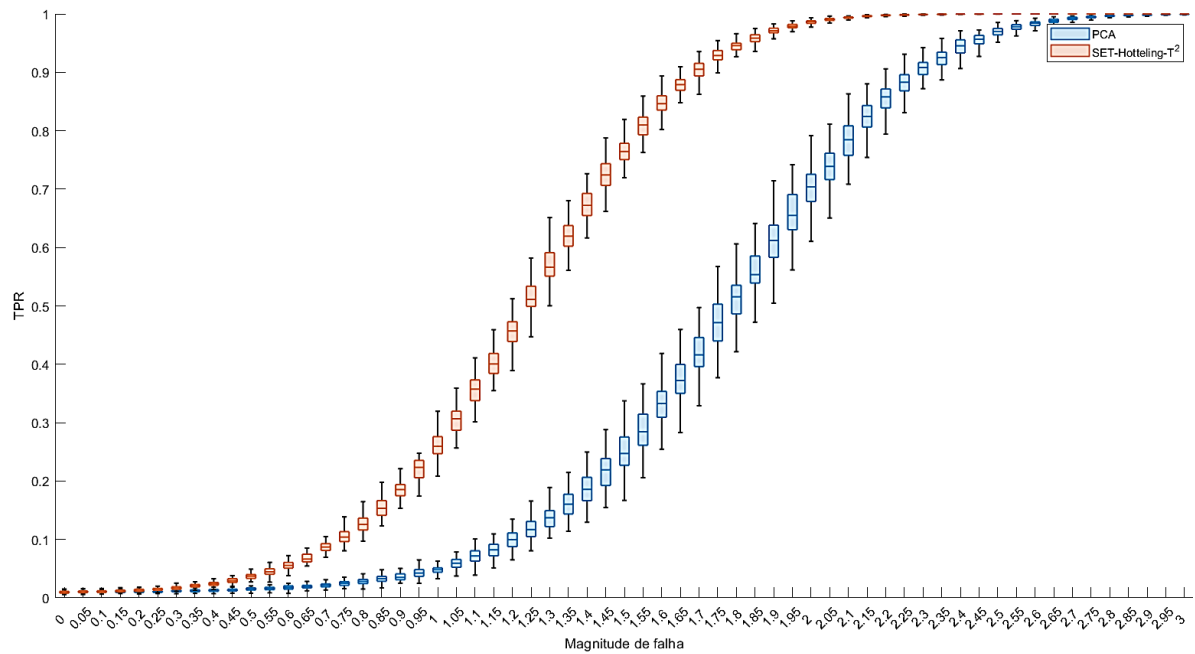


Figura A. 6- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha no sensor localizadas na variável 10. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

