Diagnostic de fonctionnement par analyse en composantes principales : Application à une station de traitement des eaux usées

Tharrault Yvon

sous la direction de J. Ragot et G. Mourot







Contexte



La performance et la fiabilité de l'ensemble des moyens de commande et de contrôle des systèmes industriels sont liées à la qualité des systèmes de mesures.

Objectif

Valider les données des capteurs utiles au pilotage d'une station de traitement des eaux usées

Outil de modélisation

Analyse en Composantes Principales





- Principe de l'Analyse en Composantes Principales (ACP)
 - Identification du modèle ACP
 - Oétection de défauts
- L'analyse en composantes principales robuste
- Localisation de défauts multiples
- Application à une station de traitement des eaux usées

Conclusion

Principe de l'Analyse en Composantes Principales (ACP) ____

• Matrice de données $X \in \Re^{N \times n}$ collectées sur le système en fonctionnement normal

ACP

Maximisation de la variance des projections des données sur des axes particuliers T = X P

- $T \in \Re^{N \times n}$: Matrice des composantes principales
- $P \in \Re^{n \times n}$: Matrice de projection

Décomposition en valeurs/vecteurs propres de la matrice de covariance

$$\Sigma = \frac{1}{N-1} X^{T} X = P \Lambda P^{T} \quad \text{avec} \quad P P^{T} = P^{T} P = I_{n}$$
$$\Sigma = \begin{bmatrix} P_{\ell} & P_{n-\ell} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda_{\ell} & 0 \\ 0 & \Lambda_{n-\ell} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{\ell}^{T} \\ P_{n-\ell}^{T} \end{bmatrix}$$

Principe de l'Analyse en Composantes Principales (ACP) ____



Décomposition



Détermination du nombre de composantes principales ℓ

Projection des défauts dans l'espace principal et l'espace résiduel



- n = 2 variables x_1 et x_2
- $X = [x_1 \ x_2]$
- l = 1
- défaut 1 : observation verte
- défaut 2 : observation rouge



Détection de défauts _____

Indicateurs généralement utilisés

SPE ou T_H^2 pour détecter un défaut dans l'espace résiduel

$$SPE(k) = x(k)^{T} P_{n-\ell} P_{n-\ell}^{T} x(k)$$

$$\mathbf{T}_{H}^{2}(k) = \mathbf{x}(k)^{\mathrm{T}} \mathbf{P}_{n-\ell} \Lambda_{n-\ell}^{-1} \mathbf{P}_{n-\ell}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}(k)$$

 T^2 pour détecter un défaut dans l'espace principal

$$T^{2}(k) = x(k)^{\mathrm{T}} P_{\ell} \Lambda_{\ell}^{-1} P_{\ell}^{\mathrm{T}} x(k)$$

Afin d'assurer la détection de l'ensemble des défauts

Utilisation d'un indicateur combiné

$$\eta(k) = \frac{T^2(k)}{\chi_l^2} + \frac{SPE(k)}{\delta^2}$$

avec χ_l^2 seuil de détection de l'indice T^2 et δ^2 le seuil de détection de l'indice *SPE*. Utilisation de la distance de Mahalanobis

$$D(k) = T^{2}(k) + T_{H}^{2}(k)$$
$$= x(k)^{\mathrm{T}} P \Lambda^{-1} P^{\mathrm{T}} x(k)$$



Détection de défauts : exemple _____



•
$$x(k) = \begin{bmatrix} x_1(k) & x_2(k) & x_3(k) & x_4(k) & x_5(k) & x_6(k) & x_7(k) & x_8(k) & x_9(k) \end{bmatrix}^T$$

• La matrice X est composée de N = 128 observations du vecteur x(k)

• $\ell = 5$ composantes principales

Détection de défauts : robustesse au nombre de composantes principales ℓ

Choix $\ell = 5$



Détection de défauts : robustesse au nombre de composantes principales ℓ



Détection de défauts : robustesse au nombre de composantes principales ℓ



Faiblesse de l'ACP



Sensibilité aux valeurs aberrantes

Valeurs aberrantes : Observations (obtenues durant des périodes de démarrage, d'arrêt, de fonctionnement dégradé, erreurs de mesure, ...) qui ne correspondent pas au fonctionnement normal ou courant du système et qui sont généralement minoritaires.



