



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



PROGRAMA DE ESTADÍSTICA E
INVESTIGACIÓN OPERATIVA
APLICADAS Y CALIDAD

Tesis doctoral

**Estudio de la integración de procedimientos
multivariantes para la regulación óptima y
monitorización estadística de procesos.**

Autora: Susana Barceló Cerdá

Directores:

Dr. D. Alberto José Ferrer Riquelme

Dr. D. Javier Sanchis Sáez

Febrero 2016

A Chimo, Ana, Beatriz.....

A mis padres y a Rosa.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mis directores Alberto y Javier su dedicación en estos años y sus consejos. Sin duda son grandes profesionales de los que he aprendido mucho.

A todos los compañeros del departamento que de alguna manera me han ayudado, especialmente a Rafa que me guio en los primeros pasos de este trabajo, a Carmina que me ayudo al principio de la investigación y a Santiago con el que he compartido mucho tiempo de trabajo, momentos difíciles y también divertidos y a Amparo.

También quiero agradecer a todos mis familiares y amigos su apoyo incondicional especialmente a Rosa. A ellos dedico este trabajo.

RESUMEN

Existe un interés relativamente reciente por parte de los investigadores del área de la estadística industrial y de la de ingeniería de sistemas y automática, y por parte de los ingenieros de calidad y por los de procesos, en la integración del Control Estadístico de Procesos (*Statistical Process Control*, SPC) y del Control Automático de Procesos (*Automatic Process Control*, APC). Estas dos filosofías de control se han desarrollado hasta recientemente de forma independiente. El objetivo general tanto del SPC como del APC, es optimizar el funcionamiento de los procesos, reduciendo la variabilidad de las características resultantes en torno a los valores deseados. El fundamento de ambas disciplinas, parte de la idea de que todo proceso presenta variaciones en su funcionamiento. Estas variaciones pueden afectar en mayor o en menor medida a la calidad final del producto y a la productividad del proceso. Las dos metodologías conceptualizan los procesos y su control de diferentes formas, se originaron en diferentes sectores industriales y han evolucionado de forma independiente, hasta que se dedujo el interés de integrarlas en el control de los procesos industriales, ya que se advirtió que podían ser complementarias, antes que contrapuestas, como se entendían hasta entonces y se exploró la posibilidad de aunar las ventajas de ambas, integrándolas en un nuevo paradigma de control.

Los ingenieros de calidad más familiarizados con las técnicas SPC, han sido reacios a utilizar técnicas de regulación por el temor al sobreajuste de los procesos y los ingenieros de procesos más habituados a aplicar el control *feedback*, en procesos que presentan autocorrelaciones y que no son estacionarios, y que de hecho se volverían inestables de no ser regulados, han sido reticentes a utilizar las técnicas tradicionales SPC, ya que en este tipo de procesos estas técnicas no han resultado eficientes. Como consecuencia de ello, no existen muchos estudios sistemáticos de cómo aplicar la regulación automática en estrategias de mejora continua de la calidad. Hasta ahora, los trabajos realizados en el desarrollo de la integración de APC y SPC se han venido haciendo en el ámbito de procesos con una variable de entrada y una de salida (*single-input-single-output*, SISO), siendo muy escasos los trabajos realizados en los procesos con varias variables de entrada y varias de salida (*multiple-input-multiple-output*, MIMO). Esta tesis se centra en el estudio de la integración de procedimientos multivariantes para la regulación óptima y la monitorización estadística de procesos,

con el propósito de contribuir a la mejora de la calidad y de la productividad de los procesos. La metodología propuesta se ha aplicado con fines ilustrativos a un proceso MIMO de producción en continuo de Polietileno de Alta Densidad (PEAD).

En primer lugar, se considera el problema de la identificación y posterior estimación de un modelo del proceso. Las variables controladas en este modelo han sido la principal característica de calidad del producto y una variable de productividad, esto último es innovador puesto que las variables de productividad se miden, pero no se consideran variables controladas. Para ello, se emplean dos metodologías de series temporales multivariantes, la obtención de la función de transferencia múltiple en forma parsimoniosa de Box-Jenkins y la obtención de la función de respuesta a impulsos mediante los modelos de regresión por mínimos cuadrados parciales (*Time Series-Partial Least Squares*, TS-PLS). Estas dos metodologías se han comparado teniendo en cuenta distintos aspectos como son la simplicidad del proceso de modelado en las etapas de identificación, estimación y validación del modelo, así como la utilidad de las herramientas gráficas que proporcionan ambas metodologías, la bondad de ajuste obtenida, y la simplicidad de la estructura matemática del modelo.

A partir del modelo de función de transferencia múltiple estimado, elegido como el más adecuado para este tipo de procesos, se desarrolla el controlador DMC (*Dynamic Matrix Control*), un algoritmo de control automático que pertenece a la familia del Control Predictivo basado en Modelos (*Model Predictive Control*, MPC). Se presenta un método de sintonizado óptimo del controlador que permita maximizar su rendimiento, aplicando diseño de experimentos 2^{k-p} .

Finalmente, se ha desarrollado un sistema de control integrado MESPC (*Multivariate Engineering Statistical Process Control*), cuya componente de monitorización se ha implementado aplicando métodos de control estadístico multivariante de procesos basados en técnicas de proyección en estructuras latentes (*Latent structures based-Multivariate Statistical Process Control*). Este módulo de monitorización se ha diseñado para que actúe como supervisor tanto del proceso como del controlador DMC. Para ello, se ha estimado un modelo NOC-PCA (*Normal Operation Conditions Principal Component Analysis*), en el que han intervenido tanto variables relacionadas con el proceso como con la calidad, todas derivadas de la componente del control automático. A partir de este modelo se han derivado los gráficos T_A^2 y DModX. Se ha

evaluado el funcionamiento del sistema MESPC, sometiéndolo a fallos potenciales o causas especiales de variabilidad simulados, analizando la respuesta del sistema MESPC propuesto.

En resumen, se propone un sistema de control integrado, automático y estadístico, que se puede aplicar a procesos industriales MIMO, que se ha estudiado y se ha evaluado aplicándolo a un proceso continuo de obtención de PEAD. Se demuestra cómo con este nuevo paradigma de control, se puede mantener mejor la estabilidad del proceso y mejorar continuamente la calidad y la productividad. Por lo tanto, se pueden conseguir beneficios económicos significativos derivados de la consistencia de la calidad de los productos y del incremento de la productividad de los procesos. Esta investigación contribuye directamente a los programas de mejora de la calidad de la industria de procesos en continuo y al campo de la estadística aplicada.

RESUM

Existeix un interès relativament recent per part dels investigadors de l'àrea de l'estadística industrial i de la d'enginyeria de sistemes i automàtica, i per part dels enginyers de qualitat i pels de processos, en la integració del Control Estadístic de Processos (*Statistical Process Control*, SPC) i del Control Automàtic de Processos (*Automatic Process Control*, APC). Aquestes dues filosofies de control s'han desenvolupat fins a recentment de forma independent. L'objectiu general tant del SPC com del APC, és optimitzar el funcionament dels processos, reduint la variabilitat de les característiques resultants entorn dels valors desitjats. El fonament d'ambdues disciplines, part de la idea que tot procés presenta variacions en el seu funcionament. Aquestes variacions poden afectar en major o en menor mesura a la qualitat final del producte i a la productivitat del procés. Les dues metodologies conceptualitzen els processos i el seu control de diferents formes, es van originar en diferents sectors industrials i han evolucionat de forma independent, fins que es va deduir l'interès d'integrar-les en el control dels processos industrials, ja que es va advertir que podien ser complementàries, abans que contraposades, com s'entenien fins llavors i es va explorar la possibilitat de conjuminar els avantatges d'ambdues, integrant-les en un nou paradigma de control.

Els enginyers de qualitat més familiaritzats amb les tècniques SPC, han sigut poc inclinats a utilitzar tècniques de regulació pel temor al sobre-ajust dels processos i els enginyers de processos més habituats a aplicar el control *feedback*, en processos que presenten autocorrelaciones i que no són estacionaris, que de fet es tornarien inestables de no ser regulats, han sigut reticents a utilitzar les tècniques tradicionals SPC, ja que en aquest tipus de processos aquestes tècniques no han resultat eficients. Com a conseqüència d'açò, no existeixen molts estudis sistemàtics de com aplicar la regulació automàtica en estratègies de millora contínua de la qualitat. Fins ara, els treballs realitzats en el desenvolupament de la integració de APC i SPC s'han vingut fent en l'àmbit de processos amb una variable d'entrada i una d'eixida (*single-input-single-output*, SISO), sent molt escassos els treballs realitzats en els processos amb diverses variables d'entrada i diverses d'eixida (*multiple-input-multiple-output*, MIMO). Aquesta tesi se centra en l'estudi de la integració de procediments multivariants per a la regulació òptima i el monitoratge estadístic de processos amb el propòsit de contribuir a la millora

de la qualitat i de la productivitat dels processos. La metodologia proposada s'ha aplicat amb finalitats il·lustratives a un procés MIMO de producció en continu de Polietilè d'Alta Densitat (PEAD).

En primer lloc, es considera el problema de la identificació i posterior estimació d'un model del procés. Les variables controlades en aquest model han sigut la principal característica de qualitat del producte i una variable de productivitat, açò últim és innovador ja que les variables de productivitat es mesuren, però no es consideren variables controlades. Per a açò, s'utilitzen dues metodologies de sèries temporals multivariants, l'obtenció de la funció de transferència múltiple en forma parsimònica de Box-Jenkins i l'obtenció de la funció de resposta a impulsos mitjançant els models de regressió per mínims quadrats parcials (*Times Series-Partial Least Squares*, TS-PLS). Aquestes dues metodologies s'han comparat tenint en compte diferents aspectes com són la simplicitat del procés de modelatge en les etapes d'identificació, estimació i validació del model, així com la utilitat de les eines gràfiques que proporcionen ambdues metodologies, la bondat d'ajust obtinguda, i la simplicitat de l'estructura matemàtica del model.

A partir del model de funció de transferència múltiple estimat, triat com el més adequat per a aquest tipus de processos, es desenvolupa el controlador DMC (*Dynamic Matrix Control*), un algorisme de control automàtic que pertany a la família del Control Predictiu basat en Models (*Model Predictive Control*, MPC). Es presenta un mètode de sintonitzat òptim del controlador que permeti maximitzar el seu rendiment, aplicant disseny d'experiments 2^{k-p} .

Finalment, s'ha desenvolupat un sistema de control integrat MESPC (*Multivariate Engineering Statistical Process Control*). Per a implementar la component de monitoratge d'aquest sistema integrat s'han usat mètodes de control estadístic multivariants de processos basats en tècniques de projecció en estructures latents (*Latent structures based-Multivariate Statistical Process Control*). Aquest mòdul de monitoratge s'ha dissenyat perquè actue com a supervisor tant del procés com del controlador DMC. Per a açò, s'ha estimat un model NOC-PCA (*Normal Operation Conditions Principal Component Analysis*), en el qual han intervingut variables relacionades tant amb el procés, com amb la qualitat, totes derivades de la component del control automàtic. A partir d'aquest model s'han derivat els gràfics T_A^2 i DModX.

S'ha avaluat el funcionament del sistema MESPC, sotmetent-lo a fallades potencials o causes especials de variabilitat simulades, analitzant la resposta del sistema MESPC proposat.

En resum, es proposa un sistema de control integrat, automàtic i estadístic, que es pot aplicar a processos industrials MIMO, que s'ha estudiat i s'ha avaluat aplicant-lo a un procés continu d'obtenció de PEAD. Es demostra com amb aquest nou paradigma de control, es pot mantenir millor l'estabilitat del procés i millorar contínuament la qualitat i la productivitat. Per tant, es poden aconseguir beneficis econòmics significatius derivats de la consistència de la qualitat dels productes i de l'increment de la productivitat dels processos. Aquesta recerca contribueix directament als programes de millora de la qualitat de la indústria de processos en continu i al camp de l'estadística aplicada.

ABSTRACT

There is a relatively recent interest by researchers in the field of industrial statistics and systems engineering and automatic, and quality engineers and process engineers, in the integration of Statistical Process Control (SPC) and the Automatic Process Control (APC). These two control philosophies have evolved independently until recently. The overall objective of both APC and SPC is to optimize the performance of processes, reducing the variability of the resulting characteristics around the desired values. The fundamentals of the two disciplines arise from the idea that the whole process has operation variations. These variations may affect, to a greater or lesser extent, the final product quality and the process productivity. The two methodologies conceptualize processes and control in different ways, they originated in different industrial sectors and have evolved independently, until the interest to integrate them in the control of industrial processes was deduced. It was warned that they could be complementary rather than conflicting methodologies as they were understood until then. The possibility of combining the advantages of both, integrating them into a new control paradigm was explored.

The quality engineers, more familiar with SPC techniques, have been reluctant to use feedback control for fear of process over-adjustment and process engineers who are more accustomed to dealing with processes that have autocorrelations and lack of stationarity, which in fact they would become unstable if they were not regulated, have been reluctant to use traditional SPC techniques, since in such processes, these techniques have not been proven to be very effective. As a result, there are few systematic studies of how to implement automatic control strategies for continuous quality improvement. So far, the work on the development of the integration of APC and SPC has been made in the field of processes with an input and an output (single-input-single-output, SISO), there still are very few studies made in processes with several input and output variables (multiple-input-multiple-output, MIMO). This thesis focuses on the study of the integration of multivariate methods for optimal control and statistical process monitoring in order to contribute to improving the quality and productivity of processes. For illustrative purposes, the proposed methodology has been applied to a MIMO continuous process for obtaining high-density polyethylene (HDPE).

First, the problem of identifying and estimating a process model is considered. Controlled variables in this model are the main feature of product quality and a productivity variable. The latter is innovative since the productivity variables are measured, but they are not considered as controlled variables. For this, two methods of multivariate time series are used, the Box-Jenkins multiple transfer function in the parsimonious way and the impulse response function obtained by Partial Least Squares regression (Time Series-Partial Least Squares, TS-PLS). These two methods were compared taking into account different aspects such as the simplicity of the modeling process in the stages of identification, estimation and model validation, as well as the utility of graphical tools that provide both methodologies, the goodness of fit obtained, and the simplicity of the mathematical structure of the model.

The DMC (Dynamic Matrix Control) controller, an automatic control algorithm belonging to the family of MPC (Model Predictive Control) controllers, is derived from the estimated Box-Jenkins multiple transfer function that has been selected as the most suitable for this kind of processes. An optimal tuning method to maximize the controller performance, applying experimental design 2^{k-p} , is presented.

Finally, an integrated control system MESPC (Multivariate Engineering Statistical Process Control) whose monitoring component has been implemented applying latent structures based multivariate statistical process control methods (Lsb-MSPC), has been developed. The monitoring module is designed to act as both process and DMC controller supervisor. To do this, we estimate a NOC-PCA model (Normal Operation Conditions Principal Component Analysis), which has as variables both process-related and quality-related variables, all derived from the automatic control system. From this model, T_A^2 and DModX graphics have been derived. We assessed the performance of MESPC system, subjecting it to simulated potential failures or special causes of variability, by analyzing the response of MESPC proposed system.

In summary, an integrated control system, automatic and statistical, which can be applied to MIMO industrial processes, is proposed. It has been discussed and evaluated through application to a continuous process producing HDPE. It is showed, how this new paradigm of control can best maintain process stability and continuously improve quality and productivity. Therefore, it is possible achieving significant economic benefits, from the consistency of product quality and the increasing productivity. This

research contributes directly to both the quality improvement programs of the continuous processes industry and to the field of applied statistics.

ÍNDICE GENERAL

CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES Y OBJETO DE LA TESIS	1
1.1 MOTIVACIÓN	1
1.2 OBJETIVOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRIBUCIONES	3
1.3 DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA TESIS	6
1.4 CONTRIBUCIONES DE LA TESIS: PUBLICACIONES.....	6
CAPÍTULO 2. INTEGRACIÓN DEL CONTROL AUTOMÁTICO DE PROCESOS (ACP) Y DEL CONTROL ESTADÍSTICO DE PROCESOS (SPC): REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA	9
2.1 LOS PROCESOS NECESITAN SER CONTROLADOS.....	10
2.2 CONTROL ESTADÍSTICO DE PROCESOS	11
2.2.1 SPC fuera de línea (<i>off-line</i>).....	13
2.2.2 SPC en línea (<i>on-line</i>)	14
2.2.3 Fases de la monitorización <i>on-line</i> del proceso	18
2.2.4 SPC tradicional.....	19
2.2.5 Gráficos de control univariantes	20
2.2.6 Medidas de rendimiento de un gráfico de control.....	22
2.2.7 Control estadístico multivariable de procesos.....	24
2.2.8 MSPC basado en las variables originales: gráficos de control.....	26
2.2.9 MSPC basado en variables latentes.....	33
2.2.10 Gráficos de control basados en variables latentes	42
2.3 ¿QUÉ OCURRE CUANDO SE MONITORIZAN PROCESOS AUTOCORRELACIONADOS?	55
2.4 ¿POR QUÉ ES NECESARIA LA REGULACIÓN DE PROCESOS?	64
2.4.1 ¿Cuándo se necesita ajustar un proceso?.....	67
2.5 METODOLOGÍA DEL CONTROL PREDICTIVO BASADO EN MODELOS	69
2.5.1 Principios básicos	69
2.5.2 Elementos de los controladores predictivos	72
2.5.3 Evolución del control predictivo	79
2.5.4 Control predictivo en la industria.....	88
2.5.5 Algoritmo de control predictivo: DMC.....	93
2.5.6 El modelo de predicción.....	95

2.5.7	Diseño del controlador DMC sin restricciones: Función de coste	98
2.5.8	Control con Matriz Dinámica Multivariable	101
2.6	DMC: PARALELISMOS CON MÉTODOS ESTADÍSTICOS APLICADOS	105
2.6.1	Introducción	105
2.6.2	Formulación del problema de control	105
2.6.3	Dualidad entre la estimación de parámetros de un modelo lineal y de un modelo de proceso.....	106
2.6.4	El modelo del proceso. Estimación de los parámetros.....	107
2.6.5	Dualidad entre la estimación de parámetros en un modelo lineal y el cálculo de la ley de control en el algoritmo DMC	108
2.6.6	Escalado de las variables de salida y la regresión por mínimos cuadrados ponderados	109
2.6.7	Penalización de las acciones de control	111
2.7	INTEGRACIÓN DEL CONTROL AUTOMÁTICO DE PROCESOS (APC) CON EL CONTROL ESTADÍSTICO DE PROCESOS (SPC)	121
2.7.1	Concepto del APC-SPC	121
2.7.2	Modelos de Función de Transferencia y Algoritmos de Control	130
2.7.3	Sistemas SISO	141
2.7.4	Sistemas MISO.....	143
2.7.5	Sistemas MIMO	145
2.8	RESUMEN	146
	CAPÍTULO 3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO INDUSTRIAL	151
3.1	INTRODUCCIÓN	151
3.2	EL PROCESO PHILIPS	153
3.3	DESCRIPCIÓN DE LAS VARIABLES DEL PROCESO	156
	CAPÍTULO 4. ESTIMACIÓN DEL MODELO DEL PROCESO	159
4.1	INTRODUCCIÓN	159
4.2	MODELO DE FUNCIÓN DE TRANSFERENCIA MÚLTIPLE O VARMAX 163	
4.3	ANÁLISIS PREVIO A LA IDENTIFICACIÓN	168
4.3.1	Método de detección de valores anómalos y ajuste conjunto de sus efectos y de los parámetros del modelo.....	168
4.3.2	Detección de anómalos cuando los parámetros del modelo ARIMA son conocidos.....	174
4.3.3	Detección de anómalos a partir de los residuos de un modelo ajustado .	179

4.3.4	Incorporación al ajuste del modelo ARIMA de los efectos de los anómalos detectados usando modelos de intervención	180
4.3.5	Un procedimiento iterativo de detección de anómalos y estimación conjunta de los parámetros del modelo y de los efectos de los anómalos	181
4.3.6	Transformaciones para estabilizar la varianza	184
4.3.7	Determinación de la transformación para estabilizar la media	187
4.3.8	Identificación de los modelos arima univariantes	187
4.4	ANÁLISIS PRELIMINAR DE LAS SERIES TEMPORALES DEL PROCESO PEAD	192
4.4.1	Análisis de las variables de entrada o manipuladas	193
4.4.2	Análisis de las variables de salida o controladas.....	206
4.5	ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA DE CORRELACIÓN CRUZADA	214
4.5.1	Preblanqueo y prefiltrado de las series.....	214
4.6	IDENTIFICACIÓN DEL MODELO	218
4.7	ESTIMACIÓN DE LAS FUNCIONES DE CORRELACIÓN CRUZADAS PARA LA DETERMINACIÓN DE LA ESTRUCTURA DEL MODELO	221
4.8	ESTIMACIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL MODELO POR EL MÉTODO DE LA MÁXIMA VEROSIMILITUD	227
4.8.1	Estimación ecuación a ecuación.....	229
4.8.2	Estimación multivariante del modelo.....	229
4.9	VALIDACIÓN DEL MODELO	234
4.10	METODOLOGÍA PLS PARA IDENTIFICACIÓN DEL MODELO	243
4.10.1	Introducción	243
4.10.2	Algoritmo NIPALS	245
4.10.3	Series Temporales PLS	246
4.10.4	Pretratamiento de los datos	252
4.10.5	Estimación del modelo	253
4.10.6	Validación del modelo. Análisis de residuos.	257
4.11	COMPARACIÓN DE LOS MODELOS ESTIMADOS	261
4.12	RESUMEN	262
CAPÍTULO 5. SINTONIZADO DEL CONTROLADOR PREDICTIVO MULTIVARIANTE MEDIANTE DISEÑO DE EXPERIMENTOS		265
5.1	INTRODUCCIÓN	265
5.2	METODOLOGÍA ANOVA (MLR)	272

5.3 ESTIMACIÓN DE EFECTOS SIGNIFICATIVOS: VARIABLES CONTROLADAS	280
5.4 ESTIMACIÓN DE EFECTOS SIGNIFICATIVOS: VARIABLES MANIPULADAS.....	298
5.5 CONCLUSIONES ANOVA (MLR)	318
5.6 METODOLOGÍA PLS PARA LA IDENTIFICACIÓN DEL MODELO	323
5.6.1 Introducción	323
5.6.2 Algoritmo NIPALS: Cálculo de las componentes PLS	324
5.6.3 ¿Cuántas componentes extraer? Validación Cruzada. Bondad de ajuste y de Predicción	328
5.7 ESTIMACIÓN DE EFECTOS SIGNIFICATIVOS.....	332
5.8 Conclusiones PLS	346
5.9 COMPARACIÓN METODOLOGÍAS ANOVA (MLR) y PLS.....	348
5.10 RESUMEN	349
CAPÍTULO 6. IMPLEMENTACIÓN DE PROCEDIMIENTOS MSPC BASADOS EN ESTRUCTURAS LATENTES. SISTEMA MESPC	353
6.1 INTRODUCCIÓN	353
6.2 ESTIMACIÓN MODELO NOC- PCA	353
6.3 MONITORIZACIÓN DEL PROCESO: GRÁFICOS T_A^2 Y DMODX.....	358
6.4 ESQUEMA DE MONITORIZACIÓN EN LÍNEA PROPUESTO.....	359
6.5 EVALUACIÓN DEL SISTEMA MESPC DE CONTROL	361
6.5.1 Error de medida del MI	362
6.5.2 Error de medida en el APRE.....	369
6.5.3 Fallo en el lazo de control de <i>TEMPERATURA</i>	373
6.5.4 Deriva en el <i>MI</i>	377
6.5.5 Cambio parcial en los parámetros del modelo del <i>APRE</i>	380
6.6 RESUMEN.....	384
CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES y LÍNEAS FUTURAS.....	387
7.1 CONCLUSIONES y CONTRIBUCIONES	387
7.2 LÍNEAS FUTURAS	395
BIBLIOGRAFÍA CITADA	397
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA	435

CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES Y OBJETO DE LA TESIS

1.1 MOTIVACIÓN

La competencia, cada vez más fuerte en el ámbito industrial debido a un mercado altamente globalizado y a las exigencias cada vez mayores de los clientes, obligan a las industrias que pretenden ser competitivas y prosperar, a mejorar continuamente la calidad y la productividad. Este objetivo sólo puede lograrse si las empresas aprovechan al máximo todos los recursos disponibles. Un recurso que sin duda es esencial lo constituye la información potencial generada por los procesos, información sobre la que deberían basarse las decisiones para mejorarlos.

Esta investigación está motivada por las características de los entornos modernos de fabricación, en los que el ciclo de vida de los productos disminuye rápidamente y los procesos de fabricación se tienen que adaptar a satisfacer las necesidades de los clientes.

Según Harrington (1991) un proceso industrial es cualquier actividad o grupos de actividades de producción que emplean unos *inputs*, les agrega valor a éstos y suministra un producto a un cliente interno o externo. Aunque comúnmente se acepta que para producir productos de calidad es crítico mantener la estabilidad del proceso de fabricación y hacer que sea robusto frente a perturbaciones que pueden hacer que el proceso deje de producir en su nominal, un ingeniero de calidad formado de manera tradicional no considera la regulación del proceso como una herramienta de mejora continua de la calidad. Por otro lado, los ingenieros de procesos que emplean las técnicas de APC o también llamado *Engineering Process Control* (EPC) se concentran en la aplicación de ajustes *on-line* de acuerdo a las perturbaciones presentes en el proceso. La barrera entre estos dos grupos de técnicos está causada principalmente por cómo interpretan cada uno de ellos el proceso, en vez de tener en cuenta que sus respectivos objetivos son esencialmente los mismos, o al menos complementarios.

El objetivo de esta tesis es estudiar y desarrollar procedimientos multivariantes integrados de control automático de procesos (*Automatic Process Control*, APC) y control estadístico de procesos (*Statistical Process Control*, SPC) y diseñar estrategias para mantener los procesos en estado estable y al nivel deseable de rendimiento.

En esta tesis se considera un proceso de fabricación como un proceso estocástico, en el cual debido a la variación inherente al proceso y a la variación en las medidas, algunos de sus parámetros están actuando pero no se pueden observar directamente. Los métodos tradicionales de SPC asumen que mientras el proceso permanezca estable y bajo control estadístico, la variabilidad observable es incontrolable, por lo tanto ningún ajuste del proceso será capaz de reducir la varianza del proceso. Incluso cuando el proceso se considera que está fuera de control no hay estrategias de ajuste explícitamente especificadas en la literatura. Sin embargo, en los entornos modernos de fabricación, algunas de las hipótesis empleadas en el SPC ya no son válidas. En primer lugar, los nuevos entornos de fabricación automatizados y las nuevas tecnologías de sensores y captura de información permiten obtener datos de procesos con mayor frecuencia que sus dinámicas, provocando que las características registradas, estén autocorrelacionadas en el tiempo. Por lo tanto, empleando un sistema de control automático que implique un esquema de ajustes debidamente diseñado, la varianza del proceso puesta de manifiesto en los datos de calidad se podría reducir. En segundo lugar, los procesos continuos como es el proceso de fabricación de Polietileno de Alta Densidad con el que se ilustra la metodología propuesta en esta tesis, están sometidos a perturbaciones que hacen a menudo que el proceso además de autocorrelacionado no sea estacionario. Por otro lado, si se quieren satisfacer las demandas especificadas por los clientes, a menudo se tienen que adoptar procesos de fabricación a corto plazo adaptados a estas exigencias, lo que implica una mayor frecuencia de puestas en marcha o de periodos transitorios, lo que aumenta las posibilidades de que se presenten causas de variación que a su vez pueden deteriorar la calidad del producto si el proceso no se ajusta en el tiempo.

Las tecnologías para implementar el control automático del proceso en línea, están disponibles y son económicamente asequibles. Es razonable pues que los ingenieros de calidad sean conscientes de su importancia en vez de ignorarlas.

Una de las dificultades que se han encontrado al trabajar en este tema, en el que intervienen dos áreas de conocimiento diferentes ha sido la capacidad de comunicación entre los investigadores de ambas áreas. A pesar de que se persigue el mismo objetivo principal, es decir reducir la variabilidad de las variables, sobre todo de calidad y mantener la estabilidad del proceso, la conceptualización y la visión del control es diferente e incluso se emplean nomenclaturas diferentes para trabajar temas análogos.

Por ello, se han revisado las técnicas utilizadas en el DMC y los métodos estadísticos aplicados que están altamente consolidados y se ha establecido una dualidad entre ellos, para demostrar que en la estructura del control predictivo basado en modelos ocupan un lugar destacado los métodos estadísticos aplicados.

Se ha hecho muy difícil conciliar ambas nomenclaturas. Por ser una tesis de un programa de estadística ha prevalecido la del área de la estadística industrial. Aunque se han empleado ambas.

1.2 OBJETIVOS DE INVESTIGACIÓN Y CONTRIBUCIONES

El objetivo global de esta investigación es desarrollar una metodología para monitorización y control, integrando procedimientos multivariantes de regulación automática y monitorización estadística. Más específicamente, se abordarán los siguientes objetivos de investigación:

- 1. Identificación del modelo del proceso.** Se va a obtener el modelo del proceso mediante dos enfoques, empleando la metodología Box-Jenkins para la obtención de la *función de transferencia múltiple* en forma parsimoniosa, y la metodología *Time Series- Partial Least Squares* (TS-PLS) para obtener la *función de respuesta a impulsos* no parsimoniosa al objeto de comparar las características de ambas metodologías. (Ver Capítulo 4).
- 2. Aplicación de procedimientos multivariantes para sintonización de controladores.** Se empleará el control predictivo basado en modelos (*Model Predictive Control*, MPC). A partir del modelo del proceso identificado y estimado, se derivará un controlador multivariante DMC (*Dynamic Model Control*). Se realizará un diseño de experimentos, para sintonizar el controlador de forma que se optimice su rendimiento. Dicho diseño se analizará mediante dos métodos estadísticos, por Regresión Lineal Múltiple (MLR) y por Mínimos Cuadrados Parciales (PLS) que se compararán. (Ver Capítulo 5).
- 3. Estudio de la dualidad entre el DMC y las técnicas estadísticas aplicadas.** Se establecerá una dualidad entre las técnicas empleadas en la metodología DMC y las técnicas estadísticas aplicadas ampliamente consolidadas, que podrían explicar el

éxito obtenido por las aplicaciones industriales del DMC, donde otras propuestas han fallado. (Ver Capítulo 2).

4. Desarrollo de procedimientos integrados de control y monitorización de procesos. El éxito de un esquema integrado de control de calidad de un proceso regulado recae en aplicar de forma apropiada las técnicas de control automático de procesos y control estadístico de procesos. El controlador propuesto se integrará en procedimientos MSPC (*Multivariate Statistical Process Control*) de proyección en estructuras latentes de manera que se pueda tanto detectar como corregir anomalías. En primer lugar se ha estimado un modelo NOC-PCA (*Normal Operating Conditions-Principal Component Analysis*) del proceso en condiciones operativas normales con A componentes, que constituirá la base del módulo de monitorización. A partir de este modelo se han construido los gráficos de control multivariantes basados en la T_A^2 de Hotelling y en la distancia al modelo DModX que se utilizan para monitorizar el comportamiento futuro del proceso. Se simularán diferentes salidas de control potenciales, mientras el proceso se monitorice. Cuando los gráficos de control pongan de manifiesto las salidas de control, se obtendrán los gráficos de contribución para diagnosticar las posibles causas. Se estudiarán el funcionamiento, las propiedades y el rendimiento de este sistema integrado MESPC (*Multivariate Engineering Statistical Process Control*). (Ver Capítulo 6).

Esta investigación se centra en el desarrollo de procedimientos multivariantes integrados de regulación y monitorización de procesos, con la finalidad de mejorar la calidad de los productos obtenidos. Se analizará la metodología propuesta en un proceso químico de polimerización de obtención de polietileno de alta densidad (PEAD) empleado para la fabricación de productos de plástico de gran consumo. En general estos procesos presentan cierta inercia frente a la acción de parámetros ambientales, el cambio de materias primas o al ajuste de sus condiciones operativas, por lo que un aumento de la frecuencia de muestreo puede llegar a generar la aparición de autocorrelación entre observaciones cercanas en el tiempo, y a menudo no son estacionarios. A medida que aumenta la automatización de los procesos este problema se agrava. En el caso SISO (*single-input-single-output*) existen numerosos trabajos de integración de regulación y monitorización estadística. Sin embargo, no se han encontrado en la literatura estadística propuestas de procedimientos integrados

multivariantes que apliquen de forma integrada el MPC, dentro de un sistema de MSPC como se propone en esta tesis. El control MSPC actuaría como supervisor de todo el proceso, incluido el funcionamiento del propio controlador DMC perteneciente a la familia del MPC que se va a desarrollar. En la literatura del área de control automático de procesos, se han encontrado algunos trabajos en donde en procesos multivariantes regulados se ha aplicado MSPC para la interpretación de las perturbaciones y variaciones en procesos MIMO (*multiple-input-multiple-output*), pero normalmente estos trabajos están enfocados en algún aspecto importante del control, como son la inferencia de variables de calidad difícilmente medibles directamente y que intervienen en el control automático de procesos por lotes. Por ejemplo ver Zhang *et al.* (2004). O también qué modelo PCA emplear cuando cambia la dinámica del proceso en el tiempo o cuando resulta conveniente dividir el proceso en bloques, ver AlGhazzawi y Lennox (2008). La investigación en este campo es claramente insuficiente y necesaria ya que con la capacidad actual de toma de datos en los procesos se genera mucha información que tiene carácter multivariante y que se debe de aprovechar para conocer y mejorar los procesos. El hecho de que haya interacciones entre las variables y colinealidades hacen que no sean del todo aplicables los procedimientos ampliamente estudiados en el ámbito SISO y que se presenten numerosos problemas que tienen que ser investigados. La toma frecuente de datos hace también que cada vez más aparezca autocorrelación en todo tipo de procesos, lo que se convierte en un desafío en el campo de las series temporales multivariantes, aspecto que se tratará en esta tesis. Por lo tanto, esta tesis presenta un nuevo enfoque al control de calidad en procesos químicos y en esta nueva aproximación se integra las series temporales multivariantes, el control predictivo basado en modelos, y concretamente el control con matriz dinámica, y el control estadístico de procesos multivariantes basado en la proyección en estructuras latentes.

En resumen, se propone una nueva metodología integrada de control de procesos, en la que distintos modelos matemáticos se aplican conjuntamente de una manera sistemática. Se demuestra que con dicha propuesta se mantiene mejor la estabilidad de todo el sistema, de manera de que se pueden incrementar los beneficios económicos debido a la consistencia alcanzada en la calidad de los productos fabricados. Esta investigación contribuye directamente a los programas de mejora de la calidad y de la productividad de diversos sectores industriales y al campo de la estadística aplicada.

1.3 DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA TESIS

En el próximo Capítulo, se realiza una revisión de los métodos de integración de control automático y estadístico de procesos en la literatura de ambos campos científicos, pero especialmente en el de la estadística industrial, ya que esta tesis se presenta en el programa de ESTADÍSTICA E INVESTIGACIÓN OPERATIVA APLICADAS y CALIDAD. Tras lo cual, la tesis está organizada como sigue:

En el Capítulo 3 se describe el proceso de producción de polietileno de alta densidad en el que se aplicará la metodología de control propuesta.

Después en el Capítulo 4 se abordará la identificación y posterior estimación de un modelo del proceso. Se emplearán dos metodologías de series temporales multivariantes para modelizar el proceso, cuyas propiedades se compararán. Las metodologías referidas son las *funciones de transferencia múltiples* de Box y Jenkins y los modelos de series temporales multivariantes TS-PLS.

En el Capítulo 5 se desarrollará el controlador DMC a partir del modelo de proceso obtenido (metodología MPC). Se presentará un método de sintonizado del controlador que permita optimizar su rendimiento, en base a un diseño de experimentos.

En el Capítulo 6 se propondrá el sistema MESPC propiamente dicho, desarrollando procedimientos MSPC basados en estructuras latentes. Se pondrá a prueba el sistema, mediante la simulación de diferentes anomalías que se pueden presentar y son esperables en el proceso para demostrar el funcionamiento y ventajas del sistema de control propuesto.

Finalmente en el Capítulo 7 se resumen las conclusiones, contribuciones de esta tesis y se discuten las líneas futuras de investigación.

1.4 CONTRIBUCIONES DE LA TESIS: PUBLICACIONES

1. Susana Barceló, Santiago Vidal-Puig and Alberto Ferrer, 2011.

Comparison of Multivariate Statistical Methods for Dynamic Systems Modeling.

Quality and Reliability Engineering International, 27, 107-124.

ISSN 1099-1638 DOI: 10.1002/qre.1102.

2. Barceló, S.; Sanchis, J.; Ferrer, A., 2006.

MLR vs PLS regression in analysing a multiresponse experimental design: A case study of tuning a multivariate predictive controller.

1er Encuentro de Jóvenes Investigadores en Quimiometría. Tarragona, España.

Universitat Rovira Virgili.

3. S. Barceló; J. Sanchis; A. Ferrer, 2006.

Sistema integrado de control estadístico y regulación automática de un proceso continuo de polimerización. Análisis de robustez del controlador predictivo DMC.

XXIX Congreso Nacional de Estadística e Investigación Operativa (SEIO). Tenerife, España. Universidad de la Laguna.

ISBN/ISSN: 84-689-8553-8.

4. Barceló, S.; Sanchis, J.; Ferrer, A., 2005.

MLR vs PLS Regression in analyzing a multiresponse experimental design: a case study of tuning a multivariate predictive controller.

4th International Symposium on PLS and Related Methods (PLS '05).

Editorial: SPAD Barcelona, España.

5. Barceló, S.; Sanchis, J.; Ferrer, A., 2005.

An integrated multivariate engineering statistical process control system in a continuous polymerisation process.

5th Annual Conference of the European Network for Business and Industrial Statistics (ENBIS). Newcastle, Reino Unido.

ISBN/ISSN: 0-7017-0184-6.

6. Barceló, S.; Ferrer, A. J.; Sanchis, J., 2004.

Application of DMC Controllers to a Continuous Polymerization Process.

4th Annual European Network for Business and Industrial Statistics Conference (ENBIS 2004). Copenhagen, Dinamarca.

7. Barceló, S.; Vidal, S.; Ferrer, A., 2003.

A Case Study of Comparison of Multivariate Statistical Methods for Processing Modelling.

3rd Annual European Network for Business and Industrial Statistics Conference (ENBIS 2003).

Barcelona, España.

CAPÍTULO 2. INTREGRACIÓN DEL CONTROL AUTOMÁTICO DE PROCESOS (ACP) Y DEL CONTROL ESTADÍSTICO DE PROCESOS (SPC): REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

Dada la vasta literatura que existe sobre los temas relacionados con esta investigación, se hace necesario resumirla y presentar sus conexiones con la misma. En este Capítulo se hace un recorrido por el origen y la evolución de los métodos integrados de control automático y estadístico de procesos y sus aplicaciones, a través de las publicaciones en el área. Tras una introducción al control en general de procesos, en primer lugar, se revisa el control estadístico de procesos, los tipos de gráficos de control más usados cuando las observaciones son independientes e idénticamente distribuidas, el efecto que sobre el funcionamiento de estos gráficos tiene la presencia de autocorrelación en los datos, y los gráficos y posibles soluciones que se han diseñado para lidiar con este problema, tanto para el SPC (*Statistical Process Control*) como para MSPC (*Multivariate Statistical Process Control*). Seguidamente se introduce el APC (*Automatic Process Control*) y la justificación del por qué es necesario utilizarlo en procesos que presentan dinámica. Se revisará la metodología MPC y uno de los algoritmos de control que la componen, el DMC que se utilizará en este trabajo. Se estudiarán los paralelismos entre el algoritmo DMC y los métodos estadísticos aplicados. Se revisa el concepto de APC-SPC (*Engineering Statistical Process Control*), que trata sobre la integración de las dos metodologías. Se responde a las siguientes preguntas: ¿Cómo se originó el APC-SPC? ¿Cuáles fueron los principales problemas originales? ¿Cómo ha evolucionado el APC-SPC en general? Y quizás lo más importante, ¿qué trabajos relevantes se han llevado a cabo recientemente en la industria? El Capítulo termina con unas conclusiones que sitúan el estado del arte de la integración APC-SPC.

2.1 LOS PROCESOS NECESITAN SER CONTROLADOS

Los procesos industriales como cualquier otro sistema no permanecen estables en el tiempo. La razón principal es el cumplimiento inexorable de la segunda ley de la termodinámica, por el que la entropía (desorden) de cualquier sistema siempre tiende a aumentar. Sin embargo, dicha estabilidad es necesaria y es lo que cualquier ingeniero de proceso o de calidad desea, de aquí que los procesos necesiten ser controlados. Además, de que deben ser mejorados continuamente.

Ahora bien, ¿qué es controlar un proceso?, ¿es estar permanentemente actuando para compensar las desviaciones aleatorias que se producen respecto a los objetivos perseguidos? ó ¿es establecer un sistema de control permanente utilizando métodos estadísticos para detectar precozmente la presencia de algún hecho excepcional y actuar en consecuencia eliminándolo (si es desfavorable) o fijándolo (sí es favorable)? Para responder a estas preguntas es necesario describir y discutir acerca de dos estrategias de control de procesos distintas, que se han desarrollado de forma independiente y que se han aplicado a diferentes tipos de industrias. Estas dos estrategias aparentemente opuestas, veremos que en realidad son complementarias y es conveniente aplicarlas conjuntamente ya que comparten los mismos objetivos.

Tradicionalmente, ha habido dos grupos técnicos diferentes que se han visto implicados en el desarrollo de los métodos de control de procesos industriales. Por un lado, los ingenieros de control centrados en el control de variables de proceso, tales como las temperaturas de reacción, caudales, etc. usando técnicas de Control Automático de Procesos, que en la literatura del área de estadística industrial se le conoce como Control Ingenieril de Procesos (*Engineering Process Control*, EPC) aludiendo a que son los ingenieros de proceso los que lo utilizan. Por el otro lado, los ingenieros de calidad y estadísticos dedicados a monitorizar las características de calidad mediante gráficos de control y otras herramientas estadísticas para la mejora de los procesos industriales. La situación académica es similar, con departamentos de ingeniería industrial, ingeniería de sistemas, ingeniería química e ingeniería eléctrica interesados en el control automático y los departamentos de estadística aplicada y calidad interesados en la ingeniería de la calidad. Ambos grupos forman dos comunidades científicas, la de control automático de procesos y la de monitorización de procesos.

Las dos metodologías de control comparten un objetivo genérico común, alcanzar y mantener los valores deseados de determinadas variables de salida, reduciendo la variabilidad de las mismas al máximo. Sin embargo, abordan problemas técnicos diferentes. La principal diferencia es que en el control estadístico de procesos, las variables de salida del sistema controlado son características de calidad de los productos, mientras que en el control automático de procesos, las variables de salida no son necesariamente de calidad, pueden ser otras variables de proceso que por diferentes razones tecnológicas o de seguridad, deben ser reguladas. Otras diferencias adicionales son cómo lograr los objetivos de control y cómo tradicionalmente se han implementado las acciones de control. En el SPC el objetivo de estabilidad y mejora se pretende alcanzar a medio o largo plazo, mediante la detección, identificación y eliminación de las causas especiales o asignables de variabilidad mediante acciones correctoras, que se suelen aplicar manualmente. La palabra “monitorización” que tiene una connotación pasiva, entra a veces en conflicto con la palabra “control” cuya connotación es más activa, pero que también se ha empleado históricamente en el ámbito del SPC. En el control automático de procesos, el objetivo de minimizar la variabilidad de las variables de salida se persigue más a corto plazo mediante ajustes regulares (acciones de control) de una o más variables compensatorias del proceso usualmente implementados de forma automática.

2.2 CONTROL ESTADÍSTICO DE PROCESOS

El SPC, cuyos fundamentos fueron establecidos por Walter Shewhart en la década de los años 1930 (Shewhart 1931) descansa sobre un concepto esencial: el de la diferenciación entre causas comunes y causas especiales de variabilidad. Las primeras, que son aquellas que están permanentemente presentes en cualquier proceso como consecuencia de cómo ha sido diseñado y de cómo es operado normalmente, producen en sus resultados una pauta de variabilidad estable y predecible en el tiempo que configura lo que se denomina proceso bajo control estadístico y define la capacidad del mismo. Las causas especiales, por su parte, tienen un carácter esporádico y puntual, estando asociadas a anomalías no previstas que provocan las denominadas salidas de control del proceso o fallos, como se denominan en el área de control automático. La distinción entre ambas

causas de variabilidad depende del contexto, en el sentido de que una causa que en un momento dado no es especial en otro momento puede pasar a ser especial (Woodall 2000).

Se dice que un proceso está “bajo control estadístico” si en el mismo sólo están presentes causas comunes de variabilidad. Solo si el proceso está bajo control estadístico tiene una identidad definida, caracterizada por una pauta de variabilidad estable y predecible de las variables de interés. Esto significa que es posible predecir el comportamiento del proceso en un futuro próximo. Por ejemplo en un proceso continuo, es posible saber el porcentaje de producto que cumplirá con una determinada especificación. Un proceso está “fuera de control” cuando en el mismo aparece alguna causa especial de variabilidad. Los procesos fuera de control no tienen una identidad definida, fluctuando de forma errática e impredecible.

El objetivo general del SPC es optimizar el funcionamiento de los procesos, reduciendo la variabilidad de las características resultantes en torno a los valores deseados, objetivo que comparte con el control automático de procesos. Dicho objetivo se pretende alcanzar estableciendo un sistema de observación, permanente e inteligente, que detecte precozmente la aparición de causas especiales de variabilidad y ayude a identificar su origen, con el fin último de eliminarlas del proceso y de tomar medidas que eviten su reaparición en el futuro (Romero 2000). Su fundamento es la toma periódica de muestras y la representación gráfica de estadísticos adecuadamente elegidos para monitorizar eficientemente los parámetros clave del proceso, y que actúan como señales de aviso de las salidas de control del mismo. Estos gráficos de control, bien utilizados, constituyen una herramienta de mejora muy útil y poderosa por diferentes motivos: implican a operarios, encargados, técnicos y directivos en la gestión de la calidad; evitan tanto los problemas de sobreajuste o de infraajuste de los procesos; permiten diferenciar entre problemas puntuales, que pueden resolverse mediante simples actuaciones locales, y problemas asociados a las causas comunes de variabilidad, cuya resolución exige actuaciones sobre el sistema que deben plantearse desde la Dirección; y posibilitan establecer la capacidad real del proceso.

El significado del término Control Estadístico de Procesos SPC ha evolucionado con el tiempo. Actualmente se puede considerar que es el uso de los métodos estadísticos para mejorar la productividad del proceso y la calidad del producto (MacGregor 1988). Bajo el paraguas del SPC se incluyen métodos de diseño de experimentos, análisis de datos,

control de calidad *on-line* y también aspectos de gestión implicados en la ejecución efectiva de estos programas de mejora. Estos métodos juegan un papel importante en el conocimiento y la mejora de nuestros procesos a través de la experimentación y el análisis de datos.

Según dónde se realicen, las actividades del SPC se clasifican en dos grupos: denominadas en línea (*on-line*) o fuera de línea (*off-line*), siendo diferentes tanto los objetivos que persiguen como los procedimientos que utilizan.

2.2.1 SPC fuera de línea (*off-line*)

El hecho de que un proceso se halle bajo control estadístico no implica necesariamente que su funcionamiento sea satisfactorio. De hecho las causas comunes podrían generar una variabilidad elevada que diera lugar a mucho producto fuera de especificaciones. En este caso, sin embargo la solución no podrá obtenerse mediante simples actuaciones locales, sino que exigirá actuaciones sobre el sistema para eliminar causas comunes o reducir su efecto.

El Control Estadístico de Procesos *off-line* consiste en actuar sobre el sistema para modificarlo y obtener un nuevo proceso con un comportamiento más satisfactorio. Los métodos de control estadístico de procesos fuera de línea constituyen un importante instrumento para mejorar la calidad de los productos obtenidos mediante procesos industriales. La herramienta principal es el diseño de experimentos (DOE: *Design of Experiments*). Genichi Taguchi popularizó y extendió su uso en las industrias japonesas, principalmente en las de automoción y electrónica, constituyendo una de las principales aportaciones de los nuevos planteamientos japoneses a la mejora de la calidad, pues han tenido un notable éxito en las últimas décadas.

En el Capítulo 5, (Sintonizado del controlador DMC), puede consultarse en qué consiste el DOE y ver un ejemplo detallado que se ha desarrollado en esta tesis.

2.2.2 SPC en línea (*on-line*)

El estado “bajo control estadístico” no constituye el estado “natural” de un proceso, sino que su consecución y mantenimiento exige la actuación constante sobre el mismo. Mantener los procesos en estado de control es precisamente el objetivo de las actividades de control *on-line* de procesos. Para ello se establece un sistema permanente e inteligente de monitorización del proceso a lo largo del tiempo con el fin de detectar precozmente cualquier causa especial de variabilidad que pueda afectarle, y que ayude a identificar el origen de la misma, con el fin último de eliminarla del proceso y tomar medidas que impidan su reaparición futura, si ésta es desfavorable, o de fijarla con carácter permanente en el proceso en el caso de que sea favorable, lo que tiene como consecuencia una mejora continua del proceso.

La herramienta básica del control *on-line* de procesos son los gráficos de control. Su fundamento es la representación gráfica de la evolución temporal de ciertos estadísticos (parámetros matemáticos que se calculan a partir de los datos de la muestra) obtenidos a partir de la toma periódica de muestras del proceso. Permiten conocer la magnitud y el tipo de variabilidad presente en el proceso, facilitando la rápida detección visual de señales estadísticas de aviso que indican anomalías. Para implementar un gráfico de control es necesario tomar decisiones acerca de las variables a medir, los parámetros poblacionales a monitorizar, los estadísticos muestrales que se van a utilizar, el tamaño de la muestra, la frecuencia de muestreo, el tipo de gráfico de control a utilizar, cómo establecer los límites de control, y los planes de reacción. Todas estas opciones determinan el coste del esquema de monitorización y su habilidad para detectar situaciones de fuera de control.

Uno de los propósitos del control estadístico *on-line* es distinguir entre causas comunes y causas asignables de variabilidad, para evitar con ello, los problemas ocasionados por el sobre-ajuste o el infra-ajuste del proceso.

Diseño de un gráfico de control

El diseño de un gráfico de control comprende las siguientes etapas (Ferrer 2009):

1. Identificación de la característica/s clave x a medir (por ejemplo, una propiedad de calidad, una variable clave del proceso que de alguna manera afecta a la calidad del

producto, o una medida analítica de una muestra de referencia), del parámetro θ que se va a monitorizar (v.g. media del proceso, varianza, proporción de unidades defectuosas o no conformes, o la tasa de defectos o no conformidades) y del modelo de distribución de probabilidad de x , $f(x, \theta)$ (v.g. normal, binomial, Poisson). En este contexto, un proceso se dice que está “bajo control estadístico”, es decir, en “control” si el modelo estadístico subyacente que representa la característica clave es estable en el tiempo. En este caso, el proceso se dice que opera bajo condiciones normales de operación (*NOC: normal operating conditions*). Si hay algún cambio en el tiempo en esta distribución, de manera que el proceso no sigue este modelo estadístico, se dice que está “fuera de control” (Woodall 2000).

2. Seleccionar un estadístico adecuado $\hat{\theta}_t = z(\mathbf{x}_t^T)$ para construir el gráfico de control y para monitorizar el parámetro θ , donde \mathbf{x}_t^T es el vector de observaciones $\mathbf{x}_t^T = \{x_{1t}, x_{2t}, \dots, x_{nt}\}$ de la característica clave en las n unidades de la producción o en las n medidas del proceso muestreadas al azar en el periodo t ($t = 1, 2, \dots$). En general, como estadísticos $\hat{\theta}_t$ se utilizan los estimadores de θ , insesgados de varianza mínima. Evidentemente $\hat{\theta}_t$, por ser una función de los valores muestrales, será una variable aleatoria cuya distribución de probabilidad dependerá de x , y por tanto de θ . A partir de la distribución de probabilidad $f(\mathbf{x}_t^T; \theta_0)$ (siendo θ_0 valor objetivo de θ , cuando el proceso está en estado de control) y para una determinada probabilidad p asociada al riesgo de primera especie α - es decir, el riesgo de que un punto caiga fuera de los límites de control, cuando en realidad no hay causas especiales presentes- se calcularán los límites de control.

Las observaciones \mathbf{x}_t^T pueden ser medidas (v.g. volúmenes de relleno, pesos, tamaño de partículas, concentraciones de analitos, viscosidades), características con solo 2 situaciones posibles (v.g. defectuoso/no defectuoso, falla/no falla) o conteos (v.g. número de defectos). En el primer caso, se emplean los gráficos de control de variables y en los demás gráficos de control por atributos. Cuando se manejan mediciones, los tamaños de muestra n que se emplean son pequeños, con valores que oscilan entre 1 y 5, mientras que en los otros casos los tamaños de muestra son mayores, del orden de 50 o más unidades.

El fundamento estadístico de los gráficos de variables estándar está basado en la distribución normal. Sea x la característica clave a controlar, si en el periodo t el proceso opera normalmente (NOC), se asume que x es una variable aleatoria que se distribuye normalmente y que puede expresarse como $x_t = \mu + a_t$, donde μ es la media del proceso y a_t sigue un proceso estocástico de ruido blanco, es decir, una serie temporal de perturbaciones independiente, idéntica y normalmente distribuidas (*iidn*) con media cero y varianza σ^2 ($a_t \sim N(0, \sigma^2)$). La media muestral $\bar{x}_t = \sum_{i=1}^n x_{ti} / n$ es el estadístico más frecuentemente utilizado para monitorizar la media μ del proceso, mientras que para monitorizar la varianza se han propuesto diferentes estadísticos tales como: el rango $R_t = \max(x_{ti}) - \min(x_{ti})$ y la varianza muestral $s_t^2 = \sum_{i=1}^n (x_{ti} - \bar{x}_t)^2 / (n-1)$.

Ciertas características de calidad no están ligadas a ninguna variable numérica, sino a un atributo que un producto puede o no poseer, o una categoría a la que puede o no pertenecer. En estos casos, cada unidad inspeccionada puede ser defectuosa o no defectuosa, fallar o no fallar, contener o no errores. La variable x que se observa, es una variable dicotómica con solo dos posibles valores, correspondientes a la unidad que cumple o no cumple con unos determinados requisitos preestablecidos. Ejemplos de este tipo de variables son: una lámpara se enciende o no, un catalizador se ha activado correctamente o no, una reacción de polimerización con presencia o ausencia de contaminantes en el reactor de polimerización, lotes conformes o no con los requerimientos de una o más propiedades del producto, un documento contiene o no errores, etc. En estos casos, se utilizan gráficos de control por atributos, cuyo fundamento estadístico está basado en la distribución binomial. Supongamos que el proceso está en estado de control estadístico, de manera que la probabilidad de que una unidad de la producción no cumpla con los requisitos establecidos (es decir sea defectuosa o no conforme) es p , y considerando que las variables asociadas a las sucesivas unidades producidas son independientes, entonces cada unidad es una realización de una variable aleatoria de Bernoulli con parámetro p . Si en el periodo t , se toma una muestra aleatoria de n unidades, la variable D_t , número de unidades defectuosas, sigue una variable binomial de parámetros n y p ($D_t \sim \text{binomial}(n, p)$), con media $\mu_{D_t} = np$ y varianza $\sigma_{D_t}^2 = np(1-p)$. En este caso, el parámetro del proceso a monitorizar es $\theta = p$, y el estadístico utilizado para ello es la proporción de unidades defectuosas en la muestra $\hat{\theta}_t = \hat{p}_t = D_t / n$.

Un ítem no conforme es una unidad de producto que contiene al menos un defecto o no conformidad. Si se necesita controlar el número de defectos o no conformidades, el control por atributos no resulta adecuado, ya que los defectos aparecen en un flujo continuo de producto (abolladuras en un capó de coche, burbujas en un cristal, defectos de soldadura en una tubería, etc.). La característica clave x a observar es en este caso, el número de defectos por unidad de longitud, área, etc., o por un periodo constante (v.g., una hora o un día). El proceso estará en estado de control si:

1. El proceso es estable y produce un número medio de defectos por unidad, que llamaremos λ .
2. Los defectos aparecen independientemente unos de otros. Se asume que estando el proceso en estado de control, en el periodo t , el número de no conformidades en la muestra de tamaño n unidades, C_t , sigue una distribución de Poisson de parámetro λ , ($C_t \sim \text{Poisson}(\lambda)$), con media y varianza $\mu_{C_t} = \sigma_{C_t}^2 = \lambda$. Para que este modelo sea adecuado, es necesario que el número de posibilidades o localizaciones potenciales de defecto tienda a infinito, la probabilidad de defecto en cada una de estas localizaciones a cero y el número medio de defectos por unidad a una constante λ . El parámetro del proceso a monitorizar es $\theta = \lambda$, y el estadístico utilizado para ello es el número promedio de defectos por unidad en la muestra $\hat{\theta}_t = \hat{\lambda}_t = C_t/n$.
3. A partir del estadístico, $\hat{\theta}_t = z(\mathbf{x}_t^T)$ elegido se calculan los límites de control, y se determinan cuáles van a ser las señales de fuera de control y las reglas de decisión.

El gráfico de control proporciona un procedimiento para detectar cualquier cambio en el valor del parámetro poblacional θ que se desea controlar. Dependiendo del tipo de cambio que se pretenda detectar, será más adecuado un tipo u otro de gráfico. Un cambio tipo pulso, un crecimiento o decrecimiento exponencial, un cambio uniforme de nivel temporal o un cambio permanente en el parámetro θ , requerirá un gráfico Shewhart, EWMA (*exponentially weighted moving average*), MA (*moving average*) o CUSUM (*cumulative sum*), respectivamente (Box, *et al.* 2009). Cada uno de ellos se calculará y construirá a partir del estadístico correspondiente $\hat{\theta}_t = z(\mathbf{x}_t^T)$. Éstos difieren fundamentalmente en la forma en que se ponderan los valores actual y pasados de $\hat{\theta}_t$.

2.2.3 Fases de la monitorización *on-line* del proceso

La implementación del control *on-line* de procesos consta de dos fases:

1. En la Fase I se construye un modelo empírico a partir de datos del proceso recogidos en condiciones de funcionamiento normales (NOC). En esta fase, los datos del proceso se analizan de forma retrospectiva, se estiman los estadísticos que van a ser usados en la monitorización y se calculan los límites de control para determinar si el proceso ha estado en estado de control en el periodo de tiempo correspondiente a los datos recogidos. Mediante un proceso iterativo donde en cada paso, se detectan observaciones fuera de control, se analizan cuidadosamente investigando sus causas, y se omiten del conjunto de datos de referencia aquellas que realmente son anomalías, se calculan de nuevo los límites de control, y se establecen los parámetros del gráfico que se utilizarán en la Fase II. La Fase I se termina cuando hay suficiente evidencia de que los datos obtenidos proceden del proceso funcionando bajo control. Esto significa que el comportamiento del proceso ha sido entendido y modelado y que las hipótesis de su comportamiento y la estabilidad del proceso se han comprobado. No importa si los datos recogidos proceden de una base de datos histórica o si se han recogido recientemente. Un uso racional de la Fase I de control puede aumentar el conocimiento del proceso y mejorarlo, ayudando al personal de operación, ingenieros y a los directivos del proceso en dicha tarea. Este modelo se utiliza en la Fase II, como patrón de comparación del funcionamiento del proceso en el futuro.
2. Es en la Fase II, cuando realmente se realiza la monitorización *on-line* del proceso. Para ello, a partir de nuevas muestras tomadas periódicamente se calculan y representan gráficamente los estadísticos mencionados, sobre el gráfico de control definido en la Fase I. En esta fase II, una vez se ha detectado una muestra fuera de control, se analiza cuidadosamente tratando de averiguar la naturaleza de las causas asignables que afectan al proceso. Se toman medidas para eliminarlas si deterioran el rendimiento del mismo o se incorporan con carácter permanente si se considera que mejoran su capacidad. En aquellos procesos no demasiado complejos (v.g. univariantes) los planes de acción para corregir situaciones de fuera de control (OCAPs: *Out-of-control-action plans*) pueden ser muy útiles (Montgomery 2005). Los mismos consisten en un diagrama de flujo o un texto descriptivo de una secuencia de actividades a realizar para comprobar si se ha producido algún hecho

que constituya una causa especial. Un OCAP está basado en el conocimiento de modos de fallo y constituye un manual de identificación y eliminación de este tipo de causas. Sin embargo, si los procesos son complejos (v.g. multivariantes) se necesitan otras herramientas para el diagnóstico y su eliminación. Más adelante se verán y discutirán estas herramientas. De cualquier manera, en esta etapa de diagnóstico, el conocimiento y experiencia que sobre el proceso tengan los operarios e ingenieros son cruciales para desarrollarla con éxito.

2.2.4 SPC tradicional

Los conceptos y métodos SPC se han convertido en importantes en las industrias manufactureras y de procesos. También pueden ser muy útiles en los laboratorios, en los que se requiere que haya coherencia en el tiempo entre medidas o conjuntos de experimentos. Como se ha dicho anteriormente, el objetivo del SPC es monitorizar el rendimiento de las operaciones repetitivas en el tiempo para verificar que permanecen en estado de control. Dicho estado se da cuando ciertas variables permanecen cerca de los valores deseados y la única fuente de variación presente es la debida a las causas comunes, es decir variaciones que afectan en todo momento al proceso y que básicamente son inevitables en condiciones operativas normales. Para monitorizar las variables clave en el proceso o el producto, se usan varios gráficos de control que permiten detectar la presencia de cualquier acontecimiento que tenga una causa especial o asignable. La mejora a largo plazo en el proceso y en la calidad del producto se puede conseguir detectando estos eventos y eliminando sus causas si son desfavorables o fijándolos permanentemente si son favorables.

Hasta hace poco, la práctica habitual en la industria era examinar sólo un pequeño número de variables independientes entre ellas, usando gráficos de control univariantes (Shewhart, sumas acumuladas (CUSUM), medias móviles ponderadas exponencialmente (EWMA)). Cuando la calidad del producto depende simultáneamente de varias variables (propiedades) no es correcto monitorizarlas independientemente, ya que podría dar lugar a decisiones erróneas. En este caso se deberían usar gráficos de control multivariantes, los cuales se pueden basar en las variables medidas directamente según el enfoque tradicional o en las variables transformadas previamente en variables latentes. A

continuación se detallan estos tres enfoques: univariante, multivariante tradicional y multivariante basado en las variables latentes.

2.2.5 Gráficos de control univariantes

Los primeros gráficos de control estadístico de procesos se llamaron gráficos Shewhart, pues fue el Dr. W. A. Shewhart de los laboratorios Bell Telephone de USA, quien primero los propuso (Shewhart 1931). En la figura 2.1 puede verse un gráfico de control. En él se representan datos de una única variable Q frente al tiempo. Consta de una línea central (LC) que representa el valor medio esperado de la variable Q cuando el proceso está en estado de control, y de dos líneas horizontales llamadas límites de control superior (LCS) y límite de control inferior (LCI). Estos límites se eligen de forma que cuando el proceso está en control estadístico, sólo una pequeña fracción -coincidente con un valor preespecificado α -de los puntos representados caerá fuera de los límites. Si un punto cae fuera de los límites (observación en rojo de la figura 2.1), se considera que es muy probable que el proceso esté fuera de control, y se procede a investigar la causa de dicha desviación.

La variable medida puede ser una característica de calidad del producto (v.g. índice de fluidez o peso molecular en un proceso de polimerización) o una variable del proceso (v.g. temperatura del reactor). El valor Q de cada uno de los puntos del gráfico puede ser el promedio de las medidas de una variable x en n muestras (gráfico \bar{X}), o del rango (gráfico R) de la variable o la desviación típica (gráfico S) de las n muestras.

Cuando $n = 1$, en el gráfico se representan simplemente los valores individuales de la variable x . Sin embargo para $n = 1$, el rango o la desviación típica no están definidos. Para solucionar esto, se usan el rango móvil o la desviación típica móvil (Montgomery *et al.* 1994, 1998).

Las muestras se toman a intervalos periódicos de tiempo en procesos continuos o al finalizar un lote o un grupo de lotes en procesos *batch*.

Una alternativa al gráfico Shewhart es el gráfico CUSUM (*cumulative sum*), diseñado por primera vez por Page en los años 50 (Page 1954,1961).

En los gráficos CUSUM no se representa únicamente el valor del estadístico Q en el instante t , sino la suma acumulada de sus desviaciones respecto a un valor objetivo en el instante actual t y pasados ($t-1, t-2, \dots$), lo que permite incorporar la información que pudieran contener las observaciones pasadas. Esto lo hace más efectivo que los gráficos Shewhart para detectar pequeños desviaciones en el proceso. Los gráficos CUSUM se pueden construir tanto para observaciones individuales como para grupos. Es particularmente efectivo para medidas individuales ($n = 1$). Así como en los gráficos Shewhart, el uso de las medias de muestras de tamaño $n > 1$, mejora sustancialmente el rendimiento del gráfico, no ocurre siempre lo mismo con los gráficos CUSUM en los que es más recomendable utilizar observaciones individuales y muestrear con mayor frecuencia (para ahondar más en esta discusión ver Hawkins y Olwell, 1998). Es por tanto un candidato idóneo para ser utilizado en las industrias químicas y de procesos, donde frecuentemente las muestras son de tamaño unitario o también en las industrias de piezas con medición automática de cada pieza y monitorización en línea.

El gráfico de control EWMA (*Exponentially Weighted Moving Average*) que fue introducido por Roberts (1959), es también una buena alternativa al gráfico Shewhart para detectar pequeñas salidas de control, siendo en este sentido equivalente a los gráficos CUSUM, frente a los que presenta la ventaja de su manejo más sencillo. Para cada punto del gráfico Shewhart, únicamente es importante la observación presente, ya que todas las observaciones pasadas se ignoran. En los CUSUM las observaciones pasadas y presentes se tienen en cuenta pero todas con el mismo peso. En los gráficos EWMA (Hunter 1986) también se tienen en cuenta tanto la observación presente, como todas las observaciones pasadas, pero a medida que se alejan en el tiempo se les da menos peso. La idea básica consiste pues en llevar al gráfico, tras la observación de cada Q_t , un estadístico E_{t+1}^* que es una media ponderada de todas las observaciones obtenidas hasta el momento, con pesos de ponderación que decrecen exponencialmente cuanto más alejada en el tiempo esté la observación. La expresión de E_{t+1}^* que define al gráfico EWMA será por tanto:

$$E_{t+1}^* = \frac{Q_t + \theta Q_{t-1} + \theta^2 Q_{t-2} + \theta^3 Q_{t-3} + \dots}{1 + \theta + \theta^2 + \theta^3 + \dots} = (1 - \theta)(Q_t + \theta Q_{t-1} + \theta^2 Q_{t-2} + \theta^3 Q_{t-3} + \dots) \quad (2.1)$$

donde $0 < \theta < 1$. Esta expresión puede escribirse como:

$$E_{t+1}^* = \lambda Q_t + (1 - \lambda) E_t^* \quad (2.2)$$

Cuando $\lambda \rightarrow 1$, entonces $E_{t+1}^* \rightarrow Q_t$ y el gráfico EWMA se convierte en un gráfico Shewhart. Cuando $\lambda \rightarrow 0$ las observaciones más recientes tienen muy poco peso y las observaciones pasadas tienen casi el mismo peso (aunque muy bajo), entonces el gráfico EWMA toma la apariencia de un gráfico CUSUM. E_{t+1}^* contiene toda la información sobre los datos pasados necesaria para el siguiente intervalo $t+1$, por lo que no es necesario mantener la información sobre observaciones previas y sus pesos, al mismo tiempo proporciona una predicción del estado del proceso en $t+1$, lo que puede ser de utilidad para el control dinámico del proceso.

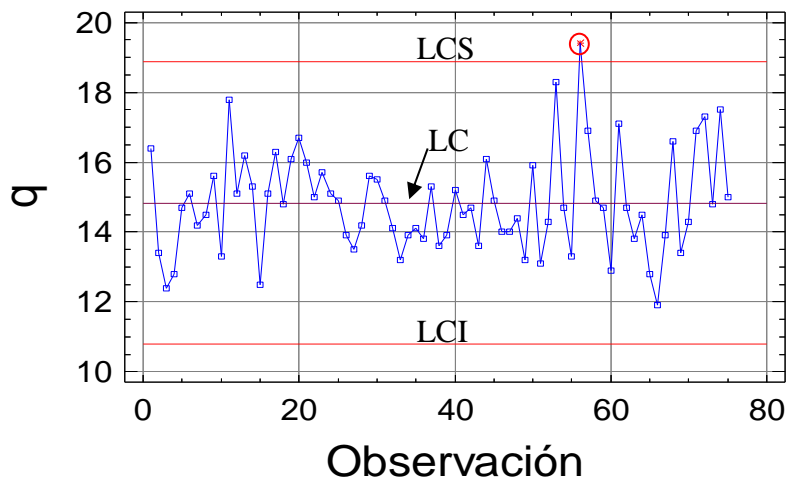


Figura 2.1 Gráfico de control estadístico Shewhart

2.2.6 Medidas de rendimiento de un gráfico de control

En un gráfico puede aparecer una señal de salida de control cuando el proceso está bajo control (falsa alarma). Del mismo modo, puede ocurrir que un punto del gráfico esté entre sus límites y el proceso no esté bajo control (falta de detección). Esto es debido a que el funcionamiento del gráfico se basa en la toma de muestras periódicas del proceso y en la distribución de probabilidad del estadístico muestral empleado en el gráfico, que por error del muestreo puede estar dando una información inexacta. Para que el gráfico tenga un

buen funcionamiento la probabilidad de que se presenten ambas situaciones debe ser baja. El funcionamiento de un gráfico será pues tanto mejor cuanto más tiempo transcurra entre falsas alarmas (tasa de falsas alarmas) y cuanto menos tiempo transcurra entre la salida de control real y su señalización en el gráfico (retardo en la detección). Desafortunadamente, los dos objetivos no se pueden optimizar al mismo tiempo. Por ejemplo, para reducir la tasa de falsas alarmas, los límites del control se pueden alejar de la línea central. Sin embargo, la ampliación de los límites de control, aumenta el riesgo de que un punto caiga entre los límites de control cuando el proceso está realmente fuera de control. Por lo tanto, se necesitará más tiempo para detectar un cambio en el proceso. Este concepto está estrechamente relacionado con el error de 1ª especie (rechazar la hipótesis nula cuando es verdadera) y el error de 2ª especie (aceptar la hipótesis nula cuando es falsa) en un contraste de hipótesis.

Se denomina ARL (*Average Run Length*) al número de muestras que hay que tomar en promedio hasta que se detecta una señal de salida de control. Existen dos medidas de rendimiento, el ARL_0 y el ARL_D que están definidos para la evaluación de la tasa de falsas alarmas y del retardo en la detección, respectivamente. Para un proceso bajo control se utiliza el ARL_0 o número de muestras tomadas en promedio hasta que se produce una señal de fuera de control (*falsa alarma*) y lógicamente debe ser lo más alto posible. Por ejemplo, si las observaciones no están correlacionadas, entonces para un gráfico de control tipo Shewhart, en el que no se empleen reglas adicionales de control, $ARL_0 = 1/\alpha$, siendo α la probabilidad de que cualquier punto se sitúe fuera de los límites de control, cuando el proceso está bajo control estadístico. Bajo el supuesto de normalidad y con los límites 3σ , $ARL_0 = 1/0.0027 = 370$. Esto quiere decir que si el proceso está bajo control estadístico, aparecerá en el gráfico una señal de falta de control cada 370 muestras, en promedio. Para un determinado gráfico de control, con unos límites determinados, el ARL_0 es único.

Para un proceso que no esté bajo control estadístico, se utiliza el ARL_D o número de muestras tomadas en promedio desde que la causa especial de variabilidad está aparece, hasta que se produce una señal de fuera de control (*detección*) y lógicamente debe ser lo más más bajo posible. El ARL_D depende de la magnitud de la salida de control, $D = |\mu_1 - \mu_0| = \delta\sigma$. Habrá tantos ARL_D como posibles magnitudes del cambio. Desde este punto de vista, el rendimiento de un gráfico de control determinado puede ser

descrito mediante la representación de los valores de ARL_D frente a diferentes magnitudes de la desviación D de la salida.

Se dice que un gráfico de control es más potente que otro si detecta antes las salidas de control de una determinada magnitud D . Para que esta comparación tenga sentido los dos gráficos tienen que tener el mismo riesgo de falsas alarmas ARL_0 .

2.2.7 Control estadístico multivariable de procesos

Frecuentemente son varias las características de calidad del producto o los parámetros del proceso que interesa controlar. En estas situaciones una primera solución a menudo adoptada, es llevar gráficos de control por separado para cada una de las variables. Sin embargo, esta forma de proceder además de obligar al operario a inspeccionar un gran número de gráficos de control puede plantear varios inconvenientes:

1. Aumenta el riesgo de falsas alarmas. En efecto, si se están controlando k características o parámetros, y cada gráfico tiene una probabilidad α de generar una falsa alarma, la probabilidad de obtener al menos una falsa alarma con los k gráficos individuales en una muestra será mayor que α . Por ejemplo si las k variables monitorizadas fueran independientes, dicha probabilidad sería $1-(1-\alpha)^k$ siendo $k \geq 2$.
2. Si, como es lo más probable, las características están correlacionadas los k gráficos individuales pueden ser menos potentes para detectar ciertas salidas de control que un gráfico conjunto que tenga en cuenta las relaciones entre las variables (Hotelling 1947).

Esta segunda situación se ilustra en la figura 2.2, que es una representación clásica del problema que se presenta con el uso de dos gráficos de control univariantes separados para cada una de las dos componentes de una variable aleatoria bidimensional (y_1, y_2) que se monitoriza. Se representan por un lado las observaciones en un gráfico bidimensional (parte superior izquierda de la figura). Las mismas observaciones se representan como univariantes en dos gráficos, uno para y_1 (parte horizontal) y otro para y_2 (parte vertical).

Supongamos que cuando únicamente está presente la variabilidad debida a causas comunes, (y_1, y_2) sigue una distribución normal bidimensional. Los puntos en el gráfico conjunto representan un conjunto de observaciones de esta distribución. y_1 e y_2 están correlacionadas y la elipse representa la región de confianza $(1-\alpha) \times 100$ % de la

distribución, siendo α el riesgo de 1ª especie (cuando el proceso está bajo control estadístico, un $\alpha \times 100$ % de los puntos caen fuera de esta elipse).

El punto indicado por el símbolo \oplus está fuera de la región de confianza común y es claramente diferente del resto de individuos de la población bajo control. Sin embargo, los gráficos univariantes no lo indican. Estos dos gráficos crean una región de aceptación cuadrada, que conduciría a aceptar producto malo como bueno. Y al contrario, puede que haya alguna muestra que esté fuera de algún límite en los gráficos univariantes y realmente ser una muestra que está bajo control (símbolo \diamond). El problema empeora a medida que aumenta el número de variables. Un sistema eficiente de control y detección de fallos debe analizar las variables conjuntamente.

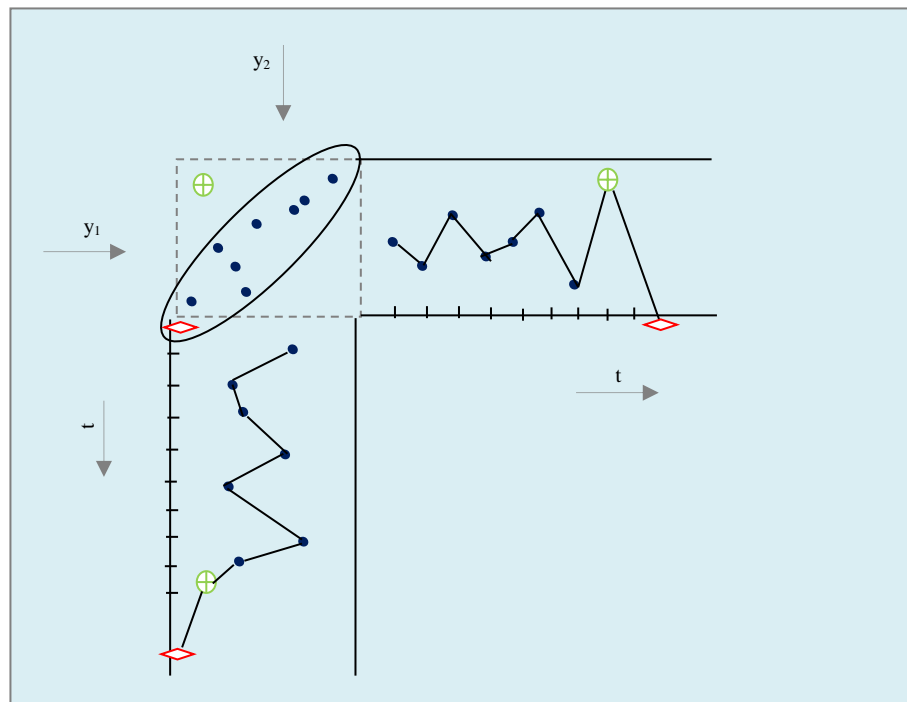


Figura 2.2 El problema que se presenta cuando se usan dos gráficos de control, uno por cada variable en vez de uno multivariante.

Mientras no se ha dispuesto de gran cantidad de datos, se ha procedido de esta forma, sin embargo en las industrias modernas de procesos continuos y por lotes y en algunas industrias manufactureras, los procesos generan una gran cantidad de datos altamente correlacionados. Cuando se presenta un evento especial en un proceso, no solo afecta a la magnitud de las variables, sino también a la relación existente entre ellas. Según MacGregor (1996), “*la interpretación de un conjunto de gráficos univariantes en presencia de variables altamente correlacionadas presenta la misma dificultad de*

interpretación que presenta la interpretación del efecto de un factor, en presencia de interacciones en los diseños de experimentos abordados modificando cada vez un solo factor (enfoque paso a paso)". Estos eventos a menudo son difíciles (o incluso imposibles) de detectar mediante los gráficos variable a variable. En estos entornos, en los que se generan gran cantidad de datos, se requieren los procedimientos de control estadístico multivariante de procesos MSPC (*Multivariate Statistical Process Control*) que tratan todas las variables simultáneamente. Se han propuesto varios enfoques, aquellos basados en las variables originales y los basados en las variables latentes.

2.2.8 MSPC basado en las variables originales: gráficos de control

Para las situaciones comentadas en el apartado anterior, se desarrollaron los gráficos de control basados en la T^2 de Hotelling, que permiten aprovechar la información contenida en la estructura de correlación de las variables. Dichos gráficos indicarán que hay anomalías en el proceso tanto cuando alguna de las variables monitorizadas adopte valores fuera de lo habitual, como cuando se modifique la estructura de correlación entre las variables.

Sea $\mathbf{X}_t = \{\mathbf{x}_{t1}, \mathbf{x}_{t2}, \dots, \mathbf{x}_{tk}, \dots, \mathbf{x}_{tK}\} \hat{=} \mathbb{R}^{N \times K}$ la matriz de observaciones de K características medidas en N unidades muestreadas al azar de la producción o medidas del proceso tomadas en el instante $t = \{1, 2, \dots\}$ (ver figura 2.3), donde $\mathbf{x}_{tk}^T = \{x_{t1k}, x_{t2k}, \dots, x_{mk}, \dots, x_{tNk}\}$ es el vector de valores de la característica k -ésima de los N individuos de la muestra (la columna k -ésima de la matriz \mathbf{X}_t) y $\mathbf{x}_m = \{x_{m1}, x_{m2}, \dots, x_{mk}\}$ es el vector de dimensión k , de la observación i -ésima (la fila i -ésima de la matriz \mathbf{X}_t).

Es posible comprobar si el proceso permanece estable, contrastando la hipótesis de que el vector ($k \times 1$) de medias del proceso permanece en su valor objetivo $\boldsymbol{\mu}_0$. Para ello se calcula el siguiente estadístico:

$$\chi_t^2 = (\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_0)^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_0) \quad (2.3)$$

donde $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^{k \times 1}$ es el vector de medidas muestrales en el instante t y $m_0 \hat{\mathbb{R}}^{k \times 1}$ y $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ son el vector de medias y la matriz de varianzas-covarianzas en estado de control estadístico.

El estadístico χ^2 de la ecuación (2.3) representa la distancia ponderada (distancia de Mahalanobis) de cualquier observación \mathbf{x}_t al valor objetivo $\boldsymbol{\mu}_0$. Si la media del proceso permanece en el valor objetivo $\boldsymbol{\mu}_0$, este estadístico se distribuye como una χ^2 central con K grados de libertad. Se puede construir un gráfico de control representando gráficamente el estadístico χ^2 frente al tiempo con un LCS dado por $\chi_\alpha^2(K)$, donde α (riesgo de primera especie) es un nivel de significación apropiado para realizar un test de hipótesis (v.g. $\alpha=0.05$). Si no se conoce la matriz de varianzas-covarianzas $\boldsymbol{\Sigma}$ en estado de control, se tiene que estimar a partir de una muestra de m observaciones multivariantes:

$$\mathbf{S} = (m-1)^{-1} \sum_{i=1}^m (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T \quad (2.4)$$

siendo $\bar{\mathbf{x}} \hat{\mathbb{R}}^{k \times 1}$ el vector de medias muestrales.

Cuando se tiene una nueva observación (\mathbf{x}), se calcula el estadístico T^2 de Hotelling en el instante t :

$$T_t^2 = (\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_0)^T \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_0) \quad (2.5)$$

este estadístico que sigue una distribución F con K y $m-K$ grados de libertad (Tracy *et al.* 1992), se puede representar gráficamente frente al tiempo de igual forma que la χ^2 . El límite de control superior de este gráfico se calcula según la siguiente expresión:

$$T_{LCS}^2 = \frac{(m-1)(m+1)K}{K(m-K)} F_{\alpha, (K, m-K)} \quad (2.6)$$

donde $F_{\alpha, (K, m-K)}$ es el percentil $100(1-\alpha)$ de una distribución F con K y $m-K$ grados de libertad. Si no es razonable asumir la normalidad multivariante, es posible calcular el LCS por técnicas de remuestreo tales como el *bootstrap* (Liu *et al.* 1996).

Observaciones por grupos racionales Si en cada instante de tiempo en vez de una observación individual, se toma la media de n observaciones multivariantes o si la estimación de \mathbf{S} está basada en un conjunto de estimadores procedentes de subgrupos racionales, entonces se deben redefinir los gráficos χ^2 y T^2 y sus LCS (Wierda 1994). Además si los gráficos se usan para analizar datos históricos, usadao también para calcular \mathbf{S} , entonces también cambian las propiedades de la distribución de la T^2 respecto a los aquí descritos.

Una vez se ha detectado una señal de falta de control, el reto es encontrar las variables que son responsables de que ésta ocurra. Para ello se han propuesto varios enfoques. Kourti y MacGregor (1996) revisaron estos métodos y propusieron un algoritmo rápido y fácil de calcular basado en las componentes principales, para determinar las variables que contribuyen numéricamente a la señal de falta de control, que más adelante se detallará por ser el método de diagnóstico empleado en esta tesis.

Gráficos CUSUM multivariantes

Se han propuesto varios gráficos CUSUM multivariantes (MCUSUM) por parte de distintos investigadores. Estos gráficos fueron revisados por Wierda (1994) y por Lowry *et al.* (1992). Wierda investigó si un gráfico MCUSUM podría detectar pequeños cambios en la media multivariante del proceso antes que el gráfico T^2 de Hotelling, y ordenó los gráficos MCUSUM en función de su rendimiento en casos simulados. Los gráficos se evaluaron en base a su habilidad para detectar estos pequeños cambios en el proceso y en la facilidad de interpretación de las señales propuestas de salida de control. El que mejor funcionaba fue el sugerido por Pignatiello y Runger (1990) que se describe a continuación. Estos investigadores proponen el siguiente procedimiento gráfico: supongamos que tenemos un vector de observaciones $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^{K \times 1}$ ($K \geq 2$) en un instante t ,

de manera que si tomamos muestras a intervalos de tiempo t , tenemos una secuencia de vectores $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots$, que en estado de control, siguen una distribución normal K -variante $\mathbf{x} \simeq N_K(\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Sigma})$, son independientes entre sí, y cuya matriz de varianzas-covarianzas $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ permanece constante. El gráfico MCUSUM propuesto se basa en el siguiente vector de sumas de desviaciones acumuladas:

$$\mathbf{s}_t = \sum_{j=t-n_t+1}^t (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_0) \quad (2.7)$$

donde n_t es el número de observaciones habidas desde la última corrección del proceso (valor cero más reciente en el gráfico) y que se define formalmente en (2.11). Puesto que

$\frac{1}{n_t} \mathbf{s}_t$ puede expresarse como:

$$\frac{1}{n_t} \mathbf{s}_t = \left(\frac{1}{n_t} \sum_{j=t-n_t+1}^t \mathbf{x}_j \right) - \boldsymbol{\mu}_0 \quad (2.8)$$

donde $\left(\frac{1}{n_t} \sum_{j=t-n_t+1}^t \mathbf{x}_j \right)$ se puede tomar como la media multivariante muestral, entonces el

vector $\frac{1}{n_t} \mathbf{s}_t$ representa la desviación de la media multivariante respecto al valor objetivo

en el instante t . Consecuentemente en dicho instante, la media multivariante del proceso

puede ser estimada como $\boldsymbol{\mu}_t = \boldsymbol{\mu}_0 + \frac{1}{n_t} \mathbf{s}_t$. Llamemos C_t a la norma del vector \mathbf{s}_t , que

puede ser considerada como la distancia entre la estimación de la media del proceso y el valor objetivo:

$$C_t = \|\mathbf{s}_t\| = \left(\mathbf{s}_t^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{s}_t \right)^{1/2} \quad (2.9)$$

Se construye el gráfico de control multivariante definiendo el estadístico:

$$MC_t = \max \{0, C_t - kn_t\}$$

que se representa gráficamente. k es un valor de referencia positivo, que habitualmente es la mitad de la distancia entre $\boldsymbol{\mu}_1$ y $\boldsymbol{\mu}_0$, siendo $\boldsymbol{\mu}_1$ (un determinado valor del estado de fuera de control), y donde

$$n_t = \begin{cases} n_{t-1} + 1 & \text{si } 0 < MC_{t-1} < H \\ 1 & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (2.10)$$

Se presenta una señal de fuera de control cuando $MC_t > H$, siendo $H > 0$ el límite de control.

Gráfico EWMA multivariante

El gráfico MEWMA (*Multivariate Exponentially Weighted Moving Average*) introducido por Lowry *et al.* (1992) es la generalización multivariante del gráfico EWMA. Supongamos que tenemos un vector de observaciones $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^{K \times 1}$ en un instante t , de manera que si tomamos muestras a intervalos de tiempo t , tenemos una secuencia de vectores $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots$, que en estado de control, siguen una distribución normal K -variante $\mathbf{x} \simeq N_K(\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Sigma})$, son independientes entre sí, y cuya matriz $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{K \times K}$ de varianzas-covarianzas permanece estable. El estadístico MEWMA en el instante t y para el vector observado \mathbf{x}_t , se define como,

$$\mathbf{w}_{t+1}^* = \mathbf{R}\mathbf{x}_t + (\mathbf{I} - \mathbf{R})\mathbf{w}_t^* \quad (2.11)$$

El vector \mathbf{w}_{t+1}^* tiene la propiedad de ser una predicción de la próxima observación. \mathbf{R} es una matriz diagonal $\{r_1, r_2, \dots, r_K\}$ y $(0 < r_k \leq 1)$. El estadístico de control que se representa en el gráfico es:

$$Q_t^2 = \mathbf{w}_{t+1}^{*T} \mathbf{\Omega}_t^{-1} \mathbf{w}_{t+1}^* \quad (2.12)$$

siendo $\mathbf{\Omega}_t, \mathbf{\Sigma} \in \mathbb{R}^{K \times K}$ la matriz de varianzas_covarianzas de \mathbf{w}_{t+1}^* . Cuando todos los r_k son iguales ($r_k = r$, para $k = 1, 2, \dots, K$), la matriz $\mathbf{\Omega}_t$ tiene la siguiente expresión:

$$\mathbf{\Omega}_t = \frac{r}{2-r} \left[1 - (1-r)^{2t} \right] \mathbf{\Sigma} \quad (2.13)$$

cuya expresión es análoga a la varianza del EWMA univariante. Los límites de control y los parámetros de ajuste necesarios para implementar el gráfico MEWMA, dependen del cambio en el vector de medias que se pretende detectar, del ARL bajo control y de las K variables a monitorizar (Kulahci y Borrór 2008). Se dará una señal de fuera de control cuando:

$$Q_t^2 = \mathbf{w}_{t+1}^{*T} \mathbf{\Omega}_t^{-1} \mathbf{w}_{t+1}^* > H \quad (2.14)$$

donde el límite de control H , se elige para alcanzar un determinado ARL bajo control.

Los gráficos de control MEWMA al igual que sus análogos univariantes son robustos frente al incumplimiento de la hipótesis de normalidad, si están diseñados adecuadamente.

Lowry *et al.* (1992) muestran que, dependiendo del tipo de proceso y de los cambios que se desean detectar, este gráfico multivariante, aunque es simple de construir, funciona igual de bien o incluso mejor que algunos gráficos MCUSUM, tales como el de Croisier 1988 -no el COT- y Pignatiello y Runger (1990). Estas comparaciones están basadas en el ARL.

Bersimis *et al.* (2007) han realizado una extensa revisión de varios tipos de gráficos de control MEWMA, con diferentes propósitos, como por ejemplo, para tratar observaciones

multivariantes dependientes del tiempo, o para monitorizar cambios en la variabilidad del proceso.

Aunque las herramientas expuestas en estos apartados son de gran utilidad, su utilización requiere disponer de más observaciones que de variables, y que no existan datos faltantes. Estos supuestos no son habituales en los procesos industriales actuales, donde las características comunes que presentan las bases de datos disponibles son: grandes dimensiones, colinealidad, ruido y datos faltantes.

En estos enfoques clásicos, las variables de proceso no se tienen en cuenta para la monitorización, y solo son empleadas para tratar de identificar las causas especiales de variabilidad cuando se ha detectado una salida de control en los gráficos de control de las variables de calidad. Además, tampoco tienen en cuenta que los pocos parámetros de calidad que se miden no definen completamente la calidad del producto, es decir, que las anomalías que ocurren en el proceso pueden afectar a la calidad del producto aunque las variables de calidad medidas no lo reflejen. Se puede concluir, por tanto, que la limitación más importante del SPC clásico para la monitorización de los modernos procesos industriales es el desaprovechamiento de la mayor parte de la información que se registra.

2.2.9 MSPC basado en variables latentes

Como ya se ha comentado, los enfoques vistos hasta ahora resultan a menudo inadecuadas en procesos industriales modernos, ya que en la actualidad los sensores son relativamente baratos, lo que permite situar centenares de ellos en los procesos, registrando de forma rutinaria medidas de un gran número de variables (caudales, temperaturas, presiones, etc.) con frecuencias de muestreo que pueden llegar a ser de milisegundos. Esto provoca una sobreabundancia de datos con información redundante (altamente correlacionados), al registrar un número de variables muy superior al número de fenómenos subyacentes independientes que dirigen el proceso en cada instante. De manera que, las medidas de las variables de proceso son, simplemente, diferentes reflejos de dichos fenómenos subyacentes. Esto se puede expresar afirmando que la dimensión del proceso es mucho menor que el número de variables registradas en cada observación. Además, cuando se presentan incidentes especiales en el proceso, estos afectan tanto a las

magnitudes de variación de las variables como a las relaciones existentes entre las mismas. Estos eventos son a menudo difíciles de detectar estudiando sólo la magnitud de cada variable de proceso independientemente de las demás, debido a que el ratio señal ruido suele ser muy pequeño en cada variable, por tratarse de datos registrados en condiciones reales de fabricación.

Los métodos en variables latentes permiten monitorizar un gran número de variables de proceso y de producto. Presentan las ventajas de ser capaces de abordar aquellas situaciones en las que aparecen datos faltantes, así como matrices de grandes dimensiones mal condicionadas. Estas técnicas permiten sintetizar toda la información contenida en una base de datos en unas pocas variables no observables (variables latentes) que explican gran parte de la variabilidad de las variables originales (variables observables que han sido medidas), y de las relaciones que existen entre las mismas. En el nuevo subespacio creado de menor dimensión (definido por las variables latentes), es posible utilizar la técnicas de control estadístico de procesos, mediante la aplicación de los gráficos de control a las variables latentes.

Los gráficos de control basados en estos métodos son simples, fáciles de entender por los operarios, y han sido ampliamente aceptados en las salas de control (Kourti 2009). Tienen mejores capacidades de detección de fallos que los gráficos de control univariantes, porque permiten detectar antes la aparición de un fallo. Y lo más importante, detectan problemas que se manifiestan como cambios en la estructura de covarianza de las variables, cuyos gráficos de control univariante no señalarían, si las variables permaneciesen dentro de su límites univariantes de operación (ver figura 2.2). La metodología basada en las variables latentes también proporciona herramientas de diagnóstico que ayudan a los operarios a determinar rápida y eficientemente el origen del problema.

Venkatasurbramanian *et al.* (2003) han realizado una revisión en tres partes de las técnicas de detección y diagnóstico de fallos, en la que se discute los (i) métodos cuantitativos basados en modelos, (ii) los modelos cualitativos y estrategias de búsqueda, y (iii) métodos basados en datos históricos del proceso. Los métodos de detección de fallos basados en las variables latentes entran dentro de la última categoría, porque usan bases de datos históricas para estimar los modelos empíricos y establecer los límites normales de operación. Las diferencias entre los métodos basados en variables latentes y los enfoques basados en modelos causales se discuten en Yoon y MacGregor (2000).

La metodología basada en las variables latentes explota la principal característica de estas bases de datos: aunque contengan medidas de un gran número de variables (cientos), éstas están altamente correlacionadas entre sí y, en realidad, la dimensión real del espacio en el que se mueven es de reducidas dimensiones. Normalmente sólo se producen unas cuantas perturbaciones o cambios independientes del proceso, y todas las medidas almacenadas de las variables del proceso, son diferentes manifestaciones de estas pocas dimensiones subyacentes. En los métodos en variables latentes la presencia de correlación antes de ser una desventaja, como ocurre con otros métodos estadísticos, se explota para el control del proceso, modelándose la estructura de correlación del espacio del proceso. Estos métodos además son extremadamente útiles cuando existen datos perdidos y cuando cada variable individual contiene poca información debido al bajo ratio señal/ruido, lo que es habitual en las bases de datos históricas industriales. Los últimos 15 años han visto un notable incremento del interés en la aplicación de los métodos estadísticos multivariantes en estructuras latentes a la detección y diagnóstico de fallos en la industria, que se ha visto reflejado en numerosas publicaciones de aplicaciones industriales y de desarrollo de patentes. (Golshan, *et al.* 2010, Kourti 2005a, 2005b y 2006, MacGregor *et al.* 2009 y 2015 y Miletic *et al.*, 2004).

PCA

Cuando se mide un gran número de variables, frecuentemente se presentan correlaciones entre ellas. Entonces la matriz Σ de varianzas-covarianzas (necesaria para el cálculo del estadístico χ^2 , de la ecuación (2.3)) es casi singular. Ante esta situación resulta útil el *Análisis de Componentes Principales*, (*Principal Component Analysis*, PCA), el cual fue formulado por primera vez en estadística por Pearson en 1901, quien definió este tipo de análisis como la “búsqueda de líneas y planos de mejor ajuste a un sistema de puntos en el espacio”. Debido a su versatilidad el PCA es conocido bajo diferentes nombres, como son “descomposición en valores singulares (SVD) en el campo del control automático que es como se le llama comúnmente en análisis con métodos numéricos, o *Eigenvector* en ciencias físicas”. El PCA, es un procedimiento para reducir la dimensión del espacio de las variables, que permite representarlo con unas pocas variables ortogonales entre sí (inacorreladas) que capturan la mayoría de la variabilidad. Estas nuevas variables son combinaciones lineales de las variables originales, y se

calculan de tal forma que la primera es la que más variabilidad explica en el sistema, la segunda explica, la siguiente mayor cantidad de variabilidad y así sucesivamente. Unas pocas componentes principales, en adelante CP, pueden explicar un alto porcentaje de la variabilidad total. Geométricamente puede describirse como una proyección de los datos originales sobre un hiperplano distinto, el de las componentes principales. Esta transformación pone en evidencia las relaciones entre las distintas variables que componen la matriz.

El PCA, consiste en descomponer un matriz de datos para poner de manifiesto los fenómenos subyacentes. Por tanto, una suposición básica del PCA es el hecho de que las direcciones de mayor varianza están en cierta medida relacionadas con dichos fenómenos subyacentes. Esta técnica permite analizar la estructura de correlación de las variables y también identificar patrones en los datos, como tendencias, agrupaciones y datos anómalos.

El análisis de componentes principales ha encontrado aplicación en numerosas disciplinas (análisis estadístico, compresión de datos, etc.). En control de procesos, la técnica PCA se ha utilizado ampliamente para la detección y aislamiento de perturbaciones (Ku et al. 1995), monitorización basada en control estadístico (Nomikos and MacGregor 1995, MacGregor y Kourti 1995), detección y diagnóstico de fallos (Rotem *et al.* 2000, Haiqing *et al.* 2000) y modelado y control de procesos multivariados (Huang *et al.* 1997), ya que permite fácilmente la extensión de los principios de la monitorización estadística de procesos a procesos multivariados.

El punto de partida de un análisis PCA es la matriz de datos $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ con N filas (observaciones) y K columnas (variables). Las observaciones pueden ser muestras analíticas, individuos biológicos, pruebas de un diseño de experimentos, lotes de un proceso por lotes o, como en nuestro caso, muestras en distintos instantes de tiempo de un proceso continuo. Las variables son medidas de propiedades que caracterizan las observaciones, tales como atributos, longitudes de onda, parámetros químicos o físicos, respuestas biológicas, medidas de sensores en un proceso (temperaturas, caudales, presiones, etc.).

El modelo PCA transforma la matriz de observaciones $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ según la siguiente expresión:

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}^T = \sum_{k=1}^K \mathbf{t}_k \mathbf{p}_k^T \quad (2.15)$$

A la matriz $\mathbf{T} \hat{\in} \mathbb{R}^{N \times K}$ se le llama matriz de *scores*, porque sus filas son los vectores de coordenadas de cada una de las observaciones en el hiperplano definido por el modelo PCA. Las columnas de la matriz \mathbf{T} , $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \dots, \mathbf{t}_K$, son los vectores de *scores* de cada una de las CP, que pueden ser vistas como nuevas variables. A la matriz $\mathbf{P} \hat{\in} \mathbb{R}^{K \times K}$ se le llama matriz de pesos, y la componen los vectores de pesos ($\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_K$) que definen las direcciones sobre las que se están proyectando las observaciones. Estas direcciones están poniendo de manifiesto la contribución de las variables originales a la formación de cada una de las CP, a las que les dotan de un posible significado. Los vectores muestrales \mathbf{p}_k son los vectores propios de la matriz de varianzas-covarianzas (esta matriz se estima en la práctica a partir de los datos, como $(n-1)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X}$, estando la matriz \mathbf{X} de datos centrada) correspondientes a los valores propios λ_i , que a su vez son las varianzas de las CP ($\text{var}(\mathbf{t}_a) = \lambda_a$). La primera CP se define como la combinación lineal $\mathbf{t}_1 = \mathbf{X}\mathbf{p}_1$ que tiene la máxima varianza sujeta a $|\mathbf{p}_1| = 1$. La segunda CP es la combinación lineal definida por $\mathbf{t}_2 = \mathbf{X}\mathbf{p}_2$ que tiene la siguiente mayor varianza sujeta a $|\mathbf{p}_2| = 1$ y con la condición de estar incorrelada (ortogonal) con la primera CP (\mathbf{t}_1) y así se definen hasta K posibles CP, todas ellas ortogonales entre sí.

La transformación PCA es dependiente de la escala de medida, de manera que si las variables que forman la matriz \mathbf{X} difieren en orden de magnitud (v.g., la temperatura en el rango 100-200 °C y la viscosidad en el rango 0.1-0.2 P), entonces la primeras CP están dominadas por las variables numéricamente más grandes. Para evitar esto la matriz \mathbf{X} tiene que ser escalada. La forma más habitual de hacerlo es escalando todas las variables a varianza unidad, lo que significa que el cálculo de las CP se lleva a cabo sobre la matriz de correlaciones en vez de sobre la de varianzas-covarianzas. También resulta conveniente centrar las variables, restándoles su propia media, ya que con ello se favorece la interpretación del modelo, al tener todas las variables preprocesadas a media cero.

Cuando el número de variables es elevado y presentan correlaciones entre ellas, el algoritmo NIPALS desarrollado por Wold (1966) resulta idóneo para el cálculo de las CP

de forma secuencial (este algoritmo se describirá en el Capítulo 4 y más detalladamente en el Capítulo 5).

En la práctica, rara vez es necesario calcular todos los posibles K valores propios, ya que la mayor parte de la variabilidad en los datos se recoge en las primeras CP. Reteniendo únicamente A componentes, la matriz \mathbf{X} se descompone de la siguiente forma por:

$$\mathbf{X} = \sum_{a=1}^A \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a^T + \mathbf{E} = \mathbf{TP}^T + \mathbf{E} \quad (2.16)$$

de manera que \mathbf{X} se aproxima por: $\hat{\mathbf{X}} = \sum_{a=1}^A \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a^T$, que es la predicción de \mathbf{X} a partir del modelo con A componentes. En esta expresión \mathbf{p}_a son los vectores de pesos que definen las direcciones principales de máxima varianza en el espacio \mathbf{X} . Estas direcciones determinan un subespacio de menor dimensión (A) que el espacio original. Esta dimensión se escoge de manera que no exista información importante de \mathbf{X} en \mathbf{E} que es la matriz de residuos, y que por tanto representa el ruido. En la figura 2.4 se representan gráficamente las matrices del modelo PCA.

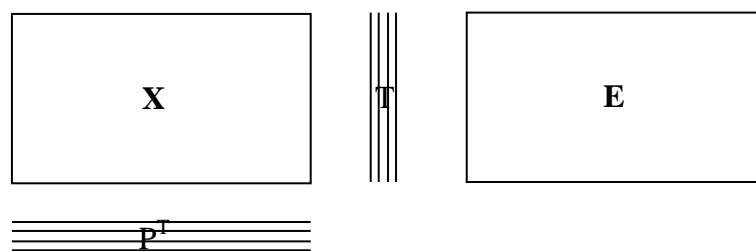


Figura 2.4 Matrices del modelo PCA

El número de componentes a incluir en el modelo PCA es una cuestión importante. Tiene que ser tal que, el modelo, además de proporcionar una representación adecuada de las variaciones sistemáticas existentes en los datos, tenga la máxima capacidad de predicción. Este número puede determinarse por varios métodos, siendo el de validación quizás el más apropiado cuando se pretende utilizar, como es este caso, el modelo PCA para predecir, ya que está basado en maximizar la capacidad de predicción. A su vez,

existen diversas variantes de la técnica de validación cruzada. La usada en esta tesis ha sido la propuesta por Wold (1976 y 1978) y modificada por Eastment y Krzanowski (1982) y éste último (1987). Estos últimos autores proponen una forma de descartar observaciones de la matriz \mathbf{X} , basada en la correspondencia entre el análisis de componentes principales y la descomposición en valores singulares de \mathbf{X} . El método se basa en predecir las observaciones que sucesivamente se van descartando de \mathbf{X} eliminando su correspondiente fila y su correspondiente columna, con el modelo PCA obtenido a partir de la matriz $\mathbf{X}^{(-i)}$, es decir sin la observación i , con la finalidad de utilizar la máxima información recogida en los datos. Una revisión de las técnicas de validación cruzada se puede encontrar en Bro *et al.* (2008). Estos autores evalúan y comparan las técnicas más importantes de validación cruzada, además de sugerir dos nuevas alternativas que son combinaciones de las propuestas por Wold y, Eastment y Krzanowski con el algoritmo de la maximización de la verosimilitud propuesto por Dempster *et al.* (1977), que pueden funcionar bien en la mayoría de circunstancias, pero sobre todo cuando hay pocas variables y pocas muestras.

La T^2 de Hotelling puede expresarse en términos de las CP de las variables (Kourti y MacGregor 1996) como:

$$T_A^2 = \sum_{a=1}^A \frac{t_a^2}{\lambda_a} = \sum_{a=1}^A \frac{t_a^2}{s_{t_a}^2} \quad (2.17)$$

PLS

Puede utilizarse también un modelo PLS y diseñar gráficos de control basados en él para monitorizar el proceso. La estrategia de control es similar al caso del PCA. La diferencia es que una salida de control detectada con un modelo PLS indicará que se ha producido un cambio en las variables de proceso que afectará a la calidad del producto. El PLS se utiliza frecuentemente cuando se desea predecir los valores de variables de calidad que no se pueden medir *on-line* y que son necesarios para controlar el proceso. Ambas técnicas se llaman métodos proyectivos porque la información inicial se proyecta sobre un espacio de menor dimensión que el original.

El PLS es un método de proyección en estructuras latentes mediante mínimos cuadrados parciales, presentado por Herman en los años 70 (Wold 1973), y perfeccionado por Svante Wold y Harald Martens en los años 80 (Wold *et al.* 1984). Asimismo, existe una gran cantidad de literatura relacionada con el tema (Bro 2009, Burnham *et al.* 1996, Geladi y Kowalski 1986, Höskuldsson 1988, Kresta *et al.* 1991, Wold, *et al.* 2009).

La obtención del modelo parte de un conjunto de datos históricos del proceso, consistente en una matriz $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ de medidas de variables del proceso y su correspondiente matriz $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times M}$ de medidas de calidad del producto. Las ecuaciones del modelo son (Kourti 2002 y 2006, Kourti y MacGregor 1996):

$$\mathbf{X} = \sum_{a=1}^A \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a^T + \mathbf{E} = \mathbf{TP}^T + \mathbf{E} \quad (2.18)$$

$$\mathbf{Y} = \sum_{a=1}^A \mathbf{u}_a \mathbf{c}_a^T + \mathbf{F} = \mathbf{UC}^T + \mathbf{F} \quad (2.19)$$

donde $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{N \times A}$ y $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times A}$ son matrices de coordenadas (*scores*) de las observaciones en las variables latentes, $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{K \times A}$ y $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{M \times A}$ son matrices de pesos (*loadings*) que indican cómo las variables latentes están relacionadas con las variables originales $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ e $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times M}$, $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ y $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{N \times M}$ son matrices de errores residuales (ver figura 2.5).

El modelo PLS parte de que los datos tanto en el espacio del proceso como en el espacio del producto se observan con error. La dimensión A del espacio de las variables latentes que, como se ha dicho anteriormente, se determina por validación cruzada o cualquier otro método, suele ser en realidad bastante pequeña. Efectivamente, se reduce la dimensión del problema mediante la proyección de los espacios \mathbf{X} e \mathbf{Y} , sobre el espacio \mathbf{T} de las variables latentes, el cual contiene la información más relevante. Trabajando en este espacio de las variables latentes de reducidas dimensiones ($\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \dots, \mathbf{t}_A$), los procedimientos de análisis del proceso, monitorización y control, y optimización se puede simplificar enormemente.

De la matriz $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ de observaciones de las variables del proceso y de la matriz $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times M}$ de observaciones de las variables de calidad del producto correspondientes, se extraen las variables latentes que expliquen la mayor variabilidad posible de los datos del proceso \mathbf{X} y que resultan lo más predictivas posibles de las variables de calidad del

producto, \mathbf{Y} . En este caso, el número de componentes significativas suele ser bastante menor. PLS es un método (o en realidad una clase de métodos) que logra este objetivo trabajando sobre la matriz de varianzas-covarianzas $\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T\mathbf{X}$. El algoritmo NIPALS se describirá detalladamente en el apartado 4.10 del Capítulo 4. La primera variable latente PLS, $\mathbf{t}_1 = \mathbf{X}\mathbf{w}_1$ es una combinación lineal de las variables x_k que maximiza la covarianza entre \mathbf{t}_1 y el espacio \mathbf{Y} . El primer vector de pesos \mathbf{w}_1 es el primer vector propio de la matriz $\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T\mathbf{X}$. Una vez que la primera componente ha sido calculada, las columnas de \mathbf{X} son proyectadas sobre \mathbf{t}_1 para dar un vector de regresión $\mathbf{p}_1 = \mathbf{X} \mathbf{t}_1 / \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1$ y la matriz \mathbf{X} es reducida (es decir los valores predichos $\hat{\mathbf{X}}$ por el modelo formado por \mathbf{t}_1 , \mathbf{w}_1 , y \mathbf{p}_1 se restan de los valores \mathbf{X} originales) para dar los residuos $\mathbf{X}_2 = \mathbf{X} - \mathbf{t}_1 \mathbf{p}_1^T$. Del mismo modo, se hace una regresión de las columnas de \mathbf{Y} sobre \mathbf{t}_1 y se obtiene \mathbf{q}_1 que es el primer vector de pesos en el espacio latente de \mathbf{Y} y a continuación se reduce \mathbf{Y} , $\mathbf{Y}_2 = \mathbf{Y} - \mathbf{t}_1 \mathbf{q}_1^T$. Entonces se calcula la segunda componente a partir de los residuos $\mathbf{t}_2 = \mathbf{X}_2 \mathbf{w}_2$, donde \mathbf{w}_2 es el primer vector propio de la matriz $\mathbf{X}_2^T \mathbf{Y}_2 \mathbf{Y}_2^T \mathbf{X}_2$, y así sucesivamente. Como ocurre en PCA los vectores de *scores* ($\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \dots$) y los vectores de pesos ($\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots$) son ortogonales.