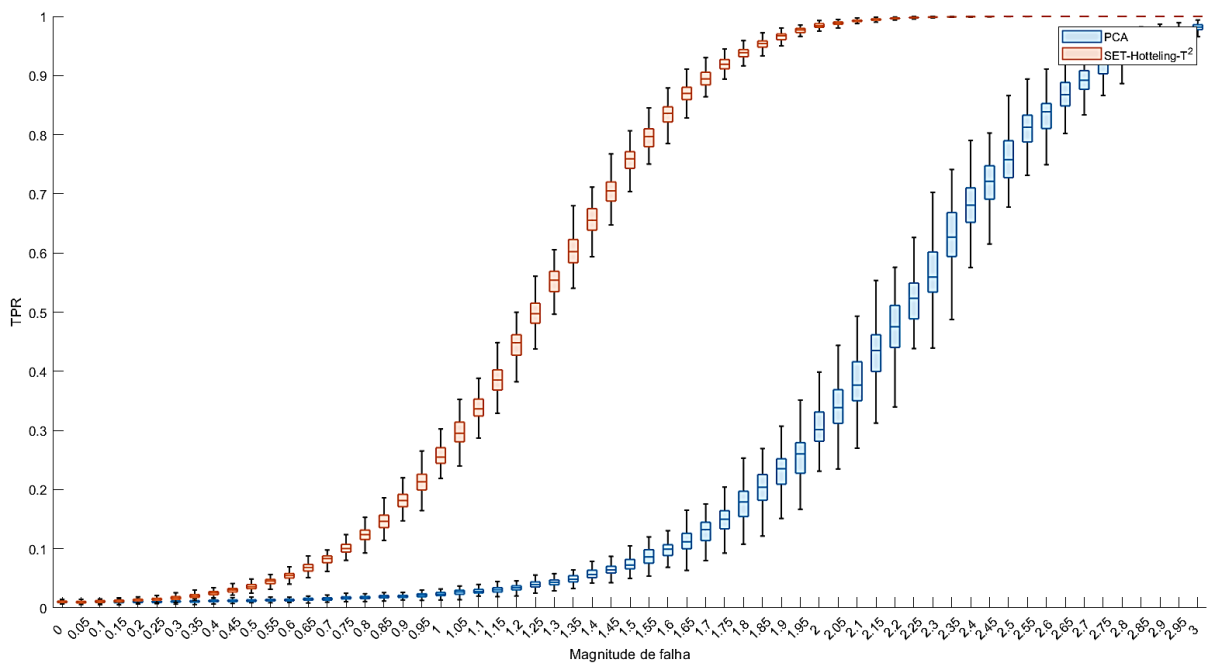


Figura A. 7- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha no sensor localizadas na variável 16. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

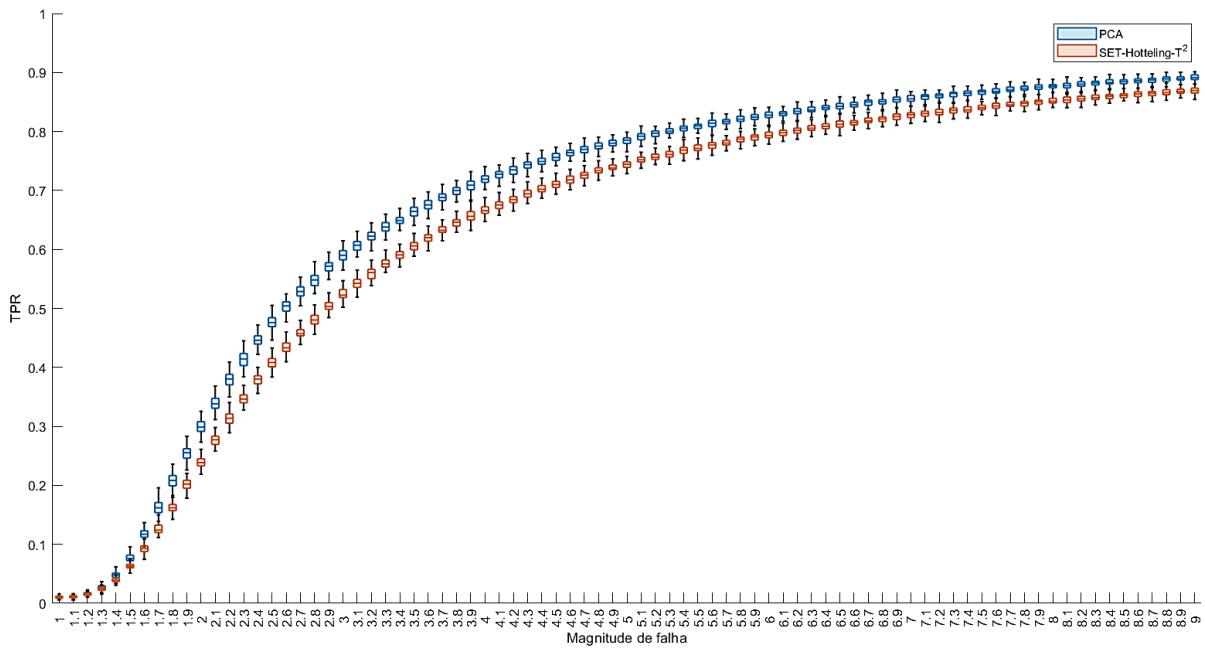


Figura A. 8- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha na correlação entre as variáveis 3 e 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