Modèle ACP robuste aux valeurs aberrantes

MM-estimator Robust Principal Component Analysis (MMRPCA)

MMRPCA





MMRPCA



Résidu r(k)

 $\begin{aligned} & \text{avec } x(k) \text{ une observation} \\ & \mu \text{ la moyenne du jeu de données X} \\ r(k) = ||P_{n-\ell}^{T}(x(k) - \mu)||^2 & P_{n-\ell} \text{ est la matrice des vecteurs propres de la matrice de variance-covariance associés aux } n - \ell \text{ plus petites valeurs propres} \end{aligned}$

Fonction objectif ρ

Le MM-estimateur minimise le critère suivant sous contrainte $P_{n-\ell}^T P_{n-\ell} = I_{n-\ell}$:

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\rho\left(\frac{r(k)}{\hat{\sigma}}\right)$$

avec ρ la fonction de objectif et $\hat{\sigma}$ la dispersion robuste des résidus *r* obtenue en minimisant le critère suivant :

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\rho\left(\frac{r(k)}{\hat{\sigma}_{i}}\right) = \delta$$



MMRPCA



Algorithme de Maronna (2005)

- Initialisation
- Oalcul des résidus r
 - Salcul de la dispertion robuste des résidus $\hat{\sigma}$
 - Solution $\mathbf{w}(k) = \dot{p}\left(\frac{r(k)}{\hat{\sigma}}\right)$

Solution Calculer
$$\mu$$
 à partir de $\mu = \frac{\sum_{k=1}^{N} \mathbf{w}(k) \mathbf{x}(k)}{\sum_{k=1}^{N} \mathbf{w}(k)}$

- Scalculer S à partir de S = $\sum_{k=1}^{N} \mathbf{w}(k) (x(k) \mu) (x(k) \mu)^{T}$
- Q Calculer P_{n-ℓ} la matrice des vecteurs propres de la matrice de variance-covariance robuste S correspondant aux n − ℓ plus petites valeurs propres.

MMRPCA_

Initialisation avec une matrice de variance-covariance robuste

Matrice de variance-covariance robuste (Caussinus et al., 2003)

$$V = \frac{\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N} w(i,j) (x(i) - x(j)) (x(i) - x(j))^{T}}{\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N} w(i,j)}$$

où les poids w(i,j) sont définis par :

$$w(i,j) = \exp\left(-\frac{\beta}{2}(x(i)-x(j))^{T}\Sigma^{-1}(x(i)-x(j))\right)$$

avec β un paramètre de réglage

Pour $\beta = 0$, $V = 2\Sigma$



MMRPCA .



Robuste seulement aux valeurs aberrantes possédant une projection dans l'espace résiduel

MM-estimateur

Le MM-estimateur maximise le critère suivant sous contrainte $P_{\ell}^{T}P_{\ell} = I_{\ell}$:

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\rho\left(\frac{||P_{\ell}^{T}(x(k)-\mu)||^{2}}{\hat{\sigma}}\right)$$

avec $\hat{\sigma}$ la dispersion robuste des résidus *r* et ρ est la fonction de pondération.