El PCA sólo modela espacios simples (\mathbf{X} o \mathbf{Y}) obteniendo las variables latentes que explican la máxima varianza. PLS maximiza la covarianza entre \mathbf{X} e \mathbf{Y} (es decir la varianza explicada tanto de \mathbf{X} como de \mathbf{Y} , que a su vez es la que mejor explica las correlaciones entre \mathbf{X} e \mathbf{Y}).

Existen otros métodos proyectivos como el PCR (*Principal Component Regression*), que es un método de regresión derivado del PCA consiste en realizar una regresión lineal múltiple entre las componentes significativas de la matriz \mathbf{X} y cada una de las variables respuesta de la matriz \mathbf{Y} , si son pocas e independientes, o bien en caso contrario con cada una de las componentes de la matriz \mathbf{Y} (Massy 1965). La regresión de Rango Reducido (RRR) o Análisis de Redundancia, maximiza la varianza de \mathbf{Y} y la correlación entre \mathbf{X} e \mathbf{Y} . La Regresión de Correlaciones Canónicas (CCR), maximiza únicamente la correlación entre \mathbf{X} e \mathbf{Y} . Una discusión de todos estos métodos puede encontrarse en Burnham *et al.* (1996). La elección del método depende de los objetivos concretos de cada caso, pero sin embargo todos ellos tienen en común que conducen a una reducción sustancial de las dimensiones del espacio original. Los métodos que modelan la variación tanto en el espacio \mathbf{X} como en el espacio \mathbf{Y} (PLS y PCR) son excelentes candidatos para aplicaciones tales como monitorización de procesos, diagnóstico y aislamiento de fallos (Kourti 2002), control automático en el espacio de las variables latentes (Golshan *et al.*

2010, Kourti 2006, Laurí *et al.* 2010 y Laurí *et al.* 2010, MacGregor, *et al.* 2009) o para el tratamiento de datos faltantes (Nelson *et al.* 1996, Arteaga y Ferrer 2002 y 2009, García-Muñoz *et al.* 2004).

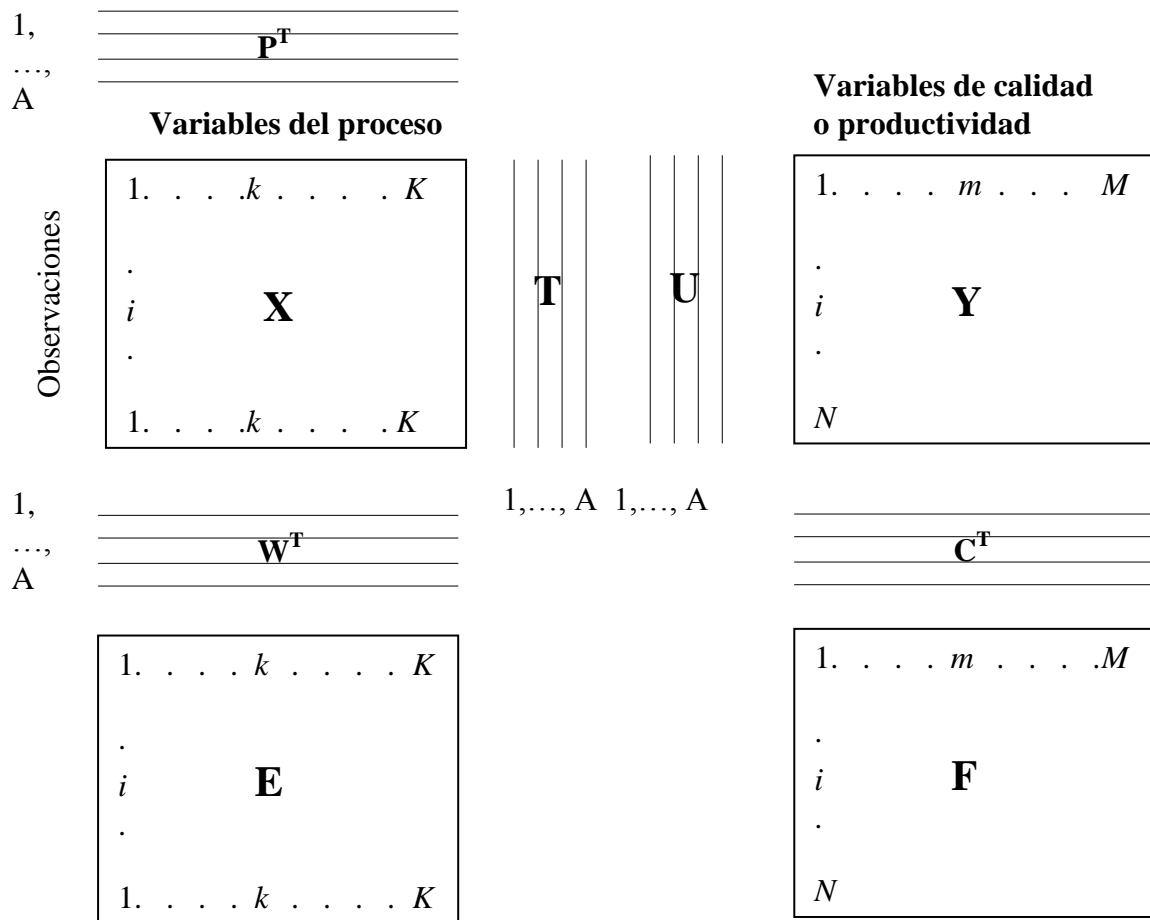


Figura 2.5 Representación gráfica de las matrices de relaciones PLS. Los *scores* PLS están almacenados en las matrices \mathbf{T} y \mathbf{U} , los *loadings* de \mathbf{X} en \mathbf{P} , los pesos de \mathbf{X} en \mathbf{W} , los *loadings* de \mathbf{Y} en \mathbf{C} . La variación residual está contenida en las matrices residuales \mathbf{E} y \mathbf{F} .

2.2.10 Gráficos de control basados en variables latentes

Los gráficos de control multivariante basados en las variables latentes, constituyen hoy en día una herramienta muy útil en el control de procesos industriales de los que se pueden obtener cantidades masivas de datos midiendo muchas variables.

Estos gráficos se pueden construir tanto para monitorizar un grupo de variables respuesta \mathbf{Y} (variables de calidad del producto), como para monitorizar un grupo de variables explicativas \mathbf{X} (variables de proceso). Sin embargo, una ventaja importante de estos métodos es la posibilidad de monitorizar variables explicativas teniendo en cuenta

su efecto sobre las variables respuesta. Para ello, se puede estimar un modelo del proceso que relacione X e Y a partir de datos históricos o recogidos convenientemente del proceso, y construir gráficos de control en los que representar valores futuros de X , lo que permite monitorizar el proceso incluso cuando todavía no se dispone de medidas de calidad, Y .

Hasta hace poco los métodos de control estadístico de calidad (SQC *Statistical Quality Control*) descritos en la literatura estadística, han puesto el énfasis en monitorizar unas cuantas variables de calidad (Y) (Kourti 2002). Sin embargo las variables del proceso (X), se miden con mayor frecuencia que las de calidad, además de que normalmente hay un mayor número de ellas medibles. Por lo tanto, es esperable que la monitorización de las variables de proceso proporcione mucha más información y más frecuentemente sobre el estado del proceso que la monitorización de las variables de calidad. De aquí que, el auténtico control de procesos (SPC) tiene que tener en cuenta también todas estas variables. Cualquier situación anómala que se produzca, dejará su huella en estos datos, hará que sea más fácil el diagnóstico de la causa del problema y permitirá actuar con anticipación puesto que se trata directamente con las variables de proceso. Por el contrario, los gráficos de monitorización de las variables de calidad solo indican que las propiedades del producto no son consistentes con las especificaciones, sin revelar cuáles son las variables de proceso responsables de ello.

Otra ventaja de monitorizar las variables de proceso reside en que para ciertas etapas del proceso no se dispone de medidas de variables de calidad, puesto que la calidad del producto se evalúa en una etapa posterior. Por ejemplo, en la preparación de un catalizador que intervendrá en una reacción de polimerización se determina la calidad del mismo a posteriori, según el funcionamiento que tenga en el proceso de polimerización. Sin embargo, sería útil conocer de antemano si el catalizador funcionará correctamente produciendo bien el producto, antes de usarlo, monitorizando las variables del proceso de preparación, con un gráfico de variables latentes que proporcionaría una detección anticipada de una eventual calidad deficiente del producto final.

Además pueden existir características del producto que no se controlen y que influyan en la aceptabilidad final del mismo. En estos casos, los datos del proceso podrían contener información sobre causas especiales que afectan a estas variables de calidad del producto no manifiestas. Por ejemplo, medir únicamente la viscosidad de un polímero y que las aplicaciones finales del mismo dependan también de la estructura química (ramificaciones moleculares, composición, concentraciones finales, etc.).

Para monitorizar unas cuantas variables de calidad se han usado normalmente los gráficos de control multivariantes vistos anteriormente (T^2 de Hotelling, MCUSUM, etc.). Estos gráficos se pueden seguir aplicando en la monitorización de unas pocas variables de proceso. Sin embargo, si el número de estas variables es muy grande, aparecen problemas en el cálculo de la T^2 de Hotelling, porque las variables suelen estar altamente correlacionadas y en consecuencia la matriz Σ mal condicionada. Usando la ecuación (2.17) para el cálculo, se tiene:

$$T^2 = \sum_{k=1}^K \frac{t_k^2}{\lambda_k} = \sum_{k=1}^K \frac{t_k^2}{s_{t_k}^2} = \sum_{k=1}^A \frac{t_k^2}{s_{t_k}^2} + \sum_{k=A+1}^K \frac{t_k^2}{s_{t_k}^2} \quad (2.20)$$

Cada *score* al cuadrado, t_k^2 se escala multiplicándolo por el recíproco de su varianza, llevándolos de este modo todos a la misma escala. Así, cada CP juega el mismo papel en el cálculo de la T^2 con independencia de la cantidad de varianza que explique de la matriz de variables originales \mathbf{X} . Las últimas CP ($k > A+1$) se dividen por valores propios muy pequeños, y como consecuencia pequeñas desviaciones en su valor (muchas veces debidas a errores de redondeo) dan lugar a importantes cambios en la T^2 . Si estas CP, las cuales explican muy poca varianza de \mathbf{X} , y que generalmente representan ruido aleatorio, se usan para el cálculo de T^2 , podrían generar falsas señales de falta de control.

Usando únicamente las primeras A CP importantes para el cálculo de T^2 ,

$$T_A^2 = \sum_{k=1}^A \frac{t_k^2}{\lambda_k} = \sum_{k=1}^A \frac{t_k^2}{s_{t_k}^2} \quad (2.21)$$

se elimina este efecto distorsionante de las últimas CP de pequeño valor de varianza.

En el desarrollo de procedimientos MSPC basados en métodos proyectivos, se aplica la misma filosofía que en los demás gráficos de control descritos. Se elige un conjunto de datos de referencia del proceso que definan las condiciones operativas normales, se omite de este conjunto cualquier observación que contenga variación debida a cualquier suceso especial, y se construye un modelo PCA o PLS a partir de estos datos. La elección de este conjunto de datos de referencia es crucial para el buen funcionamiento del procedimiento.

Monitorización con PCA

Si se está interesado en desarrollar un gráfico sobre un conjunto de variables $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{N \times J}$ (\mathbf{Z} puede ser el conjunto de variables explicativas \mathbf{X} o espacio del proceso, o las variables respuesta \mathbf{Y} o espacio de calidad del producto) se puede usar un modelo PCA. A partir del conjunto de datos de referencia se estima este modelo,

$$\hat{\mathbf{Z}} = \sum_{a=1}^A \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a^T \quad (2.22)$$

y se construye el gráfico de control basado en dicho modelo. El gráfico T^2 de Hotelling tiene un límite de control superior, cuyo procedimiento de cálculo se detalla en el siguiente apartado. El futuro comportamiento del proceso, se contrastará respecto a este modelo bajo control, mediante la proyección sobre el mismo de las nuevas observaciones que se vayan generando. Se calcula la varianza de los *scores*, $s_{t_a}^2 (= \lambda_a)$ para cada componente, que junto a la matriz de pesos $\mathbf{P}_A = [\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_A]$ se utilizará para futuros cálculos de monitorización. Dada una nueva observación multivariante $\mathbf{z}_t \in \mathbb{R}^{J \times 1}$ se calculan sus *scores* en las A componentes y los residuos asociados, mediante las siguientes expresiones:

$$\mathbf{t}_a = \mathbf{p}_a^T \mathbf{z}_t \quad a \in [1 \dots A]; \quad \mathbf{e}_t = \mathbf{z}_t - \hat{\mathbf{z}}_t \quad (2.23)$$

donde $\hat{\mathbf{z}}_t = \mathbf{P}_A \mathbf{t}_A$, \mathbf{t}_A es el vector de *scores* para cada instante de control t , y $\mathbf{P}_A \in \mathbb{R}^{J \times A}$ es la matriz de pesos. A partir de estos cálculos se obtiene la correspondiente T_A^2 con la siguiente ecuación:

$$T_A^2 = \mathbf{t}_A^T \mathbf{\Theta}^{-1} \mathbf{t}_A = \sum_{a=1}^A \frac{t_a^2}{\lambda_a} = \sum_{a=1}^A \frac{t_a^2}{s_{t_a}^2} \quad (2.24)$$

donde $\mathbf{\Theta} \in \mathbb{R}^{A \times A}$ es la matriz de varianzas de la matriz $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{N \times A}$ de *scores* del modelo NOC-PCA. Si se monitoriza \mathbf{z}_t utilizando la T_A^2 , se detectará si la variación de las

variables Z en el hiperplano de las A primeras CP es o no más grande que la variación explicada por las causas comunes, lo cual siendo importante, no es suficiente. Se podría presentar un evento especial que cambiara la estructura de covarianza entre las variables Z respecto a la habida en condiciones normales de operación. Entonces, es necesario también monitorizar los residuos \mathbf{e}_t para detectar si el ruido presente en el sistema en el instante t es similar o no al existente en el periodo de funcionamiento normal del proceso correspondiente a la construcción del modelo. El error cuadrático de predicción de una nueva observación (*Squared Prediction Error*, SPE) se calcula según la expresión:

$$\text{SPE}_{z_t} = \sum_{j=1}^J e_{t,j}^2 = \sum_{j=1}^J (z_{t,j} - \hat{z}_{t,j})^2 = \mathbf{e}_t^T \mathbf{e}_t = (\mathbf{z}_t - \hat{\mathbf{z}}_t)^T (\mathbf{z}_t - \hat{\mathbf{z}}_t) \quad (2.25)$$

donde $e_{t,j}$ es el error de predicción de la variable j en la observación \mathbf{z}_t , $z_{t,j}$ es el valor de de la variable original j en la observación \mathbf{z}_t y $\hat{z}_{t,j}$ su valor predicho por el modelo PCA con las A componentes retenidas. La expresión vectorial del SPE se muestra en las dos últimas igualdades, donde \mathbf{e}_t es el vector de errores, \mathbf{z}_t el vector de valores de las variables originales en dicha observación, y $\hat{\mathbf{z}}_t$ su predicción a partir del modelo PCA con las A CP extraídas. Mide por tanto la contribución a esta observación de las $(J-A)$ CP que no se han utilizado. A este estadístico se le llama estadístico Q (Jackson 1991) o distancia al modelo, ya que representa la distancia euclídea (perpendicular) al cuadrado de la nueva observación multivariante al hiperplano definido por las A CP del modelo. Permiten detectar las anomalías que no respetan la estructura de covarianza del modelo en condiciones normales de funcionamiento. Cuando el proceso está bajo control estadístico, SPE_{z_t} debe estar dentro de los límites de control calculados según se describirá en el siguiente apartado.

Es también frecuente utilizar la distancia al modelo (DModX) en lugar del SPE. Se trata de un parámetro proporcional al SPE,

$$\text{DMod X} = \sqrt{\frac{\text{SPE}}{gl_{res}}} \quad (2.26)$$

siendo gl_{res} los grados de libertad residuales.

Por lo tanto, un procedimiento muy eficaz de monitorización de un proceso de naturaleza multivariante es utilizar simultáneamente un gráfico de control T_A^2 basado en las primeras A CP ($\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \dots, \mathbf{t}_A$) y un gráfico SPE.

Monitorización con PLS

Cuando se dispone de datos históricos tanto de \mathbf{X} como de \mathbf{Y} , se puede estimar un modelo PLS entre \mathbf{X} e \mathbf{Y} , a partir del cual calcular los *scores* \mathbf{t} en el espacio \mathbf{X} , sus respectivas varianzas ($s_{t_a}^2 = \lambda_a$) y los pesos, \mathbf{w} y \mathbf{p} . Para monitorizar el proceso, se calculan los nuevos *scores* de cada observación nueva $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{K \times 1}$ \mathbf{x} :

$$\mathbf{t}_a = \mathbf{w}_a^T \mathbf{x}_a$$

$$\text{donde } \mathbf{x}_a = \begin{cases} \mathbf{x} & a = 1 \\ \mathbf{x}_a = \mathbf{x}_{a-1} - \mathbf{t}_{a-1} \mathbf{p}_{a-1} & a \in [2, \dots, A] \end{cases}$$

Como en el caso anterior, el control estadístico multivariante se lleva a cabo construyendo un gráfico T_A^2 sobre las primeras A variables latentes y un gráfico $\text{SPE}_{\mathbf{x}}$ en el que llevar el estadístico:

$$\text{SPE}_{\mathbf{x}} = (\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})^T (\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}) = \sum_{k=1}^A (x_k - \hat{x}_k)^2 \quad (2.27)$$

donde $\hat{\mathbf{x}}_t = \mathbf{P}_A \mathbf{t}_A$. Al igual que con en el método PCA, con el gráfico T_A^2 se detectará si la variación de las variables \mathbf{x} en el hiperplano de las A primeras CP es o no más grande que la variación explicada por las causas comunes, y con el gráfico $\text{SPE}_{\mathbf{x}}$ se detectarán eventos que provoquen que el proceso se salga del hiperplano definido por el modelo de referencia.

Los dos gráficos de control multivariantes (T_A^2 y $\text{SPE}_{\mathbf{x}}$) son conceptualmente diferentes. En realidad son dos índices complementarios que proporcionan de un vistazo una imagen del funcionamiento de un proceso (Kourti 2005). El gráfico T_A^2 comprueba si la proyección de una observación sobre el hiperplano definido por el subespacio latente

está dentro de los límites determinados por el conjunto de datos de referencia (bajo control). Por lo tanto, un valor de este estadístico que exceda los límites de control indica que la correspondiente observación anómala presenta un valor extremo en alguna (o en todas) de las K variables originales, aunque mantenga la estructura de correlación entre las variables del modelo. Esta observación puede ser considerada como un valor anómalo (*severo o extremo*) dentro del modelo PLS (Martens y Naes 1989).

Por el contrario, el gráfico SPE_x comprueba si la distancia (variabilidad del ruido) de una observación al hiperplano latente está dentro de los límites de control. Los valores del gráfico SPE que exceden los límites de control están relacionados con observaciones que no se comportan de la misma forma que las que se han usado en la creación del modelo de referencia, en el sentido de que hay una rotura de la estructura de correlación de dicho modelo. En consecuencia este gráfico detectará la aparición de cualquier acontecimiento nuevo que hace que el proceso se aleje del hiperplano definido por el modelo. Este tipo de observaciones pueden ser considerados como valores anómalos fuera modelo (anómalo *ajeno o moderado*) (Martens y Naes 1989).

Los anómalos severos son observaciones influyentes sobre las propiedades del modelo, es decir, con un fuerte poder de atraer las direcciones principales del modelo hacia ellas mismas, creando componentes ficticias en el modelo PCA (Eriksson *et al.* 2001). Debido a esto, la *validación del modelo* de referencia es muy importante, siendo necesario eliminar de la matriz de datos estos anómalos que son tan peligrosos (observaciones fuera de control) para después recalcularse el modelo PCA (Ferrer, 2009). Sin embargo, antes de eliminar cualquier observación sospechosa de la matriz de datos se debe comprobar si realmente es una observación fuera de control o es una falsa alarma. Para ello, además del conocimiento técnico del proceso se pueden emplear técnicas diagnósticas tales como los gráficos de contribución (se explican más adelante). Este proceso de construcción y validación del modelo se realiza iterativamente hasta que los gráficos de control multivariante no señalen ningún anómalo *verdadero*. Como consecuencia de este proceso de depuración, se pueden descubrir las causas de las observaciones que están fuera de control, lo que mejora el conocimiento y el funcionamiento del proceso. Sin embargo debe ser enfatizado que el modelo construido para la monitorización únicamente modela las causas comunes de variación, no las causas de la variación (Kourti 2009). Los conceptos principales que están detrás del desarrollo y uso de los gráficos multivariantes basados en las variables latentes para monitorizar procesos continuos, se trazaron al principio de los años 90 (Kourti 2004, Kourti y MacGregor 1996, Kresta *et al.* 1991,

Wise *et al.* 1991, Skägerberg *et al.* 1992). En estas publicaciones también se presentan aplicaciones prácticas de los métodos proyectivos y los algoritmos y detalles de estimación de los límites de control.

Cálculo de los límites de control de los gráficos T_A^2 y SPE

El gráfico T_A^2 de Hotelling (tanto para PCA como para PLS) tiene un LCS dependiente del número A de primeras CP. Los *scores* t_a son combinaciones lineales de las variables originales. Si estas variables se distribuyen normalmente entonces los *scores* se distribuirán normalmente. Cuando las variables originales no se distribuyan normalmente, los *scores* (siendo combinaciones lineales de estas variables) se distribuirán aproximadamente según una normal multivariante en virtud del teorema central del límite. De aquí se deriva que T_A^2 siga una distribución F de Snedecor (Tracy *et al.* 1992 Kourti y MacGregor 1996),

$$T_A^2 \sim \frac{A(N^2 - 1)}{N(N - A)} F_{A, (N - A)} \quad (2.28)$$

donde N es el número de observaciones tomadas para construir el modelo de referencia y diseñar el gráfico de control.

El valor del LCS viene dado por:

$$T_{A, LCS}^2 = \frac{(N^2 - 1)A}{N(N - A)} F_{\alpha, (A, N - A)} \quad (2.29)$$

donde $F_{\alpha, (A, N - A)}$ es el percentil $100(1 - \alpha)\%$ de una distribución F con $(A, N - A)$ grados de libertad.

Para la monitorización del SPE, es necesario determinar su LCS. En la bibliografía se han propuesto distintas aproximaciones para caracterizar las pautas de variabilidad del SPE, basadas en los resultados aproximados de la distribución de las formas cuadráticas. Box (1954) demostró que una distribución chi-cuadrado ponderada, $g\chi_h^2$, en la que el factor de ponderación (g) y los grados de libertad (h) dependen de los valores propios de

la matriz de varianzas-covarianzas de los residuos, es una buena aproximación de la distribución del SPE. El límite de control para el SPE se obtendría ajustando una distribución chi-cuadrado ponderada a la distribución de referencia del SPE que se obtiene del conjunto de datos empleados en la construcción del modelo. Nomikos y MacGregor (1995) emplean la aproximación de Box para el cálculo de los límites de control en cada instante de tiempo de un proceso por lotes, estimando los parámetros de la distribución chi-cuadrado por el método de los momentos, igualando la media y varianza muestrales del SPE (m, v) a la media y varianza de la distribución chi-cuadrado ponderada ($\mu = gh, \sigma^2 = 2g^2h$). El límite de control superior del SPE, para un riesgo de primera especie α sería:

$$\text{LCS}(\text{SPE}_\alpha) = \frac{v}{2m} \chi_{(2m^2/v), \alpha}^2 \quad (2.30)$$

donde $\chi_{2m^2/v, \alpha}^2$ es el percentil $(1-\alpha)\%$ de una distribución chi-cuadrado con $2m^2/v$ grados de libertad.

Otra forma muy utilizada para estimar los parámetros de la distribución chi-cuadrado ponderada es la aproximación de Jackson y Mudholkar (1979), cuya expresión para el límite de control viene dada por:

$$\text{LCS}(\text{SPE})_\alpha = \theta_1 \left[\frac{z_\alpha \sqrt{2\theta_2 h_0^2}}{\theta_1} + 1 + \frac{\theta_2 h_0 (h_0 - 1)}{\theta_1^2} \right]^{1/h_0} \quad (2.31)$$

donde los parámetros $\theta_i = \sum_{a=A+1}^K (\lambda_a)^i$ dependen de los valores propios λ_a de las CP que no han sido retenidas en el modelo PCA, z_α es el percentil $(1-\alpha)\%$ de una normal tipificada y h_0 es una función de los parámetros θ_i , y que se calcula según la siguiente expresión:

$$h_0 = 1 - \frac{2\theta_1\theta_3}{3\theta_2^2} \quad (2.32)$$

En Nomikos y MacGregor (1995), los autores emplean la aproximación de Jackson y Mudholkar (1979) para establecer el límite de control superior, no de un instante de tiempo concreto, sino de una observación completa. Para la estimación de los coeficientes θ_i utilizan la siguiente expresión:

$$\theta_i = \text{traza}(\mathbf{V}^i); \quad \mathbf{V} = \frac{\mathbf{E}^T \mathbf{E}}{I-1} \quad (2.33)$$

donde \mathbf{V} es la matriz de varianzas-covarianzas de los residuos, e I es el número de observaciones (lotes de referencia).

El método propuesto por Eriksson *et al.* (2001) basado en el test estadístico de comparación de varianzas en poblaciones normales ha sido el empleado en esta tesis. Estos autores definen la distancia absoluta al modelo (DModX) de una observación, como su desviación típica corregida:

$$\text{DModX} = c \sqrt{\frac{\text{SPE}}{(K-A)}} \quad (2.34)$$

donde c es el factor de corrección (función del número de observaciones N del modelo de referencia y del número de componentes A) que se necesita en la Fase I. En esta fase, la DModX de una observación perteneciente al conjunto de referencia se espera que sea ligeramente inferior, porque ha participado en la estimación del modelo. Esta corrección únicamente se tiene que tener en cuenta si el número de observaciones en el conjunto de referencia es pequeño. En la Fase II, c es 1. Estos autores, definen también la distancia al modelo absoluta normalizada (DModX_{norm}) como:

$$\text{DModX}_{\text{norm}} = \frac{\text{DModX}}{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K e_{ik}^2}{(N-A-1)(K-A)}}} = \frac{\text{DModX}}{s_0} \quad (2.35)$$

donde s_0 es la desviación típica residual conjunta. Asumiendo que el estadístico (DModX_{norm})² sigue una distribución F con $(K-A)$ y $(N-A-1)(K-A)$ grados de libertad para

las observaciones bajo control, el LCS para el gráfico SPE para un nivel de significación α se expresa como:

$$\text{LCS(SPE)}_{\alpha} = \frac{K-A}{c^2} s_0^2 F_{(K-A, (N-A-1)(K-A)), \alpha} \quad (2.36)$$

donde $F_{(K-A, (N-A-1)(K-A)), \alpha}$ es el percentil 100(1- α)% de la correspondiente distribución F .

La hipótesis de normalidad asumida en la que están basados todos estos cálculos es bastante razonable en la práctica. No obstante, también es posible obtener los límites de control de los gráficos multivariantes, por métodos de remuestreo de distribución libre. El único requerimiento es disponer de un conjunto de datos de referencia suficientemente grande del que poder extraer una distribución de referencia externa para cualquier estadístico (Box *et al.* 2005).

Diagnóstico de fallos y gráficos de contribución

En el control de calidad clásico en el que sólo se controlan las variables de calidad, corresponde a los operadores e ingenieros de proceso tratar de diagnosticar la/s causa/s de una señal de falta de control, utilizando su conocimiento del proceso e inspeccionando una a una las variables involucradas. Cuando se utilizan modelos PCA o PLS para construir los gráficos de control multivariantes, éstos adicionalmente proporcionan al usuario herramientas para diagnosticar las causas asignables. Es posible obtener gráficos de diagnóstico o de *contribución* (Miller *et al.* 1993, MacGregor *et al.* 1994) a partir del modelo en las variables latentes para el punto en el que se ha detectado una salida de control. Estos gráficos de *contribución* revelan el grupo de variables con mayores contribuciones a las desviaciones en el SPE_x y a las de los *scores*. A pesar de que estos gráficos no diagnostican inequívocamente las causas, proporcionan una idea de los posibles orígenes del problema detectado y, por tanto restringen en gran medida la búsqueda.

Contribuciones al SPE

Cuando se detecta en el gráfico SPE una situación de falta de control, la contribución de cada variable original al SPE de esta observación anómala, es sencillamente su correspondiente residuo al cuadrado:

$$\text{Cont}(\text{SPE}; x_k) = (x_k - \hat{x}_k)^2 \quad (2.37)$$

siendo x_k el valor de la variable original k para una nueva observación y \hat{x}_k su valor predicho a partir del modelo PCA o PLS. En el caso de emplear como estadístico la distancia al modelo DModX, la contribución de cada una de las k variables originales al mismo, viene dada por (Eriksson *et al.* 2001):

$$\text{Cont}(\text{DModX}; x_k) = w_k (x_k - \hat{x}_k) \quad (2.38)$$

donde w_k es la raíz cuadrada de la suma de cuadrados explicada por la variable k -ésima. Las variables con una contribución elevada deberían ser investigadas para aislar las variables originales responsables de la supuesta salida de control y diagnosticar el origen del problema.

Contribuciones a la T_A^2 de Hotelling

Si una observación nueva x_k se sale de los límites de control en el gráfico T_A^2 de Hotelling, el procedimiento de diagnóstico se lleva a cabo en dos pasos:

- (i) Se analizan los *scores* normalizados $(t_a/s_{t_a})^2$ de dicha observación y se seleccionan aquellos que tengan los valores más altos.
- (ii) Se calculan las diferentes contribuciones de las k variables originales a cada uno de los *score* “ a ” seleccionados y se representan en un gráfico de *contribuciones*. La contribución de cada variable al *score* de la componente a viene dado por:

$$\begin{aligned}\text{Cont}(t_a; x_k) &= p_{ak} (x_k - \bar{x}_k) \quad \text{para PCA} \quad \text{y} \\ \text{Cont}(t_a; x_k) &= w_{ak} (x_k - \bar{x}_k) \quad \text{para PLS}\end{aligned}\quad (2.39)$$

donde p_{ak} y w_{ak} son los pesos de la variable k en la CP $a \in [1, \dots, A]$, y \bar{x}_k es su valor medio (el cual es cero para variables centradas). Las variables que en este gráfico aparezcan con las contribuciones más altas y que además tengan el mismo signo que el *score* son las que tienen que ser investigadas (las contribuciones con signo opuesto al *score* en realidad harán que el *score* sea más pequeño).

Si hay R *scores* con valores elevados, Kourti y MacGregor (1996) sugieren calcular una “contribución promedio global” por cada variable k a los R *scores*, como se muestra a continuación:

1. Repetir para todos los R *scores* con valor elevado ($R \leq A$).

Calcular la contribución de la variable x_k al *score* normalizado al cuadrado $(t_a/s_{t_a})^2$:

$$\text{Cont}\left(\frac{t_a}{s_{t_a}^2}; x_k\right) = \frac{t_a}{s_{t_a}^2} p_{ak} (x_k - \bar{x}_k) \quad (2.40)$$

Si la contribución es negativa igualarla a cero (signo opuesto al signo del *score*).

2. Calcular la contribución total de la variable k : $\text{CONT}_k = \sum_{a=1}^R (\text{cont}_{a,k})$
3. Investigar variables con contribuciones totales elevadas

Los gráficos de contribución de las variables proporcionan una potente herramienta para la identificación de fallos. Sin embargo, el usuario debe tener cuidado a la hora de interpretarlos. En general, este enfoque señalará a una variable o a un conjunto de ellas que contribuyen *numéricamente* a la señal de falta de control (variables que no son consistentes con las condiciones normales de operación); estas variables y las variables altamente correlacionadas con ellas deben ser investigadas para asignar las causas. La función de los gráficos de contribución en el aislamiento de fallos, es indicar qué variables están relacionadas con el fallo, pero no revelan la causa real del mismo. A veces, la causa de un fallo no es una variable medida en sí misma. Las variables con

elevadas contribuciones no son más que la firma que dejan en ellas, este tipo de fallos (Kourti 2002). La incorporación del conocimiento técnico del proceso es fundamental para diagnosticar el problema y descubrir las causas del mismo (Ferrer 2009).

Además de los gráficos T_A^2 y SPE, existen otros basados también en las variables latentes, que pueden ser útiles (en ambas fases I y II) como los gráficos univariantes de series temporales para los *scores* o los gráficos de dispersión de los *scores*, permiten también detectar y diagnosticar situaciones de falta de control y también para mejorar el conocimiento del proceso.

2.3 ¿QUÉ OCURRE CUANDO SE MONITORIZAN PROCESOS AUTOCORRELACIONADOS?

En el diseño y empleo de los gráficos de control, se asume que las observaciones se distribuyen normalmente y son estadísticamente independientes, siendo esta última una hipótesis clave en las propiedades estadísticas de estos. Sin embargo, esta suposición es frecuentemente violada en muchos procesos industriales modernos, ya que, dado los grandes avances que ha habido en la tecnología de los sensores, las medidas se toman con mucha frecuencia. Así, aunque en la industria de piezas (automóvil, electrónica, etc.) tradicionalmente esta hipótesis ha sido razonable en la práctica, razón por la cual los gráficos de control han resultado excelentes herramientas para mantener los procesos bajo control estadístico, sin embargo, con el desarrollo explosivo de las nuevas tecnologías que facilitan la automatización de los procesos, es habitual encontrar dispositivos que proporcionan en un entorno CIM (*Computer Integrated Manufacturing*) información sobre cada pieza fabricada, o sobre parámetros operativos del proceso (v.g. presión del circuito hidráulico del brazo del robot que debe taladrar la pieza) con mucha frecuencia, no pudiendo aceptarse como válida la hipótesis de independencia en los datos (Keats y Hubele 1991, Keats y Montgomery 1991). Esto mismo ocurre, por otra parte, en las industrias de procesos con procedimientos de fabricación en continuo o por lotes, típicos de sectores como el petroquímico o el farmacéutico, donde es frecuente la existencia de autocorrelaciones entre medidas sucesivas.

La presencia de correlación no debe interpretarse como una causa especial de variabilidad, sino como parte del sistema de causas comunes intrínseco al proceso en

cuestión, consecuencia de la presencia de elementos como flujo de materias primas, tanques de almacenamiento, reactores, reflujos, condiciones ambientales, etc. con tiempos de residencia o dinámicas (inercias) mayores que la frecuencia de muestreo. Por ejemplo, si en un proceso de fabricación de polietileno mediante un reactor en lazo, las moléculas de etileno tienen un tiempo de residencia en el reactor de unas cuatro horas y se toma una muestra del reactor cada hora, hay moléculas que han coexistido en el reactor en varias tomas de muestra, por lo que es esperable encontrar correlaciones entre muestras consecutivas (Capilla *et al.* 1999). En general todos los procedimientos de fabricación presentan cierta inercia frente a la acción de parámetros ambientales, el cambio de materias primas o al ajuste de sus condiciones operativas, por lo que un aumento de la frecuencia de muestreo puede llegar a generar la aparición de autocorrelación entre observaciones cercanas en el tiempo.

Diversos autores han estudiado el comportamiento de los gráficos de control en presencia de autocorrelación (Bagshaw y Johnson 1975, Capilla 1991, Constable y Yen 1991, Goldsmith y Whitfield 1961, Harris y Ross 1991, Johnson y Bagshaw 1974, Knoth *et al.* 2009, Lu y Reynolds 1999a, 1999b, 2001, Maragah y Woodall 1992, Ramos *et al.* 2012, Vanhatalo y Kulahci 2014, 2015; Vasilopoulos y Stamboulis 1978).

Dado el avance en la tecnología de los sensores, la toma de datos es muy frecuente, por lo que si el intervalo de tiempo entre muestras es menor que la dinámica del proceso aparece autocorrelación positiva que es la más frecuente en la práctica industrial. Las observaciones cercanas en el tiempo tenderán a ser similares. Esto aumenta el número de falsas alarmas, ya que disminuye notablemente la longitud media del recorrido (*average run length*, ARL) bajo control, o número promedio de muestras tomadas hasta que se produce una señal de fallo, estando el proceso sin presencia de ningún fallo (Goldsmith y Whitfield, 1961, Lu y Reynolds 1999a, 1999b, 2001, Maragah y Woodall 1992). Esto provoca la sensación de que el proceso está permanentemente fuera de control, lo que no se corresponde con la realidad y suele conducir a un sobreajuste del proceso y al abandono posterior de su uso como herramienta de mejora. La justificación de estos resultados se encuentra en la modificación que sufre la varianza del estadístico que se grafica cuando se calcula a partir de observaciones correlacionadas. Con correlación positiva la varianza estimada a partir de las observaciones como si éstas procedieran de una variable distribuida idéntica e independientemente (*i.i.d.*) y que se asume en el diseño y la construcción del gráfico, es menor que la que realmente es (v.g. para un proceso

AR(1) con $\phi=0,7$, la desviación típica de la media muestral con tamaño de agrupamiento $n=5$ es casi el doble que en el caso independiente, σ/\sqrt{n}). Adicionalmente, la aplicación de recorridos móviles para estimar la desviación típica mediante la expresión $R/d_2(n)$ subestima la σ real de la población, puesto que las diferencias entre medidas consecutivas son, en general, más pequeñas que en el caso de independencia. Esto provoca una subestimación importante de la amplitud real de los límites de control. Junto con esta frecuencia elevada de falsas alarmas, los gráficos de control también pueden mostrar escasa potencia para detectar ciertas salidas de control del proceso (v.g. con correlación positiva, un salto brusco entre dos observaciones consecutivas, que con datos independientes no tendría por qué considerarse una señal de falta de control, puede indicar la aparición de una causa especial de variabilidad no detectada por el gráfico de control). En este caso aumenta el ARL fuera de control.

El fenómeno contrario se produce en el caso de que la correlación sea negativa. En este caso la sobrestimación de la varianza real provoca unos límites de control innecesariamente amplios que, aunque bajo control reducen el porcentaje de falsas alarmas, merman la sensibilidad de los gráficos para detectar cambios reales en el proceso.

Este mal comportamiento de los gráficos de control estándar en presencia de autocorrelación ha motivado en las últimas décadas, un gran interés científico por desarrollar nuevas estrategias de monitorización eficientes en procesos con dinámica, que permitan detectar la presencia de causas especiales de variabilidad cuando la autocorrelación en los datos forma parte de las causas comunes, pero eliminando los problemas de frecuentes falsas alarmas o escasa potencia que plantean los gráficos de control tradicionales en este contexto.

Hasta la fecha se han propuesto varias soluciones. Una consiste en la modificación de los parámetros de diseño y las reglas de interpretación de los gráficos de control estándar (Shewhart, CUSUM y EWMA) para compensar el efecto de la correlación sobre sus propiedades estadísticas (Alwan 1992, Han y Tsung 2005, Liu *et al.* 2003, Luceño y Box 2000, Schmid 1995, Timmer y Pignatiello 2003, VanBrackle y Reynolds 1997, Vasilopoulos y Stamboulis 1978, Winkel y Zhang 2004. Si el nivel de autocorrelación no es alto, este método puede funcionar bien en la práctica.

Otra posible solución (Berthouex *et al.* 1978) consiste en filtrar la serie de observaciones mediante el modelo ARIMA (p, d, q) más adecuado (Box *et al.* 1994) y a continuación llevar un gráfico de control de la serie de residuos del modelo. Si éste está bien ajustado, los residuos o errores de predicción a un paso (diferencia entre el valor observado en el instante t y el predicho por el modelo en $t-1$) están incorrelacionados, por lo que pueden utilizarse los gráficos de control estándar. La figura 2.6 ilustra este enfoque. Alwan y Roberts (1988) proponen llevar en paralelo al gráfico de control de los residuos, otro gráfico, sin incluir límites de control, de las predicciones del modelo. El primer gráfico llamado SCC (*Special Cause Chart*) sirve para detectar la presencia de causas especiales de variabilidad, mientras que el segundo llamado CCC (*Common Cause Chart*) refleja las causas comunes, grafica la trayectoria suavizada del proceso y puede facilitar la interpretación de las salidas de control detectadas en el gráfico de los residuos. También puede añadirse en este segundo gráfico las observaciones originales con el fin de tener información de lo que está pasando en cada instante en el proceso. Montgomery y Mastrangelo (1991) y Montgomery (2005), sugieren estimar la predicción aplicando un alisado exponencial, EWMA, a la serie original. El procedimiento en este caso también consiste en llevar dos gráficos en paralelo. Uno es el gráfico de control de los residuos del modelo (errores de predicción a un paso), el otro es un gráfico de la serie original sin límites de control, en el que se incluyen las predicciones EWMA con sus límites de control correspondientes. Teóricamente el EWMA es la predicción óptima a un paso de un modelo IMA (1,1) (Box *et al.* 1994), por lo que la propuesta de Montgomery sólo debe aplicarse cuando el modelo IMA(1,1) se ajuste bien a los datos observados. Sin embargo, en la práctica este modelo puede considerarse razonable en muchos procesos con correlación positiva y donde la media no fluctúe demasiado rápidamente. En este sentido algunos autores (Box y Kramer 1992; Box y Luceño 1997a; MacGregor 1988) consideran que el modelo IMA(1,1) es en procesos continuos correlacionados, el equivalente al modelo Normal tradicionalmente utilizado en las industrias de piezas con baja frecuencia de muestreo con relación a los elementos inerciales y, por tanto, con observaciones independientes. Se han sugerido y estudiado, un número adicional de señales de falta de control, que parecen mejorar el funcionamiento del método (Mastrangelo y Montgomery 1995).

En la década de los 90 aparecieron en la bibliografía muchos trabajos de investigación sobre las propiedades estadísticas de los gráficos de los residuos del modelo ARIMA

ajustado o SCC, comparándolas con las de los gráficos tradicionales en presencia de autocorrelación (Faltin *et al.* 1997, Lin y Adams 1996, Lu y Reynolds 1999a, y 1999b, Padgett *et al.* 1992, Runger *et al.* 1995, Superville y Adams 1994, Vander Wiel 1996, Wardell *et al.* 1994, Zhang 1997, 1998). Los gráficos de control de residuos, básicamente consisten en un test de hipótesis, son fáciles de implementar, pero siempre adolecen de poseer una ventana de oportunidad muy estrecha cuando el proceso subyacente está positivamente autocorrelacionado, debido al efecto de recuperación producido por las predicciones (Vander Wiel 1996). La ventana de oportunidad estrecha se refiere al fenómeno de que si un fallo no se detecta inmediatamente después de haberse producido, la predicción se adapta al cambio. Lo que quiere decir que pueden pasarse por alto cambios en el proceso. Zhang (1997) demostró que en el caso univariante el gráfico Shewhart basado en los residuos no tiene las mismas propiedades que el mismo gráfico de las observaciones originales para datos independientes. Mientras que el gráfico de los residuos tiene una mayor probabilidad de detectar un fallo en el primer punto representado tras el cambio de la media, la detección en las observaciones futuras depende de la estructura de autocorrelación, potencialmente responsable de la excesiva demora en detectar una señal de falta de control. Cuando las direcciones de los cambios se conocen *a priori* se puede mejorar la eficiencia del gráfico teniendo en cuenta el patrón de salidas de control esperado, mediante el test de la razón de verosimilitud generalizado (GLRT) introducido en Vander Wiel 1996 y en Apley y Shi 1999, para reducir los problemas producidos por la estrecha ventana de oportunidad. Se realiza un test de hipótesis multivariante basado en los residuos, asumiendo diferentes tiempos de ocurrencia de las salidas de control. En las investigaciones mencionadas no se ha encontrado una combinación de gráficos que tenga un comportamiento óptimo en un amplio rango de situaciones. En general, los gráficos CUSUM o EWMA de los residuos muestran un comportamiento mejor que los gráficos Shewhart para detectar ciertos cambios en la media de procesos con inercia. Sin embargo, en presencia de una elevada correlación positiva, todos los gráficos de residuos manifiestan una clara incapacidad para detectar rápidamente cambios sostenidos en la media del proceso, puesto que su ARL fuera de control es muy elevado. Además, este enfoque utiliza modelos que como se sabe son solo aproximaciones, de manera que el esquema de monitorización será sensible a los errores de estimación en los parámetros (Adams y Tseng 1998, Jones *et al.* 2001, Lu y Reynolds 1999a).

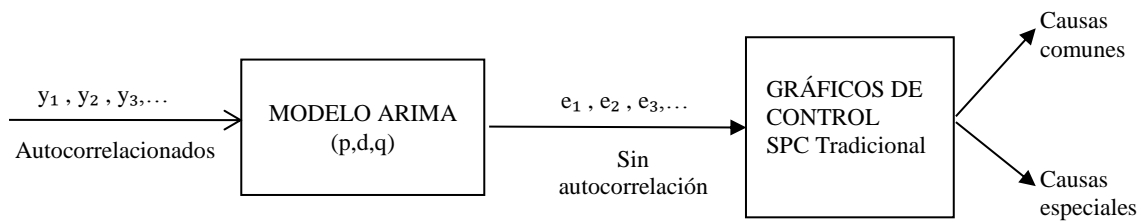


Figura 2.6 Monitorización de datos autocorrelacionados mediante modelos ARIMA.

El hecho de disponer de grandes volúmenes de datos en los procesos, no solo hace que aparezca frecuentemente autocorrelación, sino también violaciones de la normalidad (asimetría y curtosis). La mayoría de los métodos SPC para datos autocorrelacionados suponen que la distribución de las características de calidad son normales, al menos aproximadamente. Cuando, como en este caso, se preblanquean los datos, esta violación tiene consecuencias adversas en el funcionamiento de los gráficos, porque conlleva un aumento de las falsas alarmas y en consecuencia la dificultad para detectar salidas de control rápidamente. Varios autores han estudiado este problema. Castagliola 2000 propone el método SWV (*scaled weighted variance*), de distribución libre y no paramétrico para datos con fuerte asimetría y que puede usarse para gráficos de residuos. El mismo autor en 2001 propone un método para procesos simétricos pero con curtosis positiva, que transforma los datos para normalizarlos, utilizando los sistemas de distribuciones de Johnson (1949). Castagliola y Tsung (2005) estudian el impacto de la asimetría y de la curtosis en los gráficos de residuos y proponen cómo modificar los métodos convencionales, para que sean más robustos frente a la asimetría y la curtosis que excedan unos límites tolerables, con un enfoque SWV, que llaman gráficos SWV-SCC. Wang (2005) estudió el caso en que los datos estuviesen negativamente correlacionados, proponiendo una transformación para convertirlos en positivamente correlacionados. Snoussi *et al.* (2005) probaron que el estadístico Q introducido por Quensberry (1991) en conjunción con los gráficos de control de residuos era una herramienta apropiada para datos autocorrelacionados a corto plazo.

Otro método interesante propuesto por Jiang *et al.* (2000) para monitorizar un proceso autocorrelacionado es el gráfico ARMA. En lugar de filtrar la autocorrelación usando un modelo ARMA, un procedimiento que tiende a enmascarar los cambios que se desea

detectar, estos autores proponen un gráfico ARMA que busca amplificar la señal que se quiere detectar filtrando la serie, pero con un filtro lineal que por sus propiedades espectrales (dominio de las frecuencias) haga que únicamente se observen en la serie resultante las frecuencias altas. La idea es usar un filtro de paso alto que eliminará la autocorrelación positiva, correspondiente a las frecuencias bajas, dejando ver mejor los cambios que se quieren detectar. El problema es que los cambios repentinos o poco frecuentes también se eliminarán, de manera que detectarlos en la serie filtrada será muy difícil, a menos que la magnitud del cambio sea muy grande. También se hace uso de estas propiedades espectrales cuando se pretende estimar la función de correlación cruzada entre x_t e y_t (la variable manipulada y la variable controlada), como se verá más adelante. La propia autocorrelación de la serie x_t puede enmascarar la correlación cruzada entre x_t e y_t . Por ello es necesario preblanquear x_t para alisar su espectro. La aplicación de técnicas de procesamiento de señales a la monitorización de datos autocorrelacionados puede ser una fructífera área de investigación.

Otra solución al problema del SPC con datos correlacionados, iniciada por Krieger *et al.* (1992), consiste en transformar las variables unidimensionales autocorrelacionadas en vectores multivariantes y entonces usar gráficos de control multivariantes para monitorizar procesos univariantes. Chan y Li (1994) y Charnes (1995) presentaron extensiones de los gráficos Shewhart multivariantes que tenían en cuenta tanto la autocorrelación dentro del proceso como la correlación cruzada entre variables. El método de Alwan y Alwan (1994), modificado por Apley y Tsung (2002), consiste en construir en cada instante t , a partir de la serie univariante de datos autocorrelacionados, un vector multivariante de dimensión p constituido por una ventana móvil de p observaciones consecutivas $\mathbf{x}_t = \{x_{t-p+1}, x_{t-p+2}, \dots, x_t\}$ a partir del cual graficar el estadístico T^2 de Hotelling (Hotelling 1947):

$$T_t^2 = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_0)' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_0) \quad (2.41)$$

donde $\boldsymbol{\mu}_0 = (\mu_0, \mu_0, \dots, \mu_0)$ es el vector media del proceso bajo control estadístico y \mathbf{V}^{-1} es la matriz de covarianzas del vector \mathbf{X}_t . Apley y Tsung (2002) denominan este gráfico como T^2 autorregresivo y comparan el ARL de este gráfico con el de los gráficos CUSUM y Shewhart de los residuos suponiendo diferentes modelos ARMA(1,1). El gráfico T^2

autorregresivo funciona mejor que los gráficos de los residuos en la detección rápida de cambios moderados y elevados de la media del proceso, y es más robusto frente al incremento de falsas alarmas que se producen cuando existen errores de especificación o estimación en el modelo.

Mason *et al.* (2003) estudiaron las condiciones del proceso que conducen a la aparición de ciertos patrones no aleatorios en el gráfico T^2 en el caso de datos autocorrelacionados. Finalmente, Jiang (2004) estudia las propiedades del gráfico T^2 autorregresivo cuando se tiene información sobre las salidas de control que se podrían producir, poniendo de manifiesto sus ineficiencias en ese caso, y propone un gráfico de control multivariante basado en el test de la razón de verosimilitud generalizado GLTR basado en las observaciones originales autocorrelacionadas, al que le llama gráfico GLTR de las observaciones, que es más eficiente detectando cambios pequeños y moderados que los anteriores, incluso si se producen fuera de la ventana de las p observaciones. Este gráfico está directamente relacionado con los gráficos GLTR de los residuos de Vander Wiel 1996, y de Apley y Shi 1999, mencionados anteriormente.

A menudo una sola característica no define la calidad global de un producto fabricado, sino que ésta depende más bien de múltiples propiedades, que además pueden estar interrelacionadas. Debido al espectacular avance de las nuevas tecnologías de la información y a la automatización de los procesos, en los entornos modernos de producción es posible obtener medidas simultáneas de muchas características y parámetros de los procesos. Sin embargo, la mayoría de los esquemas SPC que se aplican en la práctica están basados en llevar un gráfico o unos pocos gráficos de variables de calidad del producto o parámetros del proceso de una forma univariante. Estos enfoques, aunque efectivos en el pasado cuando los datos eran escasos, son totalmente inadecuados en los procesos modernos donde se recogen cantidades masivas de variables (Ferrer 2009). De aquí que en los últimos 20 años haya cobrado relevancia el MSPC. En estos casos, obviamente también está presente la autocorrelación.

Los gráficos multivariantes tradicionales (T^2 de Hotelling 1947, MEWMA Lowry *et al.* 1992, y MCUSUM Crosier 1988) también asumen que las observaciones representadas se distribuyen idéntica e independientemente según una distribución normal multivariante. En la literatura, como se ha descrito, ha sido suficientemente documentado cómo afecta la autocorrelación a los gráficos univariantes, sin embargo, cómo afecta la estructura de autocorrelación y de correlación cruzada al número de falsas alarmas y a la habilidad de

los gráficos multivariantes para detectar salidas de control de diferentes magnitudes, no ha sido suficientemente explorado. Vanhatalo y Kulahci (2014) comparan el funcionamiento del gráfico de control T^2 de medidas individuales para diferentes magnitudes de las salidas de control y para varias estructuras de autocorrelación y de correlación cruzada en base al ARL como medida de rendimiento usando datos simulados. Comparan tres posibilidades a la hora de construir el gráfico T^2 : (i) ignorar la autocorrelación y construir el gráfico tomando el límite superior teórico, representando las observaciones originales; (ii) ignorar la autocorrelación y representar las observaciones originales ajustando el límite, calculándolo mediante simulaciones de Montecarlo para que tenga el ARL bajo control (ARL_0) estándar de aproximadamente 370 observaciones en promedio entre dos falsas alarmas, que corresponde a una proporción de falsas alarmas de 0,0027; y (iii) ajustar los datos originales a un modelo de series temporales multivariante autorregresivo y construir un gráfico para representar los residuos de este modelo. Los resultados muestran claramente que ignorar la autocorrelación y usar un límite superior teórico, lleva a peores resultados y puede conducir a conclusiones erróneas respecto al ARL_0 que puede ser significativamente diferente al nominal y una baja capacidad de detectar salidas de control sobre todo a medida que aumenta la autocorrelación en los datos. Reconocen no obstante, que por encima de 5 variables estos gráficos no funcionan adecuadamente y es necesario recurrir a técnicas de reducción de la dimensionalidad, tales como el PCA. Ya que, además de estar presente la autocorrelación, es muy frecuente que las medidas simultáneas estén correlacionadas (correlación cruzada), porque existen unos pocos fenómenos latentes que usualmente dirigen el proceso en todo momento. Muchas de las variables medidas, son por lo tanto diferentes reflejos de un mismo hecho subyacente (MacGregor y Kourti 1995). Las técnicas multivariantes MSPC, ya sean en las variables originales, o en las variables latentes también se pueden usar con datos autocorrelacionados. Ku *et al.* (1995) y Kourti y MacGregor (1995) extendieron el uso de modelos PCA en la monitorización de procesos a datos correlacionados. Del mismo modo, Runger (1996) propuso un modelo PCA que permite la autocorrelación y la correlación cruzada en los datos. Mastrangelo *et al.* (1996) exploran el uso del PCA en procesos autocorrelacionados y Wilkstrom *et al.* (1998) aplican modelos ARMA en componentes principales.

En Psarakis y Papaleonida (2007) se puede encontrar una revisión bibliográfica detallada de las técnicas SPC para datos autocorrelacionados tanto univariantes como

multivariantes. Bersimis *et al.* (2007) presentan una revisión muy extensa de varios tipos de gráficos de control MEWMA usados con diferentes propósitos, uno de ellos puede aplicarse para datos multivariantes autocorrelacionados. Kalgonda y Kulkarni (2004) proponen un gráfico que denominan gráfico Z, para monitorizar un proceso modelado como un vector autorregresivo de primer orden (VAR(1)). Pan y Jarrett (2004, 2007a y 2012) ilustran cómo el gráfico multivariante T^2 de Hotelling se puede aplicar a los residuos procedentes de un modelo en el espacio de los estados así como a los de un vector autorregresivo (VAR). Básicamente se trata de una extensión del método de Alwan y Roberts al caso multivariante. Además Pan y Jarrett (2007b) muestran que el gráfico T^2 basado en los residuos de un modelo VAR no es capaz de discriminar entre cambios en la media y en la variabilidad. Proponen usar el gráfico W y el test de Portomanteau a los residuos del modelo VAR para monitorizar la variabilidad de un proceso multivariante autocorrelacionado. Snoussi (2011) propone usar una técnica multivariante de transformación de los residuos de un modelo VAR(1) para monitorizar datos autocorrelacionados. A su vez, Vanhatalo y Kulachi (2015) analizan el impacto que tiene la autocorrelación en las componentes principales y en su uso en el MSPC. Concluyen que la autocorrelación afecta a la capacidad descriptiva del PCA, ya que es necesario extraer mayor número de componentes para explicar la misma fracción de variabilidad. Cuando se usa el PCA con fines inferenciales en el MSPC la autocorrelación puede disminuir la capacidad de detección del gráfico, sobre todo cuando se presenta autocorrelación negativa, siendo el impacto de poca importancia cuando los cambios en la media son considerables.

Finalmente, una estrategia para tratar el problema de la autocorrelación, sería muestrear menos frecuentemente, para de esta manera reducirla. Pero este enfoque podría resultar no rentable si se deja pasar mucha cantidad de producto sin controlar entre la toma de muestras. Además de que, como se verá más adelante esto solo sería útil si el proceso fuese estacionario.

2.4 ¿POR QUÉ ES NECESARIA LA REGULACIÓN DE PROCESOS?

El APC básicamente consiste en regular los procesos en línea ajustando adecuadamente variables de proceso (variables compensatorias) con el objetivo de reducir la variabilidad alrededor de la consigna o trayectoria objetivo (*setpoint*) de variables de proceso a su vez, o de variables de calidad. Se basa en el uso de controladores. Por un controlador se entiende una regla, una función o un algoritmo que describe cómo se tiene que ajustar una variable compensatoria del proceso, llamada variable manipulada X_t , de observación en observación. Por ejemplo, para mantener constante la temperatura en el interior de un reactor se utilizan controladores (*feedback*) que manipulan el caudal de fluido refrigerante en el circuito de refrigeración. En la industria los controladores suelen implementarse de forma automática mediante sensores, controladores electrónicos y actuadores disponibles en el comercio. En las aplicaciones al control de calidad, en contraste, el controlador usualmente se implementa de forma manual por un operario (por ejemplo, introduciendo nuevos valores de operación en el dial de una máquina) cuando los datos de calidad están disponibles. Algunas veces el controlador actúa desde un pequeño ordenador y sus sugerencias se introducen manualmente en el equipo por un operador. Por supuesto que los controladores automáticos también se pueden usar en control de calidad, en forma de lazo cerrado (*closed-loop*), pero es preferible mantener un operador vigilando el “lazo” con autoridad para cambiar los valores recomendados por el controlador (como por ejemplo en la fabricación de semiconductores, ver Moyne *et al.* (2001)).

El APC aprovecha la estructura de autocorrelación del sistema para proporcionar mejores predicciones k pasos adelante, es decir \hat{y}_{t+k} . La acción de control se elige para que \hat{y}_{t+k} esté lo más cerca posible del nominal T (*target o setpoint*) en algún sentido. A la hora de determinar la estrategia de control adecuada es necesario distinguir si el objetivo es el contraste de la hipótesis estadística de que el proceso es estable (está sometido sólo a causas comunes de variabilidad) y la detección de señales en procesos contaminados con ruido (objetivos típicos de la estrategia de monitorización), o si lo que se pretende es la estimación estadística del valor de la perturbación actual que necesita ser compensada por el algoritmo de control (objetivo de la estrategia de regulación).

Hunter (1994) ilustra con un ejemplo cuándo se debe usar un esquema APC o cuando un esquema SPC. Considérese el siguiente modelo estocástico:

$$z_t = \phi z_{t-1} + v_t \quad (2.42)$$

$$y_t = z_t + a_t \quad (2.43)$$

donde $\{v_t\}$ y $\{a_t\}$ son secuencias de ruido blanco incorrelacionadas entre sí e y_t es la desviación respecto al nominal de la característica de calidad. La variable z_t no es directamente observable y modela el comportamiento dinámico de la desviación respecto al nominal (es decir, en este caso cómo cambia la media con el tiempo). Lo que se observa es el comportamiento dinámico sometido a los errores de medida dados por a_t . El parámetro ϕ determina la dinámica del proceso y está relacionado con el llamado *sistema dinámico de primer orden* de acuerdo a la relación:

$$\phi = \exp\left(\frac{-\Delta t}{T_c}\right) \quad (2.44)$$

donde Δt es el tiempo entre muestras. La variable T_c es la *constante de tiempo* del sistema dinámico, que aproximadamente es dos tercios del tiempo necesario para que el proceso alcance el estado estacionario o el nivel de z_t a largo plazo. Cuanto menor sea T_c más rápida es la dinámica del proceso (es decir, más rápido la característica de calidad reacciona a los cambios en la variable controlable). Claramente, si:

$$\Delta t \geq T_c \quad \text{entonces} \quad \phi \rightarrow 0 \quad y_t = v_t + a_t \equiv \varepsilon_t \quad (2.45)$$

que es justo el modelo de Shewhart. Esto significa que si la frecuencia de muestreo es baja respecto a la dinámica del proceso, el proceso observado no estará autocorrelacionado y los gráficos SPC funcionarán adecuadamente. Alternativamente, si:

$$\Delta t \ll T_c \quad \text{entonces} \quad \phi \rightarrow 1 \quad z_t = z_{t-1} + v_t \quad (2.46)$$

En este caso, $y_t = z_t + a_t$ es la suma de un paseo aleatorio y el error de medida. De aquí que muestreando con una frecuencia mucho mayor que la dinámica del proceso, da como resultado un proceso observado no estacionario, y el uso de las técnicas SPC será inapropiado. Sin embargo, un importante resultado del análisis de series temporales es que reduciendo la frecuencia del muestreo, un proceso no estacionario (v.g. un proceso con raíz unitaria en el polinomio AR (*Autoregressive*)), sigue siendo un proceso no estacionario aunque se observe y estime un proceso estacionario con parámetros diferentes MacGregor (1976). Reducir la frecuencia de muestreo con el propósito de aplicar el SPC, únicamente es útil si el proceso original es estacionario. Si en el modelo (2.43) el ruido observado $\{a_t\}$ (error de medida) domina sobre $\{z_t\}$ también será adecuado aplicar el SPC en lugar del APC.

2.4.1 ¿Cuándo se necesita ajustar un proceso?

Una razón importante que explica por qué las ideas de ingeniería de control no arraigaran en la comunidad de la ingeniería de la calidad, fue el mensaje confuso transmitido por Deming (1986, pp. 327-329) en su famoso experimento del embudo. Se deduce de este experimento que “los ajustes aplicados a un proceso que esté bajo control estadístico no pueden más que aumentar la variación global del proceso”. De este hecho, se deriva la filosofía clásica del SPC: “no ajustar a no ser que el proceso se salga de control”. Como señala MacGregor (1990) el efecto adverso de los ajustes se sostiene en que Deming asumió que toda la variación del proceso era aleatoria.

Consideremos este experimento en su análogo univariante, es decir, según un modelo de Shewhart (el proceso de las canicas que se lanzan por un embudo para que caigan en punto considerado objetivo que originalmente discutió Deming, obviamente es bivalente):

$$y_t = \mu + \varepsilon_t \quad \varepsilon_t \stackrel{i.i.d.}{\approx} N(0, \sigma) \quad t = 1, 2, \dots, \quad (2.47)$$

donde y_t es la desviación respecto al objetivo observada y μ es la desviación media respecto al objetivo. Deming asume en su experimento que $\mu = 0$, es decir que el proceso empieza en el objetivo y permanece en el mismo a menos que se haga un ajuste y, en segundo lugar, que si ε_t siguen una secuencia normal, idéntica e independientemente distribuida, las observaciones $\{y_t\}_{t=1}^{\infty}$ también la siguen de igual manera.

Sin embargo, si los datos están autocorrelacionados y se aplican los ajustes pertinentes, MacGregor (1990) demostró que la variación alrededor del valor objetivo, puede de hecho reducirse debido a estos ajustes activos (ver también Del Castillo (2002), sección 1.4). Por lo tanto, se argumenta que si la media del proceso cambia con el tiempo entonces los ajustes son necesarios; de otro modo no. Sin embargo, como afirma del Castillo (2006) “*una media móvil no es condición ni necesaria ni suficiente para que se requieran los ajustes*”. Incluso para un proceso incorrelacionado los ajustes pueden estar justificados. Por ejemplo, si el embudo está inicialmente fuera del objetivo, contrariamente a las asunciones de Deming, y el coste de estar fuera del objetivo es alto en relación al coste de los ajustes, una secuencia de ajustes para llevar el proceso a su consigna es óptima. En una publicación muy importante y a menudo olvidada, a pesar de haber sido reeditada en 1983, Grubbs 1954 (1983) asumió la condición de que la variación era aleatoria, pero no que en la puesta a punto el proceso estuviera en el objetivo. En la puesta en marcha del proceso $|\mu| = d \neq 0$, donde d es el error de puesta a punto. Si el único coste de interés es en el que se incurre cuando el proceso se ejecuta fuera del objetivo, entonces es evidente que la acción correctiva es necesaria. Cómo realizar esto, de tal manera que $\sum_{t=1}^N y_t^2$ sea mínimo se llama *Problema de ajuste en la puesta a punto* que ha sido estudiado por Colosimo *et al.* (2004), del Castillo (1998), Lian *et al.* (2005), Pan y del Castillo (2003 y 2004), Trietsch, (1998 y 2000). La media es constante, no hay correlación y en cambio se necesitan ajustes del proceso. Para ver una visión unificada de estos métodos y otros de control con retroalimentación ver del Castillo *et al.* (2003).

Como contraejemplo, consideremos el caso de un proceso con una ligera deriva en la media, pero de tal manera que todo el producto fabricado está dentro de las especificaciones (o no demasiado lejos del objetivo como para causar un coste sustancial) durante el ciclo de producción, y supongamos que el coste de los ajustes es relativamente grande. A continuación, se deduce que los ajustes no se justifican. En conclusión, la

necesidad de ajustes en el proceso depende del modelo de proceso y de la estructura de costes. Como señala del Castillo (2006), evidentemente, si todas las condiciones asumidas en el experimento del embudo de Deming se cumplen, es estrictamente óptimo desde el punto de vista del MMSE (*Minimum Mean Square Error*) no ajustar el proceso porque dichos ajustes aumentarán el MSE (*Mean Square Error*) respecto a su mínimo. Simplemente hay que monitorizar el proceso. Pero incluso en este caso, en el que estas condiciones se cumplen, Box y Luceño (1997a) demostraron ajustando el proceso de acuerdo a un controlador PI bien sintonizado, que el MSE aumenta muy poco y se asegura que si el modelo de Shewhart es erróneo y existen perturbaciones en forma de derivas o incluso de escalón, el controlador las compensará. El mensaje de Box es que los ajustes están justificados o no dependiendo de los costes involucrados, del modelo de series temporales, así como si el aumento de los costes es tolerable a cambio de la robustez alcanzada con respecto al modelo de perturbaciones.

2.5 METODOLOGÍA DEL CONTROL PREDICTIVO BASADO EN MODELOS

2.5.1 Principios básicos

Para la implementación de la componente MAPC (*Multivariate Automatic Process Control*) se ha empleado el Control Predictivo Basado en Modelos o *Model Based Predictive Control* (MBPC o MPC) multivariable. Desarrollado originalmente para resolver problemas específicos de control en plantas nucleares y refinerías, la tecnología de control multivariable se utiliza hoy en día en plantas químicas, sector alimentario, automóvil, metalurgia, industria papelera y otros entornos industriales. El MPC constituye un campo muy amplio de métodos de control desarrollados en torno a ciertas ideas comunes. Es una metodología de control en la que se integran diversas disciplinas, como control óptimo, control estocástico, control de procesos con tiempos muertos, control multivariable, o control con restricciones. El MPC más que un controlador concreto es una metodología para el cálculo de las acciones de control.

Se trata además de una técnica comprensible a nivel intuitivo, que en cierto modo, trata de reproducir el comportamiento de un operador experto en el control de un

determinado proceso. Los pasos que seguiría un operador experto para conseguir controlar un proceso serían:

1. El operador conoce bien el proceso y por tanto, sería capaz de predecir, con mayor o menor exactitud, cuál sería la evolución dinámica de las variables de salida si le aplica unas acciones de control determinadas.
2. El mismo operador puede además, decidir si esa evolución es adecuada en relación a los objetivos que se ha marcado. Es capaz, por tanto, de valorar las distintas combinaciones de las acciones de control en función del grado de cumplimiento de unas especificaciones.
3. Con todo esto, podría decidir cuál es la mejor combinación de acciones de control dentro de un conjunto de posibilidades. El resultado final es que este operador es capaz de obtener cuál debe ser la acción de control que hay que aplicar basándose en los conocimientos que tiene del proceso y en la información pasada y actual de su estado.
4. Para conseguir una mayor calidad en el control, este mismo operador repetiría todos los cálculos cada vez que disponga de información actualizada, bien sean nuevas medidas del estado del proceso, bien conocimientos actualizados acerca del comportamiento del proceso (información nueva del modelo).

Para concretar, se entiende que pertenecen a la familia de los controladores MPC aquellos que comparten las siguientes características:

- a) Se hace uso explícito de un modelo del proceso en el cálculo de predicciones de la evolución dinámica del proceso.
- b) La ley de control (conjunto de acciones de control en un horizonte de tiempo) se obtiene de la minimización de una cierta función de coste en la que intervienen las predicciones. La función de coste es la encargada de fijar el comportamiento que se pretende conseguir (especificaciones).
- c) Se aplica el concepto de horizonte móvil (*receding horizon*): en cada periodo de muestreo se resuelve un problema de optimización diferente, puesto que se incorpora nueva información de la evolución dinámica del proceso.

De las ideas anteriores, se puede deducir la diversidad de estrategias que pueden surgir en base a estas características. Como consecuencia, aparecerán diferentes controladores:

- a) Según el tipo de modelo del proceso utilizado
- b) Según el tipo de función de coste utilizada
- c) Según el método de optimización aplicado

Para clarificar un poco más el concepto del MPC, se va a describir la metodología común que comparten todos los controladores que hacen uso de las ideas descritas anteriormente (figura 2.7):

1. En cada instante t , haciendo uso del modelo del proceso, se predicen las N futuras salidas $\hat{y}(t+k|t)$ ¹ siendo $k = 1, 2, 3, \dots, N$. El número de predicciones N , recibe el nombre de “*horizonte de predicción*”. Las salidas se predicen utilizando la salida actual $y(t)$ y las salidas y entradas pasadas (información disponible hasta el instante actual t) y las hipotéticas entradas de control futuras, $u(t+k|t)$ postuladas en ese mismo instante t , $k = 0, 1, \dots, N-1$, que se tendrían que aplicar al proceso, para conducirlo al punto de consigna y que son las que se quiere calcular.
2. Las futuras acciones de control se calculan de manera que minimicen una determinada función de coste, entre cuyos objetivos se encuentra el mantener lo más cerca posible la salida del proceso $\hat{y}(t+k|t)$ de una trayectoria de referencia $w(t+k)$ (que puede ser directamente el punto de consigna (*setpoint*) o una suave aproximación a éste) que describe cómo se desea guiar dicha salida desde su valor actual $y(t)$ hasta los puntos de consigna futuros. La función de coste adopta así generalmente la forma de una función cuadrática de los errores entre la salida predicha y la trayectoria de referencia. También en la mayoría de los casos se suele incluir algún término referente al esfuerzo de control. Además, si la función de coste que se define es cuadrática, el modelo utilizado es lineal y no existen restricciones para ninguna señal implicada, entonces es posible encontrar una solución analítica para el problema de la optimización. En caso contrario, es necesario utilizar, en general, un método numérico de optimización.

¹ Es usual encontrar en el ámbito del MPC, la sintaxis $y(t+k|t)$ para indicar la predicción de la salida para el instante $t+k$ postulada en el instante t .

3. Una vez calculada la secuencia de futuras acciones de control que en ese instante hacen óptima la función de coste, se hace uso del concepto denominado “*receding horizon*” (horizonte de control móvil). Solamente se aplica como entrada al proceso $u(t)$ la primera de ellas, despreciando el resto, puesto que en el siguiente instante $t + 1$, la salida $y(t + 1)$ ya es conocida, y utilizando esa nueva información se repiten los pasos 1 y 2, obteniendo de esta forma la señal de control $u(t + 1)$ a aplicar en ese instante (la cual no es en principio igual a la que se había postulado en el instante anterior $u(t + 1 | t)$). Esta es la principal diferencia con el control convencional el cual usa una ley de control precalculada.

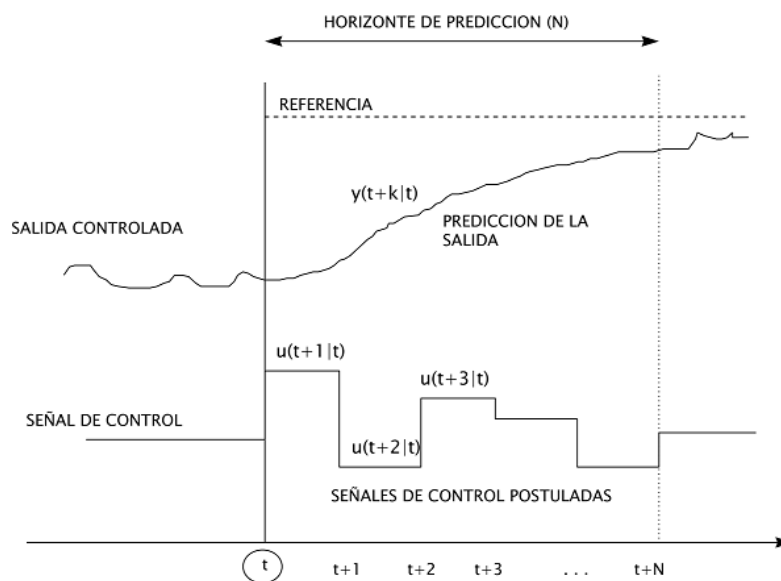


Figura 2.7 Metodología MPC. La predicción de la salida del proceso es la base del control predictivo

2.5.2 Elementos de los controladores predictivos

El análisis de esta metodología de control muestra que, sea cual sea la implementación que se realice, cualquier control predictivo basado en modelos se puede entender como un problema de optimización en cada periodo de muestreo que consta de tres elementos fundamentales:

- a) Un **predictor** basado en el modelo del proceso, encargado de calcular las predicciones de la evolución dinámica del mismo a partir de las medidas de las

variables del proceso hasta el instante actual ' t ' y unas acciones de control futuras a lo largo del horizonte de predicción.

- b) Una **función de coste** que asigna un valor de coste a cada predicción y por tanto, a cada ley de control postulada. Este valor trata de mostrar el grado de cumplimiento de las especificaciones estáticas y dinámicas compatibles con las posibles restricciones de funcionamiento.
- c) Un **optimizador** que debe encontrar el vector de acciones de control que ofrece el mejor valor de la función de coste. Generalmente en este proceso de búsqueda el optimizador realiza postulados de la ley de control e iterativamente trata de acercarse a la ley de control óptima.

Combinando distintas variaciones de estos tres elementos fundamentales se pueden obtener un gran número de controladores que formarían parte de la familia de los controladores predictivos. Aunque las diferencias entre los distintos algoritmos de MPC puedan parecer pequeñas *a priori*, en realidad pueden provocar distintos comportamientos en bucle cerrado, siendo pues críticos estos tres elementos para el éxito de un determinado algoritmo en una determinada aplicación. De hecho, para poder plantear cualquier tipo de mejora se debe analizar cada uno de estos tres elementos fundamentales.

Predictor

La piedra angular del MPC es el modelo dinámico del proceso. Este elemento del control predictivo es el que se encarga de calcular las predicciones de la evolución dinámica de las variables que se quiere controlar. El modelo debe capturar la dinámica del proceso y debe tener una alta capacidad de predicción.

En general este modelo consta de dos componentes (figura 2.8):

- a) **Modelo del proceso** que relaciona todas las variables de entrada que se pueden manipular con las variables de salida que se quiere controlar.
- b) **Modelo de perturbaciones** que a su vez se puede dividir en dos partes. Una que incluye la relación entre variables de entrada medibles, pero no manipulables con las salidas (modelo de perturbaciones identificable), y otra parte que trata de

describir la parte de la salida medida que no es explicada por el resto de modelos (modelo de perturbaciones no identificable).

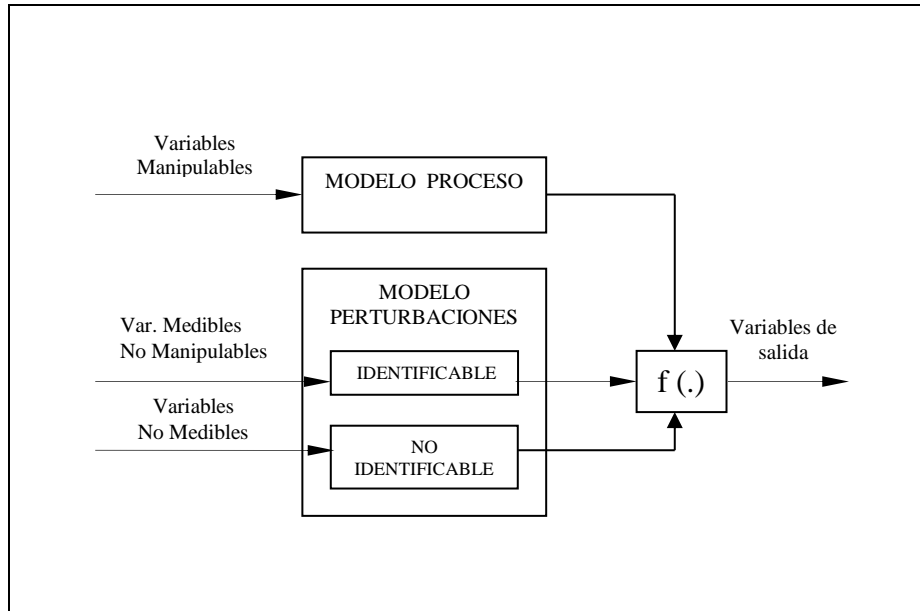


Figura 2.8 Estructura general del modelo predictor

Estas componentes se combinan en una función $f(.)$ para producir un modelo de las variables de salida. Aunque existen modelos del proceso de distinta naturaleza, los más utilizados son los modelos empíricos. Para obtener el modelo del proceso existen varios enfoques:

- Respuesta ante un impulso
- Respuesta ante un escalón
- Función de transferencia
- Representación en espacio de estados
- Modelos de Volterra
- Modelos mediante redes neuronales
- Modelos *fuzzy*

Los distintos tipos de modelos son objeto de campos de estudio en los que se describe cómo se obtienen, qué tipo de procesos pueden modelar, cuáles son sus limitaciones y cómo se utilizan para realizar predicciones de la evolución dinámica de las variables de un proceso.

En Phillips y Parr, (1995) se puede encontrar una descripción del modelado mediante respuesta a impulso, función de transferencia y representación en espacio de estados. Su utilización en control predictivo está ampliamente descrita en Camacho y Bordóns, (1995).

Un ejemplo de utilización de modelos de Volterra en control predictivo se puede encontrar en Maner *et al.* (1996). Las redes neuronales son, en algunos casos, una alternativa para el modelado de sistemas no lineales (Chen *et al.* 1990), ejemplos de utilización en control predictivo se encuentran en Nahas *et al.* (1992), Zamarreño (1996) y Liu *et al.* (1998). En cuanto a los modelos con técnicas *fuzzy*, es posible encontrar ejemplos en Espinosa y Vandewalle, (1999b) y Espinosa y Vandewalle (1999a).

Evidentemente, la calidad de las predicciones debería ser el factor que marque el tipo de método de modelado que se debe utilizar, al menos a nivel teórico. Es natural pensar que, a mayor calidad en las predicciones, más posibilidad se tiene de conseguir un control adecuado. Sin embargo, en las aplicaciones prácticas, aparecen otros factores como los económicos, de seguridad, etc. que pueden determinar, más allá de las cuestiones teóricas, el tipo de modelo seleccionado.

Las diferentes estrategias MPC pueden usar cualquiera de las técnicas de modelado mencionadas, para representar la relación de las salidas con las entradas medibles, de estas últimas algunas serán variables manipuladas y otras se pueden considerar como perturbaciones medibles, que pueden ser compensadas mediante acciones *feedforward*. Además se tendrá en cuenta en el modelo de las perturbaciones, el efecto de las entradas no medibles, el ruido y los errores de modelado, para intentar describir el comportamiento que no aparece reflejado en las partes identificables del modelo.

Sin embargo, utilizar estos modelos para predecir el efecto de las variables no manipulables (medibles o no) no es tan evidente. Cuando se tienen variables de entrada no manipulables, aunque sean medibles, no se puede saber con certeza qué valores van a tomar en el futuro y por tanto en el horizonte de predicción (intervalo de tiempo en el que se quiere realizar la predicción). El modelo puede ser muy exacto, pero el desconocimiento del valor futuro de estas variables podría producir predicciones de muy baja calidad. En estos casos se debe, al menos, conocer alguna de sus propiedades estadísticas que nos permita predecir su valor. La calidad de la predicción, en estos casos, depende tanto de la calidad del modelo como de la calidad de las estimaciones de las variables no manipulables.

Si la parte residual procedente del modelo presenta estructura de autocorrelación, es posible modelarla mediante un modelo de serie temporal ARIMA (modelos Box-Jenkins) para tratar de incrementar la calidad del control. Por ejemplo en el caso del método GPC (*Generalized Predictive Control*) propuesto por Clarke *et al.* (1987a), se utilizan modelos CARIMA (*Controlled Auto-Regressive Integrated Moving Average*) con polinomios de filtrado $T(z^{-1})$ para mejorar la robustez.

Función de coste

Un índice de funcionamiento de un sistema es una formulación matemática que responde en general a una expresión del tipo:

$$I = \int_0^{\infty} f(r(t), y(t), t) dt \quad (2.48)$$

que proporciona una medida cuantitativa del funcionamiento del sistema. En la teoría de control aparecen distintos indicadores que tratan de describir la evolución dinámica de un proceso, y que se pueden englobar en dos grandes grupos:

- a) Parámetros descriptivos de la evolución temporal de la variable controlada: error en régimen permanente, valor final, tiempo de establecimiento, sobreoscilación, tiempo de subida, etc.
- b) Medidas de la desviación de la variable controlada respecto de la referencia (tabla 2.1). Generalmente se han usado integrales de una función del error, siendo los más extendidos en su uso (Marlin 1995): IAE (integral del valor absoluto del error), ICE (integral del cuadrado del error), ITAE (integral del producto del tiempo por el valor absoluto del error), ITEC (integral del producto del tiempo por el error al cuadrado), etc.

Entre estas dos opciones, parece claro que es más apropiado para evaluar cómo funciona un sistema, utilizar parámetros del primer grupo, ya que las medidas de tipo integral no reflejan directamente cómo funciona el sistema. Sólo con el valor del índice, un operador es incapaz de saber con cierto grado de exactitud cómo está funcionando el sistema. A esto se une que es más usual especificar el funcionamiento de un proceso en términos del tipo tiempo de establecimiento y sobreoscilación menores que unos valores determinados. Sin embargo, en los indicadores de tipo integral es posible incorporar en

la evaluación del funcionamiento, otro tipo de elementos como por ejemplo, el valor de la acción de control o ponderaciones de las distintas variables y, adicionalmente, se pueden usar para incluir en el índice la evaluación de costes económicos.

Índice	Expresión
IAE	$\int_0^{\infty} r(t) - y(t) dt$
ICE	$\int_0^{\infty} (r(t) - y(t))^2 dt$
ITAE	$\int_0^{\infty} t r(t) - y(t) dt$
ITEC	$\int_0^{\infty} t (r(t) - y(t))^2 dt$

Tabla 2.1 Principales índices de funcionamiento

En general, no existe una formulación universal que sea válida para todos los problemas de control ya que cada tipo de indicadores tiene sus ventajas e inconvenientes. El índice de funcionamiento más adecuado para un problema concreto depende de los objetivos que se tengan y de las herramientas disponibles.

Una alternativa que trata de combinar los dos tipos de indicadores, es establecer unas trayectorias de referencia en un índice de tipo integral. En lugar de utilizar una referencia de tipo escalón $r(t)$, se filtra mediante una función de transferencia ($P(s)$) que fije la dinámica deseada de bucle cerrado: tiempo de establecimiento, sobreoscilación y régimen permanente, y se utiliza esta nueva respuesta $w(t)$ como referencia en un índice de funcionamiento de tipo integral.

$$\begin{aligned}
 w(s) &= P(s)r(s) \rightarrow w(t) \\
 I &= \int_0^{\infty} f(w(t), y(t), u(t), t) dt
 \end{aligned}
 \tag{2.49}$$

La traducción al entorno del control predictivo es directa, ya que operando con señales discretas el índice de coste debe, de alguna forma, imponer el funcionamiento deseado para el proceso introduciendo además nuevas características y parámetros para posibilitar su aplicación al control en línea, ya que se debe conseguir que el volumen de los cálculos a realizar sea razonable. Se puede generalizar, por tanto, como función de coste la expresión siguiente:

$$J(u) = \sum_{k=N_1}^{N_2} f(w(t+k), y(t+k), u(t+k), \delta(k), \lambda(k), N_u, t) \quad (2.50)$$

donde cada uno de los parámetros tiene el significado que se expone a continuación:

Horizonte de predicción (N_1, \dots, N_2): intervalo de tiempo en el que se realiza la predicción, debe ser finito para que sea posible su aplicación al control en línea. Un horizonte de predicción infinito o demasiado grande hace que los cálculos de las predicciones no se puedan realizar en línea, salvo que exista una formulación analítica.

Horizonte de control (N_u): intervalo del horizonte de predicción en el que se permiten variaciones de la variable manipulada. Este parámetro se utiliza para simplificar el problema de optimización, si se reduce el número de variaciones se reduce el número de variables en el problema. Cuando se limita el horizonte de control cabe la posibilidad de realizar distintas estructuraciones de las acciones de control a lo largo del horizonte de predicción.

Factores de ponderación para los errores de predicción ($\delta(k)$) y para las acciones de control ($\lambda(k)$). Estos factores se utilizan para conseguir distintos efectos en el comportamiento de bucle cerrado. Por ejemplo, mayor influencia del esfuerzo de control respecto a los errores de predicción o menor influencia en el índice de las predicciones más alejadas, o mayor ponderación de unas determinadas variables en detrimento de otras, etc.

Restricciones: puede aparecer además, un conjunto de restricciones adicionales sobre variables de entrada, salida e internas. Estas restricciones pueden ser debidas tanto a limitaciones físicas del proceso como a especificaciones de funcionamiento.

En la mayoría de los casos, la función f es cuadrática debido principalmente a que la minimización de dicho índice sujeto a restricciones lineales es matemáticamente tratable (problema de programación cuadrática QP). Existen otras aproximaciones manejando índices de coste modulares (Genceli y Nikolaou 1993, Salcedo y Martínez 2000) o con norma infinita (Rao y Rawlings 1998) que no resultan tan sencillos de manejar y que, en presencia de restricciones lineales, terminan resolviendo problemas de programación lineal.

Optimizador

Finalmente el control predictivo basado en modelos no es más que un problema de optimización. El objetivo de este elemento está claro, debe conseguir la combinación de acciones de control que optimice la función de coste. La solución ideal es la que resultaría de la optimización analítica fuera de línea, lo que implica disponer de una expresión matemática que calcule el óptimo en función de las medidas hasta el instante t' incluido. Esto se puede conseguir cuando el modelo es lineal y la función de coste es cuadrática sin restricciones. En estos casos, el problema de optimización se resuelve fuera de línea y el análisis del sistema resultante se puede realizar utilizando las herramientas clásicas de la teoría de control. Fuera de este contexto, es decir, con problemas no lineales (bien sea por los modelos utilizados, bien por la aparición de restricciones, etc.), el control predictivo se convierte en un problema de optimización en cada periodo de muestreo con el consiguiente incremento de complejidad (resultando en un controlador no lineal y en un bucle cerrado también no lineal). El método de optimización cobra más protagonismo cuando se pretende aplicar el control predictivo en línea. Por muy bueno que sea el modelo o muy acertada la función de coste, el cuello de botella es la técnica de optimización. Una selección o ajuste inadecuado de esta técnica puede provocar en algunos casos, una pérdida notable de las prestaciones del control puesto que no se localiza correctamente el óptimo.

2.5.3 Evolución del control predictivo

La idea del MPC ya se vislumbró en los años 60, antes de que el MPC se convirtiera en una de las estrategias de control avanzado más utilizada en el control de procesos. Los conceptos teóricos iniciales que pueden asociarse al control predictivo se basan en los trabajos realizados en control óptimo (tabla 2.2). Utilizando un modelo discreto lineal en espacio de estados se calcula la ley de control minimizando una función cuadrática de los estados y las acciones de control, dando lugar al regulador lineal óptimo cuadrático (LQG (*linear quadratic Gaussian*) o LQR (*linear quadratic regulator*)). Al fijar un índice infinito se podía obtener un controlador consistente en una realimentación del estado (Mosca 1995, Lemos y Mosca 1985). Debido a las capacidades limitadas de los ordenadores y al rápido muestreo de los procesos para los que el LQG fue desarrollado

(por ejemplo en la industria aeroespacial), el esfuerzo se desvió hacia la obtención de controladores que evitasen realizar la optimización en línea.

Como consecuencia, esta técnica tuvo relativamente poco impacto en la industria de procesos debido a que no contemplaba las no linealidades de los procesos, sus restricciones de funcionamiento, incertidumbres en el modelo y sólo se disponía de un índice cuadrático para medir las prestaciones. Únicamente podía aplicarse en áreas donde se podían conseguir modelos muy exactos y su obtención estaba justificada económicamente (por ejemplo, en la industria aeroespacial).

Al contrario que otras metodologías de control, el MPC fue desarrollado primero en la industria bajo varios acrónimos y recetas propias, tratando de resolver los inconvenientes planteados por el LQG antes mencionados, y mucho antes de disponer de un minucioso entendimiento de las propiedades teóricas de lo que hoy se entiende como control predictivo. La industria contribuyó decisivamente en el desarrollo de un control óptimo aplicable, apareciendo los primeros controles predictivos basados en modelos. Se trataba de algoritmos de control en los que se podía utilizar modelos más sencillos, las restricciones de funcionamiento se podían tener en cuenta en la formulación y la optimización se realizaba cada periodo de muestreo puesto que se utilizaban horizontes de predicción finitos. El interés de los investigadores por el MPC creció a mitad de los años 80, a raíz de unas jornadas organizadas por la empresa petroquímica Shell (Prett y Morari, 1987).

Las primeras implementaciones a nivel industrial (IDCOM y DMC), se desarrollaron en paralelo. De estos algoritmos cabría destacar:

El **IDCOM** o *Identification Command* (Richalet *et al.* 1976, 1978. Es el nombre del software desarrollado a partir del algoritmo conocido como *Model Algorithmic Control* (MAC) (Rouhani y Mehra 1982), también referenciado como *Model Predictive Heuristic Control* (MPHC). Sus características más importantes son:

- Modelo lineal por respuesta a impulso
- Función de coste con un índice cuadrático y horizonte de predicción finito
- No hace uso del concepto de horizonte de control
- Especificaciones mediante trayectoria de referencia generadas mediante un sistema de primer orden
- Se incluye un modelo de perturbaciones:

$$n(t+k) = \alpha n(t+k-1) + (1-\alpha) [y(t) - \hat{y}(t-1|t)] \quad 0 \leq \alpha < 1$$

- Restricciones en la entrada y la salida incluidas en la formulación
- Optimización mediante un algoritmo iterativo

Algoritmo	Modelo	Índice	Horizonte Predicción	Restricciones
LQR (1960)	L, SS	min ISE, I, O	∞	-
IDCOM (1976)	L, FIR	min ISE, O	N	I, O
DMC (1979)	L, FSR	min ISE, I, O, M	N	I, O
QDMC (1983)	L, FSR	min ISE, I, O, M	N	I, O
GPC (1987)	L, FT	min ISE, I, O, M	N	-
IDCOM-M y SMCA (1988)	L, FIR	min ISE, O min ISE, I	N	I, O
SMOC (1988)	L, SS	min ISE, I, O, M	N	I, O
Rawlings y Muske (1993)	L, SS	min ISE, I, O	∞	I, O
RMPCT (1995)	L, FT	min ISE, I, O	N	I, O
DMC+ (1996)	L, FSR	min ISE, I, O, M	N	I, O

Tabla 2.2 Breve historia del MPC (L: Lineal; SS: Espacio de estados; FIR: Respuesta impulsional; FSR: Respuesta a escalón; FT: Función de transferencia; ISE: Error cuadrático integral; I: entrada; O: salida; M: Cambio en la entrada; N: intervalo horizonte de predicción).

- **DMC** o *Dynamic Matrix Control* (Cutler y Ramaker 1979, 1980). Sus principales características son:
 - Modelo lineal por respuesta a un escalón
 - Función de coste con un índice cuadrático de los errores futuros y puede incluir términos referentes a las acciones de control
 - Horizonte de predicción finito
 - Utiliza un horizonte de control
 - Especificaciones se fijan tratando de seguir una referencia de tipo escalón
 - Se incluye un modelo de perturbaciones:

$$n(t+k|t) = y(t) - \hat{y}(t|t-1)$$

- La acción de control óptima se obtiene como la solución de un problema de mínimos cuadrados

Los algoritmos iniciales IDCOM y DMC representan la *primera generación* de la tecnología MPC (figura 2.9); tuvieron un enorme impacto en el control de procesos industriales y sirvieron para definir el paradigma industrial MPC. A partir de estas dos metodologías se han ido desarrollando con el tiempo, distintas alternativas, tanto a nivel industrial como a nivel teórico, entre las que caben destacar:

- **QDMC** o *Quadratic Dynamic Matrix Control*. Pese a que los algoritmos IDCOM y DMC originales proporcionaban un excelente control de procesos multivariables sin restricciones, el manejo de las restricciones era todavía algo *ad hoc*. Esta debilidad se abordó expresando en forma de programación cuadrática (QP) la función objetivo del algoritmo DMC, dando lugar al QDMC (Cutler *et al.* 1983, Garcia y Morshedi 1986) que incluye explícitamente las restricciones en las entradas y salidas del proceso.

El algoritmo QDMC representa la *segunda generación* de la tecnología MPC. Compuesta de algoritmos que proporcionan una forma sistemática de implementar restricciones en las entradas y en las salidas, lo que se logró planteando el problema MPC en forma de QP y resolviéndolo con la utilización de códigos estándar de QP.

- **GPC** o *Generalized Predictive Control* (Clarke *et al.* 1987a) (Clarke *et al.* 1987b):
 - El modelo de predicción utilizado es el de función de transferencia incluyendo un modelo de las perturbaciones
 - El índice es cuadrático e incluye un término de errores de predicción y otro de acciones de control
 - Utiliza los conceptos de horizonte de predicción y control
 - La optimización es analítica, por tanto se puede calcular un regulador lineal fuera de línea. Permite implementar un control adaptativo

Este algoritmo resume muchas de las características de los controladores predictivos para procesos lineales (Clarke y Mohtadi 1989, Albertos y Ortega 1989, y Ordys y Clarke 1993). También se ha utilizado con restricciones (Chow y Clarke 1994, Kuznetsov y Clarke 1994, Tsang y Clarke 1988 y Camacho 1993), y se ha planteado como control predictivo adaptativo (Clarke 1991). Algunas de sus aplicaciones industriales se pueden encontrar en Clarke 1988, Chow *et al.* 1994, Linkens y Mahfouf 1994, y Rossiter *et al.* 1991).

- **IDCOM-M** (M hace referencia a multivariable) (Grosdidier *et al.* 1988). También referenciado como **HIECON** (*Hierarchical constraint control*). Está basado en el **IDCOM**, presentando cambios en la función objetivo y en la priorización de las restricciones. Utiliza dos funciones objetivo, primero se optimiza la que evalúa los errores de predicción y, si quedan grados de libertad, se optimiza respecto a las acciones de control. Para simplificar el cálculo sólo se permite un cambio en la variable manipulada. Además también dispone de un supervisor de controlabilidad, que comprueba si existen sub-plantas mal acondicionadas, procediendo en esos casos a controlar las salidas de forma priorizada atendiendo al orden de prelación previamente establecido.

- **SMCA** (*Setpoint Multivariable Control Architecture*) es una versión mejorada del IDCOM-M desarrollada por los ingenieros de la empresa Setpoint, que combina tecnología de identificación, simulación, configuración y de control en un mismo producto. Está dotado de un optimizador que permite encontrar la solución numérica a una secuencia de objetivos de optimización, proporcionando una forma natural de incorporar múltiples objetivos de control y restricciones, priorizados.

- **SMOC** (*Shell Multivariable Optimizing Controller*) desarrollado por los ingenieros de control de la Shell Research en Francia a finales de los 80 (Marquis y Broustail 1998); Yousfi y Tournier 1991). Lo presentaron como un puente entre los modelos en el espacio de los estados y el MPC, tratando de combinar las múltiples posibilidades que proporcionan los primeros en el control con retroalimentación de procesos, con las características de manejo de restricciones que presenta el MPC. Sus principales características son:
 - Utiliza modelos lineales en el espacio de los estados, incluyendo un modelo explícito de las perturbaciones. Los estados del proceso y de las perturbaciones se estiman mediante el filtro de Kalman
 - Las restricciones en las entradas y en las salidas se formulan vía programación cuadrática

El algoritmo SMOC es casi equivalente a resolver un problema LQR con restricciones en las entradas y las salidas, excepto en que se formula en un horizonte finito. Una formulación del LQR de horizonte infinito, con restricciones no llegaría hasta

después de que en el ámbito académico, se empezará a investigar el MPC (Rawlings y Muske 1993, Scokaert y Rawlings 1998).

Los algoritmos IDCOM-M, HIECON, SMCA, y SMOC representan la *tercera generación* de la tecnología MPC, que incluyen los algoritmos PCT (*Predictive Control Technology*) y RMPC comercializados por Profimatics y Honeywell respectivamente. Esta generación se caracteriza por, distinguir entre varios niveles de restricciones (blandas, duras, priorizadas), permitir retroceder desde un solución no factible, permitir cambios en la estructura de control en tiempo real, proporcionar un conjunto de opciones para la regulación *feedback*, y un amplio rango de procesos (estables, inestables, integrados) y especificaciones de control.

- **RMPCT** (*Robust Model Predictive Control Technology*) surge de la unión del algoritmo RMPC y PCT y finalmente el **DMC-plus** surge de la unión del algoritmo SMCA y DMC, que constituyen la *cuarta generación* de algoritmos MPC, caracterizados por:
 - Uso de interfaces basadas en Windows
 - Niveles de optimización múltiples, para hacer frente a los objetivos de control priorizados
 - Flexibilidad adicional en la optimización del objetivo en estado estacionario, incluyendo programación QP y objetivos económicos
 - Consideración directa de la incertidumbre en el modelo (diseño robusto del control)
 - Tecnología de identificación mejorada, basada en los métodos de predicción de errores o en métodos de identificación de subespacio

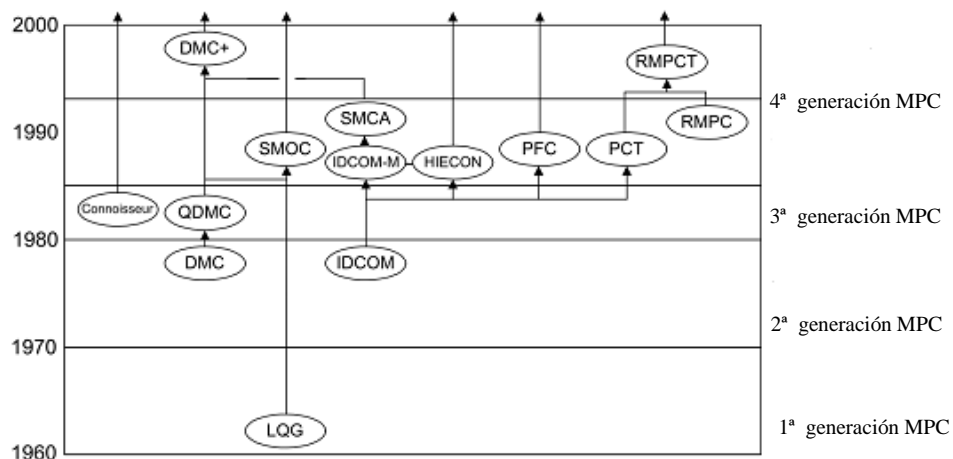


Figura 2.9. Genealogía aproximada de los algoritmos MPC lineales (Fuente: Qin y Badgwell 2003)

La comprensión de las propiedades del MPC a raíz de investigaciones cruciales realizadas en el ámbito académico (Rawlings y Muske 1993) ha permitido que hoy en día exista un marco conceptual y práctico común tanto a investigadores como a ingenieros de control. Son muchas las publicaciones que reflejan el estado del arte a nivel tecnológico y teórico del control predictivo en su tiempo de publicación (Garcia *et al.* 1989, Keyser 1991, Muske y Rawlings 1993, Richalet 1993, Clarke 1994, Froisy 1994, Qin y Badgwell 1997, 2003, Nikolaou 1998, Morari y Lee 1999, Odelson y Rawlings 2003, Froisy 2006). La visión que ofrecen respecto al futuro del MPC en la industria y en la investigación pasa por combinar esta estrategia de control con otras áreas de la ingeniería de control o incluso con otras áreas de conocimiento:

- Control no lineal (Garcia *et al.* 1989)
- Control inteligente (fuzzy, neural) (Nikolaou 1998)
- Nuevos esquemas de identificación, tanto de procesos como de límites para la incertidumbre (Bemporad y Morari 1999)
- Mejoras en los métodos de estimación del estado. Alternativas al filtro de Kalman (Qin y Badgwell 1997)
- Monitorización de procesos y diagnóstico de fallos para comprobar el funcionamiento óptimo del controlador predictivo (Control estadístico de procesos o SPC) (Froisy 1994)
- Mejora de las interfaces de usuario y diálogo con el operador (Froisy 1994)
- Integración de niveles en la jerarquía de control (Morari y Lee 1999)

- Capacidad de sintonizar un filtro de Kalman usando datos obtenidos en ciclo cerrado con control MPC (Odelson y Rawlings 2003)
- Integración de la tecnología de identificación, con el entorno MPC. Uno de los desafíos más importantes será proporcionar los medios para mezclar modelos empíricos y físicos (Froisy 2006)
- MPC aplicado a procesos por lotes y a industrias farmacéuticas y de energía nuclear (Froisy 2006)

Actualmente existen líneas de investigación en control predictivo bien definidas donde cabría destacar entre otras:

- Control predictivo estable: Desde el uso de horizontes infinitos de predicción (Muske y Rawlings 1993, Zheng y Morari 1995) hasta la utilización de horizontes casi-infinitos (Chen y Allgöwer 1998), la formulación del control predictivo en espacio de estados se impone a la de entrada-salida
- Control predictivo no lineal: En este área se utilizan tanto modelos en espacio de estados como modelos en entrada-salida (Mayne 1997, Rawlings *et al.* 1994). Sin embargo, la mayoría de modelos utilizados siguen expresando dinámicas lineales sujetas a una no linealidad de tipo estático (Genceli y Nikolaou 1995)
- Control predictivo robusto: En Bemporad y Morari (1999) se resumen distintas aproximaciones aparecidas en la literatura del control predictivo con características diferentes a la hora de representar la incertidumbre y la forma de calcular el controlador robusto. Por ejemplo, en Kouvaritakis *et al.* (1997) la incertidumbre se representa como una elipse centrada en el vector de parámetros estimados para una función de transferencia. En Badgwell (1997), la incertidumbre en el modelo se parametriza por una lista de posibles plantas y se añaden al problema original restricciones para asegurar la estabilidad robusta. Otra aproximación es la denominada min-max MPC, donde Lee y Yu (1997) presentan una formulación basada en la minimización del peor caso de un índice cuadrático para sistemas con parámetros variables en el tiempo pero acotados. Del mismo modo, Megías *et al.* (2001) presenta un min-max GPC^∞ donde la incertidumbre se representa de forma politópica
- Control predictivo adaptativo: Siendo el GPC el algoritmo orientado al control predictivo adaptativo por excelencia (Kinnaert 1989), y a pesar del amplio mercado que tendría un algoritmo MPC autoajustable, pocas son las aplicaciones reales que incluyen adaptación en línea. El control adaptativo indirecto tiende a ser sustituido

por un nuevo paradigma que contempla la integración de la identificación y el control predictivo. En esta aproximación, y debido a los problemas que presenta la identificación en bucle cerrado, se insiste en mantener una excitación persistente en las señales para poder identificar (Genceli y Nikolaou 1996)

- Utilización de técnicas de optimización alternativas para hacer frente a problemas que se plantean con modelos no lineales, restricciones de funcionamiento y nuevos índices (problemas no convexos y/o discontinuidades a resolver en tiempo real). Por ejemplo, Pérez de Madrid (1995) utiliza la programación dinámica como técnica de optimización, y en Martínez *et al.* (1996), Onnen *et al.* (1997) o Martínez *et al.* (1998) se aplican los algoritmos genéticos o *simulated annealing* como técnicas de optimización

Actualmente el MPC es considerado como una técnica madura para sistemas lineales y lentos como los que habitualmente se encuentran en la industria de procesos. Sistemas más complejos, tales como procesos no lineales, híbridos o muy rápidos, fueron considerados en un principio fuera del alcance del MPC (Camacho y Bordons 2007). Sin embargo durante los últimos años se han producido muchos resultados en estos campos. Han aparecido en la literatura aplicaciones de MPC a procesos no lineales e híbridos.

En general, los procesos industriales no son lineales, pero son muchas las aplicaciones de MPC basado en el uso de modelos lineales. Hay dos razones principales para ello: por un lado, la identificación de un modelo lineal basado en los datos del proceso es relativamente fácil y, por otro lado, los modelos lineales proporcionan buenos resultados cuando la planta opera en las cercanías del punto de operación. Además, el uso de una modelo lineal, junta a una función objetivo cuadrática, da origen a un problema convexo (Programación Cuadrática) cuya solución está bien estudiada y existen numerosos productos comerciales disponibles.

El término MPC no lineal (NMPC) se usa para Controladores Predictivos que hacen uso de un modelo dinámico no lineal (y por lo tanto con restricciones no lineales) lo que plantea una mayor complejidad. En muchos casos las condiciones operativas del proceso requieren cambios frecuentes y por tanto es necesario emplear un modelo no lineal. El uso del MPC no lineal se justifica en aquellas áreas donde las no linealidades del proceso son fuertes y las exigencias del mercado requieren cambios frecuentes en los regímenes de funcionamiento. Aunque el número de aplicaciones de MPC no lineal es todavía limitado (Qin y Badgwell 1998, 2003), su potencial es realmente elevado y usar modelos no lineales se convertirá en algo más común conforme los usuarios demanden más

prestaciones y el desarrollo de nuevas herramientas informáticas permitan que los modelos no lineales estén más fácilmente disponibles.

Según Mayne *et al.* (2000) si se examina retrospectivamente, la razón de ser del MPC es su habilidad para manejar problemas de control en los cuales el cálculo *fuera de línea* de la ley de control es difícil o imposible, aunque otras características tales como su capacidad para manejar plantas multivariables fueron consideradas inicialmente más importantes. Camacho y Bordons (2007) opinan que el éxito del MPC es debido al hecho de que es la forma más general de plantear un problema de control en el dominio del tiempo.

Aunque en esta tesis se utiliza el algoritmo clásico de control DMC, el control predictivo es una metodología con muchas líneas de investigación abiertas en la actualidad como puede ser el MPC distribuido (Tippett y Bao 2015, Tuan *et al.* 2015, Zhao y Ding 2015), el MPC jerárquico (Picasso *et al.* 2010, Zafra-Cabeza *et al.* 2011), el MPC donde se optimizan índices de coste puramente económicos (Ellis *et al.* 2014, Rawlings *et al.* 2012), o la integración de la capa de MPC con el sistema de optimización en tiempo real (RTO) del planta completa (Álamo *et al.* 2014, Limón *et al.* 2013).

2.5.4 Control predictivo en la industria

Las revisiones de Qin y Badgwell (1997, 2003), Qin y Lee (2001) y Froisy (2006) nos ofrecen una visión general del panorama actual del control predictivo en la industria y de los últimos avances en este campo. En las tres primeras referencias, se interroga a las principales compañías sobre los productos que comercializan. En general en las últimas dos décadas ha habido un número considerable de empresas que han comercializado paquetes de control predictivo, pero en los últimos años parece haberse consolidado el mapa de empresas que ofrecen productos de este tipo tras absorciones y compras de patentes de unas por parte de otras. Por ejemplo, Setpoint Inc. (quien comercializaba el paquete SMCA-IDCOM) y Treiber Controls (con su *Optimum Predictive Control (OPC)*) fueron absorbidas por Aspen Technology (DMC-plus), que más recientemente ha integrado a Neuralware. Profimatics (quien vendía el paquete *Predictive Control Technology (PCT)*) actualmente pertenece a Honeywell Hi-spec (RMPCT). En la tabla 2.3 se enumeran las compañías más importantes que en la actualidad ofrecen productos de control predictivo lineal. Estas uniones empresariales han continuado el desarrollo del

producto y han hecho emerger soluciones viables para el MPC no lineal (Qin y Badgwell 1997), que son ofrecidas por las compañías indicadas en la tabla 2.4.