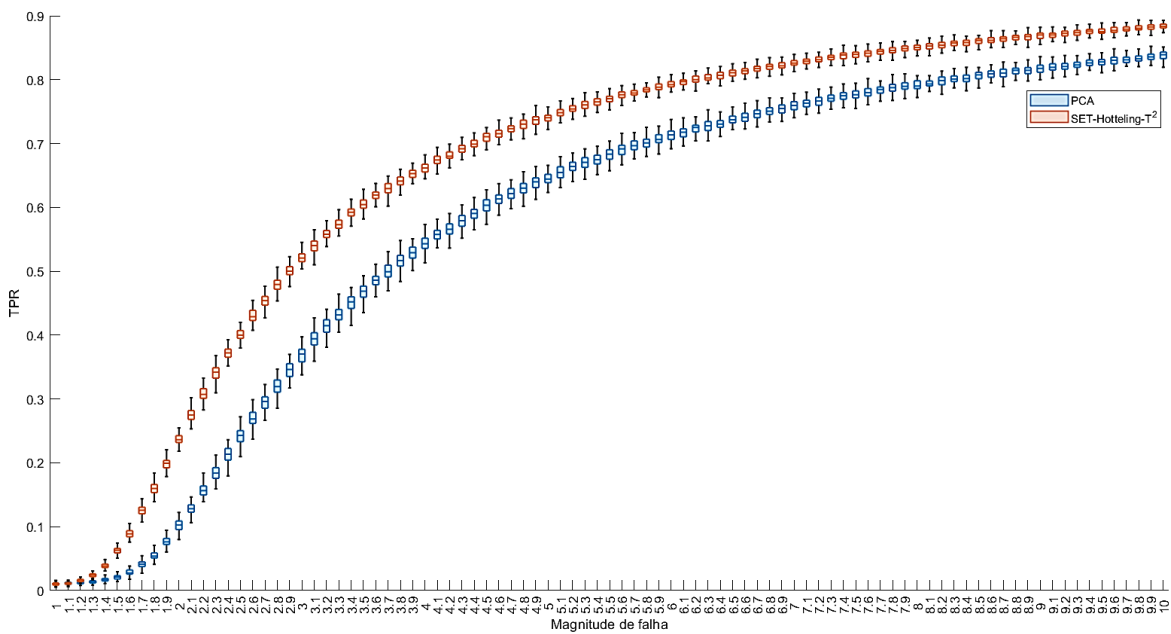


Figura A. 9- True Positive Rate (TPR) das metodologias benchmark a diferentes magnitudes de falha na correlação entre as variáveis 8 e 10. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controle. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

## Anexo III- Figuras da comparação das metodologias de monitorização propostas para a deteção de falhas

As figuras apresentadas neste anexo, representam os resultados gráficos dos cenários comparativos estudados na Secção 5.2.

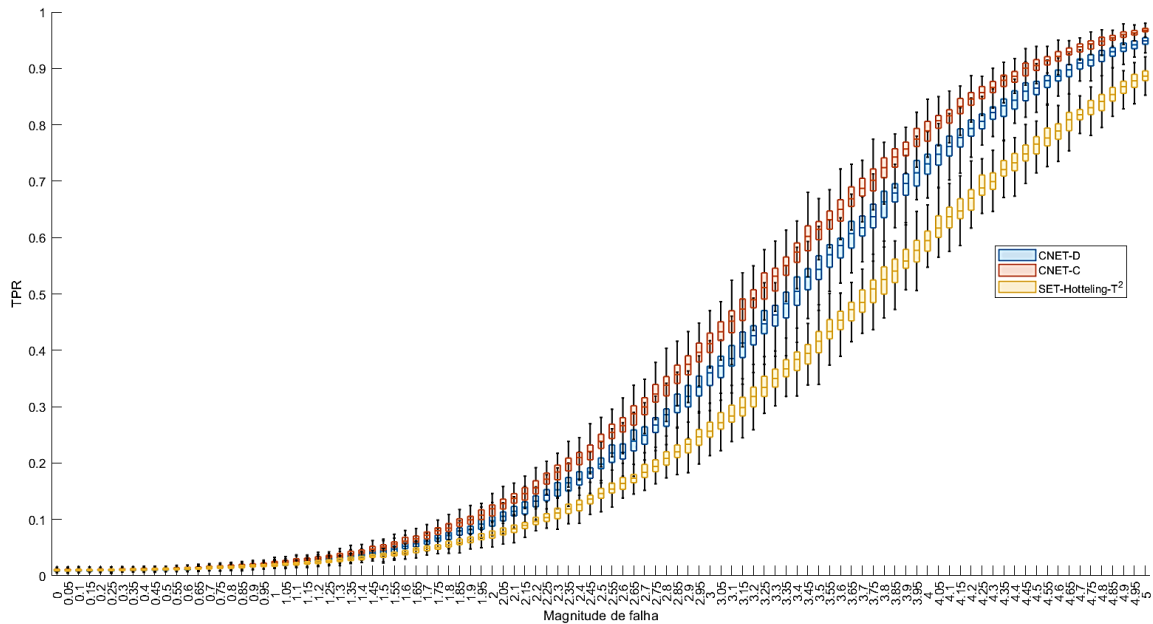


Figura A. 10- True Positive Rate (TPR) das metodologias de monitorização propostas a diferentes magnitudes de falha no processo localizadas na variável 3. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