Algorithme de la méthode MMRPCA _

Algorithme

- Calcul de la matrice de variance-covariance robuste V
- L'algorithme des MM-estimateurs pour les défauts avec une projection dans l'espace résiduel
 - Résultats : Poids associés à chaque observation w_r
 - Résultats : S_r
- L'algorithme des MM-estimateurs pour les défauts avec une projection dans l'espace principal
 - $w = min(w_r, w_p)$
- Détection et élimination des valeurs aberrantes



L'analyse en composantes principales robuste aux valeurs aberrantes



Minimum covariance determinant

L'estimateur MCD cherche *h* observations qui minimisent le déterminant de la matrice de variance-covariance des données.

où h est le nombre d'observations considérées comme "saines"

- Nécessite la connaissance du nombre de valeurs aberrantes (N - h) inconnues a priori

 \Rightarrow Pour assurer le rejet des valeurs aberrantes choix de h = 0.5N



CIRAN

Exemple de comparaison des méthodes MMRPCA et MCD _

•
$$\mathbf{x}(k) = \begin{bmatrix} x_1(k) & x_2(k) & x_3(k) & x_4(k) & x_5(k) & x_6(k) & x_7(k) & x_8(k) & x_9(k) \end{bmatrix}^{\top}$$

$$\begin{split} x_{1}(k) &= v(k)^{2} + \sin(0.1k), \quad v(k) \sim \mathcal{N}(0,1) \\ x_{2}(k) &= 2\sin(k/6)\cos(k/4)\exp(-k/N) \\ x_{3}(k) &= \log(x_{2}(k)^{2}) \\ x_{4}(k) &= x_{1}(k) + x_{2}(k) \\ x_{5}(k) &= x_{1}(k) - x_{2}(k) \\ x_{6}(k) &= 2x_{1}(k) + x_{2}(k) \\ x_{7}(k) &= x_{1}(k) + x_{3}(k) \\ x_{8}(k) \sim \mathcal{N}(0,1) \\ x_{8}(k) \sim \mathcal{N}(0,1) \end{split}$$

• La matrice X est composée de N = 128 observations du vecteur x(k)

Exemple de comparaison des méthodes MMRPCA et MCD _



le défaut n'est pas détecté
le défaut est détecté uniquement avec la méthode MMRPCA
le défaut est détecté uniquement avec la méthode MCD
le défaut est détecté avec la méthode MCD et avec la méthode MMRPCA

Durée de	Amplitude du défaut sur x ₁																
l'intervalle I1	0.3	0.6	0.9	1.2	1.5	1.8	2.1	2.4	2.7	3	4	5	6	7	8	9	10
5%																	
15%																	
25%				ĺ													
35%																	
45%																	

Durée de		Amplitude du défaut sur x8										
l'intervalle I_2	6	9	12	15	18	21	30	40	50	60	70	80
5%												
15%												
25%												
35%												
45%												

Méthode MMRPCA domaine d'application plus large que la méthode MCD

Localisation de défauts multiples

Localisation de défauts multiples

Explosion combinatoire du nombre de situations possibles de défauts

$$N_{\text{situations}} = \sum_{r=1}^{n} \mathbb{C}_{n}^{r}$$

avec \mathbb{C}_n^r représente le nombre de combinaisons possibles de choisir *r* variables parmi *n*.

Méthode

Principe de reconstruction des variables (minimisation du défaut)

Localisation de défauts multiples

La reconstruction \hat{x}_R

Minimiser l'influence des défauts sur l'indicateur de détection

$$\hat{x}_R(k) = x(k) - \Xi_R f_R$$

avec f_R : amplitude (inconnue) du défaut

 Ξ_R : matrice des directions de reconstruction

Par exemple, pour reconstruire 2 variables (R = 2,4) parmi 5 variables

$$\Xi_R = \left[\begin{array}{ccccc} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right]^T$$

L'estimation de l'amplitude du défaut \hat{f}_R :

$$\hat{f}_R = \arg\min_{f_R} \{D_R(k)\}$$

avec $D_R(k) = \hat{x}_R(k)^T P \Lambda^{-1} P^T \hat{x}_R(k)$



Localisation de défauts multiples

Le vecteur de reconstruction $\hat{x}_R(k)$ du vecteur x(k) est donné par :

$$\hat{x}_{R}(k) = \left(I - \Xi_{R}(\Xi_{R}^{T}P\Lambda^{-1}P^{T}\Xi_{R})^{-1}\Xi_{R}^{T}P\Lambda^{-1}P^{T}\right) x(k)$$