Del análisis de los datos ofrecidos por estas compañías, cabe destacar lo siguiente:

- Según los últimos datos de los que se dispone (Qin y Badgwell 2003), el número total de aplicaciones de MPC lineal instaladas en la industria, era de 4542 en 1999.
- La mayoría de estas aplicaciones (un 67%) pertenecen a la industria petroquímica y de refino.
- Industrias puramente químicas y papeleras muestran un interés creciente por estas aplicaciones, aunque también aparecen otras como alimentarias, del automóvil, aeroespaciales, de semiconductores y electrónicas.
- Aspentech aparece con el mayor número de aplicaciones instaladas (1850) y con el mayor tamaño de proceso bajo control (603 variables controladas \times 283 variables manipuladas).

Compañía	Producto	Descripción
Adersa	PFC	Predictive functional control
	HIECON	Hierarchical constraint control
	GLIDE	Identification package
Aspen Tech	DMCplus	Dynamic matrix control package
	DMCplus model	Identification package
Shell Global Solutions	SMOC-II	Shell multivariable optimizing control
Honeywell Hi-spec	RMPCT	Robust MPC technology
Invensys Systems, Inc.	Connoisseur	Control and identification package
ABB Automation Products	3dMPC	Control and identification package

Tabla 2.3 Aplicaciones más importantes que implementan el MPC lineal y sus fabricantes

De la lectura detallada de estos informes se deduce que todas las casas comerciales tienen su algoritmo de control representativo, el cuál es modificado continuamente. En la actualidad los algoritmos de control predictivo lineal que están implantados, presentan las siguientes características:

- Los modelos utilizados son de tipo respuesta impulsional o escalón, función de transferencia o espacio de estados.

- Todos los productos industriales asumen una perturbación constante a la salida a la hora de realimentar la información, aunque algunos de ellos utilizan filtros de Kalman (SMOC).

Compañía	Producto	Descripción
Adersa	PFC	Predictive functional control
Aspen Tech	Aspen Target	Nonlinear MPC package
Continental Controls, Inc.	MVC	Multivariable control
DOT Products	NOVA-NLC	NOVA Nonlinear controller
Pavilion Technologies	Process Perfecter	Nonlinear control

Tabla 2.4 Aplicaciones más importantes que implementan el MPC no lineal y sus fabricantes

- Todos los algoritmos penalizan el excesivo esfuerzo de control de diferentes formas: factor de ponderación, trayectoria de referencia, umbral para valores singulares, etc.
- La mayoría de estos productos aplican restricciones duras en la fase de optimización estática y restricciones blandas en la salida para la optimización dinámica.
- En todos los casos se utilizan horizontes de predicción y de control finitos.

Los cambios más recientes en la tecnología de control predictivo lineal que actualmente está disponible son:

- Los modelos en espacio de estados y funciones de transferencia están comenzando a utilizarse desplazando a los modelos basados en respuesta en impulso o en escalón (estos modelos están restringidos a procesos estables y requieren un número elevado de parámetros).
- Aparecen alternativas a la identificación basada en pruebas con el proceso. Junto a los simples mínimos cuadrados, métodos basados en subespacios y algoritmos de mínimos cuadrados recursivos están implementados actualmente en las aplicaciones.
- En la actualidad algunos productos que utilizan modelos en espacio de estados disponen de esquemas de realimentación basados en filtros de Kalman.
- Casi todos los productos MPC lineal realizan por separado la optimización estática y dinámica en cada ciclo de control.
- Puesto que la mayoría de los controladores predictivos deben ser sintonizados para alcanzar un bucle cerrado nominalmente estable, una práctica reciente consiste en

utilizar horizontes de predicción elevados para alcanzar amplios márgenes de estabilidad basados en los resultados de Muske y Rawlings (1993).

- Algunas aplicaciones implementan estrategias de control adaptativo y multi-modelos.

En cuanto a los algoritmos de control predictivo no lineal que se comercializan, presentan las siguientes características:

- Se utilizan tanto los modelos basados en los primeros principios como los modelos empíricos. Ejemplos de los primeros, son los que usan los algoritmos NOVA-NLC y PFC que se formulan en el espacio de los estados. Aspen Target utiliza un modelo empírico de este tipo, en cuya ecuación para las variables controladas contiene una función no lineal obtenida a partir de una red neuronal. Los algoritmos MVC y Process Perfecter usan modelos no lineales de entradas y salidas.
- Todos los algoritmos que se aplican industrialmente, o bien asumen una perturbación constante a la salida o bien para procesos inestables o integrados, una perturbación integrada en la retroalimentación. El algoritmo Aspen Target además puede utilizar un filtro de Kalman extendido, basado en una sencilla ampliación para sistemas no lineales.
- Al igual que ocurre con el MPC lineal, los algoritmos de MPC no lineal, penalizan el excesivo esfuerzo de control de diferentes formas: factores de ponderación, trayectoria de referencia, trayectoria de referencia inferior y superior o ponderada, o definiendo un túnel dentro del cual debe transitar la salida, etc.
- Todos los algoritmos de MPC no lineal, aplican restricciones duras en la fase de optimización estática y restricciones blandas en la salida para la optimización dinámica, aunque en esta fase, algunos como el PFC y el NOVA-NLC ofrecen como opción poder cumplir con restricciones duras a la salida.
- Casi todos los productos MPC no lineal realizan por separado la optimización estática y dinámica en cada ciclo de control, salvo el NOVA NLC que realiza simultáneamente la optimización estática y dinámica.
- Todos ellos realizan las optimizaciones mediante programación cuadrática.
- En todos los casos se utilizan horizontes de predicción y de control finitos, si bien el algoritmo PFC de Adersa, parametriza el perfil futuro de la entrada mediante un conjunto de funciones polinomiales, que permiten especificar un relativamente complejo perfil de entrada, a lo largo de un horizonte de control extenso

(potencialmente infinito). Esta opción es ventajosa en procesos no lineales, ya que asegura señales de entrada suaves.

Los desarrollos más recientes y las nuevas tendencias en los aspectos tanto teóricos como prácticos del NMPC se describen a continuación (Camacho y Bordons 2007):

- Desarrollo de modelos que sean capaces de capturar la dinámica no lineal del proceso.

Hay tres tipos de modelos no lineales que se formulan de NMPC:

Modelos empíricos que se obtienen de datos reales y pueden tomar la forma de entrada-salida (tales como NARX, modelos de Volterra, Hammerstein o bilineales y redes neuronales) o modelos no lineales en el espacio de estados.

Modelos fundamentales, que provienen de ecuaciones de balance, también llamados de primeros principios. Las ecuaciones se obtienen por el conocimiento del proceso, aplicando ecuaciones de balance de masa y de energía. En este caso, la predicción se hace como una simulación de las ecuaciones no lineales que describen la dinámica del proceso. Para procesos industriales complejos, este tipo de modelos es difícil y costoso de construir, ya que necesita conocimiento muy experto.

Modelos de caja gris, que se desarrollan combinando los enfoques empírico y fundamental, haciendo uso de las ventajas de cada tipo de modelo. En este enfoque híbrido, la información de los primeros principios se ve enriquecida con datos empíricos.

- Obtención de una solución factible en tiempo real al problema de la minimización. Es un asunto crucial en NMPC. Requiere la consideración (y al menos la resolución parcial) de un problema no lineal no convexo (NLP) que da lugar a una serie de dificultades computacionales relacionadas con el coste y la fiabilidad de la resolución del problema NLP en línea. Normalmente el problema se resuelve haciendo uso de la Programación Cuadrática Secuencial (*Sequential Quadratic Programming*, SQP). El método debe garantizar convergencia rápida y debe tratar problemas de mal acondicionamiento y no linealidades extremas. La solución exacta del problema de optimización en cada instante de muestreo es una tarea ardua. Por ello, en los últimos años ha aparecido una serie de formulaciones que pretenden evitar los problemas asociados a la optimización no convexa. Formulaciones como MPC lineal extendido, modelos locales, NMPC subóptimo, uso de horizontes cortos, descomposición de la secuencia de control, linealización por realimentación, MPC basado en modelos de

Volterra o NMPC con redes neuronales son descritas en detalle en Camacho y Bordons (2007).

Todos estos resultados prometedores permiten pensar que el control predictivo experimentará una mayor diseminación tanto en el mundo académico como en la comunidad industrial en los próximos años.

2.5.5 Algoritmo de control predictivo: DMC

El método DMC (Control con Matriz Dinámica, *Dynamic Matrix Control*) se desarrolló a finales de los setenta por Cutler y Ramaker (1979) de la Shell Oil Co. Fue uno de los primeros productos comerciales que implementaron el MPC y ha sido aceptado ampliamente en el mundo industrial, principalmente por las industrias petroquímicas. Actualmente el método DMC es algo más que un algoritmo y parte de su éxito se debe al hecho de que el producto comercial resuelve otros temas como la identificación u optimización global de la planta. En esta sección se describen brevemente los conceptos básicos del algoritmo que, como se ha visto anteriormente, comparte con otros algoritmos clasificables como MPC.

La Idea del Horizonte Móvil

Según se ha visto, se considera el comportamiento del proceso sobre un horizonte N en el momento actual t . Usando el modelo, se predice la respuesta de las salidas del proceso a los cambios en las variables manipuladas (en adelante VM) en dicho horizonte. Los movimientos, actual y futuros de las entradas son seleccionados de manera que la respuesta predicha tenga ciertas características deseables (óptimas). Por ejemplo, un criterio comúnmente utilizado es minimizar la suma de cuadrados de los errores futuros, es decir, las desviaciones de las variables controladas (en adelante VC) de un cierto valor objetivo (valor nominal). Esta optimización puede también tener en cuenta restricciones que se pueden presentar tanto en las VM como en las VC.

La idea, sobre ser atractiva, no funcionaría bien si se aplicase en todo el horizonte de control futuro. Las perturbaciones que se presenten y los errores de modelado podrían conducir a desviaciones entre el comportamiento predicho y el comportamiento real observado. De manera que los movimientos de control calculados para los instantes

futuros dejarían de ser adecuados. En el siguiente instante de tiempo $t + 1$, se tomará una nueva medida del proceso, desplazándose el horizonte de predicción un periodo adelante, y la optimización se realizará otra vez sobre el horizonte desplazado, postulando una acción de control que seguramente será diferente a la postulada para dicho instante en el instante anterior t . Esta estrategia de control que se esquematiza en la figura 2.10 se conoce como *horizonte de control móvil*.

Anteriormente se ha mencionado que cualquier algoritmo MPC tiene tres elementos básicos, el modelo de predicción, la función de coste y el optimizador que calcula la ley de control. En esta sección se describen estos tres elementos para el algoritmo DMC, considerándose en primer lugar por simplicidad un proceso SISO, que posteriormente se generaliza para un proceso MIMO.

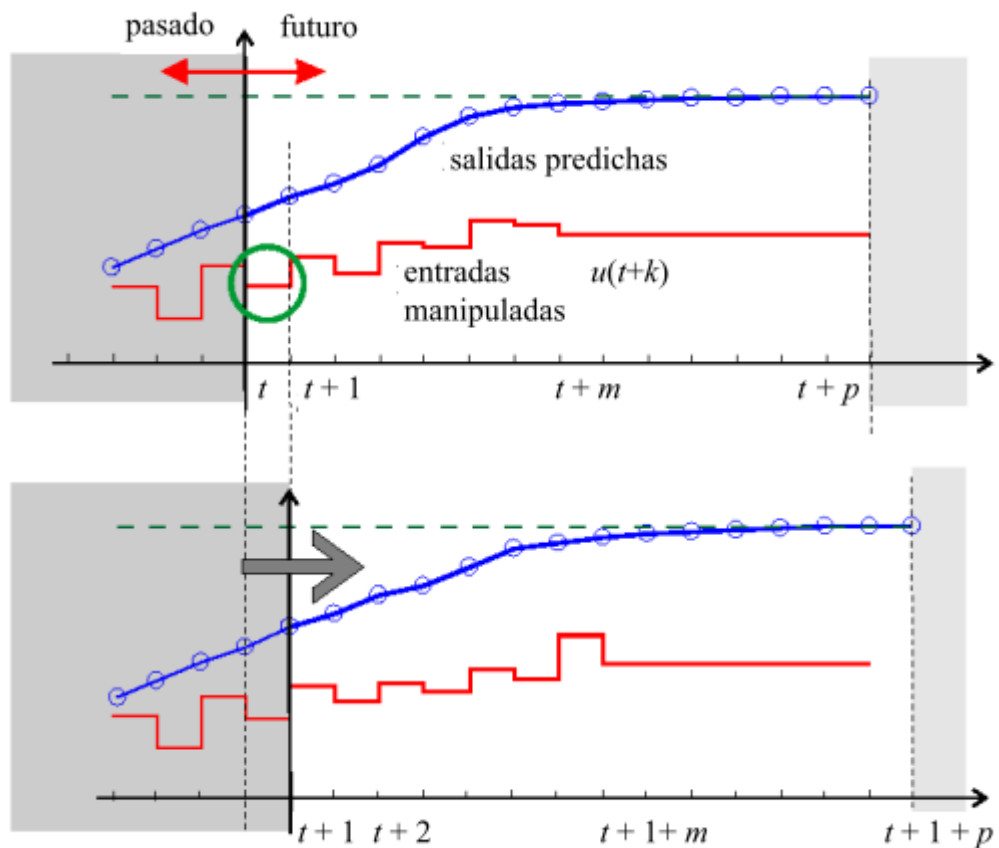


Figura 2.10 Horizonte de control móvil (Fuente: Morari *et al.* 2004).

2.5.6 El modelo de predicción

El modelo del proceso que utiliza el algoritmo DMC es el modelo de respuesta a escalón. Considérese el siguiente modelo infinito de respuesta a escalón:

$$y(t) = \sum_{k=1}^{\infty} g_k \Delta u(t-k) \quad (2.51)$$

Siendo $\Delta u(t)$ un incremento en la variable de entrada en el instante t , es decir $\Delta u(t) = u(t) - u(t-1)$, (lo que implica que $\sum_{i=1}^t \Delta u(i) = u(t)$), $k=1, 2, \dots$ un número de instantes pasados y la secuencia g_1, g_2, \dots es el valor muestral de la salida como respuesta a una entrada en forma de escalón unitario, es decir los coeficientes de la *función de respuesta a escalón*². También puede ser útil expresarlo en forma de un polinomio en el operador retardo $z^{-1} = \Delta u(t-1)$ ³:

$$y(t) = \sum_{k=1}^{\infty} g_k \Delta u(t-k) = (g_1 z^{-1} + g_2 z^{-2} + \dots + g_{\infty} z^{-\infty}) \Delta u(t) = G(z^{-1}) \Delta u(t) \quad (2.52)$$

Este modelo puede expresarse como suma de dos términos:

$$y(t) = \sum_{k=1}^{N_s} g_k \Delta u(t-k) + \sum_{k=N_s+1}^{\infty} g_k \Delta u(t-k) \quad (2.53)$$

donde el segundo término representa la respuesta a las acciones de control tomadas desde un tiempo pasado infinito hasta el instante $t-N_s-1$ incluido, siendo N_s el tiempo de estabilización de la respuesta.

² En esta tesis, en realidad el modelo del proceso se ha estimado (ver Capítulo 4) en forma de *Función de Transferencia*, $y(t) = \frac{B(z^{-1})}{A(z^{-1})} u(t)$, a partir de la cual se ha derivado la función de respuesta a escalón.

³ En el Capítulo 4 a este operador se le ha llamado B, por ser más frecuente esta denominación en la nomenclatura estadística.

Basándose en este modelo es posible hacer predicciones a lo largo del horizonte de predicción ($i=1, 2, \dots, p$), siendo p el número de instantes futuros a partir del instante actual t :

$$\hat{y}(t+i|t) = \sum_{k=1}^{N_s} g_k \Delta u(t+i-k) + \sum_{k=N_s+1}^{\infty} g_k \Delta u(t+i-k) + \hat{n}(t+i|t) \quad (2.54)$$

En el algoritmo de control DMC se asume que las perturbaciones son constantes en todo el horizonte de predicción, y que tienen el mismo valor que la del instante t , de manera que se asume que la perturbación para cada instante futuro es de tipo escalón: Cambio de nivel: $\hat{n}(t|t-1) = y_{medida}(t) - \hat{y}(t|t-1) = \hat{n}(t+i|t)$, por lo que la predicción sería:

$$\hat{y}(t+i|t) = \sum_{k=1}^{N_s} g_k \Delta u(t+i-k) + \sum_{k=N_s+1}^{\infty} g_k \Delta u(t+i-k) + y_{medida}(t) - \sum_{k=1}^{\infty} g_k \Delta u(t-k) \quad (2.55)$$

En el marco del MPC, la predicción de la respuesta consta de dos partes: la correspondiente a la respuesta forzada y la correspondiente a la respuesta libre. Si se separa el primer sumando de la ecuación (2.55) en dos términos, el primero que recoge el efecto de las acciones de control presentes y futuras ($\Delta u_t, \Delta u_{t+1}, \dots$) y el segundo que recoge el efecto de las acciones de control pasadas ($\Delta u_{t-1}, \Delta u_{t-2}, \dots$) y se agrupan los términos correspondientes a las acciones de control pasadas, se tiene:

$$\begin{aligned} \hat{y}(t+i|t) &= \sum_{k=1}^p g_k \Delta u(t+i-k) + \sum_{k=p+1}^{N_s} g_k \Delta u(t+i-k) + \\ &+ \sum_{k=N_s+1}^{\infty} g_k \Delta u(t+i-k) + y_{medida}(t) - \sum_{k=1}^{\infty} g_k \Delta u(t-k) = \sum_{k=1}^p g_k \Delta u(t+i-k) + f(t+i) \end{aligned} \quad (2.56)$$

donde el primer término es la respuesta forzada y $f(t+i)$ es la respuesta libre del proceso, dada por:

$$f(t+i) = y_{medida}(t) + \sum_{k=1}^{\infty} (g_{i+k} - g_k) \Delta u(t-k) \quad (2.57)$$

Si el proceso es asintóticamente estable, los coeficientes g_k de la respuesta ante escalón tienden a un valor constante después de N_s periodos de muestreo, por lo que se puede considerar que:

$$g_{i+k} - g_k \approx 0, \quad k > N_s$$

y por lo tanto la respuesta libre se puede calcular como:

$$f(t+i) = y_{medida}(t) + \sum_{k=1}^{N_s} (g_{i+k} - g_k) \Delta u(t-k) \quad (2.58)$$

Resumiendo:

$$\hat{y}(t+i|t) = \sum_{k=1}^p g_k \Delta u(t+i-k) + f_{t+i} \quad (2.59)$$

- $\sum_{k=1}^p g_k \Delta u(t+i-k)$: es la predicción de la respuesta forzada (controlada) del sistema y representa cómo evolucionaría el mismo, en el caso de que permaneciese en reposo a partir de la aplicación de las acciones de control propuestas para el instante actual y para los $i-1$ instantes futuros y debido al efecto de estas acciones.
- $f_{t+i} = \sum_{k=i+1}^{N_s} g_k \Delta u(t+i-k)$: es la predicción de la respuesta libre del sistema y representa cómo evolucionaría el mismo, asumiendo que las acciones de control actual y futuras son nulas.

Aplicando este modelo de predicción a los instantes $i = N_1, \dots, N_2$ (tomando $N_1=1$) y considerando los siguientes vectores:

$$\hat{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \hat{y}(t+1|t) \\ \hat{y}(t+2|t) \\ \vdots \\ \hat{y}(t+N_2|t) \end{bmatrix}, \mathbf{f} = \begin{bmatrix} f(t+1) \\ f(t+2) \\ \vdots \\ f(t+N_2) \end{bmatrix}, \Delta\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \Delta u(t) \\ \Delta u(t+1) \\ \vdots \\ \Delta u(t+N_2-1) \end{bmatrix} \quad (2.60)$$

la predicción de la respuesta se puede expresar en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \hat{y}(t+1|t) \\ \hat{y}(t+2|t) \\ \vdots \\ \hat{y}(t+N_2|t) \end{bmatrix} = G \begin{bmatrix} \Delta u(t) \\ \Delta u(t+1) \\ \vdots \\ \Delta u(t+N_2-1) \end{bmatrix} + \mathbf{f} \quad (2.61)$$

$$\hat{\mathbf{y}} = G\Delta\mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (2.62)$$

donde $G = \begin{bmatrix} g_1 & 0 & \cdots & 0 \\ g_2 & g_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{N_2} & g_{N_2-1} & \cdots & g_1 \end{bmatrix}$ se llama la *matriz dinámica*, siendo g_i los coeficientes

de la respuesta a escalón.

2.5.7 Diseño del controlador DMC sin restricciones: Función de coste

Se describe a continuación el algoritmo de control comenzando por el caso más simple de un sistema monovariable sin restricciones, extendiéndose posteriormente al caso multivariable.

El objetivo del controlador DMC es llevar el proceso lo más cerca posible del valor de referencia (*setpoint*), en el sentido de mínimos cuadrados. Para ello se calculan los movimientos de las variables manipuladas, minimizando un índice cuadrático que incluye las diferencias entre el valor de referencia (*setpoint*) o trayectoria de referencia y las predicciones de la salida sobre el horizonte de predicción con la posibilidad de incluir una penalización en los movimientos de control. La función objetivo a minimizar, presenta pues la siguiente forma genérica:

$$J(\Delta \mathbf{u}) = \sum_{i=N_1}^{N_2} \alpha_i [\hat{y}(t+i|t) - w(t+i)]^2 + \sum_{j=1}^{N_u} \lambda_j [\Delta u(t+j-1)]^2 \quad (2.63)$$

donde:

- N_1, N_2 : son los valores mínimo y máximo que establecen el *horizonte de predicción* o número N de predicciones a realizar, $N = N_2 - N_1 + 1$.
- N_u : Se denomina *horizonte de control* y representa el máximo número de incrementos de la variable manipulada a calcular (grados de libertad) teniendo en cuenta que $\Delta u(t + N_u + 1) = \Delta u(t + N) = 0$.
- $\sum_{i=N_1}^{N_2} \alpha_i [\hat{y}(t+i|t) - w(t+i)]^2$: representa la medida de los errores futuros entre las salidas predichas y las referencias (w) en el horizonte de predicción, ponderado por los factores α_i .
- $\sum_{j=1}^{N_u} \lambda_j [\Delta u(t+j-1)]^2$: representa la medida de los esfuerzos de control en el horizonte de control, ponderado por los factores λ_j .

Es posible expresar el índice (2.63) en forma cuadrática como:

$$J(\Delta \mathbf{u}) = (\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{w})^T \alpha (\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{w}) + \Delta \mathbf{u}^T \lambda \Delta \mathbf{u} \quad (2.64)$$

donde: $\alpha_{N \times N}$ y $\lambda_{N_u \times N_u}$ son matrices diagonales y

$$\mathbf{w} = [w(t+1), \dots, w(t+N_2)]^T \quad (2.65)$$

$$\hat{\mathbf{y}} = [\hat{y}(t+1|t), \dots, \hat{y}(t+N_2|t)]^T \quad (2.66)$$

$$\Delta \mathbf{u} = [\Delta u(t), \dots, \Delta u(t+N_u-1)]^T \quad (2.67)$$

son los vectores que incluyen la trayectoria de referencia (\mathbf{w}), las predicciones de la salida ($\hat{\mathbf{y}}$), ambas en el horizonte de predicción y los movimientos de control ($\Delta \mathbf{u}$) en el horizonte de control.

Sustituyendo (2.62) en el índice (2.64) se obtiene la función objetivo modificada:

$$J(\Delta \mathbf{u}) = (\mathbf{G}\Delta \mathbf{u} + \mathbf{f} - \mathbf{w})^T \alpha (\mathbf{G}\Delta \mathbf{u} + \mathbf{f} - \mathbf{w}) + \Delta \mathbf{u}^T \lambda \Delta \mathbf{u} \quad (2.68)$$

a minimizar. Si no existen restricciones, el valor óptimo de $\Delta \mathbf{u}$ se puede obtener de forma analítica, calculando la derivada de $J(\Delta \mathbf{u})$ e igualándola a 0, es decir:

$$\frac{\partial J(\Delta \mathbf{u})}{\partial \Delta \mathbf{u}} = -2\mathbf{G}^T \alpha (\mathbf{w} - \mathbf{G}\Delta \mathbf{u} - \mathbf{f}) + 2\lambda \Delta \mathbf{u} = 0 \quad (2.69)$$

De aquí que la expresión del controlador DMC SISO sin restricciones sea:

$$\Delta \mathbf{u} = (\mathbf{G}^T \alpha \mathbf{G} + \lambda)^{-1} \mathbf{G}^T \alpha (\mathbf{w} - \mathbf{f}) \quad (2.70)$$

Llamando \mathbf{e} a la diferencia entre la referencia \mathbf{w} y la predicción de la respuesta libre del sistema \mathbf{f} , es decir el error futuro si no hubiera incrementos en la señal de control, se puede reescribir la ley de control ($\Delta \mathbf{u} = (\mathbf{G}^T \alpha \mathbf{G} + \lambda)^{-1} \mathbf{G}^T \alpha (\mathbf{w} - \mathbf{f})$) como:

$$\Delta \mathbf{u} = (\mathbf{G}^T \alpha \mathbf{G} + \lambda)^{-1} \mathbf{G}^T \alpha \mathbf{e} \quad (2.71)$$

Como en todas las estrategias predictivas, sólo se implementa el primer elemento del vector $\Delta \mathbf{u}$, $\Delta u(t)$. No es aconsejable implementar la secuencia completa sobre los siguientes N_u intervalos, ya que no es posible estimar de forma exacta las perturbaciones que provocan que la salida real difiera de las predicciones que se emplean para calcular la secuencia futura de las acciones de control, no siendo posible anticiparse a ellas. Además de que el *setpoint* también podría cambiar durante los próximos N_u intervalos.

En el instante $(t-1)$, el vector $\hat{\mathbf{e}}_{t-1}$ predice la diferencia que habrá entre el estado del sistema y el valor deseado, N pasos adelante en el tiempo. En el instante actual t , se conoce el valor verdadero de este primer elemento de $\hat{\mathbf{e}}_{t-1}$. Si se compara la verdadera diferencia observada e_t con la predicha, se tiene la discrepancia:

$$\delta_t = \mathbf{e}_t - \hat{\mathbf{e}}_{t-1} \quad (2.72)$$

que se usa para actualizar $\hat{\mathbf{e}}_{t-1}$. Se elimina el primer elemento del vector $\hat{\mathbf{e}}_{t-1}$ puesto que pasa a ser un valor conocido, se añade un último elemento, con lo que se tiene el vector $\hat{\mathbf{e}}_t$ y se añade δ_t a todos los elementos del vector, siguiendo el esquema *feedback* del DMC, comentado anteriormente. Añadiendo esta información a la nueva predicción se pretende contrarrestar la dinámica no modelada y las perturbaciones no medibles, e incluso en pequeña medida el ruido de las medidas, lo que ha sido probado como muy efectivo. Si el modelo va perdiendo su capacidad de representar al proceso, el rendimiento del controlador se va a deteriorar progresivamente y puede llegar incluso a ser inestable.

Se puede decir por tanto que el incremento en la señal de control es proporcional (siendo la constante de proporcionalidad la primera fila de la matriz $(G^T \alpha G + \lambda)^{-1} G^T \alpha$) a los errores futuros y por tanto habrá cambios siempre que el controlador detecte que va a ver una discrepancia entre el objetivo deseado y el comportamiento esperado del sistema.

2.5.8 Control con Matriz Dinámica Multivariable

La extensión del algoritmo DMC al caso multivariable es sencilla. Las ecuaciones básicas se mantienen igual a excepción de que los vectores y las matrices cambian de dimensión para incluir todas las entradas y salidas, siendo prácticamente su formalización una cuestión de notación. Al tratarse de modelos lineales, se puede aplicar el principio de superposición para obtener el valor de las salidas ante los cambios en las diversas entradas. Considérese un sistema multivariable, en el que un conjunto de L salidas (y_l), se controla con un conjunto de M entradas (u_m). Entonces la relación entre la l -ésima salida y todas las entradas, (modelo MISO) tomando como base el modelo de respuesta a escalón (2.53) puede expresarse como:

$$y_l(t) = \sum_{m=1}^M \left(\sum_{k=1}^{N_s} g_{lm,k} \Delta u_m(t-k) + \sum_{k=N_s+1}^{\infty} g_{lm,k} \Delta u_m(t-k) \right) \quad l = 1, \dots, L \quad (2.73)$$

donde $y_l(t)$ es la salida l -ésima en el instante t , $g_{lm,k}$ es el coeficiente k -ésimo de la función de respuesta ante escalón de esta salida correspondiente a la entrada m -ésima, $\Delta u_m(t-k)$ es el movimiento de control de la entrada m -ésima en el instante $t-k$. La predicción para la salida l -ésima tomando como base la ecuación 2.73, será:

$$\hat{y}_l(t+i|t) = \sum_{m=1}^M \left(\sum_{k=1}^{p_l} g_{lm,k} \Delta u_m(t+i-k) \right) + f_{l,t+i} \quad (2.74)$$

siendo
$$f_l(t+i) = y_{l,medida}(t) + \sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{N_s} (g_{i+k} - g_k) \Delta u_m(t-k)$$

Recordando los vectores definidos para el proceso SISO, se pueden definir los vectores para el proceso MIMO. Utilizando la misma notación, se tiene para cada par compuesto de la salida l y la entrada m :

$$\hat{\mathbf{y}}_l = \begin{bmatrix} \hat{y}_l(t+1|t) \\ \hat{y}_l(t+2|t) \\ \vdots \\ \hat{y}_l(t+N_{2l}|t) \end{bmatrix}, \mathbf{f}_l = \begin{bmatrix} f_l(t+1) \\ f_l(t+2) \\ \vdots \\ f_l(t+N_{2l}) \end{bmatrix}, \Delta \mathbf{u}_m = \begin{bmatrix} \Delta u_m(t) \\ \Delta u_m(t+1) \\ \vdots \\ \Delta u_m(t+N_{um}-1) \end{bmatrix}, \mathbf{w}_l = \begin{bmatrix} w_l(t+1|t) \\ w_l(t+2|t) \\ \vdots \\ w_l(t+N_{2l}|t) \end{bmatrix} \quad (2.75)$$

A partir de los cuales se definen los vectores que incluyen todas las salidas y todas las entradas:

$$\hat{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}_1 \\ \hat{\mathbf{y}}_2 \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{y}}_L \end{bmatrix}, \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{f}_L \end{bmatrix}, \Delta \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_1 \\ \Delta \mathbf{u}_2 \\ \vdots \\ \Delta \mathbf{u}_M \end{bmatrix}, \mathbf{w} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_1 \\ \mathbf{w}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{w}_L \end{bmatrix} \quad (2.76)$$

La matriz dinámica multivariable $S_{\sum_{l=1}^L N_{2l} \times \sum_{m=1}^M N_{um}}$ se define como:

$$S = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & \cdots & G_{1M} \\ G_{21} & G_{22} & \cdots & G_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{L1} & G_{L2} & \cdots & G_{LM} \end{bmatrix} \quad (2.77)$$

en la que cada submatriz G_{lm} contiene los coeficientes de la función de la respuesta a escalón de la entrada l -ésima, correspondiente a la entrada m -ésima:

$$G_{lm} = \begin{bmatrix} g_{lm,1} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ g_{lm,2} & g_{lm,1} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ g_{lm,N_{um}} & g_{lm,N_{um}-1} & g_{lm,N_{um}-2} & \cdots & g_{lm,1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{lm,N_{2l}} & g_{lm,N_{2l}-1} & g_{lm,N_{2l}-2} & \cdots & g_{lm,N_{2l}-N_{um}+1} \end{bmatrix} \quad (2.78)$$

Con estas definiciones se puede escribir la ecuación multivariable de predicción de la salida:

$$\hat{\mathbf{y}} = S\Delta\mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (2.79)$$

en ella se contempla el efecto de cada cambio en las variables manipuladas sobre todas las salidas simultáneamente, así como el efecto de las perturbaciones y de la historia del sistema a través de las respuestas libres recogidas en el vector \mathbf{f} , suponiendo que tanto las entradas entre sí y como las salidas entre sí son independientes y sin tener en cuenta posibles efectos de interacciones entre las entradas sobre cada salida.

El problema de control en DMC multivariable se plantea análogamente al caso SISO. Se trata de encontrar los valores del vector $\Delta\mathbf{u}_m(t+i)$, $i = 0, \dots, N_{um}-1$, $m = 1, \dots, M$, tales que las salidas predichas evolucionen de la forma deseada. Para ello, se plantea minimizar la siguiente función objetivo:

$$J(\Delta\mathbf{u}) = (\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{w})^T \alpha (\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{w}) + \Delta\mathbf{u}^T \lambda \Delta\mathbf{u} \quad (2.80)$$

en la que el vector $\Delta \mathbf{u}$, está sujeto a: $\hat{\mathbf{y}} = S\Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}$ y siendo $\alpha_{N_\alpha * N_\alpha}$ ($N_\alpha = \sum_{l=1}^L N_{2l} * \sum_{l=1}^L N_{2l}$) y $\lambda_{N_\lambda * N_\lambda}$ ($N_\lambda = \sum_{N_{um}=1}^M N_{2l} * \sum_{N_{um}=1}^M N_{2l}$) matrices diagonales cuyos elementos son las submatrices diagonales $\alpha_{N_{2l} \times N_{2l}}$ y $\lambda_{N_{um} \times N_{um}}$ de pesos de ponderación de los errores y de los movimientos de control, respectivamente:

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \alpha_2 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \alpha_L \end{bmatrix} \quad \lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \lambda_2 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \lambda_M \end{bmatrix} \quad (2.81)$$

La función objetivo modificada es:

$$J(\Delta \mathbf{u}) = (S\Delta \mathbf{u} + \mathbf{f} - \mathbf{w})^T \alpha (S\Delta \mathbf{u} + \mathbf{f} - \mathbf{w}) + \Delta \mathbf{u}^T \lambda \Delta \mathbf{u} \quad (2.82)$$

El procedimiento de minimización análogo al caso SISO, da como resultado la siguiente solución:

$$\Delta \mathbf{u} = (S^T \alpha S + \lambda)^{-1} S^T \alpha (\mathbf{w} - \mathbf{f}) \quad (2.83)$$

o si definimos el vector \mathbf{e} como, $\mathbf{e} = (\mathbf{w} - \mathbf{f})$:

$$\Delta \mathbf{u} = (S^T \alpha S + \lambda)^{-1} S^T \alpha \mathbf{e} \quad (2.84)$$

2.6 DMC: PARALELISMOS CON LOS MÉTODOS ESTADÍSTICOS APLICADOS

2.6.1 Introducción

En determinados procesos industriales, las fluctuaciones aleatorias que dotan al sistema con su carácter estocástico son a veces insignificantes en comparación con las variaciones que se pueden explicar, en mayor o menor medida, por un modelo matemático determinista. De aquí que si se ignoran tales variaciones aleatorias, se calculan leyes de control sin necesidad de aplicar métodos estadísticos. El algoritmo de control DMC (Cutler y Ramaker 1979, Cutler 1983) es una de estas técnicas cuya filosofía no es estocástica, ya que en su formulación no contempla dichas fluctuaciones aleatorias presentes en el proceso. Sin embargo, ciertos métodos estadísticos aplicados tales como la estimación por mínimos cuadrados, la regresión contraída (*ridge regression*) o el algoritmo Levenberg-Marquardt para resolver mínimos cuadrados no lineales se demuestra que ocupan un lugar destacado en la estructura del DMC. Esta vinculación podría estar relacionada con el éxito obtenido por el DMC en la solución de problemas de control de procesos industriales donde otras propuestas han fallado (Ogunnaike 1986). Se plantea en esta sección la dualidad existente entre las técnicas del controlador DMC y determinados métodos estadísticos aplicados.

2.6.2 Formulación del problema de control

Limitándose únicamente al caso de un proceso con una entrada y una salida, para centrarse en lo esencial, y como se ha descrito con anterioridad, básicamente el planteamiento de un problema de control se resume de la siguiente forma: la salida del sistema $y(t)$ a cualquier instante de tiempo arbitrario t se desea mantener lo más cerca posible de un valor objetivo fijado $w(t)$. Para conseguirlo, se dispone de una variable de entrada del proceso fácilmente manipulable. A su vez es posible disponer de medidas de la variable de salida y de un modelo que explique adecuadamente la relación matemática entre ambas variables, y con el que poder hacer predicciones. A cada instante t , se determina una acción de control, $\Delta u(t)$ (un cambio en el valor de la variable de entrada)

con la finalidad de mantener la variable de salida del sistema lo más cerca posible del valor objetivo.

Tanto la estimación del modelo del proceso, como la solución que proporciona el DMC a este problema se relaciona con la estimación de los parámetros de un modelo lineal, tal y como se expone a continuación.

2.6.3 Dualidad entre la estimación de parámetros de un modelo lineal y de un modelo de proceso.

Sea $\mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^N$ y sea $\theta \subset \mathbb{R}^p$ el espacio muestral y el espacio de los parámetros respectivamente. Los modelos que relacionan el vector \mathbf{y} ($N \times 1$) $\in \mathcal{Y}$ de observaciones, con la matriz de diseño ($N \times p$) de variables independientes o predictoras \mathbf{X} , y el vector $\boldsymbol{\beta}$ ($p \times 1$) $\in \theta$ de parámetros de acuerdo a:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.85)$$

se llaman modelos lineales, siendo $\boldsymbol{\varepsilon}$ ($N \times 1$) un vector de perturbaciones aleatorias con distribución $\sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$ multivariable, donde \mathbf{I} es la matriz identidad ($N \times N$) como consecuencia del cual $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)$ se debe considerar como una única realización del proceso estocástico $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N)$. Sea $f_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y})$ la función de densidad conjunta del vector aleatorio \mathbf{Y} . El problema general de estimación, consiste en determinar el conjunto de los parámetros desconocidos $\boldsymbol{\beta} \in \theta$, de la función de densidad conjunta $f_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y})$ que representa el proceso estocástico subyacente que genera la secuencia particular $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)$ observada. Existen diversos métodos de estimación de $\boldsymbol{\beta}$, pero sin duda uno de los más utilizados es la regresión lineal (Draper y Smith 1998). En cuyo caso tanto si se parte de la hipótesis respecto a $f_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y})$: (i) de normalidad de \mathbf{Y} o (ii) de que los dos primeros momentos de la distribución, independientemente de cómo sea esta, cumplen que:

$$E[\mathbf{Y}] = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$$

$$\text{Cov}[\mathbf{Y}] = \sigma^2 \mathbf{I}_N$$

los estimadores *mínimo-cuadráticos* ordinarios de los parámetros requeridos se obtienen minimizando la función cuadrática:

$$S(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \quad (2.86)$$

que da lugar a la siguiente estimación de $\boldsymbol{\beta}$:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (2.87)$$

Estos mismos principios generales son de aplicación tanto a la estimación del modelo del proceso como al problema específico del cálculo de la ley de control en la metodología DMC, como se discute en la siguiente sección.

2.6.4 El modelo del proceso. Estimación de los parámetros

La respuesta del sistema dinámico a los incrementos de la variable de entrada $(\Delta u_0, \Delta u_1, \dots)$ puede expresarse mediante un filtro lineal:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + g_1 \Delta u_0 + \varepsilon_1 \\ y_2 &= y_0 + g_1 \Delta u_1 + g_2 \Delta u_0 + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ y_N &= y_0 + g_1 \Delta u_{N-1} + g_2 \Delta u_{N-2} + \dots + g_N \Delta u_0 + \varepsilon_N \end{aligned} \quad (2.88)$$

Donde y_0 es la salida inicial del sistema antes de los cambios. La secuencia g_1, g_2, \dots, g_N es la *función de respuesta a escalón*.

La ecuación (2.88) puede reorganizarse en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \bar{y}_1 \\ \bar{y}_2 \\ \vdots \\ \bar{y}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta u_0 & 0 & \cdots & 0 \\ \Delta u_1 & \Delta u_0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta u_{N-1} & \Delta u_{N-2} & \cdots & \Delta u_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_N \end{bmatrix} \quad (2.89a)$$

o más sintéticamente:

$$\bar{\mathbf{y}} = \Delta \mathbf{U} \mathbf{g} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.89b)$$

siendo $\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - y_0 \mathbf{1}$, con $\mathbf{1} = [1, 1, \dots, 1]^T$, un vector ($N \times 1$) de unos.

En principio la ecuación (2.89), tiene la misma forma que la ecuación (2.85). Dados $\Delta \mathbf{U}$ e \mathbf{y} , se tiene un sistema de ecuaciones en (2.89) que habitualmente es sobredeterminado, es decir si se tienen más ecuaciones que incógnitas $N > N_s$, se podría calcular la siguiente solución por mínimos cuadrados para \mathbf{g} :

$$\mathbf{g} = (\Delta \mathbf{U}^T \Delta \mathbf{U})^{-1} \Delta \mathbf{U}^T \bar{\mathbf{y}} \quad (2.90)$$

como en la ecuación (2.87). Sin embargo, como se verá en el Capítulo 4, aunque esta forma de estimar el modelo del proceso es posible, en la práctica no se suele determinar de este modo.

La razón más importante es la siguiente: aunque (2.88) es una manera conveniente de representar el sistema dinámico, no siempre es la forma más eficiente de aproximarse al comportamiento del mismo, en el sentido de que existen otros modelos equivalentes disponibles, que requieren de un número mucho menor de parámetros que el requerido por la secuencia $\{g_i\}$ en (2.88), y que por lo tanto no es siempre el modelo más *parsimonioso*.

2.6.5 Dualidad entre la estimación de parámetros en un modelo lineal y el cálculo de la ley de control en el algoritmo DMC

Según hemos visto en los apartados del diseño del controlador DMC, estos mismos principios estadísticos que se han aplicado en la estimación del modelo del proceso, han sido aplicados en el diseño del controlador DMC. De hecho, dados los vectores:

$\mathbf{g}_t = [g_t, g_{t-1}, \dots, g_{t-N_u+1}]^T$ y $\Delta \mathbf{u}_t = [\Delta u_{t-1}, \Delta u_{t-2}, \dots, \Delta u_N]^T$, y siempre que se cumpla:

$$g_k = \begin{cases} g_k & k > 0 \\ 0 & k < 0 \end{cases} \quad ; \quad \Delta u_k = \begin{cases} \Delta u_k & k > 0 \\ 0 & k < 0 \end{cases}$$

se pueden obtener dos representaciones equivalentes del sistema, debido a la propiedad conmutativa del producto interno:

$$y(t) = \mathbf{g}_t^T \Delta \mathbf{u} = \Delta \mathbf{u}_t^T \mathbf{g} \quad (2.91)$$

relación que es válida para todo t , siendo $\Delta \mathbf{u} = [\Delta u(t), \dots, \Delta u(t + N_u - 1)]^T$ y $\mathbf{g} = [g_1, g_2, \dots, g_N]^T$. Un conjunto de ecuaciones basadas en la primera igualdad de (2.91) conduce a: $\mathbf{y} = G \Delta \mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}$ y la otra parte conduce a: $\mathbf{y} = \Delta \mathbf{U} \mathbf{g} + \boldsymbol{\varepsilon}$, lo que pone de manifiesto la dualidad existente entre la estimación del modelo del proceso y el cálculo de la ley de control.

2.6.6 Escalado de las variables de salida y la regresión por mínimos cuadrados ponderados

En la definición del DMC, no únicamente se tuvieron en cuenta los principios básicos de la regresión por mínimos cuadrados, sino que con el propósito de mejorar el rendimiento del sistema de control, se incorporaron elementos adicionales que tienen interesantes paralelismos con los métodos estadísticos.

Es el caso de la conveniencia de ponderar los errores de las salidas para cada instante del horizonte de predicción $i = N_1 \dots N_2$, lo que se realiza a través de la inclusión de los factores α_i en la función objetivo:

$$J(\Delta \mathbf{u}) = \sum_{i=N_1}^{N_2} \alpha_i [\hat{y}(t+i|t) - w(t+i)]^2 \quad (2.92)$$

cuya minimización conduce a la siguiente ley de control:

$$\Delta \mathbf{u} = (G^T \alpha G)^{-1} G^T \alpha \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.93)$$

En el caso multivariable además puede ocurrir que un cambio unitario en una de las variables de salida, es mucho más importante que un cambio unitario en otra. Un típico ejemplo tomado de la ingeniería química, es una unidad de destilación en el que se controla la calidad del producto de cabeza (medida en fracción molar) y la temperatura en el plato de fondo de la unidad (medida en °C). En el primer caso un cambio unitario recorre su escala entera (la fracción molar debe estar entre 0 y 1), mientras que cambios de 10 °C en la temperatura son habituales. De aquí que un cambio unitario en la temperatura puede considerarse de la misma importancia que un cambio de 0,01 en la fracción molar. El DMC toma en consideración este hecho, escalando el vector de errores, de manera que cambios de igual importancia en las diferentes salidas son igualmente tratados. Esto se realiza a través de la matriz de ponderación de los errores $\alpha_{N_\alpha * N_\alpha}$ vista anteriormente en el apartado de DMC multivariable y que permite fijar la importancia de un cambio unitario en cada una de las salidas en relación a un cambio unitario en las demás. En este caso la función objetivo quedaría:

$$J(\Delta \mathbf{u}) = (S\Delta \mathbf{u} - \mathbf{e})^T \alpha (S\Delta \mathbf{u} - \mathbf{e}) \quad (2.94)$$

cuya solución es:

$$\Delta \mathbf{u} = (S^T \alpha S)^{-1} S^T \alpha \mathbf{e} \quad (2.95)$$

El método estadístico empleado es en este caso, la regresión por mínimos cuadrados ponderados, en el caso particular en el que los errores aleatorios $\boldsymbol{\varepsilon}$ de la ecuación (2.85), no tienen todos la misma varianza. En este caso la matriz no singular de varianzas-covarianzas del vector aleatorio $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\Sigma}$ sigue siendo diagonal debido a la independencia de los errores ε_i ($i = 1, \dots, N$), pero no tiene la forma $\sigma^2 \mathbf{I}$, sino que los elementos de su diagonal $1/\sigma_i^2$ son desiguales, de manera que las medidas con menor precisión, no tienen el mismo peso que aquellas con mayor precisión. Para ello se utiliza la matriz \mathbf{W} inversa de la matriz de varianzas-covarianzas $\boldsymbol{\Sigma}$, siendo la expresión equivalente en este caso a (2.87):

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{y} \quad (2.96)$$

Es interesante observar que \mathbf{W} es una matriz de términos al cuadrado, como lo es la matriz α de ponderación de los errores en el algoritmo DMC, cuya raíz cuadrada es la matriz diagonal Q , siendo elementos de esta última, los ratios que permiten ponderar los errores de predicción, de manera que $\alpha = Q^T Q$ y $\alpha_i \geq 0$.

2.6.7 Penalización de las acciones de control

En la ecuación del sistema DMC:

$$G\Delta\mathbf{u} = \mathbf{e}, \quad \Delta\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{N_u}, \quad \mathbf{e} \in \mathbb{R}^N \quad (N_u \leq N) \quad (2.97)$$

es posible elegir la dimensión N_u del vector de acciones de control $\Delta\mathbf{u}$, tan elevada como se desee. Resulta obvio que cuanto mayor sea la longitud de $\Delta\mathbf{u}$, más próximo estará $G\Delta\mathbf{u}$ a \mathbf{e} . En el caso en el que $N_u = N$, la matriz inversa de G será exacta y $G\Delta\mathbf{u}$ coincidiría con \mathbf{e} .

En la estimación de los parámetros de un modelo lineal, se puede imaginar una situación similar, en la que tras estimar un modelo inicial con un determinado número de parámetros, se añaden al mismo parámetros de forma secuencial, reestimando cada vez el modelo a partir del mismo conjunto de datos. Es obvio que cada vez que se añada un parámetro adicional la curva estimada pasará más cerca de los puntos observados, y la suma de cuadrados residual disminuirá. De hecho, si se dispone de N observaciones se podría obtener un polinomio de grado $N-1$ que pasaría por todos los puntos y cuya suma de cuadrados residual sería nula. Lo anterior no implica que necesariamente haya siempre que preferir los modelos más complicados, “porque se ajustan mejor a los datos”. Con toda seguridad esta complicada ecuación sería muy mala a la hora de predecir valores de la variable dependiente Y en función de los posibles valores de las variables independientes $\mathbf{x}=\mathbf{x}_i$.

De la misma manera que en un modelo sobreparametrizado, los estimadores pueden ser demasiados y pueden tener tanta varianza que carezcan de sentido práctico, contemplar en la ecuación (2.97) una excesiva longitud del vector $\Delta\mathbf{u}$, conduciría al

cálculo de acciones de control (elementos individuales del vector $\Delta \mathbf{u}$) excesivas e inaceptables y una norma euclídea del vector $\Delta \mathbf{u}$ excesivamente grande. Existen dos razones separadas, pero relacionadas por las que es deseable impedir esto:

- Excesiva magnitud de la variable de entrada, que podría tener como consecuencia excesiva oscilación en la respuesta del sistema
- Podría conducir a un mal condicionamiento de la matriz $(G^T G)$, lo que resulta crucial en el caso de que existan importantes errores de modelado.

Sin embargo cabe mencionar que disponer de un vector $\Delta \mathbf{u}$ suficientemente largo tiene la ventaja de permitir conocer anticipadamente lo que el controlador probablemente va a hacer en el futuro. Lo cual resulta especialmente útil cuando existen restricciones en la variable manipulada que deben cumplirse estrictamente, en cuyo caso resulta importante detectar y convenientemente ajustar decisiones de control que en el futuro llevaran a violar dichas restricciones.

Una de las formas de impedir que las acciones de control sean excesivas o un mal condicionamiento de la matriz $(G^T G)$ (manteniendo una longitud del vector $\Delta \mathbf{u}$ razonable), es añadir una matriz $\Lambda_{N_v \times N_v}$ diagonal cuyos elementos son los factores de penalización de las acciones de control en las ecuaciones del controlador DMC:

$$\begin{bmatrix} G \\ \Lambda \end{bmatrix} \Delta \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{e} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (2.98)$$

Si se hace $\lambda = \Lambda^T \Lambda$ la función objetivo podría transformarse de la siguiente forma:

$$J(\Delta \mathbf{u}) = (G \Delta \mathbf{u} - \mathbf{e})^T (G \Delta \mathbf{u} - \mathbf{e}) + \lambda (\Delta \mathbf{u} - \mathbf{0})^T (\Delta \mathbf{u} - \mathbf{0}) \quad (2.99a)$$

cuya solución es:

$$\Delta \mathbf{u} = (G^T G + \lambda)^{-1} G^T \mathbf{e} \quad (2.99b)$$

Dependiendo en cuál de los dos problemas (acciones de control excesivas o mal condicionamiento de $G^T G$) se centre la atención, la solución proporcionada por (2.99b) tiene una correspondencia diferente con los métodos estadísticos:

- **Acciones de control excesivas.** Una interpretación obvia de la solución propuesta por (2.99b) basándose en (2.99a) es que establece un compromiso entre que $G\Delta\mathbf{u}$ sea lo más cercano posible a \mathbf{e} , y que $\Delta\mathbf{u}$ sea lo más próximo a cero. La prioridad dada a cada uno de estos dos objetivos conjuntos la dicta Λ , ya que a medida que esta aumenta, se da mayor prioridad a $\Delta\mathbf{u} \approx \mathbf{0}$, sobre $G\Delta\mathbf{u} \approx \mathbf{e}$ y en consecuencia la magnitud de las acciones de control propuestas será más moderada.

En este caso, la analogía estadística se encuentra en la modificación debida a *Levenberg y Marquardt* del método *Gauss-Newton* de la estimación no lineal por mínimos cuadrados.

Por otro lado, como se discute en las publicaciones originales del método DMC (Cutler y Ramaker 1979, Cutler, 1983), debido a las inexactitudes del modelo y a las perturbaciones no modeladas del proceso, las desviaciones respecto al objetivo predichas son diferentes a las realmente observadas. Por esta razón, el método DMC propugna que únicamente el primer elemento del vector de acciones de control calculado sea implementado. El efecto de aplicar esta señal de control es entonces substraído del vector de predicción de los errores previo, obteniéndose una nueva predicción. Esta se actualiza comparando la diferencia entre el error predicho y el error real observado cuando este está disponible, entonces se reajusta el resto del vector mediante la obtención de la discrepancia entre lo predicho y lo observado. De manera que cada vez que se actualiza \mathbf{e} , se calcula secuencialmente $\Delta\mathbf{u}$ para reducir la suma de cuadrados de las desviaciones de la salida del sistema respecto del objetivo. El primer elemento de $\Delta\mathbf{u}$ se aplica y el más antiguo se actualiza. El proceso de repite con el objetivo de minimizar $\mathbf{e}^T\mathbf{e}$ en cada etapa.

Justamente este procedimiento es una clara reminiscencia del método de estimación no lineal por mínimos cuadrados, que puede realizarse mediante diferentes algoritmos de optimización. En el algoritmo mencionado de Gauss-Newton a partir de una estimación inicial del vector de parámetros θ^0 , se obtienen secuencialmente estimadores cada vez mejores, debido a que se reduce la suma de cuadrados residual a cada paso, hasta alcanzar el mínimo de dicha función. En este caso, la estimación secuencial viene dada por:

$$\theta^{(\kappa+1)} = \theta^{(\kappa)} + (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\theta^{(\kappa)}) \quad (2.100)$$

resultado obtenido del desarrollo en serie de Taylor alrededor de $\theta^{(k)}$ de la función y de la aplicación de mínimos cuadrados lineales sobre el problema convertido en lineal. El término de corrección:

$$\Delta_k = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{e} \quad (2.101)$$

siendo,

$$\Delta_k = \theta^{(k+1)} - \theta^{(k)} \quad \text{y} \quad \mathbf{e} = \theta^{(k)} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\theta^{(k)}) \quad (2.102)$$

se conoce como dirección de Newton (o de Gauss-Newton) de aproximación al mínimo. Esta dirección de aproximación al mínimo es más rápida cuando se está cerca del óptimo que la dirección de máxima pendiente que propone el algoritmo de optimización del *gradiente negativo*, pero presenta problemas cuando se está lejos del mínimo, ya que entonces avanza más rápidamente este último. Cuando existan errores de modelado se estará lejos del mínimo, y puede ocurrir, que el tamaño del término de corrección sea tan grande que las estimaciones sucesivas oscilen. Esto conduce a ratios de convergencia muy pobres y en casos extremos, podría conducir a la divergencia. Para mejorar las propiedades de convergencia se han propuesto diversas modificaciones a este algoritmo siendo una de ellas la debida a Levenberg-Marquardt, cuyo término de aproximación es:

$$\Delta_k = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda^{(k)} \mathbf{\Omega})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{e} \quad (2.103)$$

donde $\lambda^{(k)}$ es un escalar que varía en cada paso k y $\mathbf{\Omega}$ es una matriz diagonal. Las similitudes entre (2.99b) y (2.103) parecen bastante obvias. De la misma forma que en (2.103) se establece un compromiso entre la dirección de Newton y la dirección de máxima pendiente mediante $\lambda^{(k)} \mathbf{\Omega}$, también en (2.99b) se establece un compromiso entre $\Delta \mathbf{u} \approx \mathbf{0}$ y $G \Delta \mathbf{u} \approx \mathbf{e}$ mediante λ y en consecuencia se amortiguan las oscilaciones entre los valores de las acciones de control calculadas secuencialmente.

Tanto en el algoritmo Gauss-Newton, como en el de Levenberg-Marquardt se llevan a cabo regresiones sucesivas, solo que en este último caso son regresiones-cresta o *ridge regressions*, concepto que se amplía en el siguiente apartado.

- **Mal condicionamiento de la matriz ($G^T G$).** Dados los N_u valores propios de la matriz ($G^T G$): $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{N_u}$, se define su número de condición η como el cociente entre el mayor y el menor de sus valores propios, es decir:

$$\eta(G^T G) = \frac{\eta_1}{\eta_{N_u}} \quad (2.104)$$

A medida que aumenta el número de condición empeora el condicionamiento de la matriz ($G^T G$).

La mayoría de controladores predictivos utilizan índices de tipo cuadrático y calculan las acciones de control que minimizan la suma de los residuos al cuadrado del sistema de ecuaciones planteado en (2.97), tal como lo hace el DMC. El problema es que los residuos solamente son indicadores fiables de la precisión alcanzada por dicha solución si la matriz G está bien condicionada, puesto que el mal condicionamiento de la matriz G en un controlador predictivo se traslada al condicionamiento de la matriz ($G^T G$). De ahí la importancia de plantear un problema de mínimos cuadrados bien condicionado.

Diferentes circunstancias pueden conducir a un mal condicionamiento en el control predictivo:

En la mayoría de los casos conforme aumentan los horizontes N y N_u , empeora el condicionamiento de la matriz G . Tanto si aumenta el horizonte de predicción como la longitud del vector $\Delta \mathbf{u}$ obviamente aumenta las dimensiones de la matriz ($G^T G$), entonces lo hace también su número de condición. A modo de ejemplo, en la figura 2.11, se representa el número de condición de esta matriz para distintos horizontes, tanto de predicción como de control para un proceso multivariable.

También puede ocurrir que la función de respuesta a escalón \mathbf{g} de la que se deriva la matriz G , induzca por si misma a una matriz $(G^T G)$ mal condicionada, incluso con un vector $\Delta \mathbf{u}$ de longitud moderada.

Por otro lado, el problema del mal condicionamiento, aparece especialmente en el control de procesos multivariables, en los que dos (o más) variables manipuladas poseen el mismo efecto en las variables controladas. Aunque en la práctica, las variables no se comportan idénticamente igual unas que otras, a veces, sí que pueden mostrar un comportamiento muy parecido. Esto llevaría a tener filas de G que se podrían calificar como *cercanas a ser dependientes* unas de otras. Por consiguiente la matriz G , y de igual forma $(G^T G)$ estarían *muy cerca de ser singulares*.

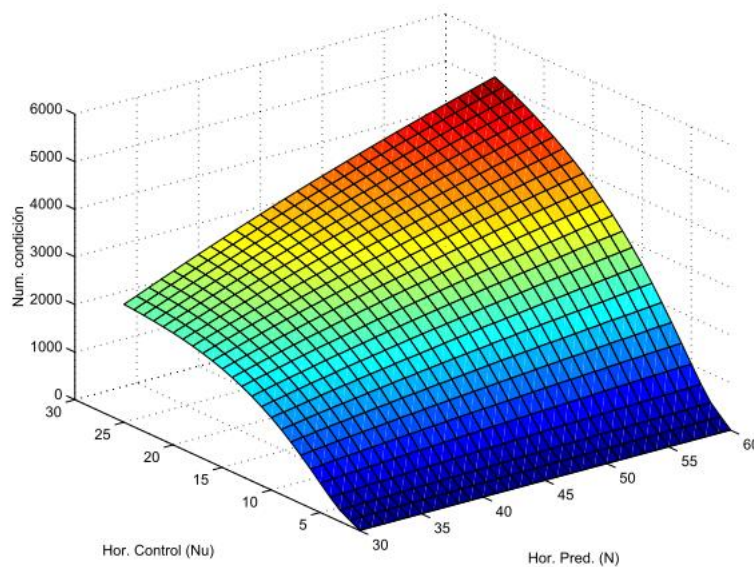


Figura 2.11 Evolución del número de condición de la matriz $(G^T G)$ para distintos horizontes de predicción y de control de un proceso 2×2 .

Es fácil deducir que si $\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{N_u}\}$ son los valores propios de $(G^T G)$ entonces los valores propios de $(G^T G + \lambda)$ son: $\{\mu_1 + \lambda, \mu_2 + \lambda, \dots, \mu_{N_u} + \lambda\}$, lo que implica que su número de condición sea:

$$\eta_\lambda (G^T G + \lambda) = \frac{\eta_1 + \lambda}{\eta_{N_u} + \lambda} \quad (2.105)$$

y como λ es un número positivo, entonces:

$$\frac{\eta_1 + \lambda}{\eta_{N_u} + \lambda} < \frac{\eta_1}{\eta_{N_u}} \quad (2.106)$$

es decir, la adición de λ a $(G^T G)$, mejora su condicionamiento. Cualquiera que sea la razón que lleva a un mal condicionamiento, cuanto mayor sea el número de condición de $(G^T G)$ más pronunciados serán los errores en el vector $\Delta \mathbf{u}$ obtenido de acuerdo a:

$$\Delta \mathbf{u} = (G^T G)^{-1} G^T \mathbf{e} \quad (2.107)$$

como resultado de la transmisión de los errores en G , ya que pequeños cambios en esta matriz pueden provocar grandes cambios en los elementos de la solución $\Delta \mathbf{u}$. En cuyo caso, la solución calculada, puede ser significativamente diferente de la solución *verdadera*, debido principalmente a este mal condicionamiento. De las ecuaciones 2.64-2.66, se deduce que el factor de ponderación λ sirve para mejorar el condicionamiento de la matriz a invertir, de manera que a medida que aumenta se produce una reducción en el tamaño de las acciones de control y por tanto un control más suave.

La analogía estadística del uso del factor de penalización de las acciones de control en el algoritmo DMC, se encuentra en la regresión-cresta (*ridge-regression*) (Hoerl y Kennard 1970), que es un tipo de regresión contraída. Tiene como objetivo solucionar el problema de mal condicionamiento, en el que la alta correlación entre variables predictivas en el modelo provoca que la matriz $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})$ sea casi singular, lo que da lugar a estimaciones de los parámetros inestables (los estimadores por ejemplo, pueden tener el signo erróneo o ser de una magnitud mayor que lo que sería razonable basándose en consideraciones físicas o prácticas), y que típicamente tendrán elevadas varianzas. La regresión-cresta es un

procedimiento que añade información adicional y específica al problema para eliminar el mal condicionamiento.

La regresión por mínimos cuadrados ordinarios cuya solución como se ha visto es:

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (2.108)$$

aunque proporciona un estimador insesgado de β , cuando existe un problema de mal condicionamiento de la matriz $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})$ a invertir, da como resultado un estimador $\hat{\beta}$ de β con los problemas antes mencionados. La regresión-cresta propone una solución alternativa a (2.108):

$$\beta^* = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \theta \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (2.109)$$

donde θ es un número positivo. A medida que θ aumenta, el valor absoluto de los estimadores disminuye, tendiendo a cero cuando θ tiende a infinito. Eligiendo un valor adecuado de θ se logran las siguientes ventajas prácticas:

- Se estabiliza el sistema adquiriendo las características generales de un sistema ortogonal.
- Que los coeficientes no tengan unos valores demasiado elevados y poco razonables con respecto a los factores respecto a los cuales representan las tasas de variación.
- Que los coeficientes que aparentemente tienen el signo erróneo para $\theta = 0$ (mínimos cuadrados ordinarios), tengan el signo correcto.
- Que la suma de cuadrados residual no tenga un valor excesivo, ni en relación al mínimo de la suma de cuadrados residual, ni en relación a lo que sería una varianza razonable para el proceso generador de los datos.

Pese a que β^* es un estimador sesgado de β , tiene la deseable propiedad de reducir el error cuadrático medio global,

$$E = \left[(\boldsymbol{\beta}^* - \boldsymbol{\beta})^T (\boldsymbol{\beta}^* - \boldsymbol{\beta}) \right] \quad (2.110)$$

ya que la reducción en la varianza residual obtenida, compensa con creces el sesgo introducido. Nótese que los sesgos presentes en los estimadores se introducen a través de θ , que no son coeficientes que se tengan en cuenta en el modelo ajustado, es decir que los estimadores de Hoerl y Kennard al ser sesgados por la presencia de θ , lo serán incluso si las variables predictivas del modelo postulado son las correctas.

Existen otros métodos alternativos a la ponderación de las acciones de control. En Sanchis (2002) se propone el controlador predictivo PC-GPC (*Principal Component Generalized Predictive Controller*), versión modificada del GPC estándar. En este trabajo se concluye que gran parte del tiempo dedicado a la implantación de un controlador se utiliza en el ajuste de sus parámetros por prueba y error, en particular, del factor de ponderación de la acción de control λ . Como alternativa en este controlador predictivo se sustituye este factor por un nuevo parámetro denominado número de componentes principales (NPC). La matriz dinámica del proceso G (matriz que contiene las respuestas en escalón de las funciones de transferencia), que tan importante papel juega en los controladores DMC y GPC, se transforma y analiza en el plano de las componentes principales. Ambos métodos consiguen el mismo efecto tanto a nivel de condicionamiento del controlador, prestaciones del bucle cerrado y robustez. La relación entre el nuevo parámetro (NPC) y algunos indicadores numéricos, como la norma del vector de acciones de control o el número de condición de la matriz dinámica G , hacen que su elección esté basada en criterios menos subjetivos que el factor de ponderación de la acción de control λ . El método propuesto puede aplicarse de forma natural a procesos multivariados, y a otros algoritmos de control predictivo como por ejemplo el DMC.

En este caso se reconduce la metodología estadística *Análisis de Componentes Principales* o *Principal Component Analysis* (PCA), haciendo uso de la *Descomposición en Valores Singulares* (SVD), hacia la filosofía del control predictivo.

En la tabla 2.5 se resume los aspectos más relevantes del algoritmo de control DMC y sus correspondientes analogías con los conceptos estadísticos.

DMC	Concepto estadístico paralelo
Formulación del problema de control: dado $G\Delta\mathbf{u} = \mathbf{e}$, encontrar $\Delta\mathbf{u}$	Formulación del problema de estimación de los parámetros en un modelo lineal: dado $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$, encontrar $\boldsymbol{\beta}$
Cálculo de la acción de control: $\Delta\mathbf{u} = (G^T G)^{-1} G^T \mathbf{e}$	Estimación mínimo cuadrática de los parámetros en un modelo lineal: $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$
Escalado de las variables de salida: $\Delta\mathbf{u} = (G^T \alpha G)^{-1} G^T \alpha \mathbf{e}$	Regresión por mínimos cuadrados ponderados: $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{y}$
Ponderación de la acción de control: $\Delta\mathbf{u} = (G^T G + \lambda)^{-1} G^T \mathbf{e}$ <ul style="list-style-type: none"> a) Frente a excesivas acciones de control b) Mejora del condicionamiento de la matriz $G^T G$ c) PC-GPC 	Regresión no lineal por mínimos cuadrados de Levenberg-Marquardt Regresión-cresta (<i>ridge-regression</i>) Análisis de componentes principales. Descomposición SVD.

Tabla 2.5 Analogías entre el algoritmo de control DMC y los métodos estadísticos.

2.7 INTEGRACIÓN DEL CONTROL AUTOMÁTICO DE PROCESOS (APC) CON EL CONTROL ESTADÍSTICO DE PROCESOS (SPC)

2.7.1 Concepto del APC-SPC

Las soluciones descritas para aplicar el SPC en procesos con inercia, diseñadas con el único fin de detectar causas especiales de variabilidad, “desaprovechan” la información valiosa que proporciona la estructura de autocorrelación presente en los datos. En efecto, en procesos con dinámica, los valores observados contienen información que permite predecir la evolución futura del proceso; información que, si se dispone de variables compensatorias fáciles de manipular, puede aprovecharse para tomar acciones que mejoren dicha evolución futura, minimizando la variabilidad predecible entorno al valor óptimo y mejorando de forma continua la calidad del producto, integrando las dos metodologías de control. Esto es especialmente necesario en procesos no estacionarios en media, muy frecuentes en procesos continuos, que deben ser intervenidos para mantener la salida en torno al valor objetivo.

La filosofía clásica del SPC: “no actuar a no ser que el proceso se salga de control”, siendo razonable cuando existe un alto coste asociado a la realización del ajuste (puesto que esto puede suponer la paralización de la máquina, cambio de herramienta, reducción de la productividad, etc.), lo cual ha venido siendo frecuente en la industria de piezas, no lo es tanto cuando el coste de ajustar el proceso es prácticamente despreciable comparado con el coste de no fabricar en el objetivo, como suele ocurrir en muchos procesos continuos. En esta situación lo más adecuado no es ajustar el proceso sólo cuando no esté bajo control, sino hacerlo continuamente mediante ajustes en variables compensatorias, de forma que se minimice la variabilidad de la salida en torno al valor objetivo, utilizando las técnicas de regulación automática (control *feedback-feedforward*) en lo que se conoce como estrategia de Control Automático o Ingenieril de Procesos. La utilización del SPC del modo tradicional para ajustar procesos con dinámica se ha mostrado altamente ineficiente, generando un rechazo hacia esta estrategia por parte de los ingenieros de procesos (Capilla *et al.* 1999, Hoerl y Palm 1997). Por otra parte, se han esgrimido algunos argumentos en contra del uso de los esquemas de control APC en la comunidad

del control de calidad. Una crítica frecuente que se suele hacer es que en muchas ocasiones las acciones de control se basan en reglas empíricas no adecuadas al proceso concreto, lo que conduce a sobreajustes o infraajustes del mismo. También se critica que al compensar la variabilidad (los controladores contrarrestan el efecto de las perturbaciones que desvían la característica de calidad de su valor objetivo), en vez de eliminar sus causas, el APC podría enmascarar información que podría utilizarse para mejorar el proceso permanentemente (Box y Kramer 1992). Por ejemplo, puede resultar difícil detectar un problema de aislamiento térmico en una máquina, si está actuando un controlador automático de temperatura. En este caso, una causa asignable (e.g. una rotura del sello de aislamiento) no se repararía, y operar con ese problema resultaría más caro que si el problema de aislamiento hubiese sido detectado y corregido. Además, los cambios importantes en el proceso no se pueden controlar únicamente con APC, ya que el controlador se puede saturar antes de compensar completamente esta perturbación. Estos casos, podrían resolverse integrando el control APC y el SPC, en un nuevo esquema en el que SPC actúe como supervisor del APC y de todo el sistema.

El control *feedforward* se utiliza cuando las perturbaciones o ruidos a los que está sometido el sistema se pueden medir directamente en su origen (ruidos identificables; v.g. propiedades de materias primas) y se puede actuar ajustando una variable compensatoria para contrarrestar su efecto sobre la salida. Cuando alternativa, o adicionalmente, se usan las desviaciones de la salida respecto a su nominal (ruido residual o no identificable) para calcular los ajustes compensatorios, aparece el control *feedback*, o *feedforward-feedback*, respectivamente. Las acciones de control pueden ejecutarse manualmente o mediante controladores automáticos, por ejemplo del tipo PID (*Proporcional-Integral-Derivativo*) muy utilizados en la industria para controlar parámetros de proceso (v.g., temperaturas en reactores o en circuitos de calefacción-refrigeración, etc.). Un controlador PID está basado en los errores de control presentes (P), pasados (I), y futuros (D). No utiliza ningún criterio de optimalidad. En el dominio discreto del tiempo y en su forma llamada *paralela* se expresa como:

$$x_t = K_p y_t + K_I \sum_{i=1}^t y_i + K_D \nabla y_t \quad (2.111)$$

o en su forma *incremental*, que es más común:

$$\nabla x_t = K_p \nabla y_t + K_I y_t + K_D \nabla^2 y_t \quad (2.112)$$

donde K_p es la constante de proporcionalidad (ganancia), K_I es la constante de la acción integral y K_D la constante de la acción derivativa, y ∇x_t es la acción de control, e y_t las desviaciones de la salida respecto del valor objetivo.

El último término, que representa la acción derivativa, proporcional al cambio en la respuesta no se suele utilizar en la práctica (Åström y Häglund 1995), por lo que resultan controladores PI, que han recibido mucha atención por parte de la comunidad Estadística debido al trabajo de Box y Luceño (1997a) en el que demostraron que son controladores bastante robustos frente a errores de modelado, siendo la componente integral la que le confiere robustez al controlador.

Mediante estos algoritmos de control se transfiere la variabilidad de la salida, que es la que genera problemas de calidad, a la de la entrada (variable de ajuste), cuya manipulación no supone prácticamente coste en muchos procesos continuos reales.

Aunque el SPC y el APC se originaron en sectores industriales diferentes: la industria de piezas y la de procesos continuos, respectivamente, hoy día las diferencias entre los procesos de ambos tipos de industrias comienzan a difuminarse, debido fundamentalmente a la automatización y al desarrollo espectacular de las tecnologías de captación y transmisión de información. Dada la frecuencia con que en los modernos procesos industriales se presentan fenómenos dinámicos que desestabilizan los procesos y hacen necesario recurrir a algoritmos de control para tratar de estabilizar su media, es indudable el interés que tiene esta nueva aproximación al problema del control *on-line* de procesos con inercia.

El APC y el SPC son realmente dos estrategias complementarias para la mejora de la calidad que, sin embargo, hasta hace unos años se han venido desarrollando de forma completamente independiente y en algunos casos han podido incluso considerarse como antagónicas. Una de las razones de este antagonismo es que ambas estrategias utilizan el término control para referirse a aspectos tan dispares como son la regulación y la monitorización de procesos. Como se ha visto, las técnicas de regulación describen métodos mediante los cuales se fuerza al proceso a seguir una trayectoria determinada

mediante ajustes en variables compensatorias fácilmente manipulables. Por otro lado, la monitorización (SPC) se refiere al método mediante el cual se implanta un sistema de información permanente e inteligente de la evolución del proceso a lo largo del tiempo para detectar precozmente cualquier anomalía que pueda ocurrir, y ayudar en la identificación de sus causas, con el fin último de eliminarlas y tomar medidas para evitar su reaparición en el futuro (o bien, si fueran favorables, incorporarlas permanentemente en el proceso).

La integración entre el control automático y estadístico de procesos está localizado en la intersección entre la teoría de control, los modelos de series temporales y el control estadístico de procesos. La nueva estrategia APC-SPC (integración del APC con el SPC) nace con el propósito de ser una herramienta de mejora de la calidad que reduce la variabilidad predecible (debida a las causas comunes) en las características de calidad mediante el control *feedforward-feedback*, e incorpora un esquema de monitorización global del sistema regulado para detectar y ayudar en la eliminación de problemas no predecibles en el proceso (provocados por las causas especiales). La componente APC de este enfoque estudia la dinámica de las relaciones entre una o más variables salida y una o varias variables entrada, para obtener la ecuación de control óptimo (Box *et al.* 1994, Isermann 1991) que permite compensar el efecto previsible de las causas comunes de variabilidad. Por otra parte, los gráficos de control SPC permiten reducir la dispersión a largo plazo y contribuir a la mejora continua de los procesos mediante la detección e identificación de causas especiales de variabilidad, implantando un sistema de monitorización permanente del proceso. La estrategia APC-SPC incorpora las ideas de la Teoría del Control con las del SPC intentando reducir tanto la variabilidad a corto como a largo plazo, sustituyendo las consignas de “ajustar continuamente” (APC) o “no actuar a no ser que el proceso se salga de control” (SPC), por la de “ajustar óptimamente y monitorizar el sistema regulado” (APC-SPC).

Varias son las denominaciones que se le han ido dando en la literatura a esta metodología integrada de control, por ejemplo Vander Wiel *et al.* (1992) acuñaron el término ASPC (*Algorithmic Statistical Process Control*); por su parte, Nembhard y Mastrangelo (1998) la denominan Control de Procesos Integrado (*Integrated Process Control*, IPC); en los círculos de la fabricación de semiconductores se le conoce como detección de fallos y control avanzado de procesos, también se le designa como ISPC (*Integrated SPC*, Kandananond, 2007); ESPC (*Engineering Statistical Process Control*,

Ferrer 2004); SPA (*Statistical Process Adjustment*, del Castillo 2002); *Synergistic Control* (Box *et al.* 2009).

Desde sus orígenes poco antes de la década de los 60, el trabajo en el campo APC-SPC se desarrolló por ingenieros de control (que trabajaban en aplicaciones de control de calidad) y por estadísticos, que en su mayor parte tenían experiencia en ingeniería química. Esto es más que una simple anécdota, ya que determinó qué tipo de procesos y sus correspondientes problemas se estudiaron inicialmente.

Los primeros intentos de integrar el APC y el SPC aparecieron hace mucho tiempo, con el trabajo de Barnard (1959). Utilizando el estudio del caso de la máquina-herramienta, el autor compara el control automático y el control estadístico de procesos y demuestra que se pueden utilizar en paralelo. Se partió pues del interés que tenían los estadísticos que trabajaban en control de calidad, en la teoría de control, y en el control con retroalimentación, que por aquella época fue un área de investigación muy activa. Cabe señalar que el período entre 1950 y 1960 fue una época de intenso y fecundo trabajo en el campo de control *feedback*, principalmente gracias a las aplicaciones aeroespaciales. El trabajo de Bellman (1953) en programación dinámica generó un gran interés en el control adaptativo; Kalman (1958) había hablado de un sistema de control *feedback* basado en datos tomados a intervalos discretos de tiempo en 1958, tras una corta estancia en Dupont, y presentó su célebre filtro aplicado a un modelo de espacio de estado en 1960.

Durante la década de 1960, Åström que estaba interesado en la aplicación de las ideas de Kalman en el control adaptativo basado en datos de operación (Åström 1967, 1970) y Box y Jenkins que trabajaban en la optimización y el control adaptativo (Box y Jenkins 1962, 1963), desarrollaron en paralelo y al parecer independientemente el controlador de mínimo error cuadrático medio MMSE, llamado "controlador de mínima varianza" entre los teóricos de control y en 1965, Feld'baum (1964) publicó un influyente libro sobre el control óptimo donde estudió problemas similares a los que interesaron a Box y Jenkins inicialmente, es decir, los procesos que tienen un óptimo móvil, una subárea de la teoría de control adaptativo que ahora se denomina "Control Óptimo". Si se desea tener una visión histórica más completa de estos desarrollos paralelos, ver Åström (1996). Mientras que, como hemos visto, hubo algunas publicaciones interesantes en el ámbito del control de procesos (a diferencia de lo ocurrido en el de los gráficos de control) escritas por estadísticos a finales de los 50 y comienzos de los 60 (vg. Barnard 1959), el trabajo de Box y Jenkins fue sin duda el más influyente en la literatura estadística.

Del Castillo (2006) define el desarrollo de esta metodología de control de procesos integrado, como un ámbito de investigación en la que una serie de técnicas estadísticas se aplican para modelar, y por lo tanto para predecir, y para controlar un proceso dinámico. Otorgándole dos características distintivas, a) las variables respuesta a controlar son características de calidad de un producto (o de un proceso que lo produce) y b) la implementación de los ajustes no es completamente automática ya que el APC-SPC corresponde a un controlador supervisor de alto nivel, es decir a un controlador de controladores de bajo nivel que a su vez operan en un proceso. La propiedad a) lo distingue de las aplicaciones de la teoría de control. Para estas, son más bien de interés algunas variables físicas, pero la finalidad no es necesariamente el control de calidad. La propiedad b) enfatiza en el carácter jerárquico con el que se aplican los ajustes de control, sobre procesos complejos o máquinas compuestas de diferentes componentes, pero modelados como una única etapa del proceso. Dada la complejidad de un proceso o de una máquina solo es factible utilizar un modelo estadístico basado en datos, lo que contrasta con los modelos basados en los primeros principios que a menudo usa la teoría de control.

En el campo de la econometría, Simon (1956) y Theil (1957) habían trabajado con problemas de programación dinámica bajo incertidumbre asumiendo una función de pérdida cuadrática, relacionada con el error cuadrático medio (MSE), criterio adoptado más adelante por Box y Jenkins. Por otra parte, a finales de los años 1950 y comienzos de 1960, algunos otros estadísticos (por ejemplo, Barnard 1959 y Bhater 1963, publicaciones de las que G. Jenkins fue comentarista) ya habían realizado trabajos sobre control *feedback* óptimo con procesos que no eran independiente e idénticamente distribuidos (*i.i.d.*), lo que contrasta con el uso de gráficos de control para datos *i.i.d.* Mientras que los métodos de control *feedback* de Box-Jenkins fueron los más prácticos, es cierto que la comunidad estadística no se interesó demasiado y no desarrolló este tipo de métodos con la misma intensidad que los ingenieros eléctricos y químicos. De hecho, gran parte de la obra posterior de Box parece dirigida a la presentación de sus ideas de control y monitorización desarrolladas con anterioridad, de la manera más sencilla posible a los ingenieros de calidad, con el fin de llegar a un público más amplio (Woodall y del Castillo 2014).

A partir de estos trabajos iniciales, surgieron una cantidad ingente de trabajos relacionados. Åström, sus colegas y estudiantes (especialmente L. Ljung) crearon la

escuela sueca de control adaptativo. El control adaptativo es una disciplina madura dentro de la teoría de control (Åström y Wittenmark 1989). Los controladores adaptativos reestiman los parámetros de un modelo continuamente, dado que estos varían con el tiempo, de aquí que sus propiedades sean difíciles de analizar. Además ocurre, que tales estimadores recursivos tienden a explotar si las entradas X_t no varían suficientemente, efecto llamado *blow-up*. En la práctica, se aplican varias medidas de seguridad que monitorean el buen funcionamiento de estos estimadores (un procedimiento similar al SPC) proporcionando una excitación persistente (Ljung 1999) (el problema es equivalente al que se presenta en regresión cuando la matriz $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ está mal condicionada por contener filas muy correlacionadas entre sí).

Por su parte, Box y Jenkins y sus estudiantes (notablemente J. F. MacGregor) continuaron sentando las bases del APC-SPC durante los años 70 y más adelante, estudiando problemas con un claro contenido en estadística. Box y MacGregor (1974 y 1976) fueron trabajos relevantes que abordaban la identificación del modelo del proceso cuando este está funcionando en ciclo cerrado. El primer trabajo presentado a la comunidad estadística relacionado con la integración APC-SPC fue el desarrollado por MacGregor (1988), quien sugirió el uso de gráficos de control para monitorizar el comportamiento de procesos sometidos a APC. Revisó los conceptos básicos del control estocástico y de los gráficos SPC, comparándolos y poniendo de manifiesto sus similitudes y las razones de la falta de interacción entre las dos metodologías. Indicó que hay dos tipos de perturbaciones en los procesos, las estocásticas y las deterministas. Las perturbaciones estocásticas proceden de la variación aleatoria a la que está sometido cualquier proceso continuamente, mientras que las deterministas ocurren de manera repentina debido a cambios en escalón o rampa en alguna variable en un determinado instante de tiempo. Inspirados en el trabajo de MacGregor (1988) muchos investigadores se interesaron por este campo. En la década de los 90 aparecieron numerosos trabajos proponiendo métodos de integración APC-SPC para aplicarlos en los contextos que se han discutido, tratando de aprovechar las potencialidades de cada uno de ellos. Cabe destacar entre ellos, (Box y Kramer 1992, Box *et al.* 1997, Box y Luceño 1997a, Faltin *et al.* 1993, Ferrer *et al.* 2000, Janakiram y Keats 1998, MacGregor 1988, 1991, MacGregor y Harris 1990, Messina *et al.* 1996, Montgomery *et al.* 1994, Nembhard y Mastrangelo 1998, Palm 1990, Tucker *et al.* 1993, Vander Wiel *et al.* 1992, Woodall y Montgomery 1999. Capilla *et al.* (1999) y Ferrer *et al.* (1998) desarrollan en un proceso industrial

petroquímico la nueva estrategia APC-SPC aplicada al control del índice de fluidez de un polímero mediante ajustes en la temperatura del reactor. Por su parte, Ferrer *et al.* (2000) discuten los beneficios del enfoque integrado APC-SPC en el control de la homogeneidad del calibre de azulejos mediante ajustes en los perfiles de temperaturas del horno de cocción de una empresa azulejera. Más recientemente, Park (2010) sugiere que cuando las causas de variación comunes y especiales que provocan que el proceso se aleje de su nominal, se puedan presentar simultáneamente es necesario que actúe un sistema integrado que el autor también denomina IPC (*Integrated Process Control*) para controlar el proceso. En su trabajo, divide el proceso en dos partes: el IC (*in-control*) y OC (*out-control*) que corresponden al proceso en el que no han ocurrido causas especiales y al proceso en el que ha ocurrido alguna causa especial, respectivamente. Propone en primer lugar ajustar el proceso mediante APC y después monitorizarlo mediante un esquema SPC efectivo. Sin embargo, apunta que el controlador que resulta óptimo para el proceso IC no es óptimo para el proceso OC. Por ello, desarrolla modelos estadísticos que modelan el nivel, los ajustes y la desviación observada del proceso y los presenta como modelos de filtro lineal. El método IPC propuesto lo aplica con fines ilustrativos a un proceso de producción de circuitos integrados a gran escala, mostrando que se consigue una mayor uniformidad en el espesor de las obleas.

Aunque un proceso esté regulado, los cambios de importancia o abruptos que se presenten se tienen que detectar y corregir lo antes posible, ya que si solo actuara un controlador emplearía demasiado tiempo para compensar un cambio de este tipo. Integrando los dos tipos de control, se tienen las ventajas de ambos, es decir, el proceso estaría alrededor del objetivo con varianza reducida, incluso si hay autocorrelación debida al propio proceso o a las perturbaciones (beneficio APC), y además se pondría en marcha un procedimiento de mejora continua mediante la detección y eliminación de causas especiales de variabilidad que pueden provocar grandes e impredecibles cambios en el proceso (beneficio SPC).

En un proceso integrado APC-SPC, no está claro qué monitorizar con los gráficos de control. Hasta ahora se han trabajado básicamente dos posibilidades:

- a) *Monitorizar la característica de calidad:* En este caso el gráfico señala si hay un cambio considerable respecto al nominal. En cuyo caso hay que tener en cuenta que el proceso puede aun así estar autocorrelacionado y, como se ha visto, monitorizar variables autocorrelacionadas tiene su problemática particular.

- b) *Monitorizar el factor ajustable*: la base de este enfoque es que un cambio en la característica de calidad provocará un ajuste de similar magnitud, de forma que los ajustes contendrán información que se puede utilizar para monitorizar el proceso. A su vez los ajustes también pueden estar autocorrelacionados. Además de que habrá un retardo entre que la característica de calidad es observada y el cálculo del ajuste a aplicar.

Son ejemplos del primer caso, Vander Wiel *et al.* (1992), Tucker *et al.* (1993), Montgomery *et al.* (1994) y Capilla *et al.* (1999).

Jiang y Tsui (2002) comparan la conveniencia de la monitorización de la característica de calidad frente a la monitorización de la acción de control cuando un proceso está controlado mediante un controlador MMSE, P o PI. Considerando un modelo de perturbaciones ARMA (1,1) y el controlador MMSE definido por Box y Luceño (1997a) llegan a la conclusión de que cuando el cambio en la media es grande (del orden de 4 ó 5 veces la desviación típica de la salida), monitorizar la característica de calidad es más eficiente. Para el caso de un controlador P (proporcional) puro no hay diferencias entre monitorizar la salida o la acción de control, mientras que cuando se usa un controlador PI el cambio en la media converge a 0, debido a que la componente integral compensará los cambios en la salida, lo que hará la detección más difícil. En este caso es más eficiente monitorizar la acción de control.

También es posible combinar ambos enfoques básicos. Por ejemplo, Tsung y Shi (1999) proponen monitorizar conjuntamente la característica de calidad y la variable manipulada de un proceso regulado usando una técnica SPC bivariante. Desarrollan una metodología integrada que combina conceptos de APC y SPC pensada para procesos por lotes. En estos, cualquier acción de control, por ejemplo el cambio de un parámetro del proceso, no se puede implementar durante la ejecución del lote, sino solo entre ejecuciones (*Run-to-Run processes*) y lo aplican a un proceso de fabricación de semiconductores. Para ello, derivan los parámetros de un controlador PID a partir del modelo de ruido que asumen que es un ARMA (1,1). Para monitorizar el proceso regulado emplean dos gráficos SPC, uno para la variable manipulada y otro para la variable de calidad empleando el concepto de control del error de primera especie de Bonferroni recomendado por Alt (1985). Así mismo estudian el rendimiento del controlador y el de los gráficos SPC. Los autores concluyen que los enfoques integrados proporcionan una mayor calidad y mejoras en el proceso, sin embargo opinan que la

investigación en estas metodologías integradas es escasa lo que supone una barrera para la implementación del concepto APC-SPC.

2.7.2 Modelos de Función de Transferencia y Algoritmos de Control

Una de las cuestiones clave en el desarrollo de la estrategia APC-SPC es el diseño del controlador a utilizar. Para ajustar un proceso que puede desviarse del nominal si no se controla, es necesario entender cómo cualquier ajuste potencial afectaría a la característica de calidad. También es importante comprender el comportamiento del proceso cuando opera sin ser controlado. Para ello, es necesario el modelado dinámico del proceso o sistema que genera la característica de calidad. Si se utiliza un modelo estadístico, el proceso se considerará como una caja negra, lo que significa que únicamente la variable de entrada y la de salida (en el caso univariante) se tendrán en cuenta para la modelización.

El algoritmo de control óptimo dependerá de la estructura de la función de transferencia dinámica entre la entrada y la salida, $H(B)$, y de la naturaleza de las perturbaciones aleatorias N_t (modelo ARIMA del ruido, $\phi(B)\nabla^d N_t = \theta(B)a_t$, siendo a_t un proceso estocástico de ruido blanco) que sumados modelizan el sistema de causas comunes que determina el proceso en cuestión, es decir el modelo:

$$y_t = \xi_t + N_t = H(B)x_t + \frac{\theta(B)}{\phi(B)}a_t \quad (2.113)$$

que puede representarse esquemáticamente como:

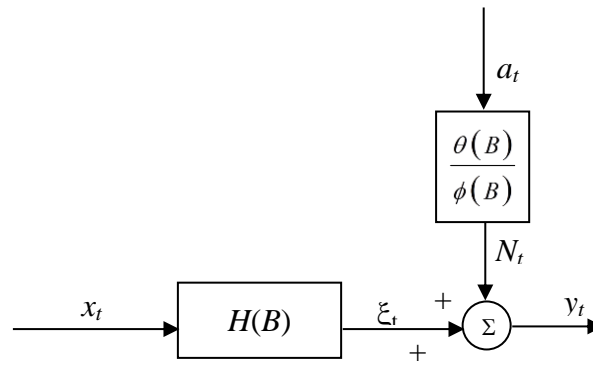


Figura 2.12 Modelo de función de transferencia dinámica.

donde y_t y x_t son, respectivamente, las desviaciones de la característica de calidad (salida) y de una variable de control manipulable (entrada) respecto a sus respectivos nominales, y donde $\theta(B)$ y $\phi(B)$ son polinomios de orden finito en el operador retardo B (estos polinomios comienzan con un uno). Se asume que todas las series temporales tienen observaciones equidistantes en el tiempo. Incluso los ingenieros de control, a día de hoy, llaman a este modelo, el *modelo de función de transferencia de Box-Jenkins (BJ)* (Box *et al.* 1994).

En esta representación, el sistema observado tiene dos partes, el primer término de la derecha es un modelo de función de transferencia del proceso que relaciona el efecto dinámico de x_t sobre la salida y_t , mientras que el segundo término representa el efecto también dinámico e independiente del anterior que sobre y_t tienen todas las perturbaciones que ocurren dentro del sistema. Estos efectos son aditivos. Cada término de la derecha de la ecuación es entendible fácilmente ya que tiene un significado físico concreto.

La naturaleza de los llamados “filtros” por los ingenieros de control, $H(B)$ y $\frac{\theta(B)}{\phi(B)}$ depende, a su vez, de la dinámica del proceso relativa a la frecuencia de muestreo. Este modelo permitirá derivar el algoritmo de control, predecir las respuestas futuras del proceso y encontrar las acciones de control óptimas para mantener la característica de calidad cerca del nominal o *set point* de alguna forma preestablecida.

Las funciones de transferencia del tipo:

$$y_t = (gB)x_t = gx_{t-1} \quad (2.114)$$

se denominan de ganancia pura, y definen los sistemas en los que todo el cambio en la salida y_t inducido por un cambio sostenido en la entrada x_t se produce tras un solo intervalo de tiempo. Este modelo es muy frecuente en las industrias de piezas donde, tras ajustar una máquina, el efecto se transmite inmediatamente a la siguiente pieza producida. El proceso está sujeto a perturbaciones, debidas al desgaste de las herramientas, de las piezas de la máquina, a las variaciones en la materia prima, a efectos térmicos, y a otros factores. De aquí que, lo que se observará realmente será:

$$y_t = gx_{t-1} + N_t \quad (2.115)$$

donde el término de ruido N_t típicamente seguirá un modelo ARIMA de bajo orden. En las industrias de procesos este modelo también puede ser válido si el intervalo de muestreo es suficientemente grande (es decir, baja frecuencia de muestreo) relativo a la inercia o tiempo de residencia del proceso, lo que suele ocurrir cuando el valor de la característica de calidad se obtiene tras costosas (por cuestiones de tiempo y/o dinero) y, por tanto, infrecuentes determinaciones analíticas en laboratorio.

Sin embargo, cuando el intervalo de muestreo es suficientemente pequeño como para que los efectos transitorios o dinámicos cobren importancia, la función de transferencia se modeliza mejor a partir de la siguiente expresión:

$$y_t = \frac{\omega_s(B)B^b}{\delta_r(B)} x_t \quad (2.116)$$

donde $\omega_s(B)$ y $\delta_r(B)$ son dos polinomios de órdenes s y r respectivamente en el operador B ($\omega_s(B)$ comienza con una constante arbitraria b_0 y $\delta_r(B)$ comienzan con un uno). Estas ecuaciones que incluyen polinomios en el operador retardo, se llaman ecuaciones en diferencias y son análogas a las ecuaciones diferenciales, pero usadas cuando el proceso se muestrea a intervalos de tiempo discretos. A $\delta_r(B)$ se le llama *polinomio*

*característico*⁴ porque determina (caracteriza) las propiedades de estabilidad del sistema. Y a la ecuación $\delta_r(B) = 0$, *ecuación característica del sistema*, ya que sus raíces (también llamadas polos de la función de transferencia) determinan su estabilidad.

De entre todos estos modelos, la función de transferencia de primer orden expresada como:

$$y_t = \frac{\omega_0 B^b}{1 - \delta B} x_t \quad (2.117)$$

constituye una aproximación razonable para caracterizar el comportamiento dinámico de muchos procesos industriales reales (Box y Kramer 1992, MacGregor 1988). Aunque en algunos casos, será necesario una función de transferencia de *segundo orden*:

$$y_t = \frac{\omega_0 B^b}{1 - \delta_1 B - \delta_2 B^2} x_t \quad (2.118)$$

Evidentemente habrá procesos más complicados que requieran más términos en la función de transferencia. En cualquier caso, y_t se observará con presencia de perturbaciones debidas a las variaciones en la materia prima, fluctuaciones de las condiciones ambientales y factores similares. Respecto al ruido N_t pueden considerarse en ambos casos, modelos de perturbaciones estocásticas estacionarios del tipo ARMA, o también no estacionarios del tipo ARIMA. En modelos estacionarios, a medida que va aumentando el intervalo de muestreo, la autocorrelación va perdiendo fuerza, llegándose en el límite a un proceso de ruido blanco $N_t = a_t$ (observaciones independientes e idénticamente distribuidas), que es la hipótesis clásica del SPC tradicional. Por otra parte, los distintos modelos de ruido no estacionarios, a medida que el intervalo de muestreo aumenta, tienden todos al modelo límite IMA(1,1):

⁴ En teoría de control comúnmente a este polinomio se le llama *mónico* porque comienza con un 1, y al polinomio $w_s(B)$ que comienza por w_0 no *mónico*.

$$\nabla N_t = (1 - \theta B)a_t \quad (2.119)$$

Esta es una de las razones por las cuales en características de calidad de procesos no estacionarios obtenidas tras infrecuentes determinaciones analíticas en laboratorio, el modelo IMA es muy usado en la práctica del SPC, y sus predicciones EWMA suelen dar muy buenos resultados (MacGregor 1988).

El objetivo del APC es optimizar las acciones de control respecto a un criterio preestablecido. La cuestión es cómo ajustar un proceso con la seguridad de que el ajuste sea óptimo en un sentido bien definido para la característica de calidad del producto que queremos controlar. El esquema general de un proceso regulado se representa en la figura 2.13.

Como se ha mencionado anteriormente el primer controlador que se desarrolló fue el MMSE o controlador de mínima “varianza” (Åström 1967, 1970 y Box y Jenkins 1962, 1963). El problema que se plantea en el control MMSE consiste en encontrar una regla (un “controlador”) que nos indique cómo mover una variable de control x_t de manera que el MSE de una variable respuesta dinámica y_t (la cual se asume que son las desviaciones respecto al nominal) se minimice en el modelo de *función de transferencia*:

$$y_t = \frac{\omega(B)}{\delta(B)} x_{t-b} + \frac{\theta(B)}{\phi(B)} a_t \quad a_t \stackrel{i.i.d.}{\approx} N(0 \ \sigma) \quad (2.120)$$

A pesar de la fácil interpretación y de las ventajas de ajustar el modelo (2.120), quizás resulte más sencillo derivar un controlador MMSE a partir de un modelo que contenga menos polinomios. El modelo ARMAX (*Autoregressive Moving Average eXogenous variable*) usado por Åström, empleando la terminología de la ingeniería de procesos, es el siguiente:

$$A(z^{-1})y_t = B(z^{-1})u_{t-k} + C(z^{-1})a_t \quad a_t \stackrel{i.i.d.}{\approx} N(0 \ \sigma) \quad (2.121)$$

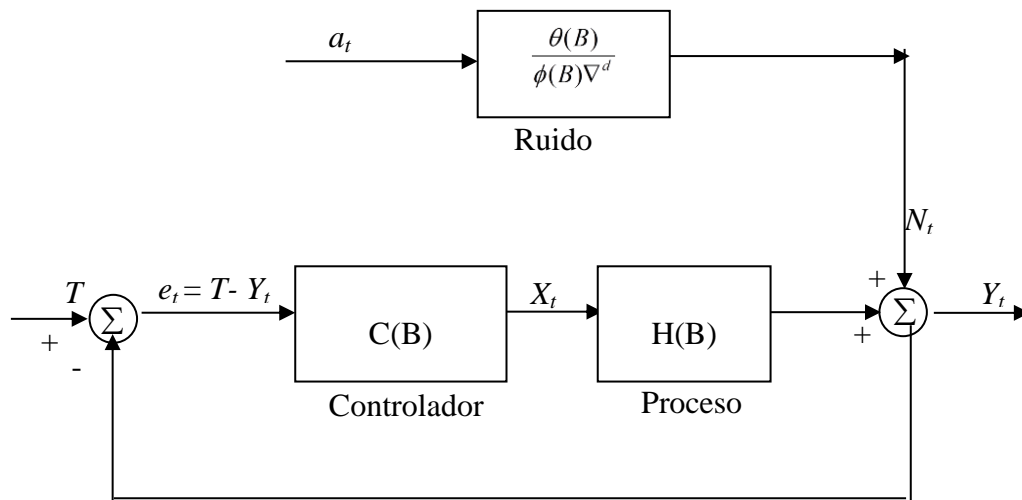


Figura 2.13 Esquema de un proceso regulado: control *feedback*.

con las siguientes relaciones obvias entre los dos modelos: $A(z^{-1}) = \delta(B)\phi(B)$,

$B(z^{-1}) = \omega(B)\phi(B)$, $C(z^{-1}) = \theta(B)\delta(B)$, $k=b$ y $z^{-1}=B$. Este modelo tiene básicamente la desventaja de que sus términos no se pueden identificar con el significado físico de las partes del sistema. Sea n el orden máximo de los polinomios $A(B)$, $B(B)$ y $C(B)$. El controlador *feedback* MMSE óptimo encontrado tanto por Åström, como por Box-Jenkins, en su expresión más general es:

$$x_t = -\frac{G(B)}{B(B)F(B)} y_t \quad (2.122)$$

en donde los polinomios G y F tienen órdenes $n-1$ y $k-1$ respectivamente, y se obtienen igualando coeficientes de la misma potencia de B en la ecuación $C = AF + B^k G$ (aquí G comienza con una constante, pero F empieza con un uno). Los ajustes vienen dados por $x_t - x_{t-1}$, cantidades cuya notación en la literatura de series temporales es ∇x_t . Bajo las acciones de este controlador, la salida controlada obedece al siguiente modelo:

$$Y_t = F(B)a_t \quad (2.123)$$

el cual, como se puede ver, es un proceso de media móvil de orden $k-1$. Por lo tanto, los procesos no siempre estarán incorrelacionados, incluso cuando están controlados vía un controlador MMSE.

Puesto que en muchos procesos industriales continuos el coste de no fabricar en el objetivo es muy superior al resto de costes, éste es el único que se suele considerar en la optimización de las acciones de control. Suponiendo además, que este coste es proporcional al cuadrado de las desviaciones de la salida frente al nominal T :

$$\text{Coste} = k(y_t)^2 \quad (2.124)$$

ya que como se ha visto, y_t son las desviaciones respecto al nominal T . Por lo tanto, minimizar dicho coste es equivalente a minimizar el error cuadrático medio, por lo que estos algoritmos de control están diseñados para minimizar la siguiente función objetivo:

$$\min. E(y_{t+k})^2 = \min. (\hat{y}_{t+k/t})^2 \quad (2.125)$$

Estos esquemas, en cada instante de tiempo t , determinan el ajuste de la entrada de forma que la predicción de mínima varianza a k pasos de la salida hecha en t , $\hat{y}_{t+k/t}$ coincida con su nominal T .

En el caso en que la función de transferencia no refleje dinámica, es decir que pueda expresarse como un modelo de respuesta rápida o ganancia pura (expresión (2.115), y que se use la predicción a un paso, el controlador de mínima varianza es:

$$x_t = -\frac{1}{g} \hat{N}_{t+1/t} \quad (2.126)$$

donde $\hat{N}_{t+1/t}$ es la predicción de mínima varianza de las perturbaciones para $t+1$, hecha en el instante t . Por tanto, las acciones de control dependen del modelo de las perturbaciones N_t .

Suponiendo un modelo estacionario ARMA(1,1) para N_t :

$$(1-\phi)N_t = (1-\theta)a_t \quad (2.127)$$

entonces se obtiene el siguiente controlador de mínima varianza:

$$x_t = -\frac{\phi-\theta}{g} \sum_{i=0}^t \phi^i y_{t-i} \quad (2.128)$$

Esta es la ecuación de un controlador integral con pesos exponencialmente decrecientes (puesto que $|\phi| < 1$).

Si se considera que el ruido sigue un modelo no estacionario IMA(1,1) (expresión (2.117)), el controlador de mínima varianza se expresa como:

$$x_t = -\frac{1-\theta}{g} \sum_{i=0}^t y_i \quad (2.129)$$

que es la ecuación de un controlador integral puro, muy utilizado en industrias de procesos para regular caudales en sistemas con respuestas rápidas contaminados con perturbaciones no estacionarias (MacGregor 1988).

En el caso en que la dinámica del proceso sea importante y pueda modelarse mediante una función de respuesta de primer orden (expresión (2.117)) con $b=1$ (lo que indica que un cambio en el comienza a manifestarse en la salida al instante siguiente), el controlador de mínima varianza es:

$$x_t = \frac{(1-\delta B)}{\omega_0} \hat{N}_{t+1/t} \quad (2.130)$$

y suponiendo que la perturbación sigue un modelo IMA(1,1), el controlador de mínima varianza es:

$$x_t = -\frac{(1-\theta)\delta}{\omega_0} y_t - \frac{(1-\theta)(1-\delta)}{\omega_0} \sum_{i=0}^t y_i \quad (2.131)$$

Inmediatamente resultó obvio tanto para Åström como para Box y Jenkins, que aunque estos controladores de mínima varianza son los óptimos desde el punto de vista MMSE, pueden no ser los más adecuados en la práctica, debido a varias causas. La primera es que pueden requerir drásticas acciones de control que, o bien exceden los límites físicos de rango de los equipos de instrumentación, o pueden afectar a otras respuestas, por lo que en muchos casos no son aceptables. Otra limitación es que no son robustos a errores en la modelización, ya que su funcionamiento y estabilidad dependen mucho de la precisión con que se ha estimado el modelo de función de transferencia (Box *et al.* 1994, Bergh y MacGregor 1987a, Harris y MacGregor 1987). Adicionalmente, este tipo de controladores no puede utilizarse en sistemas de fase no mínima (no invertibles), pues no serían viables ya que para cancelar una desviación de la salida en t provocarían acciones de control cada vez más grandes en los instantes de ajuste siguientes (Capilla *et al.* 1999, Harris *et al.* 1980).

Al darse cuenta de esto Box y Jenkins estudiaron algoritmos de control en los que, a costa de incrementar el MSE de la salida (respecto a la opción de mínima varianza), se requiriesen ajustes de menor magnitud en las acciones de control, teniendo en cuenta dos posibilidades:

- a) El caso en el que el coste del ajuste es fijo y que, por lo tanto, el objetivo es:

$$\text{minimizar } J_t = E \left[\sum_{t=1}^{\infty} y_t^2 + c\delta(\nabla x_{t-1}) \right] \quad (2.132)$$

donde:

$$\delta(\nabla x_{t-1}) = \begin{cases} 1, & \text{si } \nabla x_{t-1} \neq 0 \\ 0, & \text{si } \nabla x_{t-1} = 0 \end{cases}$$

Esto originó las llamadas políticas de control de banda muerta o ajuste acotado (*dead band* o *bounded adjustment*) (Box y Jenkins 1963).

b) El caso en el que la varianza de la entrada x_t debe ser restringida. Por lo tanto:

$$\text{minimizar } J_t = E \left[\sum_{t=1}^{\infty} y_t^2 \right] \quad (2.133)$$

sujeto a $\text{var}(x_t) \leq r$

Los controladores de varianza restringida de Box-Jenkins o *controladores con restricciones* son relativamente complicados de obtener y resultan ser controladores complejos. Restringir la varianza es equivalente a suponer una función de coste cuadrática en el factor de control en sí mismo:

$$\text{minimizar } J_t = E \left[\sum_{t=1}^{\infty} y_t^2 + r x_t^2 \right] \quad (2.134)$$

o alternatively se pueden usar los ajustes ∇x_t . El parámetro de restricción r actúa como un multiplicador de Lagrange en el proceso de optimización. Si los errores se distribuyen normalmente, este es un problema bien conocido en la teoría de control llamado *control cuadrático-lineal gaussiano* (LQG), ver Åström (1970). A diferencia de los controladores de mínima varianza, estos son menos sensibles a errores en la modelización del modelo de función de transferencia utilizado para su diseño.

El problema de los controladores cuadráticos-lineales es que su solución es complicada, requiriendo la utilización de ecuaciones de Wiener-Hopf discretas (Harris *et al.* 1980).

Clarke y Hasting-James (1971), y Clarke y Gawthrop (1975) proponen una alternativa mucho más sencilla de obtener controladores con restricciones mediante la minimización de la expresión:

$$\text{minimizar } E\{ \hat{y}_{t+k/t}^2 + r(\nabla x_t)^2 \} \quad (2.135)$$

Donde $\hat{y}_{t+k/t}$ es la predicción de varianza mínima de la salida y_{t+k} hecha en el instante t . El controlador de Clarke es un caso particular del controlador cuadrático-lineal general, es el controlador cuadrático lineal óptimo a un paso. Este algoritmo determina en cada instante de tiempo t el ajuste a aplicar en la entrada ∇x_t para conseguir que la predicción de la salida $\hat{y}_{t+k/t}$ sea 0, sujeto a la restricción en la magnitud de dicho ajuste en t , independientemente de los ajustes pasados o futuros. Algunos autores denominan a este tipo de controlador como de *cortas miras*, puesto que en la determinación del ajuste a aplicar en cada instante de tiempo no tiene en cuenta el efecto que éste tendrá en la salida en tiempos superiores al retardo del proceso b .

El criterio de Clarke (que conduce a los controladores cuadrático-lineales óptimos a un paso) es muy utilizado en la práctica dado que su solución es muy sencilla de obtener analíticamente y, para un mismo valor en la restricción de la varianza de los ajustes, provoca únicamente ligeros incrementos en la varianza de la salida respecto a los controladores de mínima varianza con restricciones (MacGregor y Tidwell 1977). Otro atractivo de este criterio es que conduce a controladores en los que el parámetro de restricción de los ajustes r aparece explícitamente en la ecuación del controlador (algo que no ocurre en los controladores de mínima varianza con restricciones), por lo que puede ser fácilmente modificado o autoajustado *on-line*.