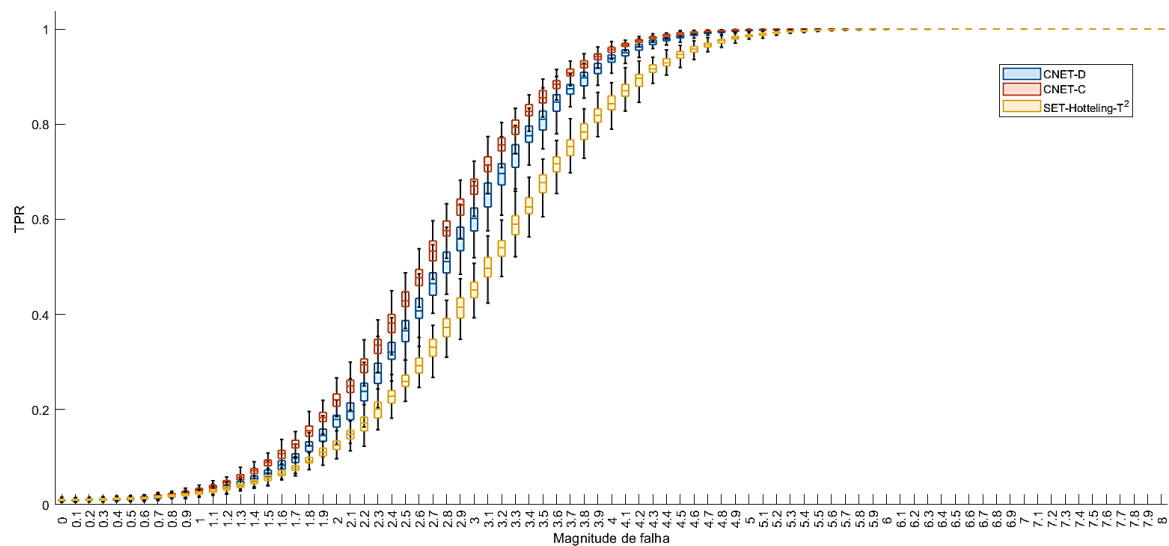


Figura A. 11- True Positive Rate (TPR) das metodologias de monitorização propostas a diferentes magnitudes de falha no processo localizadas na variável 10. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

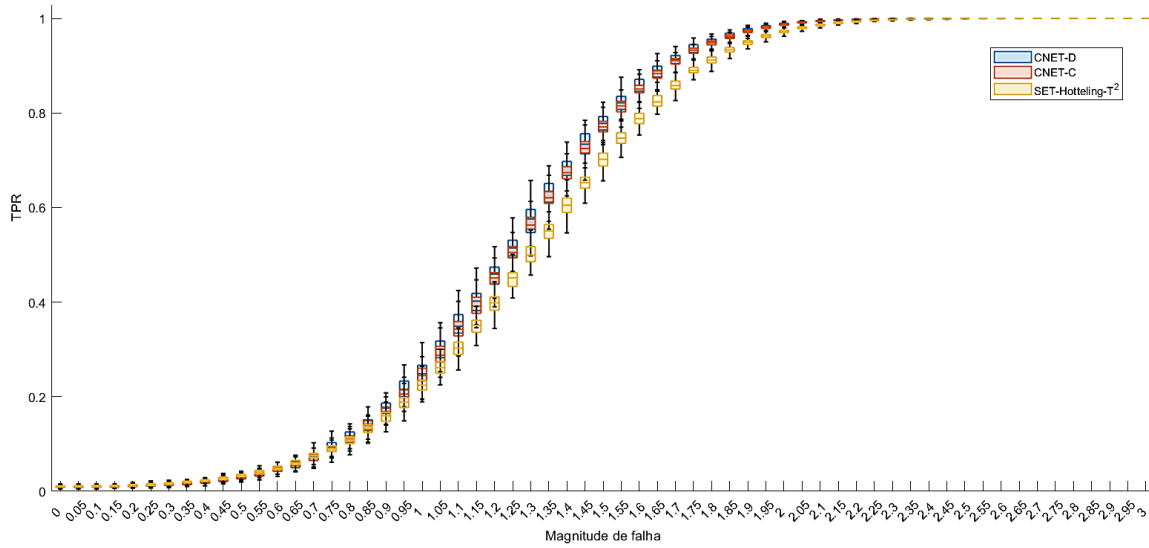


Figura A. 12- True Positive Rate (TPR) das metodologias de monitorização propostas a diferentes magnitudes de falha no processo localizada na variável 16. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