Condition de reconstruction structurelle :

Existence de $(\Xi_R^T P \Lambda^{-1} P^T \Xi_R)^{-1} \Rightarrow$ la matrice $\Xi_R^T P \Lambda^{-1} P^T \Xi_R$ de plein rang

Pour qu'un défaut soit reconstructible, il faut qu'il soit au minimum projeté dans l'espace principal ($r \le \ell$) ou dans l'espace résiduel ($r \le n - \ell$). Cette condition implique que le nombre de variables reconstruites r doit respecter l'inégalité :

$$r \leq \max(n - \ell, \ell)$$

avec r : Nombre de variables reconstruites

 ℓ : Nombre de composantes principales

n : Nombre de variables



Détection et localisation de défauts multiples

Condition de reconstruction : $r \leq \max(n - \ell, \ell)$

Le nombre maximum de reconstructions est le suivant :

$$\sum_{r=1}^{\max(n-\ell,\ell)} \mathbb{C}_{r}$$

avec \mathbb{C}_n^r représente le nombre de combinaisons possibles de choisir *r* variables parmi *n*.

Localisation de défauts

Pour les observations en défaut, les ensembles de variables défaillantes sont déterminés comme suit :

$$\hat{R} = rg_{R\in\mathfrak{I}} D_{R}(k) < \gamma_{lpha}^{2}$$

où γ_{α}^2 le seuil de détection de l'indicateur D_R

et \Im est l'ensemble des combinaisons des directions de reconstructions possibles.



Détection et localisation de défauts multiples

Réduction du nombre de reconstruction

Détermination des directions de projections colinéaires.

Un indicateur K est alors construit :

$$K(R_1, R_2) = \max\{(d(R_1, R_2), d(R_1, R_2)\}$$

où $d(R_1, R_2)$ distance entre deux sous espaces dans l'espace principal et $\tilde{d}(R_1, R_2)$ distance entre deux sous espaces dans l'espace résiduel :

$$\begin{aligned} d(R_1, R_2) &= || \hat{\Xi}_{R_1} (\hat{\Xi}_{R_1}^T \hat{\Xi}_{R_1})^{-1} \hat{\Xi}_{R_1}^T - \hat{\Xi}_{R_2} (\hat{\Xi}_{R_2}^T \hat{\Xi}_{R_2})^{-1} \hat{\Xi}_{R_2}^T ||_2 \\ \tilde{d}(R_1, R_2) &= || \tilde{\Xi}_{R_1} (\tilde{\Xi}_{R_1}^T \tilde{\Xi}_{R_1})^{-1} \hat{\Xi}_{R_1}^T - \tilde{\Xi}_{R_2} (\tilde{\Xi}_{R_2}^T \tilde{\Xi}_{R_2})^{-1} \tilde{\Xi}_{R_2}^T ||_2 \end{aligned}$$

avec $\hat{\Xi}_{R_1} = \Lambda_{\ell}^{-1/2} P_{\ell}^T \Xi_{R_1}$, $\tilde{\Xi}_{R_1} = \Lambda_{n-\ell}^{-1/2} P_{n-\ell}^T \Xi_{R_1}$ et R_1 et R_2 correspondent aux ensembles des indices des variables reconstruites.

Par exemple, pour reconstruire 2 variables ($R_1 = 2, 4$) parmi 5 variables

$$\Xi_{R_1} = \left[\begin{array}{rrrr} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right]^T$$

Tharrault (CRAN-INPL)

Soutenance de thèse



Localisation des défauts

Algorithme pour la détermination des défauts détectables et localisables

CIRAN

r = 1

Calculer pour l'ensemble des directions possibles l'indicateur K(R₁, R₂). Si K(R₁, R₂) est nul :

 seul l'ensemble des variables potentiellement en défaut peut être déterminé, c'est-à-dire les variables avec les indices R₁, R₂ ou R₁ et R₂. Il est donc nécessaire de considérer une seule direction, par exemple R₁.