Otro grupo de controladores con restricciones lo constituyen los *controladores de horizonte extendido* (*Extended Horizon Controllers*, EHC). Estos controladores son una modificación de los de mínima varianza (2.125) en los que la función objetivo a minimizar es:

$$\text{minimizar } \hat{y}_{t+k/t}^2 \quad k > b \quad (2.136)$$

Estos controladores, en vez de conseguir que $\hat{y}_{t+k/t} = 0$, como en el caso de los controladores de mínima varianza, determinan la acción de control en t para que $\hat{y}_{t+k/t} = 0$, donde $k > b$. Esto provoca una disminución de la varianza de los ajustes (respecto al

controlador de mínima varianza), al tiempo que incrementa su robustez frente a errores en el modelo. Capilla *et al.* (1999) derivan diversos controladores según los criterios anteriores obteniendo que el controlador de horizonte extendido (EHC) es un caso particular del controlador de Clarke para un cierto valor del coeficiente de restricción de los ajustes r .

En el caso en que los costes de muestreo y de ajuste no se consideren despreciables (lo que puede ocurrir en industrias de piezas, dado que los ajustes del proceso pueden suponer parada de máquinas, cambio de piezas y pérdida de productividad), los esquemas anteriores de ajuste no se deben aplicar en cada intervalo de muestreo, ya que la estrategia óptima dependerá de los costes relativos asociados a no fabricar en el objetivo frente a los de ajustar el proceso. Box (1991), Box y Kramer (1992), Box *et al.* (1994), Box y Luceño (1994, 1997a) y Luceño (1998) estudian en estos contextos lo que denominan esquemas óptimos de banda muerta o de ajuste acotado (*dead band feedback adjustment schemes*, también llamados *bounded schemes*).

2.7.3 Sistemas SISO

Ferrer *et al.* (1997) exponen la filosofía de la estrategia APC-SPC en el caso más sencillo de un sistema de una entrada y una (*single-input/single-output* SISO). En el desarrollo de la componente APC, el conocimiento del modelo de función de transferencia del proceso permite determinar las acciones de control a adoptar en cada instante t para minimizar la variabilidad de la característica de calidad en torno a su valor nominal.

El desarrollo de los esquemas de monitorización plantea varias cuestiones: como “qué monitorizar” y “con qué herramienta”. La respuesta a estas cuestiones no es fácil, pues las causas especiales se manifiestan de forma diferente según el algoritmo de control utilizado, y la herramienta de monitorización más adecuada para detectar una causa especial depende de la forma en que dicha causa se manifieste. Stanfelj *et al.* (1991) presentan un método jerárquico basado en análisis de funciones de autocorrelación y correlación cruzada para evaluar el comportamiento de sistemas regulados y ayudar al diagnóstico de problemas relacionados fundamentalmente con errores de especificación del modelo, o con mal ajuste de los controladores. La monitorización de las desviaciones

de la salida permite evaluar si el algoritmo de control está funcionando adecuadamente. Aunque para esto, es necesario además monitorizar los ajustes en la variable manipulada, pues puede ocurrir que el sistema esté sometido a cambios que fueren al controlador a realizar ajustes cada vez mayores que, si no se detectan a tiempo, pueden provocar la saturación del controlador y la imposibilidad de seguir compensando los efectos de estas causas especiales de variabilidad, generando problemas en el proceso. Algunas causas especiales que produzcan desviaciones temporales del modelo bajo control se pueden manifestar como datos anómalos o pautas inusuales en la secuencia de errores de predicción, por lo que es adecuado monitorizar dichos errores. También puede aportar información valiosa la monitorización de la serie de desviaciones de la salida reconstruidas en el supuesto de que no hubiera existido algoritmo de control.

Los procedimientos de monitorización consisten fundamentalmente en la aplicación de los gráficos de control estándar a las magnitudes resultantes del proceso regulado (errores de predicción, ajustes en las variables compensatorias, desviaciones de la salida, etc.). Para determinar qué tipo de gráfico es adecuado en cada caso, es necesario conocer la estructura de las diferentes magnitudes a monitorizar bajo el sistema regulado, lo que puede obtenerse analíticamente a partir del modelo de función de transferencia y el algoritmo de control utilizado.

Si la dinámica del proceso es $Y_t = H(B)X_t + N_t$, es posible expresar las acciones de control óptimo como $\nabla X_t = G(B)Y_t$. Sustituyendo esta ecuación en la anterior se puede obtener el modelo ARMA para las desviaciones de la respecto al nominal, $Y_t = A(B)a_t$. A partir de este modelo, sustituyendo en la ecuación de control, se obtiene el modelo ARMA para los ajustes de la variable compensatoria, $\nabla X_t = G(B)A(B)a_t$. Adicionalmente, en la deducción de la ecuación de control, se deriva el modelo ARMA para los errores de predicción (diferencia entre la salida observada en t y la que se predijo para t en el instante $t-b$, siendo b el retardo de la función de transferencia).

Estos resultados son necesarios para el diseño de los procedimientos de monitorización. El conocimiento de la dinámica de estas variables permite modificar los parámetros del gráfico correspondiente (límites de control, señales de falta de control a emplear, etc.) con el fin de evitar la elevada frecuencia de falsas alarmas y la pérdida de potencia que supone utilizar gráficos de control estándar con datos autocorrelacionados (Capilla *et al.* 1999, Ferrer *et al.* 1998, Ferrer *et al.* 2000).

Capilla *et al.* (1999) y Ferrer *et al.* (1998) desarrollan en un proceso industrial petroquímico que de nuevo se va a estudiar en esta tesis, la nueva estrategia APC-SPC aplicada al control del índice de fluidez de un polímero mediante ajustes en la temperatura del reactor. Los autores diseñan varios tipos de algoritmos de control (mínima varianza, con restricciones, etc. Box *et al.* 1994, Bergh y MacGregor 1987a, Harris y MacGregor 1987) estudiando la estabilidad y robustez frente a errores de especificación del modelo. Comparan el funcionamiento del sistema APC frente al enfoque integrado APC-SPC ante diversas causas especiales de variabilidad (error de medida del índice de fluidez del polímero en laboratorio, fallo de calibración del sensor de temperatura, presencia de contaminación en el flujo de entrada al reactor, cambios en las condiciones de activación del catalizador, etc.) y obtienen que los controladores diseñados, en general, son bastante efectivos en la estabilización del proceso tras la presencia de las causas especiales de variabilidad. A pesar de ello, la varianza del sistema APC aumenta respecto a la situación sin causas especiales. Esto es debido a que los controladores tardan un tiempo en cancelar el efecto de las perturbaciones, tiempo en el que la variabilidad del proceso aumenta. Los autores muestran cómo la incorporación de la componente SPC, para monitorizar el sistema, puede proporcionar a largo plazo una importante reducción de variabilidad de la característica de calidad, al permitir detectar las causas especiales y ayudar en su identificación, permitiendo la implantación de medidas correctoras que eviten su reaparición en el futuro.

2.7.4 Sistemas MISO

Martín *et al.* (1997, 1998) amplían el estudio desarrollado por Capilla *et al.* (1999) al caso del control del índice de fluidez de un polímero mediante ajustes en dos variables compensatorias fácilmente manipulables: la temperatura del reactor y el caudal de entrada en el mismo de un producto químico (monómero).

Considerando el principio de superposición de modelos lineales, y que las dos variables de ajuste están incorrelacionadas, se puede añadir el efecto individual que cada variable compensatoria tiene sobre la variable respuesta, teniendo en cuenta que las perturbaciones pueden ser ajustadas mediante un único modelo de serie temporal. En este

caso, se asume que el modelo de función de transferencia de causas comunes puede expresarse como:

$$y_t = \frac{\omega_1(B)}{\delta_1(B)} x_{1,t-b_1} + \frac{\omega_2(B)}{\delta_2(B)} x_{2,t-b_2} \frac{\theta(B)}{\phi(B)} a_t \quad a_t \stackrel{i.i.d.}{\simeq} N(0, \sigma) \quad (2.137)$$

Los autores citados desarrollan diversas estrategias de control a partir de las ya comentadas en el apartado 2.7.3, pero particularizándolas al caso de dos variables de ajuste, y estudian sus propiedades de robustez frente a errores de especificación de los parámetros de la función de transferencia del modelo. Al mismo tiempo derivan la estructura de las diversas magnitudes resultantes de la regulación (desviación de la salida, ajustes, etc.).

El análisis de los resultados obtenidos bajo control refleja que los algoritmos de control *bi-input* permiten reducir todavía más la variabilidad de la salida respecto al control con una sola variable de ajuste.

Se estudia también en estos trabajos la eficacia del sistema APC ante diversas causas especiales de variabilidad. En los resultados obtenidos se observa que el controlador *bi-input* es preferible al *mono-input* en el sentido de que da lugar a errores cuadráticos medios en las salidas menores, y al mismo tiempo con menores ajustes en las variables compensatorias.

En todos los casos, las causas especiales empeoran el funcionamiento del proceso (incrementan el error cuadrático medio de la salida), pues los controladores tardan un tiempo en compensar sus efectos. Por ello, los autores estudian las ventajas del esquema integrado APC-SPC mediante la monitorización de diversas magnitudes del proceso regulado, concluyendo que el esquema integrado APC-SPC es preferible al APC al permitir detectar con rapidez la presencia de las causas especiales simuladas, lo que en la práctica permitirá investigarlas e implantar medidas que eviten su aparición en el futuro, con la consiguiente mejora del proceso.

2.7.5 Sistemas MIMO

En el ámbito de la integración de las metodologías APC y SPC se ha realizado como se ha visto bastante investigación referida a procesos SISO, sin embargo en procesos MIMO (*multi-input/ multi-output*) el avance ha sido muy limitado, existiendo pocas publicaciones. Algunos investigadores han aplicado métodos estadísticos multivariantes de proyección en estructuras latentes, PCA, PLS y otras técnicas de identificación y diagnóstico de fallos (FDI) para interpretar perturbaciones y variaciones en procesos multivariantes que están regulados, aunque normalmente estos trabajos ponen su foco en algún aspecto concreto del control. Por ejemplo, Zhang *et al.* (2004) investigaron los beneficios que ofrece a los ingenieros involucrados en procesos de fermentación por lotes, el modelo *multi-way* PLS usado para inferir variables de calidad que son difíciles de medir *on-line*, tales como la concentración en biomasa. Estudiaron las ventajas de utilizar dicho modelo integrado en el marco del Control Predictivo basado en Modelos (MPC, *Model Predictive Control*), para regular el crecimiento de biomasa en el tanque fermentador. Al mismo tiempo, muestran las capacidades de estos métodos multivariantes para monitorizar el proceso e incluso el funcionamiento del controlador. Para ello utilizaron las capacidades que tiene el modelo PLS para detección y aislamiento de fallos. Afirman que en estudios previos la monitorización y el control de los procesos de fermentación por lotes han sido vistos como problemas independientes. Para investigar la aplicación de este sistema de control modelizan el proceso mediante una serie de detallados modelos mecanicistas. Demuestran las ventajas que tiene integrar el uso de un modelo PLS en la estructura de un controlador MPC, para inferir variables de calidad que son difíciles de medir *on-line*, detectar e aislar fallos y monitorizar el funcionamiento del proceso y del propio controlador. Este seguimiento proporciona una medida de la consistencia de las condiciones de funcionamiento con los datos utilizados para desarrollar el modelo y también una indicación de la precisión del modelo PLS estimado en estas condiciones.

Recientemente, AlGhazzawi y Lennox (2008) han aplicado a un proceso complejo de refinado de petróleo la monitorización en tiempo real basada en la metodología MSPC, con un controlador MPC multivariable instalado. Han estudiado la capacidad de diferentes modelos PCA (estático, estático multibloque, recursivo y recursivo multibloque), tomando como variables para construir los modelos PCA, variables del

proceso y variables controladas. Concluyen que en este procedimiento integrado el modelo PCA que mejor funciona en este proceso de fraccionamiento en columna, es el recursivo y multibloque, debido a que la dinámica del proceso varía con el tiempo y a que dividir el proceso en unidades lógicas permite detectar mayor número de anomalías. La diferencia con la metodología desarrollada en esta tesis, es que en su trabajo no consideran la inclusión de variables implícitas del controlador MPC (ajustes presentes y futuros, normas futuras de los vectores de ajustes, errores y errores predichos, etc.) en el modelo NOC-PCA en que se basan los gráficos de control multivariantes del módulo MSPC, que ayuden a perfeccionar la monitorización del funcionamiento del controlador MPC. Reconocen que en la pasada década se ha avanzado mucho en la implementación de sistemas automáticos de control y se han realizado numerosas investigaciones sobre la supervisión de los controladores en bucle cerrado en procesos SISO, pero que el avance en procesos MIMO ha sido muy limitado. La complejidad de estos sistemas MPC hacen que la identificación y el diagnóstico de problemas en su funcionamiento sea un reto. Los mismos autores en (2009) exploran la capacidad del MSPC para la supervisión del funcionamiento del sistema de control MPC en el mismo proceso de refinamiento de petróleo, comprobando que permite detectar anomalías en el funcionamiento del controlador e identificar las posibles causas de dicho comportamiento. Para ello, utilizan gráficos de control intuitivos y fáciles de usar basados en modelos PCA/PLS, que incluso puedan ser manejados por operarios que no sean expertos conocedores de la tecnología MPC. Muestran a través de su aplicación a datos históricos obtenidos de este proceso de fraccionamiento, cómo el MSPC es capaz de identificar y diagnosticar un rendimiento insuficiente del controlador MPC, producido por varias fuentes, incluyendo una interacción inapropiada de los operadores de control.

2.8 RESUMEN

De la descripción de la metodología APC-SPC y de las investigaciones industriales referenciadas en la bibliografía se concluye que es posible reducir sustancialmente la variabilidad de las características de calidad de los productos fabricados, tanto a corto plazo como a largo plazo, lo que permite tanto la optimización como la mejora continua de la calidad. De este modo se hace viable la monitorización de procesos dinámicos,

mejorando su capacidad, reduciendo las falsas alarmas y aumentando la escasa potencia que se tiene cuando se usan las técnicas tradicionales de SPC en estos contextos. Recurriendo a un ejemplo práctico se puede decir que “*no se puede conducir un vehículo con SPC, pero tampoco se puede detectar un fallo en el sistema de dirección del vehículo con APC*” (Faltin *et al.* 1993). Pero quizá ambas cosas son posibles con un sistema integrado APC-SPC.

Un tema que merece ser investigado con mayor profundidad es la forma de implantar los esquemas APC en la práctica: utilizando una estructura de controlador ya prefijada que funcione razonablemente bien en un amplio rango de situaciones, o diseñando el algoritmo de control a partir del modelo de función de transferencia y de la función objetivo a minimizar.

Algunos autores como Box y Kramer (1992) sugieren utilizar directamente la estructura del controlador PI (2.130) expresado como (2.131), donde los coeficientes del término proporcional (K_p) e integral (K_I) pueden ajustarse mediante técnicas de experimentación secuencial (*Evolutionary Operations*, EVOP) (Box y Draper 1968) que permiten experimentar en condiciones de producción normal (experimentación *on-line*). Box y Luceño (1997b) proporcionan un estudio muy exhaustivo de estos esquemas PI comparando su funcionamiento con otros esquemas óptimos de regulación más complejos. Las ventajas que ofrecen estos controladores PI son su sencillez (los ajustes en cada instante t se calculan como combinación lineal de las dos últimas desviaciones de la salida) y facilidad de implantación (los ajustes pueden obtenerse gráficamente). Tsung (1998) estudia la eficiencia y robustez de los controladores PI ante diversas dinámicas de proceso y modelos de ruido (ARMA(1,1) y ARIMA(1,1,1)). Los autores recomiendan el uso en la práctica de estos controladores, dada su relativa poca pérdida de eficiencia respecto al controlador de mínima varianza en un rango amplio de valores de los parámetros del modelo, y su robustez frente a errores de especificación en el mismo. En el caso en que sea necesario utilizar controladores con restricciones, Box y Luceño (1995) también sugieren la utilización de controladores PI con los parámetros adecuadamente ajustados, y comparan su buen funcionamiento relativo a los esquemas óptimos en estas situaciones (controladores de mínima varianza con restricciones, expresión (2.131)), mucho más complicados de obtener.

Otros autores como Vander Wiel y Vardeman (1992) consideran, sin embargo, que aunque el controlador PI puede ser adecuado en muchas situaciones, es conveniente

derivar el algoritmo de control a partir de la identificación y estimación del modelo de función de transferencia del sistema. Una ventaja de este método es que se pueden obtener analíticamente los modelos que seguirán las diversas magnitudes resultantes del sistema regulado (desviaciones de la salida, ajustes, etc.), y se pueden diseñar los esquemas de monitorización adecuados según su estructura (Capilla *et al.* 1999).

Un peligro que tiene este enfoque es que, puesto que el modelo de perturbaciones N_t se identifica y estima a partir de datos históricos del proceso, en ocasiones puede ocurrir que un modelo no estacionario IMA(1,1) se estime equivocadamente como un modelo estacionario ARMA (1,1) con parámetro ϕ cercano a uno, siendo ambos modelos equivalentes desde el punto de vista estadístico (Ferrer *et al.* 2000). El problema de este error de modelización del ruido es que el algoritmo de control derivado bajo la suposición del modelo de perturbaciones estacionario ARMA, en presencia de perturbaciones no estacionarias IMA, provocaría un controlador inestable (ajustes cada vez mayores) que forzaría a la desconexión del controlador automático y a una pérdida de confianza en el sistema APC por parte de los operarios e ingenieros del proceso. Esto también podría ocurrir en el caso en que el modelo de perturbaciones, inicialmente estacionario, hubiera cambiado a un proceso no estacionario. Esta falta de robustez de los controladores diseñados suponiendo modelos ARMA para las perturbaciones, ante perturbaciones no estacionarias, ha sido estudiada por varios autores (Box y Luceño 1997a, Ferrer *et al.* 2000, Tsung 1998).

Sin embargo, el modelo IMA es robusto a errores de especificación en el sentido de que el controlador diseñado según este modelo no estacionario, en presencia de ruido estacionario, seguiría siendo estable y sólo daría lugar a un ligero incremento en la varianza de la salida. La robustez que proporciona el modelo IMA para las perturbaciones N_t , en contraste con el modelo ARMA, se explica fundamentalmente porque el modelo no estacionario fuerza a la ecuación de control a incluir una acción integral pura, que es capaz de compensar cambios de nivel (Box y Luceño 1997a, Ferrer *et al.* 2000, Tsung 1998). El modelo IMA, por tanto, aparte de ser una alternativa más segura frente a errores de especificación del modelo, debido a su no estacionariedad, constituye un modelo más creíble frente al modelo ARMA estacionario, ya que éste último asume que si el sistema funciona en ciclo abierto (sin ajustes de control) la salida continuará fluctuando alrededor de su nominal sin experimentar cambios de nivel, lo que resulta una hipótesis poco realista en muchos contextos industriales.

Las ventajas del modelo IMA frente a otros modelos de perturbaciones estacionarios no invalida la estrategia de diseño de los algoritmos de control a partir de la modelización del sistema dinámico, sino que es un elemento más a tener en cuenta en el proceso de diseño. Por otra parte, los controladores con restricciones derivados a partir del criterio de Clarke (expresiones (2.133) y (2.134)) pueden llegar a ser incluso más sencillos de obtener que los controladores PI con restricciones (Box y Luceño 1995). Además, el hecho de tener explícito en la ecuación de control el parámetro de restricción de los ajustes r puede resultar interesante desde el punto de vista de la estrategia APC-SPC por la posibilidad de desarrollar esquemas de control con parámetro de restricción variable. Así, ante determinadas señales de falta de control detectadas por los diferentes gráficos de monitorización, se podría tratar de reducir el peso del coeficiente r para permitir acciones de control más agresivas que corrigieran el proceso en menos tiempo. Habría que estudiar, sin embargo, ante qué tipo de situaciones causantes de ciertas salidas de control estadístico del proceso, este esquema sería efectivo, ya que, por ejemplo, ante cambios en la dinámica del ruido o de la función de transferencia, una disminución del peso del coeficiente r supondría una disminución en la robustez del controlador, lo que podría ocasionar problemas de inestabilidad en la práctica (Capilla *et al.* 1999, Ferrer *et al.* 1998).

Estas cuestiones siguen siendo objeto de debate actual en la comunidad científica y continuarán siéndolo en el futuro, por lo que estudios comparativos de los diferentes enfoques planteados podrían aportar luz sobre esta problemática.

Otro tema abierto es cómo desarrollar la metodología APC-SPC en procesos *multi-input/ multi-output* (sistemas MIMO) donde existen varias variables salida relacionadas entre sí (*v.g.* distintas variables de calidad, variables de productividad, etc.), que pueden depender de más de un parámetro de proceso. El diseño de sistemas de regulación automática (componente APC) ha sido tratado en el contexto MIMO por algunos autores (Clarke *et al.* 1987a, 1987b, Cutler y Ramaker 1979, 1980, Harris y MacGregor 1987). Normalmente la monitorización y el control de los procesos han sido vistos como problemas independientes. En las investigaciones revisadas, para procesos MIMO, en las que se utilizan ambos tipos de control no se estudia desde una visión global e integrada de todo el sistema de control, sino que se enfatiza en algún aspecto importante del control, ya sea automático o estadístico.

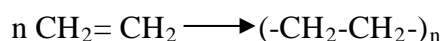
La aplicación de la metodología APC-SPC en este contexto, supone integrar el sistema de regulación con otro de monitorización. Intervienen pues muchos temas de modelización, de control y de monitorización, algunos de los cuales han sido poco tratados en la bibliografía existente sobre estas cuestiones, habiendo una necesidad de más investigación en esta vasta y vital área. Todos estos temas serán tratados en los siguientes capítulos de esta tesis.

CAPÍTULO 3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO INDUSTRIAL

3.1 INTRODUCCIÓN

La metodología de integración de procedimientos multivariantes de control automático y monitorización estadística de procesos continuos propuesta en esta tesis, se ha aplicado con fines ilustrativos a un proceso de fabricación a escala industrial de polietileno de alta densidad, cuya abreviatura es PEAD.

El polietileno, de ahora en adelante PE, forma parte del grupo de compuestos químicos denominado “poliolefinas”. Se denomina poliolefina o polialqueno a todo aquel polímero que se obtiene por polimerización de una olefina, término que está siendo sustituido por alqueno según la denominación IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*). Un alqueno es un hidrocarburo insaturado que tiene uno o varios enlaces dobles carbono-carbono en su molécula. El PE es un polímero sintético termoplástico que se obtiene por polimerización del etileno, según la siguiente reacción general:



El número de veces que se repite la unidad básica en el proceso de polimerización depende del tipo de catalizador utilizado, de la temperatura y de la presión de la reacción química, dando lugar a los diferentes tipos de PE, más o menos ramificados, y con cadenas lineales de menor o de mayor longitud. El PE es un material parcialmente cristalino y parcialmente amorfo, de color blanquecino y translúcido.

De forma general, el PE se clasifica en tres tipos de acuerdo a su densidad ya que esta característica física determina en gran medida la estructura y las propiedades del polímero:

- PE de baja densidad
- PE de media densidad
- PE de alta densidad

El PE de baja densidad, es un polímero de cadena ramificada. Se obtiene por polimerización del etileno a altas presiones por el mecanismo de radicales libres. Es un

polímero con una densidad comprendida entre 0.910 – 0.925 g/cm³; es incoloro, inodoro y no tóxico. El PE de media densidad, es un polímero con densidad comprendida entre 0.930 – 0.940 gr/cm³, que se emplea especialmente en la fabricación de tuberías. El PE alta densidad, es un polímero con estructura lineal y muy pocas ramificaciones. Se obtiene por polimerización del etileno a presiones relativamente bajas. Para obtenerlo existen diferentes procesos, que utilizan distintos catalizadores: el proceso Ziegler-Natta, el proceso Philips, o el que usa como catalizadores los metallocenos, utilizados únicamente para obtener PE de ultra alto peso molecular (PEAD-UAPM). Es un polímero con densidad comprendida entre 0.941 – 0.954 gr/cm³.

EL PEAD es un polímero sintético, termoplástico, miembro de las poliolefinas, es semicristalino (70 – 80%), incoloro, inodoro, no toxico, lácteo y se puede encontrar en todas las tonalidades transparentes y opacas. Es un plástico muy utilizado en productos de consumo, por su bajo precio, porque es un excelente aislante de la electricidad, por su muy buena resistencia química y por su flexibilidad.

El sistema de control integrado APC-SPC que se va a desarrollar en esta tesis, se aplicará al proceso de obtención de PE de alta densidad mediante polimerización del gas etileno y mediante el proceso Philips que permite obtener el polímero a bajas temperaturas y presiones.

La materia prima es el gas etileno obtenido en su mayor parte del petróleo. Es un gas que a presión normal (760 mm Hg) tiene un punto de ebullición de – 103.71°C y calor de polimerización muy alto (3350-4185 J/g). El calor desprendido en la reacciones de polimerización tiene que ser cuidadosamente controlado, porque las reacciones de descomposición que se producen a altas temperaturas son a su vez muy exotérmicas pudiéndose producir explosiones si el proceso se descontrola. Las impurezas tienen que ser rigurosamente eliminadas puesto que afectan al proceso de polimerización y también afectan a las propiedades del polímero obtenido, especialmente a las propiedades aislantes de la electricidad y al envejecimiento por calor del plástico. En particular, el monóxido de carbono, el acetileno, el oxígeno y la humedad, tienen que estar a niveles muy bajos.

Variando la temperatura, la presión, la composición y el tipo del iniciador, mediante la incorporación de agentes de transferencias de cadenas, y mediante la inyección del iniciador en la mezcla de la reacción en diferentes puntos del reactor, es posible hacer variar, independientemente de otras características del polímero, las ramificaciones,

peso molecular, y distribución de los pesos moleculares, sobre un amplio rango sin necesidad de tiempos dilatados de transición.

Para un sistema dado, cuanto más alta es la temperatura, más rápida es la reacción, y menor es el peso molecular.

3.2 EL PROCESO PHILIPS

En este proceso se utiliza un catalizador que patentó la Philips Petroleum Co, que montó la primera planta en 1957 en Pasadena (EEUU), que consiste en un óxido metálico, ya sea de cromo o titanio, soportado sobre sílice-aluminio. Este tipo de catalizador trabaja a presiones medias de 5 – 15 Kg/cm² y temperatura de 100 a 170° C utilizándose como disolvente un hidrocarburo como el hexano.

Para obtener el PEAD, el catalizador se activa a 250°C, y se inyecta en un reactor separador gas-líquido, en el que también se inyecta el etileno. El solvente sirve para disolver el polímero a medida que se va formando, y también vale como medio de transferencia de calor, pero es inerte. El catalizador se elimina de la parte líquida del reactor y el polímero se separa del solvente, mediante la inyección del solvente o precipitando el polímero mediante enfriamiento. Con este proceso se pueden obtener polímeros cuyo índice de fluidez (o “*melt index*”, un inverso del peso molecular) varía en un amplio rango, entre menos de 0.1 hasta más de 600, pero los productos comerciales tienen un índice de fluidez entre 0.2-5 y son los que tienen mayor densidad de los PE comerciales, del orden de 0.96 g/cm³.

El mecanismo de polimerización no se conoce, pero no hay dudas de que la reacción de polimerización se produce cerca de la superficie del catalizador donde se concentran las moléculas de etileno y se orientan en el espacio de una determinada forma. El peso molecular y el índice de fluidez dependen en gran medida de la temperatura. Si aumenta la temperatura, aumenta el índice de fluidez y disminuye el peso molecular. A una presión por encima de 2.9 MPa, la presión de la reacción tiene poca incidencia en el peso molecular y en la productividad, pero por debajo de esa presión sí que tiene influencia en el peso molecular y en la productividad, disminuyéndolas. La temperatura de activación del catalizador también tiene influencia en estos dos aspectos. A mayor temperatura de activación, mayor es la productividad y menor es el peso molecular. La

presencia de oxígeno, acetileno, nitrógeno o cloro, actúan como venenos del catalizador, por lo tanto, se deben emplear reactivos muy puros.

Cuando el proceso de polimerización se lleva a cabo a temperaturas del orden de 100°C, es decir por debajo del punto de fusión cristalino, el polímero es muy poco soluble en el solvente y forma gránulos en suspensión alrededor de las partículas del catalizador. Se necesitan altos niveles de conversión para reducir el nivel de contaminación por parte del catalizador y puede haber problemas de acumulación del polímero sobre las paredes del reactor. De esta forma se fabrican polímeros de peso molecular más alto.

El PEAD no es totalmente cristalino, pues dado el tamaño de la molécula lo habitual es encontrar zonas ordenadas dispersas en zonas amorfas, es decir posee un estado semicristalino. De las zonas cristalinas/zonas amorfas depende la cristalinidad. A esta relación se le denomina grado de cristalinidad. El grado de cristalinidad que se alcanza depende de la estructura, además del proceso seguido para la cristalización. Según la temperatura a la que se efectúe ésta, la rapidez con que se generan los cristales, y el tratamiento térmico y mecánico posterior que se le da al polímero, la cristalinidad resultará mayor o menor. La cristalinidad juega un papel muy importante en las propiedades del PEAD, principalmente en las propiedades mecánicas y térmicas ya que estas se ven favorecidas cuanto más cristalino es el polímero.

La combinación de las diversas características del PEAD como son: la densidad, índice de fluidez, peso molecular, distribución del peso molecular, contenido de monómeros, proporciona los diversos grados que el mercado ofrece de este plástico.

La principal característica de calidad es el Índice de fluidez. El MI (“*melt index*”) es un parámetro indicativo de la capacidad de flujo del plástico en estado fundido. La obtención de esta información se da en condiciones normalizadas de laboratorio, de esta manera es posible realizar comparaciones en condiciones semejantes. El Índice de fluidez o la capacidad de flujo del PE no dependen solamente del peso molecular, también la distribución del peso molecular y el grado de ramificación entre otros factores que afectan la capacidad de flujo del polímero.

En la Figura 3.1 se muestra el diagrama del proceso Philips de obtención del PEAD y en la Figura 3.2 una foto del reactor en lazo.

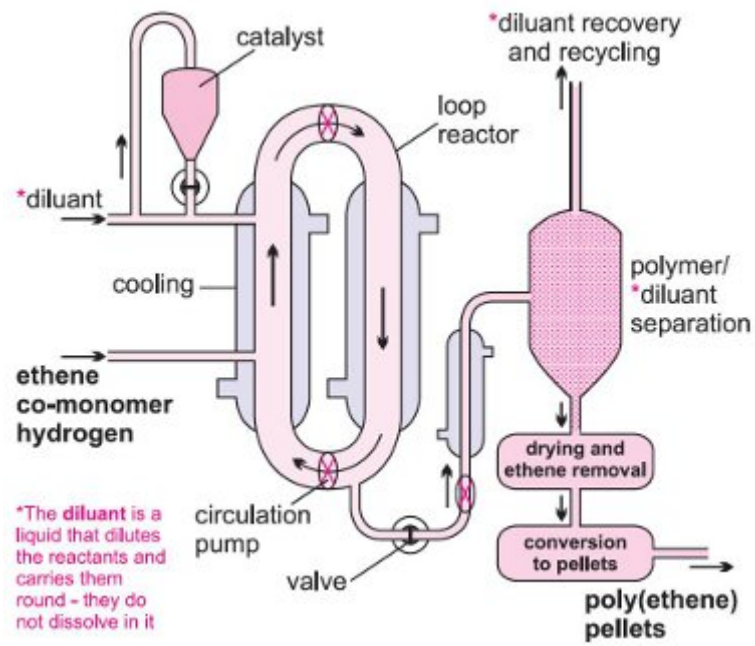


Figura 3.1 Diagrama del proceso Philips de obtención del PEAD



Figura 3.2 Reactor en lazo del proceso Philips de obtención del PEAD

3.3 DESCRIPCIÓN DE LAS VARIABLES DEL PROCESO

Es un proceso MIMO (*multi-input; multi-output*), en el que se tienen dos salidas o variables controladas y dos entradas o variables manipuladas. Las salidas son: la característica clave de calidad del polímero que es la viscosidad medida mediante un índice de fluidez (MI_t , *Melt Index*) y una medida del rendimiento del proceso ($APRE_t$), calculada por balance de energía. Las entradas son la temperatura (T_t) y el caudal de etileno (E_t). Ambas son dos variables de proceso manipulables de forma fácil y económica (*variables compensatorias*) que permiten la regulación de las variables de salida. Las observaciones de las propiedades del polímero MI_t se han tomado a intervalos equiespaciados de tiempo: en concreto las muestras se han obtenido cada dos horas del efluente del reactor y analizadas *off-line* en laboratorio, comprobándose que el error de muestreo y de medida no revestían gran importancia.

Los datos de productividad ($APRE_t$) se han calculado también por balance de energía cada dos horas, de forma contemporánea a los datos de viscosidad. Por otro lado, la temperatura y el caudal de etileno (T_{t-1} , E_{t-1}) son las medias de la temperatura y del caudal de etileno en el reactor durante las dos horas anteriores al periodo t , lo que significa, tal como se refleja en la Figura 3.3, que las mismas van adelantadas una hora respecto a las variables de salida.

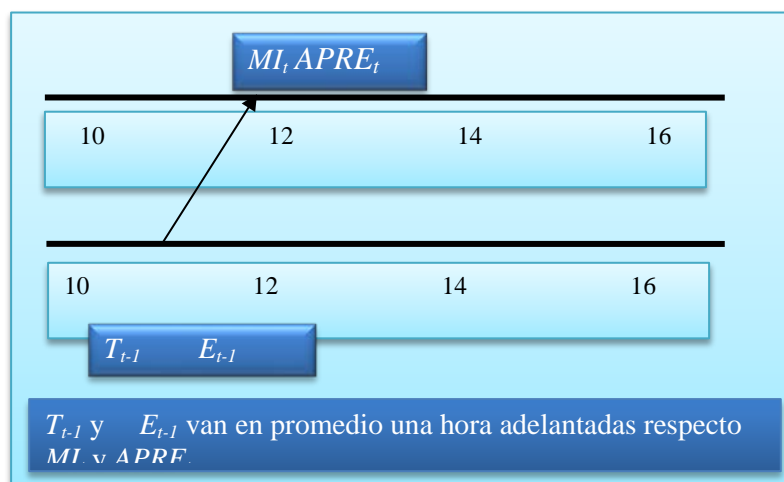


Figura 3.3 Esquema de obtención de los datos del proceso

El objetivo del sistema de control es minimizar la variación del MI_t alrededor de un valor nominal de 0.8 y establecer la producción $APRE_t$ tan elevada como sea posible

siempre que se pueda garantizar que el MI_t se mantenga dentro de las especificaciones de calidad. Estas variables se pueden controlar mediante el ajuste de la temperatura T_t en el reactor y el caudal de entrada de etileno E_t . Los costes asociados a las variaciones de estos parámetros son despreciables comparados con los costes en los que se incurre cuando la viscosidad del polímero toma valores distintos a su valor nominal o la producción no está por encima de un nivel aceptable. Las oportunidades de ajuste se presentan cada dos horas, cuando se dispone de los datos de viscosidad y de producción, y tras las acciones de control pertinentes en las *variables compensatorias*, los niveles de temperatura y de caudal de etileno permanecen sin cambios entre observaciones. La Figura 3.4 muestra los datos representados gráficamente en forma de series temporales de las distintas entradas y salidas del proceso en una de las campañas de fabricación analizadas.

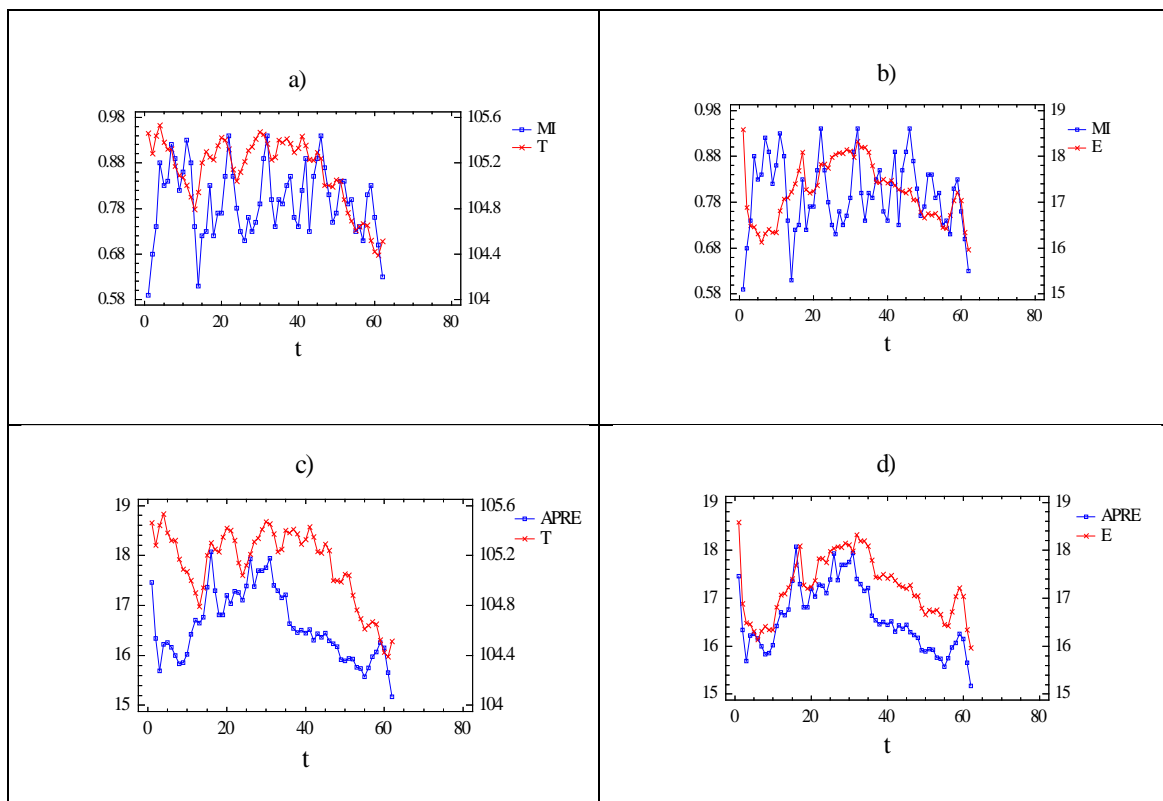


Figura 3.4 Ejemplo de los datos de entradas y salidas de una campaña de fabricación: a) T_t , MI_t b) E_t , MI_t c) T_t , $APRE_t$ y d) E_t , $APRE_t$

En todas las series representadas se pueden observar autocorrelaciones. También es posible observar cómo se reproducen algunos picos, valles y puntos de inflexión tras un periodo de retardo entre las entradas y las salidas, lo que hace sospechar que las

diferentes series estén correlacionadas de forma cruzada. Queda, por tanto, justificado el empleo de metodologías estadísticas de modelado basadas en el análisis de series temporales y modelos de regresión dinámica multivariantes.

CAPÍTULO 4. ESTIMACIÓN DEL MODELO DEL PROCESO

4.1 INTRODUCCIÓN

Cuando el objetivo perseguido es establecer un sistema de control de un proceso industrial (mediante regulación automática, monitorización estadística o una integración de ambas estrategias), un requerimiento clave es disponer de un modelo del mismo. La mayoría de los procesos industriales, y en particular los procesos químicos, son de naturaleza multivariante (es decir concurren en ellos dos o más variables de entrada y salida), además suelen ser no lineales y están constantemente respondiendo a perturbaciones medibles o no medibles, de las que no se sabe cuándo se producen en el tiempo. Aunque casi todos los procesos son no lineales, en la práctica los modelos lineales son comúnmente usados para establecer sistemas de control. Esta práctica está en parte justificada porque en general los procesos operan dentro de regiones localizadas en las cuales las no linealidades que se presentan son bastante suaves. Por lo tanto, una cuestión importante a efectos de establecer un sistema de control integrado es obtener un modelo lineal multivariable apropiado y que caracterice las perturbaciones aleatorias. La palabra apropiado es más bien subjetiva, pero refleja la capacidad del modelo para describir el proceso y no únicamente la capacidad de ajustarse bien a los datos obtenidos- a lo que Ljung (1991) se refiere como la diferencia entre sistema de identificación y ajuste a una curva.

El proceso que va a servir de base para la ilustración de la metodología propuesta en este trabajo de investigación consiste en un proceso continuo de obtención a escala industrial de PEAD, un polímero a partir del monómero correspondiente (etileno), que se usa en la fabricación de muchos productos de consumo. Los mecanismos subyacentes que regulan este proceso son de naturaleza multivariante y no son bien conocidos, por lo que obtener un modelo basado en los primeros principios no es fácil.

En este tipo de procesos industriales es frecuente la existencia de autocorrelaciones entre medidas sucesivas, consecuencia de la presencia de elementos inerciales como flujo de materias primas, tanques de almacenamiento, reactores, reflujos, condiciones ambientales, etc. con tiempos de residencia o dinámicas (inercias) mayores que la frecuencia de muestreo (Ferrer 2004). Por ejemplo, en este proceso de fabricación de

PEAD mediante un reactor en lazo, las moléculas de etileno tienen un tiempo de residencia de unas cuatro horas; si se toma una muestra del reactor cada dos horas, hay moléculas que han coexistido en el reactor en varias tomas de muestra, por lo que es esperable encontrar correlaciones entre muestras consecutivas (Capilla *et al.* 1999). En general todos los procedimientos de fabricación presentan cierta inercia frente a la acción de parámetros ambientales, el cambio de materias primas o al ajuste de sus condiciones operativas, por lo que un aumento de la frecuencia de muestreo puede llegar a generar la aparición de autocorrelación entre observaciones cercanas en el tiempo.

En este contexto, los modelos de regresión múltiple, de gran importancia en el análisis estadístico clásico, presentan dos limitaciones importantes: la primera suponer que la relación entre las variables de entrada y de salida del sistema es instantánea, cuando en realidad este tipo de procesos con dinámica presentan inercias y/o retardos en las respuestas; la segunda que la parte de la/s respuesta/s no explicada por las variables independientes es ruido blanco, es decir, que puede modelarse como un proceso estocástico idéntico, independiente y normalmente distribuido. Estas dos restricciones –razonables en situaciones estáticas en las que por hipótesis se prescinde de la posible dimensión temporal de los datos– son frecuentemente erróneas cuando las variables se observan a lo largo del tiempo y es esperable estructura dinámica (Peña 1998). Además en estos procesos también es frecuente encontrar correlación entre las variables de salida, siendo más adecuado en este caso ajustar un modelo conjunto para todas ellas, en vez de un modelo para cada variable de salida. El modelo conjunto aumentaría la precisión de las estimaciones.

Por estas razones es conveniente obtener el *modelo de regresión dinámica* que en este tipo de sistemas vendrá caracterizado por la *función de transferencia discreta*. Las *funciones de transferencia dinámica* (Box y Jenkins 1976, Box *et al.* 1994) surgen como una generalización de los modelos de regresión para estudiar la relación entre una o más series temporales dependientes $y_{1t}, y_{2t}, \dots, y_{Lt}$ y una o más series temporales explicativas: $x_{1t}, x_{2t}, \dots, x_{Mt}$, cuando se sospecha que las series están autocorrelacionadas y que, además, las relaciones existentes no son exclusivamente instantáneas sino que pueden presentar retardos temporales y/o inercias. Estos modelos permiten medir cómo se transmiten los efectos entre variables y son un instrumento importante en ingeniería

de procesos, puesto que sólo cuando se conoce la dinámica del sistema es posible establecer un sistema de control efectivo.

En procesos con dinámica, los valores observados contienen información que permite predecir la evolución futura del proceso; información que, si se dispone de *variables compensatorias* fáciles de manipular, puede aprovecharse para tomar acciones que mejoren dicha evolución futura, minimizando la variabilidad predecible respecto al valor óptimo y mejorando de forma continua la calidad del producto (Ferrer 2004). Cuando el coste de ajustar el proceso es prácticamente despreciable comparado con el coste de no fabricar en el objetivo, como suele ocurrir en muchos procesos continuos, está justificada la regulación continua del proceso, mediante ajustes en *variables compensatorias*, de forma que se minimice la variabilidad de las variables de salida en torno a sus valores objetivo, utilizando las técnicas de regulación automática (control *feedback* o *feedforward*) en lo que se conoce como estrategia APC o EPC.

Los esquemas de control avanzado de procesos, tales como el control predictivo basado en modelos (MPC) que se va a aplicar en esta tesis, está compuesto por una serie de algoritmos de control como *Dynamic Matrix Control* (DMC) o *Generalized Predictive Control* (GPC). El MPC está siendo ampliamente aceptado en las industrias de procesos químicos. Ello se debe a la capacidad de este tipo de algoritmos de control de ser aplicados a sistemas de naturaleza multivariable, con diversos tipos de restricciones ya sean “duras” o “blandas”, usando descripciones del proceso simples e intuitivas tales como la función de respuesta a impulsos (*fir*) o la función de respuesta a escalón (*fer*). Al ser algoritmos de control basados en modelos, su diseño requiere obtener un modelo del proceso preciso, que debe representar fielmente el proceso, describiendo las relaciones dinámicas entre las variables que intervienen y las perturbaciones estocásticas, con la finalidad de poder realizar predicciones óptimas de la evolución del mismo que permitan que dicho control sea eficaz y eficiente. Los modelos deterministas, basados en primeros principios, son difíciles de obtener o poco manejables para ser usados en el diseño de estos controladores. De manera que usualmente el modelo del proceso multivariable se obtiene empíricamente a partir de un conjunto de datos registrados del proceso mediante un experimento de identificación. En estos test de identificación, las variables manipuladas (VM) clave son excitadas para generar las respuestas a escalón en las variables controladas (VC). Sin embargo, operando de esta forma, no se obtiene un verdadero modelo multivariable, puesto que no se tiene en cuenta en la identificación las posibles correlaciones entre las VC. En esta

tesis, se propone identificar un modelo multivariable, que tenga en cuenta estas correlaciones e interacciones entre variables.

Tras identificar, estimar y validar el modelo de *función de transferencia*, será posible derivar el algoritmo de control que permita saber cuáles son las acciones de control que se deben tomar en cada tiempo t . La función *fir* o *fer* del proceso, necesaria para derivar la ley de control, se puede estimar de varias formas a partir de los datos obtenidos funcionando el proceso en condiciones normales. Por ejemplo en forma parsimoniosa, estimando la *función de transferencia* de orden bajo mediante cocientes de polinomios, por el método de estimación de la máxima verosimilitud o general de los errores de predicción (Box y Jenkins 1976, Box *et al.* 1994, Åström 1970, Ljung 1987), o también se puede estimar directamente en forma no parsimoniosa usando métodos de regresión tales como los mínimos cuadrados ordinarios o métodos sesgados, como los mínimos cuadrados regularizados o regresión-cresta (*ridge regression* o RR) (Hoerl and Kennard 1970) o los mínimos cuadrados parciales PLS (Wold 1975). Existen varios artículos de revisión excelentes que analizan varias propiedades de estos métodos de regresión (Burnham *et al.* 1996, Breiman y Freiman, 1997, Frank y Freiman 1993).

Aunque identificar directamente la *fir* tiene ciertas ventajas, -vg., se puede ajustar cualquier sistema lineal dinámico complejo, sin necesidad de seleccionar previamente la estructura del modelo-, la comparación entre los métodos de estimación de la función de transferencia, de bajo orden, parsimoniosa, y los de estimación directa de la *fir* usando diferentes métodos de regresión no está suficientemente documentada (Dayal 1996). Por ello, en el presente trabajo se va a obtener el modelo del proceso mediante los dos enfoques mencionados, empleando la metodología Box-Jenkins para la obtención de la *función de transferencia múltiple* en forma parsimoniosa, y la metodología series temporales multivariantes TS-PLS para obtener la *función de respuesta a impulso* no parsimoniosa al objeto de comparar las características de ambas metodologías.

En el presente capítulo se comparan las dos metodologías estadísticas de estimación multivariante mencionadas, para el modelado de un proceso industrial de polimerización en continuo. Dicha comparación se realiza teniendo en cuenta distintos aspectos como son la *simplicidad* del procedimiento de modelado en las etapas de identificación, estimación y validación del modelo, así como la utilidad de las *herramientas gráficas* que proporcionan ambas metodologías, la *bondad de ajuste* obtenida, la *simplicidad de la estructura matemática* del modelo, etc. El capítulo consta de dos amplias secciones, la primera referente al modelado aplicando la metodología

Box-Jenkins mediante el modelo de *función de transferencia múltiple*, y la segunda al modelado mediante el método de regresión PLS dinámico o series temporales TS-PLS. En ambas secciones, tras introducir sucintamente ambas metodologías, se aborda la formulación del modelo, se describen los análisis preliminares de los datos, y se identifica, se estima y se valida el modelo. La última sección de este capítulo ofrece una comparación de ambos modelos y las conclusiones obtenidas.

4.2 MODELO DE FUNCIÓN DE TRANSFERENCIA MÚLTIPLE O VARMAX

Para obtener el modelo del proceso se estimará la *función de transferencia múltiple* (*multi-input multi-output*) (Jenkins 1979, Liu y Hudak 1985, Reinsel 1997, Liu 2006) que es una formulación alternativa a los modelos ARMA vectoriales usados en análisis de series temporales multivariantes. Estos modelos permiten establecer las relaciones dinámicas entre las variables de entrada x_{mt} y las variables de salida y_{lt} de un sistema dinámico que presenta autocorrelaciones y correlaciones cruzadas como ocurre en el contexto de este proceso. La forma general de la *función de transferencia múltiple* que relaciona M variables de entrada con L variables de salida, expresada matricialmente es la siguiente:

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{c} + \sum_{b=0}^{\infty} \Psi_b^* B^b \mathbf{x}_t + \mathbf{n}_t \quad (4.1)$$

donde $\mathbf{x}_t = (x_{1t}, x_{2t}, \dots, x_{Mt})^T$ es un vector ($M \times 1$) de variables exógenas (entradas), $\mathbf{y}_t = (y_{1t}, y_{2t}, \dots, y_{Lt})^T$ es un vector ($L \times 1$) de variables endógenas (salidas), que varían a lo largo del tiempo t ; $B^b \mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t-b}$ es el operador retardo; Ψ_b^* son matrices ($L \times M$) de respuesta a impulsos, cuyos coeficientes representan los efectos que los cambios en las variables de entrada x_{mt} tienen sobre las variables de salida b periodos después, $y_{l(t+b)}$, y donde el superíndice* está indicando una matriz asociada a las variables exógenas; \mathbf{c} es un vector ($L \times 1$) de constantes; \mathbf{n}_t es un vector de ruido ($L \times 1$), del cual se asume que sigue un proceso ARMA vectorial estacionario, $\Phi^{-1}(B)\mathbf{n}_t = \Theta(B)\mathbf{a}_t$, donde

$\Phi(B) = \mathbf{I} - \Phi_1 B - \Phi_2 B^2 - \dots - \Phi_p B^p$ y $\Theta(B) = \mathbf{I} - \Theta_1 B - \Theta_2 B^2 - \dots - \Theta_q B^q$ son matrices de polinomios en función de B , de orden finito, y Φ_i y Θ_j son matrices $(L \times L)$. En la expresión anterior, $\mathbf{a}_t = (a_{1t}, a_{2t}, \dots, a_{Lt})^T$ es una serie de vectores $(L \times 1)$ de ruido blanco, esto es, independientes e idénticamente distribuidos según una normal multivariante $N(\mathbf{0}, \Sigma)$.

Otra forma de representación del modelo, es la llamada modelo ARMAX multivariante o vectorial. En el modelo (4.1) el operador de la *función de transferencia* $\Psi^*(B) = \sum_{b=0}^{\infty} \Psi_b^* B^b$ se puede representar factorizado en forma de cociente como: $\Psi^*(B) = \Phi^{-1}(B)\Theta^*(B)$, dando lugar a la expresión:

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{c} + \Psi^*(B)\mathbf{x}_t + \mathbf{n}_t = \mathbf{c} + \Phi(B)^{-1}\Theta^*(B)\mathbf{x}_t + \mathbf{n}_t \quad (4.2)$$

donde $\Theta^*(B) = \mathbf{I} - \Theta_1^* B - \Theta_2^* B^2 - \dots - \Theta_s^* B^s$ es de orden s , y Θ_b^* son matrices $(L \times M)$.

Asumiendo, por conveniencia, que el factor $\Phi(B)$ en $\Psi^*(B)$ es el mismo que el factor AR del modelo de ruido \mathbf{n}_t , la ecuación 4.2 puede expresarse como:

$$\Phi(B)\mathbf{y}_t = \mathbf{c}' + \Theta^*(B)\mathbf{x}_t + \Phi(B)\mathbf{n}_t \equiv \mathbf{c}' + \Theta^*(B)\mathbf{x}_t + \Theta(B)\mathbf{a}_t \quad (4.3)$$

o, de forma equivalente:

$$\mathbf{y}_t - \sum_{b=1}^p \Phi_b \mathbf{y}_{t-b} = \mathbf{c}' + \sum_{b=0}^s \Theta_b^* \mathbf{x}_{t-b} + \mathbf{a}_t - \sum_{b=1}^q \Theta_b \mathbf{a}_{t-b} \quad (4.4)$$

a esta forma del modelo se le llama sistema ARMAX (la X representa a las variables exógenas de entrada, \mathbf{x}_t).

El modelo (4.4) es estable, si todas las raíces del $\det\{\Phi(B) = \mathbf{I} - \Phi_1 B - \Phi_2 B^2 - \dots - \Phi_p B^p\} = 0$ son mayores que uno en valor absoluto (*det* es determinante). En ese caso, si la serie de entrada \mathbf{X}_t es un proceso estocástico

estacionario (de la misma manera que la serie \mathbf{n}_t), entonces la serie de salida \mathbf{y}_t también será estacionaria y el proceso tendrá una representación convergente similar a (4.1):

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{c} + \Psi^*(B)\mathbf{x}_t + \Psi(B)\mathbf{a}_t = \mathbf{c} + \sum_{b=0}^{\infty} \Psi_b^* \mathbf{x}_{t-b} + \sum_{b=0}^{\infty} \Psi_b \mathbf{a}_{t-b} \quad (4.5)$$

donde $\Psi(B) = \Phi^{-1}(B)\Theta(B)$. De forma similar, el modelo (4.4) es invertible si todas las raíces del $\det\{\Theta(B) = \mathbf{I} - \Theta_1 B - \Theta_2 B^2 - \dots - \Theta_q B^q\} = 0$ son mayores que uno en valor absoluto. No existen sin embargo restricciones sobre las raíces del $\det\{\Theta^*(B) = \mathbf{I} - \Theta_1^* B - \Theta_2^* B^2 - \dots - \Theta_q^* B^q\} = 0$.

Si los procesos originales \mathbf{X}_t , \mathbf{Y}_t y \mathbf{N}_t no fuesen estacionarios es necesario convertirlos previamente en los procesos \mathbf{x}_t , \mathbf{y}_t y \mathbf{n}_t estacionarios. Para ello, se emplea el procedimiento de diferenciación. Para el caso de una serie Z_t univariante no estacionaria, se define el *operador diferencia*, y se denota por $\nabla = (1 - B)$ como:

$$\nabla Z_t = (1 - B)Z_t = Z_t - Z_{t-1} \quad (4.6)$$

El resultado de aplicar el operador diferencia a una serie Z_t con T observaciones es obtener una nueva serie de $T-1$ observaciones mediante la operación (4.6), para $t = 2, \dots, T$. A este cálculo realizado para $\forall t$, se le llama *primera diferencia*. El operador diferencia puede aplicarse más de una vez, hasta obtener un proceso estacionario z_t :

$$z_t = \nabla^d Z_t = (1 - B)^d Z_t \quad (4.7)$$

donde d es el orden de diferenciación. Cuando una serie Z_t tras ser diferenciada d veces se ha transformado en estacionaria, se dice que es una serie integrada de orden d . Normalmente casi nunca es necesario $d > 2$ para estabilizar una serie en media. Lo mismo es aplicable al caso multivariante. Si se tiene el vector $\mathbf{Z}_t = (Z_{1t}, Z_{2t}, \dots, Z_{Kt})^T$ que consta de K series univariantes no necesariamente estacionarias:

$$\mathbf{z}_t = \mathbf{D}(B)\mathbf{Z}_t \tag{4.8}$$

$$\mathbf{D}(B) = \text{Diag} \left\{ (1-B)^{d_1}, (1-B)^{d_2}, \dots, (1-B)^{d_k} \right\} =$$

donde

$$= \begin{bmatrix} (1-B)^{d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & (1-B)^{d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & (1-B)^{d_k} \end{bmatrix} \tag{4.9}$$

El modelo (4.8) es lo suficientemente flexible como para permitir diferentes grados de diferenciación para cada serie temporal.

Hay que tener, por lo tanto, en cuenta que los procesos \mathbf{x}_t , \mathbf{y}_t y \mathbf{n}_t derivan de los procesos originales \mathbf{X}_t , \mathbf{Y}_t y \mathbf{N}_t transformados mediante diferenciación para convertirlos en procesos estacionarios o mediante transformaciones tipo Box-Cox (Box y Cox, 1964) para estabilizarlos en varianza, según la siguiente expresión: $\mathbf{y}_t = \nabla^d \mathbf{Y}_t^{(\lambda)}$.

Las hipótesis principales de este modelo son:

- (1) el proceso exógeno \mathbf{x}_t se genera independientemente del proceso de ruido \mathbf{n}_t .
De hecho, las variables exógenas \mathbf{x}_t pueden estar compuestas de variables estocásticas y no estocásticas (deterministas);
- (2) el proceso exógeno \mathbf{x}_t puede afectar al proceso respuesta \mathbf{y}_t , pero no al contrario, es decir la relación es unidireccional;

Para el uso práctico del modelo (4.1) los elementos individuales de la matriz del operador de la *función de transferencia* $\Psi^*(B) = \sum_{b=0}^{\infty} \Psi_b^* B^b$ pueden ser representados en forma de cocientes de polinomios de orden finito en el operador retardo B ,

$v_{lm} = \frac{\omega_{lm}(B)}{\delta_{lm}(B)}$. Puesto que cada componente del *output* puede expresarse en función de

los *inputs* como: $y_{lt} = \sum_{m=1}^M \sum_{b=0}^{\infty} v_{lm,b} x_{mt-b} = \sum_{m=1}^M v_{lm}(B) x_{mt}$, cada subconjunto de coeficientes

$v_{lm,b}$ constituye la *función de respuesta a impulsos* univariante. Estos coeficientes

recogen y cuantifican los efectos que los cambios de una componente input, x_{mt} tienen sobre una componente *output* $y_{l(t+b)}$, b periodos después. Por otro lado, el proceso de ruido \mathbf{n}_t es un proceso ARMA vectorial, cuyas componentes pueden ser expresadas como $n_{it} = \frac{\theta_i(B)}{\phi_i(B)} a_{it}$, lo que conduce a una formulación alternativa de la *función de transferencia multi-input multi-output* expresada para cada una de las ecuaciones individuales como:

$$y_{it} = c_l + \sum_{m=1}^M \frac{\omega_{lm}(B)}{\delta_{lm}(B)} B^{b_{lm}} x_{mt} + \frac{\theta_l(B)}{\phi_l(B)} a_{it} ; \quad l \in (1, \dots, L) \quad (4.10)$$

donde $\omega_{lm}, \delta_{lm}, \theta_l$ y ϕ_l son polinomios de orden finito en el operador retardo, B . El modelo descrito en (4.10) es una generalización multivariante del modelo de *función de transferencia SISO (single-input single-output)* (Box y Jenkins 1976, Box *et al.* 1994, Pankratz 1991).

La ecuación (4.10) expresada en forma matricial, para el caso particular del proceso objeto de estudio, en el que $M=2$ y $L=2$, tiene la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} y_{1t} \\ y_{2t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\omega_{11}(B)B^{b_{11}}}{\delta_{11}(B)} & \frac{\omega_{12}(B)B^{b_{12}}}{\delta_{12}(B)} \\ \frac{\omega_{21}(B)B^{b_{21}}}{\delta_{21}(B)} & \frac{\omega_{22}(B)B^{b_{22}}}{\delta_{22}(B)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1t} \\ x_{2t} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\theta_1(B)}{\phi_1(B)} & 0 \\ 0 & \frac{\theta_2(B)}{\phi_2(B)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1t} \\ a_{2t} \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

Para que el modelo pueda ser estimable, se asume que el modelo es identificable (Granger y Newbold 1986, Hannan 1971, Kohn 1979), para lo cual es necesario que las series de ruido sean estacionarias e invertibles (las raíces de los polinomios $\phi_i(B)$ y $\theta_i(B)$ estén fuera del círculo unidad) y las raíces de $\delta_{lm}(B)$ estén fuera del círculo unidad.

En algunos contextos, como el del proceso tratado en esta tesis, el interés se centra en usar las variables de entrada \mathbf{x}_t para controlar los valores de las variables respuesta o

de salida y_t , por lo que a las variables x_t se les llama frecuentemente *variables manipuladas* y a las variables y_t *variables controladas*.

4.3 ANÁLISIS PREVIO A LA IDENTIFICACIÓN

Antes de proceder a la identificación del modelo, es necesario realizar algunos análisis previos a esta, con la finalidad de realizar las siguientes comprobaciones:

- (1) Existencia de datos anómalos. En esta etapa preliminar, se pretende estar alerta ante observaciones inusuales. En realidad se pueden detectar valores anómalos u *outliers* en cualquier etapa del modelado. De hecho es bastante usual entre los analistas de series temporales descubrir valores anómalos en la etapa de validación del modelo, cuando se estudian las series de residuos procedentes de la estimación.
- (2) Detectar la posible heterocedasticidad de los datos para ver si es necesario estabilizar la varianza mediante alguna transformación de tipo Box-Cox (Box y Cox , 1964).
- (3) La necesidad de diferenciar las series, en el caso de que no sean estacionarias. Tal como se ha mencionado en la sección anterior, los procesos estocásticos que generan las series deben ser estacionarios, es decir, permanecer en equilibrio alrededor de una media constante.

En esta etapa también resulta interesante obtener los modelos ARIMA de las series individuales de entrada y de salida antes de proceder a la identificación del modelo de *función de transferencia múltiple*.

4.3.1 Método de detección de valores anómalos y ajuste conjunto de sus efectos y de los parámetros del modelo

Para identificar qué datos son auténticos *outliers*, saber en qué periodo t se han producido, estudiar de qué tipo son y proceder a la estimación y posterior eliminación de sus efectos sobre la serie, se empleará un método conjunto de identificación de valores anómalos y estimación conjunta de sus efectos y de los parámetros del modelo ARIMA o *función de transferencia* desarrollado por Chen y Liu (1993a).

Las series temporales a menudo están sujetas a sucesos externos inesperados o incontrolados (intervenciones). Si se conocen estos sucesos se pueden cuantificar sus efectos a través del análisis de intervención (Box y Tiao 1975). Sin embargo, si inicialmente no se conocen esos sucesos o los periodos de tiempo t en los que se producen, o aunque sí se conozcan, el tipo de respuesta dinámica (pulso, escalón, cambio gradual o abrupto, etc.) no es conocida, resulta más adecuado usar otras aproximaciones como la que se presenta en esta sección, para detectar y ajustar los efectos de estos sucesos.

Los efectos de estas intervenciones producen observaciones inusuales (anómalos u *outliers*). Dependiendo de su naturaleza, los anómalos pueden tener un efecto moderado o sustancial sobre una serie temporal. Detectar los anómalos es importante por las siguientes razones:

1. **Una mejor comprensión de la serie bajo estudio.** La detección de anómalos puede poner de manifiesto la ocurrencia de esos acontecimientos externos que afectan a la serie y de qué manera le afectan. Idealmente las intervenciones identificadas se pueden explicar e interpretar. Pese a que el método que se presenta sólo permite identificar el evento externo, no proporcionando explicaciones al respecto, el estudio de la historia de la serie puede conducir a interpretaciones plausibles de los acontecimientos identificados o también a descubrir las observaciones anómalas (e.g. errores en la toma de datos) que pueden enmascarar el propio modelo de la serie.
2. **Una mejor especificación y estimación del modelo.** Las intervenciones y los anómalos pueden alterar seriamente la estructura de autocorrelación de una

serie y los estadísticos usados en la identificación del modelo. Estos efectos pueden ser desde moderados a severos. Descubrir los anómalos y ajustar los efectos de estos eventos externos, puede mejorar la especificación global del modelo ARIMA, simplificarlo y obtener estimaciones más precisas de los parámetros del mismo, aumentando la potencia estadística de los contrastes de hipótesis usados.

- 3. Mejores predicciones.** Los acontecimientos externos pueden afectar a la precisión de las predicciones. Si se modelan y ajustan los efectos de las intervenciones, mejorará la capacidad global de predicción del modelo obtenido. Incluso si se considera que ese evento externo puede volver a ocurrir, se puede predecir su efecto.

Tipos de outliers

Sea:

$$z_t = \frac{\theta_q(B)}{\phi_p(B)\nabla^d} a_t \quad (4.12)$$

un proceso ARIMA (p, d, q) . En esta notación p es el orden del polinomio $\theta(B)$, es decir de la parte autorregresiva estacionaria; d es el grado de diferenciación y q es el grado del polinomio $\phi(B)$, es decir de la parte media móvil.

El proceso (4.12) se asume que es estacionario e invertible. Estos procesos podrían tener también un término constante que no se va a tener en cuenta para simplificar la notación. Supóngase que en vez de observar z_t en realidad se está observando una serie contaminada y_t compuesta por la serie original z_t más un término de contaminación $f(t)$:

$$y_t = f(t) + z_t \quad (4.13)$$

donde $f(t)$ describe un acontecimiento externo. En la práctica $f(t)$ puede tener una gran variedad de formas. Para simplificar, vamos a suponer que $f(t)$ tiene la forma de una función de transferencia expresada como cociente de polinomios en B , siendo B el operador de retardo:

$$f(t) = \frac{\omega(B)}{\delta(B)} I_t^{(i)} \quad (4.14)$$

donde $I_t^{(i)}$ es una variable binaria determinista.

Consideremos cuatro casos especiales para $f(t)$:

Anómalo aditivo (AO)

Diremos que ha ocurrido un anómalo aditivo (AO *Additive outlier*) sobre una serie temporal en un instante $t=i$, si el valor de la serie en ese instante se genera de manera distinta al resto. En este caso en el término $f(t)$, todos los coeficientes de $\omega(B)$ y de $\delta(B)$ serán cero excepto ω_0 (escrito aquí como ω_A). El modelo que seguirá una serie observada, y_t , afectada por un AO en $t=i$ será, sustituyendo $f(t) = \omega_A I_t^{(i)}$ en 4.14:

$$y_t = \omega_A I_t^{(i)} + z_t \quad (4.15)$$

es decir,

$$y_t = \omega_A I_t^{(i)} + \frac{\theta(B)}{\phi(B)\nabla^d} a_t \quad (4.16)$$

donde $I_t^{(i)} = 0$ para $t \neq i$ e $I_t^{(i)} = 1$ para $t = i$. Este modelo es idéntico al de análisis de intervención con un impulso. La diferencia es que en el análisis de intervención, en la variable $I_t^{(i)}$, el instante i se supone conocida, mientras que en el método que se expone el instante i es desconocido. Este tipo de datos anómalos son análogos a los que ocurren

en datos estáticos como, por ejemplo, un error de medición o de transcripción de un dato.

La ecuación 4.16 muestra que la serie contaminada y_t es idéntica a la serie original z_t excepto en una observación. La serie se desplaza ω_A unidades en el tiempo $t=i$, hacia arriba (si $\omega_A > 0$) o hacia abajo (si $\omega_A < 0$).

Anómalo innovativo (AI)

Diremos que ha ocurrido un anómalo innovativo (IO *Innovational Outlier*) en una serie temporal en $t=i$, cuando la innovación $\{a_t\}$ en ese punto está directamente afectada por una cantidad desconocida debida a un suceso imprevisto. La innovación de una serie temporal representa el efecto agregado no sistemático de todas las variables que influyen sobre la serie, y un anómalo innovativo es, por lo tanto, un efecto añadido a la serie aleatoria de ruido a_t . Un atípico sobre la innovación puede interpretarse como un cambio imprevisible en una o varias de las variables que afectan a la serie. Como la innovación representa el error de predicción a un paso, podemos decir que un IO es un incremento del error de predicción de la serie en un punto debido a un cambio en las condiciones externas.

En este caso, en el término $f(t)$ todos los coeficientes de $\omega(B)$ serán cero excepto ω_0 (escrito aquí como ω_1). El modelo que seguirá una serie observada y_t , afectada por un

IO en $t=i$ será, sustituyendo $f(t) = \frac{\theta(B)}{\phi(B)\nabla^d} \omega_1 I_t^{(i)}$ en 4.14:

$$y_t = \frac{\theta(B)}{\phi(B)\nabla^d} \omega_1 I_t^{(i)} + z_t \quad (4.17)$$

es decir,

$$y_t = \frac{\theta(B)}{\phi(B)\nabla^d} \omega_1 I_t^{(i)} + \frac{\theta(B)}{\phi(B)\nabla^d} a_t \quad (4.18)$$

donde $I_t^{(i)} = 0$ para $t \neq i$ e $I_t^{(i)} = 1$ para $t = i$. Reagrupando términos en la ecuación (4.18), se puede ver con mayor claridad el efecto de un atípico innovativo:

$$y_t = \frac{\theta(B)}{\phi(B)\nabla^d} (\omega_t I_t^{(i)} + a_t) \quad (4.19)$$

Por lo tanto, y a diferencia de un anómalo aditivo, el anómalo innovativo es un suceso cuyo efecto se propaga de acuerdo al modelo ARIMA de ruido del proceso. Los anómalos innovativos son pues específicos de situaciones dinámicas.

Cambio de nivel

Se produce un cambio de nivel (LS *Level Shift*) en una serie cuando en un determinado instante de tiempo se produce un acontecimiento externo cuyo efecto es permanente.

En este caso, en el término $f(t)$ todos los coeficientes de $\omega(B)$ serán cero excepto ω_0 (escrito aquí como ω_s), y todos los coeficientes de $\delta(B)$ en el denominador serán cero excepto δ_1 que es $\delta_1 = 1$. El modelo que seguirá una serie observada y_t , afectada por un LS en $t=i$ será, sustituyendo $f(t) = \frac{\omega_s}{\nabla} I_t^{(i)}$ en 4.14:

$$y_t = \frac{\omega_s}{\nabla} I_t^{(i)} + z_t \quad (4.20)$$

es decir,

$$y_t = \frac{\omega_s}{\nabla} I_t^{(i)} + \frac{\theta(B)}{\phi(B)\nabla^d} a_t \quad (4.21)$$

donde $I_t^{(i)} = 0$ para $t \neq i$ e $I_t^{(i)} = 1$ para $t = i$. Siendo $\frac{\omega_s}{\nabla} I_t^{(i)}$ un término de intervención en escalón. La ecuación (4.20) indica que la serie contaminada y_t es idéntica a la original z_t hasta $t = i$; a partir de este instante, y_t es desplazada ω_s unidades hacia arriba si ($\omega_s > 0$) o hacia abajo si ($\omega_s < 0$).

Otra forma de expresar el término de intervención en escalón sin utilizar el operador diferencias ∇ es $f(t) = \omega_S S_t^{(i)}$ donde $S_t^{(i)} = 0$ para $t < i$ e $S_t^{(i)} = 1$ para $t \geq i$, ya que un impulso es el resultado de diferenciar un escalón $I_t^{(i)} = \nabla S_t^{(i)}$

Cambio transitorio

Se presenta un cambio transitorio (TC *Temporary Change*) en una serie, cuando el efecto de un suceso externo a la misma tiene al principio un cierto impacto sobre ella, y después dicho efecto decae exponencialmente.

En este caso, en el término $f(t)$ todos los coeficientes de $\omega(B)$ serán cero excepto ω_0 (escrito aquí como ω_{TC}) y todos los coeficientes de $\delta(B)$ en el denominador serán cero excepto δ_1 que estará comprendido entre 0 y 1. El modelo que seguirá una serie observada y_t , afectada por un TC en $t=i$ será, sustituyendo $f(t) = \frac{\omega_{TC}}{1-\delta B} I_t^{(i)}$ en 4.14:

$$y_t = \frac{\omega_{TC}}{1-\delta B} I_t^{(i)} + z_t \quad (4.22)$$

es decir,

$$y_t = \frac{\omega_{TC}}{1-\delta B} I_t^{(i)} + \frac{\theta(B)}{\phi(B)\nabla^d} a_t \quad 0 < \delta < 1 \quad (4.23)$$

donde $I_t^{(i)} = 0$ para $t \neq i$ e $I_t^{(i)} = 1$ para $t = i$. Vemos que si $\delta = 1$ el modelo sería el correspondiente a un cambio de nivel, LS, mientras que si $\delta = 0$ correspondería a un anómalo aditivo AO.

4.3.2 Detección de anomalos cuando los parámetros del modelo ARIMA son conocidos

Es bastante usual considerar los residuos de un modelo ajustado para detectar los anomalos de una serie temporal, ya que la mayoría de métodos de diagnóstico están basados en el análisis de residuos. Sin embargo, los anomalos en una serie temporal pueden afectar tanto a la identificación del modelo como a los parámetros que se pretenden estimar. Por tanto, es difícil precisar la utilidad del análisis de residuos en la detección de anomalos, puesto que los propios residuos han podido verse afectados por los valores anomalos.

Para fijar las ideas subyacentes al método de detección de anomalos que se va a emplear en esta tesis, supongamos que los coeficientes del modelo ARIMA y la σ_a^2 son conocidos. Más adelante consideraremos el caso en el que dichos parámetros son estimados.

Una forma equivalente de escribir el modelo ARIMA para la serie z_t en (4.12) es:

$$\pi(B)z_t = a_t \quad (4.24)$$

donde se verifica que:

$$\pi(B) = 1 - \pi_1 B - \pi_2 B^2 - \dots = \frac{\phi(B)\nabla^d}{\theta(B)} \quad (4.25)$$

siendo π_i los coeficientes de la representación AR(∞) del modelo ARIMA (4.24) como se discute en Box y Jenkins (1976).

Supongamos ahora que filtramos la serie y_t observada, contaminada por los atípicos, con el operador $\pi(B)$, con lo que obtenemos la serie de residuos:

$$e_t = \pi(B)y_t \quad (4.26)$$

a los que llamamos e_t para diferenciarlos de las innovaciones verdaderas a_t , y con las que coincidirán o no, dependiendo del periodo de tiempo y del tipo de intervención que se produzca. Dado que:

$$\begin{aligned} e_t &= \pi(B)y_t = (1 - \pi_1 B - \pi_2 B^2 - \pi_3 B^3 - \dots)y_t = \\ &= y_t - \pi_1 y_{t-1} - \pi_2 y_{t-2} - \pi_3 y_{t-3} - \dots \end{aligned} \quad (4.27)$$

cuando en (4.27) se calcula el residuo, se está calculando la diferencia entre el valor observado y_t (primer término de la parte derecha) y la predicción a un paso de y_t , \hat{y}_t (los términos restantes de la parte derecha). Pese a que expresar el modelo ARIMA en función de los coeficientes π_i hace que no se obtenga una forma parsimoniosa del mismo, sin embargo hacerlo así es útil en el desarrollo de un procedimiento para detectar anómalos e intervenciones. Los valores estimados de \hat{e}_t serían los residuos del modelo estimado, si los coeficientes $\pi(B)$ se calculasen a partir de los parámetros estimados del modelo ARIMA en vez de a partir de los parámetros conocidos del verdadero modelo ARIMA.

Estimación del efecto ω_0 de un anómalo

La descripción analítica de e_t para cada uno de los tipos de anómalos comentados anteriormente, es, teniendo en cuenta que:

$$y_t = \pi^{-1}(B)e_t \quad (4.28)$$

y sustituyendo esta expresión en (4.15), (4.18), (4.21) y (4.24):

$$e_t = \omega_A \pi(B)I_t^{(i)} + a_t \quad \text{para un anómalo aditivo (AO)}$$

$$e_t = \omega_I I_t^{(i)} + a_t \quad \text{para un anómalo innovativo (IO)} \quad (4.29)$$

$$e_t = \frac{\omega_s}{\nabla} \pi(B) I_t^{(i)} + a_t \quad \text{para un cambio de nivel (LS)}$$

$$e_t = \frac{\omega_{TC}}{1-\delta B} \pi(B) I_t^{(i)} + a_t \quad \text{para un cambio transitorio (TC)}$$

Alternativamente, estas ecuaciones se pueden escribir de la siguiente forma:

$$e_t = \omega_0 w_t + a_t \quad (4.30)$$

donde w_t se define como:

$$w_t = \begin{cases} \pi(B) I_t^{(i)} & \text{para AO} \\ I_t^{(i)} & \text{para IO} \\ \frac{\pi(B)}{\nabla} I_t^{(i)} & \text{para LS} \\ \frac{\pi(B)}{(1-\delta B)} I_t^{(i)} & \text{para TC} \end{cases} \quad (4.31)$$

siendo ω_0 igual a ω_A , ω_I , ω_{LS} , ω_{TC} dependiendo del tipo de anómalo. La ecuación (4.30) representa un modelo de regresión simple a través del origen; por lo tanto el estimador mínimo cuadrático de ω_0 para el efecto de un único anómalo en $t=i$ es:

$$\hat{\omega}_0 = \frac{\sum_{t=i}^n w_t e_t}{\sum_{t=i}^n w_t^2} \quad (4.32)$$

Siendo la varianza de la estimación:

$$\text{var}(\hat{\omega}_0) = \frac{\sigma_a^2}{\sum_{t=i}^n w_t^2} \quad (4.33)$$

Los resultados (4.32) y (4.33) para la estimación del parámetro ω_0 y de la varianza de dicha estimación, se derivan en muchos textos, ver al respecto Abraham y Ledolter 1984.

Como se discute en Chang *et al.* (1988), un procedimiento para la detección de los anómalos es examinar el valor máximo de los estadísticos de los efectos de los anómalos estimados estandarizados:

$$\begin{aligned}\hat{t}_{AO} &= (\hat{\omega}_{AO} / \hat{\sigma}_a) \left(\sum_{t=i}^n w_{AOt}^2 \right)^{1/2} \\ \hat{t}_{IO} &= (\hat{\omega}_{IO} / \hat{\sigma}_a) \\ \hat{t}_{LS} &= (\hat{\omega}_{LS} / \hat{\sigma}_a) \left(\sum_{t=i}^n w_{LS t}^2 \right)^{1/2} \\ \hat{t}_{TC} &= (\hat{\omega}_{TC} / \hat{\sigma}_a) \left(\sum_{t=i}^n w_{TC t}^2 \right)^{1/2}\end{aligned}\tag{4.34}$$

Sea H_0 la hipótesis nula: no se ha presentado ningún evento AO, IO, LS o TC en el tiempo $t=i$; lo que quiere decir que el coeficiente ω_0 en (4.30) es igual a cero. Sea H_A la hipótesis alternativa $\omega_A \neq 0$; sea H_I la hipótesis alternativa $\omega_I \neq 0$; sea H_S la hipótesis alternativa $\omega_S \neq 0$ y sea H_{TC} la hipótesis alternativa $\omega_{TC} \neq 0$. Si la H_0 se cumple, los estadísticos \hat{t}_{AO} , \hat{t}_{IO} , \hat{t}_{LS} , \hat{t}_{TC} en (4.34) siguen distribuciones asintóticamente normales con media cero y varianza 1, con lo que las hipótesis nulas planteadas se contrastan estudiando la significación del efecto del anómalo mediante la prueba de la razón de verosimilitudes.

Conociendo el tipo y la localización de un anómalo se pueden ajustar las series de las observaciones y los residuos (es decir, obtener unas nuevas series en las que el efecto del anómalo se ha eliminado). Basta para ello con hacer uso de las ecuaciones (4.15), (4.18), (4.21) y (4.24) y la ecuación (4.30) y (4.31). Sin embargo se presentan los siguientes problemas:

1. No se conoce si un anómalo se ha presentado, y si lo ha hecho, cuál ha sido el tiempo t en que se ha producido;
2. Si se ha producido el evento externo, no se sabe de qué tipo es;

3. Puede haber más de un anómalo en una serie;
4. No se conoce el verdadero modelo de la serie y tampoco las precisiones de las estimaciones.

Diversos investigadores han desarrollado procedimientos para tratar de resolver los problemas planteados 1-4. En el siguiente apartado se da una visión general de este tipo de procedimientos. Todos ellos se basan en el uso de la serie de residuos del modelo ARIMA ajustado para diagnosticar la presencia de anómalos. Chen y Liu (1993a) desarrollaron un procedimiento iterativo de estimación conjunta de los parámetros del modelo y de los efectos de los anómalos para abordar además también el problema 4 más a fondo. Este procedimiento se detalla en la sección 4.3.5.

4.3.3 Detección de anómalos a partir de los residuos de un modelo ajustado

En la práctica, los parámetros del modelo ARIMA y σ_a^2 no se conocen, pero pueden estimarse. Se emplean entonces los residuos del modelo estimado \hat{e}_t , para detectar la presencia de anómalos en la serie. Hilmer *et al.* (1983) y Chang *et al.* (1988) desarrollaron procedimientos similares para operar de esta manera.

Puesto que no se sabe cuándo se produce un anómalo ni de qué tipo es, lo que se hace es proceder secuencialmente en el tiempo. Se calculan los cuatro estadísticos $\hat{\tau}_{AO}$, $\hat{\tau}_{IO}$, $\hat{\tau}_{LS}$, $\hat{\tau}_{TC}$ en (4.34) (uno para cada tipo de anómalo) para cada índice de tiempo t . Se toma el mayor (en valor absoluto) de los estadísticos calculados para cada tipo de anómalo y se retiene el índice de tiempo correspondiente. A continuación se compara este valor con un valor especificado previamente: *valor crítico* C . Si el valor crítico C no es superado se concluye que no existe un anómalo en la serie.

Sin embargo si se supera el valor C , entonces se considera que la serie tiene un dato anómalo, identificándose de qué tipo es. A continuación los residuos se ajustan, eliminado el efecto del anómalo, y se calcula una nueva estimación de σ_a^2 . Se procede de nuevo, tomando los residuos ajustados para comprobar si se detecta otro anómalo. Para ello se usan las estimaciones iniciales de los parámetros del modelo ARIMA, pero

usando la nueva la serie de residuos y la nueva estimación σ_a^2 . Si se detecta algún anómalo, se ajustan los residuos de forma iterativa hasta que no se encuentran anómalos adicionales.

El valor crítico C depende del modelo ARIMA subyacente y del tamaño de la muestra. En la práctica el valor 4 proporciona una razonable sensibilidad a los anómalos.

Este procedimiento puede presentar dos posibles problemas. El primero es que la búsqueda iterativa de anómalos puede no ser efectiva, ya que anómalos de menor magnitud, podrían quedar enmascarados por los de mayor magnitud debido al algoritmo de búsqueda, y segundo, y más importante, el procedimiento de detección depende completamente de los parámetros estimados del modelo ARIMA basado en la serie observada y contaminada, por lo que dichas estimaciones pueden resultar sesgadas. Estos problemas pueden tratarse con el método que se presenta en la sección 4.3.5 y que ha sido empleado en este trabajo.

4.3.4 Incorporación al ajuste del modelo ARIMA de los efectos de los anómalos detectados usando modelos de intervención

En las secciones anteriores se han esquematizado procedimientos para la detección de anómalos cuando los parámetros del modelo ARIMA son conocidos o se han estimado. Estos procedimientos se pueden usar como método de detección de anómalos y diagnóstico del modelo estimado, sin embargo no se ha tratado la posible incorporación al modelo de los efectos de los anómalos, ajustando conjuntamente los parámetros del modelo y dichos efectos mediante modelos de intervención (Box y Tiao 1975).

Para ello se debe proceder a: la reestimación del modelo, una vez identificados los anómalos potenciales y sus correspondientes periodos de tiempo $t=i$, incorporando sus efectos sobre el modelo. Al estimar los efectos potenciales de los anómalos junto con los parámetros del modelo ARIMA subyacente, se pretende obtener mejores estimadores de los parámetros del modelo ARIMA, comprobar su adecuación general y si los anómalos detectados son reales.

Un procedimiento sencillo para detectar y ajustar los efectos de los anómalos conjuntamente con los parámetros del proceso es emplear secuencialmente las técnicas

de detección descritas en la sección 4.3.3 junto con análisis de intervención, como se describe en Chang *et al.* (1988). Sin embargo, hay que tener en cuenta que durante todo el procedimiento secuencial descrito se está utilizando el modelo ARIMA estimado, y dicha estimación puede verse afectada por la existencia de los propios anómalos.

4.3.5 Un procedimiento iterativo de detección de anómalos y estimación conjunta de los parámetros del modelo y de los efectos de los anómalos

El procedimiento basado en el análisis de intervención descrito en la sección anterior puede presentar algunas deficiencias, tales como:

1. La eficiencia del procedimiento de detección de anómalos puede verse afectada por los sesgos en las estimaciones de los parámetros del modelo ARIMA debido a la presencia de anómalos.
2. Algunos anómalos pueden quedar enmascarados y, por lo tanto, permanecer sin identificar.
3. Se pueden detectar anómalos falsos.

Chen y Liu (1993a) proponen un método iterativo de detección de anómalos y estimación conjunta de los parámetros del modelo y de los efectos de dichos anómalos para tratar de resolver estos problemas. Se presenta a continuación un esquema de este procedimiento (Liu y Hudak 1992). Una discusión del método más completa se puede encontrar en Chen y Liu (1993a) y en Liu (2006).

Como en el procedimiento anterior de Chang *et al.* (1988), el procedimiento propuesto por Chen y Liu (1993a) comienza con un modelo que presenta parámetros potenciales sesgados por la presencia de anómalos y se aplica un procedimiento iterativo de detección de anómalos a los residuos del modelo obtenido empíricamente. La serie original se ajusta (se eliminan los efectos de los anómalos) de acuerdo a los tipos de anómalos detectados y sus efectos. Se aplica la estimación máximo-verosímil a la serie ajustada. La serie de residuos calculada a partir de esta estimación se examina de nuevo. Estas tres etapas: (1) detección de anómalos, (2) ajuste de anómalos, (4) estimación de los parámetros en base a la serie ajustada se itera hasta que no se encuentran más anómalos. En esta etapa toda la información acumulada respecto a los

anómalos se emplea para ajustar conjuntamente los efectos de los anómalos y producir una serie de observaciones ajustada final. Después de este paso, se estiman los parámetros finales del modelo ARIMA a partir de la serie ajustada, mediante el método de máxima verosimilitud. Como etapa final, el procedimiento de detección de anómalos se aplica a los residuos de la serie original, pero usando los parámetros estimados finales del modelo.

Este procedimiento de estimación conjunta difiere de los expuestos anteriormente en varios aspectos. En primer lugar, la detección de anómalos se lleva a cabo de forma iterativa, basándose tanto en la serie ajustada de residuos como en la serie ajustada de observaciones. Es decir, una vez que un anómalo se detecta, su efecto se elimina tanto de la serie observada como de la serie residual del modelo estimado. Ajustando la serie observada, se hace innecesario formular y estimar un modelo de intervención. En segundo lugar, los anómalos se detectan basándose en estimadores más robustos de los parámetros del modelo. Finalmente, los efectos de los anómalos se estiman conjuntamente por regresión lineal múltiple. Como consecuencia de esto, el procedimiento sugerido por Chen y Liu (1993a) obtiene estimadores más robustos de los parámetros del modelo, reduciendo la detección de falsos anómalos y el enmascaramiento de sus efectos.

Este procedimiento de tratamiento de anómalos es el empleado en esta tesis. A continuación se presenta un esquema del mismo, dividido en varias etapas:

Etapas 1. Detección inicial de anómalos y estimación de parámetros del modelo

- 1.1 Estimar el modelo ARIMA identificado usando la serie ajustada más reciente (el procedimiento comienza con los datos de la serie original sin ajustar).
Cálculo de la serie de residuos.
- 1.2 Emplear del método descrito en la sección 4.3.3 para determinar si hay algún anómalo en la serie de residuos actual.
- 1.3 Si se descubre un anómalo potencial, eliminar su efecto postulado de los residuos y se repite el paso 1.2, de lo contrario se pasa al paso 1.4.

- 1.4 Si no se detecta ningún anómalo en la serie original, entonces la misma está libre de anómalos. Sin embargo, si se han detectado anómalos, entonces ajustar la serie observada y repetir los pasos 1.1 a 1.4, hasta que no se encuentren nuevos anómalos, pasando a continuación a la etapa 2.

Etapa 2. Estimación conjunta de los efectos de los anómalos

- 2.1 Estimar los efectos de los anómalos identificados mediante un modelo de regresión lineal múltiple.
- 2.2 Estandarizar los efectos estimados. Si el menor (en valor absoluto) de estos efectos estandarizados es menor que el valor crítico usado en la etapa 1.2, entonces eliminar dicho anómalo del conjunto y volver a 2.1, de lo contrario se pasa a 2.4.
- 2.3 Obtener una serie ajustada basándose únicamente en aquellos anómalos que han salido significativos.
- 2.4 Usar la serie ajustada para obtener el modelo ARIMA. Si el cambio relativo en la desviación típica residual respecto a la estimación anterior es mayor que un valor de tolerancia ε , ir al paso 2.1 para realizar más iteraciones; de lo contrario ir a 4.1. El valor de tolerancia ε , es una constante predeterminada elegida por el usuario como medio para controlar la precisión de la estimación no lineal. Un valor apropiado de ε puede ser 0,001.

Etapa 3. Estimación final de los parámetros del modelo y de los efectos de los anómalos

- 3.1 Los últimos parámetros estimados en el apartado 2.4 son las estimaciones finales de los parámetros del modelo ARIMA.
- 3.2 Usar los parámetros estimados en 4.1 y la serie original para calcular la serie residual.

- 3.3 Repetir etapa 1, excepto si los parámetros del modelo no se han vuelto a estimar en 2.4.
- 3.4 Repetir pasos 2.1 y 2.2 de la etapa 2 si es necesario. Las estimaciones obtenidas en la iteración final de 2.1 serán los correspondientes a de los efectos de los anómalos.

La **Etapa 1** esencialmente es el procedimiento de Chang *et al.* (1988) descrito en la sección 4.3.3, pero con la diferencia de que una vez que se detecta un anómalo, su efecto se elimina tanto de la serie residual del modelo estimado como de la serie observada, a partir de la cual el modelo ARIMA es reestimado. La **Etapa 2** es un procedimiento *stepwise*, usado para evaluar los efectos de los anómalos detectados conjuntamente, y eliminar los que no son auténticos anómalos. Una vez determinados los verdaderos anómalos y estimados sus efectos, la serie observada se ajusta, y los parámetros del modelo ARIMA se estiman apropiadamente. Tras esta etapa, la serie de residuos obtenida debe distinguirse poco de la serie e_t en la ecuación (4.26), es decir de la serie de residuos que procederían de la serie y_t observada contaminada por los atípicos, si se conociesen los verdaderos parámetros del modelo ARIMA. De manera que en la **Etapa 4**, se repite la etapa 1 y 2, es decir los anómalos se vuelven a detectar y a estimar conjuntamente, pero a partir de un modelo ARIMA estimado de forma robusta. Por lo tanto, cuando se repite la **Etapa 1** hasta el paso 4.4, se empieza por considerar que no hay anómalos presentes y esencialmente vuelven a ser descubiertos (y también es posible detectar cualquier de ellos que haya sido previamente enmascarado, por la falta de robustez de los parámetros estimados). La repetición de la **Etapa 2** en 4.4 vuelve a estimar los efectos de los anómalos.

4.3.6 Transformaciones para estabilizar la varianza

Es frecuente encontrar en muchas series una varianza mayor cuando la serie toma valores altos que cuando toma valores más bajos, es decir presentar una variabilidad creciente con el nivel de la serie. Si se presenta este tipo de heterocedasticidad, se deben

transformar los datos con el fin de estabilizar la varianza antes de proceder a cualquier modificación adicional o al análisis de los datos.

La dependencia de la variabilidad del nivel de la serie puede ser el resultado de que ésta se genera como producto (en lugar de la suma) de un componente sistemático o predecible, que define el nivel de la serie y que representaremos por $\mu_t = f(z_{t-1}, \dots)$ para indicar que es función de los valores pasados, y el término de innovación, u_t , que define la variabilidad. Entonces:

$$z_t = \mu_t u_t \quad (4.35)$$

Una variabilidad homogénea en u_t producirá una variabilidad en z_t tanto mayor cuanto mayor sea el valor de la parte sistemática $f(z_{t-1}, \dots)$. Es decir, $\sigma_{z_t} = |\mu_t| \sigma_{u_t}$. Si se toman logaritmos, y definiendo $a_t = \ln u_t$:

$$z'_t = \ln z_t = \ln \mu_t + a_t \quad (4.36)$$

obteniéndose una descomposición aditiva para la variable z'_t , que tendrá varianza constante.

El caso anterior puede generalizarse permitiendo que la desviación típica sea una función potencial de la media local, mediante:

$$\sigma_{z_t} = k \mu_t^\alpha \quad (4.37)$$

y se demuestra (Peña 2005, p.274) que si transformamos las variables z_t en nuevas variables mediante:

$$z'_t = z_t^{1-\alpha} \quad (4.38)$$

estas nuevas variables z_t' tienen varianza constante, que no depende de la media de la variable transformada. Como, por otro lado, para estabilizar la varianza realizando dicha transformación, z_t no debe ser negativo, si algún valor z_t es negativo, se añade una constante a z_t de manera que todos los valores sean positivos. Una forma más general de escribir esta transformación es:

$$z_t' = \begin{cases} \frac{z_t^{1-\alpha} - 1}{1-\alpha} & \alpha \neq 1 \\ \ln z_t & \alpha = 1 \end{cases} \quad (4.39)$$

Restando 1 a $z_t^{1-\alpha}$ y dividiendo el resultado por $1-\alpha$ no se altera la estructura temporal de la varianza de la serie y, sin embargo, le confiere interesantes propiedades a la transformación (ver en Johnston 1984 una discusión más detallada), ya que realizando estos pasos: (1) se preserva el orden de los datos cuando $1-\alpha$ es negativo; (2) se hace continua la expresión (4.49) en el caso límite en el que $1-\alpha \rightarrow 0$ y (4) en dicho caso conduce a la transformación logaritmo natural. Este tipo de transformación pertenece a la familia de *transformaciones Box-Cox* (Box y Cox 1964). Esta familia incluye, además de las potencias, el logaritmo de la variable. En efecto, cuando α es muy próximo a uno puede comprobarse, tomando límites en la primera expresión de (4.49), que la transformación equivale a tomar el logaritmo natural de la variable z_t .

Cuando en la serie se observa una relación entre el nivel y la variabilidad, podemos estimar el valor de α necesario para conseguir variabilidad constante, haciendo grupos de observaciones consecutivas, calculando en cada grupo la desviación típica s_i y la media \bar{x}_i y representando estas variables en un gráfico. Tomando logaritmos en (4.37), y sustituyendo por los valores estimados, la pendiente de la regresión:

$$\log s_i = c + \alpha \log \bar{x}_i \quad (4.40)$$

estimaré el valor de α , y la transformación de los datos mediante (4.39) conducirá a una serie donde la variabilidad no dependa del nivel. Los gráficos entre variabilidad y

media conviene hacerlos con grupos de datos lo más homogéneos posible. Para series no estacionales, se toma un tamaño de grupo de cinco o seis observaciones contiguas.

Por ejemplo, tal y como se ha visto, si la desviación típica de los datos es proporcional a su nivel, tomando los logaritmos naturales se obtiene una nueva serie con varianza constante; o si la varianza de la serie original es proporcional a su nivel, tomando la raíz cuadrada de la serie original del mismo modo, se estabiliza la varianza. Otras transformaciones son posibles, pero estas dos (especialmente la transformación logarítmica) son muy útiles en la práctica. La transformación logarítmica, además de ser muy común, es fácilmente interpretable, ya que los cambios en los logaritmos de los datos son cambios relativos (porcentajes) de los cambios en la métrica original. Y si tenemos en cuenta que los procedimientos inferenciales que se van a emplear asumen la hipótesis de normalidad, es además, una transformación que tiene la ventaja adicional de tener la posibilidad de normalizar los datos, si estos no se distribuyen normalmente, aunque esto no siempre se consigue.

4.3.7 Determinación de la transformación para estabilizar la media

Muchas series temporales reales no son estacionarias en media, es decir, su nivel medio varía con el tiempo. Para estabilizar la media de la serie se aplican diferencias regulares, de este modo se transforma en estacionaria. La decisión de aplicar estas diferencias puede basarse en el gráfico de la serie (ya que la necesidad de diferenciar es en muchos casos clara a la vista de este gráfico) y en la función de autocorrelación muestral, que se introduce seguidamente.

El procedimiento de diferenciación, que convierte las series no estacionarias en estacionarias ha sido detallado en la sección 4.2, expresiones 4.6, 4.7 y 4.8, tanto para el caso univariante como para el multivariante.

Cuando la decisión de diferenciar no sea clara al analizar el gráfico de la serie, conviene estudiar su *fas*, función de autocorrelación simple.

4.3.8 Identificación de los modelos arima univariantes

Como se discute en Pankratz (1991) resulta una buena práctica obtener los modelos ARIMA de las series individuales de entrada y de salida antes de proceder a la identificación del modelo de *función de transferencia múltiple*. Varias son las razones que hacen interesante proceder de esta manera, entre ellas:

1. Proporcionan para las series de salida un modelo de referencia inicial y un conjunto de predicciones. Si un modelo de *regresión dinámica múltiple* no se ajusta mejor a los datos y proporciona mejores predicciones que el modelo ARIMA correspondiente a cada una de las series de salida, no merece la pena trabajar con dicho modelo. Sin embargo, en algunos casos, se está más interesado en conocer cómo explican las series de entrada, el comportamiento de las series de salida, que en obtener buenas predicciones. En este caso se debe seguir construyendo el modelo de *regresión dinámica múltiple* pese a que proporcione peores predicciones o no se ajuste tan bien a los datos como el modelo ARIMA. En esta tesis el interés reside tanto en obtener unas buenas predicciones como en conocer muy bien la naturaleza de las relaciones entre las variables de entrada y de salida siendo necesario emplear la *función de transferencia múltiple* para derivar a partir de ella el algoritmo de control automático.
2. Los modelos ARIMA obtenidos para las series de entrada permiten obtener predicciones que pueden ser utilizadas para predecir las series de salida.
3. Estos modelos pueden poner de manifiesto comportamientos en los datos que mediante elementos de modelado pueden ser incorporados posteriormente al modelo de función de transferencia.
4. Los modelos ARIMA de las series *input* proporcionan información necesaria en la etapa de validación del modelo de función de transferencia y para el cálculo de los errores estándar de los intervalos de confianza de las predicciones.

Función de Autocorrelación Simple y Parcial

En el análisis de series temporales, frecuentemente se está interesado en la estructura de autocorrelación de las mismas. Se desea medir cómo cualquier valor actual de la serie z_t está relacionado con *sus propios* valores futuros $\{z_{t+1}, z_{t+2}, \dots\}$, o equivalentemente con *sus propios* valores pasados $\{z_{t-1}, z_{t-2}, \dots\}$. La autocorrelación mide la dirección (positiva o negativa) y la intensidad de la relación entre observaciones dentro de una serie temporal z_t , cuando éstas están separadas por k periodos, siendo $k=1,2,4,\dots,K$. Considerando las series z_t y z_{t+k} como sendas variables aleatorias, el coeficiente de correlación de orden k entre ellas es semejante al coeficiente de correlación entre dos variables aleatorias cualesquiera x e y . El estudio de la estructura de autocorrelación de una serie temporal conduce habitualmente a la identificación del modelo ARIMA de la serie.

Función de autocorrelación simple

Se denomina *función de autocorrelación simple (fas)* al conjunto de coeficientes de autocorrelación del proceso en función del retardo.

Llamando $\mu_z = E(z_t)$ al valor medio poblacional de la variable aleatoria z_t , $\gamma_k = E[(z_{t+k} - \mu_z)(z_t - \mu_z)]$ a la covarianza entre z_t y z_{t+k} , y $\gamma_0 = \sigma_z^2 = E(z_t - \mu_z)^2$ a la varianza poblacional. El *coeficiente de autocorrelación poblacional* teórico para el retardo k se definen como:

$$\rho_k = \frac{\gamma_k}{\gamma_0} \quad (4.41)$$

Para una serie estacionaria, la covarianza entre z_t y z_{t+k} y, por lo tanto, la autocorrelación ρ_k , son independientes de t ; sólo dependen de k , el número de periodos de tiempo que separan z_t y z_{t+k} .

El *coeficiente de autocorrelación muestral* r_k , que estima ρ_k , se calcula como:

$$r_k = \frac{\sum_{t=1}^{N-k} (z_t - \bar{z})(z_{t+k} - \bar{z})}{\sum_{t=1}^N (z_t - \bar{z})^2} \quad (4.42)$$

siendo N el tamaño muestral y $\bar{z} = \frac{\sum_{t=1}^N z_t}{N}$ la media muestral de la serie, que es un estimador insesgado de la media poblacional.

Se pueden calcular muchos coeficientes de autocorrelación para una serie temporal z_t ; en realidad uno por cada decalaje k . Si N es el número de datos de la serie z_t , debido a que se pierde una observación de z_{t+k} por cada incremento unitario de k , el máximo valor de k (indicado por K) es menor que N . Se puede estimar la *función de autocorrelación simple* mediante los coeficientes de autocorrelación muestral r_k estimados en función del retardo. A esta representación se le denomina *correlograma* o *función de autocorrelación muestral*.

Prueba de significación para los coeficientes de autocorrelación simple

El valor de cualquier coeficiente de autocorrelación muestral r_k puede diferir de cero únicamente por azar del muestreo. Para comprobar si existe relación lineal en la población entre z_t y z_{t+k} se tiene que contrastar la hipótesis nula:

$$H_0 : \rho_k = 0 \quad (4.43)$$

frente a la alternativa $H_1 : \rho_k \neq 0 \quad (4.44)$

Para realizar este test, es necesario calcular la desviación típica de los coeficientes de autocorrelación muestral r_k . Bartlett (1946) estudió las propiedades estadísticas de estos coeficientes en procesos normales estacionarios y Box y Jenkins (1976) derivaron la siguiente aproximación para la desviación típica de r_k , bajo la hipótesis de que a

partir de un cierto retardo q todos los coeficientes de autocorrelación ρ_k del proceso son cero:

$$\sigma(r_k) = \sqrt{\frac{(1 + 2 \sum_{j=1}^q \rho_j^2)}{N}} \quad \text{para } k > q \quad (4.45)$$

Puesto que los coeficientes ρ_j son desconocidos, se sustituyen por los coeficientes de autocorrelación muestrales r_j en el cálculo de la desviación típica de r_k :

$$s(r_k) = \sqrt{\frac{(1 + 2 \sum_{j=1}^q r_j^2)}{N}} \quad (4.46)$$

Después de estimar la desviación típica de r_k , se pueden calcular los límites de un intervalo de aceptación como $0 \pm 2 s(r_k)$ para un nivel de significación con el que contrastar la hipótesis nula $H_0 : \rho_k = 0$. En la práctica r_k se tomará como significativo ($\alpha=0.05$) si:

$$\left| \frac{r_k}{s(r_k)} \right| > 2 \quad (4.47)$$

Media Estacionaria y Función de Autocorrelación Simple

Cuando la necesidad de diferenciar no se deduzca claramente al analizar el gráfico de la serie, conviene estudiar su función de autocorrelación simple *fas*. Debido a que el modelo de un proceso no estacionario contiene un término AR(1) con $\phi = 1$, los coeficientes de autocorrelación muestrales serán positivos y tenderán a mantenerse durante un gran número de retardos, con decrecimiento lento y lineal, lo que indicará la falta de estacionaridad y la necesidad de diferenciación. Sin embargo, si la media de una

serie z_t es estacionaria, la función de autocorrelación simple muestral tenderá a decrecer rápidamente. En la práctica un decrecimiento rápido significa que los coeficientes de autocorrelación muestrales comienzan a caer dentro de los límites de aceptación de la hipótesis nula $\rho_k = 0$ (no son estadísticamente significativos) a partir del decalaje 5 o 6.

Función de autocorrelación parcial

Se define el *coeficiente de autocorrelación parcial* de orden k, ρ_k^p , como el coeficiente de correlación entre observaciones separadas k periodos, cuando se elimina de la relación entre las dos variables la dependencia lineal debida a los valores intermedios. Cualquier modelo ARIMA se puede expresar en su forma autorregresiva. Si consideramos el siguiente conjunto de k ecuaciones de regresión:

$$\begin{aligned} z_t &= C_1 + \phi_{11}z_{t-1} + a_{1,t} \\ z_t &= C_2 + \phi_{21}z_{t-1} + \phi_{22}z_{t-2} + a_{2,t} \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ z_t &= C_k + \phi_{k1}z_{t-1} + \phi_{k2}z_{t-2} + \dots + \phi_{kk}z_{t-k} + a_{k,t} \end{aligned} \quad (4.48)$$

El *coeficiente de correlación parcial poblacional* en el decalaje $k=1,2,\dots,K$ es $\rho_k^p = \phi_{kk}$, es decir, el último coeficiente en cada ecuación, que se estima por el coeficiente de correlación parcial muestral $r_k^p = \hat{\phi}_{kk}$ para cada k , a partir de los datos. A la representación de los coeficientes de autocorrelación parcial en función del retardo se le llama la *función de autocorrelación parcial (fap)*.

Prueba de significación para los coeficientes de autocorrelación parcial

Quenouille (1949) demostró que si una serie temporal sigue un proceso AR(p), los coeficientes de autocorrelación parcial de orden $p+1$ y mayores, se distribuyen de forma aproximadamente normal, con desviación típica:

$$\sigma(r_k^p) = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad k \geq p+1 \quad (4.49)$$

Para comprobar si un coeficiente de autocorrelación parcial $\rho_k^p \neq 0$ se tiene que contrastar la hipótesis nula:

$$H_0 : \rho_k^p = 0 \quad (4.50)$$

frente a la alternativa $H_1 : \rho_k^p \neq 0 \quad (4.51)$

En la práctica r_k' se considerará como estadísticamente significativo ($\alpha=0.05$) si:

$$\left| \frac{r_k'}{\sqrt{1/N}} \right| > 2 \quad (4.52)$$

4.4 ANÁLISIS PRELIMINAR DE LAS SERIES TEMPORALES DEL PROCESO PEAD

Se han investigado cinco campañas de fabricación de polietileno del mismo grado, denominadas campañas 0, 2, 4, 4 y 5. Para cada campaña, las cuatro variables se han registrado cada dos horas, tal como se ha descrito anteriormente en el apartado 3.3, del Capítulo 3.

4.4.1 Análisis de las variables de entrada o manipuladas

Análisis de la serie temporal de Temperatura (T_t)

En la tabla 4.1 se muestran los parámetros estadísticos básicos de las series de temperatura T_t de las diferentes campañas. En ella se puede observar que la varianza y recorrido mínimos se dan en la campaña 5. En la campaña 4 se presentan la varianza y el recorrido más elevados, así como el máximo ajuste y el ajuste medio más altos, y el mínimo valor de temperatura, que es bastante más bajo que en las demás campañas.

Además de los parámetros estadísticos básicos, también son útiles los gráficos de las series, así como las funciones estimadas de autocorrelación simple y de autocorrelación

parcial, herramientas estadísticas que incluso nos podrían dar información acerca de la naturaleza de la *función de transferencia*, tanto en la metodología Box-Jenkins, como en la metodología de series temporales TS-PLS. En la figura 4.1 se muestran los gráficos de las series. En los mismos, se constata que no son series estacionarias en media y que, por lo tanto, necesitan ser diferenciadas. Además, en la campaña 4 se detectan disminuciones bruscas de la temperatura (anómalos potenciales) que explican los resultados extraídos de esa campaña mostrados en la tabla 4.1.

Puesto que la presencia de anómalos puede alterar la estructura de autocorrelación de una serie temporal, antes de proceder a estimar la *fas* y la *fap*, esta serie se someterá al estudio de detección de anómalos y estimación conjunta de sus efectos y de los parámetros del modelo ARIMA, mediante el método propuesto en la sección 4.3.5. Mediante este método se ha analizado la serie de temperatura de la campaña 4, obteniéndose una nueva serie ajustada, a la que se le han eliminado los efectos de los valores anómalos y que es la que ha sido empleada para el cálculo y representación de la *fas* y de la *fap*, junto con las series originales de las demás campañas.