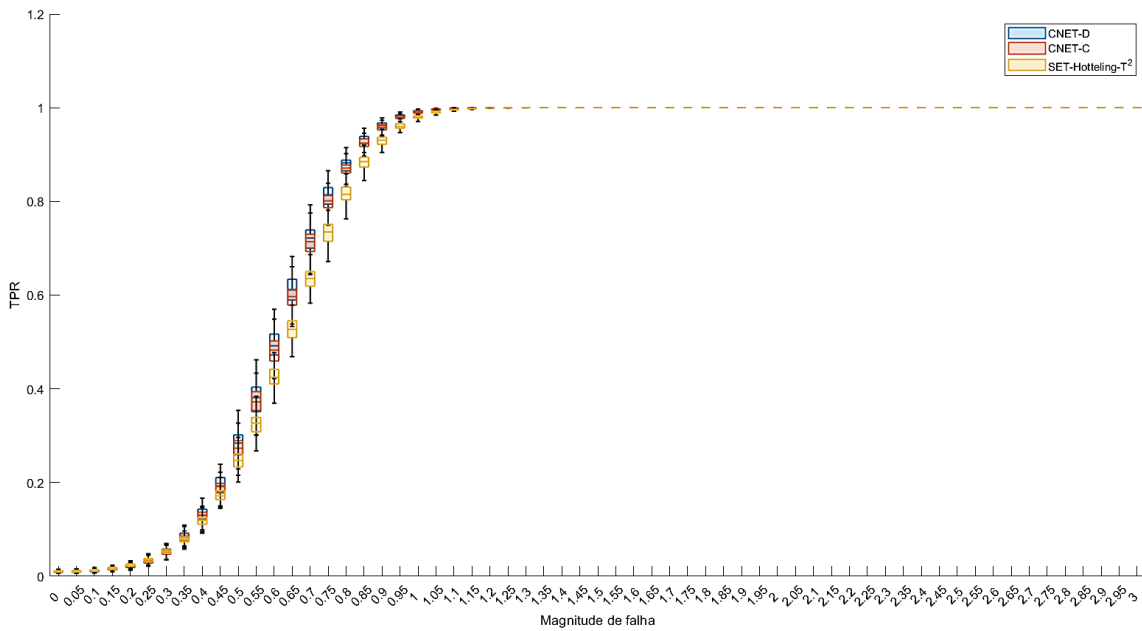


Figura A. 13- True Positive Rate (TPR) das metodologias de monitorização propostas a diferentes magnitudes de falha no sensor localizada na variável 3. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