Si $K(R_1, R_2)$ est proche de zéro :

• l'amplitude du défaut doit être importante pour assurer la localisation du défaut

Sinon le défaut est localisable

- r = r + 1
- Solution Tant que $r \le \max(\ell, n \ell)$ aller à l'étape 2

Exemple numérique : cas multiple défauts _____

On considère :

•
$$\mathbf{x}(k) = \begin{bmatrix} x_1(k) & x_2(k) & x_3(k) & x_4(k) & x_5(k) & x_6(k) & x_7(k) & x_8(k) & x_9(k) \end{bmatrix}^{\top}$$

$x_1(k) = v(k)^2 + \sin(0.1 k),$	v(k)	$\sim \mathcal{N}(0,1)$			
$x_2(k) = 2\sin(k/6)\cos(k/4)e$	exp(-	k/N)			
$x_3(k) = \log(x_2(k)^2)$					
$x_4(k) = x_1(k) + x_2(k)$					
$x_5(k) = x_1(k) - x_2(k)$					
$x_6(k) = 2x_1(k) + x_2(k)$		l ₁ {10 : 24}	l ₂ {35 : 49}	l ₃ {60 : 74}	l ₄ {85 : 99}
$x_7(k) = x_1(k) + x_3(k)$		((*****)	(*****)	(*****)
	X1	X	×	0	0
$\mathbf{x}_{0}(k) \sim \mathcal{N}(0, 1)$	x ₁ x ₂	× 0	× ×	0 0	0 0
$x_8(k) \sim \mathcal{N}(0,1)$	x ₁ x ₂ x ₃	× 0 ×	× × 0	0 0 0	0 0 0
$x_8(k) \sim \mathcal{N}(0,1)$ $x_9(k) \sim \mathcal{N}(0,1)$	X ₁ X ₂ X ₃ X ₄	× 0 × 0	× × 0 0	0 0 0 ×	0 0 0 0

• La matrice X est composée de N = 128 observations du vecteur x(k)



Exemple numérique : reconstruction utile _____



$\max(\ell, n-\ell) = \max(5, 4) = 5$

Le nombre maximum de reconstructions est donc de 381.

r = 1

Κ			R ₁									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9		
	1	0	1	0.99	1.00	0.92	0.92	1.00	1.00	0.99		
	2		0	1.00	0.96	0.73	0.97	1.00	1.00	1.00		
	3			0	1.00	0.96	1.00	0.40	1.00	1.00		
R_2	4				0	0.97	0.73	1.00	0.99	1.00		
	5					0	0.97	0.99	1.00	1.00		
	6						0	1.00	0.99	1.00		
	7							0	1.00	0.99		
	8								0	1.00		

r=2

Pour $R_1 = \{1,3\}$ et $R_2 = \{1,7\}$, $K(R_1, R_2) = 0$ \Rightarrow Les projections des directions 1,3 et 1,7 sont colinéaires

Le nombre de reconstructions nécessaires est de 150 au lieu de 381

Tharrault (CRAN-INPL)

Soutenance de thèse



Exemple numérique : reconstruction utile _____



	<i>I</i> 1	I_2	l ₃	<i>I</i> 4			
D _{1,3}	0	×	×	×			
D _{1,2}	×	0	×	\times			
D _{4,8}	×	×	0	0			
D_8	×	\times	×	0			
Localisations des défauts							

sur les différents intervalles

- dans l'intervalle l₁, x₁ et x₃ ou/et x₇ sont en défaut
- dans l'intervalle l₂, x₁ et x₂ sont en défaut
- dans l'intervalle I3, x4 et x8 sont en défaut
- dans l'intervalle I₄, x₈ est en défaut