	Campaña 0	Campaña 2	Campaña 3	Campaña 4	Campaña 5
Nº observaciones	117	81	171	111	62
Media	106.35	104.37	105.37	104.73	105.13
Varianza	0.16	0.35	0.27	0.77	0.09
Desviación típica	0.40	0.59	0.52	0.88	0.29
Mínimo	105.45	103.31	104.42	98.63	104.39
Máximo	106.79	105.34	106.66	105.61	105.53
Recorrido	1.34	2.03	2.24	6.98	1.14
Mínimo ajuste	0.0	0.0	0.0	0.005	0.0
Máximo ajuste	0.34	1.10	1.16	3.90	0.26
Ajuste medio	0.05	0.14	0.10	0.27	0.08

Tabla 4.1 Parámetros estadísticos básicos de las series de temperatura T_t de las diferentes campañas

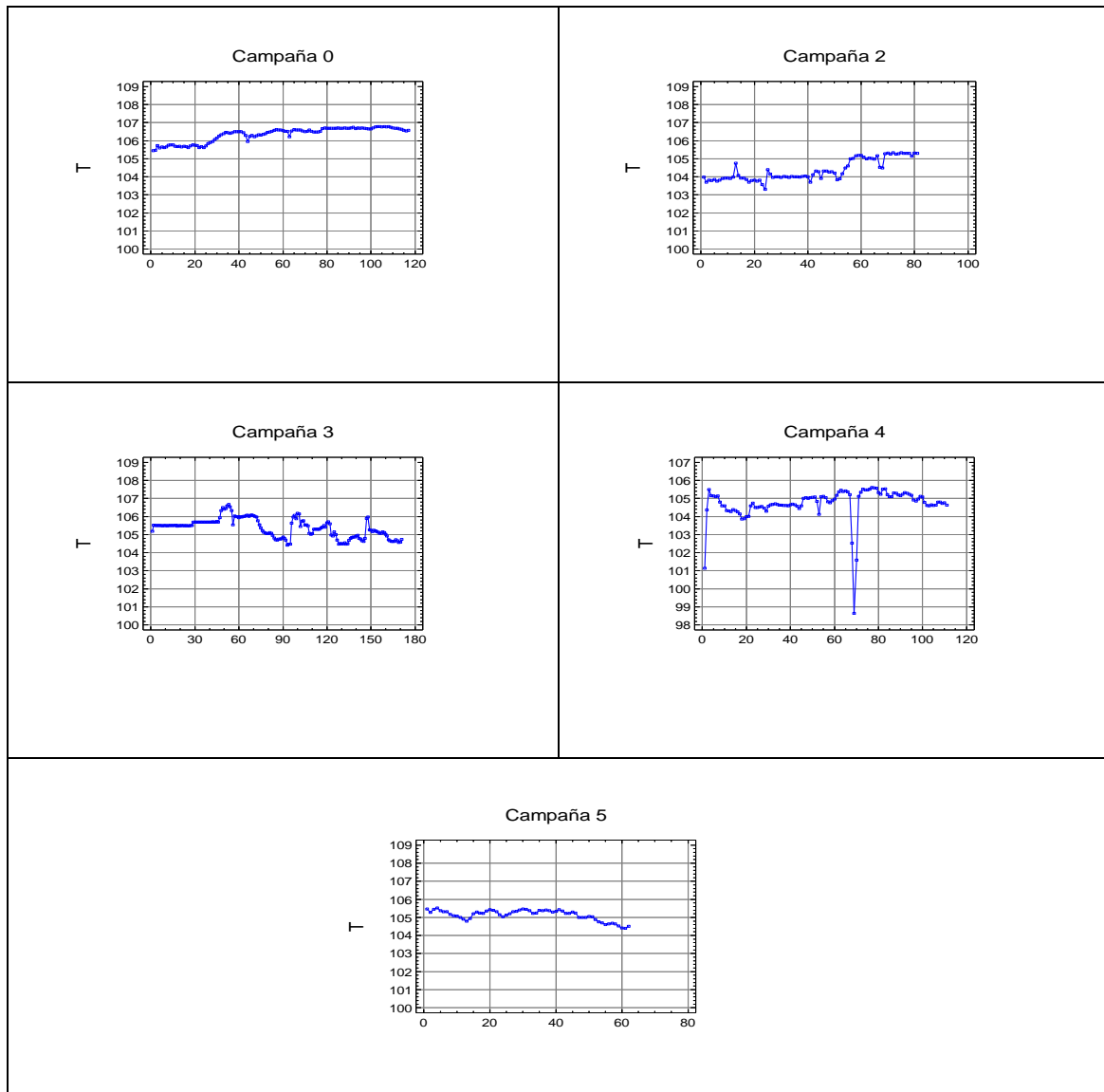


Figura 4.1 Gráfico de las series de temperatura T_t de las diferentes campañas.

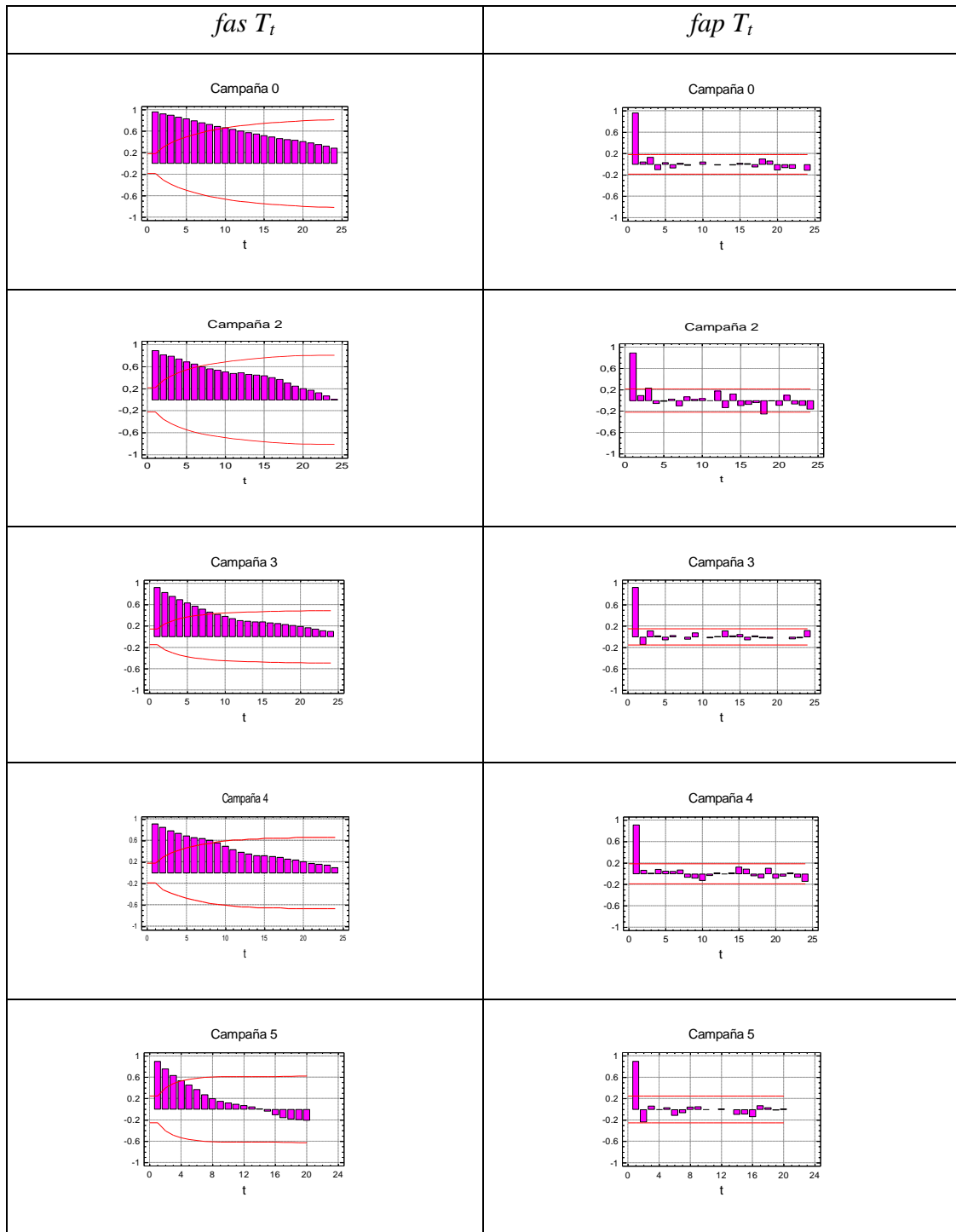


Figura 4.2 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de temperatura T_t de las distintas campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$). (t es el periodo de muestreo).

En la figura 4.2 se representan las funciones de autocorrelación simple (fas) y parcial (fap) estimadas de las series de temperatura de las 5 cinco campañas. Según se puede apreciar en las mismas, el coeficiente de autocorrelación simple r_k decrece

lentamente, lo que de nuevo indica que estas series no son estacionarias en media. Por otro lado, el coeficiente de correlación parcial r_k' de orden 1, es en todos los casos estadísticamente significativo y próximo a uno.

Esta estructura de autocorrelación sugiere el modelo denominado *paseo aleatorio*, que es un modelo AR(1) con el coeficiente $\phi_1 = 1$. Es decir,

$$T_t = T_{t-1} + a_t \quad (4.53)$$

$$\text{o} \quad \nabla T_t = a_t \quad (4.54)$$

Este proceso no es estacionario, pero tampoco es explosivo, y pertenece a la clase de procesos integrados de orden 1. Este modelo implica que los cambios en valores adyacentes de la serie son ruido blanco y no dependen del pasado de la misma. Se le denomina paseo aleatorio debido a que las perturbaciones se suponen aleatorias e independientes. Una propiedad interesante de este tipo de procesos es que no tienen afinidad por ningún valor medio, es decir deambulan sin tendencia hacia ningún valor, lo que se constata en los gráficos de la series de la figura 4.1. Si una serie que sigue este modelo se diferencia, la serie diferenciada sigue un proceso de ruido blanco. Por lo tanto, cabe esperar que todos sus coeficientes de autocorrelación simple y parcial sean cero para todo k .

Los gráficos de las series de temperatura diferenciadas ∇T_t , representados en la figura 4.5, indican que las series se han convertido en estacionarias en media, y no necesitan ser diferenciadas de nuevo.

Las funciones de autocorrelación simple (*fas*) y parcial (*fap*) de las series ∇T_t se representan en la figura 4.4. Según lo que se ha comentado anteriormente, lo lógico bajo el supuesto de que las series originales son paseos aleatorios es que estas funciones no presenten autocorrelaciones significativas. Esto se aprecia con claridad en las campañas 0, 4 y 4, sin embargo en las campañas 2 y 5 se aprecian algunos coeficientes estadísticamente significativos que sugieren modelos alternativos al ARIMA (0,1,0). Sin embargo, como se pretende identificar un modelo único para la serie de temperatura a partir de la muestra de 5 campañas, el que mejor se ajusta es el ARIMA (0,1,0) o *paseo aleatorio* (4.54), que se empleará como filtro al aplicar el método de preblanqueo y prefiltrado para la estimación de las funciones de correlación cruzadas (este método se

describe más adelante). A continuación en la tabla 4.2 se detallan las varianzas residuales estimadas de estos modelos.

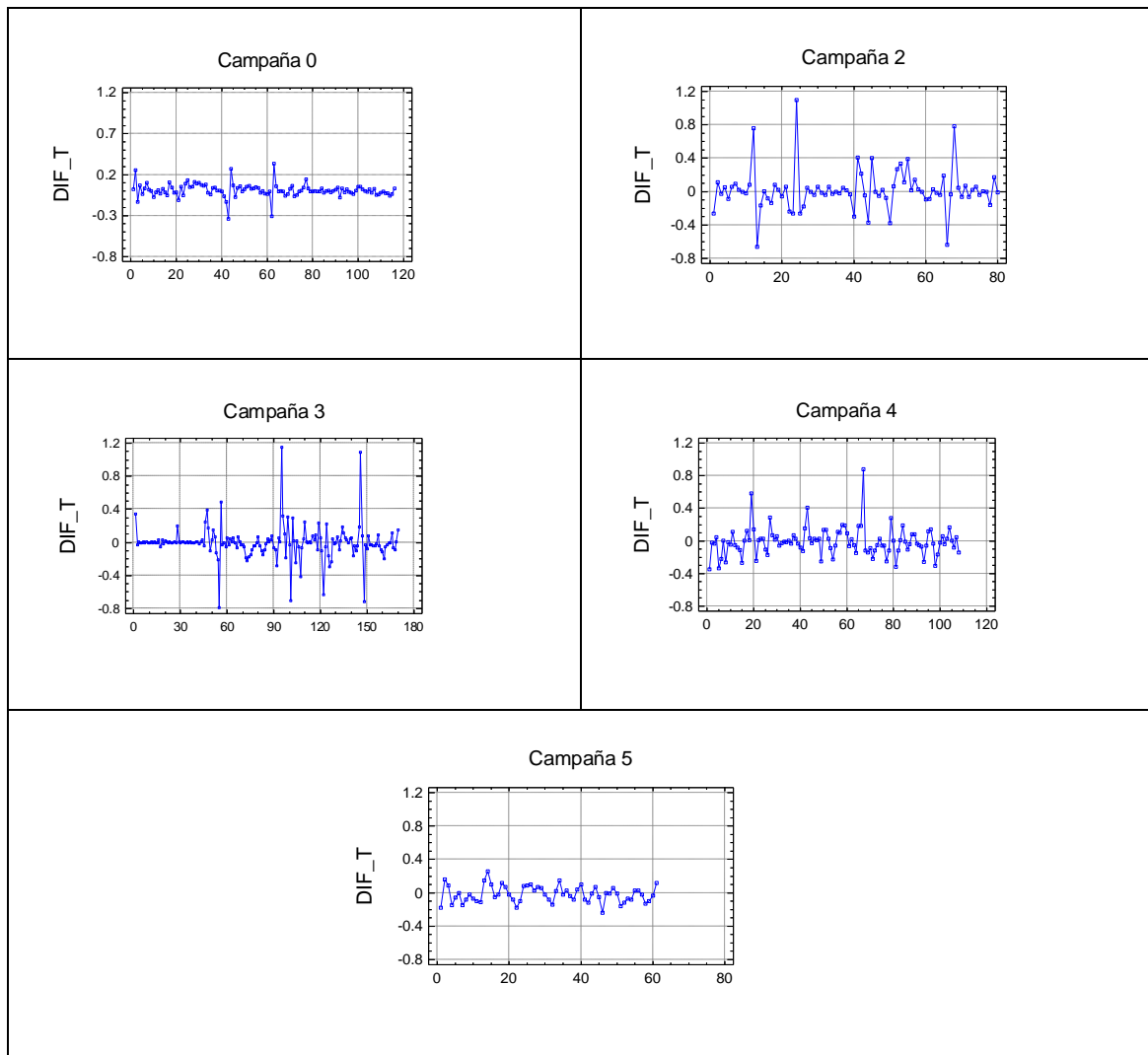


Figura 4.3 Gráficos de las series de temperatura diferenciadas ∇T_t de las diferentes campañas.

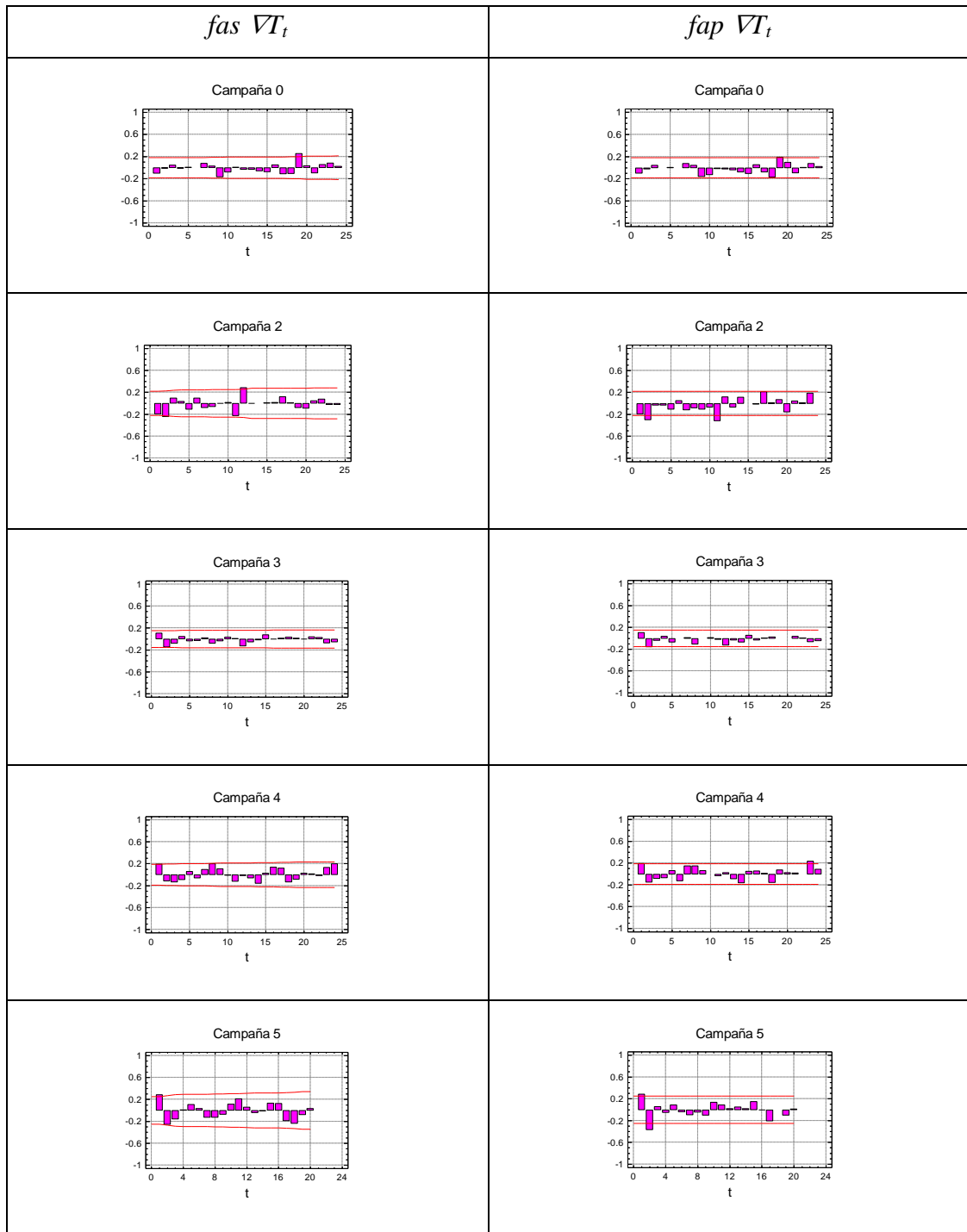


Figura 4.4 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de temperatura ∇T_t de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores-p < 0.05).

Campaña	$\hat{\sigma}_{a_t}^2$
0	0.007
2	0.062
3	0.041
4	0.041
5	0.010

Tabla 4.2 Varianzas residuales estimadas de los modelos ARIMA (0,1,0) para las series de T_t .

Análisis de la serie temporal de Caudal de Etileno (E_t)

En la tabla 4.4 se muestran los parámetros estadísticos básicos de las series de caudal de etileno E_t de las diferentes campañas. La menor varianza y recorrido se presentan en la campaña 5, que también presenta los ajustes mínimo, máximo y promedio más bajos.

En las campañas 4 y 4 se dan las varianzas y los recorridos más altos, y los ajustes máximos más altos. En estas campañas se estudiará con especial atención la posible presencia de valores anómalos.

En la figura 4.5 se muestran los gráficos de las series de caudal de etileno E_t . En los mismos, se constata que no son series estacionarias en media y que, por lo tanto, necesitan ser diferenciadas.

En la figura 4.6 se representan las funciones de autocorrelación simple (f_{as}) y parcial (f_{ap}) estimadas de las series de caudal de etileno de las 5 cinco campañas. Del mismo modo que ocurría con las series de temperatura, el coeficiente de autocorrelación simple r_k decrece lentamente, lo que de nuevo indica que estas series no son estacionarias en media.

	Campaña 0	Campaña 2	Campaña 3	Campaña 4	Campaña 5
Nº observaciones	117	81	171	111	62
Media	16.32	15.81	13.28	15.86	17.23
Varianza	0.58	2.16	4.85	3.08	0.41
Desviación típica	0.76	1.47	2.20	1.75	0.64
Mínimo	14.80	12.78	6.23	5.62	15.96
Máximo	17.97	18.46	16.65	17.65	18.58
Recorrido	3.17	5.68	10.42	12.03	2.62
Mínimo ajuste	0.0005	0.0075	0.0007	0.007	0.001
Máximo ajuste	2.16	3.12	3.68	4.92	1.69
Ajuste medio	0.21	0.50	0.30	0.44	0.19

Tabla 4.3 Parámetros estadísticos básicos de las series de temperatura E_t de las diferentes campañas.

Por otro lado, el coeficiente de correlación parcial r_k' de orden 1 es, en todos los casos, estadísticamente significativo y próximo a uno. Por lo tanto, al igual que ocurría con las series de temperatura, el modelo sugerido es el *paseo aleatorio*:

$$E_t = E_{t-1} + a_t \quad (4.55)$$

o

$$\nabla E_t = a_t \quad (4.56)$$

Los gráficos de las series de caudal de etileno diferenciadas ∇E_t , representados en la figura 4.7 indican que las series se han convertido en estacionarias en media, y no necesitan ser diferenciadas de nuevo.

Las funciones de autocorrelación simple (*fas*) y parcial (*fap*) de las series ∇E_t se representan en la figura 4.8. Como era previsible no presentan coeficientes de autocorrelación significativos, salvo en las campañas 4 y 4, lo que sugiere modelos alternativos para estas últimas. Sin embargo, el modelo común elegido es el *paseo aleatorio*, que se utilizará en el preblanqueado y prefiltrado de las series. A continuación en la tabla 4.4 se detallan las varianzas residuales estimadas de estos modelos.

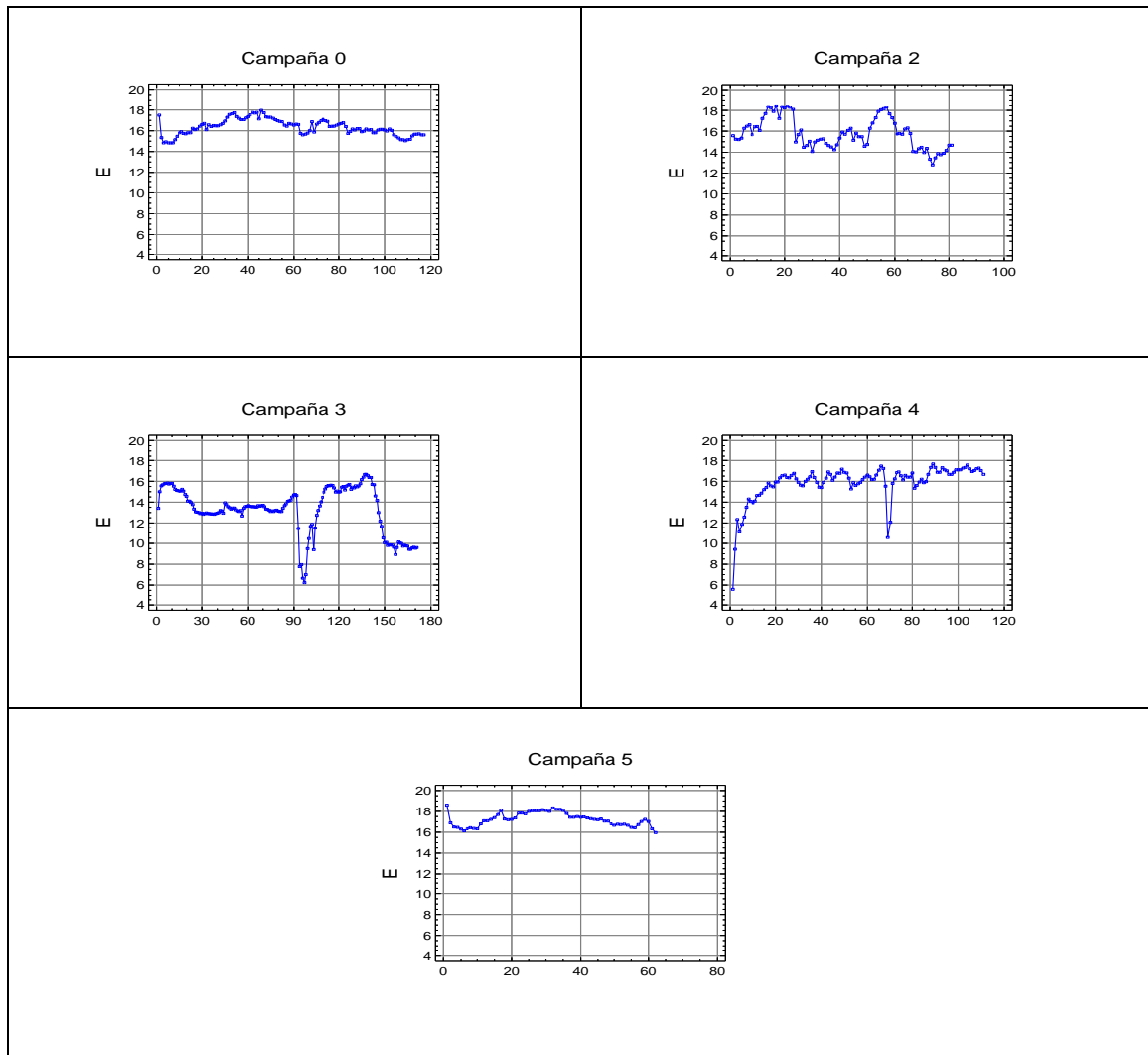


Figura 4.5 Gráfico de las series de caudal de etileno E_t de las diferentes campañas.

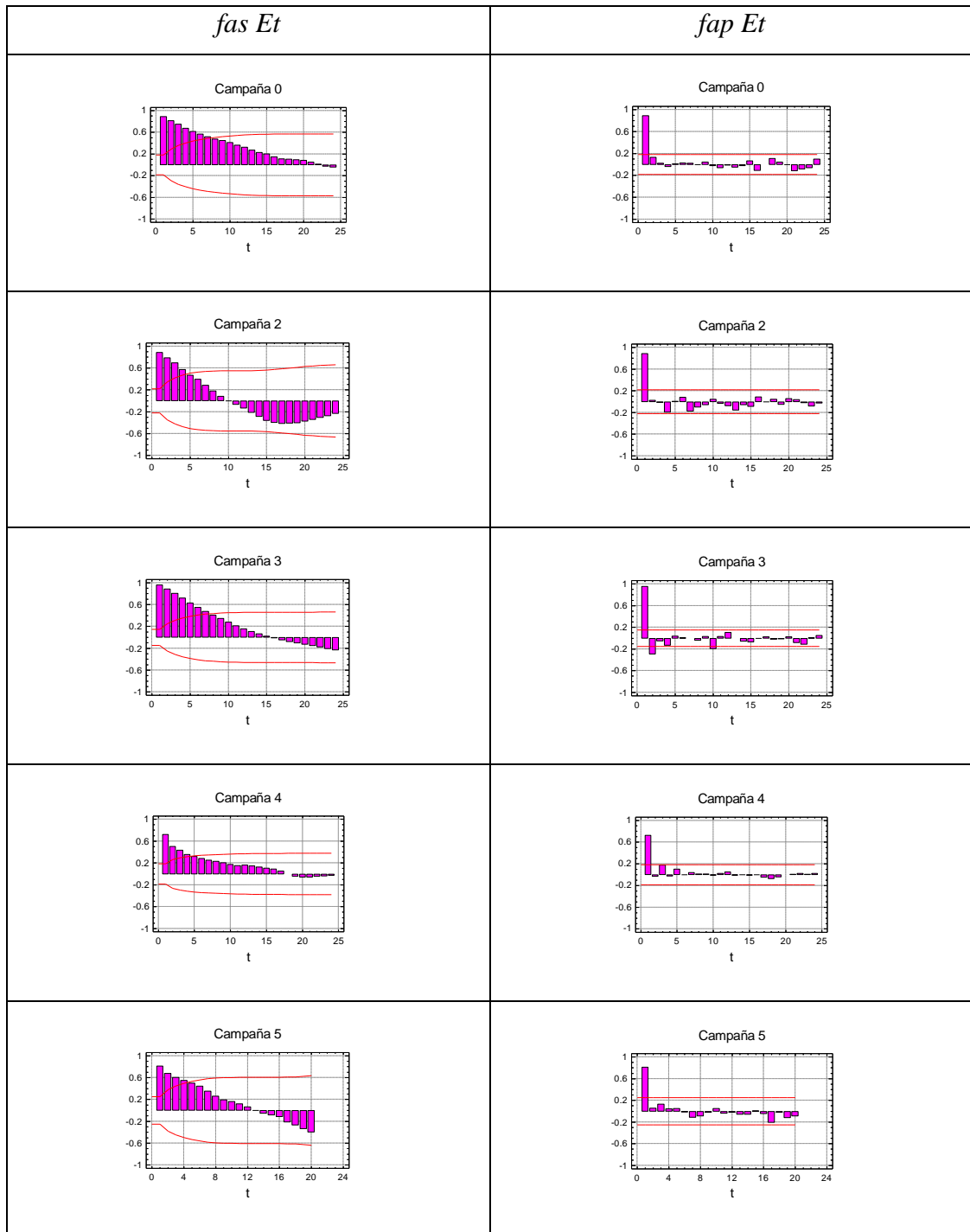


Figura 4.6 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de caudal de etileno E_t de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).

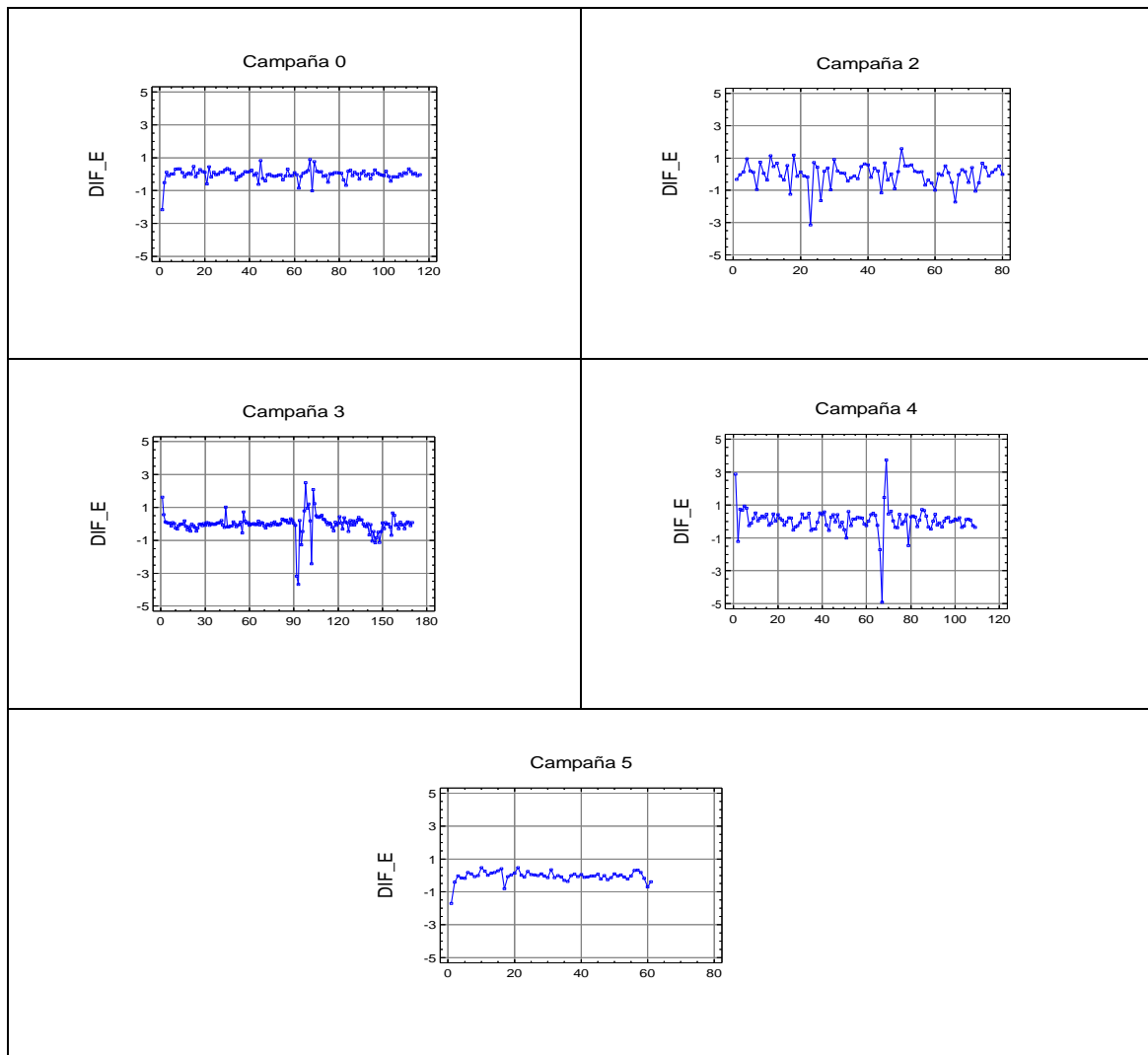


Figura 4.7 Gráfico de las series de caudal de etileno diferenciadas ∇E_t de las diferentes campañas.

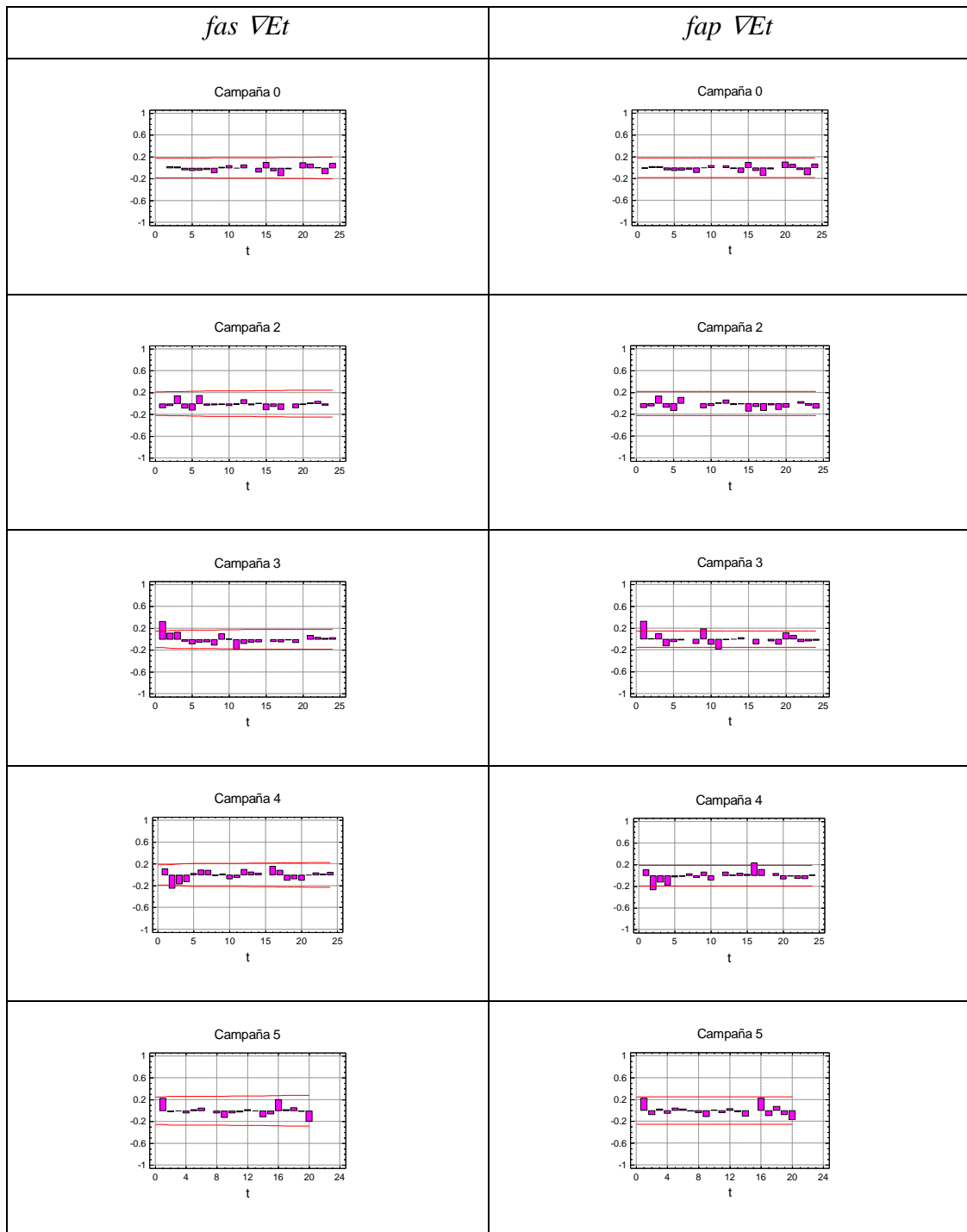


Figura 4.8 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de caudal de etileno ∇Et de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).

Campaña	$\hat{\sigma}_{a_t}^2$
0	0.116
2	0.490
3	0.369
4	0.759
5	0.102

Tabla 4.4 Varianzas residuales estimadas de los modelos ARIMA (0,1,0) para las series de E_t .

4.4.2 Análisis de las variables de salida o controladas

Análisis de la serie temporal de Índice de Fluidez (MI_t)

En la tabla 4.5 se muestran los parámetros estadísticos básicos de las series de índice de fluidez MI_t de las diferentes campañas. En la misma se puede observar la regularidad en dicho parámetro, que fluctúa aproximadamente alrededor del valor objetivo 0.8. Hay que tener en cuenta que ésta es una variable controlada. La campaña 5 presenta la menor varianza y recorrido. Por el contrario, los mayores valores para la varianza y el recorrido se presentan en las campañas 4 y 4.

	Campaña 0	Campaña 2	Campaña 3	Campaña 4	Campaña 5
Nº observaciones	117	81	171	111	62
Media	0.79	0.75	0.79	0.80	0.79
Varianza	0.009	0.008	0.010	0.011	0.006
Desviación típica	0.09	0.09	0.10	0.10	0.08
Mínimo	0.48	0.43	0.37	0.39	0.59
Máximo	1.06	1.00	1.20	1.18	0.94
Recorrido	0.58	0.57	0.83	0.79	0.35

Tabla 4.5 Parámetros estadísticos básicos de las series de índice de fluidez MI_t de las diferentes campañas.

La evolución temporal del índice de fluidez MI_t a lo largo de cada una de las campañas estudiadas se recoge en los gráficos representados en la figura 4.9:

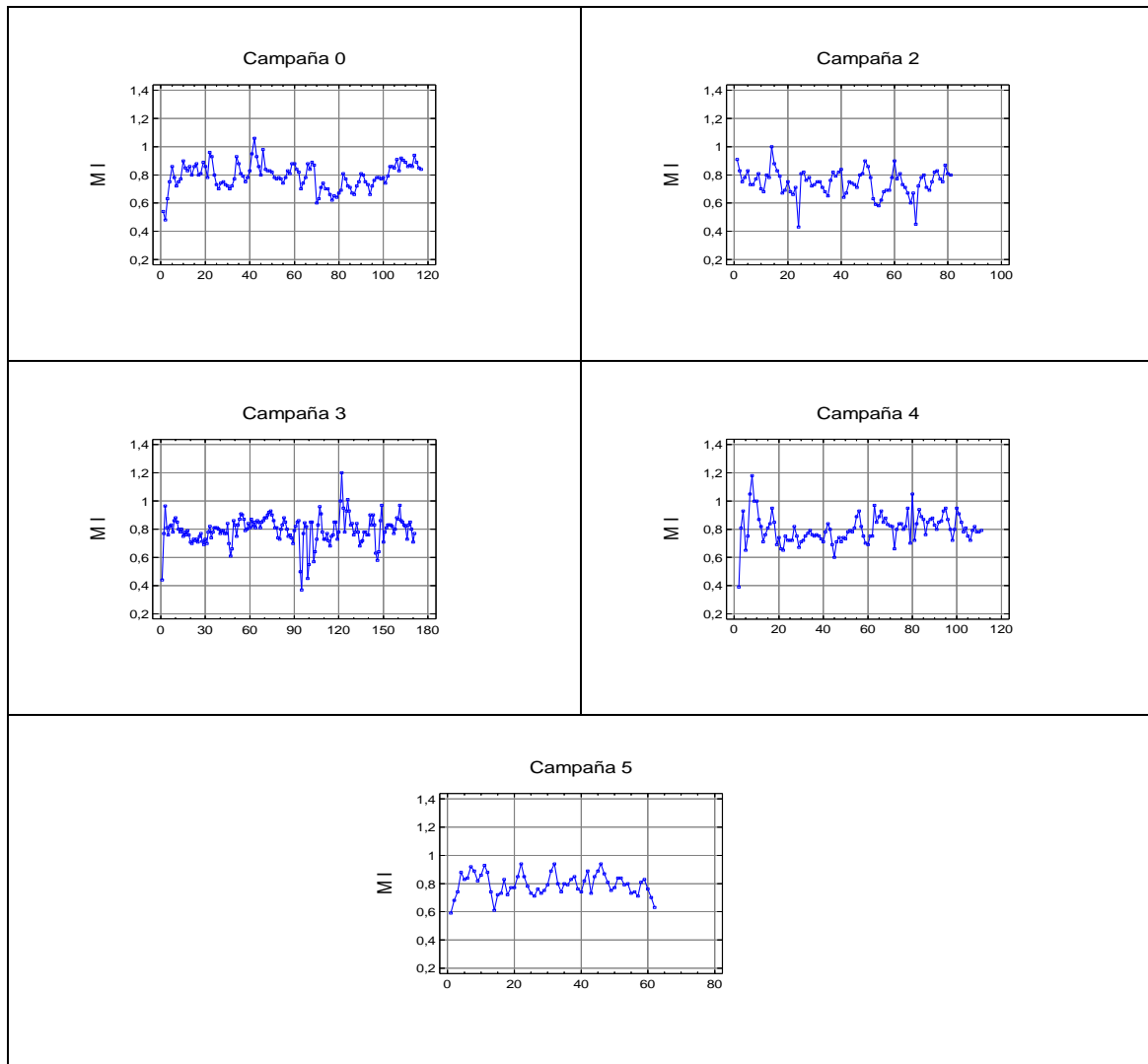


Figura 4.9 Gráfico de las series de índice de fluidez MI_t de las diferentes campañas.

Tanto en los gráficos de las series como en las funciones de autocorrelación simple representadas en la figura 4.10 no se aprecia falta de estacionaridad en las series MI_t . Al tratarse de una variable controlada, su variabilidad se transmite, al menos en parte, a las variables compensatorias T_t y E_t , provocando la no estacionaridad de estas últimas, comentada anteriormente.

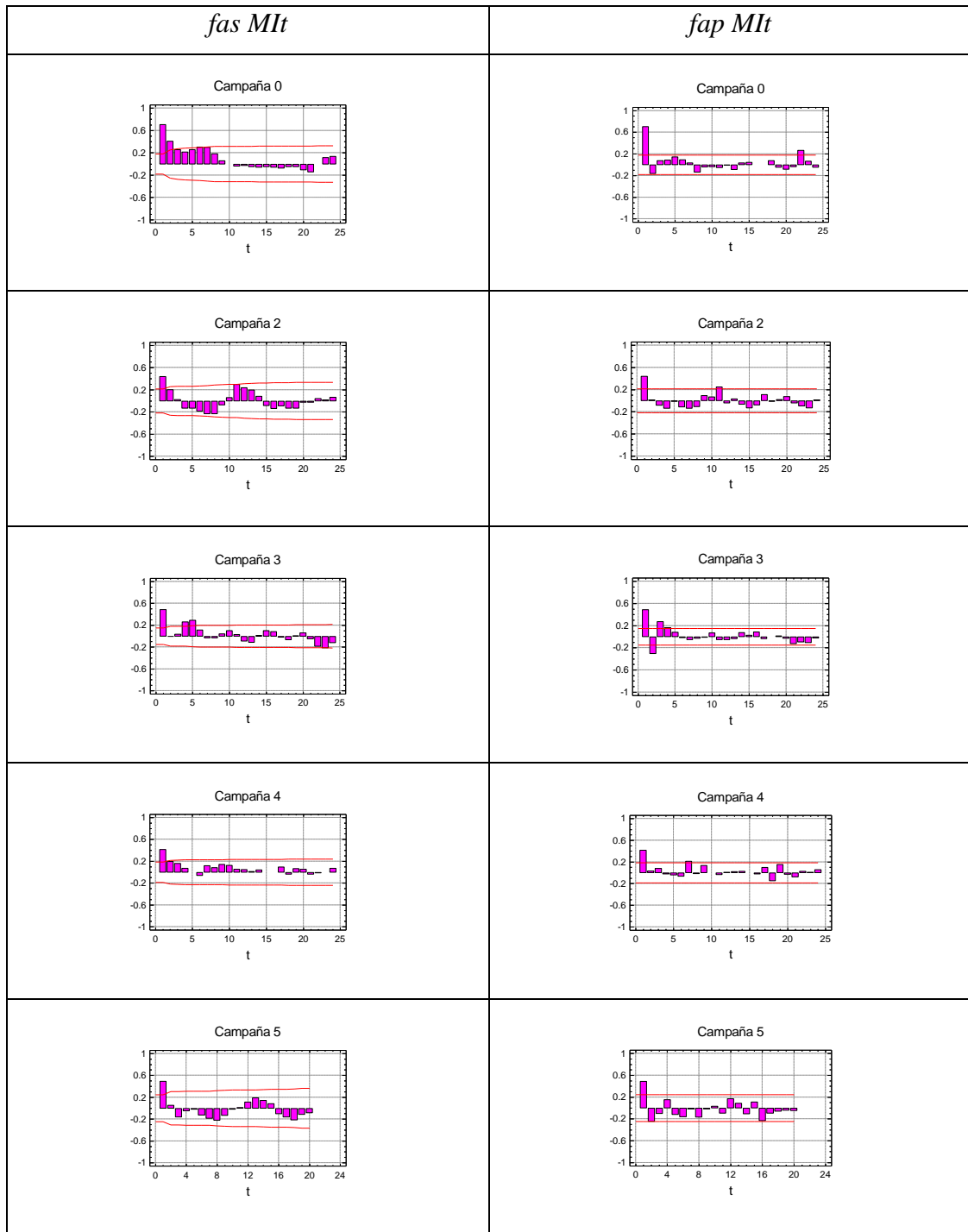


Figura 4.10 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de caudal de etileno MI_t de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).

El modelo univariante que mejor se ajusta globalmente a estas series es el ARMA (1,0) con constante:

$$MI_t = C + \phi MI_{t-1} + a_t \tag{4.57}$$

A continuación en la tabla 4.6 se muestran los parámetros y la varianza residual estimados de este modelo:

Campaña	C	ϕ	$\hat{\sigma}_{a_t}^2$
0	0.8	0.7	0.005
2	0.7	0.4	0.006
3	0.8	0.5	0.007
4	0.8	0.4	0.007
5	0.8	0.5	0.004

Tabla 4.6 Parámetros y varianzas residuales estimados de los modelos ARMA (1,0) de las series MI_t para las diferentes campañas

Aunque las series de MI_t presentan estacionaridad en media, se diferenciarán posteriormente para obtener las funciones de correlación cruzada entre entradas y salidas (ver sección 4.5.1), necesarias para la identificación del modelo de *función de transferencia múltiple*.

Análisis de la serie temporal $APRE_t$

En la tabla 4.7 se recogen los parámetros estadísticos básicos de las series de $APRE_t$, en la que se aprecia una mayor productividad en promedio en la campaña 5, que presenta además la mínima varianza observada, el mínimo más elevado y el recorrido más bajo. Por el contrario en la campaña 4 se observa la menor productividad en promedio, la varianza más elevada y el mínimo y el máximo más bajos. De los análisis descriptivos de las variables de entrada y de salida se deduce que la campaña 5 es la que presenta un mejor control del proceso y una mayor productividad, mientras que en las campañas 4 y 4 el control del proceso ha sido más deficiente, obligando a estudiar con especial atención la posible presencia de datos anómalos.

	Campaña 0	Campaña 2	Campaña 3	Campaña 4	Campaña 5
Nº observaciones	117	81	171	111	62
Media	15.90	15.45	12.98	15.42	16.59
Varianza	0.52	2.05	4.21	1.99	0.48
Desviación típica	0.72	1.43	2.05	1.41	0.69
Mínimo	14.45	12.86	7.21	8.80	15.17
Máximo	17.53	18.10	16.17	17.05	18.07
Recorrido	3.08	5.24	8.96	8.25	2.9

Tabla 4.7 Parámetros estadísticos básicos de las series de índice de fluidez $APRE_t$ de las diferentes campañas.

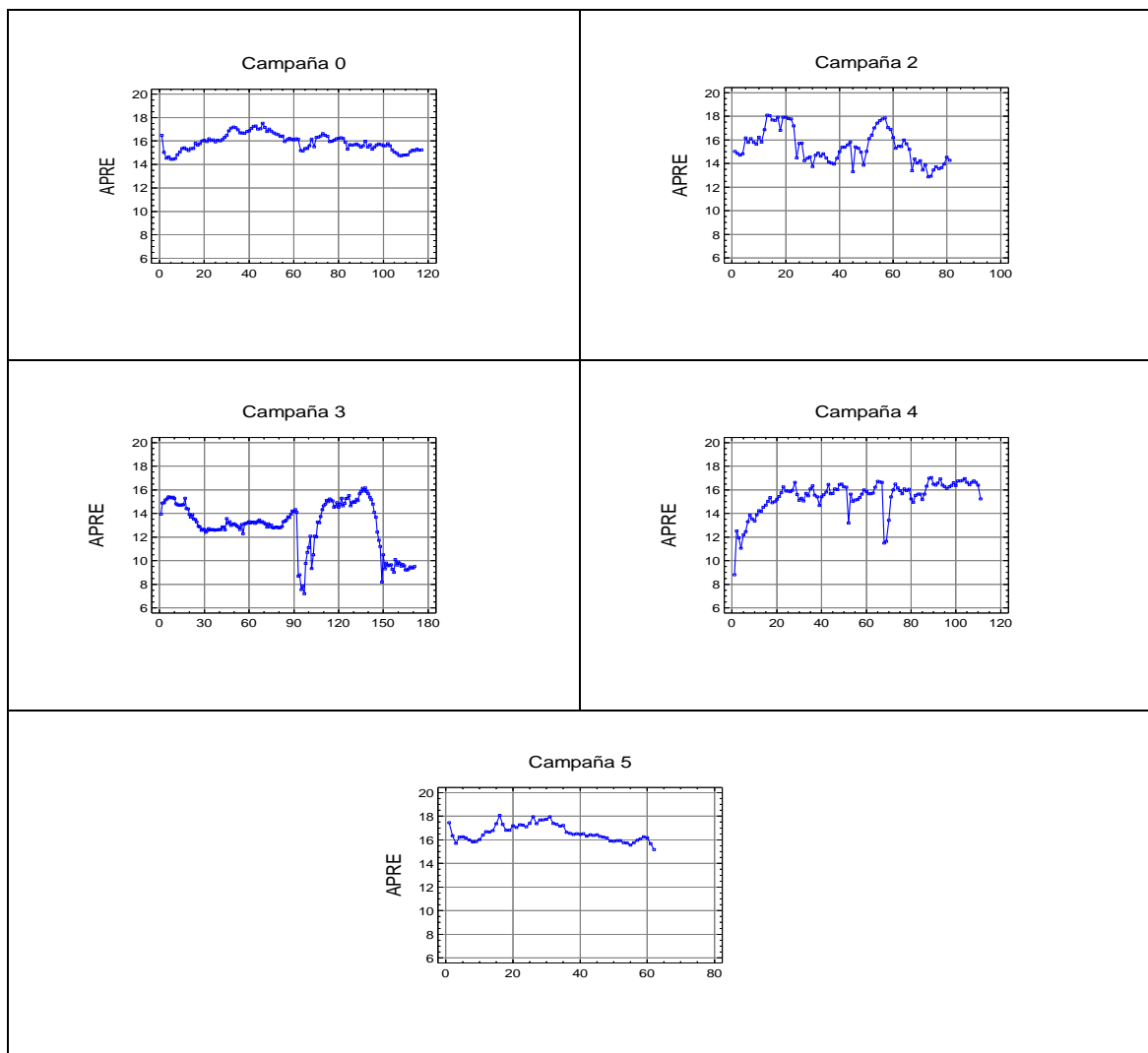


Figura 4.11 Gráfico de las series de $APRE_t$ de las diferentes campañas.

Examinando los gráficos de las series de $APRE_t$ para las diferentes campañas en la figura 4.11, se observa que no tienen un comportamiento estable en media. A este respecto hay que tener en cuenta que esta variable de salida no estaba controlada cuando se tomaron los datos. Para identificar los modelos ARIMA que representan a estas series es necesario diferenciarlas. La falta de estacionaridad queda también reflejada en las funciones de autocorrelación simple y parcial estimadas que se muestran en la figura 4.12. En las mismas se puede ver que el coeficiente de autocorrelación simple r_k se amortigua lentamente, y el coeficiente de autocorrelación parcial r_1' es estadísticamente significativo y próximo a 1, lo que sugiere el modelo ARIMA (0,1,0) o *paseo aleatorio*:

$$APRE_t = APRE_{t-1} + a_t \quad (4.58)$$

o

$$\nabla APRE_t = a_t \quad (4.59)$$

Los gráficos de las series diferenciadas, $\nabla APRE_t$, representados en la figura 4.13 indican que las series de $APRE_t$ se han convertido en estacionarias en media, y no necesitan ser diferenciadas de nuevo.

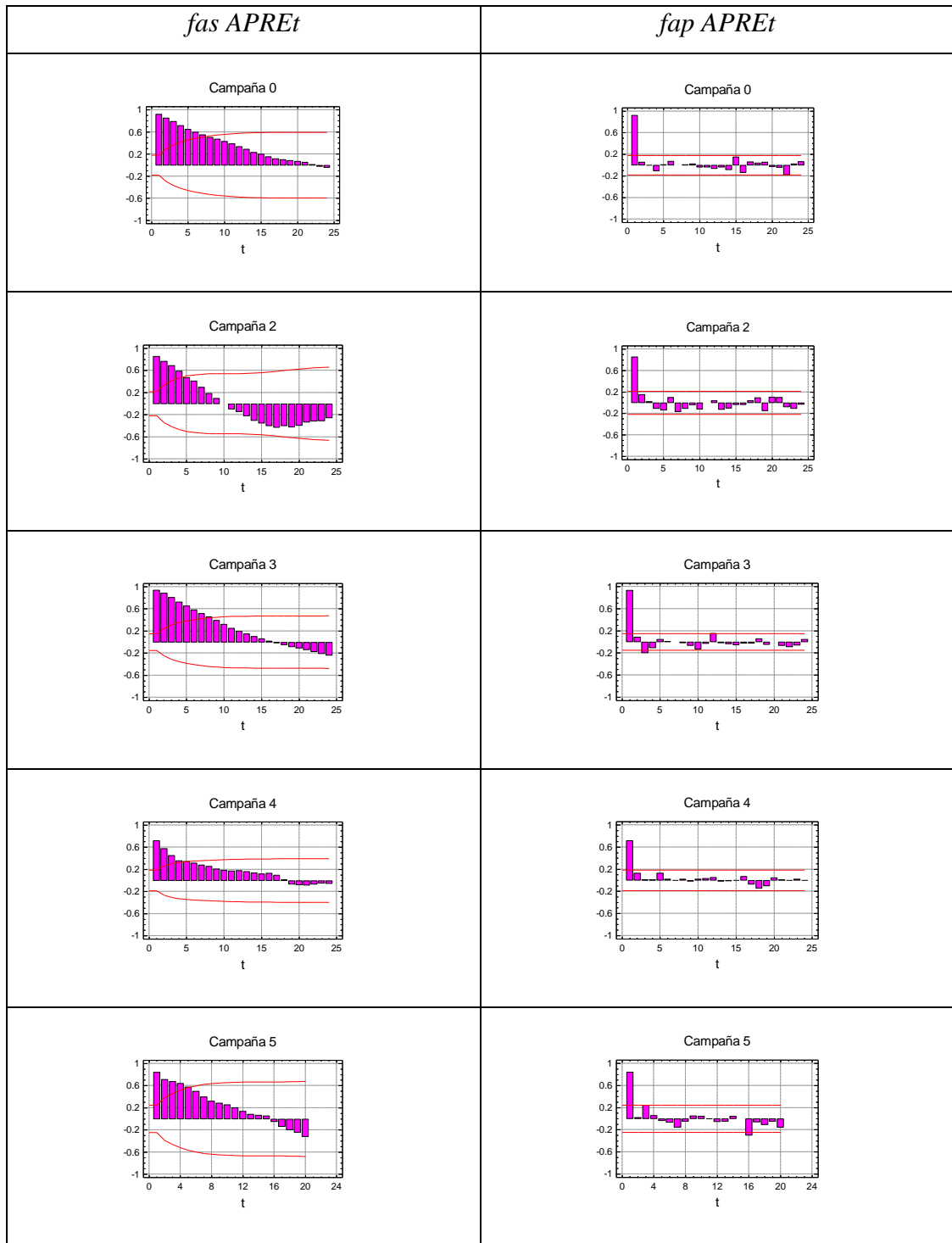


Figura 4.12 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de $APRE_t$ de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).

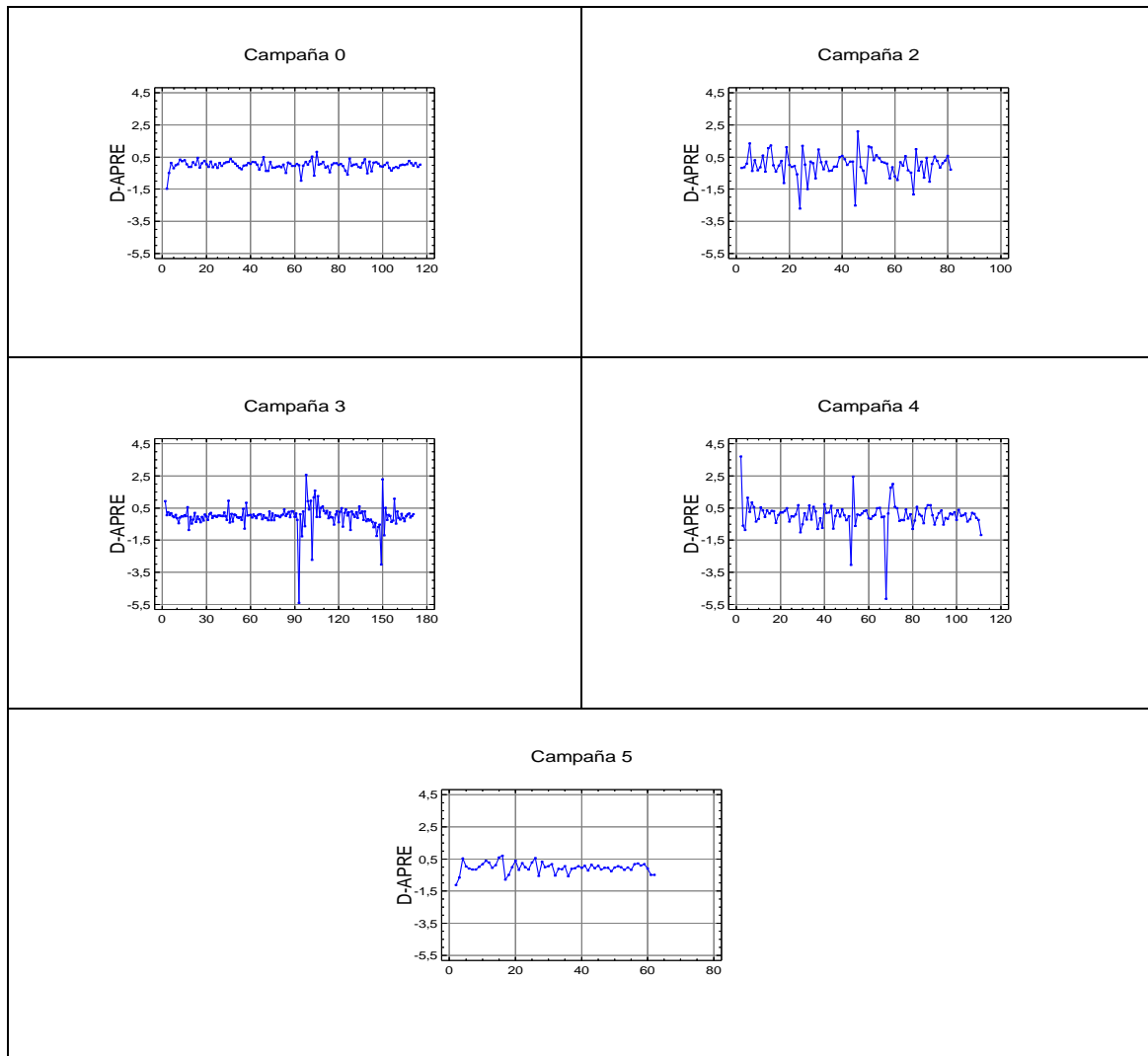


Figura 4.13 Gráfico de las series de $\nabla APRE_t$ de las diferentes campañas.

En la tabla 4.8 se presentan las varianzas residuales obtenidas al estimar el modelo ARIMA (0,1,0) propuesto para cada campaña.

Campaña	$\hat{\sigma}_{a_t}^2$
0	0.079
2	0.595
3	0.499
4	0.736
5	0.108

Tabla 4.8 Varianzas residuales estimadas de los modelos ARIMAS para las series de $APRE_t$

4.5 ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA DE CORRELACIÓN CRUZADA

El método de identificación del modelo de *función de transferencia múltiple* utilizado en esta tesis, es la generalización al caso multivariante del propuesto por Box y Jenkins (Box y Jenkins, 1976, Box *et al.* 1994). Dicho método es adecuado cuando las variables salida puedan estar correlacionadas y la correlación entre las variables entrada es de poca importancia y está basado en el procedimiento de preblanqueo y en las *funciones de correlación cruzada* (FCC) entre cada entrada y cada salida, que a continuación se detallan.

4.5.1 Preblanqueo y prefiltrado de las series

Considerando en principio el modelo de regresión dinámica entre una entrada x_t y una salida y_t , el proceso de identificación se simplifica cuando la serie entrada del sistema es ruido blanco. Cuando una serie de entrada original sigue cualquier otro proceso estocástico, esta simplificación es posible a través del preblanqueo. Supongamos dos series estacionarias x_t e y_t , con medias constantes μ_x y μ_y , respectivamente. Consideremos el modelo de regresión dinámica para y_t y el modelo ARMA para x_t siguientes:

$$y_t = \frac{\omega(B)B^b}{\delta(B)}x_t + \frac{\theta(B)}{\phi(B)}a_t \quad (4.60)$$

$$x_t = \frac{\theta_x(B)}{\phi_x(B)}\alpha_t$$

donde a_t y α_t son procesos de perturbaciones aleatorias incorrelacionadas, de media cero y distribuidas normalmente. Por simplicidad se asume que la constante en el modelo de regresión dinámica es cero y no aparecen elementos estacionales ni en el modelo ARMA de x_t , ni en el modelo ARMA para la serie de ruido del modelo de regresión dinámica. Los resultados que se muestran se pueden generalizar fácilmente al caso en que se incluya un término constante y se consideren series estacionales. Antes

de proceder a describir el procedimiento de preblanqueo, se discute la correlación cruzada.

Correlación cruzada

La principal herramienta en el método del preblanqueo es la *función de correlación cruzada* (FCC), que representa los coeficientes de correlación cruzada para distintos retardos k . El coeficiente de correlación cruzada poblacional para las variables x_t e y_t se define como:

$$\rho_{xy}(k) = \frac{\gamma_{xy}(k)}{\sigma_x \sigma_y} \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.61)$$

donde $\gamma_{xy}(k)$ es la covarianza cruzada poblacional entre x_t e y_t para el retardo k , y σ_x y σ_y son las desviaciones típicas de x_t e y_t , respectivamente. Un coeficiente de correlación cruzada es una covarianza cruzada estandarizada. La covarianza cruzada poblacional se define como:

$$\gamma_{xy}(k) = E[(x_t - \mu_x)(y_t - \mu_y)] \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.62)$$

Correlación cruzada muestral

Supongamos que, tras la diferenciación de las series, se tienen T observaciones. Una estimación de las covarianzas cruzadas $c_{xy}(k)$ en (4.61) vendrá dada por:

$$c_{xy}(k) = \begin{cases} T^{-1} \sum_{t=1}^{T-k} (x_t - \bar{x})(y_{t+k} - \bar{y}) & k = 0, 1, 2, \dots \\ T^{-1} \sum_{t=1}^{T+k} (y_t - \bar{y})(x_{t-k} - \bar{x}) & k = 0, -1, -2, \dots \end{cases} \quad (4.63)$$

donde \bar{x} y \bar{y} son las medias muestrales de las dos series. Los estadísticos $s_x = [c_{xx}(0)]^{1/2}$ y $s_y = [c_{yy}(0)]^{1/2}$ son las estimaciones de σ_x y σ_y , respectivamente.

Sustituyendo estas estimaciones y los valores $c_{xy}(k)$ de (4.63) en (4.61) se obtiene una estimación de $\rho_{xy}(k)$:

$$r_{xy}(k) = \frac{c_{xy}(k)}{s_x s_y} \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.64)$$

Como los valores $r_{xy}(k)$ son estadísticos muestrales, es necesario conocer las estimaciones de las desviaciones típicas con las que estos coeficientes pueden fluctuar en las muestras debido al azar del muestreo, para decidir si difieren significativamente de cero. Según Bartlett (1946 y 1966), y como se discute en Box y Jenkins (1976, pp. 476-477), si x_t e y_t no están correlacionadas cruzadamente, y si una de las series es ruido blanco, asumiendo normalidad, entonces aproximadamente:

$$\text{var}[r_{xy}(k)] = (T - k)^{-1} \quad (4.65)$$

Preblanqueo

El modelo ARMA de la serie estacionaria x_t (4.60) se puede transformar, utilizando los operadores AR y MA como filtros, en una serie de ruido blanco α_t (en la práctica $\hat{\alpha}_t$) a la que se denomina x_t preblanqueada:

$$\theta_x^{-1}(B)\phi_x(B)x_t = \alpha_t \quad (4.66)$$

Si se aplica la misma transformación a la serie y_t , se obtiene:

$$\beta_t = \theta_x^{-1}(B)\phi_x(B)y_t \quad (4.67)$$

A partir de las ecuaciones (4.60), (4.66) y (4.67) se tiene que:

$$\beta_t = v(B)\alpha_t + \varepsilon_t \quad (4.68)$$

donde $\varepsilon_t = \theta_x^{-1}(B)\phi_x(B)\phi^{-1}(B)\theta(B)\alpha_t$ es la serie de ruido filtrada y $v(B) = \frac{\omega(B)B^b}{\delta(B)}$, lo que

indica que existe la misma función de transferencia entre las series filtradas β_t y α_t que entre las series originales x_t e y_t . La diferencia fundamental reside en que la serie de entrada filtrada α_t es ruido blanco. En consecuencia, multiplicando ambos lados de la ecuación (4.68) por α_{t-k} y tomando esperanzas, se obtiene:

$$E[\alpha_{t-k}\beta_t] = v_k\sigma_\alpha^2 = \gamma_{\alpha\beta}(k) \quad (4.69)$$

ya que ε_t está incorrelacionado con α_{t-k} al estarlo, por hipótesis, x_t y α_t . Por lo tanto:

$$v_k = \frac{\gamma_{\alpha\beta}(k)}{\sigma_\alpha^2} \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.70)$$

o, en términos de correlación cruzada;

$$v_k = \frac{\rho_{\alpha\beta}(k)\sigma_\beta}{\sigma_\alpha} \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.71)$$

Por lo tanto, después de preblanquear la entrada y aplicar el mismo filtro a la salida, la *función de respuesta a impulsos* es proporcional a la *función de correlación cruzada* entre las series filtradas.

En la práctica no se conocen los parámetros de la ecuación (4.71), por lo que para obtener la estimación la *función de respuesta a impulsos* \hat{v}_k , se calcula función de correlación cruzada entre los residuos de los procedimientos de filtrado de la entrada y de la salida ($r_{\alpha\beta}(k)$), así como las desviaciones típicas s_α y s_β , obteniéndose:

$$\hat{v}_k = \frac{r_{\alpha\beta}(k)s_\beta}{s_\alpha} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.72)$$

Las estimaciones preliminares \hat{v}_k así obtenidas, en general, son estadísticamente poco eficientes, pero proporcionan información útil para elegir los órdenes de los polinomios $\omega(B)$ y $\delta(B)$ adecuados, y el parámetro de retardo b , necesarios para iniciar el proceso de estimación de la *función de transferencia*.

4.6 IDENTIFICACIÓN DEL MODELO

Tal como se ha comentado anteriormente, para diseñar un sistema de control del proceso es necesario obtener un modelo del mismo que represente fielmente las relaciones dinámicas entre las diferentes variables de entrada $\{x_t\}$ y de salida $\{y_t\}$, capaz de separar los efectos de las variables de entrada de los efectos de las perturbaciones, sobre las variables de salida. El *modelo Box-Jenkins* es apropiado para este fin puesto que en el mismo se presentan separados la parte dinámica y la parte estocástica del proceso. Siguiendo el principio de parsimonia, la idea es encontrar el modelo adecuado más simple, es decir, aquel que con el menor número de coeficientes explique lo mejor posible el comportamiento del sistema dinámico. Los modelos parsimoniosos tienden a dar predicciones más precisas. El modelo de *respuesta a impulsos* puede tener un gran número de coeficientes v_k , posiblemente un número infinito, mientras que los modelos paramétricos (*funciones de transferencia*) usan menos coeficientes. Obtener un modelo parsimonioso resulta esencial cuando el proceso está sujeto a perturbaciones y el ratio señal-ruido es bajo, sobre todo cuando el proceso es multivariante.

Por razones económicas (ya que el producto debe permanecer dentro de las especificaciones técnicas) y de seguridad, los datos se han obtenido en bucle cerrado (usando la terminología de Control Automático). Sin embargo, para estimar el modelo verdadero del proceso sería deseable haber obtenido los datos del proceso en lazo abierto (sin regulación), ya que de esta forma se evitaría el efecto del *feedback* sobre las estimaciones de los coeficientes del modelo.

En la figura 4.14, se esquematiza el proceso en lazo cerrado. $H_1(B)$ y $H_2(B)$ son las ecuaciones de la *función de transferencia* del proceso; $C_1(B)$ y $C_2(B)$ son las ecuaciones de la *función de transferencia* del controlador; N_{1t} y N_{2t} son las componentes del ruido. Aún en condiciones muy controladas, es muy posible que las características de salida se

vean afectadas por la influencia de otras variables o perturbaciones no observables. Estas perturbaciones constituyen la razón por la cual se necesita el control. SP_1 y SP_2 son los valores objetivos de las características de salida, alrededor de los cuales se desea que varíen las salidas lo mínimo posible. Si se opera en lazo cerrado la medida observada de cada salida y_{it} se compara con el valor objetivo deseado. Mediante la *función de transferencia* del controlador se calculan las acciones de control $\{u_t\}$ a tomar, ajustando las entradas $\{x_t\}$ según las cantidades calculadas, tratando de llevar las salidas $\{y_t\}$ lo más cerca posible de los valores objetivos o *set-points*. Esto es, en esencia el *feedback*. Cuando el proceso está regulado, las entradas $\{x_t\}$ dependen de las salidas $\{y_t\}$ y como consecuencia uno o varias entradas x_t pueden estar correlacionadas con las perturbaciones N_{1t} y N_{2t} , puesto que el controlador está intentando contrarrestar los efectos de éstas. En este caso habría que añadir a la ecuación del modelo en lazo abierto (4.60), la ecuación de realimentación:

$$\begin{aligned} y_t &= \frac{\omega(B)B^b}{\delta(B)} x_t + \frac{\theta(B)}{\phi(B)} a_t \\ x_t &= \frac{\theta_x(B)}{\phi_x(B)} \alpha_t \\ x_t &= C(B)e_t \end{aligned} \quad (4.73)$$

En nuestro caso, los datos se tomaron del proceso regulado, pero únicamente mediante los ajustes de la temperatura para controlar el MI_t .

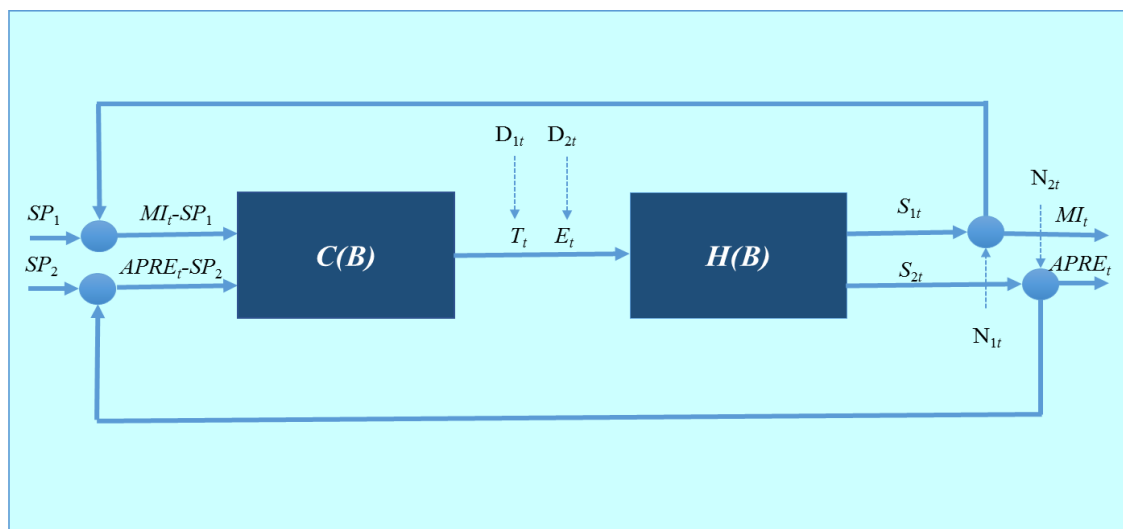


Figura 4.14 Esquema del proceso en bucle cerrado.

Si, por las razones mencionadas, se recogen datos cuando el proceso está funcionando en lazo cerrado, es necesario tener en cuenta que si se emplean los procedimientos estándar de identificación, estimación y validación en lazo abierto basándose en estos datos, se puede obtener modelos incorrectos debido a la dependencia entre las entradas $\{x_t\}$ y las componentes del ruido N_{1t} y N_{2t} (Box y MacGregor 1974, 1976). Los coeficientes de correlación cruzada $\rho_{xy}(k)$ para $k \geq 0$ se pueden ver afectados por la respuesta del controlador (de hecho reflejarían una mezcla de la reacción del proceso y del controlador), presentándose efectos confundidos, como se explica a continuación.

Tomando como base el caso SISO, en la identificación por correlación cruzada, si no existe relación entre la entrada x_t y el ruido N_t , según se ha visto en el apartado anterior:

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha\beta}(k) &= v_k \frac{\sigma_\alpha}{\sigma_\beta} & k \geq 0 \\ \rho_{\alpha\beta}(k) &= 0 & k < 0 \end{aligned} \quad (4.74)$$

Para $k = 0$ normalmente se cumplirá que $\rho_{xy}(0) = 0$, ya que en un sistema discreto habitualmente $b > 0$ puesto que el proceso no suele responder instantáneamente. Por lo tanto, al estimar la FCC (*función de correlación cruzada*), se espera que ésta solo presente coeficientes estadísticamente significativos para $k > 0$. Si presentara coeficientes significativos para $k \leq 0$, este hecho estaría indicando la presencia de realimentación, es decir la presencia de efectos de la salida y_t sobre la entrada x_t .

Sin embargo si existe relación entre x_t y N_t , lo que ocurre en lazo cerrado, al multiplicar la ecuación $\beta_t = v(B)\alpha_t + \varepsilon_t$ (4.68) por α_{t-k} , tomar esperanzas y dividir por σ_α y σ_β , se tiene que:

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha\beta}(k) &= v_k \frac{\sigma_\alpha}{\sigma_\beta} + \rho_{\alpha\varepsilon}(k) \frac{\sigma_\varepsilon}{\sigma_\alpha} & k \geq 0 \\ \rho_{\alpha\beta}(k) &= \rho_{\alpha\varepsilon}(k) \frac{\sigma_\varepsilon}{\sigma_\alpha} & k < 0 \end{aligned} \quad (4.75)$$

Por lo tanto, intentar la identificación usando (4.74) conducirá a un modelo incorrecto debido a que la entrada x_t estará correlacionada con el ruido N_t . Box y MacGregor (1974) sugieren que, para que en lazo cerrado el modelo pueda ser estimado, hay que romper la dependencia entre x_t y N_t . Esto se puede conseguir o bien añadiendo a la entrada x_t una señal binaria pseudoaleatoria (*dither signal*) D_t tal como se indica en la figura 4.14 (la cual está incorrelacionada con y_t y con α_t), o bien usando diferentes algoritmos de control o diferentes criterios de ajuste manual. La secuencia D_t debe ser elegida de forma que las desviaciones de la salida y_t sean de una magnitud aceptable. Con esta fuente de ruido añadida a la entrada x_t la ecuación de realimentación quedaría:

$$x_t = C(B)e_t(+D_t) \quad (4.76)$$

donde el paréntesis del término de las señales *dither* indica que éstas pueden o no ser añadidas en un cierto instante t .

En este caso no ha sido necesario añadir señales *dither* a los ajustes de T_t , ya que el control ha sido manual y la magnitud de los ajustes del control ha estado basada en la experiencia particular de varios operadores, en algunos casos con diferente filosofía de control. Puesto que los mismos no siguen exactamente las mismas reglas de control, se puede considerar que las señales *dither* están incluidas en el control manual del proceso. En el caso de que el control no hubiese sido manual también se hubiera podido identificar en lazo cerrado el modelo del proceso, si se hubiesen utilizado diferentes algoritmos de control automático.

4.7 ESTIMACIÓN DE LAS FUNCIONES DE CORRELACIÓN CRUZADAS PARA LA DETERMINACIÓN DE LA ESTRUCTURA DEL MODELO

Tal como se ha comentado anteriormente, para la identificación del modelo de *función de transferencia múltiple* es necesario previamente estimar las funciones de correlación cruzada (FCC) entre las distintas parejas formadas por cada entrada $\{x_{mi}\}$ y cada salida $\{y_l\}$. En la figura 4.15 se muestran las FCC estimadas para las diferentes componentes entre la serie de entrada T_t preblanqueada y la serie de salida filtrada MI_t .

(el filtro ha sido la primera diferencia). En la misma se puede observar la consistencia de la relación entre ambas variables a través de las cinco campañas de fabricación, que se traduce en que el efecto que tiene un cambio en la variable T en el periodo t comienza a manifestarse en la variable MI dos horas después, MI_{t+1} [$r(1)$ estadísticamente significativo y positivo], terminando dos horas más tarde, MI_{t+2} [$r(2)$ estadísticamente significativo y positivo], lo cual se tendrá en cuenta en la formulación del modelo. Debido a que los datos fueron tomados con el proceso controlado de forma manual, en la misma figura 4.15 también se puede observar la reacción del operador, que disminuye o aumenta la temperatura T_t dependiendo de si el valor medido en el laboratorio de MI_t indica si éste ha aumentado o disminuido, respectivamente [$r(0)$ estadísticamente significativo y negativo].

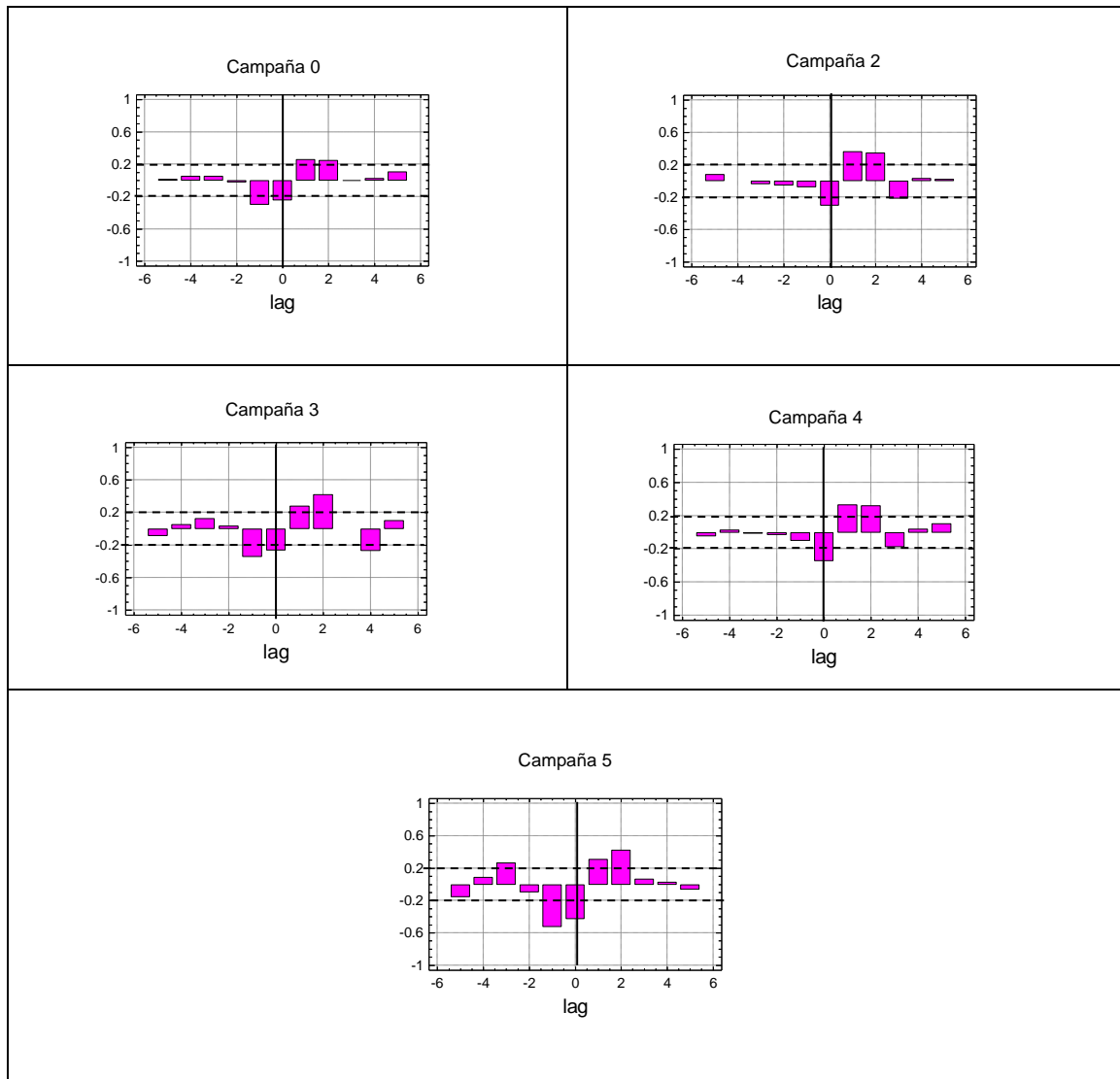


Figura 4.15 Funciones de correlación cruzada estimadas entre ∇MI y ∇T para las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas discontinuas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).

En la figura 4.16 se muestran las FCC estimadas entre la variable de entrada E_t preblanqueada y la serie de salida MI_t filtrada (el filtro también en este caso ha sido la primera diferencia) que representa la relación dinámica entre las mismas para las cinco campañas de fabricación. Dicha relación es bastante consistente a través de las mismas. El efecto que tiene un cambio en el caudal de etileno E en el periodo t , empieza a notarse en el MI dos horas más tarde, MI_{t+1} [$r(1)$ estadísticamente significativo en las campañas 2, 3 y 4] con efecto positivo, y termina dos horas más tarde MI_{t+2} [$r(2)$ estadísticamente significativo en las campañas 2 y 5], con efecto negativo. Nótese que no se evidencia una relación instantánea entre ambas variables [$r(0)$ no es

estadísticamente significativo] debido a que en el proceso el MI no estaba controlado con la variable de entrada E .

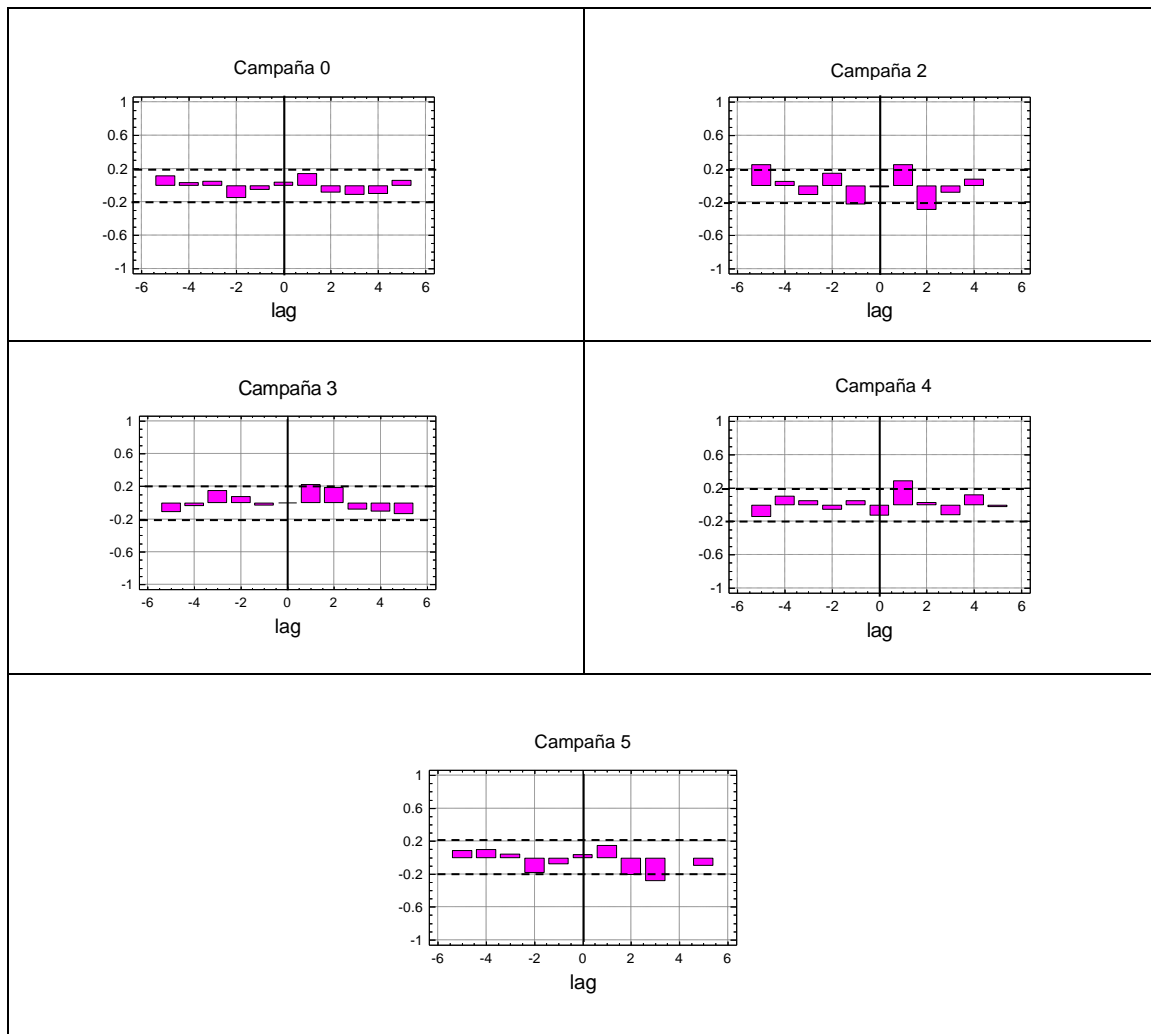


Figura 4.16 Funciones de correlación cruzada estimadas entre ∇MI y ∇E para las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas discontinuas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).

En la figura 4.17 las FCC estimadas muestran la relación dinámica entre $\nabla APRE$ y ∇T (de nuevo el filtro ha sido la primera diferencia). En ella se observa cómo un cambio en la variable de entrada T en el periodo t tiene un efecto positivo sobre la variable de rendimiento $APRE$ dos horas más tarde, $APRE_{t+1}$ [$r(1)$ es estadísticamente significativo en las cinco campañas] y finaliza dos horas después, $APRE_{t+2}$ [$r(2)$ estadísticamente significativo en la campaña 5], siendo el efecto positivo en las campañas 0 y 5. El coeficiente de correlación cruzada $r(0)$ significativo y negativo en las campañas 0, 2, 3 y 5 se explica como un efecto colateral de los ajustes realizados por

los operadores en la variable temperatura T_t intentando controlar el índice de fluidez MI_t y de la ligera correlación existente entre las variables de entrada temperatura y caudal de etileno.

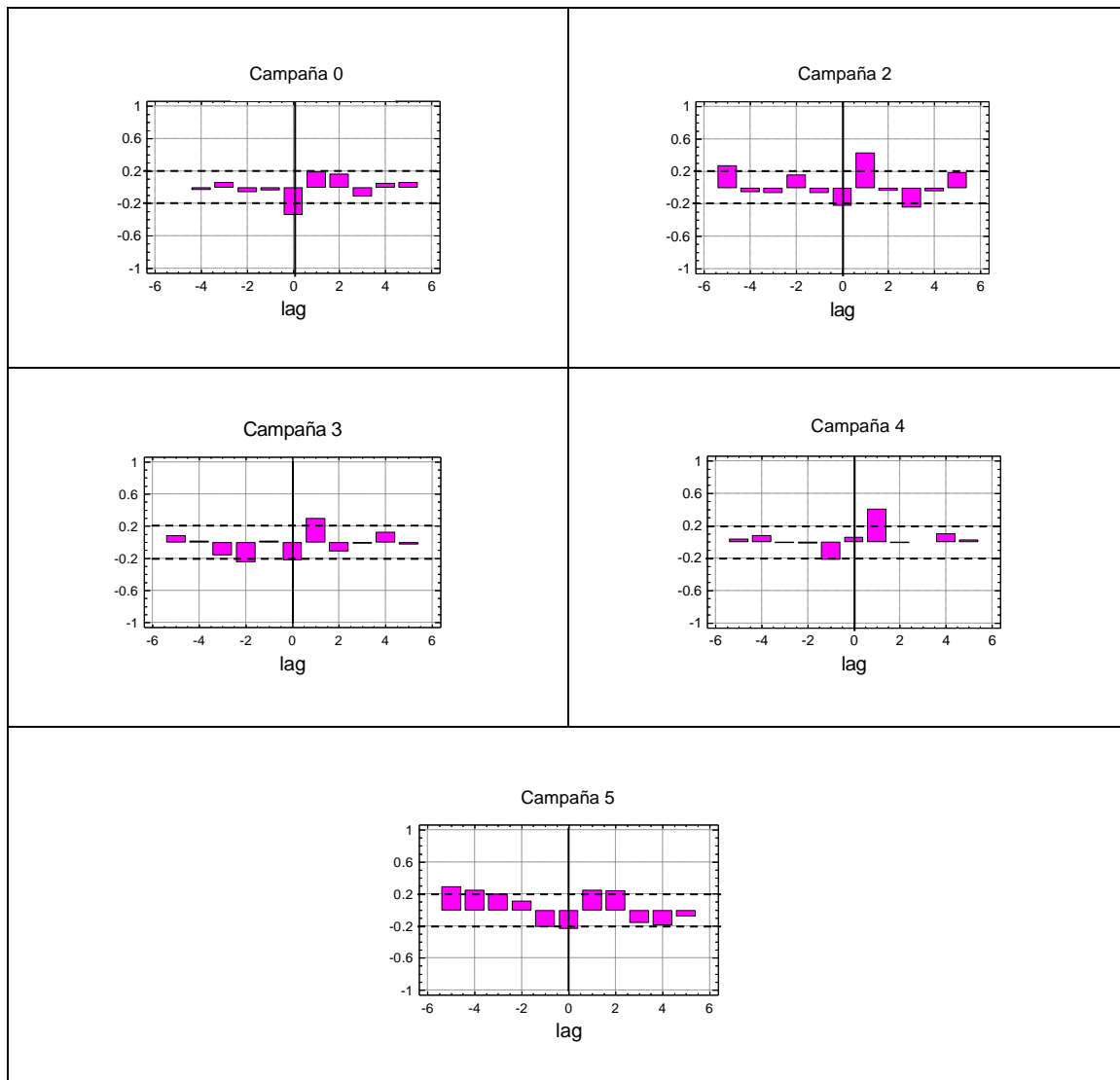


Figura 4.17 Funciones de correlación cruzada estimadas entre $\nabla APRE$ y ∇T para las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas discontinuas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).

La figura 4.18 muestra las relaciones dinámicas entre $\nabla APRE$ y ∇E mediante las FCC estimadas para las cinco campañas. El efecto de cambiar E en el periodo t tiene el mayor impacto sobre $APRE$ dos horas después, $APRE_{t+1}$ [$r(1)$ estadísticamente significativo y positivo]. En este caso la relación instantánea entre ambas variables estimada mediante $r(0)$ es positiva y estadísticamente significativa en las campañas 3, 4 y 5. Esta relación instantánea es una consecuencia de la forma en que se calculó la

variable de productividad $APRE$, que está directamente relacionada con el caudal de etileno E .

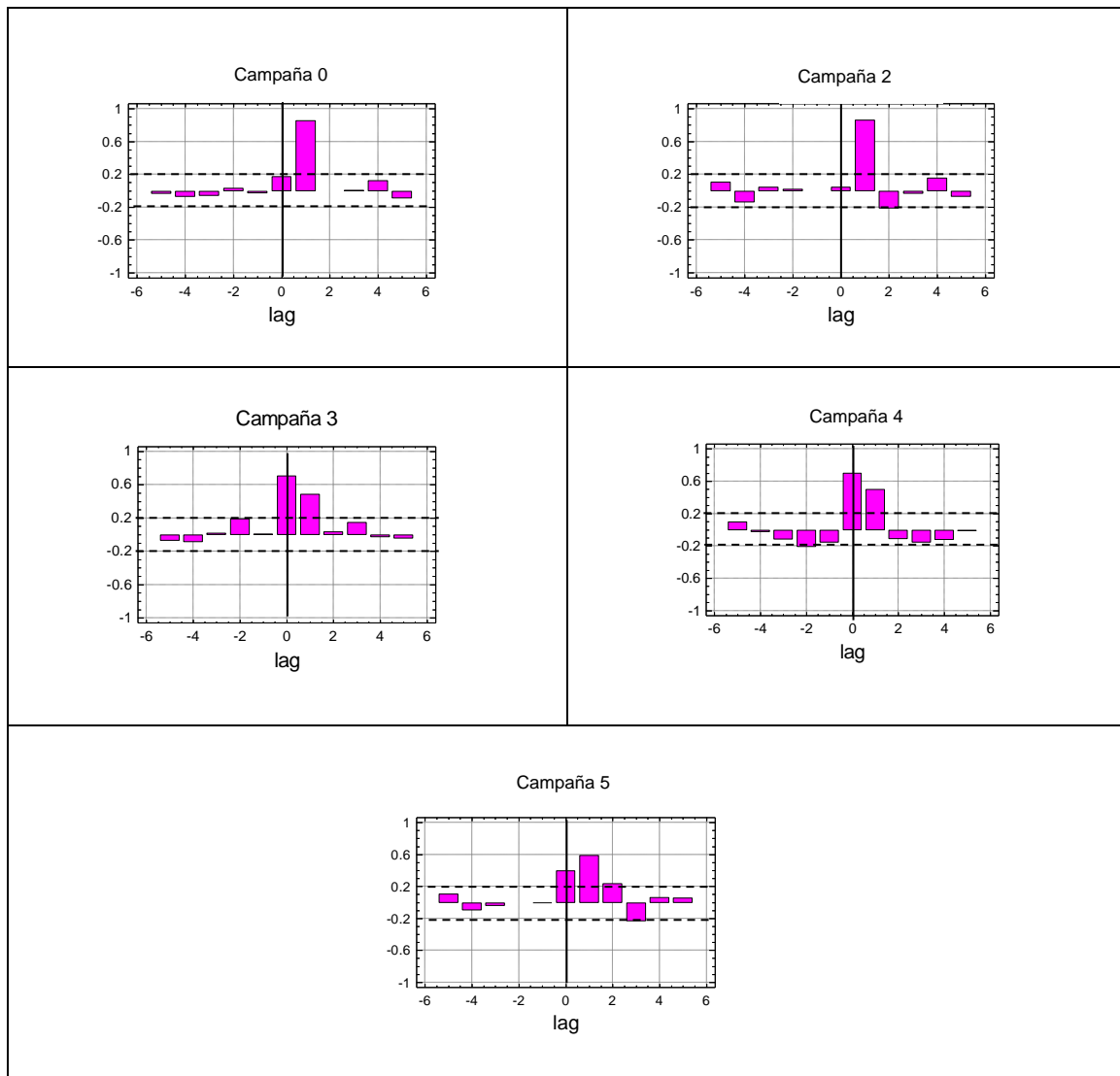


Figura 4.18 Funciones de correlación cruzada estimadas entre $VAPRE_t$ y VE_t para las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas discontinuas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).

La visión general del proceso de polimerización y la consistencia de las *funciones de correlación cruzadas* sugieren el siguiente modelo tentativo de *función de transferencia múltiple* para explicar la variación en el tiempo t , del índice de fluidez MI y del índice de productividad $APRE$:

$$\begin{bmatrix} \nabla MI_t \\ \nabla APRE_t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\omega_{11,1} + \omega_{11,2}B)B & (\omega_{12,1} + \omega_{12,2}B)B \\ (\omega_{21,1} + \omega_{21,2}B)B & \omega_{22,1}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla T_t \\ \nabla E_t \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\theta_1(B)}{\phi_1(B)} & 0 \\ 0 & \frac{\theta_2(B)}{\phi_2(B)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1t} \\ a_{2t} \end{bmatrix} \quad (4.77)$$

donde ∇T_t y ∇E_t son los cambios de la temperatura y del caudal de etileno para cada periodo t , respectivamente, y a_{it} son procesos de ruido blanco que se distribuyen normalmente $N(0, \sigma_{it}^2)$. El modelo para ∇MI_t es un modelo de *función de transferencia discreta* de segundo orden para las dos variables de entrada. El modelo para $\nabla APRE_t$ es un modelo de *función de transferencia discreta* de segundo orden para la T_t y de primer orden para E_t . En el modelo (4.77) se refleja que las variables controladas ∇MI_t y $\nabla APRE_t$ no están correlacionadas, ya que en la matriz del modelo ARIMA vectorial de ruido los valores fuera de la diagonal principal son 0.

4.8 ESTIMACIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL MODELO POR EL MÉTODO DE LA MÁXIMA VEROSIMILITUD

Una vez se ha identificado y especificado el modelo de *función de transferencia múltiple* tentativamente, el siguiente paso es estimar los parámetros del mismo y la matriz de varianzas-covarianzas Σ residual, maximizando la función de verosimilitud correspondiente.

Existen varios métodos de estimación de los parámetros por el método de la máxima verosimilitud (MV), que básicamente se clasifican en condicionales y exactos. Ambos tipos de métodos difieren fundamentalmente en que los primeros asumen que los valores iniciales de las perturbaciones desconocidos y necesarios para la estimación del modelo 4.4, son $a_{l,0} = a_{l,-1} = \dots = a_{l,-q+1} = 0$, mientras que en los algoritmos exactos estos valores iniciales se estiman usando la función de verosimilitud, siendo un procedimiento más complejo.

La estimación MV en *funciones de transferencia múltiples* se conoce como estimación FIML (*full-information maximum likelihood*). Respecto a las propiedades de los estimadores FIML y para conocer más detalles sobre los métodos de estimación MV de los modelos ARMAX vectoriales, se puede consultar las referencias (Hendry 1971, Chow y Fair 1974, Zellner y Palm 1974, Zellner 1979 y Reinsel 1979). Vall (1976)

derivó la siguiente función de verosimilitud para el modelo (4.4) en el enfoque condicional:

$$l = -\frac{T}{2} \ln |\Sigma| - \frac{1}{2} \sum_{t=1}^T \mathbf{a}_t' \Sigma^{-1} \mathbf{a}_t \quad (4.78)$$

donde la serie \mathbf{a}_t se obtiene de forma recursiva de:

$$\mathbf{a}_t = \mathbf{y}_t - \mathbf{c}' - \sum_{b=1}^p \Phi_b \mathbf{y}_{t-b} - \sum_{b=0}^s \Theta_b^* \mathbf{x}_{t-b} + \sum_{b=1}^q \Theta_b \mathbf{a}_{t-b} \quad (4.79)$$

para $t=1, \dots, T$, condicionado a que los valores iniciales para las series \mathbf{a}_t se toman $\mathbf{a}_0 = \mathbf{a}_{-1} = \dots = \mathbf{a}_{1-q} = \mathbf{0}$, y usando los valores observados de \mathbf{x}_t y de \mathbf{y}_t como los iniciales cuando sea necesario.

En este caso, se han obtenido estimaciones aproximadas basadas en la función de verosimilitud condicional propuesta. Esta opción requiere menos tiempo de computación que los algoritmos de MV exactos, pero pueden conducir a estimaciones seriamente sesgadas en la estimación de los parámetros de medias móviles $\theta_l(B)$ del modelo de ruido en (4.4), especialmente cuando estos coeficientes se encuentran cerca del límite de invertibilidad. Para este caso, se dispone también de un procedimiento que proporciona unos estimadores aproximados más exactos desarrollado por Hillmer y Tiao (1979), que requiere mayor tiempo de computación, pero obtiene mejores estimadores de los coeficientes MA de medias móviles. Debido a que implementar el algoritmo exacto de estimación multivariante (estimación conjunta de todas las ecuaciones del modelo de función de transferencia múltiple) es complejo este procedimiento no se ha empleado.

Los estimadores máximo-verosímiles de los parámetros desconocidos del modelo ARMAX vectorial se obtienen por métodos numéricos iterativos, usando una variante del método de Gauss-Marquardt, tratándose de un procedimiento de estimación no lineal (MACC 1965).

Es importante tener en cuenta que las propiedades de consistencia y de eficiencia de los estimadores FIML se derivan del hecho de que el modelo de *función de*

transferencia múltiple está *correctamente identificado*. En realidad todo modelo es una aproximación de las relaciones existentes entre todas las variables del mismo, y no existe el modelo verdadero (excepto en el caso en que el conjunto de datos haya sido simulado). Cuando un modelo de *función de transferencia múltiple* no está correctamente especificado, las estimaciones obtenidas de forma multivariante son más vulnerables a los errores de especificación que cuando se estiman ecuación a ecuación. Ello es debido a que se intenta obtener unos estimadores eficientes para todos los parámetros del sistema. Por ello, es una buena práctica estimar previamente los diferentes submodelos para cada salida y_{it} , ya que los estimadores así obtenidos son menos vulnerables a los errores de especificación. Posteriormente, y tomando como base los parámetros estimados, se puede re-estimar de nuevo el modelo de forma conjunta para el vector salida \mathbf{y}_t .

4.8.1 Estimación ecuación a ecuación

A continuación en las tablas 4.9 y 4.10 se muestran los parámetros estimados del modelo identificado 4.76, usando el método de MV condicional, acompañados de sus desviaciones típicas entre paréntesis y las varianzas residuales estimadas, así como los coeficientes de determinación para cada campaña.

Como puede apreciarse en las tablas 4.9 y 4.10 los parámetros estimados varían un poco entre campañas. Sin embargo el modelo 4.80, describe razonablemente bien el proceso durante un largo periodo de tiempo. Por otro lado, los análisis de los residuos que se describirán en la siguiente sección, permiten dar como válido el modelo estimado, no dando razones para considerar modelos alternativos que pudieran aumentar la capacidad de predicción de las variables de salida.

Modelo ∇MI_t :

$$\nabla MI_t = (\omega_{11,1} + \omega_{11,2}B)\nabla T_{t-1} + (\omega_{12,1} + \omega_{12,2}B)\nabla E_{t-1} + a_{1t} \quad (4.80)$$

CAMPAÑA	$\hat{\omega}_{11,1}$	$\hat{\omega}_{11,2}$	$\hat{\omega}_{12,1}$	$\hat{\omega}_{12,2}$	$\hat{\sigma}_{1t}^2$	R_1^2
0	0.24 (0.08)	0.23 (0.08)	0.003 (0.02) ^{NS}	-0.002 (0.02) ^{NS}	0.004	54
2	0.14 (0.04)	0.20 (0.04)	0.008 (0.01) ^{NS}	-0.05 (0.01)	0.005	36
3	0.13 (0.03)	0.21 (0.03)	0.009 (0.01)	0.04 (0.01)	0.006	40
4	0.08 (0.05) ^{NS}	0.12 (0.05)	0.095 (0.02)	-0.008 (0.02) ^{NS}	0.006	30
5	0.068 (0.09) ^{NS}	0.30 (0.08)	0.11 (0.03)	-0.083 (0.03)	0.003	51

Tabla 4.9 Parámetros estimados (estimación ecuación a ecuación) del modelo ∇MI_t (ecuación 4.80) para las 5 campañas estudiadas (desviaciones típicas entre paréntesis). R^2 : bondad del ajuste (%). NS: no significativo estadísticamente, valor- $p > 0.05$.

Modelo $\nabla APRE_t$:

$$\nabla APRE_t = (\omega_{21,1} + \omega_{21,2}B)\nabla T_{t-1} + \omega_{22,1}\nabla E_{t-1} + \frac{1}{(1-\phi B)}a_{2t} \quad (4.81)$$

CAMPAÑA	$\hat{\omega}_{21,1}$	$\hat{\omega}_{21,2}$	$\hat{\omega}_{22,1}$	$\hat{\phi}_2$	$\hat{\sigma}_{2t}^2$	R_2^2
0	0.47 (0.13)	-0.24 (0.13) ^{NS}	0.82 (0.04)	-0.63 (0.08)	0.013	98
2	0.53 (0.15)	-0.36 (0.14)	0.91 (0.05)	-0.46 (0.10)	0.099	95
3	0.83 (0.17)	-0.61 (0.17)	0.77 (0.05)	-0.56 (0.07)	0.21	95
4	0.10 (0.05)	-0.33 (0.04)	0.77 (0.05)	-0.33 (0.08)	0.05	98
5	0.80 (0.31)	-0.08 (0.32) ^{NS}	0.67 (0.13)	-0.37 (0.12)	0.057	88

Tabla 4.10 Parámetros estimados (estimación ecuación a ecuación) del modelo $\nabla APRE_t$ (ecuación 4.81) para las 5 campañas estudiadas (desviaciones típicas entre paréntesis). R^2 : bondad del ajuste (%). NS: no significativo estadísticamente, valor- $p > 0.05$.

4.8.2 Estimación multivariante del modelo

Como se ha justificado anteriormente el modelo de *función de transferencia múltiple* se ha estimado en principio ecuación a ecuación. Con objeto de comparar estas estimaciones con la estimación multivariante FIML, se presentan en las tablas 4.11 y 4.12 los resultados de la estimación conjunta del modelo. En la tabla 4.14 se muestran las matrices de varianzas-covarianzas estimadas, así como las matrices de correlación, cuyo elemento fuera de la diagonal muestra el coeficiente de correlación cruzada entre las series residuales a_{1t} y a_{2t} .

Modelo Conjunto:

$$\begin{bmatrix} \nabla MI_t \\ \nabla APRE_t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\omega_{11,1} + \omega_{11,2}B)B & (\omega_{12,1} + \omega_{12,2}B)B \\ (\omega_{21,1} + \omega_{21,2}B)B & \omega_{22,1}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla T_t \\ \nabla E_t \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\theta_{11}(B)}{\phi_{11}(B)} & 0 \\ 0 & \frac{\theta_{22}(B)}{\phi_{22}(B)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1t} \\ a_{2t} \end{bmatrix} \quad (4.82)$$

Modelo ∇MI_t :

CAMPAÑA	$\hat{\omega}_{11,1}$	$\hat{\omega}_{11,2}$	$\hat{\omega}_{12,1}$	$\hat{\omega}_{12,2}$	$\hat{\sigma}_{1t}^2$	R_1^2
0	0.22 (0.08)	0.21 (0.08)	0.013 (0.02) ^{NS}	0.02 (0.02) ^{NS}	0.004	46
2	0.13 (0.04)	0.19 (0.04)	0.01 (0.01) ^{NS}	-0.05 (0.01)	0.005	34
3	0.12 (0.03)	0.19 (0.03)	0.02 (0.01)	0.02 (0.01) ^{NS}	0.006	34
4	0.10 (0.05)	0.12 (0.05)	0.11 (0.02)	-0.006 (0.02) ^{NS}	0.007	27
5	0.066 (0.09) ^{NS}	0.30 (0.08)	0.11 (0.03)	-0.08 (0.03)	0.003	44

Tabla 4.11 Parámetros estimados (estimación conjunta) del modelo ∇MI_t (ecuación 4.81) para las 5 campañas estudiadas (desviaciones típicas entre paréntesis). R^2 : bondad del ajuste (%). NS: no significativo estadísticamente, valor- $p > 0.05$.