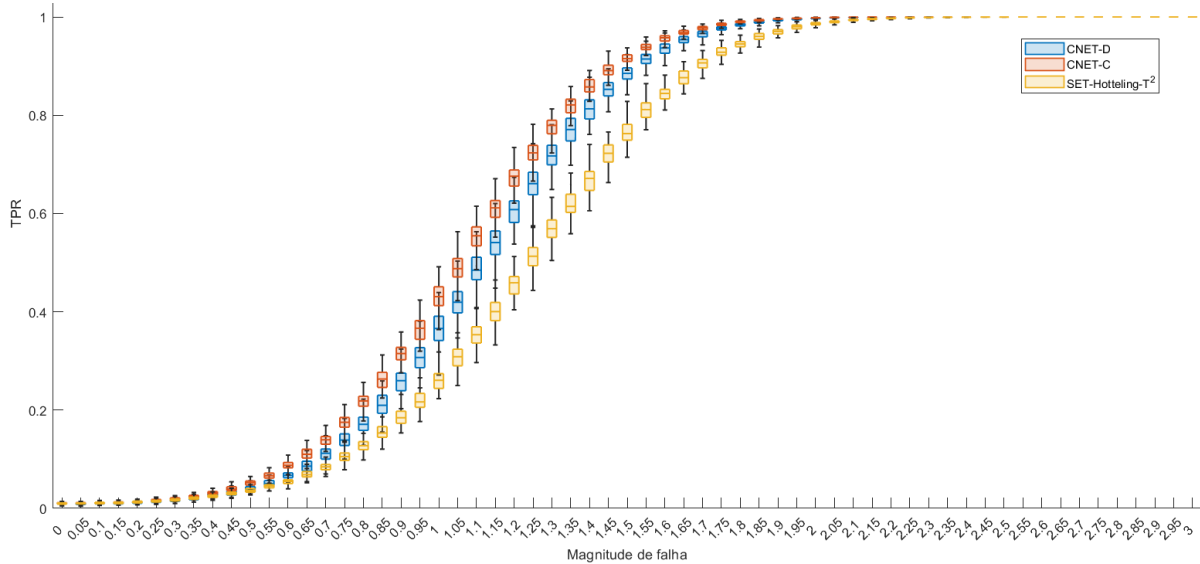


Figura A. 14- True Positive Rate (TPR) das metodologias de monitorização propostas a diferentes magnitudes de falha no sensor localizada na variável 10. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

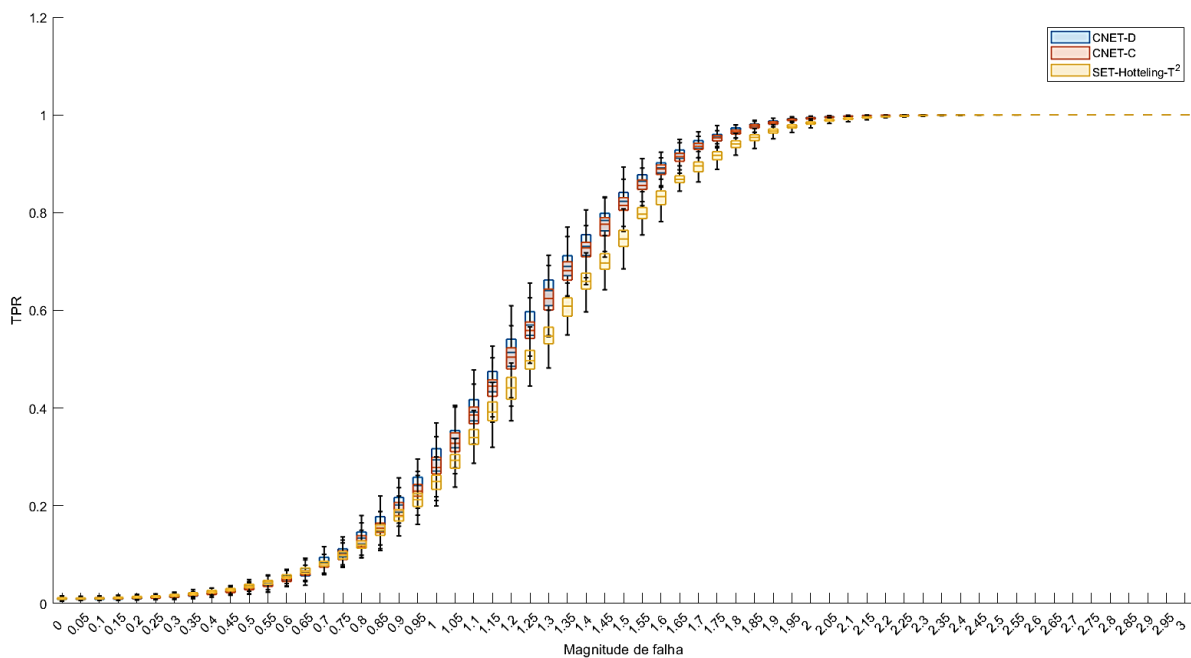


Figura A. 15- True Positive Rate (TPR) das metodologias de monitorização propostas a diferentes magnitudes de falha no sensor localizada na variável 3. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