Description de la station de traitement des eaux usées





Application à la station de traitement des eaux usées

Objectifs

Valider les données des capteurs utiles au pilotage d'une station de traitement des eaux usées

Construction de la matrice de données X

Présence de phénomènes dynamiques → Détermination des décalages temporels Présence de phénomènes non-linéaires → Détermination des transformations non linéaires à prendre en compte

Comprendre les différents phénomènes de la partie biologique Déterminer des transformations non-linéaires

Utilisation du modèle ASM1 Simplification du modèle ASM1 au cas de la station

Technique de modélisation afin de déterminer les décalages temporels et transformations non-linéaires à prendre en compte



Application à la station de traitement des eaux usées







Décalages temporels à prendre en compte pour la partie hydraulique

Partie Hydraulique										
Variable	Décalages temporels	Transformation	Décalages temporels							
		non linéaire								
H3	q^0, q^{-1}									
H5	q^0									
H6	q^0									
Q8	q^0 ,	tanh((Q8-550)./150)	<i>q</i> ⁻¹							
H14	q^0, q^{-1}									
C7	q^0									

Matrice de données

$$x(k) = \begin{bmatrix} H3(k) & H5(k) & H6(k) & Q8(k) & H14(k) \\ tanh((Q8(k-1)-550)./150) & H3(k-1) & H14(k-1) & C7(k) \end{bmatrix}^{T}$$

Construction du modèle

4 composantes principales robustes déterminées



Analyse des directions de reconstruction utiles dans l'espace global

Le nombre maximum de reconstructions est donc de 381 ($max(n-\ell,\ell) = 5$)

ĸ		R ₁									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	
	1	0	0.85	0.97	1.00	1.00	1.00	0.97	0.99	1.00	
	2		0	0.91	1.00	0.97	1.00	0.95	1.00	1.00	
	3			0	1.00	0.99	1.00	0.99	1.00	1.00	
R_2	4				0	1.00	0.94	0.99	0.98	0.71	
	5					0	0.90	0.89	0.90	0.98	
	6						0	1.00	1.00	0.91	
	7							0	0.80	0.99	
	8								0	0.97	

TABLE: indicateur K pour r = 1

Le nombre de reconstructions nécessaires est de 202 au lieu de 381



Localisation des défauts

Indice des défauts	Direction de reconstruction qui minimise l'influence des défauts
16, 17	D ₁
3, 10, 11, 14, 15, 19, 20, 21	D ₃
7, 12	D _{1,6}
6, 8, 13, 18, 22	D _{3,9}
1, 2, 5	D _{1,3,4}
4	D _{3,7,9}
9	D _{1,2,3,7}

Analyse

Lorsque l'indice D₃ est calculé, les défauts 3, 10, 11, 14, 15, 19, 20 et 21 sont proches de zéro

• sur cette période, les valeurs du capteur H6 sont aberrantes.

Interprétation

Raison : Changement des relations entre les différentes mesures lorsque la valeur de *H*6 est inférieure à 1*m*85



Détermination de défauts capteurs, ou d'un mode de fonctionnement très particulier

Tharrault (CRAN-INPL)

Conclusion & perspectives



Conclusion

- ACP robuste aux valeurs aberrantes sur l'ensemble des variables
- Utilisation de la distance de Mahalanobis pour détecter des défauts sur l'ensemble des variables
- Utilisation du principe de reconstruction afin de localiser les variables d
 éfaillantes
- Détermination des défauts multiples isolables
 -> évite l'explosion combinatoire des scénarios de défauts
- Application à la partie hydraulique d'une station d'épuration

Perspectives

- Valider la méthode robuste MMRPCA sur un exemple de grandes dimensions
- Application à la partie biologique d'une station d'épuration
- Extension au changement de modes de fonctionnements