Si se comparan los resultados entre la estimación por el método de la máxima verosimilitud condicional ecuación a ecuación, con la estimación conjunta por el método FIML, se observa que para la variable de salida ∇MI (tablas 4.9 y 4.11) apenas existen diferencias en las estimaciones, únicamente disminuyen muy ligeramente las bondades de los ajustes y, en consecuencia, aumentan las varianzas residuales. En estas últimas, debido a la precisión con que se han medido, no se percibe apenas dicha disminución. Para la variable de salida $\nabla APRE$ (tablas 4.10 y 4.12) tampoco se observan diferencias, excepto para la campaña 4, en la que en la estimación FIML, disminuye R^2 y aumenta $\hat{\sigma}_{2t}^2$. Recuérdese al respecto que en dicha campaña (ver sección 4.4) se produjo una parada de la producción, generándose en las series temporales valores anómalos que han dificultado su tratamiento estadístico.

Modelo $\nabla APRE_t$:

CAMPAÑA	$\hat{\omega}_{21,1}$	$\hat{\omega}_{21,2}$	$\hat{\omega}_{22,1}$	$\hat{\phi}_2$	$\hat{\sigma}_{2t}^2$	R_2^2
0	0.47 (0.13)	-0.24 (0.13) ^{NS}	0.82 (0.04)	-0.63 (0.08)	0.013	97
2	0.53 (0.15)	-0.35 (0.14)	0.91 (0.05)	-0.40 (0.10)	0.100	95
3	0.83 (0.17)	-0.62 (0.16)	0.78 (0.05)	-0.58 (0.07)	0.21	95
4	0.28 (0.11)	-0.30 (0.08)	0.59 (0.11)	-0.62 (0.09)	0.33	69
5	0.80 (0.31)	-0.08 (0.32) ^{NS}	0.67 (0.13)	-0.36 (0.12)	0.057	88

Tabla 4.12 Parámetros estimados (estimación conjunta) del modelo $\nabla APRE_t$ (ecuación 4.81) para las 5 campañas estudiadas (desviaciones típicas entre paréntesis). R^2 : bondad del ajuste (%). NS: no significativo estadísticamente, valor- $p > 0.05$.

El hecho de que las salidas ∇MI_t y $\nabla APRE_t$ no estén prácticamente correlacionadas, tal como puede verse en las matrices de correlaciones residuales (tabla 4.13), hace que la estimación conjunta no sea más eficiente, sino muy ligeramente peor, probablemente debido a que la estimación FIML intenta obtener estimaciones eficientes para todos los parámetros de todo el sistema. Como, por otro lado, no se trata de un sistema complejo con muchas variables, los cambios son imperceptibles.

El modelo elegido finalmente para derivar el controlador DMC es el correspondiente a la campaña 5, por haber sido una campaña muy regular, sin anomalías y con la menor desviación típica residual, cuya expresión es:

$$\nabla MI_t = 0,07\nabla T_{t-1} + 0,30\nabla T_{t-2} + 0,11\nabla E_{t-1} - 0,08\nabla E_{t-2} + a_{1t}$$

$$\nabla APRE_t = 0,8\nabla T_{t-1} - 0,08\nabla T_{t-2} + 0,67\nabla E_{t-1} + \frac{1}{(1+0,37B)} a_{2t}$$

$$\{a_{1t}\} : \text{ruido blanco } \hat{\sigma}_{a_1}^2 = 0,004 \text{ y } \{a_{2t}\} : \text{ruido blanco } \hat{\sigma}_{a_2}^2 = 0,057$$

Campañas	MATRICES DE VARIANZAS-COVARIANZAS RESIDUALES	MATRICES DE CORRELACIONES RESIDUALES
0	$\begin{pmatrix} 0,0039 & \\ 0,0006 & 0,0127 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1,0000 & \\ 0,0864 & 1,0000 \end{pmatrix}$
2	$\begin{pmatrix} 0,0054 & \\ -0,0053 & 0,0995 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1,0000 & \\ -0,2279 & 1,0000 \end{pmatrix}$
4	$\begin{pmatrix} 0,0062 & \\ -0,0109 & 0,2122 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1,0000 & \\ -0,3020 & 1,0000 \end{pmatrix}$
4	$\begin{pmatrix} 0,0065 & \\ -0,0128 & 0,3299 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1,0000 & \\ -0,2750 & 1,0000 \end{pmatrix}$
5	$\begin{pmatrix} 0,0030 & \\ -0,0018 & 0,0568 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1,0000 & \\ -0,1384 & 1,0000 \end{pmatrix}$

Tabla 4.13 Matrices de varianzas-covarianzas y de correlaciones residuales estimadas para las cinco campañas.

4.9 VALIDACIÓN DEL MODELO

Tras haber identificado y estimado el modelo de *función de transferencia múltiple* es necesario verificar si éste se ajusta adecuadamente a los datos y representa de manera fidedigna las relaciones entre las variables que componen el sistema. Para validar el modelo es necesario comprobar que se cumplen las hipótesis asumidas. Para ello se utilizará el análisis de residuos.

Las hipótesis del modelo más importantes son (ver sección 4.2):

- $\mathbf{a}_t = (a_{1t}, a_{2t}, \dots, a_{L_t})^T$ en el modelo (4.4) sigue un proceso vectorial de ruido blanco, esto es, independiente e idénticamente distribuido según una normal multivariante $N(\mathbf{0}, \Sigma)$.
- El proceso exógeno \mathbf{x}_t se genera independientemente del proceso de ruido \mathbf{n}_t . Si no se satisface esta hipótesis, significa que al menos una de las series que

componen el proceso de ruido $\mathbf{a}_t = (a_{1t}, a_{2t}, \dots, a_{L_t})^T$ se puede predecir por alguna de las variables de entrada x_{mt} y sus respectivos retardos y, por lo tanto, existiría falta de ajuste (*lack of fit*) producido por errores de especificación del modelo.

- c) El proceso exógeno \mathbf{x}_t puede afectar al proceso respuesta \mathbf{y}_t , pero no al contrario, es decir la relación es unidireccional.

Para verificar a) se pueden examinar los gráficos y las *funciones de autocorrelación simple (fas)* de las series residuales a_{lt} .

Para verificar b) y c) es necesario estimar las FCC entre las series residuales a_{lt} y las variables de entrada preblanqueadas x_{mt} . Para comprobar la independencia entre las series a_{lt} y x_{mt} es necesario este preblanqueamiento, ya que si una serie a_{lt} es ruido blanco pero la serie x_{mt} presenta autocorrelación, la FCC resultante podría tener una forma muy similar a la *fas* de la serie x_{mt} , lo que podría conducir a conclusiones erróneas.

Un aspecto importante en la construcción de un modelo de *función de transferencia* es determinar qué reformulaciones se tienen que hacer en el modelo tentativo si los contrastes diagnósticos muestran inadecuación del mismo. En este tipo de modelos existen varias fuentes de deficiencias: el modelo de función de transferencia puede ser incorrecto o, puede serlo el modelo de ruido o pueden ser ambos incorrectos.

a) Modelo de *función de transferencia* correctamente especificado, pero modelo de ruido incorrectamente especificado.

Si la *función de transferencia* ha sido correctamente especificada, entonces el modelo de los residuos no debería estar correlacionado con las series de entrada preblanqueadas. Sin embargo, los residuos del modelo podrían estar autocorrelacionados, lo que se pondría de manifiesto en las *fas* de las series residuales.

b) Modelo de *función de transferencia* incorrectamente especificado.

Si la *función de transferencia* está incorrectamente especificada, entonces los residuos del modelo todavía contendrían información sistemática que podría ser explicada por las series de entrada. En este caso, las series residuales podrían estar correlacionadas de forma cruzada con las series de entrada preblanqueadas. Adicionalmente estas series residuales podrían presentar autocorrelaciones debido a que contendrían información sistemática. Estas características se pueden presentar incluso si el modelo de ruido hubiese sido correctamente identificado. De aquí que en este caso, aparecerían tanto coeficientes de correlación cruzada como coeficientes de autocorrelación estadísticamente significativos, en las FCC entre las series de entrada preblanqueadas y las series residuales y en las *fas* de estas últimas respectivamente.

c) Modelo de *función de transferencia* y modelo de ruido incorrectamente especificados.

Si tanto el modelo de *función de transferencia* como el modelo de ruido están incorrectamente especificados, los residuos estarán tanto autocorrelacionados entre sí, ya que tienen estructura dinámica, como correlacionados con los valores de las series de entrada. La autocorrelación de los residuos se detectará con su correlograma y la dependencia con las series de entrada estudiando las FCC entre las series residuales del modelo y las diferentes variables explicativas.

Por último, si tanto la función de transferencia como el modelo del proceso de ruido son correctos, no habrá ni autocorrelaciones, ni correlaciones cruzadas.

En las tablas 4.14-4.18 se muestran los gráficos de las series a_{1t} y sus correspondientes gráficos de las *fas* para las distintas campañas. En los gráficos de las series residuales no se aprecia ninguna pauta de variabilidad no aleatoria, ni valores anómalos. En los gráficos de las *fas* tampoco aparecen autocorrelaciones importantes. Únicamente en la campaña 0 aparece una ligera autocorrelación [$r(1)$ significativo] en la serie a_{1t} , y en la campaña 2 también aparece [$r(1)$ significativo] en a_{1t} y [$r(2)$ significativo] en la serie a_{2t} . Esto es debido a que se ha ajustado un modelo global para las cinco campañas. Solamente nos debe preocupar el hecho de que haya una fuerte evidencia de que estas series sean muy diferentes de un proceso de ruido blanco. En las mismas tablas también se han representado las FCC estimadas entre las variables de

entrada x_{mt} preblanqueadas $\alpha_{mt} = \nabla x_{mt}$, y las series residuales a_{lt} , que en este caso son las variables de salida. Tampoco en este caso se encuentran coeficientes de correlación cruzada que permitan predecir las series residuales a_{lt} a partir de las variables de entrada x_{mt} (coeficientes de correlación cruzada $r_{\alpha,a}$ de decalajes positivos), puesto que ninguno de ellos es significativo. Los coeficientes de correlación cruzada entre α_{1t} (serie del modelo ARIMA ∇T_t) y a_{1t} (serie residual para el modelo de *función de transferencia* de ∇MI_t) [$r(0)$ y $r(-1)$ significativos en todas las campañas excepto en la 2 y la 4] ponen de nuevo de manifiesto la existencia de retroalimentación, es decir la reacción del operador que disminuye o aumenta la temperatura T_t dependiendo de si el valor medido en el laboratorio de MI_t indica si éste ha aumentado o disminuido respectivamente. También de nuevo se detecta la relación instantánea entre las variables $APRE_t$ y E_t mediante la relación en el retardo 0 entre α_{2t} (serie del modelo ARIMA ∇E_t) y a_{2t} (serie residual para el modelo de *función de transferencia* de $\nabla APRE_t$) [$r(0)$ significativo en todas las campañas]. Esta relación instantánea es, como se ha explicado anteriormente, consecuencia de la forma en que se calculó la variable de productividad $APRE$, que está directamente relacionada con el caudal de etileno E .

El estudio pormenorizado de las técnicas de análisis de residuos, permite aceptar el modelo estimado (4.79, 4.80) como válido. Dicho modelo será utilizado para predecir las variables de salida $\{y_{lt}\}$ a partir de las variables de entrada $\{x_{mt}\}$ en el sistema de control integrado (automático y estadístico) que se propone en esta tesis, descrito en el Capítulo 6.

Campaña 0

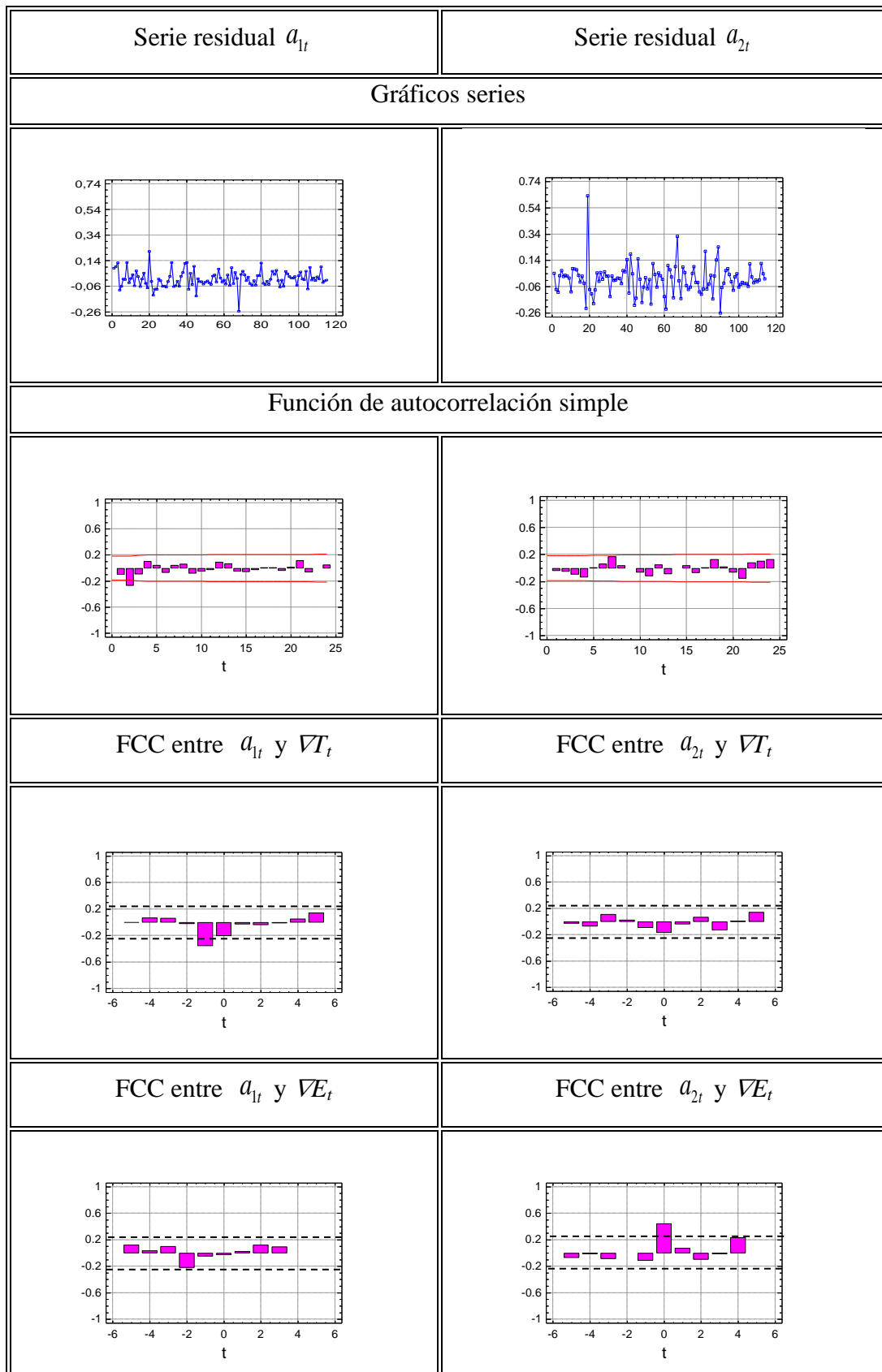


Tabla 4.14 Análisis de residuos del modelo *función de transferencia múltiple* estimado de la Campaña 0.

Campaña 2

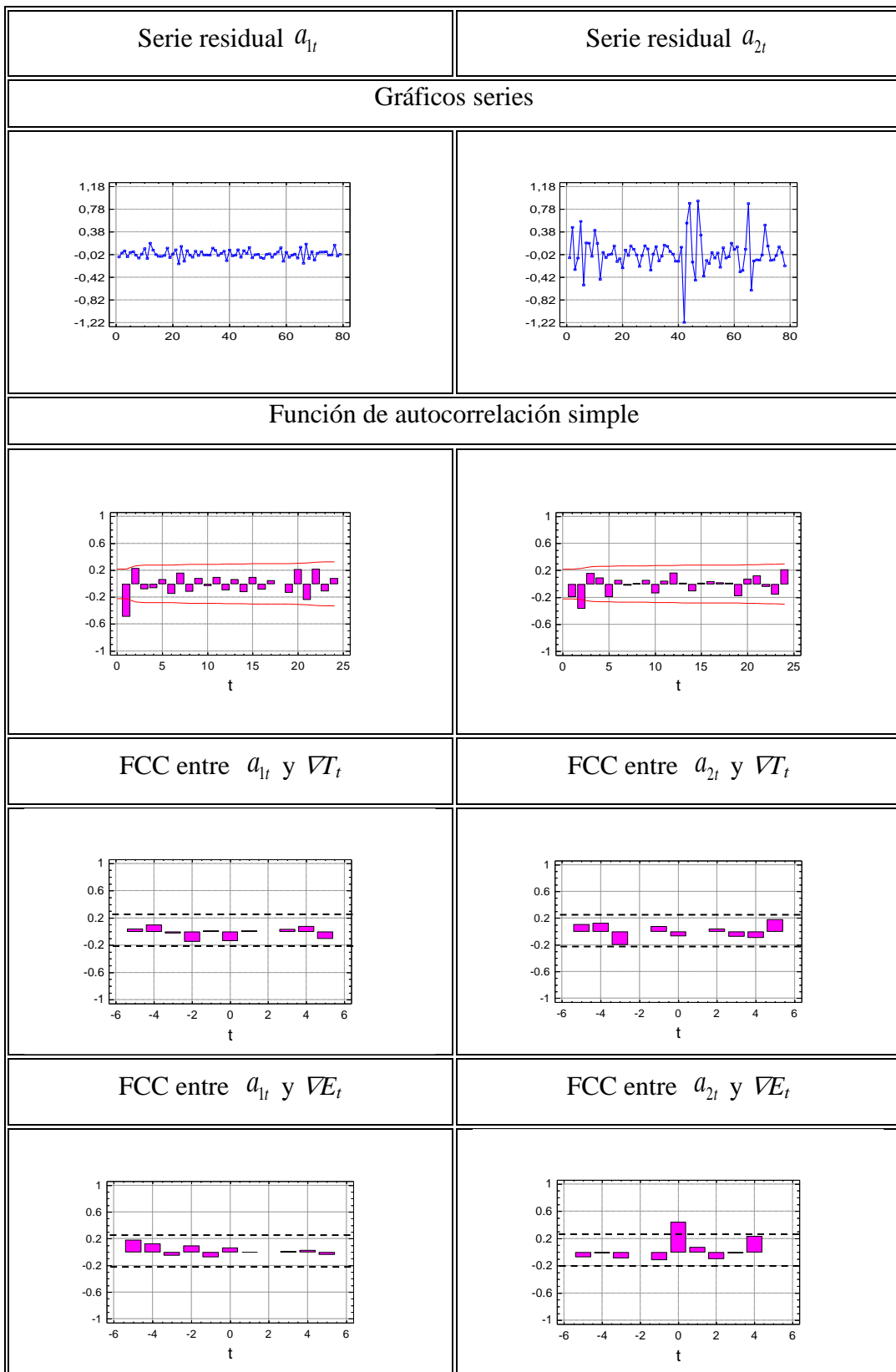


Tabla 4.15 Análisis de residuos del modelo *función de transferencia múltiple* estimado de la Campaña 2.

Campaña 3

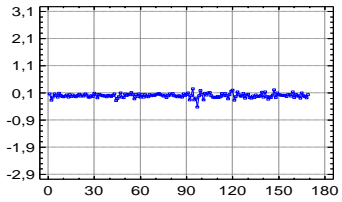
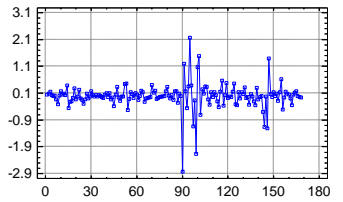
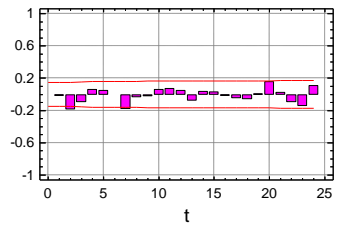
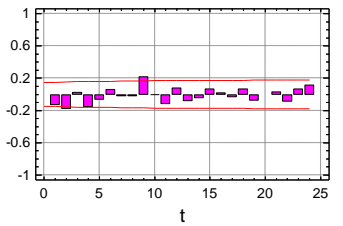
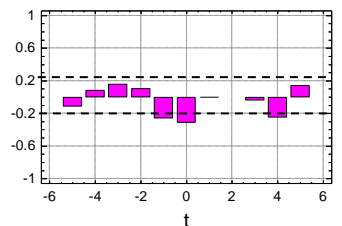
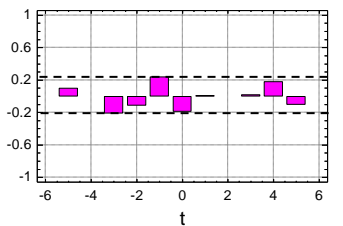
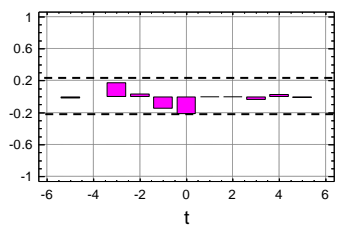
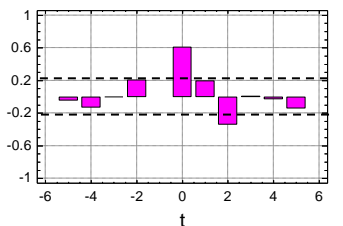
Serie residual a_{1t}	Serie residual a_{2t}
Gráficos series	
	
Función de autocorrelación simple	
	
FCC entre a_{1t} y ∇T_t	FCC entre a_{2t} y ∇T_t
	
FCC entre a_{1t} y ∇E_t	FCC entre a_{2t} y ∇E_t
	

Tabla 4.16 Análisis de residuos del modelo *función de transferencia múltiple* estimado de la Campaña 3.

Campaña 4

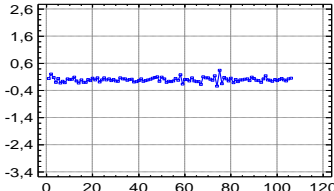
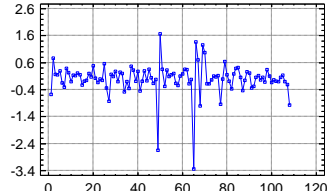
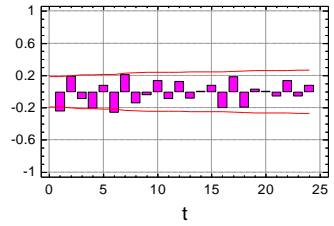
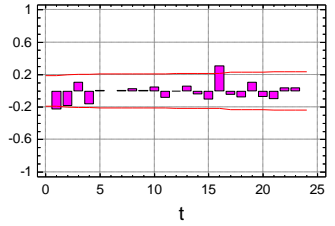
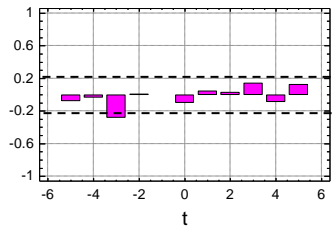
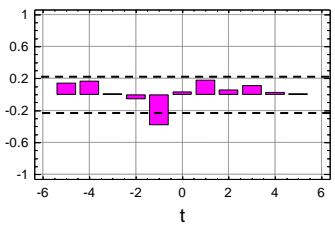
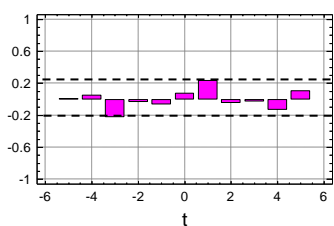
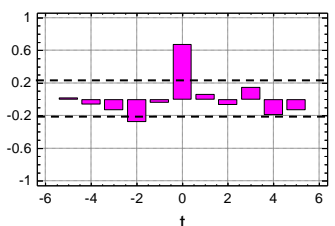
Serie residual a_{1t}	Serie residual a_{2t}
Gráficos series	
	
Función de autocorrelación simple	
	
FCC entre a_{1t} y ∇T_t	FCC entre a_{2t} y ∇T_t
	
FCC entre a_{1t} y ∇E_t	FCC entre a_{2t} y ∇E_t
	

Tabla 4.17 Análisis de residuos del modelo *función de transferencia múltiple* estimado de la Campaña 4.

Campaña 5

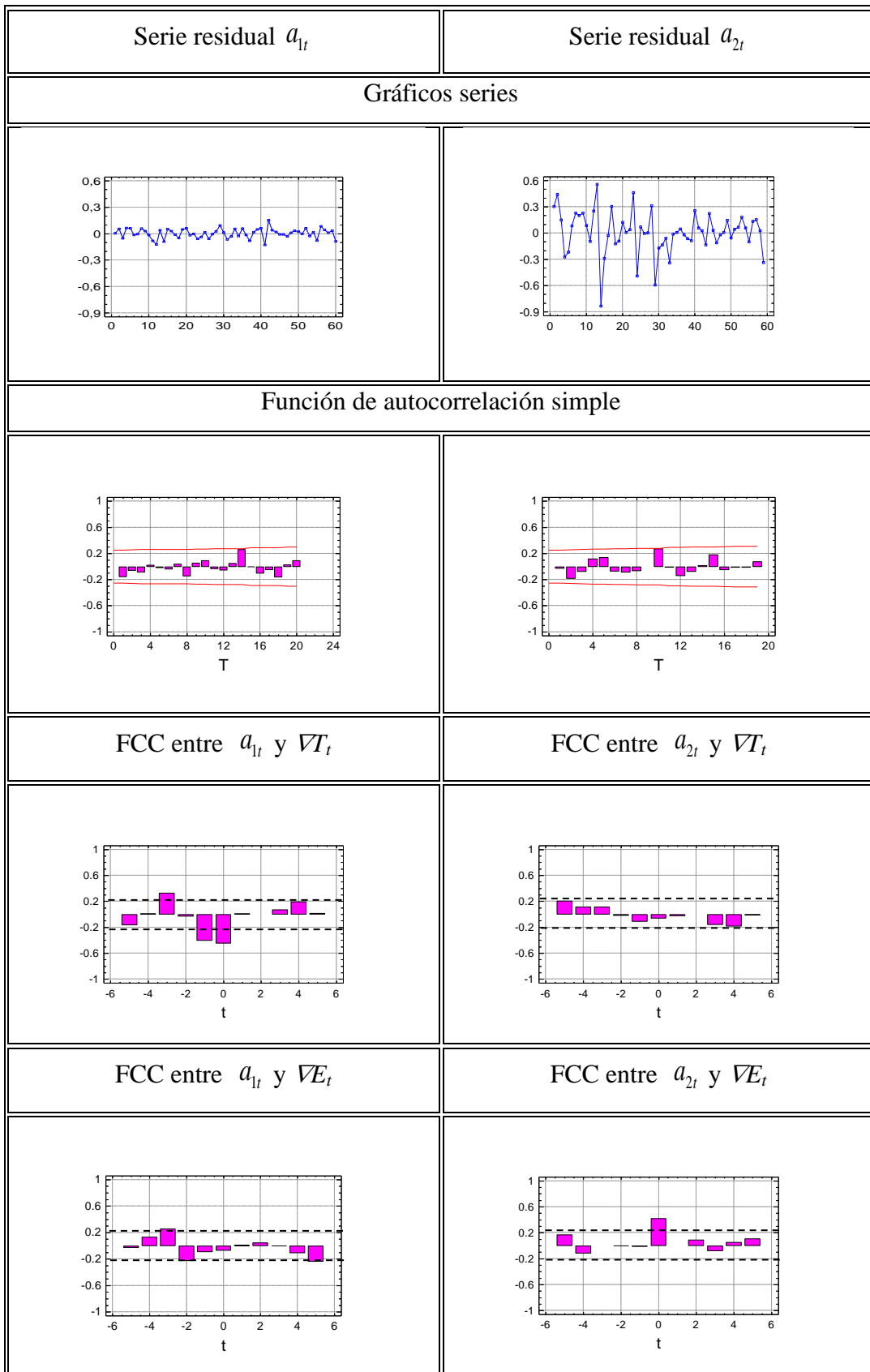


Tabla 4.18 Análisis de residuos del modelo *función de transferencia múltiple* estimado de la Campaña 5.

4.10 METODOLOGÍA PLS PARA IDENTIFICACIÓN DEL MODELO

4.10.1 Introducción

PLS (*partial least squares* o *projections to latent structures*) (Wold 1984) es un método multivariante de regresión, con propiedades interesantes desde el punto de vista estadístico. Representa una alternativa a la regresión MLR, ya que es un método que funciona bien en situaciones en las que ésta última presenta problemas, como cuando se dispone de más variables que de observaciones, o cuando existe colinealidad entre variables, el inconveniente que la colinealidad supone para la regresión MLR, para el método de regresión PLS supone más bien una información que es aprovechada (Wold *et al.* 1984). Los modelos obtenidos proporcionan mayor estabilidad en las predicciones, porque el riesgo de sobreparametrización se minimiza. Es muy eficiente en el caso de que existan datos faltantes y además proporciona herramientas gráficas muy útiles que facilitan el análisis de datos y la interpretación de los resultados. De este modo se detectan valores anómalos fácilmente, lo que mejora la calidad del modelo ajustado y reduce el riesgo de extrapolación cuando nuevas observaciones se proyectan sobre el modelo. Además todo ello se obtiene con bajos requerimientos computacionales.

PLS es un método de regresión proyectivo que modela la relación entre una matriz respuesta \mathbf{Y} y una matriz predictora \mathbf{X} . PLS proyecta los datos del espacio original de alta dimensionalidad (\mathbf{X}, \mathbf{Y}) , en un nuevo subespacio con un número menor de dimensiones A , en el que se definen un conjunto de variables llamadas *variables latentes* (t_1, t_2, \dots, t_A) y (u_1, u_2, \dots, u_A) . Estas nuevas variables recogen de forma resumida toda la información más relevante e importante contenida en los datos originales, respecto a las relaciones que ligan los factores experimentales y las variables respuesta.

Por lo tanto, PLS es un método que trata de buscar las direcciones que maximicen las covarianzas entre \mathbf{X} e \mathbf{Y} . Teniendo pues un enfoque diferente al análisis de correlaciones canónicas centrado en maximizar la correlación entre \mathbf{X} e \mathbf{Y} , y al análisis de componentes principales centrado en hallar las direcciones que explican más variación de la \mathbf{X} .

En efecto, la covarianza muestral entre dos variables cualesquiera x e y es igual a $Cov(x, y) = r(x, y)s_x s_y$, siendo $r(x, y)$ el coeficiente de correlación muestral y s_x, s_y las respectivas desviaciones típicas muestrales. Por lo tanto, si se buscan las direcciones que maximizan la covarianza, se están buscando las direcciones que maximizan el producto $r(x, y) s_x s_y$ y, por tanto, dichas direcciones serán aquellas que den lugar a los mayores valores del coeficiente de correlación r (presentando, por tanto, buenas propiedades predictivas de la y a partir de la x), y que al mismo tiempo den lugar a maximizar s_x y s_y lo que quiere decir que dichas direcciones estarán entre las de mayor variabilidad de la matriz \mathbf{X} y de la matriz \mathbf{Y} . Esto último supondrá que dichas direcciones explicarán gran parte de la variabilidad de ambos espacios.

La dimensionalidad se reduce en ambas matrices (\mathbf{X} y \mathbf{Y}), de acuerdo con el objetivo de buscar las direcciones de los espacios \mathbf{X} e \mathbf{Y} que simultáneamente expliquen más variabilidad y sean más útiles en la predicción de las variables respuesta (\mathbf{Y}). Lo que se consigue maximizando la covarianza entre cada par de variables latentes $cov(t_a; u_a)$.

Ambas matrices \mathbf{X} y \mathbf{Y} de datos originales se descomponen en otras más pequeñas según el siguiente procedimiento:

$$\mathbf{X} = \sum_{a=1}^A \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a^T + \mathbf{E} = \mathbf{TP}^T + \mathbf{E} \quad (4.83)$$

$$\mathbf{Y} = \sum_{a=1}^A \mathbf{u}_a \mathbf{c}_a^T + \mathbf{F} = \mathbf{UC}^T + \mathbf{F} \quad (4.84)$$

donde \mathbf{T} y \mathbf{U} son matrices de *scores* (coordenadas de las observaciones originales en la nueva base), \mathbf{P} y \mathbf{C} son matrices de *loadings* (pesos), y \mathbf{E} y \mathbf{F} son matrices de residuos para \mathbf{X} y \mathbf{Y} , respectivamente, para un modelo con A variables latentes determinadas por validación cruzada. Los vectores \mathbf{t}_a contienen los *scores* que son las coordenadas de las observaciones \mathbf{x} en el nuevo subespacio A , en cada una de las variables latentes PLS. Son pues combinaciones lineales de la matriz \mathbf{X} (en la primera variable latente PLS) o de la matriz residual \mathbf{X}_{a-1} (en la variable latente a , $\forall a > 1$):

$$\mathbf{t}_a = \mathbf{X}_{a-1} \mathbf{w}_a \quad (4.85)$$

siendo \mathbf{w}_a el vector de pesos para la variable latente a . Estos pesos son proporcionales a los coeficientes de correlación de cada una de las variables \mathbf{x} con las variables \mathbf{y} . Conviene aclarar en este punto que estos pesos difieren de los que conforman las matrices \mathbf{P} y \mathbf{C} . En la sección siguiente, en la que se esquematiza el algoritmo de cálculo se clarifica el significado de estos vectores de pesos.

Las componentes PLS se calculan secuencialmente. Para este trabajo se ha usado el algoritmo NIPALS desarrollado por Wold *et al.* (1984). Una descripción detallada y completa del algoritmo puede encontrarse en Höskuldsson (1988) y su comparación con otros métodos de regresión puede encontrarse en Geladi y Kowalski (1986). Una descripción corta y sencilla del PLS en la versión de Höskuldsson puede consultarse en Kourti y McGregor (1996). Con la finalidad de aclarar los conceptos anteriormente expuestos, se describe a continuación de forma concisa el funcionamiento del algoritmo.

4.10.2 Algoritmo NIPALS

Las componentes del modelo PLS se van obteniendo de modo secuencial haciendo uso del algoritmo NIPALS (Geladi y Kowalski 1986):

- **Obtención de la primera componente PLS:**

La primera variable latente t_1 será aquella combinación de las variables de entrada originales que hace máxima la covarianza entre \mathbf{X} e \mathbf{Y} , resultando $\mathbf{t}_1 = \mathbf{w}_1^T \mathbf{x}$. Siendo \mathbf{w}_1 el primer vector propio de la matriz de varianzas-covarianzas muestral: $\mathbf{X}^T \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T \mathbf{X}$.

Una vez obtenido los *scores* $\mathbf{t}_1 = \mathbf{X} \mathbf{w}_1$

- Se hace una regresión de las columnas de \mathbf{X} sobre \mathbf{t}_1

- Se obtiene el vector de *loadings* de la regresión $\mathbf{p}_1 = \frac{\mathbf{X}^T \mathbf{t}_1}{\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1}$ (4.86)

- Se hace una regresión de las columnas de \mathbf{Y} sobre \mathbf{t}_1

- Se obtiene el vector de *loadings* de la regresión $\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{t}_1^T \mathbf{Y}}{\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1}$ (4.87)

- Se elimina de las matrices originales \mathbf{X} e \mathbf{Y} , la parte explicada por esa primera componente PLS obteniéndose las matrices de residuos \mathbf{X}_2 , \mathbf{Y}_2

$$\mathbf{X}_2 = \mathbf{X} - \mathbf{t}_1 \mathbf{p}_1^T \quad (4.88)$$

$$\mathbf{Y}_2 = \mathbf{Y} - \mathbf{t}_1 \mathbf{q}_1^T \quad (4.89)$$

- **Obtención de la segunda componente PLS:**

La segunda variable latente se obtiene a través de $\mathbf{t}_2 = \mathbf{w}_2^T \mathbf{X}$. Siendo \mathbf{w}_2 el primer vector propio de $\mathbf{X}_2^T \mathbf{Y}_2 \mathbf{Y}_2^T \mathbf{X}_2$.

El algoritmo NIPALS continuaría extrayendo componentes hasta que se considere oportuno. En general el criterio que determina el n° adecuado de componentes se determina por validación cruzada.

Por último señalar que estos modelos siempre pueden ser expresados en la forma clásica de los modelos de regresión lineal:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{E} \quad (4.90)$$

A lo largo de esta sección se emplearán frecuentemente los modelos expresados de esta forma, dado que facilitarán la comparación de los mismos con los modelos obtenidos con la metodología Box-Jenkins. Aunque cabe señalar que el modelo expresado bajo la forma de *loadings* y *scores* en las diferentes componentes, así como la utilización de todos los recursos gráficos asociados a estas técnicas (gráficos de *loadings*, gráficos de *scores* y gráficos de contribución) facilitan la visualización de la estructura de covarianzas existentes entre las diferentes variables del estudio, tanto de variables de salida como de las variables de entrada. Dicha estructura bajo el modelo en la forma clásica de regresión queda en cierto modo oculta.

4.10.3 Series Temporales PLS

La metodología de series temporales TS-PLS consiste en la utilización de la regresión de mínimos cuadrados parciales para el estudio de un conjunto de datos que han sido sometidos previamente a un pre-tratamiento dirigido a que el modelo pueda recoger la dinámica existente en la relación de las variables de entrada \mathbf{X} y las variables de salida \mathbf{Y} . La aplicación de esta metodología se ha basado en las propuestas de Dayal *et al.* (1994) y Eriksson *et al.* (1999). Adicionalmente, en el proceso de búsqueda de la función de transferencia que relaciona las series de entradas con las series de salida se podrá sacar ventaja de todos los recursos gráficos propios de las técnicas multivariantes de tipo proyectivo.

Nuestro objetivo será la estimación de una función de transferencia no parsimoniosa adoptando en nuestro caso un modelo *fir*, donde la variable de salida 'y' se expresa como una combinación lineal de variables de entrada 'x' y donde, adicionalmente, se consideran como variables de entrada toda una serie de nuevas variables construidas decalando las variables de entrada originales.

$$y_{lt} = \sum_{m=1}^2 (\beta_{m0}x_{mt} + \beta_{m1}x_{mt-1} + \beta_{m2}x_{mt-2} + \dots) + \varepsilon_{lt} \quad (4.91)$$

Observaciones:

- Tal como se ha explicado en la sección 4.7, no se ha encontrado correlación entre las dos variables de salida $y = (y_1, y_2)$ y, por lo tanto, procederemos a obtener un modelo de función de transferencia separado para cada una de ellas.
- El número de decalajes a considerar en el modelo inicial se determinará en la fase previa de estudio de la dinámica presente en los datos.

Las fases a seguir para la formulación del modelo *fir* son las siguientes:

- a) Estudio inicial de los datos
- b) Pre-tratamiento de los datos
- c) Estimación del modelo PLS

- Estimación del modelo inicial
- Selección de decalajes más influyentes
- Depuración de variables.
- Estimación del modelo final

d) Validación del modelo: Análisis de residuos.

Estudio inicial de los datos

En esta fase se pretenden los siguientes objetivos:

1. Visualización del proceso estudiado y estudio descriptivo del mismo.
2. Comprobar si la serie de salida es estacionaria con objeto de determinar la necesidad de diferenciarla, en especial si el objetivo perseguido es comparar los resultados de la metodología TS-PLS con los obtenidos usando la metodología Box -Jenkins.
3. Obtención de las funciones de autocorrelación y correlación cruzada entre las series de entrada y las series de salida con objeto de conocer la memoria existente en el sistema y por tanto el número de decalajes apropiado para emplear en los modelos TS-PLS.
4. Se puede estudiar la existencia de algún controlador en el proceso, así como de algún comportamiento cíclico.

1. Visualización del proceso estudiado

Para la visualización de la evolución del proceso procedemos a obtener un modelo PLS de la variable de calidad y de productividad por separado con todas las variables de proceso. Se incorporan también en el modelo las variables obtenidas decalando 5 periodos las variables de proceso originales que sirven para incorporar la dinámica al modelo:

$$\nabla MI_t = f(\nabla T_{t-1}, \nabla T_{t-2}, \nabla T_{t-3}, \nabla T_{t-4}, \nabla T_{t-5}, \nabla T_{t-6}, \nabla E_{t-1}, \nabla E_{t-2}, \nabla E_{t-3}, \nabla E_{t-4}, \nabla E_{t-5}, \nabla E_{t-6})$$

(4.92)

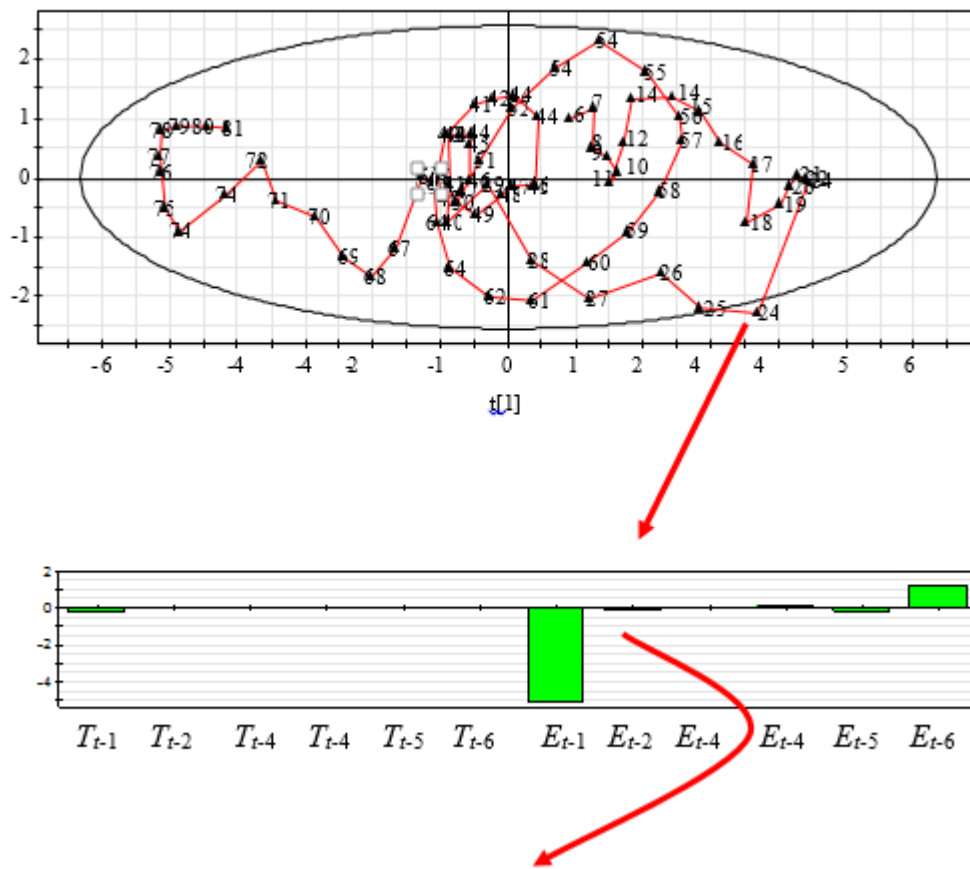
$$\nabla APRE_t = f(\nabla T_{t-1}, \nabla T_{t-2}, \nabla T_{t-3}, \nabla T_{t-4}, \nabla T_{t-5}, \nabla T_{t-6}, \nabla E_{t-1}, \nabla E_{t-2}, \nabla E_{t-3}, \nabla E_{t-4}, \nabla E_{t-5}, \nabla E_{t-6})$$

(4.93)

Los gráficos de *scores* resultan particularmente interesantes para detectar cualquier anomalía en la evolución del proceso. En la figura 4.19 mostramos como ejemplo un gráfico de *scores* obtenido para la variable de calidad $\nabla APRE_t$ en la primera y tercera componente y la campaña 2. En el mismo podemos observar a través de la numeración de las observaciones que el proceso va evolucionando paulatinamente dentro de la elipse de control definida por la distribución conjunta de los *scores* al 95%. En particular, si observamos algún cambio que pudiese resultar notable, por ejemplo el cambio de la observación 23 a la 24, éste sería fácilmente diagnosticado a través de un gráfico de contribución donde se ve que entre la observación 23 y 24 hay un descenso del caudal de etileno inyectado al reactor de polimerización.

Un PCA nos serviría del mismo modo que el PLS para seguir la evolución del proceso y visualizar el conjunto de datos disponibles para el estudio. A modo de ejemplo en la figura 4.20 se muestra un gráfico de *scores* del modelo PCA para la salida $\nabla APRE_t$ y la campaña 2 y para las mismas variables de entrada que en el caso anterior, donde se puede observar la evolución del proceso a lo largo del tiempo. Además, no se observan agrupaciones o *clusters* de observaciones que pudiesen invalidar el empleo de un modelo PLS único para la totalidad de los datos de la campaña.

Este tipo de estudio podría ayudar a determinar la necesidad de realizar análisis de intervención en algún momento de la campaña, siendo complementario a la metodología Box-Jenkins. De aquí que, un primer resultado del presente estudio sería el interés que tienen todos los recursos gráficos de las técnicas de proyección en estructuras latentes para la visualización de los datos previa al empleo de la metodología Box-Jenkins.



Observación	Caudal etileno
23	18,1045
24	14,9735
25	15,6845

Figura 4.19 Gráfico de *scores* (PLS) y de contribución de $\nabla APRE_t$ en la primera y la tercera componente de la campaña 2 (arriba); gráfico de contribuciones para la diferencia entre las observaciones 23 y 24 (centro); datos tratados (bajo).

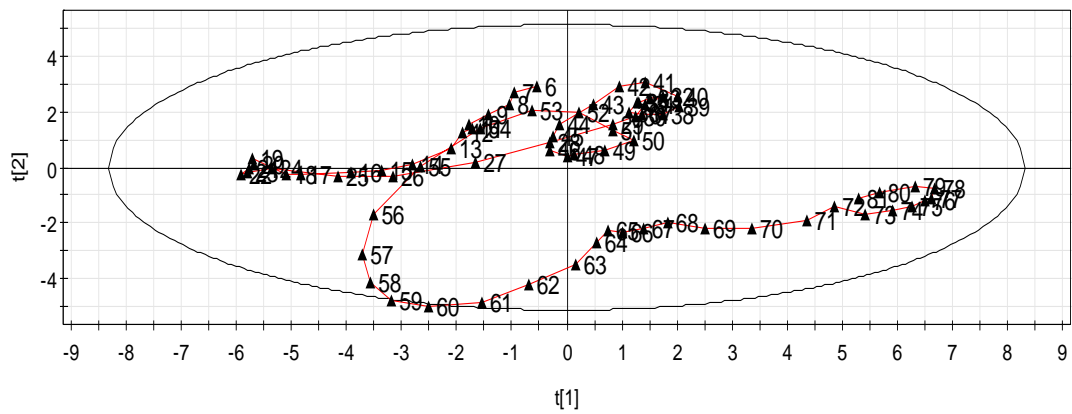


Figura 4.20 Gráfico de *scores* (PCA) para $\nabla APRE_t$ en la primera y la segunda componente y las mismas variables *input* usadas en el modelo PLS para la campaña 2

2. Comprobar la estacionariedad de las series:

Si las series de datos no fuesen estacionarias no sería posible estimar las funciones de correlación cruzadas necesarias en la metodología Box-Jenkins para poder definir la estructura del modelo. Las funciones de correlación cruzadas han resultado útiles en la metodología PLS para determinar el número de decalajes a incluir en el modelo tentativo. Por lo que, para poder llevar a cabo la estimación, será necesario diferenciar las series.

3. Obtención de las funciones de autocorrelación y correlación cruzada entre las series de entrada y las series de salida

Del estudio previo de los gráficos de autocorrelación y de correlación cruzada se ha deducido el empleo de 5 decalajes para las diferentes variables de entrada. Al elegir dicho número pretendemos asegurarnos que toda la posible memoria del proceso haya sido recogida en el modelo inferencial que tratamos de estimar.

4. Existencia de algún controlador en el proceso:

Ya hemos visto en el apartado 4.7, en el análisis de la función de correlación cruzada estimada entre ∇MI_t y ∇T_t , cómo se ha detectado la presencia de control de retroalimentación al aparecer el coeficiente de correlación $r(0)$ significativo.

4.10.4 Pretratamiento de los datos

La matriz \mathbf{X} de variables de entrada se expande creando 5 variables nuevas a partir de cada una de las entradas originales. Estas variables nuevas serán las mismas que las variables originales pero decaladas un cierto número de veces. En particular las cinco variables corresponderán a los 5 primeros decalajes $x_{t-1}, x_{t-2}, x_{t-3}, x_{t-4}, x_{t-5}$ de cada uno de las dos entradas. Con lo cual al final del proceso de expansión tendremos 12 variables de entrada. Esta operación de decalado se efectuará de acuerdo con la figura 4.21 que, como se observa, provocará la pérdida de 5 observaciones.

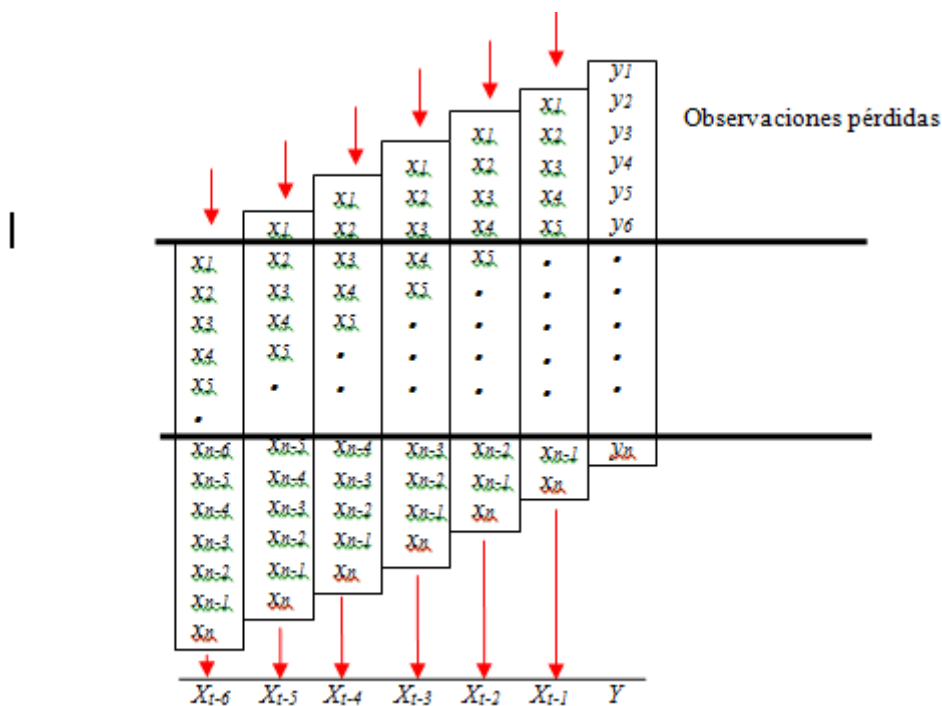


Figura 4.21 Decalado de las variables entrada x_{it} originales

Adicionalmente, las variables serán diferenciadas con objeto de convertirlas en estacionarias y, de este modo, hacer el modelo resultante comparable con el modelo Box-Jenkins estimado. Todo el pretratamiento habitual en la estimación de modelos PLS como el centrado y autoescalado a varianza unidad también será llevado a cabo con la matriz \mathbf{X} expandida. El centrado perseguirá facilitar la interpretación del modelo al llevar el origen de coordenadas al centro de gravedad de la nube de individuos. Dado que el PLS es un método de regresión dependiente de la varianza, deberemos

autoescalar con objeto de que todas las variables en principio tengan la misma probabilidad de expresarse en el modelo.

4.10.5 Estimación del modelo

Puesto que, como se ha dicho anteriormente, las salidas no están correlacionadas, procedemos a estimar un modelo PLS para cada salida por separado (4.92 y 4.93).

Cualquier modelo PLS puede ser siempre expresado por medio de los coeficientes de un modelo de regresión clásico. Los coeficientes del modelo pueden ser expresados de diferentes maneras y nos interesará utilizar unos o otros según sea el caso.

Para la selección de los retardos utilizaremos los coeficientes β_{CS} tal y como se presenta en la ecuación (4.91)

$$\frac{\nabla APRE_t - m_{\nabla APRE_t}}{s_{\nabla APRE_t}} = \beta_1 \frac{\nabla E_{t-1} - m_{\nabla E_{t-1}}}{s_{\nabla E_{t-1}}} + \beta_2 \frac{\nabla T_{t-1} - m_{\nabla T_{t-1}}}{s_{\nabla T_{t-1}}} + \dots \quad (4.94)$$

Puesto que cada variable está escalada por su desviación típica los parámetros β_{CS} medirán directamente la importancia de las variables del modelo.

Buscando modelos parsimoniosos procedemos a la selección de los decalajes más importantes para el modelo. Para dicha selección utilizaremos el "Gráfico de coeficientes de regresión PLS", donde se representa el valor de los β_{CS} correspondientes a todas las variables originales y a sus decalajes. El criterio de selección consistirá en seleccionar los β_{CS} de mayor valor y que sean consistentes en signo en las diferentes campañas estudiadas.

Este gráfico, de hecho, es la representación de la función de respuesta a impulso y podría plantearse como una ayuda para la identificación de la función de transferencia cuando se usa combinado con la metodología Box-Jenkins.

Hay que destacar que este gráfico sería similar a la función de correlación cruzada en el caso de que las variables de entrada fuesen independientes.

A modo de ejemplo, en la figura 4.22 se muestra el gráfico de coeficientes PLS estimados para el modelo ∇MI_t para la campaña 5. Esta figura es bastante similar a las funciones de correlación cruzada entre ∇MI_t y ∇T_t por un lado, y ∇MI_t y ∇E_t por otro,

que se han representado juntas en el gráfico 4.23 (que son muy similares a las figuras 4.15 y 4.16 de la metodología Box-Jenkins) para decalajes positivos. Las formas adoptadas por las barras en el gráfico de coeficientes PLS podrían usarse para la identificación del orden de la función de transferencia.

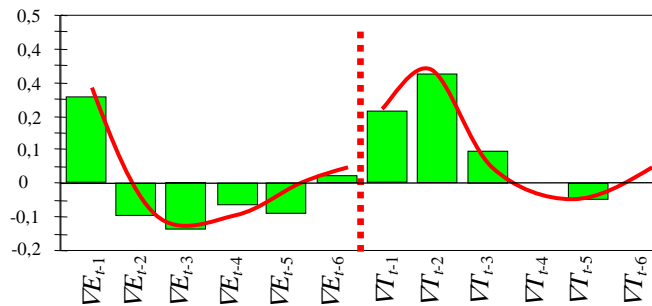


Figura 4.22 Gráfico de coeficientes β_{CS} PLS estimados para el modelo de ∇MI_t . Campaña 5.

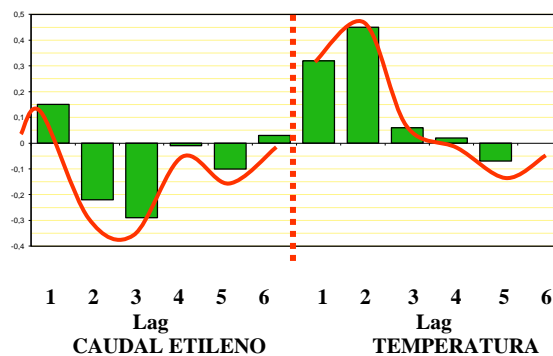


Figura 4.23 Funciones de correlación cruzada entre ∇MI_t y ∇E_t y, entre ∇MI_t y ∇T_t , respectivamente. Campaña 5.

En las figuras 4.24 y 4.25 se muestran los coeficientes β_{CS} con sus intervalos de confianza al 95% y para los dos modelos (∇MI y $\nabla APRE$). Los coeficientes de los decalajes más influyentes se seleccionan basándose en su significación estadística y en su consistencia en las diferentes campañas en estudio. En el modelo para ∇MI_t los decalajes seleccionados son ∇E_{t-1} , ∇T_{t-1} y ∇T_{t-2} porque sus coeficientes β_{CS} son positivos en las 4 campañas, y ∇E_{t-2} porque su coeficiente es negativo en las campañas 2 y 5, aunque en las campañas 0 y 4 el signo es diferente pero con valores muy

próximos a 0. Los decalajes seleccionados para el modelo $\nabla APRE_t$ han sido ∇E_{t-1} y ∇T_{t-1} porque sus coeficientes β_{CS} son positivos en las 4 campañas en estudio y ∇T_{t-2} porque su coeficiente β_{CS} es positivo en las campañas 0, 4 y 5, aunque en la campaña 2 el signo es diferente pero con un valor muy próximo a 0.

Después de la selección de los retardos más influyentes para los modelos, ambos modelos pueden ser depurados. Esta fase sirve para refinar el modelo propuesto del proceso y por lo tanto obtener una formulación del mismo más parsimoniosa. Con este propósito, la gran cantidad de variables de entrada altamente correlacionados considerados al principio se reduce sustancialmente en este paso. Con el fin de continuar con esta fase utilizamos la información contenida en los diferentes diagramas de *loadings* del modelo que permitan identificar los diferentes grupos de variables altamente correlacionadas que proporcionan la misma información al modelo. En nuestro modelo, no hubo necesidad de proceder a esta operación ya que estos modelos han sido creados a partir de un pequeño número de variables de entrada.

Después de la depuración del modelo el siguiente paso es la estimación final. Con el fin de comparar los modelos PLS estimados con los correspondientes modelos Box-Jenkins, los modelos PLS se expresarán en forma de un modelo de regresión clásico (4.91). La forma elegida para los coeficientes de regresión es la de los coeficientes β ordinarios estimados de acuerdo con las expresiones (4.92) y (4.93). El estudio de la significación estadística de los coeficientes ordinarios se basa en un procedimiento *jackknife* (*Jackknife* es una técnica de remuestreo en la que dada una población de valores obtenidas de los datos observados, se muestrea aleatoriamente dicha población un número determinado de veces, eliminando uno a varios valores en cada muestreo, formando grupos con un número menor de valores que el grupo original, hasta obtener la distribución del estadístico muestral de forma empírica).

Modelo ∇MI_t :

$$\nabla MI_t = \beta_1 \nabla T_{t-1} + \beta_2 \nabla T_{t-2} + \beta_3 \nabla E_{t-1} + \beta_4 \nabla E_{t-2} + a_{1t} \quad (4.95)$$

Modelo $\nabla APRE_t$:

$$\nabla APRE_t = \beta_1 \nabla T_{t-1} + \beta_2 \nabla T_{t-2} + \beta_3 \nabla E_{t-1} + a_{2t} \quad (4.96)$$

Las tablas 4.19 y 4.20 proporcionan los resultados del procedimiento de estimación para las cuatro campañas estudiadas para los modelos ∇MI_t y $\nabla APRE_t$, respectivamente. Se ha omitido la campaña 3 en esta tabla por ser una campaña que presentaba muchas anomalías, resultando difícil su tratamiento y estimación por la metodología TS-PLS. R^2_x y R^2_y indican la fracción de la suma de los cuadrados de todas las entradas y salidas explicados por el modelo, respectivamente. Q^2 es la fracción de la variación total de la variable de salida que se puede predecir por el modelo.

CAMP	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\beta}_4$	$\hat{\sigma}_1^2$	R^2_x	R^2_y	Q^2
0	0.18	0.19	0.032 ^{NS}	0.013 ^{NS}	0.004	29.8	13.4	1.87
2	0.13	0.12	0.031 ^{NS}	-0.037 ^{NS}	0.006	29.5	36.7	17.2
4	0.02 ^{NS}	0.09	0.058 ^{NS}	-0.002 ^{NS}	0.007	64.1	20.8	12.8
5	0.18	0.27	0.086	-0.033 ^{NS}	0.003	35.9	38.7	31.9

Tabla 4.19 Parámetros estimados del modelo ∇MI_t (ecuación (4.92)) para las 4 campañas estudiadas. R^2_x : bondad de ajuste para las entradas. R^2_y : bondad de ajuste para la salida. Q^2 : bondad de predicción de la salida. NS: estadísticamente no significativo, p -value>0.05.

CAMP	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\sigma}_2^2$	R^2_x	R^2_y	Q^2
0	0.83	0.49	0.60	0.022	40.9	63.9	57.5
2	0.19 ^{NS}	0.12 ^{NS}	0.85	0.015	66.5	96.5	96
4	0.23 ^{NS}	0.38	0.61	0.095	37	40.2	28
5	0.61	0.46 ^{NS}	0.41	0.064	44.7	22.4	15.2

Tabla 4.20 Parámetros estimados del modelo $\nabla APRE_t$ (ecuación (4.94)) para las 4 campañas estudiadas. R^2_x : bondad de ajuste para las entradas. R^2_y : bondad de ajuste para la salida. Q^2 : bondad de predicción de la salida. NS: estadísticamente no significativo, p -value>0.05.

4.10.6 Validación del modelo. Análisis de residuos.

El análisis de residuos no encontró ninguna estructura que indicase inadecuación de los modelos estimados salvo en el caso del modelo estimado para ∇MI_t en el que se encontró cierta estructura en los residuos en la campaña 2, tal como puede verse en la figura 4.26, en la que se representan las funciones de autocorrelación y autocorrelación parcial estimadas, por lo que no se puede asumir que sea ruido blanco. Estudiada la estructura de dichos residuos se observa una estructura del mismo tipo que la encontrada por la metodología Box-Jenkins, lo cual resulta interesante, puesto que el análisis de residuos del modelo TS-PLS puede ser complementario al análisis de residuos en la metodología Box-Jenkins, al tratar de identificar el modelo de ruido.

Modelo ∇MI_t

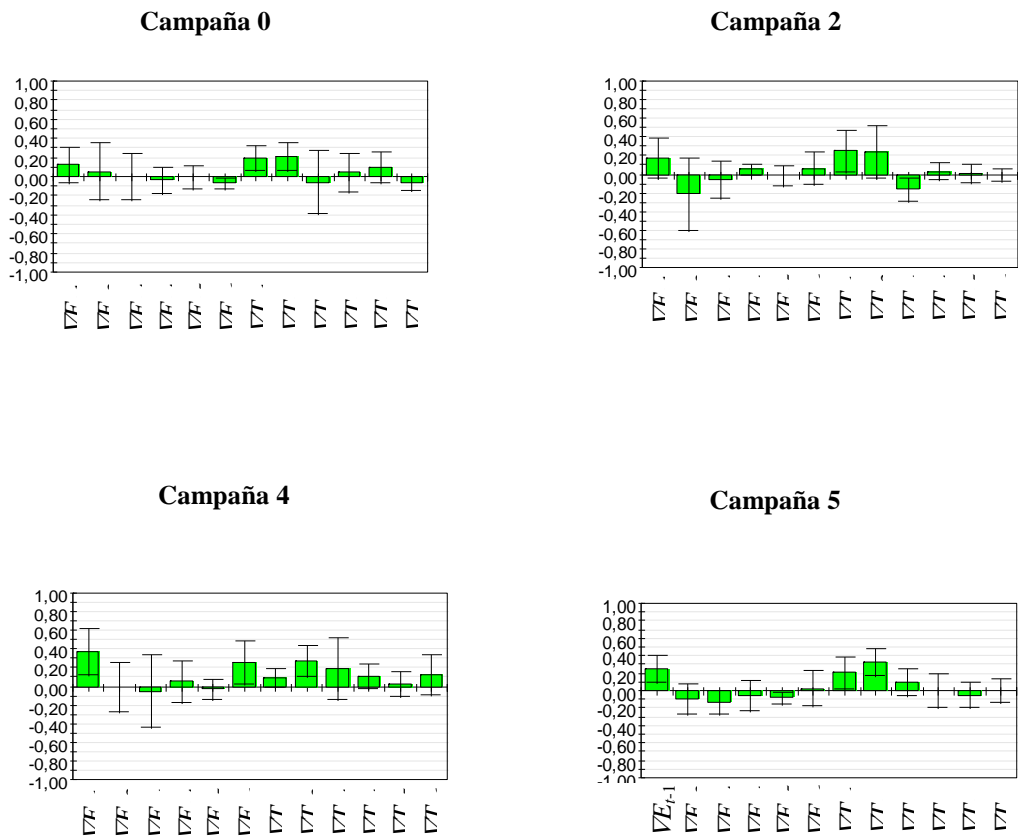


Figura 4.24 Gráfico de coeficientes β_{CS} del modelo para ∇MI_t y para las campañas 0, 2, 4 y 5.

Modelo $\nabla APRE_t$

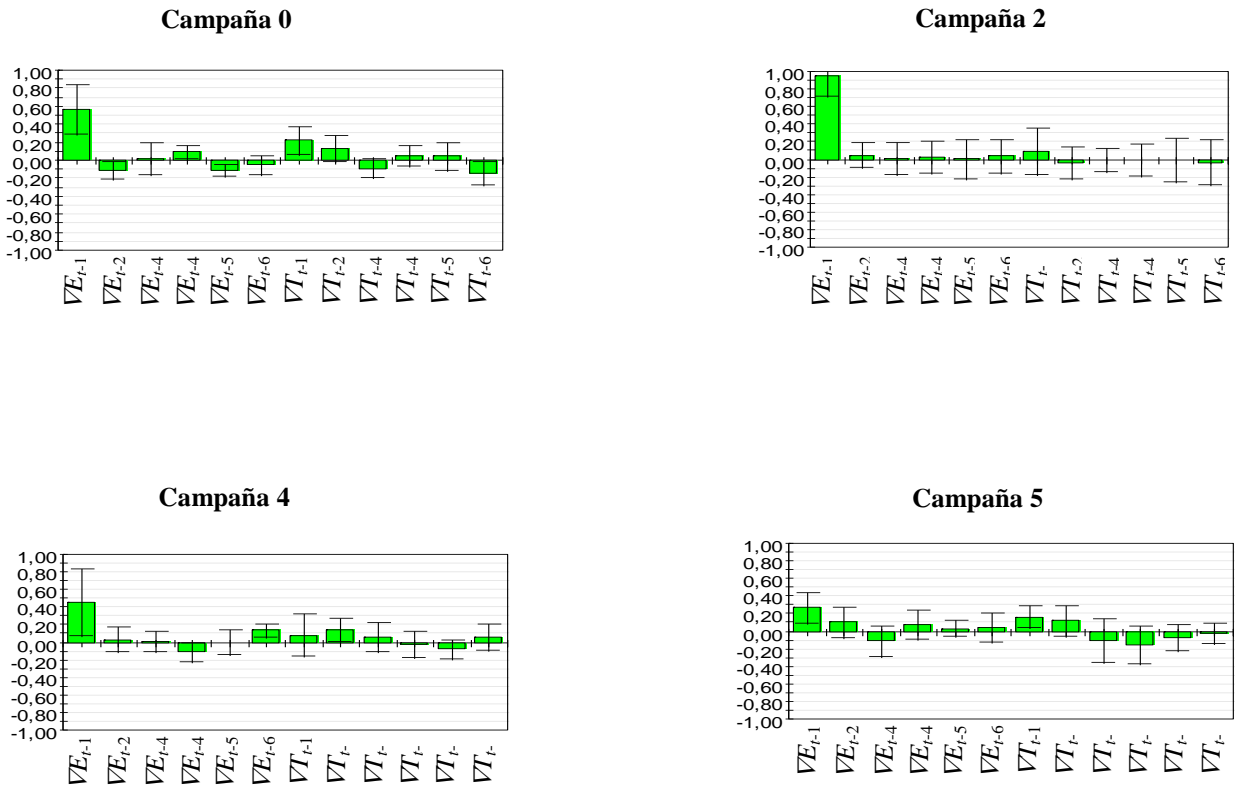


Figura 4.25 Gráfico de coeficientes β_{CS} del modelo para $\nabla APRE_t$ y para las campañas 0, 2, 4 y 5.

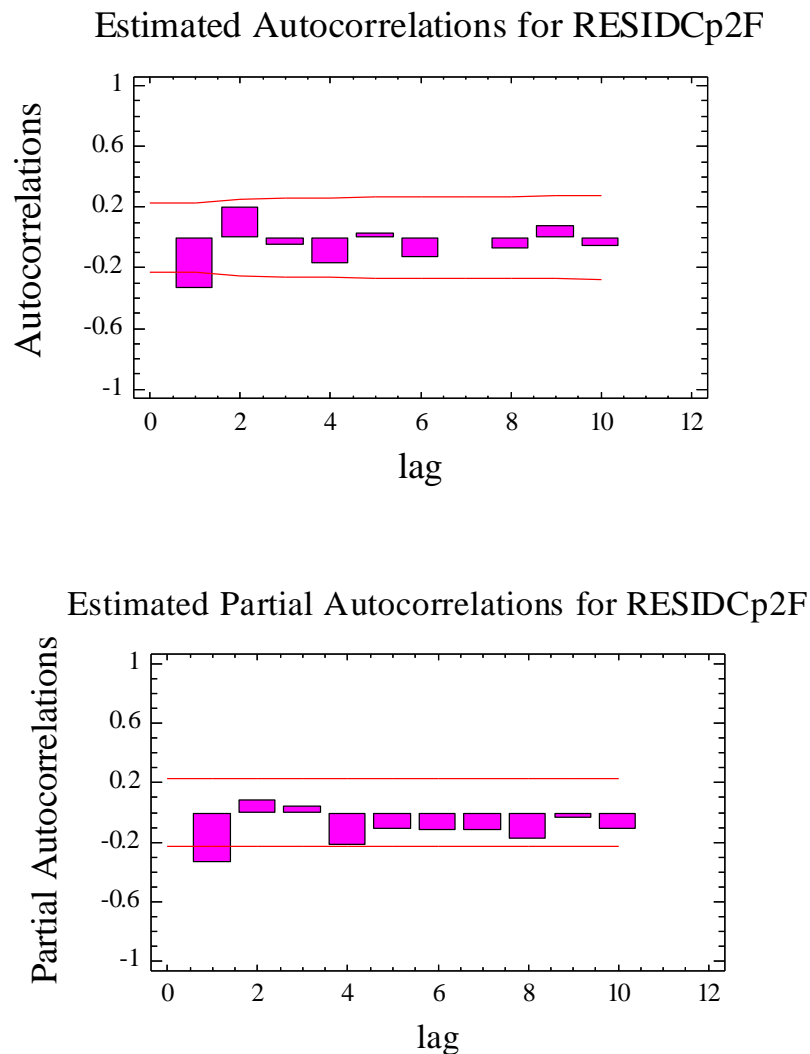


Figura 4.26 Análisis de residuos del modelo estimado de la Campaña 2.

4.11 COMPARACIÓN DE LOS MODELOS ESTIMADOS

Los modelos estimados para ∇MI_t mediante las metodologías Box-Jenkins y TS-PLS se han descrito anteriormente en las tablas 4.9 y 4.19, respectivamente. Ambos modelos tienen la misma estructura y los parámetros estimados presentan similitudes y algunas discrepancias. Los coeficientes estimados para la variable ∇T_{t-1} son consistentes (positivos) en todas las campañas para ambas metodologías, aunque este coeficiente no es estadísticamente significativo en la campaña 4 en ambas metodologías, y en la campaña 5 en el modelo de Box-Jenkins. Los coeficientes asociados a la variable ∇T_{t-2}

son similares, a excepción de en la campaña 4, donde este coeficiente es algo más pequeño. Los coeficientes estimados para la variable ∇E_{t-1} son consistentes (positivos) en todos los modelos estimados, aunque no es estadísticamente significativo en las campañas 0 y 2 en ambas metodologías, y en la campaña 4 en el modelo TS-PLS. Por último, los coeficientes estimados para la variable ∇E_{t-2} son muy similares, casi siempre negativos, excepto para la campaña de 0 en el modelo TS-PLS, donde no es estadísticamente significativo. La varianza residual estimada es similar en ambas metodologías. Sobre la base de esta comparación se puede afirmar que las dos metodologías llegan a resultados bastante similares siguiendo diferentes enfoques.

Para ambas metodologías la estructura del modelo para $\nabla APRE_t$ también es similar, excepto para el modelo de ruido. En la metodología Box-Jenkins, este es un modelo autorregresivo AR (1), mientras que en la metodología TS-PLS, es ruido blanco. Los coeficientes estimados para el primer retardo ∇T_{t-1} y ∇E_{t-1} son bastante similares, mientras que para ∇T_{t-2} tienen signos opuestos en general. Esta discrepancia se puede explicar por la diferente estructura del modelo de ruido estimado en ambas metodologías. La varianza residual estimada es menor en el modelo de Box-Jenkins, a excepción de la campaña 2 donde es mayor que en el modelo TS-PLS.

La metodología Box-Jenkins produce modelos más parsimoniosos porque proporciona la posibilidad de expresar el modelo de función de transferencia como un cociente de polinomios de matrices de coeficientes y permite expresar explícitamente el ruido como un modelo ARIMA vectorial, mientras que la metodología TS-PLS se identifica directamente una función de respuesta a impulsos finita no parsimoniosa frecuentemente sobreparametrizada. Aunque por medio de TS-PLS, el proceso de estimación es más sencillo, si el modelo tiene muchos coeficientes, se producirá mucha incertidumbre y predicciones menos precisas. A pesar del mayor esfuerzo de modelado necesario para identificar la función de transferencia parsimoniosa de Box y Jenkins, esta última se recomienda cuando la estructura del proceso es razonablemente simple y la inercia del proceso no es demasiado importante.

TS-PLS proporciona un conjunto de herramientas gráficas muy útiles para el estudio descriptivo del modelo, permitiendo seguir su evolución, y detectar cualquier anomalía del proceso de forma gráfica, mientras que la metodología Box-Jenkins usa métodos más complejos y sofisticados de detección, identificación, estimación y eliminación de valores anómalos.

El gráfico de coeficientes de regresión PLS facilita la identificación de la función de transferencia; su utilidad es la misma que la función de correlación cruzada (usada en la metodología Box-Jenkins) cuando las variables de entrada son independientes. La metodología Box-Jenkins es más sensible a la presencia colinealidad entre las variables de entrada. Las dos metodologías funcionan bien determinando las variables y los retardos a ser considerados en el modelo, ya que los resultados obtenidos son consistentes en ambos modelos.

4.12 RESUMEN

En este capítulo se ha estimado un modelo del proceso industrial de obtención de PEAD en continuo. Se ha enfatizado más en la capacidad del modelo para describir con fidelidad el proceso, que en encontrar un muy buen ajuste a los datos, que podría incorporar ruido al modelo y añadir incertidumbre a las predicciones que se efectúen a partir del mismo en el MPC.

Se ha presentado el problema de la existencia de autocorrelación en las variables de proceso y de calidad que se observan a intervalos de tiempo discretos y con inercias mayores que la frecuencia de muestreo. También se ha planteado el problema de la correlación entre las variables de salida, que hace pertinente la estimación conjunta para mejorar la precisión de las estimaciones. Se ha identificado, formulado, estimado y comparado el modelo del proceso mediante dos metodologías que se han comparado la *función de transferencia múltiple* en forma parsimoniosa, y la obtención de la *función de respuesta a impulsos* mediante series temporales multivariantes TS-PLS.

Se han presentado las ideas básicas que hay detrás de ambas metodologías, se han discutido sus ventajas y sus limitaciones. Estas dos metodologías se han comparado teniendo en cuenta distintos aspectos como son la simplicidad del proceso de modelado en las etapas de identificación, estimación y validación del modelo, así como la utilidad de las herramientas gráficas que proporcionan ambas metodologías, la bondad de ajuste obtenida, la simplicidad de la estructura matemática del modelo, etc.

Como conclusión general, la metodología Box-Jenkins es el mejor enfoque para identificar el modelo en procesos MIMO cuando el número tanto de variables de entrada como de salida es reducido. Sin embargo, incluso en este contexto TS-PLS se puede usar como herramienta complementaria para conocer mejor el proceso y detectar valores anómalos. En cambio, cuando se trata de procesos con gran número de variables

de entrada y de salida con problemas de colinealidad y funciones de transferencia complejas, la metodología de elección es TS-PLS, dada la complejidad (e incluso la inviabilidad) que supondría el uso de la metodología Box-Jenkins.

A partir de este modelo de *función transferencia múltiple* Box-Jenkins se ha obtenido la *función de respuesta a escalón* cuya formulación es necesaria para utilizarla en el algoritmo de control DMC para predecir la respuesta del proceso.

CAPÍTULO 5. SINTONIZADO DEL CONTROLADOR PREDICTIVO MULTIVARIANTE MEDIANTE DISEÑO DE EXPERIMENTOS

En este capítulo se diseñará y sintonizará el controlador DMC mediante un diseño de experimentos 2^{k-p} . Se compararán las metodologías ANOVA (regresión MLR) y la regresión PLS en el análisis de los datos experimentales.

5.1 INTRODUCCIÓN

La sintonización o puesta a punto del controlador DMC, consiste en averiguar los valores de los parámetros de diseño del mismo que optimicen el rendimiento del sistema de control automático. Frecuentemente en la industria, los valores de estos parámetros se eligen o bien observando pasivamente los procesos o de forma empírica, basando su selección en experiencias previas o en ensayos que a menudo son de prueba y error. De hecho, parte del tiempo dedicado a la implantación de un controlador se utiliza en el ajuste de sus parámetros por prueba y error, en particular del parámetro λ (Sanchis 2002). Uno de los enfoques que suele adoptarse tradicionalmente consiste en hacer ensayos de forma secuencial, modificando cada vez un único parámetro de control y estudiando cómo se ven afectados los índices de rendimiento del control en ciclo cerrado. Ello refleja la idea, que se tiene habitualmente, de que si se modifican muchos factores a la vez, no va a ser posible precisar cuáles de estos factores han sido los responsables de los cambios observados en los resultados. Sin embargo este enfoque, pese a parecer lógico a primera vista, es completamente desaconsejable, por resultar ineficaz e ineficiente. Esta forma de proceder aunque está muy extendida tiene en realidad bastantes desventajas, entre las que se pueden mencionar las siguientes: exige un gran número de ensayos, por lo tanto es muy costosa; las conclusiones obtenidas para cada factor (en nuestro caso cada parámetro de diseño del controlador) tiene un campo de validez muy restringido; no permite detectar la presencia de interacciones; y en definitiva no garantiza la obtención de las condiciones operativas óptimas.

La alternativa aconsejable a este enfoque es la utilización de los métodos de Diseño Estadístico de Experimentos para el estudio simultáneo del efecto de todos los factores de interés. Una de las aportaciones esenciales de los planteamientos modernos de Calidad Total, ha sido la de enfatizar la importancia esencial, para el logro de una calidad

competitiva, de las actividades que se desarrollan en las fases de diseño de productos y de procesos. Siendo uno de los objetivos básicos de estas actividades el de identificar y cuantificar los efectos que los parámetros de proceso tienen sobre las pautas de variabilidad de las características de calidad y productividad relevantes, con el fin de obtener las condiciones operativas óptimas. En el fondo una de las ideas básicas en estos modernos planteamientos de Calidad Total, es precisamente la de convertir los principios y técnicas del método científico en una herramienta de trabajo cotidiana en la industria, sobre el que basar el proceso de la mejora continua. Dicho enfoque es el que ha sido utilizado en la sintonía del controlador DMC en este trabajo.

El Diseño de Experimentos, es una metodología estadística cuyo objetivo es la obtención eficiente de datos altamente informativos, siendo la técnica básica en estos nuevos planteamientos de la búsqueda de la calidad competitiva. Nos ofrece la posibilidad de estudiar simultáneamente varios factores sin que sus efectos se confundan entre sí, como en un principio cabría esperar, gracias a que los experimentos se diseñan utilizando la importante propiedad de la ortogonalidad de los efectos de los factores. Diseñando adecuadamente el experimento es posible estudiar con un número reducido de pruebas los efectos aislados simples e incluso los efectos de las interacciones entre los mismos sobre una o varias variables respuesta (en nuestro caso variables que cuantifican el rendimiento del control automático del proceso).

Para la obtención de los valores óptimos de los parámetros de diseño del controlador DMC, se ha utilizado un diseño factorial fraccionado 2^{k-p} (Box y Hunter 1961).

Fases del diseño del experimento

Un **Experimento** es un conjunto de pruebas cuyo objetivo es obtener información respecto al efecto de un conjunto de factores sobre una o más variables respuesta (en contextos industriales, tiene la finalidad de tomar decisiones que permitan mejorar el proceso o el producto en estudio).

En este caso, el objetivo es la optimización del rendimiento del DMC que controlará el proceso PEAD. En primer lugar, se establecen las características de calidad o de productividad sobre las que se quiere incidir para mejorar, investigando los posibles efectos de los factores de diseño del controlador *DMC*. Por lo tanto, las respuestas son las

variables que miden el rendimiento del control automático del proceso y que se especifican seguidamente:

	VARIABLES DE RENDIMIENTO DEL CONTROLADOR	ABREVIATURA
Relacionadas con las variables controladas	Error Cuadrático Medio MI	<i>ECM_MI</i>
	Varianza MI	<i>VAR_MI</i>
	Error Cuadrático Medio APRE	<i>ECM_APRE</i>
	Varianza APRE	<i>VAR_APRE</i>
Relacionadas con las variables manipuladas	Máximo Incremento T	<i>MAX_INCT</i>
	Varianza Incremento T	<i>VAR_INCT</i>
	Incremento Medio de T	<i>MED_INCT</i>
	Máximo Incremento E	<i>MAX_INCE</i>
	Varianza Incremento E	<i>VAR_INCE</i>
	Incremento Medio de E	<i>MED_INCE</i>

Tabla 5.1 Variables Respuesta del experimento de optimización del sintonizado del controlador DMC.

Tal y como se mencionó en el capítulo anterior, el objetivo del sistema de control es minimizar la variación de las variables controladas alrededor de un valor nominal. El valor nominal de la característica clave de calidad del polietileno de alta densidad MI_t se estableció en 0,8 (gr/10min) y el de la característica de productividad $APRE_t$ en 16,5895 (gr/gr). Como variables indicadoras del rendimiento del control se tomaron los errores cuadráticos medios de estas dos variables controladas y sus correspondientes varianzas, además de los incrementos máximos; las varianzas y valores medios de los incrementos en valor absoluto de las dos variables manipuladas T_t y E_t . Para alcanzar el objetivo de control y para que el rendimiento del sistema sea óptimo, se pretende minimizar todas estas variables respuesta. A continuación se detalla cómo se han realizado los cálculos de estas variables respuesta experimentales. El Error Cuadrático Medio, cuya expresión matemática se muestra a continuación, es el promedio de las desviaciones al cuadrado del valor observado de MI_t y $APRE_t$ en el instante t respecto al valor nominal:

$$ECM_MI = \frac{\sum_{t=1}^N (MI_t - 0.8)^2}{N} \quad (5.1)$$

$$ECM_APRE = \frac{\sum_{t=1}^N (APRE_t - 16.5895)^2}{N} \quad (5.2)$$

Siendo $N=62$, el número de periodos de tiempo t durante los que se ha simulado el proceso en cada prueba del experimento.

Los máximos incrementos de las variables manipuladas en un instante t serán:

$$\max|\Delta T_t| = \max|T_t - T_{t-1}| \quad \text{y} \quad \max|\Delta E_t| = \max|E_t - E_{t-1}| \quad t = 2, \dots, N \quad (5.3)$$

Los valores medios de los incrementos en valor absoluto en un instante t serán:

$$MED_INCT = \frac{\sum_{t=1}^N |\Delta T_t|}{N} = \frac{\sum_{t=1}^N |T_t - T_{t-1}|}{N} \quad (5.4)$$

$$MED_INCE = \frac{\sum_{t=1}^N |\Delta E_t|}{N} = \frac{\sum_{t=1}^N |E_t - E_{t-1}|}{N} \quad (5.5)$$

Los **Factores controlados** de un experimento son aquellos parámetros o características, en nuestro caso parámetros de diseño del controlador DMC, para los que se prueban distintas alternativas, con el fin de estudiar cómo influyen sobre las variables respuesta. Los seis que se incluyeron en el experimento como potencialmente influyentes en el rendimiento del control fueron los siguientes:

Factores controlados	Abreviatura
A: Horizonte de predicción	<i>HP</i>
B: Horizonte de control	<i>HC</i>
C: Constante de ponderación de errores <i>MI</i>	α_{MI}
D: Constante de ponderación de errores <i>APRE</i>	α_{APRE}
E: Constante de ponderación del esfuerzo de control <i>T</i>	λ_T
F: Constante de ponderación del esfuerzo de control <i>E</i>	λ_E

Tabla 5.2 Factores controlados del experimento de optimización del sintonizado del controlador DMC.

Cada factor se ensayó a dos niveles bajo y alto, representados por los signos (-) y (+), respectivamente. En el caso de las constantes de ponderación los valores asignados a los niveles se corresponden con los valores límites entre los cuales el proceso funciona normalmente. Estos se indican en la siguiente tabla:

Factores controlados	Niveles	
<i>HP</i>	-	2
	+	4
<i>HC</i>	-	1
	+	2
α_{MI}	-	0.1
	+	0.3
α_{APRE}	-	0.03
	+	0.09
λ_T	-	0.001
	+	1.7
λ_E	-	0.01
	+	2

Tabla 5.3 Niveles ensayados de los factores controlados del experimento de optimización del sintonizado del controlador DMC.

Un **Tratamiento** es una combinación de niveles de los distintos factores que se utiliza en una determinada **Prueba**. Esta última consiste en un ensayo elemental del experimento. Si el experimento tiene replicaciones un tratamiento se ha podido ensayar varias veces. A cada tratamiento posible le corresponde una población estadística sobre las que se definen las variables respuesta. Al realizar cada prueba se obtiene un individuo al azar de la población asociada al tratamiento correspondiente.

El diseño utilizado es la fracción factorial 2_{VI}^{6-1} (tabla 5.4), es un diseño en el que se realizan 32 pruebas, es decir la mitad de las 64 pruebas exigidas en un plan factorial completo 2^6 que tendría todas las combinaciones posibles entre niveles de los distintos factores. El hecho de no ensayar todas las combinaciones posibles hace que se presente confusión entre efectos. Este diseño tiene resolución *VI*, lo que nos indica el grado de confusión entre efectos. En este caso, los efectos potencialmente importantes que pueden influir, es decir, los de los factores simples y los de las interacciones dobles no se confundirán entre sí. Los resultados de las distintas pruebas se han obtenido simulando el proceso, mediante los modelos estimados de las variables controladas ∇MI_t , $\nabla APRE_t$, en el Capítulo 4 (ecuaciones 4.80 y 4.81), con los coeficientes de la campaña 5, por haber sido la campaña que menos anomalías ha presentado. Las secuencias de innovaciones \mathbf{a}_{1t} y \mathbf{a}_{2t} distribuidas *i.i.d.*, tienen varianzas respectivas $\hat{\sigma}_{1t}^2=0.004$ y $\hat{\sigma}_{2t}^2=0.057$, que son las varianzas residuales estimadas para ambos modelos.

La función de coste cuadrática del controlador DMC empleado en las simulaciones es la ecuación (2.63), que aplicada a este caso resulta:

$$J(\Delta \mathbf{u}) = \sum_{i=1}^{HP} \alpha_{MI} \left(MI'(t+i|t) - SP_MI(t+i|t) \right)^2 + \sum_{i=1}^{HP} \alpha_{APRE} \left(APRE'(t+i|t) - SP_APRE(t+i|t) \right)^2 + \sum_{j=1}^{HC} \lambda_T \left[\nabla T_{j+t-1} \right]^2 + \sum_{j=1}^{HC} \lambda_E \left[\nabla E_{j+t-1} \right]^2 \quad (5.6)$$

<i>Prueba</i>	<i>HP</i>	<i>HC</i>	<i>α_{MI}</i>	<i>α_{APR} <i>E</i></i>	<i>λ_T</i>	<i>λ_E</i>
1	-	-	-	-	-	-
2	+	-	-	-	-	+
3	-	+	-	-	-	+
4	+	+	-	-	-	-
5	-	-	+	-	-	+
6	+	-	+	-	-	-
7	-	+	+	-	-	-
8	+	+	+	-	-	+
9	-	-	-	+	-	+
10	+	-	-	+	-	-
11	-	+	-	+	-	-
12	+	+	-	+	-	+
13	-	-	+	+	-	-
14	+	-	+	+	-	+
15	-	+	+	+	-	+
16	+	+	+	+	-	-
17	-	-	-	-	+	+
18	+	-	-	-	+	-
19	-	+	-	-	+	-
20	+	+	-	-	+	+
21	-	-	+	-	+	-
22	+	-	+	-	+	+
23	-	+	+	-	+	+
24	+	+	+	-	+	-
25	-	-	-	+	+	-
26	+	-	-	+	+	+
27	-	+	-	+	+	+
28	+	+	-	+	+	-
29	-	-	+	+	+	+
30	+	-	+	+	+	-
31	-	+	+	+	+	-
32	+	+	+	+	+	+

Tabla 5.4 Esquema de la fracción factorial 2_{VI}^{6-1} .

5.2 METODOLOGÍA ANOVA (MLR)

Una vez simuladas las 32 pruebas del experimento y obtenidos los resultados se ha realizado el análisis estadístico de los datos y se han obtenido las conclusiones.

En el análisis de los resultados se han utilizado dos métodos estadísticos, con la finalidad de compararlos y conocer cuál de los dos ofrece mejores resultados. Las dos metodologías han sido: la técnica tradicional ANOVA (Fisher 1925), ajustando el modelo mediante regresión por mínimos cuadrados (MLR *Multiple Linear Regression*) y la técnica de proyección en estructuras latentes de regresión por Mínimos Cuadrados Parciales (PLS) (Wold 1966a y b, 1973,1975).

El modelo lineal matemático que se ha ajustado para cada una de las variables respuesta Y , se presenta en la ecuación (5.6). Por claridad, se parte del diseño factorial 2^k más simple, el 2^2 con dos factores a dos niveles. Como se ha expuesto anteriormente se utilizan los signos (-) y (+) para representar dichos niveles. Si éste es cuantitativo, (+) indicará el nivel superior y (-) el inferior; en el caso de un factor cualitativo, estos niveles se definen arbitrariamente. Como este diseño contiene dos factores, el modelo estadístico es:

$$y_{kl} = \mu + \alpha_k + \beta_l + (\alpha\beta)_{kl} + u_{kl} \quad k = 1,2; l = 1,2 \quad (5.7)$$

La formulación (5.6) puede expresarse definiendo una variable indicadora para cada factor:

$$X_1 \begin{cases} +1 & \text{si factor 1 a nivel alto(+)} \\ -1 & \text{si factor 1 a nivel bajo(-)} \end{cases}$$

$$X_2 \begin{cases} +1 & \text{si factor 2 a nivel alto(+)} \\ -1 & \text{si factor 2 a nivel bajo(-)} \end{cases}$$

lo que nos permite escribir el modelo como:

$$y_{ij} = \mu + \alpha_2 X_1 + \beta_2 X_2 + (\alpha\beta)_{22} X_1 X_2 + u_{ij} \quad i = 1,2; j = 1,2 \quad (5.8)$$

expresión que indica el número de parámetros existentes: uno por factor y uno por la interacción de segundo orden. En este diseño α_2 y β_2 representan el incremento esperado en la respuesta con relación al nivel medio cuando los factores se fijan a nivel alto (+). Por conveniencia, como en los diseños factoriales con dos niveles existe un único parámetro por factor, el efecto de de cada factor se define como el incremento esperado de la respuesta cuando este factor pasa de (-) a (+), de manera que:

$$\mu = \text{media pruebas del experimento} = \bar{y}$$

$$\alpha = \text{efecto de A} = 2\alpha_2$$

$$\beta = \text{efecto de B} = 2\beta_2$$

$$\alpha\beta = \text{efecto de la interacción} = 2(\alpha\beta)_{22}$$

El modelo (5.7) se puede estimar mediante regresión por mínimos cuadrados, del mismo modo que el modelo más general que se expresa a continuación que contempla un número k de factores explicativos X_k :

$$Y_i = \beta_0 + \sum_{k=1}^K \beta_k X_k + \sum_{k<l} \beta_{kl} X_k X_l + \dots + u_i \quad (5.9)$$

Siendo Y_i ($i=1,2,\dots,N$) la respuesta obtenida en cada una de las pruebas del experimento; β_0 la media obtenida a partir de todas las pruebas del mismo; β_k 1/2 del efecto de cada factor X_k ; β_{kl} 1/2 del efecto de cada una de las interacciones $X_k X_l$ y u_i las perturbaciones aleatorias de cada prueba.

En notación matricial, el modelo para los N diferentes conjuntos de condiciones se puede escribir como:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (5.10)$$

Donde \mathbf{y} es el vector $N \times 1$ de los valores de la respuesta; \mathbf{X} es la matriz $N \times (k+1)$, siendo $k+1$ el número de coeficientes del modelo, es decir la matriz de las variables independientes (regresores); $\boldsymbol{\beta}$ es el vector $(k+1) \times 1$ de parámetros y $\boldsymbol{\varepsilon}$ es el vector $N \times 1$ de los residuos. Expresar el modelo (5.8) en forma matricial proporciona un método abreviado para escribir las ecuaciones utilizadas en los cálculos de mínimos cuadrados.

La estimación de los coeficientes β del modelo definido en (5.9), se obtiene mediante el criterio de mínimos cuadrados por la expresión matricial:

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (5.11)$$

en el ámbito del diseño de experimentos la matriz $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ se llama matriz de información y su inversa $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ matriz de varianzas-covarianzas. Las estimaciones de los efectos principales y de las interacciones expuestas para el diseño factorial fraccionado 2^{6-1} son pues estimaciones de mínimos cuadrados, cuya variabilidad es importante conocer. La desviación típica de cada uno de los estimadores b_k viene dada por la expresión:

$$s_{b_k} = s \sqrt{c_{kk}} \quad (5.12)$$

donde s es la desviación típica residual estimada, es decir una estimación del error experimental s (ϵ) en el modelo (5.9) y los c_{kk} son los elementos de la diagonal principal de $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$. El primer factor s de la ecuación (5.11), depende de la variabilidad experimental debida a factores no incluidos en el modelo y el segundo, c_{kk} depende del diseño experimental y el producto de ambos mide la calidad de las estimaciones individuales. Las ecuaciones expuestas muestran la relevancia de la matriz \mathbf{X} y por lo tanto la importancia del modelo experimental elegido.

ANOVA (MLR): Validación del modelo

En regresión interesa que un modelo se ajuste lo mejor posible a los datos, y que además con dicho modelo se pueda realizar predicciones a partir de nuevas observaciones con el menor error de predicción posible. A medida que aumenta el número de variables mayor es la bondad de ajuste. Sin embargo el hecho de que aumente la bondad de ajuste no implica necesariamente que haya siempre que preferir los modelos más complicados “porque se ajustan mejor a los datos”. Los modelos no son tanto mejores cuanto más complicados son, sino todo lo contrario. El objetivo es obtener modelos lo más sencillos posibles que expliquen bien los datos. La significación estadística de las variables, la coherencia con los conocimientos técnicos sobre el tema y su relevancia para los objetivos

perseguidos en el estudio, son los criterios esenciales a seguir a la hora de seleccionar un determinado modelo (Romero y Zúñica 2008)

Bondad de ajuste

La variabilidad total de la variable dependiente Y en el conjunto de las N observaciones viene medida por la suma de cuadrados total:

$$SCT_{Total} = \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \quad (5.13)$$

y tiene $N-1$ grados de libertad.

Parte de esta variabilidad es debida (o, al menos está asociada) a las variables explicativas X_1, \dots, X_K . Esta parte explicada por dichas variables tiene K grados de libertad (tantos como variables explicativas hay en el modelo). La variabilidad restante se recoge en los residuos e_i , y se mide por la suma de cuadrados residual:

$$SCR = \sum_{i=1}^N e_i^2 \quad (5.14)$$

que tendrá $(N-1)-K$ grados de libertad. La diferencia:

$$SC_{explicada} = SC_{Total} - SCR \quad (5.15)$$

es la parte de la variabilidad de Y asociada a las variables explicativas.

Se define el *coeficiente de determinación* R^2 como el cociente:

$$R^2 = \frac{SC_{Explicada}}{SC_{Total}} = 1 - \frac{SCR}{SC_{Total}} \quad (5.16)$$

que como es obvio estará comprendido entre 0 y 1 y que por tanto medirá la proporción (o porcentaje si se multiplica por 100) de la varianza de Y que está asociada a las variables

explicativas incluidas en el modelo. Cuanto más cercano a 1 sea este coeficiente, mayor parte de la variabilidad constatada de Y estará asociada a dichas variables.

Siempre que se añadan nuevas variables al modelo, el coeficiente R^2 aumentará puesto que los residuos serán menores (en el sentido de que la suma de cuadrados residual será menor, o como mucho igual). A la hora de comparar modelos, esta característica es una desventaja del estadístico R^2 , puesto que puede aumentar arbitrariamente. Para evitar este inconveniente, se define el coeficiente de determinación corregido o ajustado por grados de libertad R_{adj}^2 como un cociente entre varianzas, en lugar de como cociente de sumas de cuadrados:

$$R_{adj}^2 = 1 - \frac{SCR / gl_{res}}{SCT / gl_{Tot.}} = 1 - \frac{s_{res}^2}{s_Y^2} \quad (5.17)$$

de aquí que s_{res}^2 estimador de σ^2 se pueda expresar en función de s_Y^2 estimador de la varianza de Y y de R_{adj}^2 :

$$s_{res}^2 = s_Y^2 (1 - R_{adj}^2) \quad (5.18)$$

Al añadir una nueva variable al modelo, R_{adj}^2 no necesariamente aumentará, ya que s_{res}^2 puede disminuir, pero también podría aumentar, lo que nos informa de la relevancia de la variable añadida. De (5.15 y 5.16) se deduce:

$$R_{adj}^2 = 1 - \frac{SCR / (N - I - K)}{SCT / (N - I)} = 1 - \frac{(N - I)}{(N - I - K)} * \frac{SCR}{SCT} = 1 - \frac{(N - I)}{(N - I - K)} (1 - R^2) \quad (5.19)$$

Esta fórmula hace patente que R_{adj}^2 será, para $k \geq 1$, siempre menor que R^2 , pudiendo ser negativo.

Bondad de predicción: PRESS

Como se ha mencionado anteriormente un modelo no es necesariamente mejor cuanto mayor es su bondad de ajuste, sino que hay que tener en cuenta también su capacidad de predicción. La bondad de predicción se calcula con técnicas de validación cruzada, las cuales fueron descritas por primera vez por Stone (1974) y Geisser (1974) y que son técnicas de remuestreo. Es un método de validación interna, cuya gran ventaja es que no necesita observaciones externas adicionales para validar el modelo.

Para emplear el método de validación cruzada existen distintos criterios de descartar las observaciones. Si el número total de observaciones es reducido, lo más razonable es descartar una observación cada vez, es decir eliminar una muestra y usar todas las demás para obtener un nuevo modelo y predecir la primera. Este procedimiento se repite N veces, tantas como muestras se tienen. Si el número de observaciones es muy elevado, al descartar una observación el modelo prácticamente no se modificará (a no ser que ésta sea influyente), por lo que es más razonable eliminar varias observaciones simultáneamente, construir el modelo y luego obtener los valores predichos para dichas observaciones. En este caso, es importante que la selección de las observaciones se realice aleatoriamente.

En este trabajo, se empleará el primer procedimiento. Tras estimar el modelo MLR con todas las observaciones se procederá a validarlo cruzadamente estimando tantos modelos como observaciones se tengan. Se procede de la siguiente forma: se elimina la observación “ i ” tanto de la matriz \mathbf{X} como del vector \mathbf{y} , de manera que se obtiene otra matriz \mathbf{X}_{-i} de dimensiones $(N-1) \times K$ y un vector \mathbf{y}_{-i} de dimensiones $(N-1)$ donde el subíndice $-i$ se refiere a que la observación “ i ” ha sido eliminada. El modelo postulado y los coeficientes estimados *OLS* (*ordinary least squared*) serán:

$$\mathbf{y}_{-i} = \mathbf{X}_{-i}\boldsymbol{\beta}_{-i} + \boldsymbol{\varepsilon}_{-i} \quad (5.20)$$

$$\mathbf{b}_{-i} = (\mathbf{X}_{-i}^T \mathbf{X}_{-i})^{-1} \mathbf{X}_{-i}^T \mathbf{y}_{-i} \quad (5.21)$$

la predicción para la observación que ha sido omitida será:

$$\hat{y}_{i,-i} = x_i^T \mathbf{b}_{-i} \quad (5.22)$$

La diferencia entre el valor observado y el valor predicho se llama residuo validado de forma cruzada (también se llama residuo eliminado o residuo predicho):

$$e_{i,-i} = y_i - \hat{y}_{i,-i} \quad (5.23)$$

Estos residuos forman parte del estadístico *PRESS* (**P**rediction **E**rror **S**um of **S**quares) o suma de cuadrados del error de predicción propuesto por Allen (1974) como el sumatorio para las N observaciones de los residuos de predicción al cuadrado y que resulta útil para comparar diferentes modelos:

$$PRESS = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_{-i})^2 \quad (5.24)$$

por esta razón al residuo predicho (5.23) también se le llama “*residuo PRESS*”.

Si un valor $e_{i,-i}$ es demasiado alto, significa que el modelo estimado depende específicamente de la observación x_i y por lo tanto dicho punto es muy influyente, considerándose un punto anómalo o *outlier*.

Se puede demostrar que:

$$e_{-i} = \frac{e_i}{(1-h_{ii})} \quad (5.25)$$

siendo h_{ii} los elementos de la diagonal de la matriz $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ llamada en inglés matriz “*hat*”. Por lo tanto el error de predicción e_{-i} es justo el residuo e_i ordinario ponderado de acuerdo a dichos elementos. Como $0 < h_{ii} < 1$ y por lo tanto $1-h_{ii} < 1$, e_{-i} es siempre mayor que e_i , lo cual es lógico puesto que para calcular e_{-i} se ha eliminado la observación “*i*”.

A partir del *PRESS* se calcula el estadístico Q^2 mediante la ecuación (5.26). En modelos de regresión, este estadístico se conoce como “bondad de predicción”, porque aporta información sobre la capacidad del modelo para predecir las variables respuesta en nuevas observaciones.

$$Q^2 = 1 - \frac{PRESS}{SCT} \quad (5.26)$$

Por la misma razón que se acaba de exponer, *PRESS* es siempre mayor que *SCR*. De aquí que la bondad de ajuste R^2 siempre es mayor que la de predicción Q^2 . Si la diferencia es demasiado grande, esto se debe a la existencia de un residuo elevado, es decir a un punto con una gran influencia en la regresión.

Se considera generalmente hablando, que un modelo tiene buena capacidad de predicción a partir de un valor $Q^2 > 0.5$, siendo excelente a partir de $Q^2 > 0.9$. Preferiblemente la diferencia entre ($R^2 - Q^2$) no debe ser mayor que 0.3.

Análisis de residuos

Para comprobar si el modelo postulado es correcto, es esencial utilizar adicionalmente la información contenida en los residuos para cuestionarse la adecuación del modelo a las hipótesis asumidas para dichos residuos u_i . Estos deben distribuirse normal e idénticamente, con media 0, varianza σ^2 constante y ser independientes entre sí:

$$u_i \approx N(0, \sigma^2) \quad (5.27)$$

Recordemos que el modelo se sintetiza en la ecuación (5.8). Como sabemos el residuo estimado para cada observación e_i , no es más que la diferencia entre el valor realmente observado y_i y el valor predicho a partir del modelo estimado para esos valores concretos x_{ik} de las variables explicativas:

$$e_i = y_i - \left(b_0 + \sum_{k=1}^K b_k x_{ik} + \sum_{k<l} b_{kl} x_{ik} x_{il} + \dots \right) \quad (5.28)$$

Los residuos e_i son en realidad las estimaciones de los valores de las perturbaciones aleatorias u_i en cada observación.

Resulta de especial utilidad una representación en papel probabilístico normal de los residuos, para comprobar la hipótesis de normalidad, así como la existencia de datos anómalos. Si en dicha representación éstos se alinean entonces se satisface dicha asunción.

5.3 ESTIMACIÓN DE EFECTOS SIGNIFICATIVOS: VARIABLES CONTROLADAS

Error Cuadrático Medio del MI (ECM_{MI})

En la tabla 5.5 y en las figuras 5.1 y 5.2 se recogen los efectos sobre el ECM_{MI} estadísticamente significativos (valor- $p < 0.05$), analizando los datos con el test F del ANOVA y mediante el gráfico de Daniel. En la figura 5.1 se han representado los efectos sobre el gráfico de Daniel. Si los factores explicativos no tuvieran efecto sobre la variable respuesta, los efectos muestrales se distribuirían independiente e idénticamente de forma normal y con media cero, de manera que representados en papel probabilístico normal (gráfico de Daniel) caerían sobre una recta, aquellos que no estuvieran sobre la recta serían los efectos significativos. En la figura 5.2 se representan los efectos estandarizados, es decir divididos por su desviación típica (DT) debida al error de muestreo, de forma que, cada cociente efecto/ DT (efecto estandarizado), se distribuirá según una distribución t de Student, en este caso con $v=23$ grados de libertad. Un valor “significativo” de t al nivel del 5% es 2.069¹. Dicho valor está representado por la línea vertical que marca el nivel de significación ($\alpha=0.05$). Este procedimiento se seguirá para todas las variables respuesta del experimento.

Factores	Efectos
Media	0.0124 +/- 0.0004
C:alfa_MI	-0.0036 +/- 0.0007
D:alfa_A	0.0037 +/- 0.0007
E:lambda_T	0.0020 +/- 0.0007
F:lambda_E	0.0071 +/- 0.0007
CE:alfa_MI*lambda_T	0.0018 +/- 0.0007
CF: alfa_MI*lambda_E	-0.0023 +/- 0.0007
DF: alfa_APRE*lambda_E	0.0030 +/- 0.0007
EF: lambda_T*lambda_E	-0.0032 +/- 0.0007

¹ $P(|t_{23}| > 2.069) = 0.05$

Tabla 5.5 Efectos estimados (ANOVA) significativos (valor- $p < 0.05$) de los factores sobre el *ECM_MI* acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.

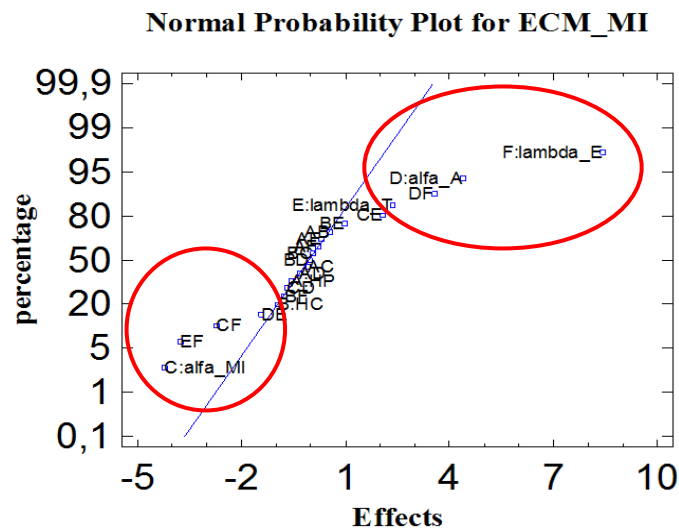


Figura 5.1 Gráfico de Daniel: Efectos significativos

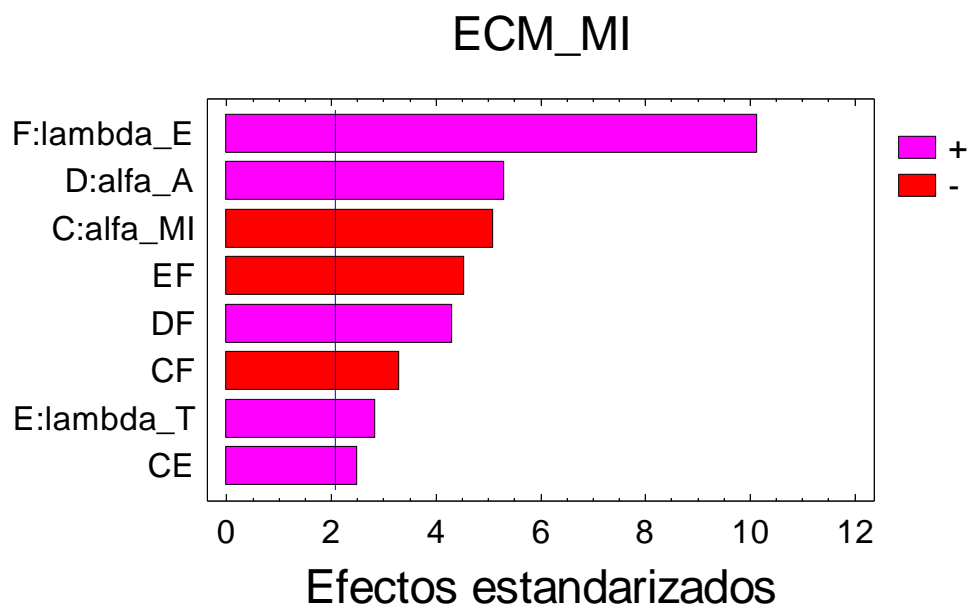


Figura 5.2 Diagrama de Pareto de los efectos significativos (valor- $p < 0.05$) estandarizados sobre *ECM_MI*. La línea vertical señala el límite de significación.