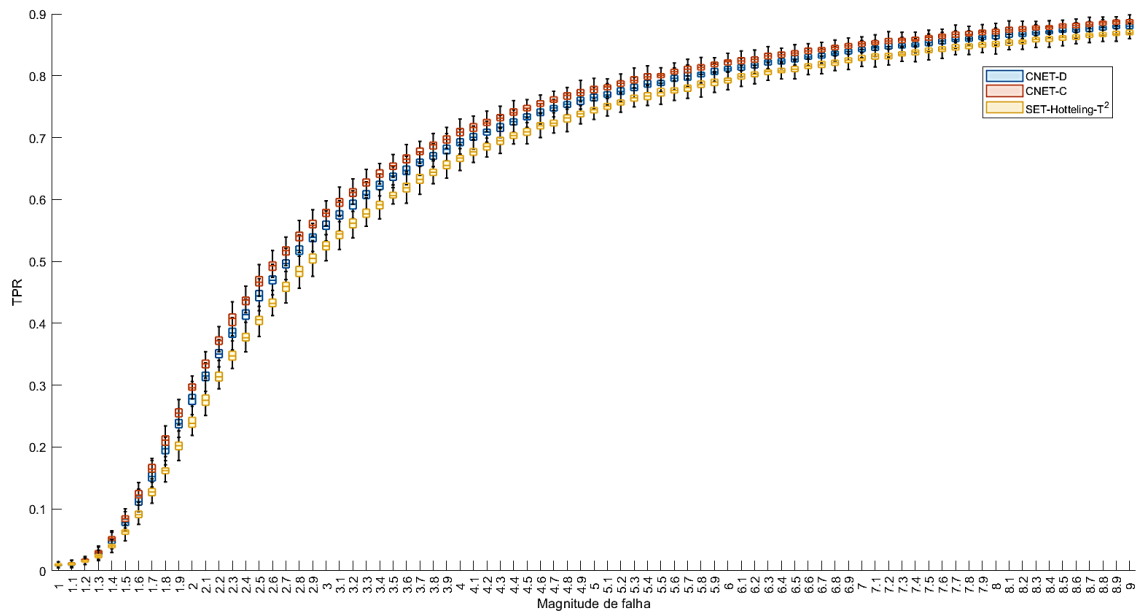


Figura A. 16- True Positive Rate (TPR) das metodologias de monitorização propostas a diferentes magnitudes de falha na correlação entre as variáveis 3 e 1. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.

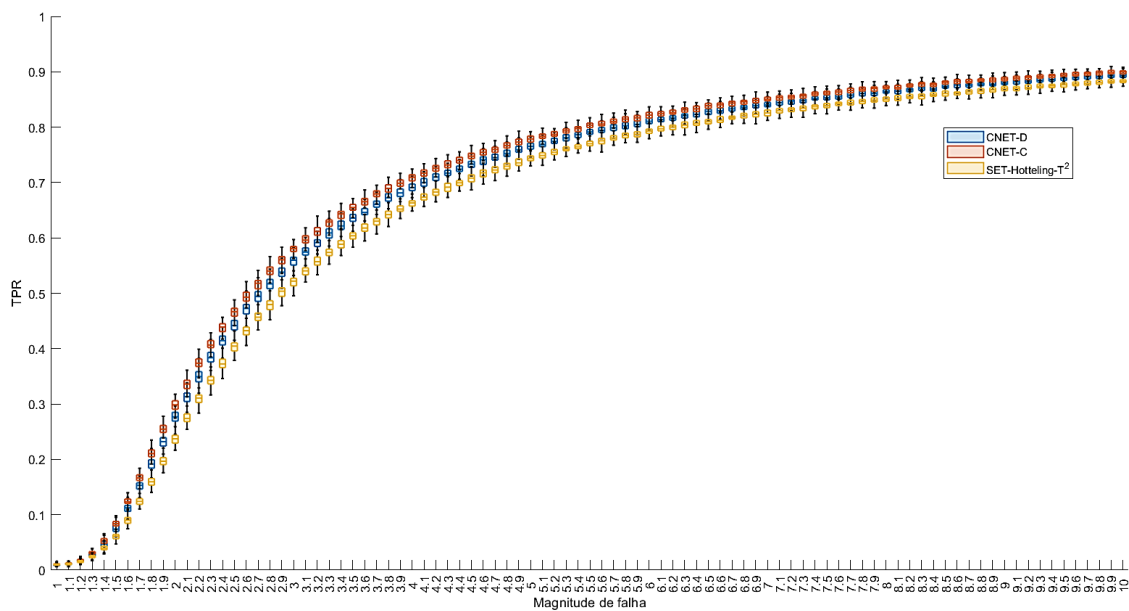


Figura A. 17- True Positive Rate (TPR) das metodologias de monitorização propostas a diferentes magnitudes de falha na correlação entre as variáveis 8 e 10. Para magnitude de falha igual a 0 o sistema está em controlo. Os bigodes representam os intervalos de confiança a 95%.