Se observa cómo las constantes de ponderación del esfuerzo de control (λ_T y λ_E) influyen en el ECM_{MI} , ambas con un efecto positivo. Si aumenta el valor de estas constantes, se penaliza el aumento de la magnitud de los ajustes de las variables manipuladas T y E en la función de optimización del controlador DMC, haciéndose más difícil reconducir la variable controlada MI a su nominal y en consecuencia aumenta el ECM_{MI} .

El factor λ_E tiene un efecto mayor que λ_T sobre esta variable (ver figura 5.2). Esto último es consecuencia de la mayor capacidad de la temperatura para controlar el MI . En efecto, el modelo estimado del proceso (5.29) (para más detalles ver Capítulo 4) nos indica que la ganancia de la función de transferencia para la temperatura es 0,368, mientras que para el caudal de etileno es 0,027. De aquí que, al aumentar la constante de ponderación de los movimientos de control, el efecto de λ_E sea mayor (hace aumentar más el ECM_{MI}) que el de λ_T , debido a su menor capacidad de control del MI . En la figura 5.3 se han representado las trayectorias que en promedio sigue el MI alrededor de su valor objetivo junto con los promedios de ECM_{MI} en las pruebas en las que λ_T y λ_E han estado a nivel alto. Se ve que en dichas condiciones el ECM_{MI} es mayor para λ_E alto.

$$\nabla MI_t = (0.068 + 0.3B) \nabla T_{t-1} + (0.11 - 0.083B) \nabla E_{t-1} + a_{1t} \quad (5.29)$$

Sin embargo como existe una interacción significativa entre ambas constantes es necesario matizar el análisis anterior. Existe interacción entre los factores si el efecto de uno de ellos es diferente según el nivel al que esté el otro factor. Si hay interacción el efecto conjunto de los factores que interaccionan no será la suma de sus efectos simples. Como se puede ver en la tabla 5.5 y en las figuras 5.2 y 5.4 la interacción $\lambda_T * \lambda_E$ es significativa, siendo además la de mayor magnitud. Según se puede ver en la figura 5.4, el efecto de λ_T es positivo si el nivel al que se encuentra λ_E es bajo, sin embargo es negativo cuando λ_E está a nivel alto. El descenso que se obtiene en el ECM_{MI} en condiciones operativas óptimas λ_T (-) y λ_E (-) (máximos ajustes) es mayor que si no existiese interacción. Lo cual quiere decir que en el control del MI las variables manipuladas T y E actúan sinérgicamente, potenciando sus efectos individuales. Sin embargo y debido a esta interacción, no es la combinación $\lambda_T(+)$ y $\lambda_E(+)$ la que provoca mayor ECM_{MI} como cabría esperar, sino $\lambda_T(-)$ y $\lambda_E(+)$. Por lo tanto, si se tiene que restringir el movimiento del E , es mejor restringir también el movimiento de la T .

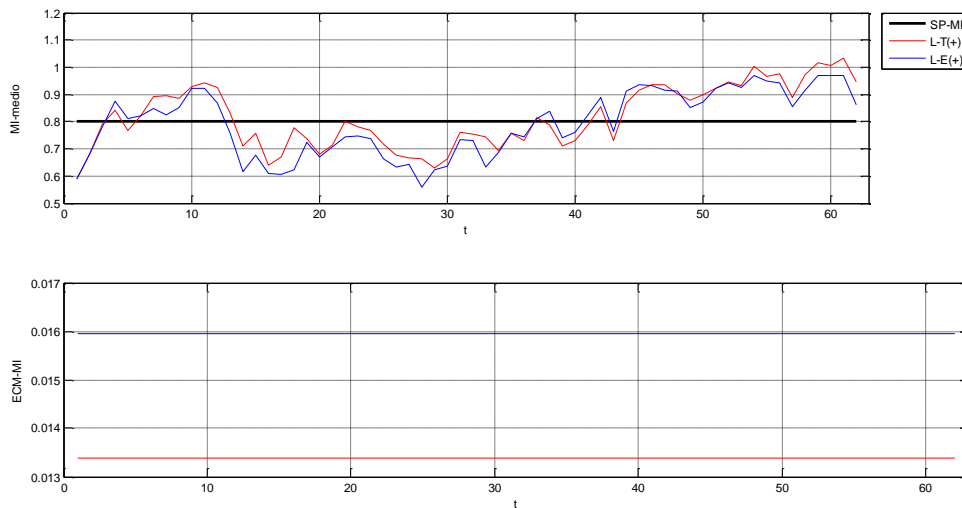


Figura 5.3 Trayectoria promedio del MI alrededor de su valor nominal (gráfico superior) y ECM_{MI} en las pruebas del diseño en las que λ_T y λ_E han estado a nivel alto (+).

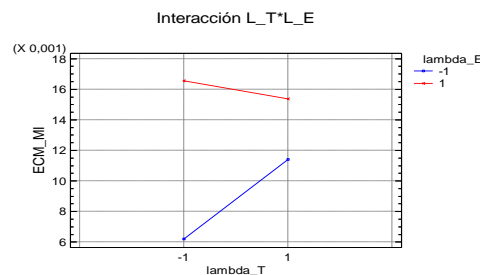


Figura 5.4 Efecto de la interacción $\lambda_T * \lambda_E$ sobre ECM_{MI} .

Así mismo también tienen un efecto significativo sobre el ECM_{MI} las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas (α_{MI} y α_{APRE}). Sus efectos son de magnitud similar, pero de signo contrario. Al aumentar α_{MI} se penaliza en la función de optimización del controlador DMC, las desviaciones del MI respecto a su nominal, disminuyendo el ECM_{MI} , al contrario de lo ocurre con la otra constante α_{APRE} , cuyo efecto es positivo, dado que el controlador cuando α_{APRE} esté al nivel alto, se centrará en controlar principalmente el $APRE$.

La interacción entre α_{MI} y λ_E (ver figura 5.5) consiste en que el efecto de α_{MI} que es negativo tanto cuando λ_E está a nivel bajo como cuando está a nivel alto, es más pronunciado cuando el movimiento de E , está más restringido, es decir si se optase por reducir los ajustes del E , el hecho de escoger el nivel alto de α_{MI} permite reducir el error contrarrestando el aumento del ECM_{MI} provocado por el menor esfuerzo de control del E .

La interacción existente entre α_{APRE} y λ_E (ver figura 5.5) consiste en que el efecto de α_{APRE} es positivo tanto cuando λ_E está a nivel bajo como cuando está a nivel alto, pero en este último caso el efecto es mayor. Por lo tanto, cuando se tiene mayor disponibilidad de los movimientos de control del E , el efecto de α_{APRE} , no es tan perjudicial sobre el ECM_{MI} , que cuando se reduce su movimiento.

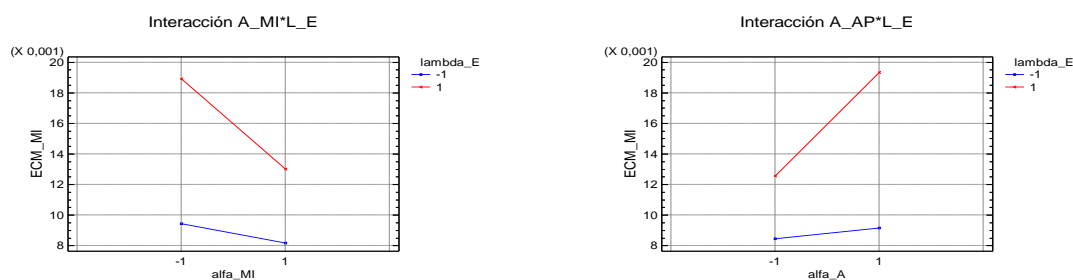


Figura 5.5 Efectos de las interacciones $\alpha_{MI} * \lambda_E$ y $\alpha_{APRE} * \lambda_E$ sobre ECM_{MI} .

Por último también existe interacción entre α_{MI} y λ_T (ver figura 5.6). Como en el caso anterior, el efecto de α_{MI} también es negativo sobre el ECM_{MI} , tanto cuando λ_T está a nivel bajo como cuando lo está a alto, pero en el primer caso es de mayor magnitud, actuando ambos factores de forma que potencian sus efectos individuales de reducción del ECM_{MI} .

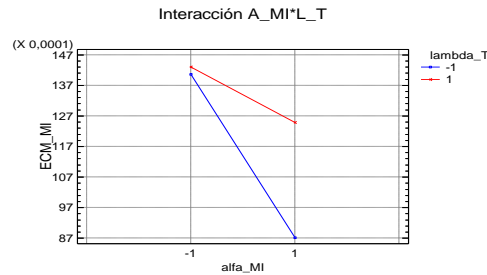


Figura 5.6 Efecto de la interacción $\alpha_{MI} * \lambda_T$ sobre ECM_{MI} .

Todo estas conclusiones que permiten conocer mejor el funcionamiento del proceso, no se hubieran obtenido si no se hubiese realizado el diseño de experimentos que permite separar los efectos tanto simples como interacciones al ser ortogonales en el diseño.

De este análisis se concluye que las condiciones operativas óptimas desde el punto de vista de minimizar el ECM_{MI} es mantener el nivel bajo de las constantes del esfuerzo de control, el nivel alto de la constante de ponderación de errores α_{MI} y el nivel bajo de α_{APRE} . Siendo la media predicha en estas condiciones $ECM_{MI} = 0.002$. Los horizontes de predicción y de control no han tenido influencia en esta variable de rendimiento del control, probablemente debido a que se trata de un proceso con poca inercia.

Del análisis de residuos (diferencias $y - \hat{y}$, entre el valor y obtenido experimentalmente y el valor predicho \hat{y} por el modelo ajustado), cuyas representaciones gráficas en función del número de la prueba y en papel probabilístico normal pueden verse en las figuras 5.7 y 5.8, podemos deducir que el modelo obtenido es válido en el sentido de que proporciona una aproximación adecuada a la verdadera respuesta y no existen valores anómalos. Por lo tanto podemos aceptar el modelo ajustado como útil para el objetivo que se ha propuesto. En la tabla 5.6 se muestran los valores del coeficiente R^2 , el Q^2 y de la desviación típica residual $\hat{\sigma}$ del modelo.

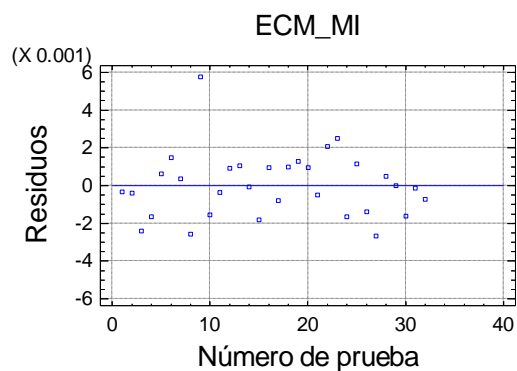


Figura 5.7 Residuos del modelo ajustado para ECM_MI en función del número de la prueba del diseño.

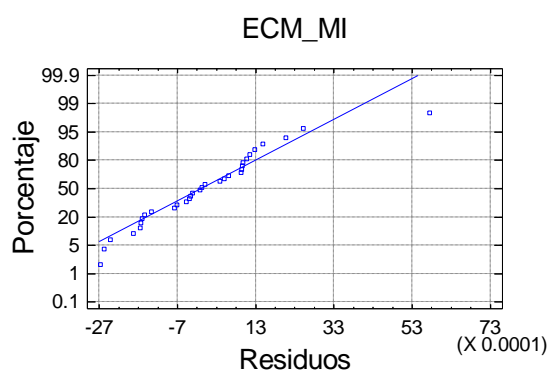


Figura 5.8 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para ECM_MI .

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.91	0.82	0.002

Tabla 5.6 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para ECM_MI .

Varianza del MI

En la tabla 5.7, y en la figura 5.9 se recogen los efectos estadísticamente significativos (valor- $p < 0.05$) sobre la **Varianza del MI** , en adelante VAR_MI . Los resultados son prácticamente los mismos que los obtenidos para el ECM_MI . Esta similitud de resultados

es lógica porque estas variables están relacionadas matemáticamente según la siguiente expresión:

$$ECM_MI = s^2(MI) + sesgo^2 \quad (5.30)$$

Las constantes de ponderación del esfuerzo de control influyen en esta respuesta, ambas con un efecto positivo, es decir, si estas constantes pasan de nivel bajo a nivel alto, y por lo tanto se restringe el movimiento de las variables manipuladas E y T aumenta la VAR_MI . Del mismo modo que ocurría con el ECM_MI , λ_E tiene un efecto mayor que λ_T y existe interacción entre estos dos factores (ver figura 5.10).

Así mismo, también tienen un efecto significativo (valor-p < 0.05) sobre el VAR_MI las constantes α_MI y α_APRE . Igual que en el caso del ECM_MI , sus efectos son de magnitud similar, pero de signo contrario. Si se penaliza en la función de optimización del controlador DMC, las desviaciones del MI respecto a su nominal, al aumentar dicha constante disminuya la VAR_MI , al contrario de lo ocurre con α_APRE cuyo efecto es positivo, puesto que el controlador tenderá a reducir la variabilidad de esta última variable respecto a su valor nominal de forma prioritaria.

Las interacciones que resultan significativas coinciden con las vistas para el ECM_MI , como puede observarse en la figura 5.11. En este caso, la interacción de mayor magnitud es la existente entre la constante de ponderación de errores α_APRE y la constante del esfuerzo de control λ_E . Si observamos la figura 5.11 (interacción FD) vemos que el efecto positivo de λ_E es mayor cuando α_APRE está a nivel alto que cuando está nivel bajo, es decir ambos factores simples potencian sus efectos simples cuando interaccionan entre sí aumentando la varianza del MI . Según el análisis de los resultados para minimizar esta variable respuesta las condiciones operativas óptimas serán las mismas que las propuestas en el apartado anterior. Siendo la media predicha en estas condiciones $VAR_MI=0.002$.

Factores	Efectos
Media	0.0122 +/- 0.0003
C:alfa_MI	-0.0035 +/- 0.0007
D:alfa_A	0.0038 +/- 0.0007
E:lambda_T	0.0015 +/- 0.0007
F:lambda_E	0.0078 +/- 0.0007
CE	0.0017 +/- 0.0007
CF	-0.0023 +/- 0.0007
DF	0.0031 +/- 0.0007
EF	-0.0026 +/- 0.0007

Tabla 5.7 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la *Varianza del MI* acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.

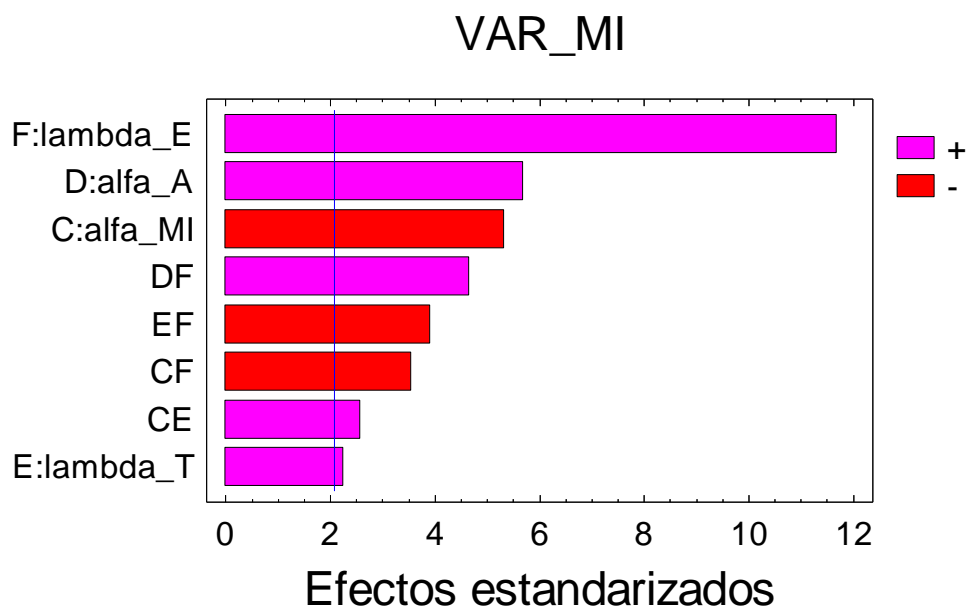


Figura 5.9 Diagrama de Pareto de los efectos significativos (valor-p < 0.05) estandarizados sobre VAR_MI. La línea vertical señala el límite de significación.

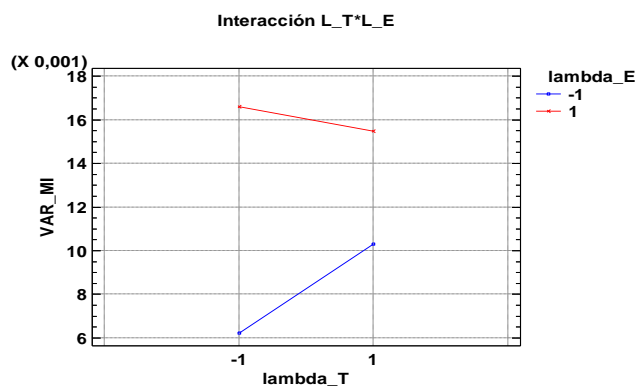


Figura 5.10 Gráfico de la interacción λ_T y λ_E

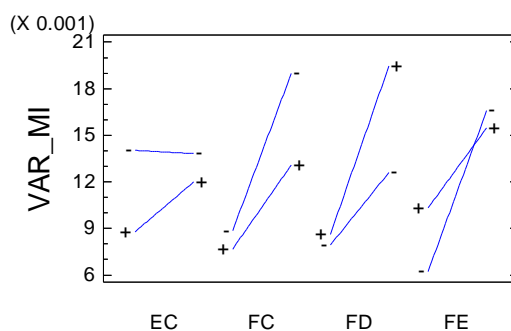


Figura 5.11 Gráfico de las interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) entre los distintos factores simples. C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas MI y $APRE$ respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.

Del análisis de residuos, cuyas representaciones gráficas pueden verse en las figuras 5.12 y 5.13 podemos deducir que el modelo obtenido es válido y útil para el objetivo que se ha propuesto, no habiendo presencia de valores anómalos. En la tabla 5.8 se muestran los valores del coeficiente R^2 , el Q^2 y de la desviación típica residual $\hat{\sigma}$ del modelo.

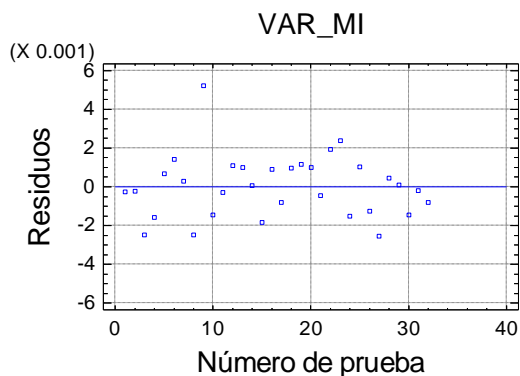


Figura 5.12 Residuos del modelo ajustado para *VAR_MI* en función del número de la prueba del diseño.

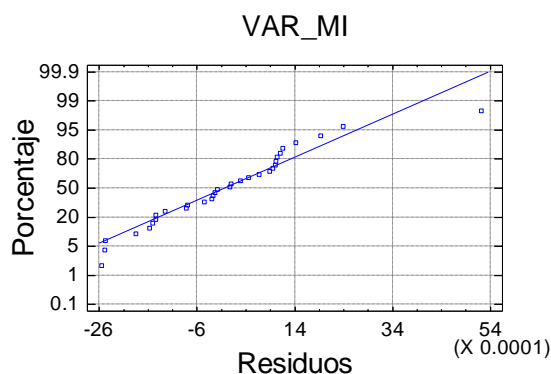


Figura 5.13 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para *VAR_MI*.

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.92	0.84	0.002

Tabla 5.8 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para *VAR_MI*.

Error Cuadrático Medio del *APRE*

En la tabla 5.9, así como en las figuras 5.14 y 5.15 se recogen los efectos estadísticamente significativos (valor- $p < 0.05$), que influyen en el **Error Cuadrático Medio del *APRE***, en adelante *ECM_ APRE*. Por estar muy próximo al límite de significación (valor- $p=0.054$), también se ha considerado el efecto de la interacción entre

α_{MI} y λ_T y en consecuencia también se ha tenido en cuenta en el modelo el efecto simple de la constante de ponderación de errores del *MI* por intervenir en dicha interacción, pese a que su efecto simple no es en si significativo. La constante de ponderación de errores del *APRE* tiene efecto significativo (valor- $p < 0.05$) y lógicamente negativo, ya que si en la función de optimización del controlador se penalizan los errores de esta variable, las acciones de control que calculará el controlador, harán que su error cuadrático medio disminuya. También y como en los casos anteriores, las constantes de ponderación del esfuerzo de control influyen en esta respuesta, ambas con un efecto positivo, es decir si estas constantes pasan de nivel bajo a nivel alto, aumenta el *ECM_{APRE}*. De nuevo tiene un efecto de mayor magnitud la restricción del movimiento del caudal de etileno λ_E . Las dos interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) son las existentes entre α_{APRE} y λ_E y entre ésta y λ_T . La primera de ellas nos indica (ver figura 5.13) que cuando los errores de la variable *APRE* están más penalizados, el hecho de restringir el movimiento del caudal de etileno no tiene un efecto tan considerable, en el sentido de aumentar el error cuadrático medio de dicha variable, que cuando el nivel de penalización es bajo, es decir ambas variables tienen efectos contrapuestos que se potencian entre sí. En cuanto a la interacción entre las constantes del esfuerzo de control podemos observar en la figura 5.15 (interacción FE) que el efecto de limitar el movimiento del caudal de etileno hace que aumente el error cuadrático medio del *APRE*, como ya se veía en su efecto simple, pero que este aumento es mayor si a su vez el movimiento de la temperatura está más limitado, es decir los efectos simples de estos parámetros de diseño del controlador se potencian entre sí. Si nuevamente nos fijamos en la figura 5.15, vemos representada la interacción entre α_{MI} y λ_T (interacción EC). Si se restringe el esfuerzo de control de la temperatura aumenta el *ECM_{APRE}*, pero sobre todo cuando no están penalizados los errores del *MI*, porque cuando lo están ese efecto se reduce mucho.

Las condiciones operativas óptimas cuando el objetivo es minimizar la variable *ECM_{APRE}* son, mantener el nivel bajo los cuatro factores que han salido significativos. Pese a que cabría esperar que para esta variable respuesta la condición óptima para la constante de ponderación de los errores α_{APRE} fuese su nivel alto, ello no es así debido al efecto de las interacciones, que se terminan de comentar. La media predicha en estas condiciones es $ECM_{APRE}=0.0538$.

Factores	Efectos
Media	0.0645 +/- 0.0011
C:alfa_MI	0.0015 +/- 0.0022
D:alfa_A	-0.0060 +/- 0.0022
E:lambda_T	0.0054 +/- 0.0022
F:lambda_E	0.0130 +/- 0.0022
CE	-0.0045 +/- 0.0022
DF	-0.0088 +/- 0.0022
EF	0.0058 +/- 0.0022

Tabla 5.9 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre el **Error Cuadrático Medio del APRE** acompañados de sus desviaciones típicas muestrales. También se ha considerado la interacción CE (valor-p= 0.054) y el efecto simple de α_{MI} que pese a no ser significativo interviene en dicha interacción.

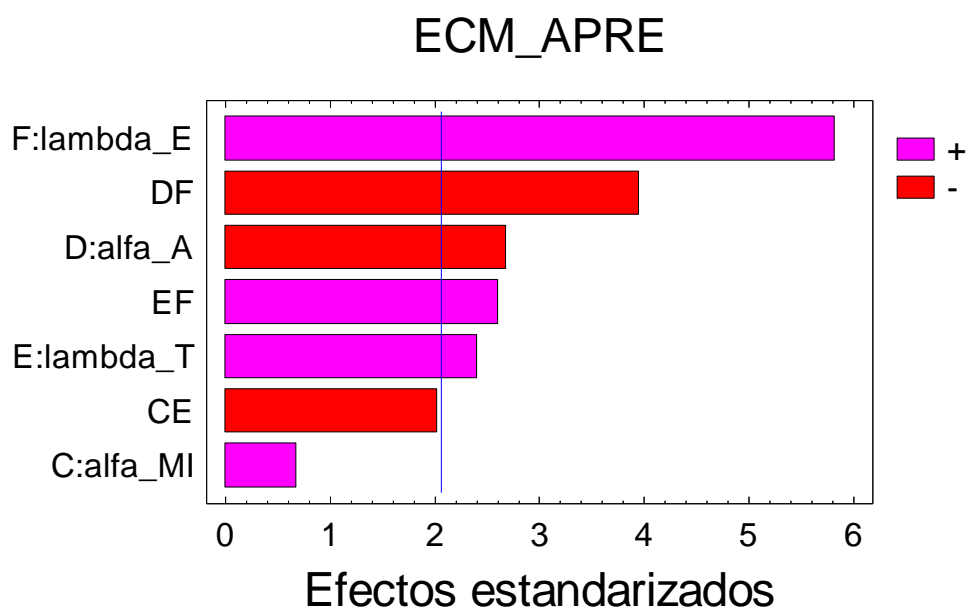


Figura 5.14 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre *ECM_APRE*. La línea vertical señala el límite de significación (valor-p < 0.05).

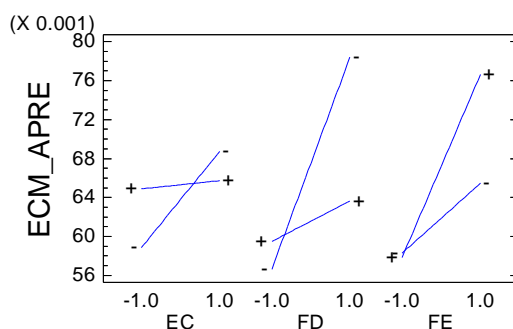


Figura 5.15 Gráfico de las interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) entre los distintos factores simples. C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas MI y $APRE$ respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.

Del análisis de residuos, cuyas representaciones gráficas pueden verse en las figuras 5.16 y 5.17 podemos deducir que el modelo obtenido es válido y útil para el objetivo que se ha propuesto, no habiendo presencia de valores anómalos. En la tabla 5.10 se recogen los valores del coeficiente R^2 , el Q^2 y de la desviación típica residual $\hat{\sigma}$ del modelo.

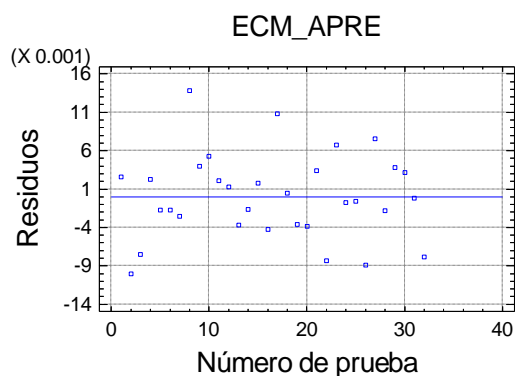


Figura 5.16 Residuos del modelo ajustado para ECM_{APRE} en función del número de la prueba del diseño.

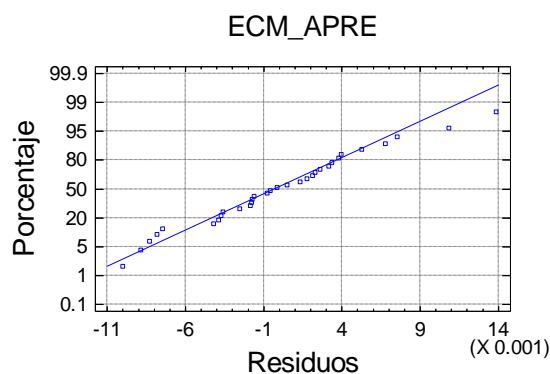


Figura 5.17 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para *ECM_APRE*.

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.75	0.56	0.006

Tabla 5.10 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para el modelo *ECM_APRE*.

Varianza del *APRE*

Los resultados para la variable respuesta **Varianza del *APRE***, en adelante *VAR_APRE* son muy similares a los obtenidos para el Error Cuadrático Medio del mismo, debido a la relación existente entre ambas variables explicada anteriormente. Dichos resultados se muestran en la tabla 5.11, así como gráficamente en las figuras 5.18 y 5.19. Como en todos los casos anteriores, las constantes de ponderación de los esfuerzos de control influyen en esta respuesta, ambas con un efecto positivo, es decir si estas constantes pasan de nivel bajo a nivel alto, se limita el movimiento de las variables manipuladas y en consecuencia aumenta la *VAR_APRE*, teniendo como en los casos anteriores un efecto de mayor magnitud la restricción del movimiento del caudal de etileno λ_E . La constante de ponderación de errores α_{APRE} tiene efecto significativo (valor-p < 0.05) y lógicamente negativo, al contrario de la constante de ponderación de los errores del *MI* cuyo efecto es positivo (este factor se ha tomado en cuenta en el modelo pese a no ser significativo, debido a que interviene en una interacción significativa). Las interacciones significativas (valor-p < 0.05) por orden de importancia son, las que se producen entre α_{APRE} y λ_E ;

entre λ_T y λ_E y entre α_{MI} y λ_T . La interpretación de las interacciones es la misma que se ha dado en el apartado anterior (ver figura 5.19). La única pequeña diferencia existente se da en la interacción entre α_{MI} y λ_T (interacción CE), consistente en que cuando la constante de ponderación de los errores del *MI* está a nivel alto, y por lo tanto se está intentando minimizar esos errores, el efecto de la constante del esfuerzo de control de la temperatura es negativo en vez de positivo, es decir, en este caso, al limitar el movimiento de la variable de control temperatura disminuye la varianza del *APRE*. Las condiciones operativas óptimas si se desea minimizar la variable *VAR_APRE* son, las mismas que para la variable respuesta anterior, mantener el nivel bajo de los cuatro factores simples que han salido significativos. También para esta variable se produce el mismo fenómeno que para *ECM_APRE*, es decir, pese a que cabría esperar que la condición óptima para la constante de ponderación de los errores α_{APRE} fuese su nivel alto, ello no es así debido al efecto de las interacciones. La media predicha en estas condiciones es $VAR_{APRE}=0.0548$.

Factores	Efectos
Media	0.0646 +/- 0.0011
C:alfa_MI	0.0012 +/- 0.0021
D:alfa_A	-0.0047 +/- 0.0021
E:lambda_T	0.0044 +/- 0.0021
F:lambda_E	0.0111 +/- 0.0021
CE	-0.0047 +/- 0.0021
DF	-0.0077 +/- 0.0021
EF	0.0049 +/- 0.0021

Tabla 5.11 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre el **Varianza del APRE** acompañados de sus desviaciones típicas muestrales. El efecto simple de α_{MI} ha sido considerado pese a no ser significativo por el hecho de intervenir en la interacción CE, que sí es significativa.

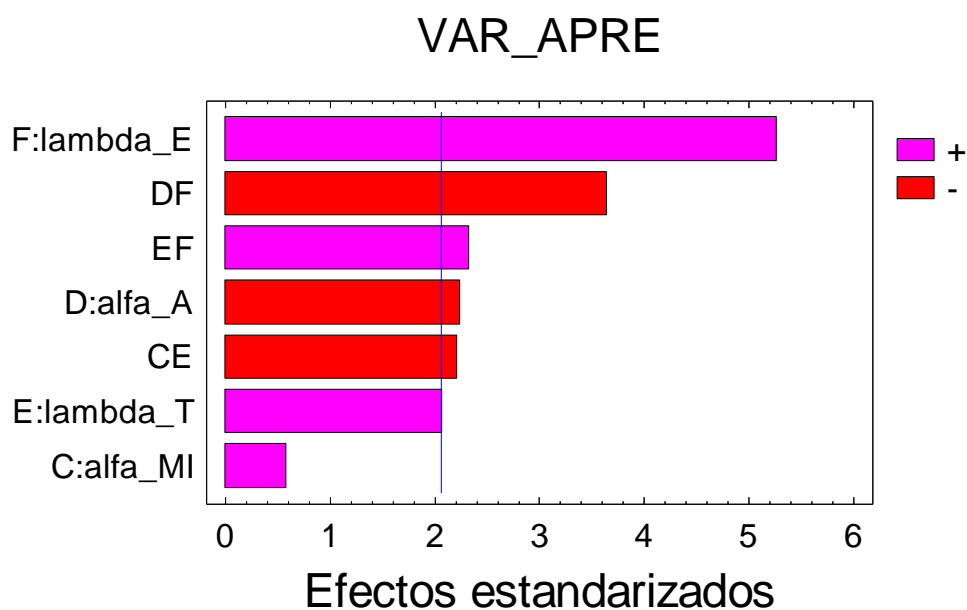


Figura 5.18 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre *VAR_APRE*. La línea vertical señala el límite de significación (valor- $p < 0.05$).

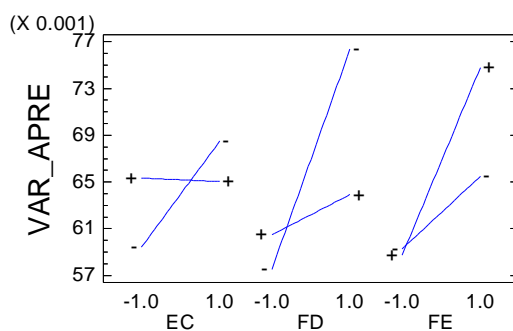


Figura 5.19 Gráfico de las interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) entre los distintos factores simples. $C:\alpha_{MI}$ y $D:\alpha_{APRE}$ son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas *MI* y *APRE* respectivamente; $E:\lambda_T$ y $F:\lambda_E$ son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.

El análisis de residuos, se muestra gráficamente a continuación en las figuras 5.20 y 5.21, no observándose ninguna anomalía, que nos condujera a pensar en reformular el modelo. En la tabla 5.12 se muestran los valores del coeficiente R^2 , el Q^2 y de la desviación típica residual $\hat{\sigma}$ del modelo.

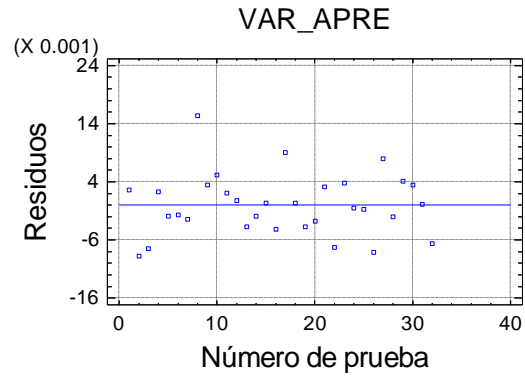


Figura 5.20 Residuos del modelo ajustado para *VAR_APRE* en función del número de la prueba del diseño.

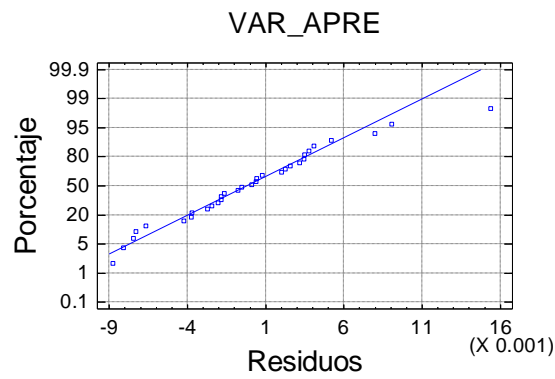


Figura 5.21 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para *VAR_APRE*.

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.72	0.50	0.006

Tabla 5.12 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para *VAR_APRE*.

5.4 ESTIMACIÓN DE EFECTOS SIGNIFICATIVOS: VARIABLES MANIPULADAS

Máximo Incremento de la *TEMPERATURA*

En la tabla 5.13 y en las figuras 5.22 y 5.23 se reflejan los efectos significativos (valor- $p < 0.05$) sobre la variable respuesta **Máximo Incremento de la *Temperatura***, en adelante *MAX_INCT*. Los efectos más importantes son las constantes del esfuerzo de control λ_T y λ_E . La constante de ponderación del esfuerzo de control de la temperatura, λ_T tiene un efecto negativo, ya que al limitar el movimiento de la temperatura obviamente disminuye su incremento máximo. Al contrario λ_E tiene un efecto positivo, probablemente debido a que si se limita el movimiento del caudal de etileno, el controlador intentará llevar las variables controladas a su nominal aumentando el movimiento de la temperatura, siendo previsible que aumente su máximo. Las constantes de ponderación de los errores α_{MI} y α_{APRE} tienen ambas efecto significativo y de signo contrario. Si se intenta reducir los errores del *MI* entonces disminuye el *MAX_INCT*, por el contrario si se intenta reducir las desviaciones respecto del nominal del *APRE*, aumenta el *MAX_INCT*, lo que parece indicar que el control del *APRE* hace que se mueva más la temperatura.

Factores	Efectos
Media	0.3137 +/- 0.017
C:alfa_MI	-0.1234 +/- 0.035
D:alfa_A	0.1005 +/- 0.035
E:lambda_T	-0.5618 +/- 0.035
F:lambda_E	0.1748 +/- 0.035
CE	0.1240 +/- 0.035
DE	-0.0810 +/- 0.035
DF	0.0820 +/- 0.035
EF	-0.1403 +/- 0.035

Tabla 5.13 Efectos estimados significativos (valor- $p < 0.05$) de los factores sobre el **Máximo Incremento de la *Temperatura***, acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.

Las interacciones significativas cuyas representaciones gráficas pueden ser observadas en la figura 5.23, son las que se dan entre λ_T y λ_E ; α_{MI} y λ_T ; α_{APRE} y λ_T y α_{APRE} y λ_E . Se trata en todas ellas de interacciones ligeras que matizan los efectos de los factores simples, como es el caso de la interacción entre las dos constantes de ponderación de los esfuerzos de control. Respecto a la interacción que se da entre α_{MI} y λ_T (interacción CE) cabe destacar que cuando el movimiento de la temperatura está reducido, el hecho de intentar reducir los errores del *MI*, no tiene efecto sobre el máximo incremento de la temperatura, sin embargo cuando se más se permite el movimiento de *T*, curiosamente el máximo incremento de la temperatura disminuye, probablemente debido a la gran capacidad, discutida anteriormente, que tiene la temperatura de controlar la variable *MI*. Sin embargo, la interacción entre α_{APRE} y λ_T (interacción DE) nos indica que ocurre prácticamente lo mismo con la variable *APRE* cuando λ_T está a nivel alto, pero cuando la temperatura se mueve más libremente al contrario del caso anterior se da un aumento del *MAX_INCT*. Probablemente la temperatura no tiene tanta capacidad del control del *APRE*. Por último si observamos la interacción entre α_{APRE} y λ_E (interacción DF) vemos que tanto si λ_E está a nivel bajo como si está a nivel alto, si se intenta reducir los errores del *APRE*, aumenta el *MAX_INCT*. Pero este aumento es menor cuando no está limitado el movimiento del caudal de etileno, puesto que de esta manera dicha variable intervendrá en el control, ayudando a disminuir el incremento de la temperatura. Las condiciones operativas óptimas para minimizar el *MAX_INCT* son las siguientes: α_{MI} a nivel alto; α_{APRE} a nivel alto; λ_T a nivel alto y λ_E a nivel bajo. En un principio cabría esperar que el nivel óptimo de las constantes de ponderación de los errores de la variable controlada *APRE*, α_{APRE} fuera justamente el contrario, sin embargo, ello no es así por el efecto de las interacciones. El valor predicho en estas condiciones es *MAX_INCT*= 0,007.

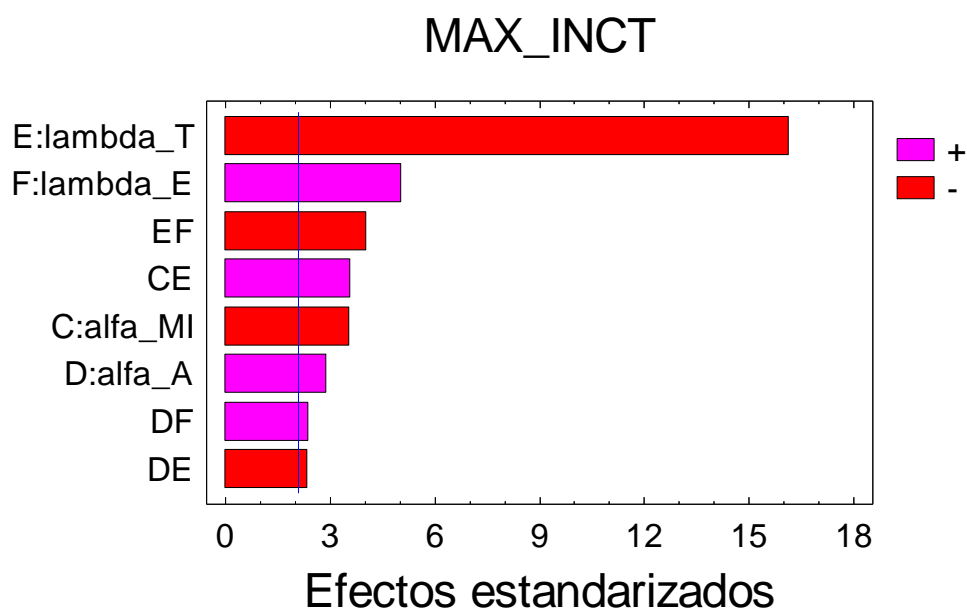


Figura 5.22 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre *MAX_INCT*. La línea vertical señala el límite de significación (valor- $p < 0.05$).

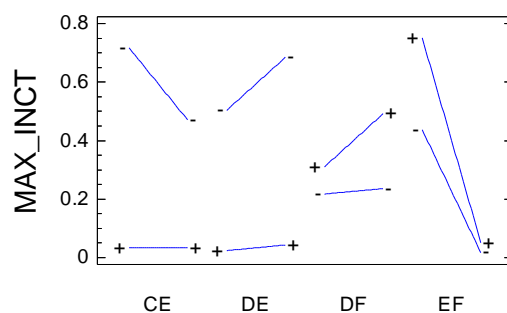


Figura 5.23 Gráfico de las interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) entre los distintos factores simples. C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas *MI* y *APRE* respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.

El análisis de residuos, se muestra gráficamente a continuación en las figuras 5.24 y 5.25. En el mismo podemos observar que la varianza residual es mayor en aquellas pruebas en las que la constante de ponderación de los esfuerzos de control de la temperatura ha estado a nivel bajo (16 primeras pruebas). Ello probablemente se deba a un fenómeno de escala, ya que en estas pruebas el *MAX_INCT* también ha sido mayor debido

a que el movimiento de la temperatura no ha estado restringido. Esta falta de homocedasticidad tendría que tenerse en cuenta a la hora de predecir la varianza en las condiciones operativas óptimas para esta variable respuesta. Por otro lado, los residuos se distribuyen de forma aproximadamente normal. Concluimos de este análisis de residuos, que el modelo estimado nos va ser útil. En la tabla 5.14 se muestran los valores del coeficiente R^2 , el Q^2 y de la desviación típica residual $\hat{\sigma}$ del modelo.

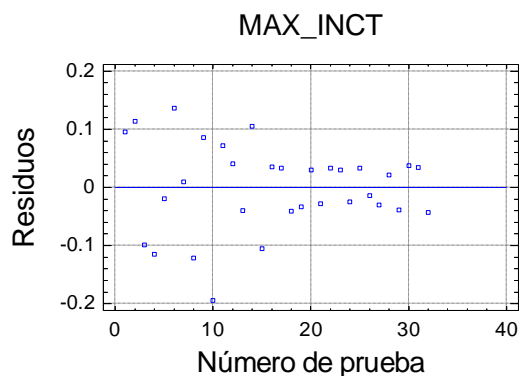


Figura 5.24 Residuos del modelo ajustado para MAX_INCT en función del número de la prueba del diseño.

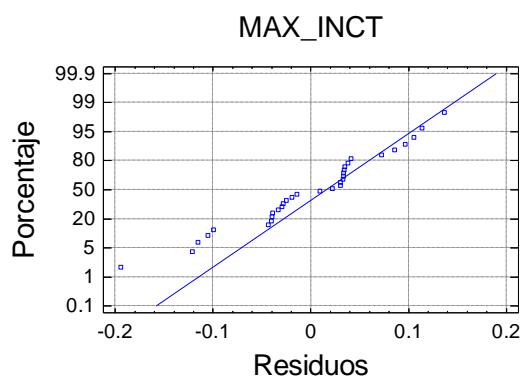


Figura 5.25 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para MAX_INCT .

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.94	0.88	0.098

Tabla 5.14 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para MAX_INCT .

Varianza del Incremento de la *TEMPERATURA*

Según podemos observar en la tabla 5.15 y en las figuras 5.26 y 5.27, los efectos significativos (valor- $p < 0.05$) sobre la **Varianza del Incremento de la Temperatura**, en adelante *VAR_INCT* son exactamente los mismos y del mismo signo que los comentados para la variable anterior **Máximo Incremento de la Temperatura**. Ello es debido, a que ambas variables están relacionadas. Por lo tanto las interpretaciones comentadas en el apartado anterior son válidas también para esta variable respuesta. Las condiciones operativas óptimas para minimizar el *VAR_INCT* son las mismas que para la anterior variable respuesta *MAX_INCT*. En un principio cabría esperar que el nivel óptimo de α_{APRE} fuera el nivel bajo, sin embargo ello no es así por el efecto de las interacciones. El valor predicho en estas condiciones es *VAR_INCT*= 0.

Factores	Efectos
Media	0.0157 +/- 0.0012
C:alfa_MI	-0.0076 +/- 0.0024
D:alfa_A	0.0066 +/- 0.0024
E:lambda_T	-0.0310 +/- 0.0024
F:lambda_E	0.0116 +/- 0.0024
CE	0.0076 +/- 0.0024
DE	-0.0063 +/- 0.0024
DF	0.0058 +/- 0.0024
EF	-0.0112 +/- 0.0024

Tabla 5.15 Efectos estimados significativos (valor- $p < 0.05$) de los factores sobre la **Varianza del Incremento de la Temperatura**, acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.

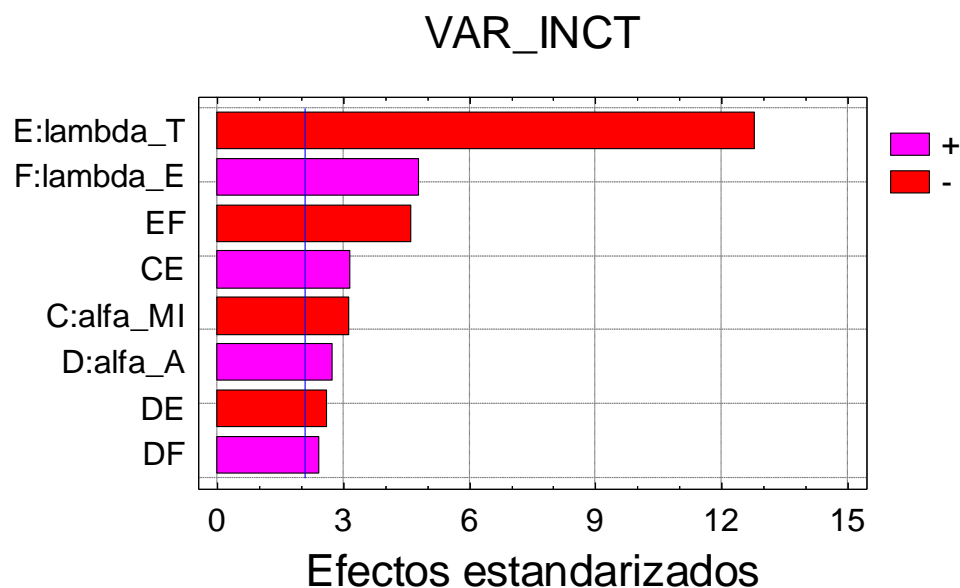


Figura 5.26 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre *VAR_INCT*. La línea vertical señala el límite de significación (valor- $p < 0.05$).

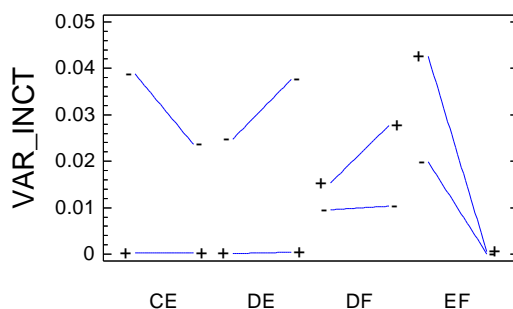


Figura 5.27 Gráfico de las interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) entre los distintos factores simples. C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas *MI* y *APRE* respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.

En las figuras 5.28 y 5.29 se muestran las representaciones gráficas de los residuos del modelo. De nuevo podemos observar una mayor varianza residual en aquellas pruebas en las que la constante de ponderación de los esfuerzos de control de la temperatura ha estado a nivel bajo. Por otro lado, los residuos se distribuyen de forma aproximadamente normal. En la tabla 5.16 se indican los valores del coeficiente R^2 , el Q^2 y de la desviación típica residual $\hat{\sigma}$ del modelo

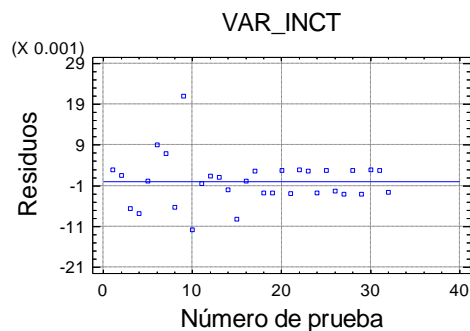


Figura 5.28 Residuos del modelo ajustado para VAR_INCT en función del número de la prueba del diseño.

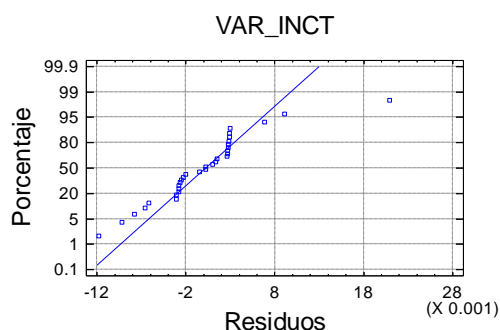


Figura 5.29 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para VAR_INCT .

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.92	0.84	0.007

Tabla 5.16 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para VAR_INCT .

Incremento Medio de la *TEMPERATURA*

Los resultados del experimento factorial para la variable respuesta **Incremento Medio de la Temperatura**, en adelante MED_INCT , se muestran en la tabla 5.17 y en las figuras 5.30 y 5.31. Además de los efectos que han sido significativos (valor- $p < 0.05$) para las dos variables respuesta anteriores, sobre MED_INCT también influye la interacción entre el Horizonte de Predicción HP y λ_T , razón por la cual se ha retenido como significativo el factor simple HP , pese a no haber salido como tal en el análisis.

Factores	Efectos
Media	0.0678 +/- 0.0014
A:HP	0.0011 +/- 0.0027
C:alfa_MI	-0.0080 +/- 0.0027
D:alfa_A	0.0111 +/- 0.0027
E:lambda_T	-0.1126 +/- 0.0027
F:lambda_E	0.0224 +/- 0.0027
AE	0.0062 +/- 0.0027
CE	0.0116 +/- 0.0027
DE	-0.0056 +/- 0.0027
DF	0.0092 +/- 0.0027
EF	-0.0112 +/- 0.0027

Tabla 5.17 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la **Media del Incremento de la Temperatura**, acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.

Los signos de estos efectos e interacciones, así como sus interpretaciones son también los mismos que para las variables respuesta anteriores. Hay que tener en cuenta que esta variable respuesta, pese a ser un promedio del **Incremento de la Temperatura**, refleja también la variabilidad de la variable manipulada temperatura, puesto que dicho incremento está medido en valor absoluto. Tal como podemos observar en la figura 5.31 (interacción AE) el efecto del *HP* es diferente según que λ_T esté a nivel bajo (efecto negativo) o a nivel alto (efecto positivo). Las condiciones operativas óptimas para minimizar el *MED_INCT* son las siguientes: *HP* a nivel bajo; α_{MI} a nivel alto; α_{APRE} a nivel alto; λ_T a nivel alto y λ_E a nivel bajo. En un principio cabría esperar que el nivel óptimo de la constantes α_{MI} y α_{APRE} fueran los niveles bajos, sin embargo ello no es así por el efecto de las interacciones. El valor predicho en estas condiciones es *MED_INCT*= 0.004.

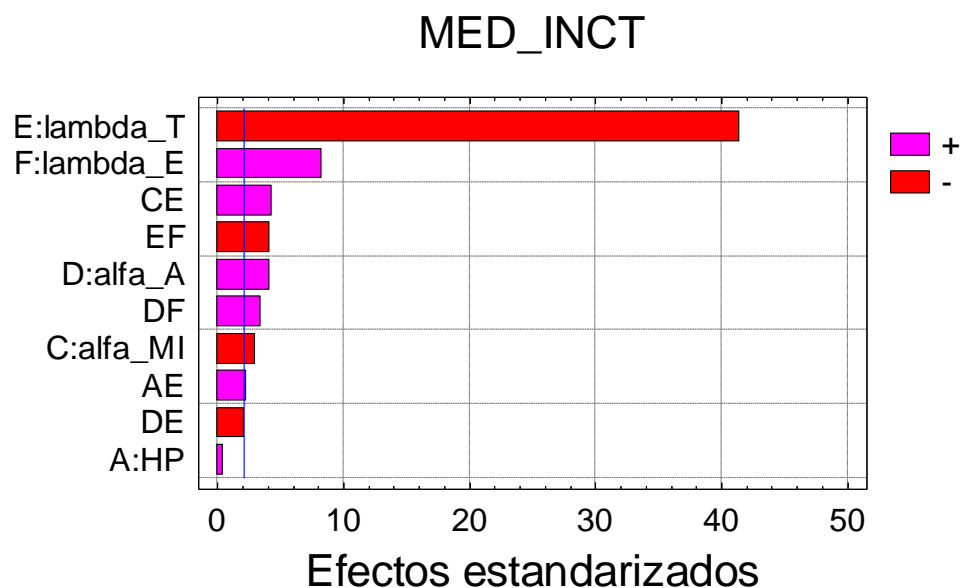


Figura 5.30 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre *MED_INCT*. La línea vertical señala el límite de significación (valor- $p < 0.05$).

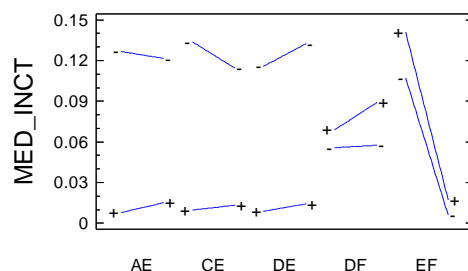


Figura 5.31 Gráfico de las interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) entre los distintos factores simples. A: HP, es el Horizonte de Predicción; C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas *MI* y *APRE* respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.

Si hacemos el estudio de los residuos del modelo, representados gráficamente en las figuras 5.32 y 5.33 podemos de nuevo observar una mayor varianza residual en las pruebas en las que la constante de la ponderación del esfuerzo de control de la temperatura λ_T ha estado a nivel bajo (primeras 16 pruebas) y que los residuos se distribuyen aproximadamente según una distribución normal.

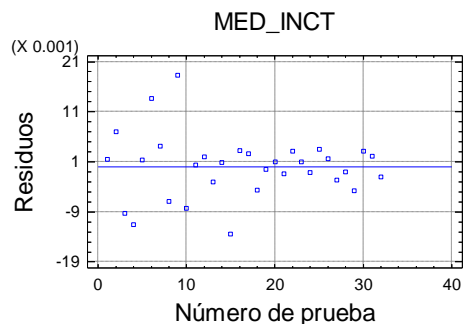


Figura 5.32 Residuos del modelo ajustado para *MED_INCT* en función del número de la prueba del diseño.

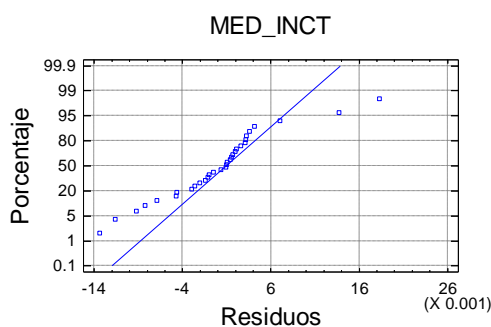


Figura 5.33 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para *MED_INCT*.

Los coeficientes R^2 y Q^2 , y la desviación típica residual $\hat{\sigma}$ del modelo ajustado para *MED_INCT* se recogen en la tabla 5.18. Como se ve la bondad del ajuste en este modelo es muy alta, deduciéndose de ello que la variabilidad constatada en *MED_INCT* queda explicada prácticamente en su totalidad por los factores considerados en el estudio.

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.99	0.97	0.008

Tabla 5.18 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para *MED_INCT*.

Máximo Incremento del Caudal de *ETILENO*.

A continuación en la tabla 5.19 y en las figuras 5.34 y 5.35 se muestran los resultados obtenidos para la variable respuesta **Máximo Incremento del Caudal de Etileno**, en adelante *MAX_INCE*. El efecto simple de mayor magnitud significativo (valor-p < 0.05) es

la constante de ponderación del esfuerzo de control del caudal de etileno λ_E que tiene un efecto lógicamente negativo, puesto que al restringir el movimiento del caudal de etileno disminuye su incremento máximo. También la constante de ponderación del esfuerzo de control de la temperatura λ_T influye sobre esta variable, aunque su efecto es de mucha menor magnitud y de signo contrario, puesto que si se limita el movimiento de control de la temperatura, repercute en un mayor movimiento de control del caudal de etileno para satisfacer las necesidades de control.

Factores	Efectos
Media	0.4648 +/- 0.0129
A:HP	0.1201 +/- 0.0257
B:HC	-0.0873 +/- 0.0257
C:alfa_MI	0.0212 +/- 0.0257
D:alfa_A	0.1353 +/- 0.0257
E:lambda_T	0.1573 +/- 0.0257
F:lambda_E	-0.8639 +/- 0.0257
AE	-0.0542 +/- 0.0257
AF	-0.0982 +/- 0.0257
BF	0.0851 +/- 0.0257
CE	-0.0652 +/- 0.0257
DF	-0.1121 +/- 0.0257
EF	-0.1318 +/- 0.0257

Tabla 5.19 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la **Máximo Incremento del Caudal de Etileno**, acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.

La constante de ponderación de los errores del *APRE* tiene un efecto positivo, puesto que si se le pide al controlador que reduzca las desviaciones respecto al nominal del *APRE*, tenderá a incrementar el movimiento del caudal de etileno y en consecuencia su valor máximo. El horizonte de predicción *HP* y el de control *HC* en este caso sí que tienen influencia sobre el incremento máximo del caudal de etileno, el primero tiene un efecto positivo. Si las predicciones se hacen a más largo plazo aumenta el máximo incremento del caudal de etileno, ya que seguramente se detecten mayores necesidades de movimientos de control, ocurriendo lo contrario con el horizonte de control *HC* que a medida que aumenta,

el sistema puede repartir en más periodos los movimientos de control necesarios para la consecución del objetivo y por lo tanto el movimiento del caudal de etileno tiende a ser menor. Por último se ha tenido en cuenta la constante de ponderación de los errores del MI , pese a no ser significativo, por intervenir en la interacción que se da entre α_{MI} y λ_T , teniendo un efecto positivo.

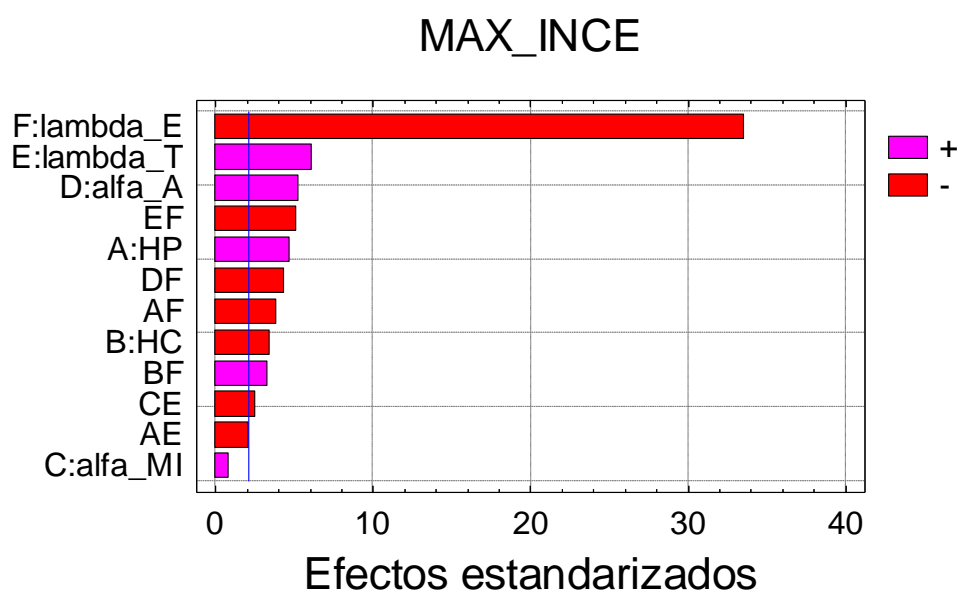


Figura 5.34 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre MAX_INCE . La línea vertical señala el límite de significación (valor- $p < 0.05$).

En este caso se presentan bastantes interacciones (ver figura 5.35), entre ellas, la más importante es la que se produce entre las dos constantes de ponderación de los esfuerzos de control λ_T y λ_E . Como ya se ha indicado, el efecto que tiene la limitación del esfuerzo de control de la temperatura sobre MAX_INCE es positivo, pero mucho más acusado si se permite un mayor movimiento al caudal de etileno, por lo tanto sus efectos contrapuestos se refuerzan entre sí. Desde este punto de vista si se pretende minimizar el MAX_INCE , el esfuerzo de control debe recaer en mayor medida sobre la variable manipulada temperatura. Del mismo modo se pueden interpretar las interacciones existentes entre α_{APRE} y λ_E y entre el horizonte de control HP y λ_E , que son las siguientes por orden de importancia. Tal como ya se ha comentado tanto α_{APRE} , como HP tienen un efecto positivo, pero éste es de mayor magnitud si no está limitado el movimiento del caudal de etileno. De menor magnitud pero existentes son las interacciones entre HC y λ_E , entre α_{MI} y λ_T y entre esta última y HP . De la primera, se puede interpretar que tal como se

ha visto, el horizonte de control HC tiene un efecto negativo sobre MAX_INCE , pero únicamente cuando se mueve con mayor libertad el caudal de etileno, al cual le reduce su incremento máximo, de lo contrario cuando éste último ya tiene reducido su movimiento por el efecto de λ_E a nivel alto, no tiene efecto. Las condiciones operativas óptimas para minimizar el MAX_INCE son las siguientes: HP a nivel bajo; HC a nivel alto; α_MI a nivel bajo; α_APRE a nivel bajo; λ_T a nivel bajo y λ_E a nivel alto. El valor predicho en estas condiciones es $MAX_INCE= 0.003$.

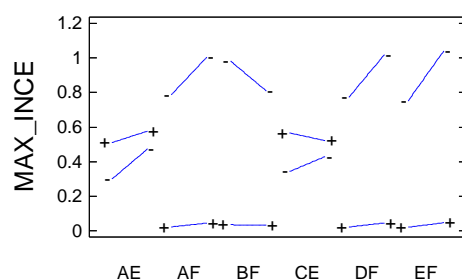


Figura 5.35 Gráfico de las interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) entre los distintos factores simples. A: HP , es el Horizonte de Predicción; B: HC es el Horizonte de Control; C: α_MI y D: α_APRE son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas MI y $APRE$ respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.

En la figuras 5.36 y 5.37 se representan gráficamente los residuos del modelo. Si se analizan los mismos, vemos que no existe ninguna indicación de la inadecuación del modelo ajustado, del cual se recogen os coeficientes R^2 y Q^2 , y la desviación típica residual $\hat{\sigma}$, en la tabla 5.20. En este caso también se constata una bondad del ajuste muy elevada.

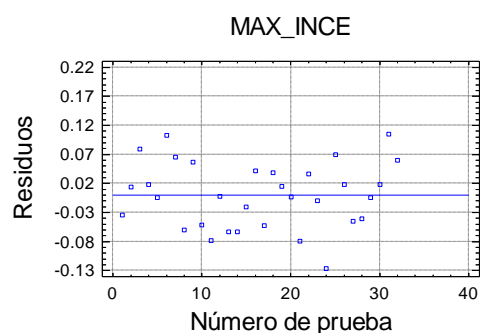


Figura 5.36 Residuos del modelo ajustado para MAX_INCE en función del número de la prueba del diseño.

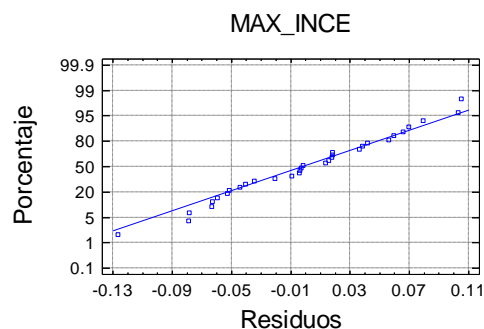


Figura 5.37 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para *MAX_INCE*.

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.99	0.96	0.073

Tabla 5.20 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para *MAX_INCE*.

Varianza del Incremento del Caudal de ETILENO.

Tal como se refleja en la tabla 5.21 y en las figuras 5.38 y 5.39, los efectos significativos (valor- $p < 0.05$) sobre la **Varianza del Incremento del Caudal de Etileno**, en adelante *VAR_INCE* son exactamente los mismos y del mismo signo que los comentados para la variable anterior **Máximo Incremento del Caudal de Etileno**. Sin embargo la importancia relativa de cada uno de ellos es distinta a la que tienen para dicha variable respuesta. Estas similitudes entre modelos se deben a que ambas variables están relacionadas. Por lo tanto las interpretaciones comentadas en el apartado anterior son válidas también para esta variable respuesta, a excepción del orden de importancia de algunos efectos simples e interacciones dobles.

Como en el caso anterior el efecto simple más importante es la constante de ponderación del esfuerzo de control del caudal de etileno λ_E , siendo su efecto negativo. Los efectos que sobre varianza de *E* tienen *HP* y *HC* son similares a los encontrados para la variable anterior, así como también influyen α_{APRE} y λ_T , con signo positivo. Como en el caso anterior se ha retenido el efecto simple α_{MI} , por intervenir en la interacción significativa entre α_{MI} y λ_T . Las interacciones en este caso más relevantes se dan entre *HP* y λ_E y entre α_{APRE} y λ_E . Ambas tienen la misma interpretación (ver figura 5.39),

si el caudal de etileno no tiene limitado su movimiento HP y α_{APRE} tienen efecto positivo sobre VAR_{INCE} , sin embargo no tienen efecto si dicho movimiento está limitado. En este caso, aunque se le exija más al controlador no aumenta VAR_{INCE} . Del mismo modo se interpreta la interacción entre el horizonte de control HC y λ_E . Si el caudal de etileno se mueve libremente el HC , tiene un efecto negativo, sin embargo no tiene efecto si dicho movimiento está limitado. Como ocurre con el resto de las variables respuesta anteriores existe interacción entre las dos constantes de ponderación del esfuerzo de control λ_T y λ_E . Dicha interacción consiste en que λ_T tiene un efecto positivo si λ_E está a nivel bajo, sin embargo como en las interacciones comentadas hasta ahora, no tiene efecto si λ_E está a nivel alto. Por último son también significativas las interacciones entre HP y λ_T y entre α_{MI} y λ_T , cuyos efectos son los mismos que los comentados en la anterior variable respuesta MAX_{INCE} . Las condiciones operativas óptimas para minimizar el VAR_{INCE} son las mismas que para la variable anterior MAX_{INCE} . El valor predicho en estas condiciones es $VAR_{INCE}=0$.

Factores	Efectos
Media	0.0336 +/- 0.0015
A:HP	0.0143 +/- 0.0031
B:HC	-0.0102 +/- 0.0031
C:alfa_MI	0.0031 +/- 0.0031
D:alfa_A	0.0142 +/- 0.0031
E:lambda_T	0.0095 +/- 0.0031
F:lambda_E	-0.0669 +/- 0.0031
AE	-0.0077 +/- 0.0031
AF	-0.0141 +/- 0.0031
BF	0.0101 +/- 0.0031
CE	-0.0072 +/- 0.0031
DF	-0.0140 +/- 0.0031
EF	-0.0093 +/- 0.0031

Tabla 5.21 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la **Varianza del Incremento del Caudal de Etileno**, acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.

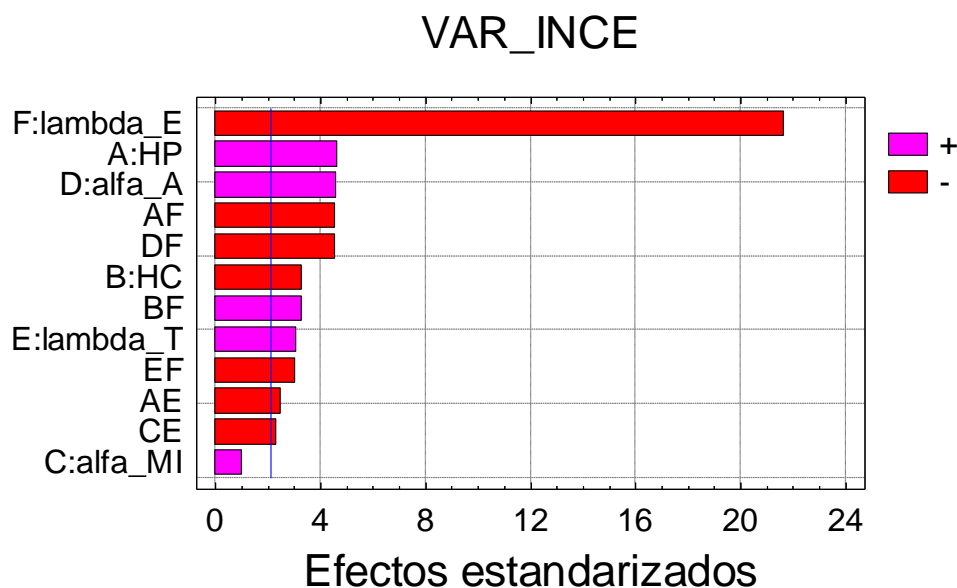


Figura 5.38 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre *VAR_INCE*. La línea vertical señala el límite de significación (valor- $p < 0.05$).

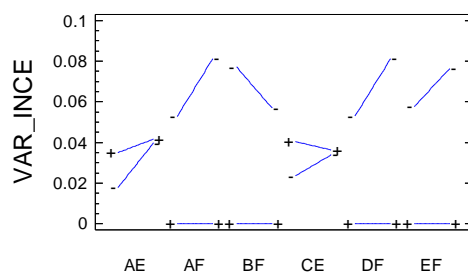


Figura 5.39 Gráfico de las interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) entre los distintos factores simples. A:HP, es el Horizonte de Predicción; B:HC es el Horizonte de Control; C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas MI y APRE respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.

El análisis de residuos, se muestra gráficamente a continuación en las figuras 5.40 y 5.41. No se observa ningún residuo anómalo y los residuos se distribuyen normalmente. Concluimos de este análisis, que el modelo estimado es adecuado. En la tabla 5.22 se muestran los coeficientes R^2 y Q^2 , y la desviación típica residual $\hat{\sigma}$ estimada del ajustado, indicándonos que la bondad del ajuste es muy alta.

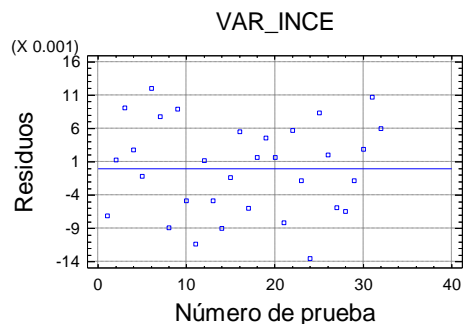


Figura 5.40 Residuos del modelo ajustado para *VAR_INCE* en función del número de la prueba del diseño.

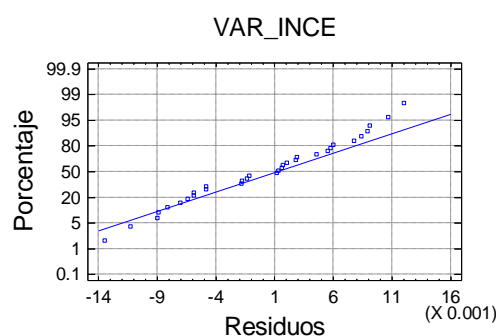


Figura 5.41 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para *VAR_INCE*.

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.97	0.91	0.009

Tabla 5.22 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para *VAR_INCE*.

Media del Incremento del Caudal de *ETILENO*.

En la tabla 5.23 y en las figuras 5.42 y 5.43, se pueden ver los efectos significativos (valor- $p < 0.05$) sobre la **Media del Incremento del Caudal de Etileno**, en adelante *MED_INCE*. Éstos coinciden con los encontrados en las variables anteriores *MAX_INCE* y *VAR_INCE*, tanto en que influyen sobre *MED_INCE* como de qué manera influyen, es decir en sus respectivos signos. Sin embargo el orden de importancia de la magnitud de cada uno de ellos es distinto, aunque los tres modelos ajustados son similares. Estas similitudes entre modelos se deben a que estas variables están relacionadas. Por lo tanto las

interpretaciones comentadas en los apartados anteriores son válidas también para esta variable respuesta, a excepción del orden de importancia de algunos efectos simples e interacciones dobles.

Factores	Efectos
Media	0.0913 +/- 0.0021
A:HP	0.0214 +/- 0.0042
B:HC	-0.0123 +/- 0.0042
C:alfa_MI	0.0052 +/- 0.0042
D:alfa_A	0.0194 +/- 0.0042
E:lambda_T	0.0124 +/- 0.0042
F:lambda_E	-0.1671 +/- 0.0042
AE	-0.0131 +/- 0.0042
AF	-0.0165 +/- 0.0042
BF	0.0117 +/- 0.0042
CE	-0.0104 +/- 0.0042
DF	-0.0140 +/- 0.0042

Tabla 5.23 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la **Media del Incremento del Caudal de Etileno**, acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.

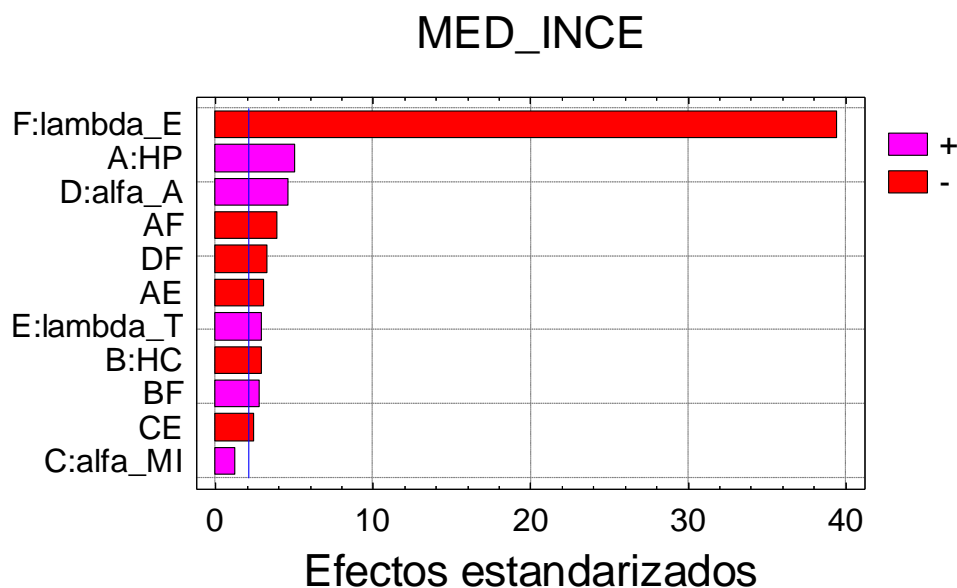


Figura 5.42 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre *MED_INCE*. La línea vertical señala el límite de significación (valor- $p < 0.05$).

Como en los dos casos anteriores el efecto simple más importante es la constante de ponderación del esfuerzo de control del caudal de etileno λ_E , siendo su efecto negativo. Los siguientes factores que influyen significativamente por orden de importancia son, el horizonte de predicción *HP* y la constante de ponderación de los errores α_{APRE} , ambos con signo positivo, la constante de ponderación del esfuerzo de control λ_T , con signo positivo y el horizonte de control *HC* con efecto negativo. Como en los dos casos anteriores se ha retenido el efecto simple α_{MI} , cuyo signo es positivo, por formar parte en una interacción significativa, que es la existente entre α_{MI} y λ_T .

La representación gráfica de las interacciones la podemos observar en la figura 5.43. En dicha representación se constata la gran similitud de estas interacciones con las encontradas para la variable *MAX_INCE* (ver figura 5.35) y *VAR_INCE* (ver figura 5.39) ya comentadas. Se encuentran únicamente pequeñas diferencias, entre ellas, la más importante es que para esta variable la interacción λ_T y λ_E no es significativa.

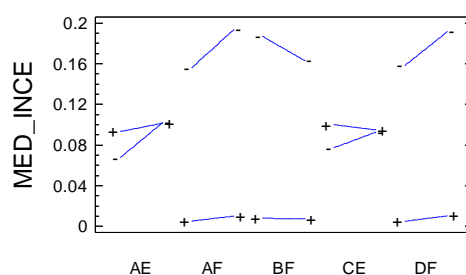


Figura 5.43 Gráfico de las interacciones significativas (valor- $p < 0.05$) entre los distintos factores simples. A: HP , es el Horizonte de Predicción; B: HC es el Horizonte de Control; C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas MI y $APRE$ respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.

Las condiciones operativas óptimas para minimizar la MED_INCE son las mismas que para las dos variables anteriores MAX_INCE y VAR_INCE . El valor predicho en estas condiciones es $MED_INCE = 0$.

Las figuras 5.44 y 5.45, muestran gráficamente el análisis de residuos del modelo ajustado para esta variable MED_INCE . No se observa ningún residuo anómalo y los residuos se distribuyen normalmente. Concluimos de este análisis, que el modelo estimado es adecuado. En la tabla 5.24 se muestran los coeficientes R^2 y Q^2 , y la desviación típica residual del modelo.

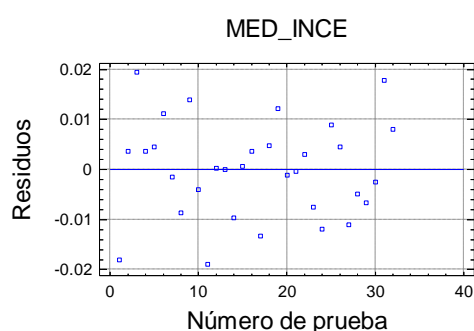


Figura 5.44 Residuos del modelo ajustado para MED_INCE en función del número de la prueba del diseño.

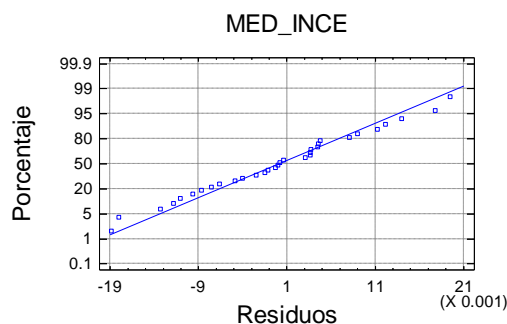


Figura 5.45 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para *MED_INCE*.

R^2	Q^2	$\hat{\sigma}$
0.99	0.97	0.012

Tabla 5.24 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para *MED_INCE*.

5.5 CONCLUSIONES ANOVA (MLR)

En el experimento analizado se ha estudiado el posible efecto de los parámetros de diseño del controlador DMC en las variables de rendimiento del control automático. Dicho controlador ha sido implementado como parte del sistema de control integrado de un proceso de polimerización de naturaleza multivariante. El objetivo del estudio ha sido encontrar las condiciones operativas óptimas para los parámetros de diseño del controlador. Los factores estudiados, así como las variables respuesta se pueden consultar en las tablas 5.2 y 5.1 respectivamente.

El efecto de la constante de la ponderación de los esfuerzos de control del caudal de etileno λ_E , tiene para todas las variables respuesta un efecto positivo, lo que quiere decir que si disminuye el movimiento del caudal de etileno, aumenta mucho la variabilidad de todas las variables respuesta, lo que no es deseable para el rendimiento del control, a excepción lógicamente de las relacionadas con la propia variabilidad del caudal de etileno que sí que disminuye. Por otro lado, la constante de ponderación de los esfuerzos de control de la temperatura λ_T , tiene también en todos los casos el mismo efecto positivo, salvo en aquellas variables relacionadas con la variabilidad de la temperatura, pero en relación al efecto anterior, es menor, lo que quiere decir que la temperatura aunque se

mueva poco es más capaz de reducir la variación de las variables de salida y mantenerlas alrededor de su valor objetivo.

Las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas (MI y $APRE$) α_{MI} y α_{APRE} , influyen también sobre todas las variables de rendimiento del sistema de control. Como era de esperar, a medida que se exige que sea menor el error en el MI , se reduce la variabilidad del MI y aumenta la del $APRE$. Al contrario ocurre con la variable controlada $APRE$. En relación a las respuestas referidas a los movimientos de control de las variables manipuladas T y E , los signos de los efectos de los factores α_{MI} y α_{APRE} son en todos los casos positivos, es decir si se pretende reducir la variabilidad de las variables de salida MI y $APRE$, dicha variabilidad se transmite a las variables manipuladas. Una excepción es el efecto de α_{MI} sobre la variabilidad de la temperatura, para la cual es negativo. Ello puede ser debido a la capacidad que tiene la temperatura de controlar el MI que hace que aunque se desee reducir más el error del MI , el movimiento de la temperatura sea más suave.

Los Horizontes de Predicción HP y de Control HC , no influyen sobre las variables respuesta relacionadas con los errores de las variables controladas MI y $APRE$, ni sobre las variables referidas a los movimientos de control de la temperatura T , sin embargo sí que tienen efecto sobre la variabilidad del caudal de etileno E . Si las predicciones se hacen a más largo plazo aumenta la variabilidad de E , ya que seguramente se detecten mayores necesidades de movimientos de control, ocurriendo lo contrario con el horizonte de control HC , ya que a mayor horizonte de control, el sistema puede repartir en más periodos los movimientos de control necesarios para la consecución del objetivo y por lo tanto en cada periodo de tiempo el movimiento del caudal de etileno tiende a ser más suave. Poniendo unos límites adecuados a la longitud de estos horizontes, se consigue un controlador más robusto, capaz de manejar las restricciones.

En general una de las interacciones más importantes para todas las variables estudiadas es la existente entre las dos constantes de ponderación de los esfuerzos de control λ_T y λ_E . Existe para todas las variables respuesta, a excepción de la variable MED_{INCE} . Las interacciones entre α_{APRE} y λ_E y α_{MI} y λ_T también son importantes y se dan en todas las variables respuesta. Algunas interacciones sólo se dan en grupos de variables relacionadas entre sí, como por ejemplo la interacción entre α_{APRE} y λ_T que es significativa únicamente en las variables referidas a la temperatura o las que se

dan entre HP y λ_T ; HP y λ_E y entre HC y λ_E que sólo aparecen en las variables relacionadas con el caudal de etileno.

En la tabla 5.25 se recogen las condiciones operativas óptimas de sintonizado del controlador DMC que minimizan la variabilidad de las variables controladas y que por lo tanto maximizan el rendimiento del controlador. Se concluye que las condiciones operativas óptimas desde el punto de vista de minimizar las variables ECM_{MI} y VAR_{MI} es mantener el nivel bajo de las constantes del esfuerzo de control λ_T y λ_E , el nivel alto de la constante de ponderación de errores α_{MI} y el nivel bajo de α_{APRE} . Mientras que para minimizar las variables ECM_{APRE} y VAR_{APRE} son, mantener el nivel bajo los cuatro factores λ_T y λ_E α_{MI} α_{APRE} que han salido significativos. Pese a que cabría esperar que para estas variable respuesta la condición óptima para la constante de ponderación de los errores α_{APRE} fuese su nivel alto, ello no es así debido al efecto de las interacciones. De no haberse realizado el diseño de experimentos, no se habrían identificado las interacciones, y no se habrían tenido en cuenta en el sintonizado del controlador. Se habría elegido como óptimo el α_{APRE} a nivel alto. A menudo ocurre que las interacciones entre factores ejercen un efecto más importante que los efectos de cada factor individualmente. No influyen como se ha visto ni el HC , ni el HP , probablemente porque el proceso no tenga inercia en las variables de salida.

En la tabla 5.26 se tienen las condiciones operativas óptimas que minimizan la variación en la variable manipulada T . Para disminuir dicha variación lógicamente se debe aumentar el factor de penalización λ_T y disminuir el factor de ponderación del error α_{MI} , lo que resulta contrapuesto a las condiciones exigidas para mejorar el rendimiento de control. λ_E puede reducirse puesto que se trata de la temperatura y α_{APRE} debe estar alto. En un principio cabría esperar que el nivel óptimo de α_{APRE} fuera justamente el opuesto, sin embargo ello no es así por el efecto de las interacciones, ya que aunque se penalice más el error de $APRE$ en la función objetivo del controlador, la variación en la temperatura se minimiza.

También en la tabla 5.26 se tienen las condiciones operativas óptimas referidas a la variación en la variable manipulada E . El horizonte de predicción HP que debe ser 2 períodos, el mínimo de los probados y el de control HC , también debe ser 2 que es el más alto de los probados (ver tabla 5.3), del mismo orden que la inercia de esta variable de entrada en el modelo del proceso (ecuaciones 4.80 y 4.81). De esta forma se suaviza el movimiento de control del caudal de etileno. Las condiciones óptimas para las constantes

de ponderación de los errores deben de ser lo más bajas posibles, al igual que la constante λ_T y lógicamente λ_E a nivel alto para que se restrinja el movimiento del caudal de etileno.

<i>ECM_MI</i>	<i>VAR_MI</i>	<i>ECM_APRE</i>	<i>VAR_APRE</i>
$\alpha_{MI}^+ \alpha_{APRE}^-$ $\lambda_T^- \lambda_E^-$	$\alpha_{MI}^+ \alpha_{APRE}^-$ $\lambda_T^- \lambda_E^-$	$\alpha_{MI}^- \alpha_{APRE}^-$ $\lambda_T^- \lambda_E^-$	$\alpha_{MI}^- \alpha_{APRE}^-$ $\lambda_T^- \lambda_E^-$

Tabla 5.25 Condiciones operativas óptimas de los parámetros de diseño del controlador DMC para minimizar *ECM_MI* *VAR_MI* *ECM_APRE* *VAR_APRE*. Los signos: - (nivel bajo) y + (nivel alto) indican los niveles óptimos de los factores controlados (tabla 5.3).

<i>MAX_INCT</i>	<i>VAR_INCT</i>	<i>MED_INCT</i>
$\alpha_{MI}^+ \alpha_{APRE}^+$ $\lambda_T^+ \lambda_E^-$	$\alpha_{MI}^+ \alpha_{APRE}^+$ $\lambda_T^+ \lambda_E^-$	$HP^- \alpha_{MI}^+ \alpha_{APRE}^+$ $\lambda_T^+ \lambda_E^-$
<i>MAX_INCE</i>	<i>VAR_INCE</i>	<i>MED_INCE</i>
$HP^- HC^+$ $\alpha_{MI}^- \alpha_{APRE}^-$ $\lambda_T^- \lambda_E^+$	$HP^- HC^+$ $\alpha_{MI}^- \alpha_{APRE}^-$ $\lambda_T^- \lambda_E^+$	$HP^- HC^+$ $\alpha_{MI}^- \alpha_{APRE}^-$ $\lambda_T^- \lambda_E^+$

Tabla 5.26 Condiciones operativas óptimas de los parámetros de diseño del controlador DMC para las variables respuesta relacionadas con la dispersión de las variables manipuladas *T* y *E*. Los signos: - (nivel bajo) y + (nivel alto) indican los niveles óptimos de los factores controlados (tabla 5.3).

Debido a que se requiere optimizar varias variables respuesta simultáneamente, es difícil identificar un conjunto de condiciones operativas óptimas de los parámetros de diseño del controlador DMC, para las cuales se alcancen los objetivos deseados para todas ellas, que en este caso es minimizarlas. Si la optimización de dos o más respuestas experimentales presenta situaciones conflictivas, se tendrá un conjunto de soluciones que reflejarán un compromiso entre objetivos contradictorios, para el conjunto de factores controlados. Según se ha descrito, el elegir un determinado nivel de un factor puede permitir la minimización de algunas variables, pero eso conlleva la maximización de otras. Véase por ejemplo el factor controlado λ_E . Si se elige su nivel bajo, se minimizarán las variables *ECM_MI* y *VAR_MI*; *ECM_APRE* y *VAR_APRE*; *MAX_INCT*; *VAR_INCT* y

MED_INCT, pero ello implica la maximización de *MAX_INCE*; *VAR_INCE* y *MED_INCE*.

En las tablas 5.27 y 5.28 se muestran los coeficientes de determinación R^2 , el ajustado R_{adj}^2 y el coeficiente de predicción Q^2 de las respuestas relacionadas con las variables controladas y manipuladas. Las bondades de ajuste R^2 y R_{adj}^2 son excelentes para todos los modelos estimados, salvo para las variables *ECM_APRE* y *VAR_APRE* para las que son algo más bajos. Se puede observar que los R^2 y R_{adj}^2 son más altos para las respuestas relacionadas con las variables manipuladas. De todo esto se deduce que la variabilidad constatada en las distintas respuestas experimentales queda explicada en un alto porcentaje, por los parámetros de diseño del controlador DMC e interacciones que han salido significativos y que explican algo mejor aquellas respuestas relacionadas con las variables manipuladas. Por otro lado, las bondades de predicción también son muy elevadas, aunque como ocurre con la bondad de ajuste para *ECM_APRE* y *VAR_APRE*, Q^2 es menor. También es relevante el hecho de que las diferencias ($R^2 - Q^2$) son muy reducidas, oscilando entre 0.01 y 0.22, lo que nos indica la validez de los modelos. Ello tiene como consecuencia que las desviaciones típicas residuales sean de pequeña magnitud. Por otro lado los análisis de los residuos resultantes de los diferentes ajustes no indican anomalías. Todo ello indica la adecuada elección del diseño experimental y la validez de los modelos obtenidos.

	R^2	R_{adj}^2	Q^2
<i>ECM_MI</i>	0.91	0.87	0.82
<i>VAR_MI</i>	0.92	0.89	0.84
<i>ECM_APRE</i>	0.75	0.68	0.56
<i>VAR_APRE</i>	0.72	0.63	0.50

Tabla 5.27 Medidas de bondad de ajuste R^2 , R_{adj}^2 y de bondad de predicción Q^2 para las repuestas relacionadas con las variables controladas.

	R^2	R^2_{adj}	Q^2
<i>MAX_INCT</i>	0.94	0.92	0.88
<i>VAR_INCT</i>	0.92	0.87	0.84
<i>MED_INCT</i>	0.99	0.98	0.97
<i>MAX_INCE</i>	0.99	0.98	0.96
<i>VAR_INCE</i>	0.97	0.95	0.91
<i>MED_INCE</i>	0.99	0.98	0.97

Tabla 5.28 Medidas de bondad de ajuste R^2 , R^2_{adj} y de bondad de predicción Q^2 para las repuestas relacionadas con las variables manipuladas.

5.6 METODOLOGÍA PLS PARA LA IDENTIFICACIÓN DEL MODELO

5.6.1 Introducción

Cuando en un diseño experimental se han medido varias repuestas, resulta de utilidad ajustar un modelo único que represente cómo varían todas estas repuestas simultáneamente como reacción a la variación de los factores en la región experimental estudiada (Eriksson *et al.* 1999). El método de regresión PLS permite obtener un modelo para cada respuesta independientemente (PLS1) o ajustar todas las repuestas simultáneamente (PLS2) teniendo en cuenta la estructura de covarianzas entre ellas. En general cuanto más correlación exista entre las variables respuesta, mejor es el funcionamiento del PLS2 con respecto al PLS1 en términos de precisión de las predicciones e interpretación de los resultados. De aquí que se puede usar para la evaluación de datos complejos procedentes de diseños experimentales. También es posible usarlo para analizar datos que no proceden de diseños experimentales.

5.6.2 Algoritmo NIPALS: Cálculo de las componentes PLS

El cálculo de las t_a ($a=1, 2, \dots, A$) componentes se lleva a cabo de forma iterativa como se expone a continuación. La primera variable latente t_1 es una combinación lineal de las variables originales \mathbf{x} que maximiza la covarianza entre las matrices \mathbf{X} e \mathbf{Y} , cuya expresión matemática es $\mathbf{t}_1 = \mathbf{w}_1^T \mathbf{x}$, siendo \mathbf{w}_1 el primer vector propio de la matriz de covarianzas muestral $\mathbf{X}^T \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T \mathbf{X}$. Antes de comenzar el algoritmo es conveniente centrar las variables y si sus varianzas no son similares, escalarlas. Escalar supone trabajar con las matrices de correlaciones y centrar, restar a las variables sus respectivas medias. Los pasos que sigue el algoritmo para calcularla son los siguientes:

- 1) En este primer paso se realiza una regresión entre cada una de las variables de la matriz \mathbf{X} sobre \mathbf{u} , siendo esta última cualquier variable de la matriz \mathbf{Y} , si bien lo más frecuente es empezar con la que tiene mayor varianza, obteniéndose un vector de los pesos \mathbf{w} (*weights*) de la primera componente:

$$\mathbf{w} = \frac{\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{u}}{\mathbf{u}^T \cdot \mathbf{u}} \quad (5.32)$$

Estos pesos son las pendientes de las rectas de ajuste por el criterio de mínimos cuadrados de las variables (columnas) de \mathbf{X} sobre \mathbf{u} , es decir los coeficientes de regresión, lo que permite predecir \mathbf{X} a partir de \mathbf{u} (modelo $\mathbf{X} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}^T + \mathbf{U}$).

- 2) A continuación este vector de pesos se normaliza:

$$\mathbf{w} = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{\mathbf{w}}{\sqrt{\mathbf{w}^T \mathbf{w}}} \quad (5.33)$$

- 3) En este paso, se calcula la variable latente de la matriz \mathbf{X} , proyectando las observaciones en la dirección definida por el vector \mathbf{w} .

$$\mathbf{t} = \frac{\mathbf{X} \cdot \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T \mathbf{w}} \quad (5.34)$$

Esta nueva regresión permite predecir \mathbf{X} a partir de \mathbf{w} (modelo $\mathbf{X}^T = \mathbf{w} \cdot \mathbf{t}^T + \mathbf{U}$). Al haber normalizado el vector \mathbf{w} , el denominador de la expresión anterior generalmente valdrá 1, a no ser que haya datos faltantes. Höskuldsson (1988) omite este denominador.

4) Se calcula el vector \mathbf{c} realizando una regresión de la matriz \mathbf{Y} sobre la variable latente \mathbf{t} :

$$\mathbf{c} = \frac{\mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{t}}{\mathbf{t}^T \cdot \mathbf{t}} \quad (5.35)$$

Obtenemos en este paso los coeficientes de regresión de las rectas que mejor predicen las variables \mathbf{y} a partir de la correspondiente variable latente \mathbf{t}_a , representante de \mathbf{X} por el criterio de mínimos cuadrados. Dicha predicción se realizará a través del modelo $\mathbf{Y} = \mathbf{t} \cdot \mathbf{c}^T + \mathbf{U}$.

5) A continuación este vector de pesos se normaliza:

$$\mathbf{c} = \frac{\mathbf{c}}{\|\mathbf{c}\|} = \frac{\mathbf{c}}{\sqrt{\mathbf{c}^T \mathbf{c}}} \quad (5.36)$$

6) En este paso se obtiene el vector \mathbf{u} . Para ello se proyecta la matriz \mathbf{Y} sobre al vector \mathbf{c} .

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{Y}^T \cdot \mathbf{c}}{\mathbf{c}^T \cdot \mathbf{c}} \quad (5.37)$$

Esta nueva regresión nos permitiría predecir \mathbf{Y}^T a partir de \mathbf{c} (modelo $\mathbf{Y}^T = \mathbf{c} \cdot \mathbf{u}^T + \mathbf{U}$)

7) Si en este paso se alcanza la convergencia se pasa a 8) de lo contrario se vuelve a 1). Alcanzar la convergencia en este caso significa que la variable \mathbf{u} obtenida en el paso anterior es igual o muy parecida a la variable \mathbf{u} tomada como punto de partida de

la matriz \mathbf{Y} . La experiencia indica que la convergencia en general se alcanza con menos de 10 iteraciones.

8) Se proyecta la matriz \mathbf{X} sobre \mathbf{t} :

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{t}}{\mathbf{t}^T \cdot \mathbf{t}} \quad (5.38)$$

obteniéndose un vector \mathbf{p} de pesos (*loadings*) de naturaleza distinta a los recogidos en el vector \mathbf{w} . Se obtiene un modelo de regresión ($\mathbf{X} = \mathbf{t} \cdot \mathbf{p}^T + \mathbf{U}$) que permite predecir \mathbf{X} a partir de las variables latentes.

9) A continuación se calculan las matrices residuales \mathbf{X}_a y \mathbf{Y}_a filtrando la matriz \mathbf{X}_{a-1} , y realizando la predicción de \mathbf{Y}_{a-1} con la componente t_{a-1} :

$$\mathbf{X}_a = \mathbf{X}_{a-1} - t_{a-1} \mathbf{p}_{a-1}^T \quad (5.39)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{Y}}_{a-1} &= \mathbf{t}_{a-1} \mathbf{c}_{a-1}^T \\ \mathbf{Y}_a &= \mathbf{Y}_{a-1} - \hat{\mathbf{Y}}_{a-1} = \mathbf{Y}_{a-1} - \mathbf{t}_{a-1} \mathbf{c}_{a-1}^T \end{aligned} \quad (5.40)$$

Con este paso termina el cálculo de una componente. Para extraer nuevas componentes se repite el procedimiento de forma iterativa utilizando como matrices de inicio en el paso 1), las residuales \mathbf{X}_{a-1} y \mathbf{Y}_{a-1} .

Los vectores que se van obteniendo en cada iteración se van almacenando en matrices cuyas dimensiones se pueden ver en la figura 5.46 siguiente en el que se esquematiza gráficamente el algoritmo de cálculo:

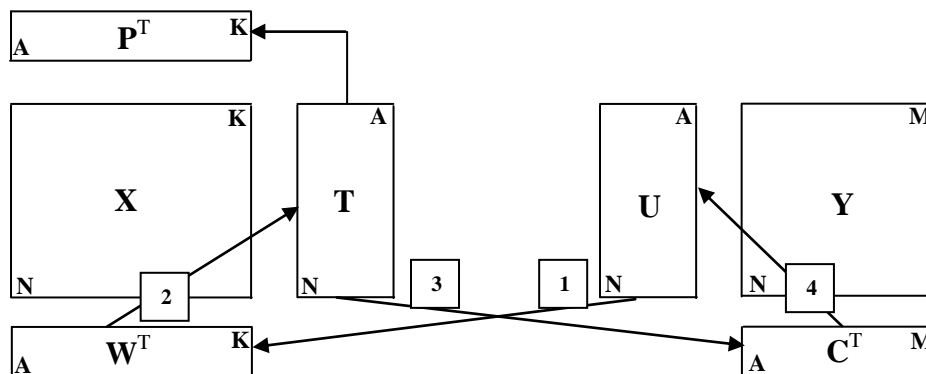


Figura 5.46 Diagrama del algoritmo NIPALS esquematizado

El procedimiento se realiza maximizando la covarianza entre T y U , ambas relacionadas por la relación interna:

$$U = TB + H \quad (5.41)$$

donde B es una matriz diagonal y H es una matriz residual. Se puede demostrar que:

$$Y = TBC^T + F^* = XW(P^TW)^{-1}BC^T + F^* = XB_{\text{coef}} + F^* \quad (5.42)$$

Es decir, es posible expresar el modelo PLS como un modelo de regresión predictivo clásico, en los que B_{coefs} son los coeficientes de regresión y F^* una matriz de residuos.

La idea clave que está detrás de la metodología de regresión PLS, es sustituir en el algoritmo de cálculo los principios del método de estimación por máxima verosimilitud (que estadísticamente está bien fundamentado, pero que sin embargo muestra problemas de aplicabilidad cuando en entornos de alta dimensionalidad se presentan problemas de mal condicionamiento y singularidad de las matrices a invertir) por un enfoque secuencial, en el que se van realizando una serie de ajustes locales por mínimos cuadrados.

5.6.3 ¿Cuántas componentes extraer? Validación Cruzada. Bondad de ajuste y de Predicción

Como se ha mencionado anteriormente, en regresión interesa que un modelo se ajuste lo mejor posible a los datos, y que además con dicho modelo se puedan realizar predicciones a partir de nuevas observaciones con el menor error de predicción posible. Es necesario distinguir entre la bondad de ajuste y bondad de predicción de un modelo. En los modelos PLS, como en cualquier otro modelo de regresión, a medida que aumentan el número de componentes mayor es la bondad de ajuste, sin embargo cuando se introduce en el modelo una nueva componente hay que ver también si aumenta la bondad de predicción.

Aunque en principio es posible obtener tantas componentes como el valor del rango de la matriz X , no todas se suelen usar. Las razones principales para ello, son que los datos observados nunca están libres de ruido y que por lo tanto algunas componentes más pequeñas solo modelarían ruido, además de que podrían conllevar problemas de colinealidad. Existen varios enfoques para determinar el número de componentes a extraer. El método utilizado en este caso ha sido el de *validación cruzada* adaptado al PLS por Wold (1978) y modificado por Eastment y Krzanowski (1982) y que se explica en las siguientes secciones.

BONDAD DE AJUSTE

Se define la Suma de Cuadrados Residual de un modelo PLS con “A” componentes (SCR_A) y con M variables respuesta, como el sumatorio para las N observaciones de las diferencias al cuadrado entre el valor realmente observado y_{im} y el valor predicho \hat{y}_{im} por el modelo:

$$SCR_A = \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^N (y_{im} - \hat{y}_{im})^2 \quad (5.43)$$

La suma de cuadrados residual obtenida con un modelo que no tuviera ninguna componente, obviamente coincidiría con la suma de cuadrados total:

$$SCR_{Total} = SCR_0 = \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^N (y_{im} - \bar{y}_m)^2 \quad (5.44)$$

Para cuantificar la bondad de ajuste en regresión se utiliza el coeficiente de determinación acumulado $R_{Y_{cum}}^2$. Para un modelo PLS con “A” componentes es la proporción de variabilidad explicada por el modelo respecto a la variabilidad total.

$$R_{Y_{cum}}^2 (A) = 1 - \frac{SCR_A}{SCT} \quad (5.45)$$

En un modelo PLS con “A” componentes, interesa conocer cuál es la contribución de cada una de ellas a la bondad de ajuste. Dos posibles formas de definirla son las siguientes:

a) La fracción de la suma de cuadrados total explicada por la componente a-ésima es igual al coeficiente de determinación obtenido con el modelo con “a” componentes, menos el obtenido con “a-1” componentes, de acuerdo con la expresión (5.46), teniendo en cuenta que $R_{Y_{cum}}^2 (0) = 0$. Con este criterio se cumple la ecuación (5.47), lo cual es una forma sencilla de analizar la contribución de cada componente en un modelo PLS.

$$R_Y^2 (a) = R_{Y_{cum}}^2 (a) - R_{Y_{cum}}^2 (a-1) \quad (5.46)$$

$$R_{Y_{cum}}^2 (A) = \sum_{a=1}^A R_Y^2 (a) \quad (5.47)$$

b) Otra forma de definir la contribución de una componente “a” a la bondad de ajuste de un modelo, que no es equivalente a la anterior, es mediante la expresión (5.48), a partir de la suma de cuadrados residual del modelo con “a” componentes, y la del modelo sin la última componente. Con este criterio, el coeficiente de determinación de un modelo con “A” componentes según se ha definido anteriormente (ecuación 5.45) se calcula según la expresión (5.48).

$$R_Y^2 (a) = 1 - \frac{SCR_a}{SCR_{a-1}} \quad (5.48)$$

$$R_{Y_{cum}}^2(A) = 1 - \prod_{a=1}^A [1 - R_Y^2(a)] = 1 - \frac{SCR_A}{SCT} \quad (5.49)$$

BONDAD DE PREDICCIÓN: PRESS

La bondad de predicción se calcula con técnicas de validación cruzada, las cuales fueron descritas por primera vez por Stone (1974) y Geisser (1974). Posteriormente fueron adaptadas para su implementación con PLS por Wold (1978). Es un método de validación interna, cuya gran ventaja es que no necesita observaciones externas adicionales para validar el modelo. En ocasiones el número de variables es muy superior al número de observaciones y por tanto interesa construir un modelo con el mayor número posible de observaciones.

Para emplear el método de validación cruzada existen distintos criterios de descartar las observaciones como ya hemos visto en regresión MLR. Si el número total de observaciones es reducido, lo más razonable es descartar una observación cada vez. Es decir consiste en eliminar una muestra y usar todas las demás para obtener un modelo PLS y predecir la primera, repitiendo N veces (nº de observaciones) este procedimiento con todas las muestras y calculando el error cuadrático medio de la predicción. Este cálculo se repite para cada uno de los modelos PLS obtenidos con un número diferente de componentes $A = 1, 2, 3, \dots$. Si el número de observaciones es muy elevado, al descartar una observación el modelo prácticamente no se modificará (a no ser que ésta sea influyente), por lo que es más razonable eliminar varias observaciones simultáneamente, construir el modelo y luego obtener los valores predichos para dichas observaciones. Dicha selección de observaciones se tiene que realizar aleatoriamente. A medida que aumente el número de componentes disminuirá el error de predicción, pero llegará un momento en que la disminución será irrelevante y que incluso podría aumentar. El número de componentes A, a partir del cual el error de predicción no disminuye, será en general el que se tome para el modelo.

Análogamente a como ya hemos visto en MLR, en validación cruzada se define la Suma de Cuadrados del Error de Predicción con las siglas PRESS de un modelo PLS con "A" componentes como el sumatorio para las N observaciones de las diferencias al cuadrado entre el valor observado y el valor predicho por el modelo estimado eliminando dicha observación.

$$PRESS_A = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_{-i})^2 \quad (5.50)$$

A partir del *PRESS* se calcula la bondad de predicción obtenida por modelo *PLS*, que se denomina estadístico Q^2 .

La expresión (6.47) permite el cálculo de Q^2 correspondiente a la componente *a*-ésima, válida para un modelo *PLS* con una o varias variables respuesta:

$$Q^2(a) = 1 - \frac{PRESS_a}{SCR_{a-1}} \quad (5.51)$$

Para $a=1$, $SCR_{a-1} = SCR_{Total}$.

Por lo tanto, $Q^2(a)$ es la fracción de la variación total de *Y* que puede ser predicha por la componente *a*-ésima. Una componente “*a*” será significativa si $Q^2(a)$ es estadísticamente mayor que 0, ya que esto equivale a suponer que $PRESS_a < SCR_{a-1}$. Es decir, la suma de los cuadrados de los errores de predicción obtenidos por validación cruzada con el modelo con “*a*” componentes es significativamente menor que la suma de los cuadrados del error del modelo sin la componente *a*-ésima. Por tanto, dicha componente aportará información relevante al modelo, ya que éste predice con menor error si se incluye dicha componente. Aunque en la terminología se utiliza un superíndice cuadrático, $Q^2(a)$ puede tomar valores negativos, cuando $PRESS_a > SCR_{a-1}$. En cambio $R_Y^2(a)$ siempre es positivo. Para un modelo con “*a*” componentes se cumple siempre que $PRESS_a > SCR_a$, porque cada error de predicción $y_i - \hat{y}_{-i}$ se ha calculado eliminando en el modelado la observación “*i*” en cuestión. A partir de aquí y teniendo en cuenta las ecuaciones (5.48) y (5.51) se deduce que $R_Y^2(a) > Q^2(a)$. Es decir, la bondad de ajuste de una cierta componente *a*-ésima es siempre mayor que la de predicción.

La bondad de predicción acumulada para las “*A*” componentes del modelo se calcula con la expresión (5.52). Puede definirse como la proporción de variabilidad de las variables respuesta predicha o como el coeficiente de determinación del modelo obtenido por validación cruzada. Podría ocurrir que Q^2 acumulado disminuyese lo que indicaría que en realidad se está modelando ruido y sería señal de sobreparametrización.

$$Q_{acum}^2(A) = 1 - \frac{PRESS_A}{SC_{TOTAL}} \quad (5.52)$$

La bondad de predicción global del modelo PLS obtenida por validación cruzada Q_{cum}^2 , se utiliza para determinar el número de componentes “A” que se utilizarán, para modelar la información relevante contenida en los datos. Si $Q_{cum}^2 > 0.5$ se considera que el modelo tiene una buena capacidad de predicción, si $Q_{cum}^2 > 0.9$ la habilidad de predicción es excelente. No obstante, el número de componentes a extraer depende del objetivo del estudio, si lo que se desea es predecir lo mejor posible, el número de componentes a retener será aquel cuyo Q_{cum}^2 sea máximo. Sin embargo si el estudio está más enfocado en la interpretación, a veces es recomendable ir más allá e incluir componentes que estadísticamente no son significativas, pero que contienen información interesante, lo que puede ocurrir con aquellas componentes de las zonas limítrofes. Para analizar los datos se ha utilizado como criterio de significación $Q^2(a) > 0.05$.

5.7 ESTIMACIÓN DE EFECTOS SIGNIFICATIVOS

Conceptualmente, PLS se puede entender como el cálculo de pares de nuevas variables, conocidas como variables latentes o scores, que resumen la variación en las respuestas y en los factores, buscando las direcciones de los espacios \mathbf{X} e \mathbf{Y} que simultáneamente expliquen más variabilidad y sean más útiles en la predicción de las variables respuesta (\mathbf{Y}). Lo que se consigue maximizando la covarianza entre cada par de variables latentes $cov(t_a; u_a)$.

Tras analizar los datos experimentales, se ha obtenido un modelo PLS con cuatro pares de variables latentes, que son las componentes PLS. En la tabla 5.29, se indican las componentes significativas con sus respectivas medidas de bondad de ajuste y de predicción, así como dicho parámetros acumulados. En la figura 5.47, se representan estos últimos gráficamente. Como se puede observar el modelo obtenido tiene una capacidad de predicción $Q^2 = 0.527$ y bondad de ajuste $R^2 = 0.947$ globales, tras haber extraído 4 componentes. Teniendo en cuenta que se han modelado simultáneamente 10 variables respuestas, estos valores pueden considerarse adecuados.

Componente	$R_Y^2(a)$	$R_{Ycum}^2(a)$	$Q^2(a)$	$Q_{cum}^2(a)$
1	0.485	0.485	0.161	0.161
2	0.297	0.783	0.246	0.368
3	0.125	0.908	0.197	0.492
4	0.0391	0.947	0.0694	0.527

Tabla 5.29 Medidas de bondad de ajuste $R_Y^2(a)$ y de predicción $Q^2(a)$ de cada componente “a” significativa y acumuladas $R_{Ycum}^2(a)$ y $Q_{cum}^2(a)$ del modelo PLS.

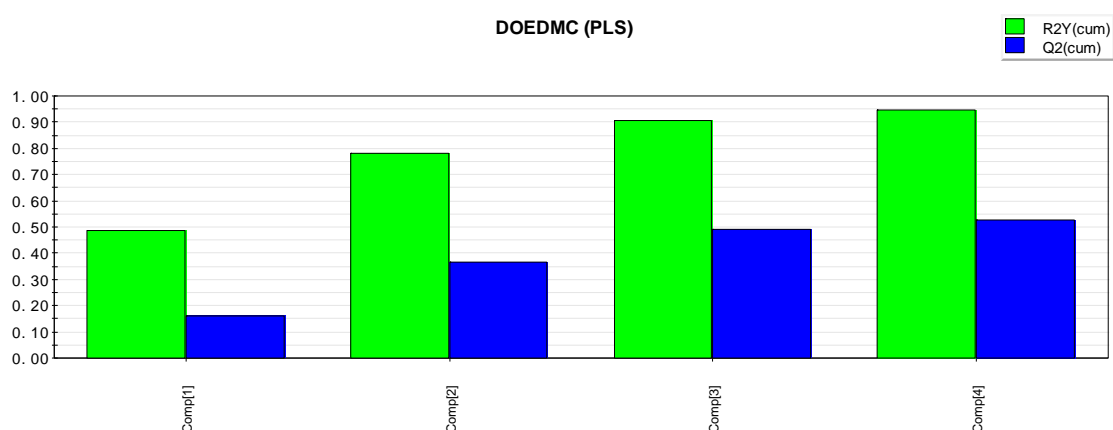


Figura 5.47 Medidas de bondad de ajuste $R_{Ycum}^2(a)$ y de predicción $Q_{cum}^2(a)$ acumulados en las 4 componentes PLS.

Es posible fraccionar estos estadísticos globales en los coeficientes acumulados para las cuatro componentes $R_{VYcum}^2(4)$ y $Q_{VYcum}^2(4)$ individuales para cada variable respuesta Y que se muestran en la tabla 5.30. También se adjuntan dichos los coeficientes de determinación ajustados. La bondad de ajuste individual oscila entre [0.85-0.99], y el coeficiente ajustado oscila entre [0.83-0.94], es decir son valores muy altos aunque para ECM_{APRE} y VAR_{APRE} bajan un poco. Sin embargo los coeficientes $Q_{VYcum}^2(4)$ son bajos lo que indica menor capacidad de predicción, además las diferencias existentes entre

$R_{VYcum}^2(4)$ y $Q_{VYcum}^2(4)$ son algo altas, lo que podría ser indicio de sobreparametrización, si bien hay que tener en cuenta que se modelan 10 respuestas simultáneamente.

En la tabla 5.31 se recogen los coeficientes de determinación $R_{VYcum}^2(4)$ y de determinación ajustado $R_{VYcum;adj}^2(4)$ para las variables manipuladas que oscilan entre [0.95-0.99] y [0.94-0.99] respectivamente, indicándonos una bondad de ajuste excelente. Los coeficientes $Q_{VYcum}^2(4)$ oscilan entre [0.56-0.70] que indican una capacidad de predicción buena.

	$R_{VYcum}^2(4)$	$R_{VYcum;adj}^2(4)$	$Q_{VYcum}^2(4)$
<i>ECM_MI</i>	0.94	0.93	0.37
<i>VAR_MI</i>	0.95	0.94	0.39
<i>ECM_APRE</i>	0.88	0.87	0.29
<i>VAR_APRE</i>	0.85	0.83	0.23

Tabla 5.30 Medidas de bondad de ajuste $R_{VYcum}^2(4)$; bondad de ajuste ajustada $R_{VYcum;adj}^2(4)$ y bondad de predicción $Q_{VYcum}^2(4)$ acumuladas en 4 componentes, para las repuestas relacionadas con las variables controladas del sistema de control.

	$R_{VYcum}^2(4)$	$R_{VYcum;adj}^2(4)$	$Q_{VYcum}^2(4)$
<i>MAX_INCT</i>	0.97	0.96	0.64
<i>VAR_INCT</i>	0.95	0.94	0.56
<i>MED_INCT</i>	0.99	0.98	0.70
<i>MAX_INCE</i>	0.99	0.99	0.66
<i>VAR_INCE</i>	0.97	0.97	0.60
<i>MED_INCE</i>	0.98	0.98	0.69

Tabla 5.31 Medidas de bondad de ajuste $R_{VYcum}^2(4)$; bondad de ajuste ajustada $R_{VYcum;adj}^2(4)$ y bondad de predicción $Q_{VYcum}^2(4)$ acumuladas en 4 componentes, para las repuestas relacionadas con las variables manipuladas del sistema de control.

Gráficamente pueden verse en la figura 5.48. Esto pone de manifiesto que los parámetros de diseño del controlador DMC y sus interacciones explican y predicen mejor el subconjunto de respuestas de rendimiento del sistema de control relacionadas con las variables manipuladas, tal y como ya hemos visto en el análisis MLR de los datos.

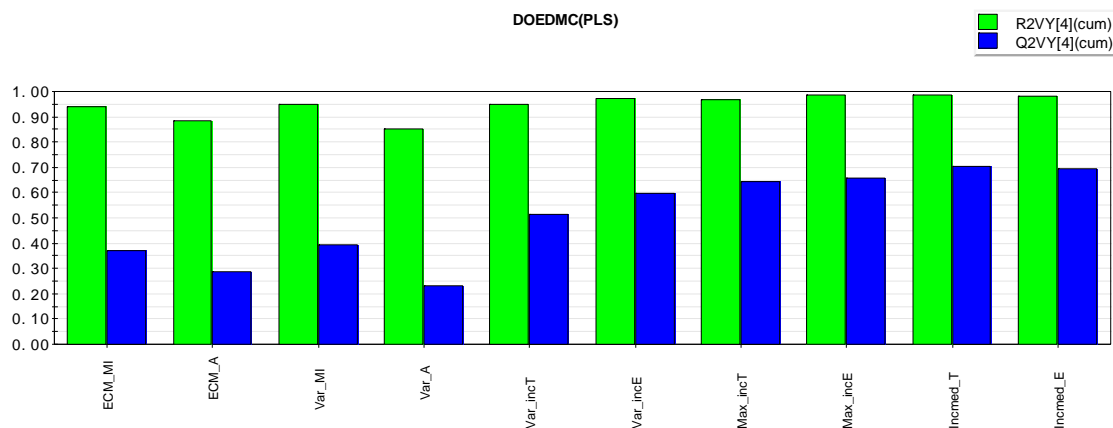


Figura 5.48 Medidas de bondad de ajuste $R^2_{VYcum}(4)$ y de predicción $Q^2_{VYcum}(4)$ individuales acumuladas para cada variable respuesta en las 4 componentes PLS.

INTERPRETACIÓN MODELO PLS: SCORES

Los cuatro pares de variables latentes ofrecen la posibilidad de visualizar la estructura de correlación entre los factores y las respuestas. En la figura 5.49 se representan los diagramas de dispersión de los *scores* u frente a los *scores* t , para las dos primeras componentes del modelo PLS. En el primer diagrama se representa la primera variable latente de Y , llamada u_1 frente a la primera variable latente de X llamada t_1 , en el segundo diagrama se representa u_2 frente t_2 . Si hubiese una relación lineal perfecta entre factores (X) y respuestas (Y) todos los puntos experimentales caerían sobre la diagonal que va desde el extremo bajo a la izquierda y el alto a la derecha. Inversamente cuanto más débil sea dicha relación lineal más dispersos estarán los puntos experimentales alrededor de la diagonal ideal. Cada punto del diagrama viene acompañado de un número que indica el experimento de que se trata. Se puede ver que para las dos primeras componentes existe una fuerte estructura de correlación lineal. En la figura 5.50 se muestran los mismos diagramas de dispersión para la tercera y cuarta componente. Para estas dos últimas la correlación es algo menor pero todavía importante, considerando que son la tercera y cuarta componente. Ello indica que los cambios en los factores tienen clara influencia en las respuestas y que no existen valores anómalos en los datos, detectados como puntos

experimentales alejados de la recta ideal. Tanto los indicadores de bondad de ajuste, de predicción como la estructura de correlación constatada nos demuestran que el planteamiento del modelo es adecuado.

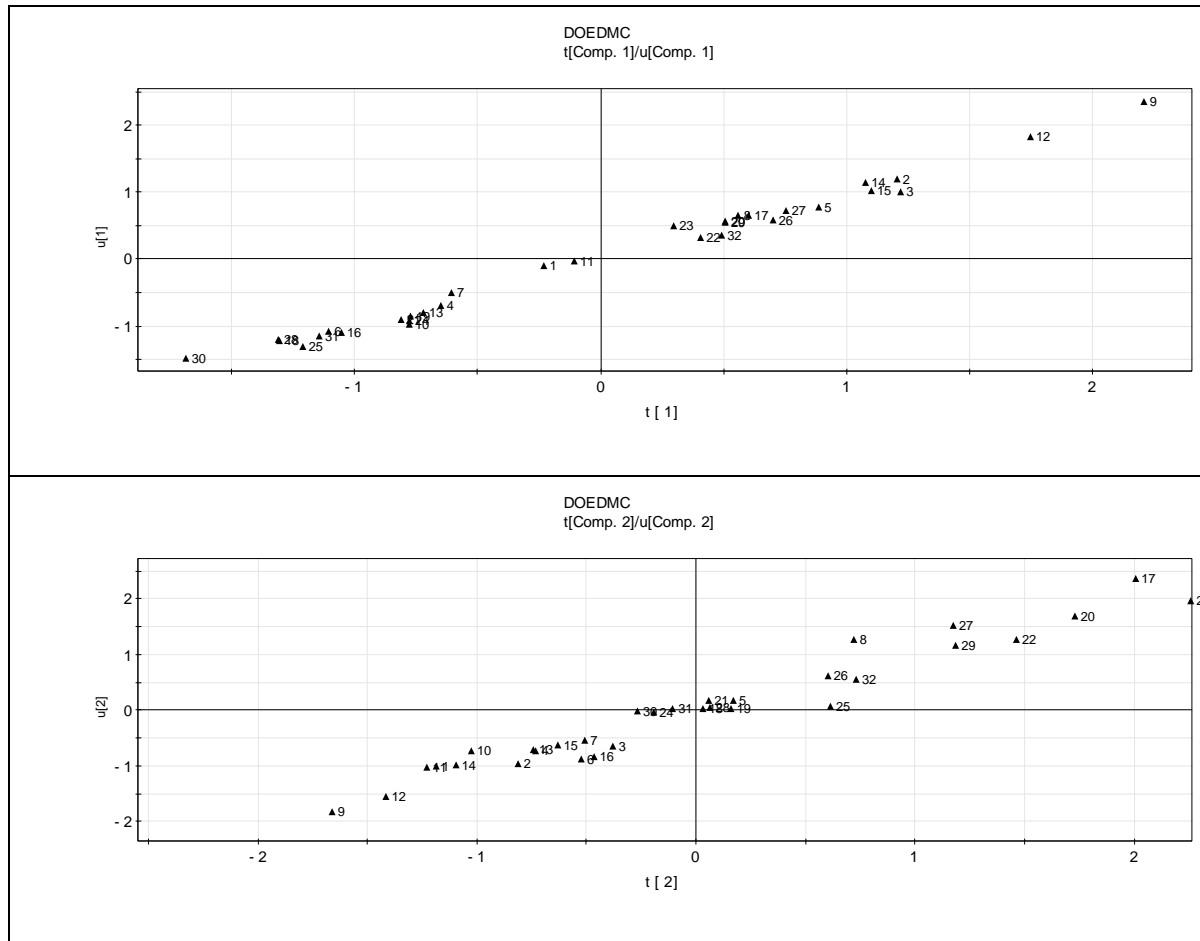


Figura 5.49 Diagramas de dispersión de “scores” u vs. t de las dos primeras dimensiones del modelo PLS.

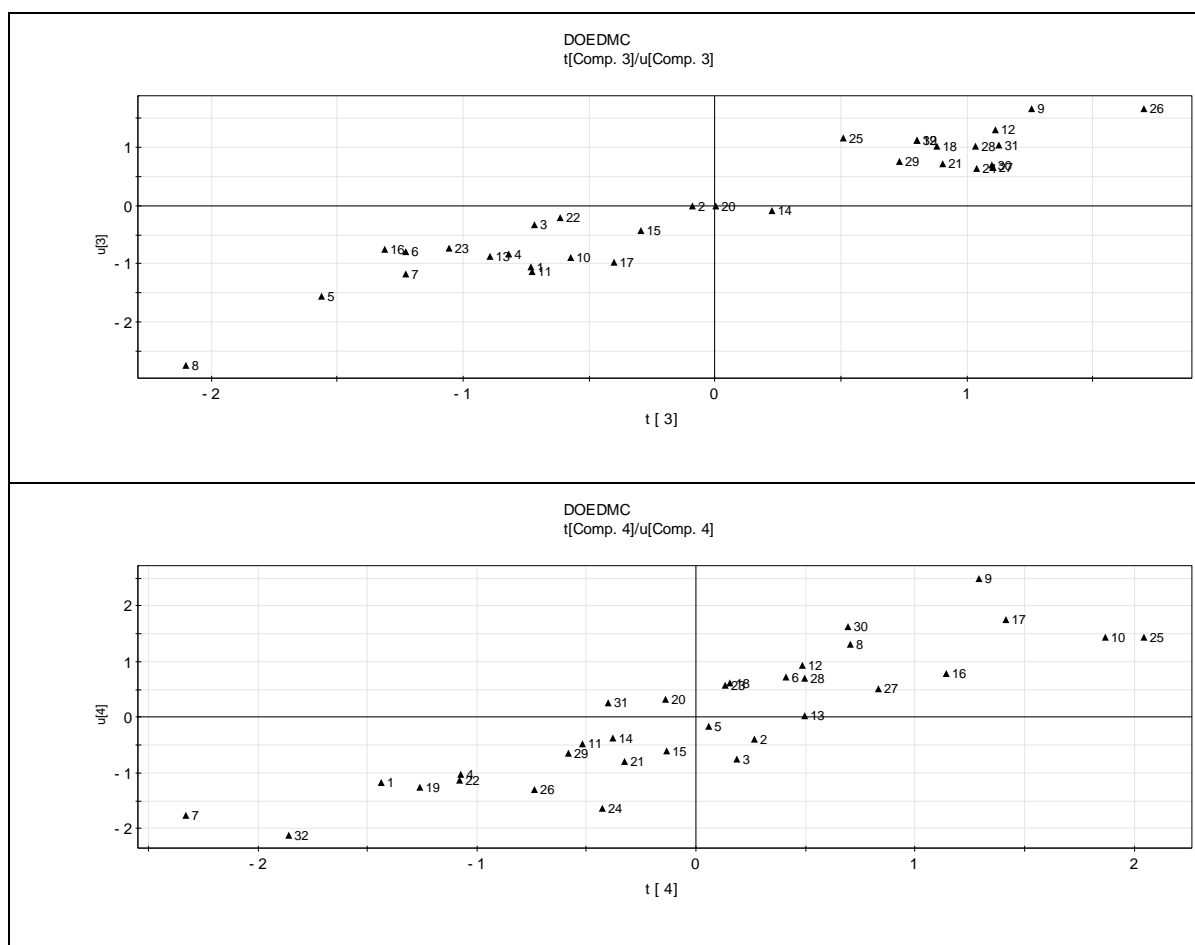


Figura 5.50 Diagramas de dispersión de “scores” u vs. t de las componentes 3 y 4 del modelo PLS.

INTERPRETACIÓN MODELO PLS: PESOS O *LOADINGS*

La metodología PLS ha permitido obtener un único modelo para todas las variables respuestas y también permite, como puede verse en la figura 5.51, visualizar las relaciones entre todos los factores y todas las respuestas al mismo tiempo, lo que representa una forma eficiente de interpretar el modelo PLS. Se han representado los *loadings* de la segunda componente $wc[2]$ frente a los de la primera $wc[1]$. En la interpretación del modelo tenemos que considerar la distancia de los factores y de las respuestas al origen de coordenadas en el gráfico. Cuanto más lejos esté una variable del origen, mayor impacto ha tenido en la formación de la componente y si además se trata de las primeras componentes, mayor importancia tiene en el modelo. También tenemos que tener en cuenta el signo del *loading*, el cual nos informa sobre el sentido de la correlación entre variables. Inspeccionando la figura 5.51 vemos que hay cuatro grupos de variables. El

primer grupo formado por el error cuadrático medio y varianza del MI , ECM_{MI} , y VAR_{MI} , el segundo por el error cuadrático medio y varianza del $APRE$, ECM_A , y VAR_A , el tercero por el máximo incremento, la varianza y el incremento medio de la temperatura, MAX_{INCT} , VAR_{INCT} y MED_{INCT} , y el cuarto por el máximo incremento, la varianza y el incremento medio del caudal de etileno, MAX_{INCE} , VAR_{INCE} y MED_{INCE} . Las variables dentro de cada grupo están muy correlacionadas entre sí. En el estudio MLR hemos estimado un modelo para cada variable respuesta, las correlaciones entre respuestas que deducíamos por el análisis minucioso de cada modelo quedan constatadas mediante las herramientas gráficas que proporciona la metodología PLS. Vemos en la figura 5.51 que el parámetro del controlador DMC que sin duda es el que más influye en la variabilidad de las variables controladas y de las manipuladas es la constante de ponderación del esfuerzo de control del caudal de etileno λ_E , tal y conforme ya se ha constatado en el estudio MLR.

En la formación de la primera componente tienen un peso elevado el factor λ_E , y los grupos de respuestas ECM_{MI} , y VAR_{MI} , con las que el primero está correlacionado positivamente, así como el grupo de variables MAX_{INCE} , VAR_{INCE} y MED_{INCE} que lo están negativamente. Esta primera dimensión refleja principalmente el control del MI , por parte del caudal de etileno E y cómo esta variable controlada transmite su variabilidad a dicha variable manipulada.

La interpretación de la segunda componente es análoga pero referida al control del $APRE$ por parte de la temperatura T , ya que en la formación de la componente tienen un peso elevado y positivo la constante de ponderación del esfuerzo de control de la temperatura λ_T y el grupo de variables ECM_A , y VAR_A y negativo el grupo formado por MAX_{INCT} , VAR_{INCT} y MED_{INCT} .

Por otro lado, gráficamente se ve que encontrar las condiciones operativas óptimas que minimicen simultáneamente todas las respuestas no va a ser fácil porque se presentarán situaciones conflictivas. Esto mismo se ha deducido también del estudio MLR. La ventaja del método PLS es que todo ello se ha podido ver muy fácilmente y de forma inmediata con el diagrama de *loadings*, pese a que intervienen muchas variables, mientras que con el método MLR, estas conclusiones, han requerido un análisis mucho más exhaustivo de los resultados.

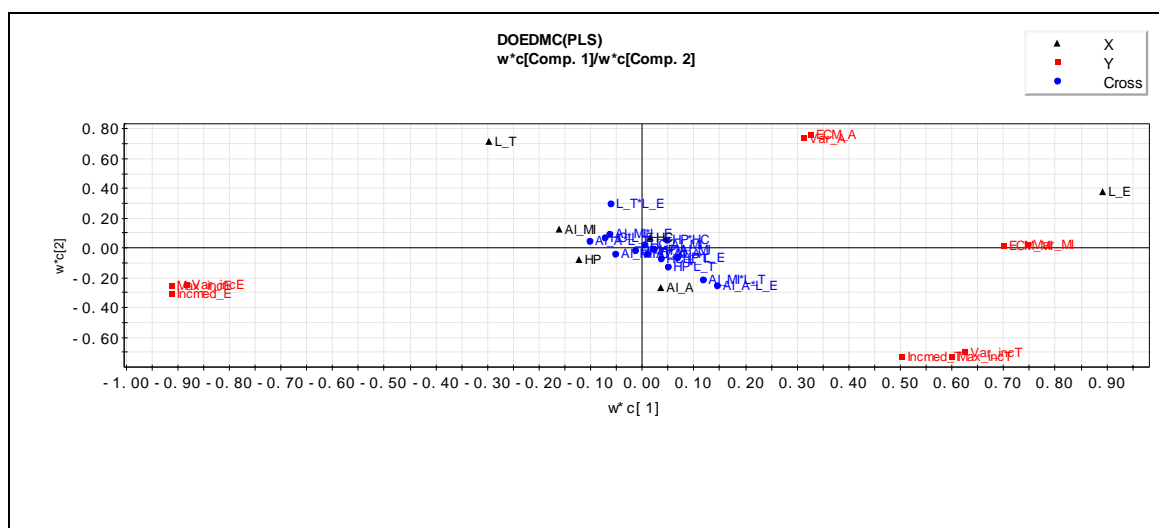


Figura 5.51 Diagramas de *loadings* (● variables respuesta en rojo, ▲ factores en negro). Segunda componente vs. primera componente del modelo PLS.

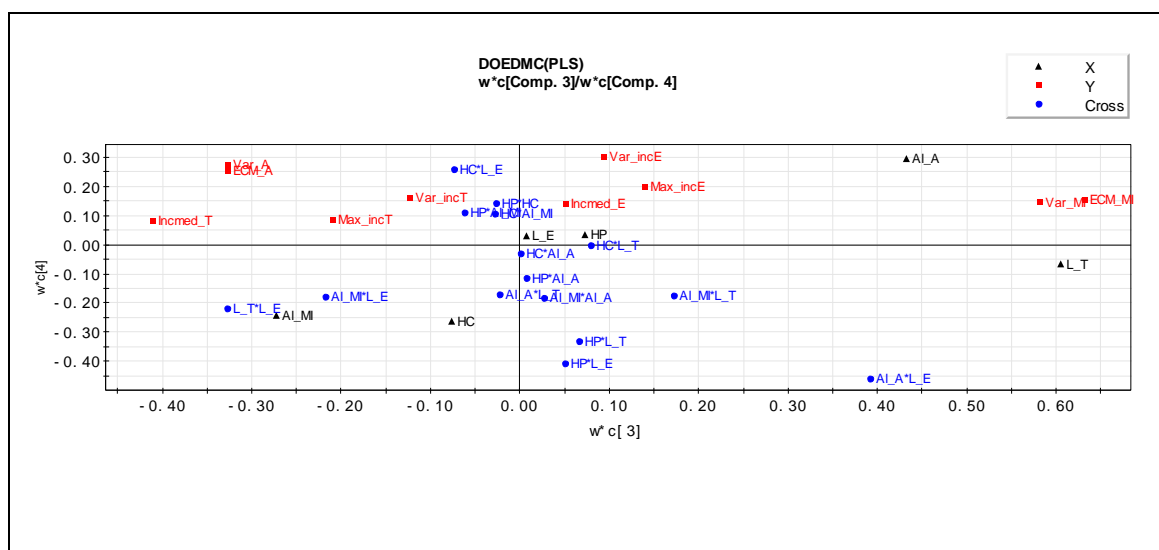


Figura 5.52 Diagramas de *loadings*. Cuarta componente vs. tercera componente del modelo PLS.

La tercera componente, aunque no es tan importante como las dos primeras, es significativa y todavía explica un 12.5% de la estructura de correlación. Como se puede ver en la figura 5.52, en la que se ha representado los *loadings* de la cuarta componente $wc[4]$ frente a los de la tercera $wc[3]$, tienen un peso importante las siguientes variables: con *loadings* positivos los factores simples λ_T y α_{APRE} y la interacción $\alpha_{APRE} * \lambda_E$ y el grupo de respuestas ECM_{MI} , y VAR_{MI} y con *loadings* negativos el factor α_{MI} y las interacciones $\lambda_T * \lambda_E$ y $\alpha_{MI} * \lambda_E$ y el grupo de respuestas ECM_A , y VAR_A . Lo

que refleja esta componente es la gestión por parte del controlador DMC de los objetivos de control de las dos variables controladas simultáneamente, cuando en función de las constantes de ponderación de los errores de cada una de ellas, aparecen como objetivos contrapuestos y cómo influye en dicha gestión el esfuerzo de control de la temperatura y las interacciones existentes entre los diferentes factores de penalización o de ponderación de errores.

La cuarta y última componente significativa explica aproximadamente el 4% de la variabilidad. En dicha componente (Ver figura 5.52) aparecen todas las variables respuesta con *loadings* positivos, junto con α_{APRE} y con *loadings* negativos α_{MI} , HC y numerosas interacciones. Por lo tanto, define la dimensión en la que aumenta o disminuye la variabilidad global del sistema de control. Se deduce que, a medida que aumenta α_{APRE} aumentará la variabilidad global, en contra de lo esperado para ECM_A , y VAR_A , lo que ya se había detectado en el análisis MLR. El efecto es opuesto al del factor α_{MI} cuyo aumento hace disminuir dicha variabilidad global. Por otro lado si aumenta el horizonte de control HC , disminuye la variabilidad global. Todas estas relaciones se habían encontrado en el estudio MLR, salvo la influencia del HC en algunas de ellas, sin embargo, la forma en que se presentan gráficamente en PLS lo hace muy interesante.

Error Cuadrático Medio y Varianza del MI

Un procedimiento útil para investigar la influencia de los diferentes factores sobre las respuestas utilizando el diagrama de *loadings* (ver figura 5.53), consiste en trazar una línea que vaya desde la localización de la respuesta pasando por el origen hasta llegar al extremo opuesto, y proyectar ortogonalmente sobre ella las diferentes variables explicativas, lo que facilita la interpretación del modelo.

Si analizamos las respuestas: error cuadrático medio y varianza del MI , ECM_{MI} y VAR_{MI} (recuadradas en el gráfico), sobre la primera componente, en primer lugar lo que se constata es que esta variable latente, que es la más importante, está reflejando el control del MI por parte del caudal de etileno. Que sobre el mismo, el factor más influyente es la constante de ponderación del esfuerzo de control del caudal de etileno λ_E , que está correlacionado positivamente con estas respuestas. Si se penalizan las acciones de control del caudal de etileno, aumenta la variabilidad de la variable controlada MI y también

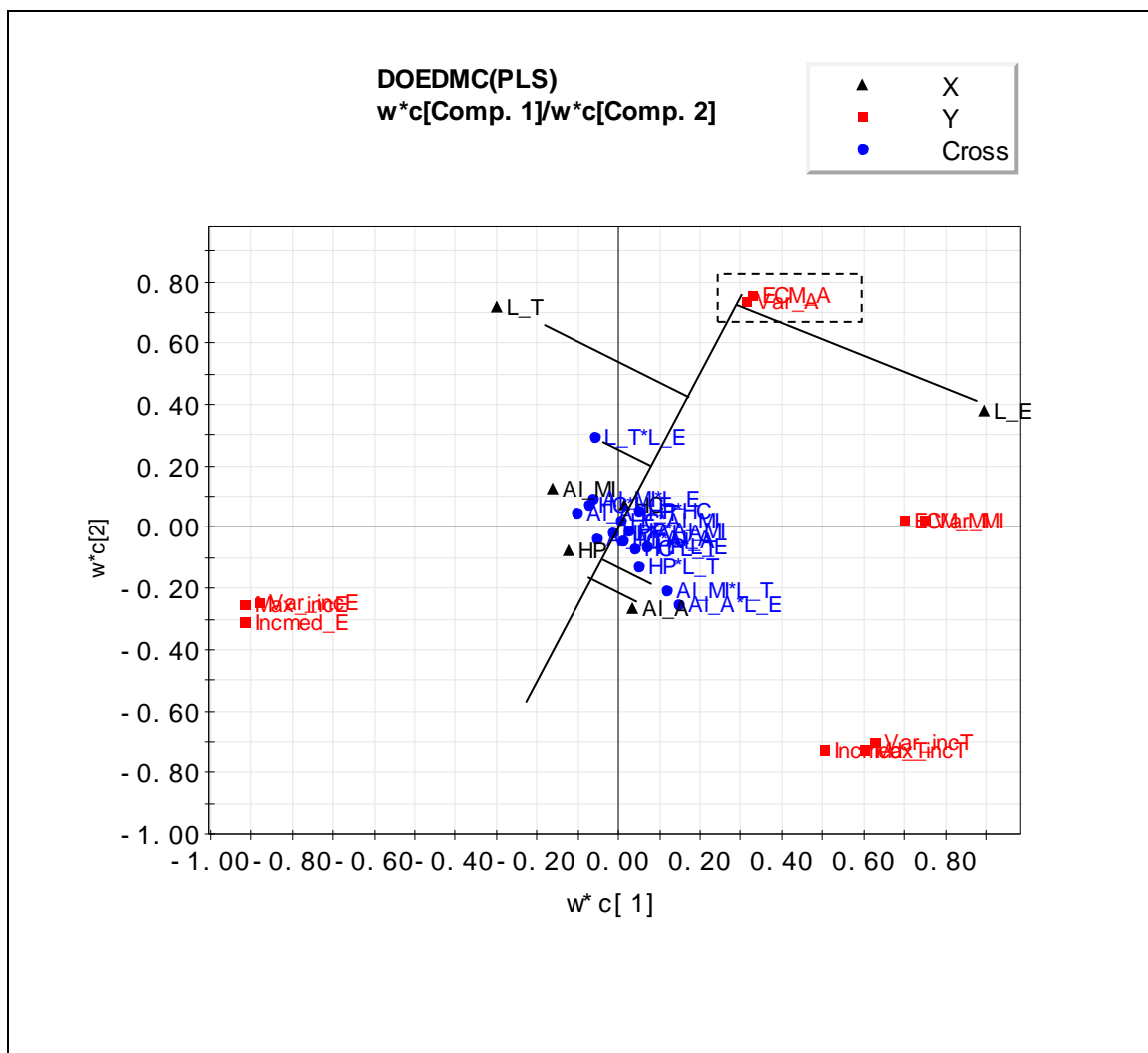


Figura 5.55 Diagramas de *loadings*. segunda componente vs. primera componente del modelo PLS. Interpretación respuestas *ECM_A* y *VAR_A*.

Máximo Incremento, Varianza e Incremento Medio de la *Temperatura*

Los factores e interacciones que tienen efecto sobre las variables relacionadas con la temperatura son las siguientes (ver figura 5.56): con efecto positivo y por orden de importancia λ_E ; el grupo de interacciones $\alpha_{APRE}*\lambda_E$ y $\alpha_{MI}*\lambda_T$ y α_{APRE} . Con efecto negativo, λ_T , que como ya veíamos en el estudio *MLR*, es el factor más importante para este grupo de respuestas y la interacción $\lambda_T*\lambda_E$ y α_{MI} . De nuevo vemos que los resultados son consistentes con los obtenidos anteriormente.

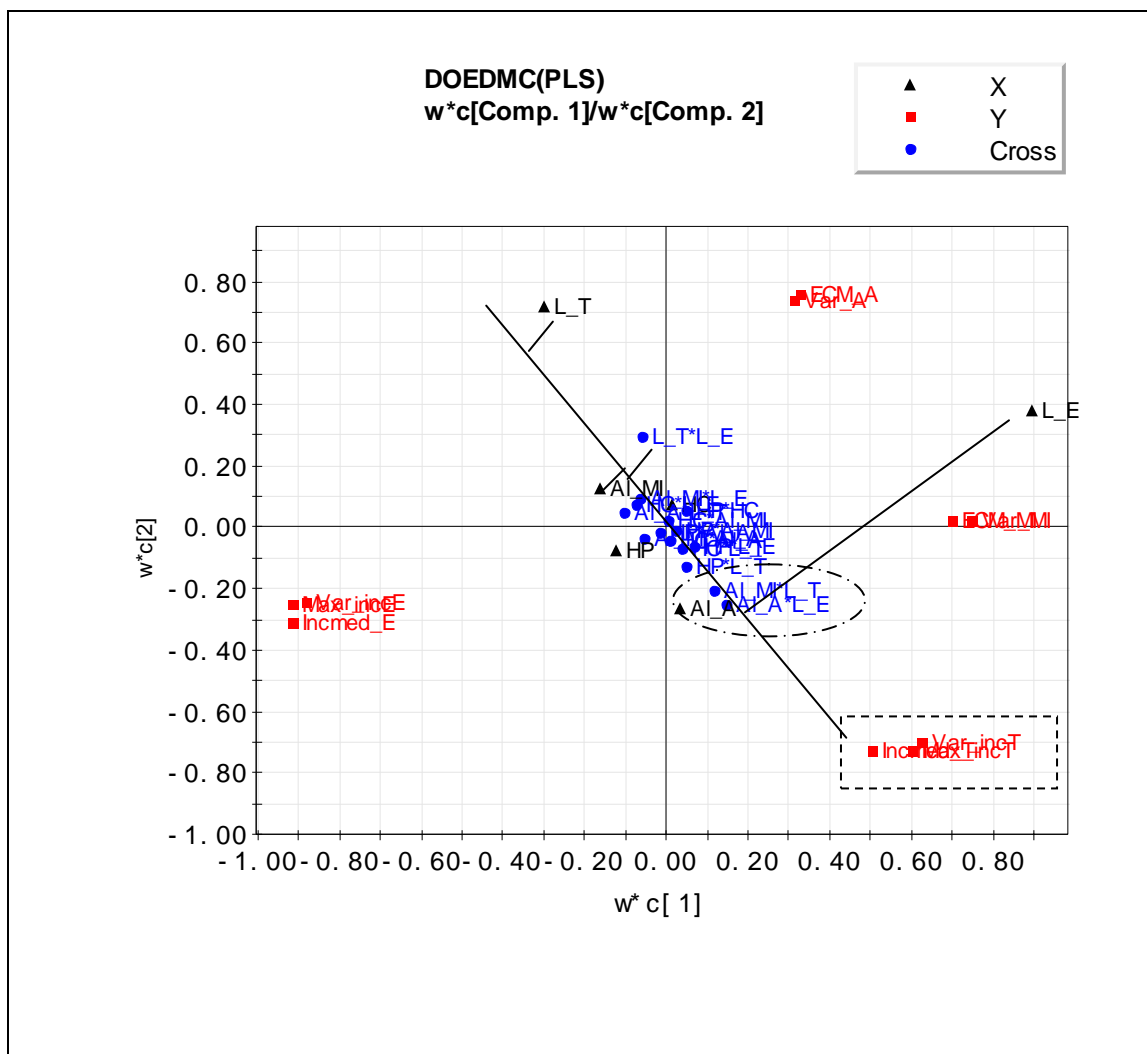


Figura 5.56 Diagramas de *loadings*. Segunda componente vs. primera componente del modelo PLS. Interpretación respuestas *MAX_INCT*; *VAR_INCT* y *MED_INCT*.

Máximo Incremento, Varianza e Incremento Medio del Caudal de *Etileno*

En las figuras 5.57 y 5.58 se han representado los diagramas de *loadings*, de la segunda y primera componente y de la tercera y la cuarta respectivamente. Las líneas auxiliares ayudan a interpretar los efectos sobre las respuestas relacionadas con la variabilidad de los movimientos del Caudal de Etileno. El factor más importante es la constante de ponderación de dichos movimientos, λ_E , con efecto negativo, tal como se puede ver en la figura 5.57.

En la figura 5.58 se aprecia los efectos positivos de α_{APRE} ; de λ_T y de la interacción $HC*\lambda_E$ y los negativos de α_{MI} y HC y la interacción $\lambda_T*\lambda_E$.

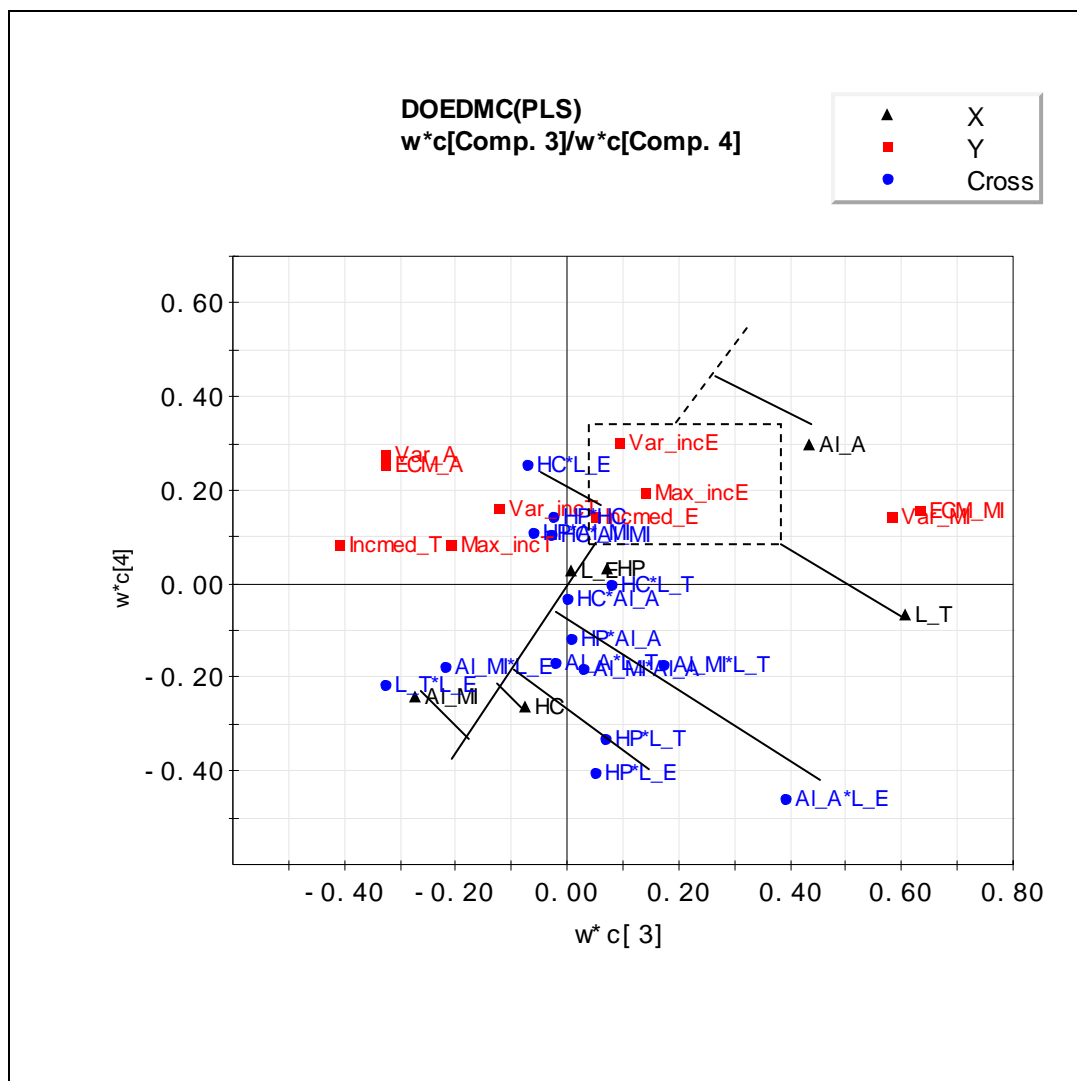


Figura 5.58 Diagramas de *loadings*. Cuarta componente vs. Tercera componente del modelo PLS. Interpretación respuestas *MAX_INCE*; *VAR_INCE* y *MED_INCE*.

5.8 Conclusiones PLS

Tras analizar los datos experimentales, se ha obtenido un modelo PLS con cuatro pares de variables latentes, que son las *componentes* PLS. El modelo obtenido tiene una capacidad de predicción $Q^2 = 0.527$ y bondad de ajuste $R^2 = 0.947$ globales, tras haber extraído 4 componentes. Teniendo en cuenta que se han modelado simultáneamente 10 variables respuestas, estos valores se pueden considerar adecuados.

La bondad de ajuste individual para cada variable oscila entre [0.85-0.99], y el coeficiente ajustado oscila entre [0.83-0.94], es decir valores muy altos excepto para

ECM_{APRE} y VAR_{APRE} para las que bajan un poco. Sin embargo los coeficientes $Q_{V_{cum}}^2(4)$ son bajos lo que indica menor capacidad de predicción, además las diferencias existentes entre $R_{V_{cum}}^2(4)$ y $Q_{V_{cum}}^2(4)$ son algo altas, lo que podría ser indicio de sobreparametrización, si bien hay que tener en cuenta como se ha dicho que se modelan 10 respuestas simultáneamente. Tanto los indicadores de bondad de ajuste, de predicción, como la estructura de correlación constatada entre las variables latentes, nos demuestran que el planteamiento del modelo es adecuado.

La metodología PLS ha permitido obtener un único modelo para todas las variables respuestas y también permite visualizar las relaciones entre todos los factores y todas las respuestas al mismo tiempo, mediante los diagramas de *loadings* lo que proporciona una forma eficiente de interpretar el modelo PLS.

Se han determinado cuatro *clusters* de variables. El primer *cluster* formado por el error cuadrático medio y varianza del MI , ECM_{MI} , y VAR_{MI} , el segundo por el error cuadrático medio y varianza del $APRE$, ECM_A , y VAR_A , el tercero por el máximo incremento, la varianza y el incremento medio de la temperatura, MAX_{INCT} , VAR_{INCT} y MED_{INCT} , y el cuarto por el máximo incremento, la varianza y el incremento medio del caudal de etileno, MAX_{INCE} , VAR_{INCE} y MED_{INCE} .

En la formación de la primera componente tienen un peso elevado el factor λ_E , y los grupos de respuestas ECM_{MI} , y VAR_{MI} , con las que el primero está correlacionado positivamente, así como el grupo de variables MAX_{INCE} , VAR_{INCE} y MED_{INCE} que lo están negativamente. Esta primera dimensión refleja el control del MI , por parte del caudal de etileno E y pone de manifiesto cómo esta variable controlada transmite su variabilidad a dicha variable manipulada.

La interpretación de la segunda componente es análoga pero referida al control del $APRE$ por parte de la temperatura T , ya que en ésta, tienen un peso elevado y positivo la constante de ponderación del esfuerzo de control de la temperatura λ_T y el grupo de variables ECM_A , y VAR_A y negativo el grupo formado por MAX_{INCT} , VAR_{INCT} y MED_{INCT} .

La tercera componente refleja la gestión por parte del controlador DMC de los objetivos de reducción de la dispersión de las variables controladas alrededor de su valor nominal simultáneamente, cuando en función de las constantes de ponderación de los errores de cada una de ellas, aparecen como objetivos contrapuestos y cómo influye en

dicha gestión el esfuerzo de control de la temperatura y las interacciones existentes entre todos estos factores.

La cuarta componente significativa define la dimensión en la que aumenta o disminuye la variabilidad global del sistema. Se deduce que a medida que aumente α_{APRE} aumentará la variabilidad total del sistema, cuyo efecto es opuesto al del factor α_{MI} , tal y conforme ya se había deducido en el estudio MLR. Por otro lado si aumenta el horizonte de control HC , disminuyen la variabilidad global. Poniendo unos límites adecuados a la longitud de los horizontes HP y HC , se consigue un controlador más robusto, capaz de manejar las restricciones.

Mediante la regresión PLS, se han obtenido todos los factores e interacciones que influyen sobre las variables respuesta, así como la magnitud y signo de sus efectos. Los resultados han sido similares a los obtenidos con la regresión MLR, aunque el enfoque es diferente. Las condiciones operativas óptimas obtenidas son consistentes con las encontradas por MLR.

5.9 COMPARACIÓN METODOLOGÍAS ANOVA (MLR) y PLS

Los modelos obtenidos en el análisis del diseño experimental tanto por ANOVA (MLR), como por PLS, tienen valores muy altos de bondad de ajuste, medidos por los coeficientes de determinación R^2 , y los de determinación ajustados R_{adj}^2 . En todos los casos ambos coeficientes son muy parecidos, en el caso del PLS son prácticamente idénticos. Lo que indica que el ruido incorporado a los modelos es mínimo, sobre todo en el caso del PLS. Por otro lado, las bondades de predicción también son elevadas, en el caso del ANOVA, aunque como ocurre con la bondad de ajuste para ECM_{APRE} y VAR_{APRE} , el coeficiente Q^2 es menor. Los coeficientes $Q_{v_{cum}}^2(4)$ para la regresión PLS son más bajos, e incluso son menores que 0.5 para las variables controladas, lo que indica menor capacidad de predicción, además las diferencias existentes entre $R_{v_{cum}}^2(4)$ y $Q_{v_{cum}}^2(4)$ son algo altas, lo que podría ser indicio de sobreparametrización, si bien hay que tener en cuenta que se modelan 10 respuestas simultáneamente. PLS se ajusta mejor a los datos, pero con MLR se obtienen mejores predicciones.

La metodología PLS ha permitido obtener un único modelo para todas las variables respuesta. El diagrama de *loadings* permite visualizar las relaciones entre todos los factores y las variables respuesta, mediante las distancias relativas en el plano de las componentes y las agrupaciones de variables correlacionadas. También se visualizan los factores de mayor peso en el modelo. Todo ello, favorece la interpretación. En el estudio MLR hemos estimado un modelo para cada variable respuesta, las correlaciones entre respuestas se han constatado igualmente pero tras analizar cuidadosamente uno a uno los modelos para cada variable respuesta. Como dicen Eriksson *et al.* (1999), cuando en un diseño experimental se han medido varias respuestas, resulta de utilidad ajustar un modelo único que represente cómo varían todas estas respuestas simultáneamente como reacción a la variación de los factores en la región experimental estudiada.

Los cuatro pares de variables latentes ofrecen la posibilidad de visualizar la estructura de correlación entre los factores y las respuestas, mediante el diagrama de dispersión de los *scores*.

Las relaciones entre factores y las respuestas que están muy correlacionadas entre sí pueden analizarse conjuntamente, de forma que se ahorra tiempo de análisis, haciendo que este sea más eficiente.

Mediante la regresión PLS, se han obtenido todos los factores e interacciones que influyen sobre las variables respuesta, así como la magnitud y signo de sus efectos. Los resultados han sido similares a los obtenidos con la regresión MLR, aunque el enfoque es diferente. La visualización de los efectos mediante las herramientas gráficas del PLS, lo hacen muy interesante y enriquece las conclusiones.

Las condiciones operativas óptimas obtenidas son consistentes con las encontradas por MLR.

5.10 RESUMEN

Se ha diseñado y sintonizado el controlador DMC, mediante un diseño de experimentos factorial fraccionado 2^{6-1} para el estudio simultáneo de todos los parámetros de diseño del controlador. Una de las aportaciones de esta tesis es emplear el diseño de experimentos para el diseño y sintonización del controlador DMC y enfatizar la importancia esencial, para el logro de una calidad competitiva, de las actividades que se desarrollan en las fases de diseño de productos y de procesos.

Se han identificado y cuantificado los efectos que los factores de diseño del controlador DMC tienen sobre las pautas de variabilidad de variables que miden el rendimiento del control automático del proceso, con el fin de obtener las condiciones operativas óptimas. El diseño de experimentos produce datos experimentales altamente informativos. En este trabajo se han obtenido por simulación, y se han analizado por dos métodos estadísticos diferentes, el método ANOVA analizado por regresión por mínimos cuadrados ordinarios y la regresión PLS. Se han comparado desde el punto de vista de los resultados obtenidos.

Se han obtenido para todas las variables respuesta los efectos de los factores e interacciones de orden 2 significativas (valor- $p < 0.05$). El factor cuyo efecto simple ha resultado ser de mayor magnitud para todas las variables respuesta, ha sido λ_E , a excepción de las variables respuesta relacionadas con el propio caudal de etileno. Por otro lado, λ_T , tiene también en todos los casos el mismo efecto positivo, salvo en aquellas variables relacionadas con la variabilidad de la temperatura, pero menor que el efecto anterior. De esta comparación de efectos se ha deducido que la temperatura tiene mayor capacidad de control de las variables de salida *MI* y *APRE*.

Las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas (*MI* y *APRE*) α_{MI} y α_{APRE} , influyen también sobre todas las variables de rendimiento del sistema de control. Cuando se quiere reducir la variabilidad de las variables de salida *MI* y *APRE*, dicha variabilidad se transmite a las variables manipuladas. Una excepción es el efecto de α_{MI} sobre la variabilidad de la temperatura que hace que aunque se desee reducir más el error del *MI*, el movimiento de la temperatura sea más suave.

Los Horizontes de Predicción *HP* y de Control *HC*, influyen únicamente sobre la variabilidad del caudal de etileno *E*. Debido a que este tiene menor capacidad de control de las variables controladas, ejerce un control más agresivo que el de la temperatura, por ello probablemente sí que influyan le influyan *HP* y *HC*.

Se han encontrado muchas interacciones siendo la más importante λ_T y λ_E , ello hace que las condiciones operativas no sean siempre las esperadas intuitivamente. Estos dos parámetros de diseño del controlador DMC son importantes en el rendimiento del control automático.

Se han encontrado las condiciones operativas óptimas de sintonizado del controlador DMC que minimizan la variabilidad de las variables controladas y que por lo tanto maximizan el rendimiento del controlador. Se debe escoger en todo caso el nivel bajo de

las constantes del esfuerzo de control λ_T y λ_E , el nivel alto de la constante de ponderación de errores α_{MI} si se quiere hacer más énfasis en el control de la variable de calidad o su nivel bajo si se quiere hacer más énfasis en la productividad, y siempre el nivel bajo de α_{APRE} . Se ha constatado que algunas veces las interacciones entre factores ejercen un efecto más importante que los efectos de cada factor individualmente.

Por otro lado, se han encontrado también las condiciones operativas óptimas que minimizan la variación en la variable manipulada T , que son condiciones contrapuestas a las condiciones exigidas para mejorar el rendimiento de control del MI , salvo para λ_E que es la misma. También son contrapuestas a las del control del $APRE$, salvo para α_{MI} y λ_E que son las mismas.

Las condiciones operativas óptimas referidas a la variación en la variable manipulada E , incluyen las referidas al horizonte de predicción HP y al horizonte de control HC , factores que únicamente han influido sobre la variación E . Ambos deben ser de 2 periodos que coincide con la inercia de esta variable de entrada en el modelo del MI . De esta forma se suaviza el movimiento de control del caudal de etileno. Las condiciones óptimas para las constantes de ponderación de los errores deben de ser lo más bajas posibles, al igual que la constante λ_T y lógicamente λ_E tiene que estar a nivel alto para que se restrinja el movimiento del caudal de etileno.

De la comparación de las metodologías ANOVA (MLR) y PLS se obtienen las siguientes conclusiones:

La regresión MLR tiene más capacidad de predicción que la PLS, sin embargo esta último tiene mayor capacidad de ajuste. Ello es debido a que el PLS al retener un número de componentes por validación cruzada inferior al máximo, incorpora menos ruido en el modelo, pero también menos información.

Con la regresión PLS se puede obtener un modelo conjunto para todas las variables respuesta. Sus herramientas gráficas permiten visualizar rápidamente las relaciones entre todos los factores y las variables respuesta, y las agrupaciones de variables correlacionadas. También se visualizan los factores de mayor peso en el modelo. Los cuatro pares de variables latentes ofrecen la posibilidad de visualizar la estructura de correlación entre los factores y las respuestas, mediante el diagrama de dispersión de los *scores*.

En PLS, las relaciones entre factores y las respuestas que están muy correlacionadas entre sí pueden analizarse conjuntamente, de forma que se ahorra tiempo de análisis, haciendo que este sea más eficiente.

Mediante ambas metodologías, se han obtenido todos los factores e interacciones que influyen sobre las variables respuesta, así como la magnitud y signo de sus efectos y las condiciones operativas óptimas, los resultados han sido consistentes para ambas, aunque el enfoque es diferente. La visualización de los efectos mediante las herramientas gráficas del PLS facilita la interpretación del modelo y enriquece las conclusiones. Todo ello hace del PLS una metodología realmente interesante, sobre todo cuando crece el número de variables que intervienen en el modelo.

CAPÍTULO 6. IMPLEMENTACIÓN DE PROCEDIMIENTOS MSPC BASADOS EN ESTRUCTURAS LATENTES. SISTEMA MESPC

6.1 INTRODUCCIÓN

Para implementar la componente MSPC del sistema de control integrado se han empleado métodos estadísticos MSPC de proyección en estructuras latentes. En primer lugar se ha estimado un modelo PCA del proceso en condiciones operativas normales para estudiar la estructura de correlación entre las variables. Para ello, se ha simulado el proceso operando sin presencia de causas asignables de variabilidad y en ciclo cerrado. Se han tomado como datos, los valores de algunas variables derivadas del sistema de control. Con estos datos, se ha estimado el modelo NOC-PCA (*Normal Operating Conditions-PCA*) con A componentes, que constituirá la base del módulo de monitorización. A partir de este modelo se han construido los gráficos de control multivariantes basados en la T_A^2 de Hotelling y en la distancia al modelo DModX que se utilizan para monitorizar el comportamiento futuro del proceso. Se han utilizado también otros gráficos que resultan útiles para la detección de fallos. Se han simulado diferentes salidas de control potenciales, mientras el proceso se monitorizaba. Cuando los gráficos de control han puesto de manifiesto las salidas de control, se han obtenido los gráficos de contribución para diagnosticar las posibles causas. Con ello se muestra el funcionamiento y rendimiento del sistema integrado de control MESPC propuesto

6.2 ESTIMACIÓN MODELO NOC- PCA

Para estimar el modelo NOC-PCA, se ha generado un conjunto de datos que constituyen las observaciones de referencia, que definen las variaciones que el proceso puede presentar cuando está funcionando normalmente, es decir únicamente bajo causas comunes de variabilidad. Aquellas condiciones que permiten alcanzar unos resultados adecuados del proceso se incluyen para estimar el modelo de referencia.

En el caso de que el conjunto de referencia no incluya variaciones suficientes y aceptables del proceso, el modelo construido generará un exceso de falsas alarmas

durante la monitorización de nuevas observaciones. Por otro lado, si lo que ocurre es que el conjunto de referencia incluye situaciones que generan resultados inaceptables en el proceso, el modelo construido perderá sensibilidad es decir, disminuirá su capacidad para detectar estas situaciones. Las diez variables consideradas para la estimación del modelo, derivadas del sistema de control se recogen en la tabla 6.1. Se han simulado 236 instantes de tiempo, por lo que se ha generado una base de datos de $10 \times 236 = 2360$ datos. Los modelos simulados han sido los estimados en el Capítulo 4 (ecuaciones 4.80 y 4.81), con los coeficientes estimados de la campaña 5, por haber sido una campaña con un buen funcionamiento. Se ha incorporado a los modelos de las variables controladas ∇MI_t , $\nabla APRE_t$ una secuencia de innovaciones \mathbf{a}_{1t} y \mathbf{a}_{2t} distribuidas *i.i.d.*, con varianzas $\hat{\sigma}_{1t}^2 = 0.004$ y $\hat{\sigma}_{2t}^2 = 0.057$.

Variables registradas	Abrev.	Col.
Ajuste temperatura instante actual t	<i>incT1</i>	1
Ajuste temperatura futuro $t+HC$	<i>incT2</i>	2
Ajuste caudal etileno instante actual t	<i>incE1</i>	3
Ajuste caudal etileno futuro $t+HC$	<i>incE2</i>	4
Norma euclídea vector ajustes temperatura	<i>NincT</i>	5
Norma euclídea vector ajustes caudal de etileno	<i>NincE</i>	6
Error MI instante t	<i>E_MI</i>	7
Error $APRE$ instante t	<i>E_APRE</i>	8
Error predicho MI instante $t+HP$	<i>E_LMI</i>	9
Error predicho $APRE$ instante $t+HP$	<i>E_LAPRE</i>	10

Tabla 6.1 Variables derivadas del sistema de control seleccionadas para estimar el modelo NOC-PCA de referencia y sus abreviaturas. HP y HC, son los horizontes de predicción y de control, del controlador.

Los errores para los instantes presentes t para el MI y $APRE$ son: $MI_t - 0.8$ y $APRE_t - 16.5895$.

El modelo NOC-PCA estimado a partir de estas observaciones tiene cuatro componentes obtenidas por validación cruzada (Wold 1978). En la tabla 6.2, se indican las componentes significativas con sus respectivas medidas de bondad de ajuste y de predicción, así como dichos parámetros acumulados. En la figura 6.1, se representan estos parámetros gráficamente. Como se puede observar, el modelo obtenido explica el

99.5% ($R^2 = 0.995$) de la suma de cuadrados y predice el 97.1% ($Q^2 = 0.971$) por lo que desde estos aspectos se puede considerar un modelo adecuado.

Componente	$R_x^2(a)$	$R_{Xcum}^2(a)$	$Q^2(a)$	$Q_{cum}^2(a)$
1	0.546	0.546	0.448	0.448
2	0.250	0.796	0.49	0.739
3	0.158	0.954	0.316	0.822
4	0.040	0.995	0.837	0.971

Tabla 6.2 Medidas de bondad de ajuste $R_x^2(a)$ y de predicción $Q^2(a)$ de cada componente "a" significativa y acumuladas $R_{Xcum}^2(a)$ y $Q_{cum}^2(a)$ del modelo NOC-PCA.

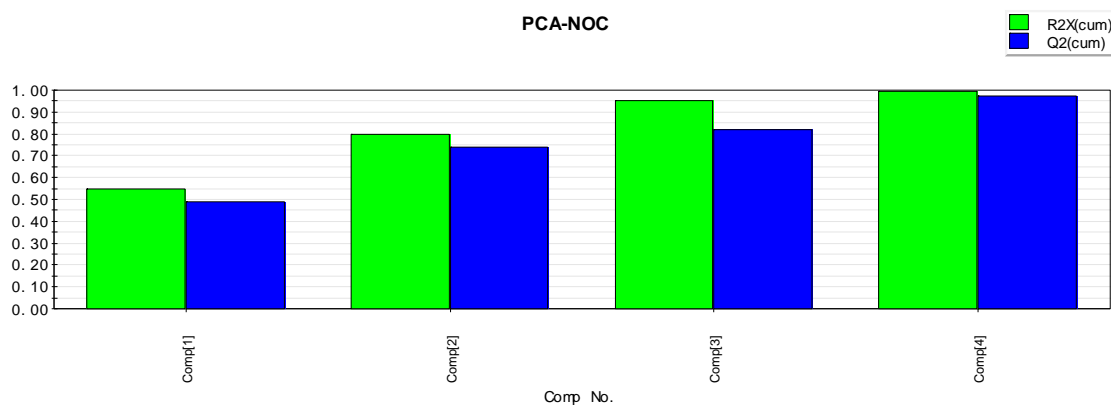


Figura 6.1 Medidas de bondad de ajuste $R_{Xcum}^2(a)$ y de predicción $Q_{cum}^2(a)$ acumulados en las 4 componentes NOC-PCA.

En la figura 6.2 se representa el gráfico de *scores* de la segunda componente frente a la primera componente. Este gráfico, además de darnos una visión general del proceso y trazar su evolución en el tiempo, nos permite detectar grupos de observaciones y datos anómalos, en el caso de que existan. En esta figura, se puede apreciar que las observaciones presentan una distribución homogénea en el plano creado por estas dos componentes. Como era de esperar no se observan valores anómalos que se alejen de la elipse de confianza ($100 \times (1-\alpha)\%$) calculada a partir de la T^2 de Hotelling, puesto que las observaciones se han generado simulando el proceso cuando funciona normalmente. Tan sólo 8 observaciones (3% del total) se encuentran fuera de la región de confianza elíptica, aunque muy próximas al mismo, lo cual es esperable puesto que se ha calculado con un 5% de nivel de significación. De hecho si se calcula dicha región con

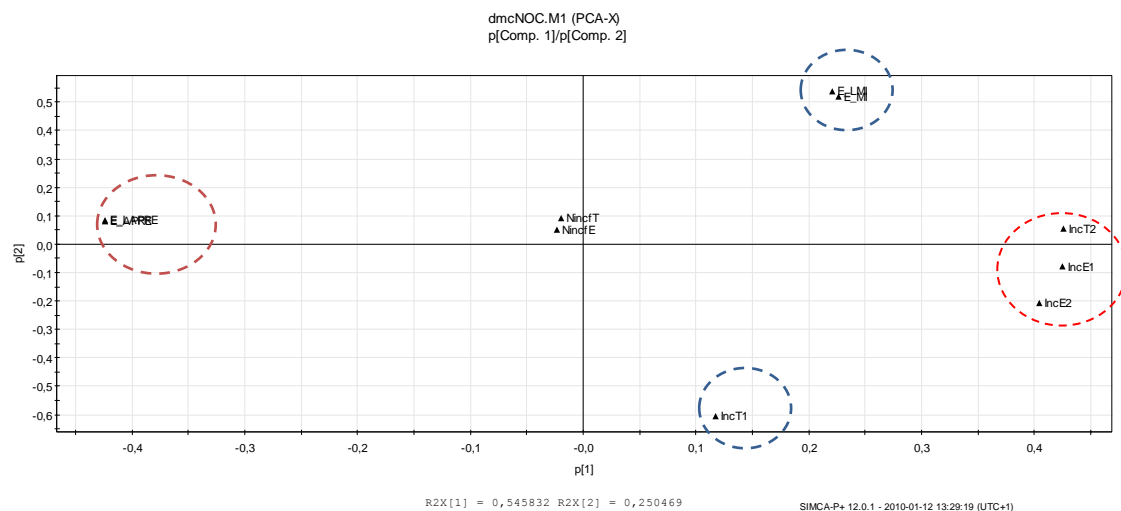


Figura 6.4 Gráfico de *loadings* PCA, de la segunda componente frente a la primera.

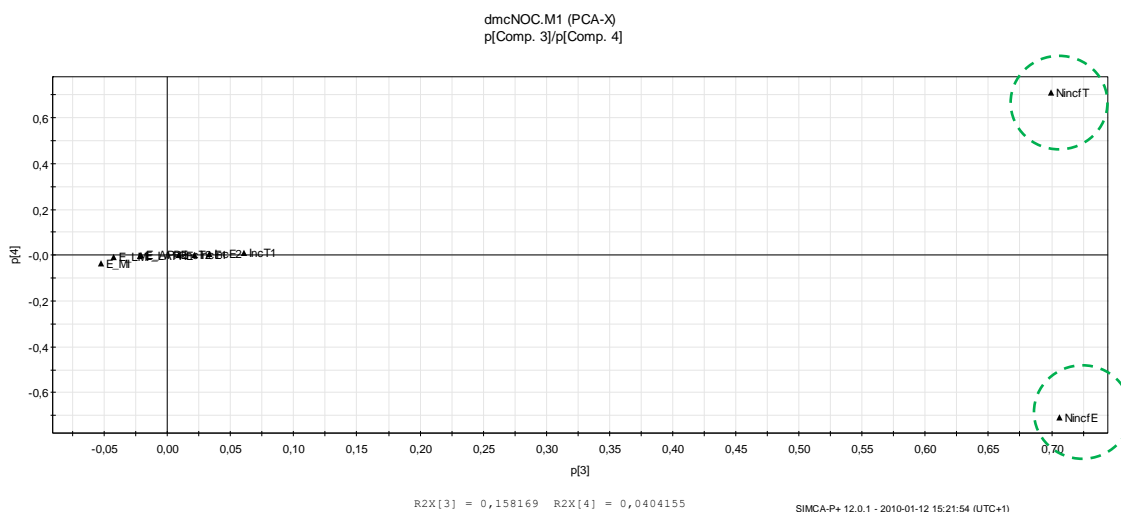


Figura 6.5 Gráfico de *loadings* PCA, de la cuarta componente frente a la tercera.

La dirección de mayor variabilidad del proceso corresponde a las desviaciones de la variable de salida de productividad *APRE* y a los movimientos de control calculados por el controlador DMC del caudal de etileno y el de la temperatura, este último calculado para el instante $t + 1$. A medida que disminuyen los errores tanto reales como predichos de *APRE*, aumenta la magnitud de los ajustes mencionados. La segunda dirección principal refleja las variaciones de la variable de calidad *MI*, y los movimientos de control de temperatura aplicados en cada instante t . En condiciones normales, a medida que disminuyen los errores tanto reales como predichos del *MI*, aumentan los ajustes de la temperatura en el instante t .

Por otro lado, la tercera componente refleja la variación registrada en los ajustes calculados, tanto de la temperatura como del caudal de etileno, es decir, la variación global de los movimientos de control, mientras que la cuarta y última componente indica cómo estos ajustes futuros de las variables manipuladas, tienen una correlación negativa entre ellos, si aumentan los de la temperatura disminuyen los del caudal de etileno y viceversa.

6.3 MONITORIZACIÓN DEL PROCESO: GRÁFICOS T_A^2 Y DMODX

A partir del modelo NOC-PCA se han construido los gráficos de control T_A^2 de Hotelling y de distancia al modelo DmodX. Si se proyectan las observaciones de referencia sobre ellos, vemos que no existe ninguna anomalía (ver figura 6.6), lo que de nuevo nos indica que el modelo NOC-PCA, se ha estimado a partir de observaciones del proceso funcionando normalmente.

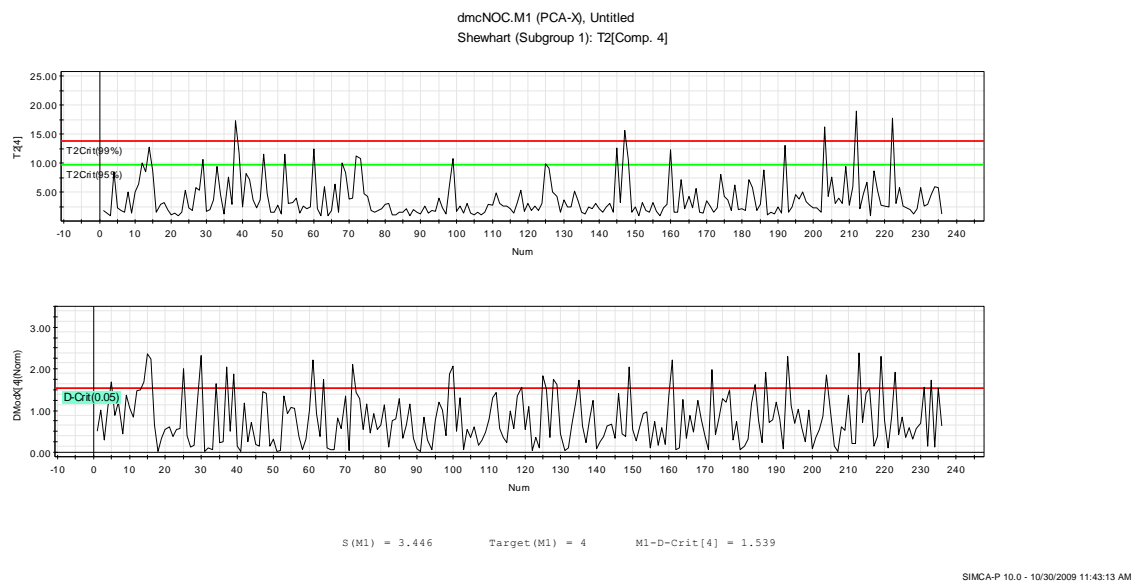


Figura 6.6 Proyección de las observaciones de referencia sobre los gráficos T_A^2 y DModX.

6.4 ESQUEMA DE MONITORIZACIÓN EN LÍNEA PROPUESTO

El procedimiento de monitorización que se propone tiene como objetivo comprobar en tiempo real si el proceso de polimerización PEAD está funcionando normalmente y detectar y diagnosticar lo más pronto posible los fallos que se puedan producir.

La monitorización y diagnóstico de fallos en tiempo real es fundamental para asegurar la calidad y la productividad del polímero resultante, ya que permitirá corregir los problemas con rapidez, impidiendo que se produzca producto fuera de especificaciones o al menos reduciéndolo y aportando conocimientos sobre el funcionamiento del proceso que ayude en la prevención de problemas en el futuro.

En la figura 6.7 se representa el esquema de monitorización propuesto. El procedimiento aplicado a cada nueva observación se describe esquematizado en la figura 6.8. Tal y como se refleja en dicha figura, la nueva observación \mathbf{x}^T , se proyecta sobre el modelo PCA, se calculan los vectores de *scores* y de residuos, la T_A^2 de Hotelling y la distancia al modelo DModX que se representan en sus correspondientes gráficos tal y como se muestra en la figura 6.7.

En primer lugar, se analiza el gráfico DModX y a continuación el gráfico T_A^2 . En el caso de que algún punto caiga fuera de los límites de control, se interrogaría al proceso mediante el gráfico de contribuciones que indica qué variables contribuyen a la perturbación registrada. Con esta información y los conocimientos técnicos que se tengan del proceso se facilita el diagnóstico de las causas de la salida de control.

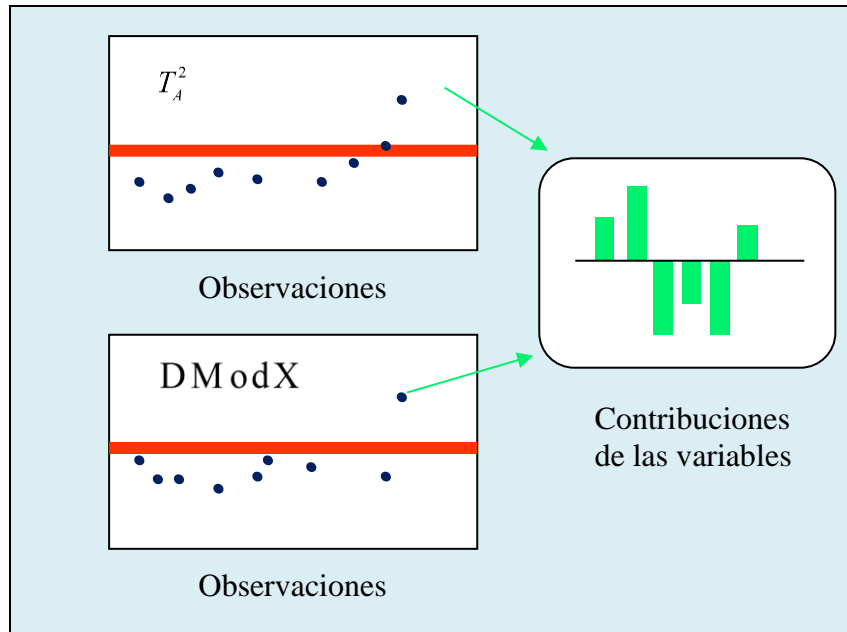


Figura 6.7 Esquema de monitorización propuesto

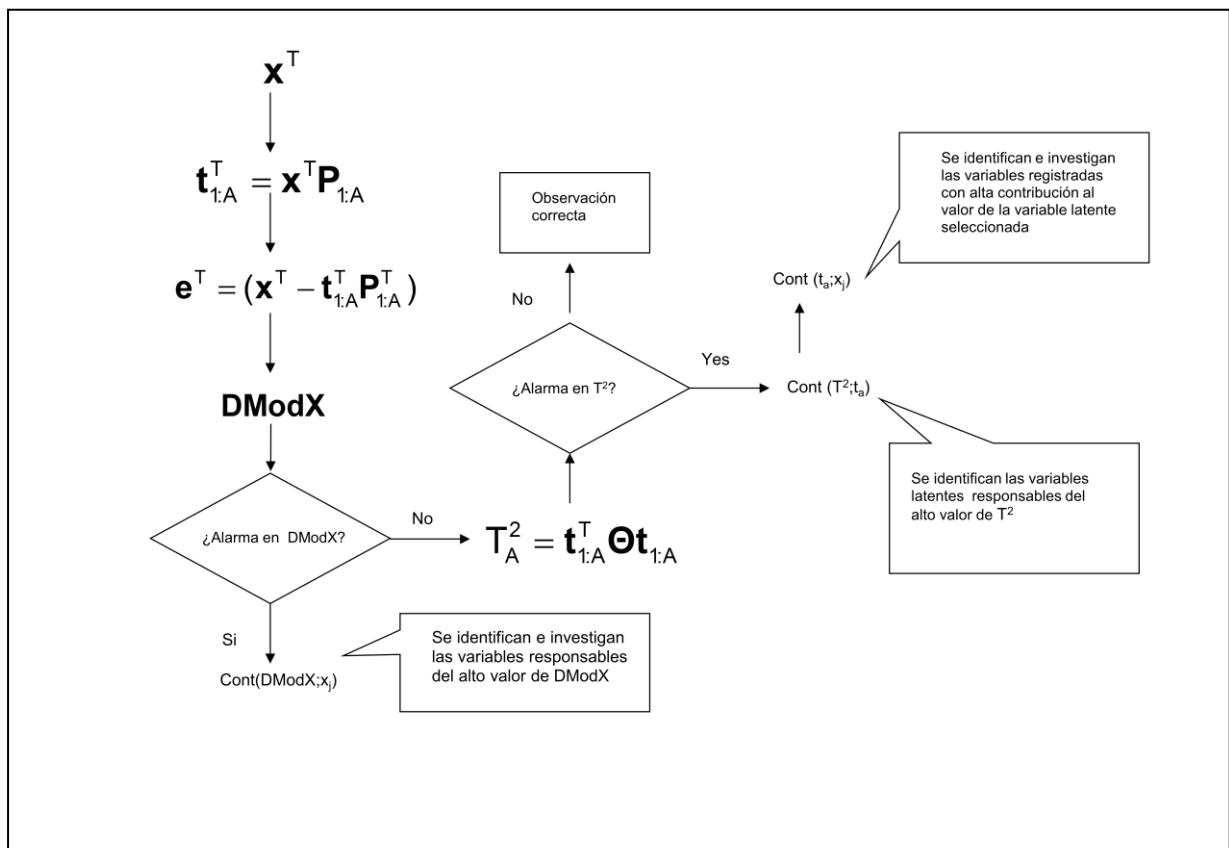


Figura 6.8 Procedimiento de monitorización propuesto.

Se propone una metodología integrada MESPC en la que la componente MSPC actúe monitorizando todo el sistema de control (figura 6.9). El elemento principal del sistema es el proceso PEAD, del que se requiere que opere eficaz y eficientemente produciendo

producto de buena calidad, con un nivel de productividad alto. Para alcanzar estos objetivos primordiales, los obstáculos son las perturbaciones del sistema, tanto comunes como especiales. Para compensar las causas comunes de variabilidad se instala el controlador DMC, que recibe información de los sensores o de las determinaciones en laboratorio, para mediante actuadores mantener el proceso estable alrededor de las consignas. El módulo MSPC, recibe información del controlador DMC, lo que permite detectar y diagnosticar las causas especiales de variabilidad, tanto del proceso como del controlador DMC. Se diseñan los gráficos derivados del modelo PCA basado en datos del proceso, T_A^2 de Hotelling, de distancia al modelo DModX y de contribución. Con ello, se supervisa tanto el rendimiento y robustez del controlador, como la calidad del producto y la productividad. El MSPC actúa como un controlador de alto nivel monitorizando todo el sistema. A lo que hay que añadir que toda la información generada ayuda a conocer más el proceso y mejorarlo continuamente.

6.5 EVALUACIÓN DEL SISTEMA MESPC DE CONTROL

Para analizar el funcionamiento del sistema MESPC integrado de control propuesto, se ha simulado el proceso funcionando en ciclo cerrado y monitorizado, en presencia de causas especiales de variabilidad. Cada una de las perturbaciones simuladas son similares a las que Capilla *et al.* (1999) probaron y publicaron sobre el mismo proceso con un control SISO. Estas perturbaciones representan algún tipo de problema que potencialmente se puede presentar en el proceso. Estos autores proponen un sistema de control integrado por un controlador univariante y control estadístico de procesos tradicional, también univariante, que llaman CCC ($r = 0.05$) (*Clarke's constrained controller*) /SPC.

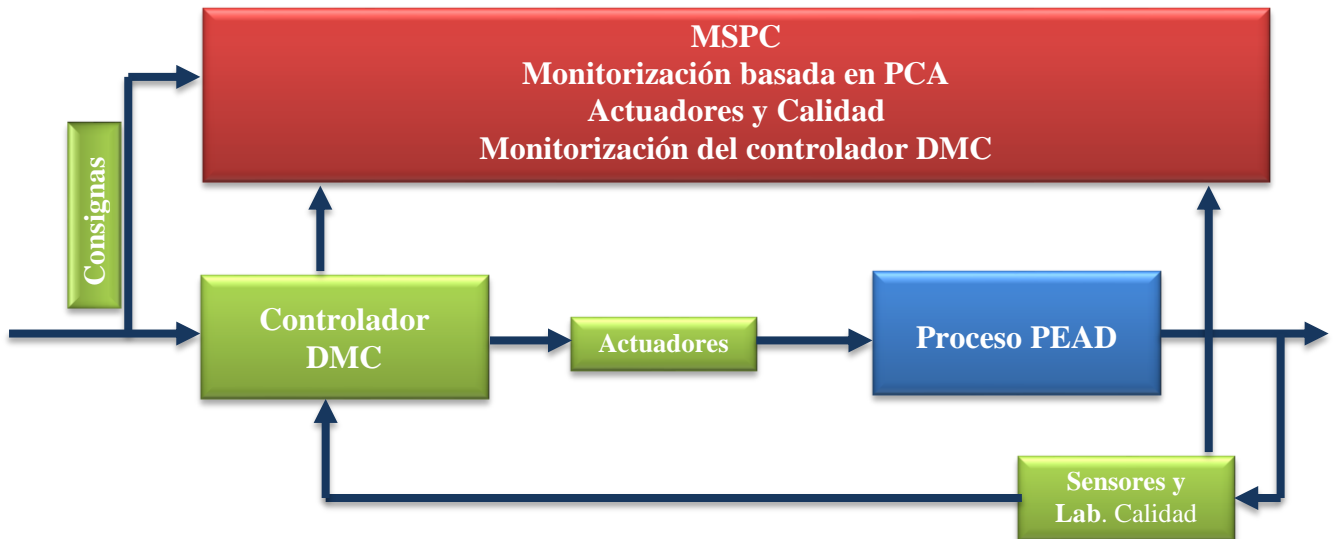


Figura 6.9 Sistema de control integrado MESPC propuesto.

Los fallos que van a ser tratados son:

1. Error de medida del MI
2. Error de medida del $APRE$
3. Fallo del sensor del lazo de temperatura
4. Deriva en el MI
5. Cambio parcial en los parámetros de la función de transferencia del $APRE$

6.5.1 Error de medida del MI

Se ha supuesto que en los instantes $t=30$ y $t=130$ el proceso de medida de viscosidad del polietileno MI en el laboratorio o el analizador en línea, introduce sendos errores analíticos de magnitud $\delta = 0.3$ unidades ($\approx 5\sigma_{a_{it}}$). El desfase entre el valor observado y el verdadero del MI , se puede expresar de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 MI_{t \text{ observado}} &= MI_{t \text{ real}} + \delta I[t] = \\
 &= MI_{t-1} + (\omega_{11,1} + \omega_{11,2}B)\nabla T_{t-1} + (\omega_{12,1} + \omega_{12,2}B)\nabla E_{t-1} + a_{it} + \delta I[t]
 \end{aligned}
 \tag{6.1}$$

donde

$$I[t] = 0 \quad \text{si } t \neq 30 \text{ y } t \neq 130$$

$$I[t] = 1 \quad \text{si } t = 30 \text{ o } t = 130$$

En la figura 6.10 se han representado las series temporales superpuestas de las señales de las 10 variables registradas, escaladas y centradas, cuya inspección no pone claramente de manifiesto los fallos que se están produciendo en los instantes $t=30$ y $t=130$. Sin embargo, un análisis multivariante de los datos, puede revelar estos fallos con mayor claridad.

Se representan las observaciones nuevas, proyectadas sobre el modelo NOC-PCA, en los gráficos T_A^2 de Hotelling y DModX que se pueden ver en la figuras 6.11. La T_A^2 de Hotelling derivada de los *scores* PCA, es una media ponderada de éstos que mide la distancia de Mahalanobis de la proyección de una observación en el hiperplano definido por el modelo PCA, al centro de dicho hiperplano. Permite detectar desviaciones significativas respecto a la variación sistemática de los datos. Por su parte, la DModX mide la variación residual en la observación que no se captura en el modelo PCA. La figura 6.11 muestra la señal de “salida de control”. En este caso, dicha señal aparece antes en el gráfico T_A^2 que en el gráfico DModX. El proceso es llevado a su estado de control un periodo después por la acción del controlador DMC, sin embargo durante el periodo en que se produce el problema, si no se elimina inmediatamente la causa de variabilidad especial, el proceso puede estar produciendo fuera de especificaciones.

Tras detectarse una señal en los gráficos de control, es necesario diagnosticar la causa de esa perturbación en el proceso, con el objetivo de eliminarla lo más pronto posible mediante la correspondiente acción correctora. Para ello resulta muy útil el gráfico de contribuciones de las variables originales a los *scores* t_a , cuya contribución a la formación de la T_A^2 haya resultado más elevada en la observación en la que se ha detectado el problema. En este caso las variables latentes que más han contribuido al alto valor de la T_A^2 , han sido t_2 y t_4 .

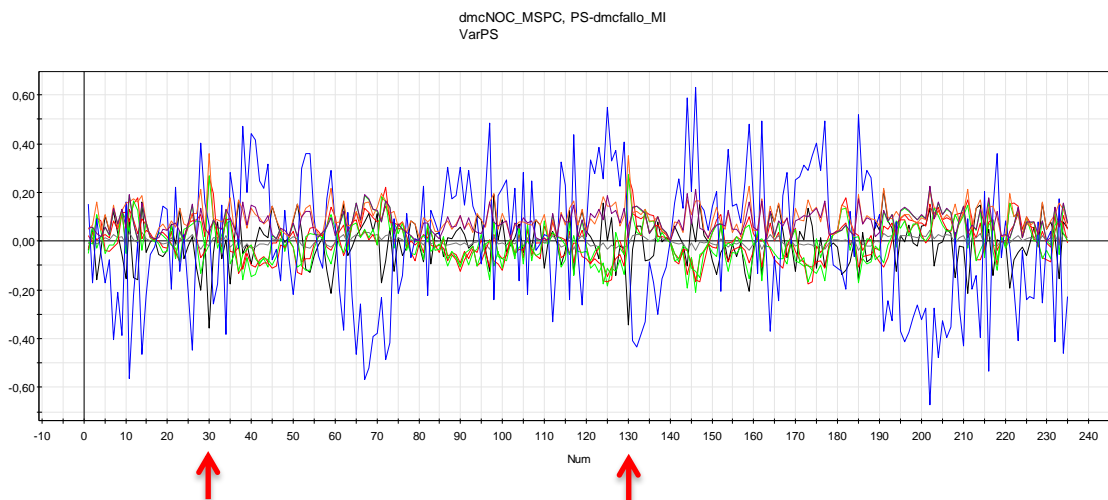


Figura 6.10 Gráfico de las series temporales superpuestas de las 10 variables registradas. No se revelan con claridad los fallos que se están produciendo.

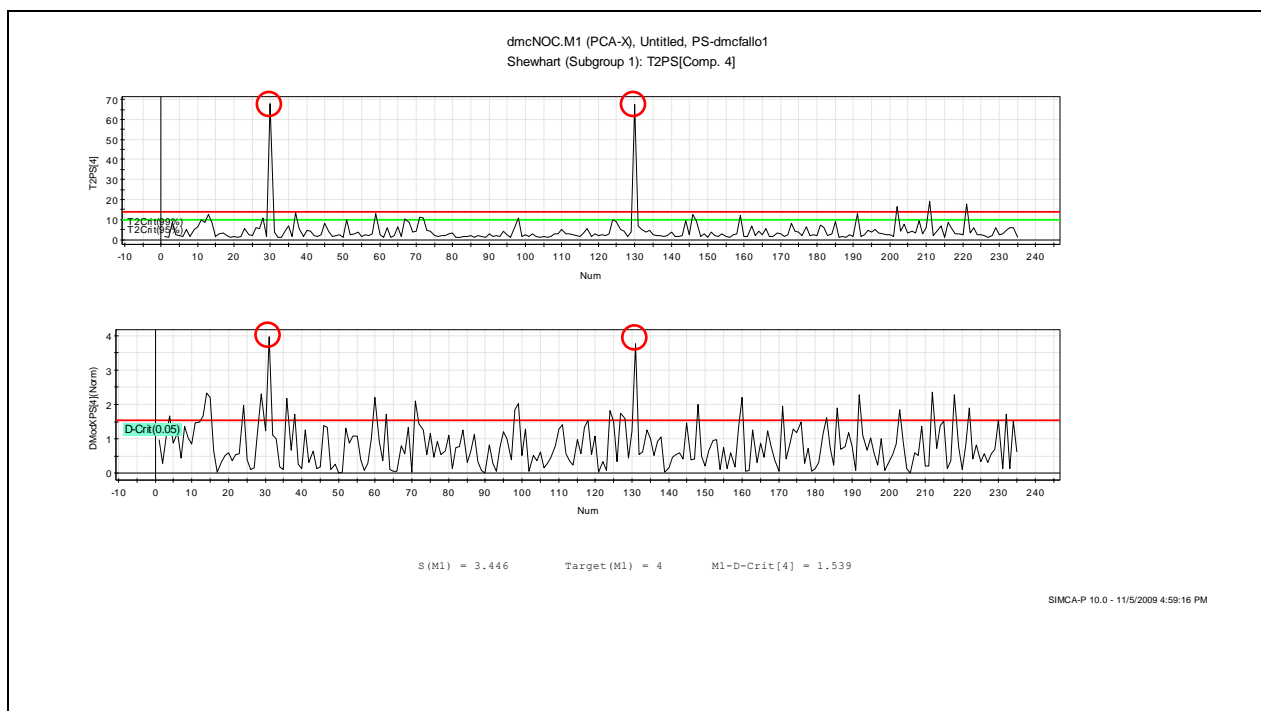


Figura 6.11 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de sendos errores de medida del MI en $t=30$ y en $t=130$: gráficos T_A^2 y $DModX$.

La figura 6.13 muestra las contribuciones para la observación $t = 30$ y el *score* t_2 . En la misma podemos ver que las variables registradas con mayor contribución al *score* t_2 son los errores del *MI*, tanto el error en $t = 30$, como el error predicho para $t+1$, en el instante $t = 30$. El valor negativo de la contribución del ajuste de la temperatura en el instante $t = 30$ significa que, su valor es menor que el valor medio en el modelo. Estas son las variables que deben ser investigadas, lo que probablemente nos llevaría a diagnosticar que el problema ha estado en la medida del *MI*. Este error analítico afecta al siguiente valor de T (temperatura) porque la acción de control para el próximo periodo está basada en un *MI* erróneo, mayor del que realmente es, lo que conduce a un ajuste de control lógicamente negativo, con una magnitud más grande de lo esperado y de lo realmente necesitado. La norma del vector de incrementos de T tiene una contribución alta al *score* t_4 tal como puede verse en la figura 6.14. El patrón de contribuciones se reproduce en la observación $t = 130$ en donde se ha simulado un fallo similar. Como se constata, cuando el proceso se sale de control, analizar las variables latentes afectadas nos permite reconocer qué es lo más probable que haya sucedido en las variables originales en donde el fallo ha dejado su huella, ya que se conoce el patrón de variabilidad y cómo se forman las CP, en condiciones de funcionamiento normal del proceso. Además, para facilitar el diagnóstico de fallos del sistema en el futuro, se puede ir registrando un banco de huellas o firmas que van dejando los diferentes fallos. Respecto a los resultados obtenidos por Capilla *et al.* (1999), que proponen un sistema SISO de control ESPC para el mismo proceso, la salida de control se detecta en el mismo periodo $t = 30$ en el que se ha producido, el controlador DMC lleva el proceso a su nominal en el siguiente instante de tiempo $t = 31$, mientras que el controlador univariante propuesto por estos autores lo hace un periodo después, en $t = 32$, lo que en la práctica son dos horas después. En ese periodo de tiempo es posible que se haya producido ya producto fuera de especificaciones. Aunque hay que tener en cuenta, que en este caso se ha controlado el proceso además de con la temperatura, con la variable manipulada adicional, caudal de etileno.

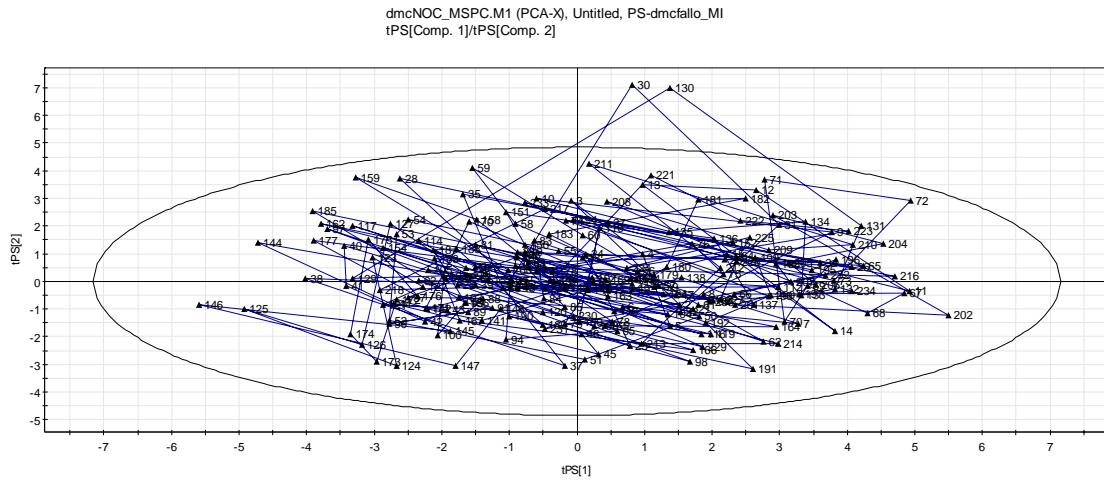


Figura 6.12 Gráfico de *scores PCA*, de la segunda CP frente a la primera, t_2 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: error *MI*.

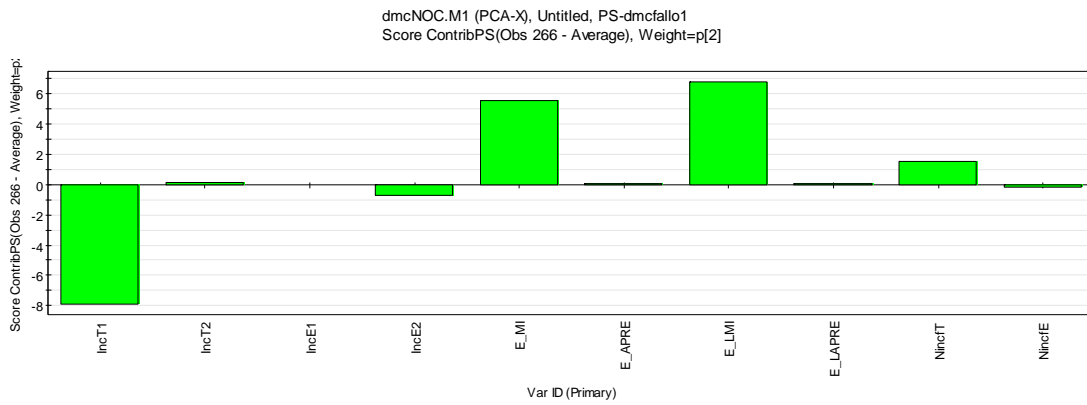


Figura 6.13 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de fuera de control en el gráficos T_A^2 y la componente 2.

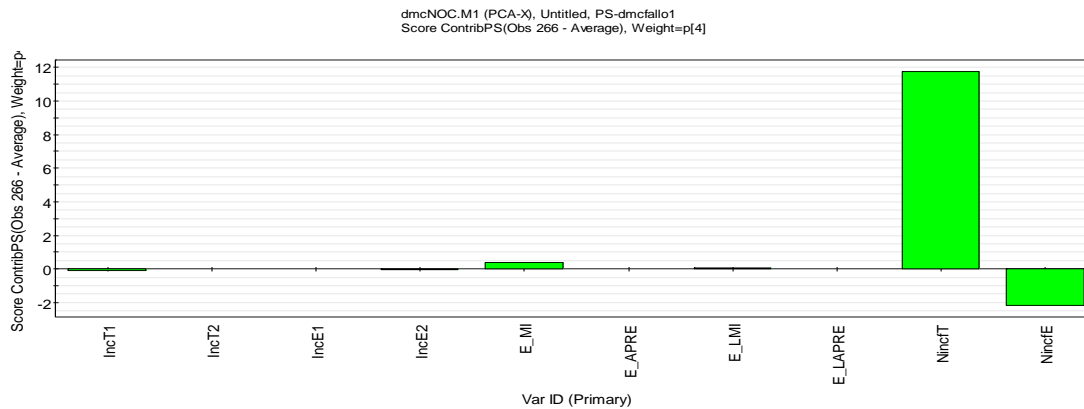
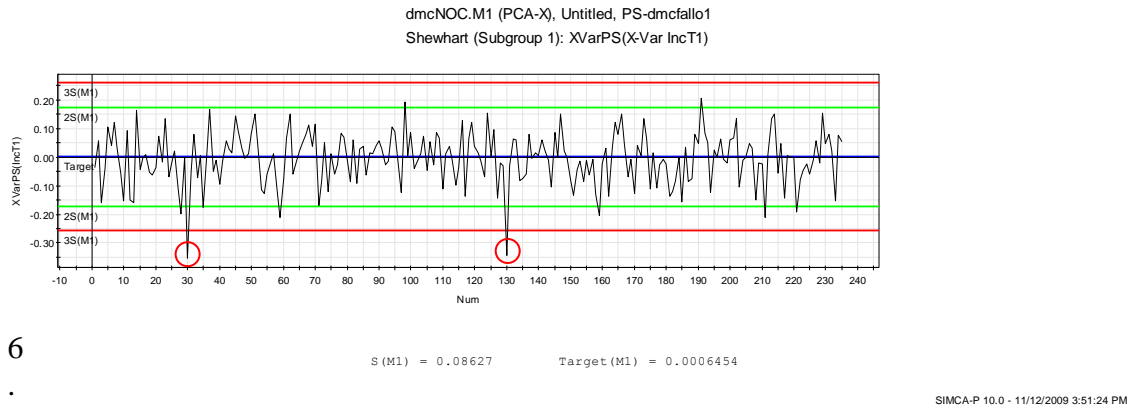


Figura 6.14 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de fuera de control en el gráfico T_A^2 y la componente 4.

El estadístico multivariante T_A^2 da una magnitud absoluta de la desviación del proceso dentro del subespacio latente, pero no indica la dirección en la cual se está moviendo el proceso. Para obtener dicha información son útiles los gráficos de dispersión de los *scores*. En la figura 6.12 se muestra el gráfico de *scores* t_2 / t_1 en las dos primeras CP, de este conjunto de datos. El límite de control elíptico T_A^2 (99%) se calcula a partir de todas las variables. Se puede observar que el proceso se ha movido fuera de la elipse de control en las observaciones $t = 30$ y $t = 130$. Tras estas observaciones, el proceso vuelve a la región de funcionamiento normal por la acción del controlador DMC. Como puede constatarse, este tipo de gráficos puede ser muy útil para observar la evolución del proceso y sus posibles desviaciones de un vistazo. No obstante, como la información contenida en todas las variables se ha condensado en cuatro CP, es conveniente analizar e interpretar todos los posibles planos formados por las componentes principales, aunque aquí con fines ilustrativos solo se ha representado el formado por las dos primeras componentes.

Las perturbaciones simuladas en el proceso se ven también reflejadas en los gráficos de control Shewhart univariantes de estas variables, cuya contribución a la T_A^2 ha sido considerable. En las figuras 6.15-6.18 se pueden ver estos gráficos. Sin embargo, cabe hacer notar que utilizando sólo dos gráficos de control multivariante, en vez de diez univariantes y analizando las contribuciones, se detecta la salida de control de diferentes variables simultáneamente. Se tiene pues una visión conjunta de la

perturbación producida, lo que ayuda a diagnosticar la/s causa/s y sin duda simplifica el control. Además los gráficos univariantes no tienen en cuenta la posible correlación entre las variables, lo que tiene como consecuencia la posibilidad de que el proceso esté fuera de control, y que no se detecte. Con el método de monitorización propuesto, la elipse de control se construye teniendo en cuenta dicha correlación, de manera que aumenta la eficiencia en la detección de problemas en el proceso.



6
.

1
5 Gráfico de control Shewhart de la variable *incT1*.

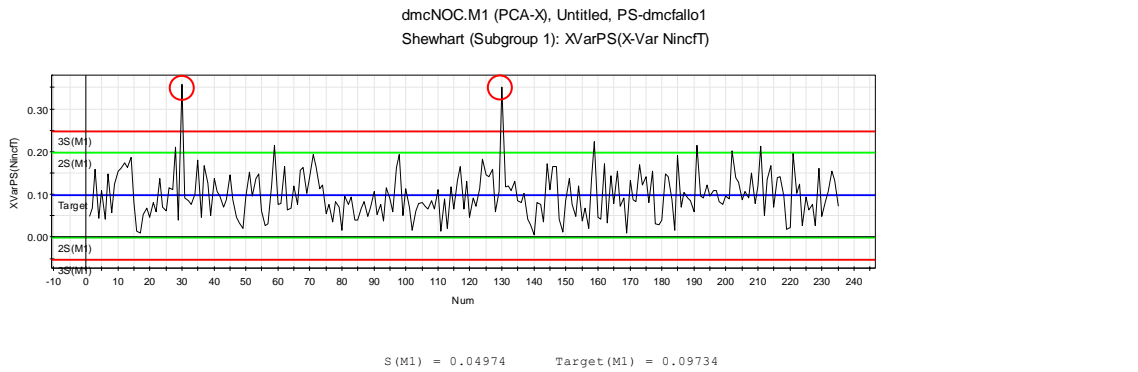


Figura 6.16 Gráfico de control Shewhart de la variable *NincT*.

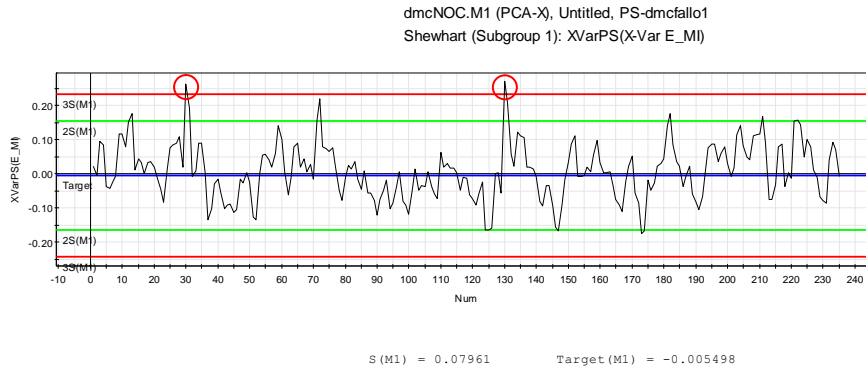


Figura 6.17 Gráfico de control Shewhart de la variable E_{MI} .

SIMCA-P 10.0 - 11/12/2009 3:53:08 PM

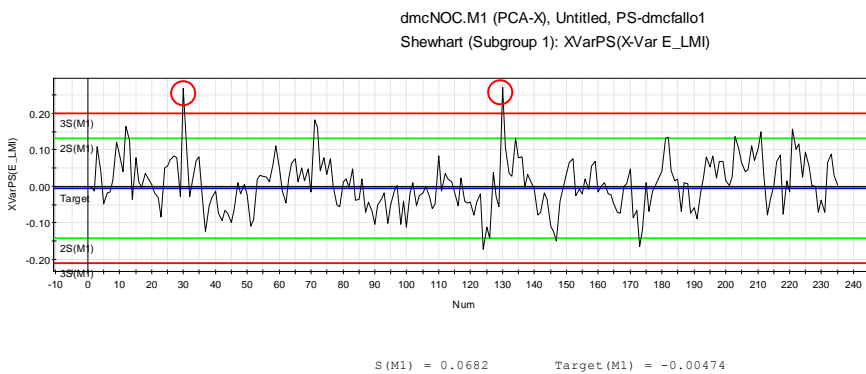


Figura 6.18 Gráfico de control Shewhart de la variable E_{LMI} .

SIMCA-P 10.0 - 11/12/2009 3:54:04 PM

6.5.2 Error de medida en el APRE

La variable controlada $APRE$ es un índice de productividad, que se calcula por balance de energía. Se ha supuesto que en el instante $t = 30$ se produce un error en el valor obtenido de $APRE$, de magnitud $\delta = 1.2$ unidades ($\approx 5 \sigma_{a_{2t}}$). El desfase entre el valor observado y el verdadero, se puede expresar de la siguiente forma:

$$APRE_{t-cal} = APRE_{t-real} + \delta I[t] =$$

$$APRE_{t-1-real} + (\omega_{21,1} + \omega_{21,2}) \nabla T_{t-1} + \omega_{22,1} \nabla E_{t-1} + \frac{1}{(1-\phi B)} a_{2t} + \delta I[t] \tag{6.2}$$

donde

$$I[t] = 0 \quad \text{si } t \neq 30$$

$$I[t] = 1 \quad \text{si } t = 30$$

En la figura 6.19 se muestran los gráficos T_A^2 y DModX de la realización del proceso simulado en presencia de este fallo. La señal se detecta en el gráfico de la T_A^2 en el mismo periodo en el que se ha producido el fallo y en un periodo posterior en el gráfico DModX. En el gráfico de la T_A^2 , hay cuatro puntos consecutivos fuera del límite de control, mientras que en el gráfico DModX sólo se observa uno. En la figura 6.20, se representa el gráfico de *scores* de la segunda CP, frente a la primera t_2 / t_1 . En el mismo, se puede observar la evolución del proceso. A partir de la observación del instante $t = 30$, el proceso se sale de la elipse de control T_A^2 de Hotelling (99%), regresando a la zona de funcionamiento normal por la acción del controlador varios periodos después.

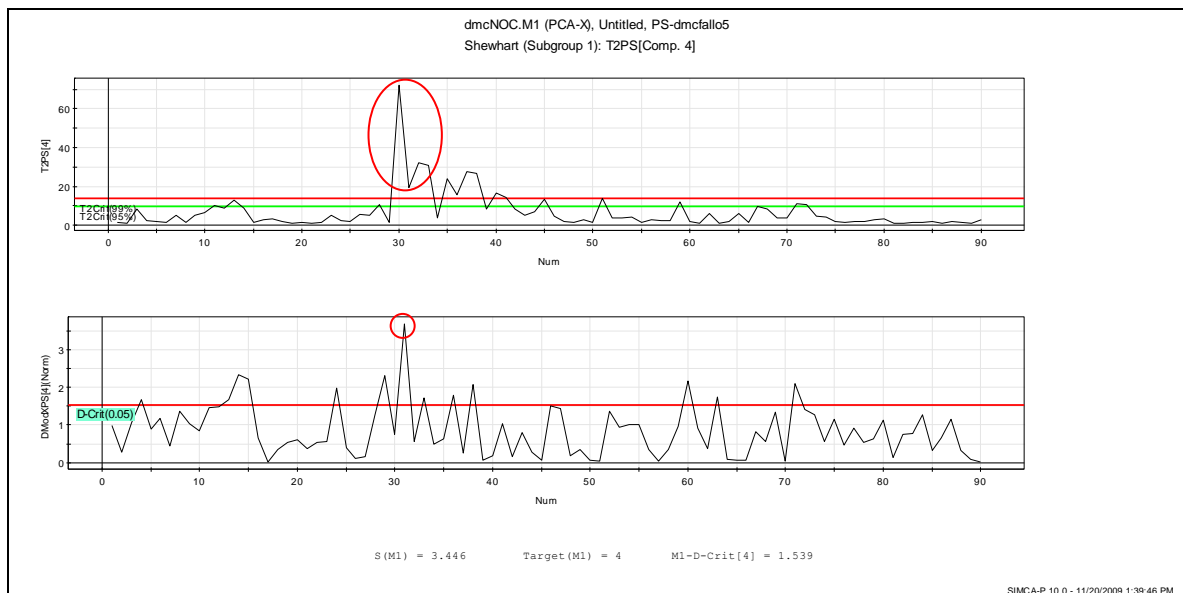


Figura 6.19 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de un error de obtención del APRE: gráficos T_A^2 y DModX.

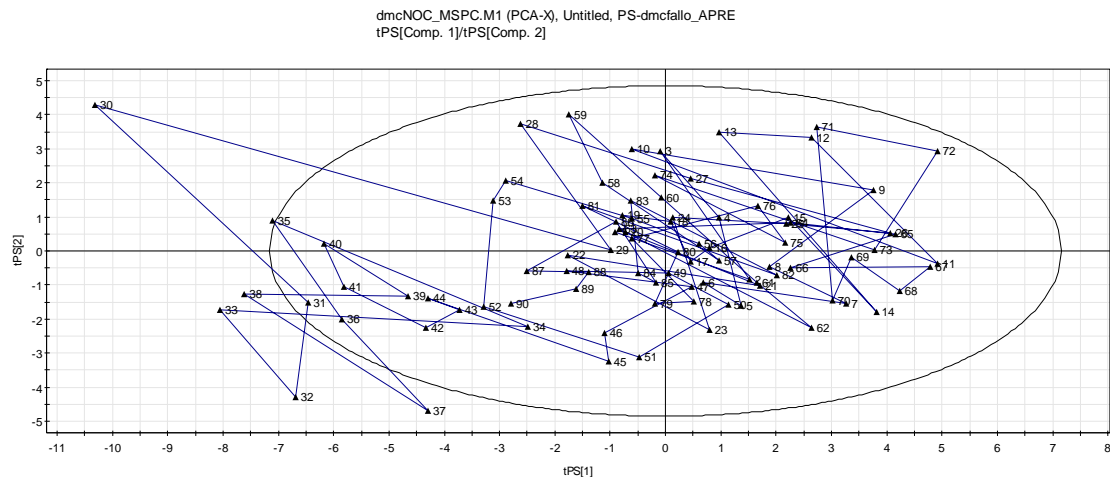


Figura 6.20 Gráfico de *scores PCA*, de la segunda CP frente a la primera, t_2 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: error *APRE*.

La figura 6.21 muestra las contribuciones a la primera variable latente t_1 , en la observación $t = 30$. Las variables registradas con mayor contribución son los errores del *APRE*, tanto el error en $t = 30$, como el error predicho para $t+1$, así como los ajustes de las variables manipuladas, calculados para ambos instantes. Aunque entre los ajustes de la temperatura, tiene menor contribución el ajuste para $t = 30$, al contrario de lo que ocurría en el caso anterior, cuando el error se producía en el *MI*. Se ha obtenido el gráfico de contribución a la CP, t_3 , puesto que también contribuye en gran medida a la T_A^2 . Como se puede ver en la figura 6.22, las normas de los vectores de las acciones de control, son más elevadas de lo normal, sobre todo las acciones del caudal de etileno, que están correlacionadas con las desviaciones del *APRE*, lo que nos da más pistas acerca del fallo producido. Este patrón de contribuciones nos permitirá diagnosticar adecuadamente este tipo de fallo, tras ser detectado en los gráficos de control.

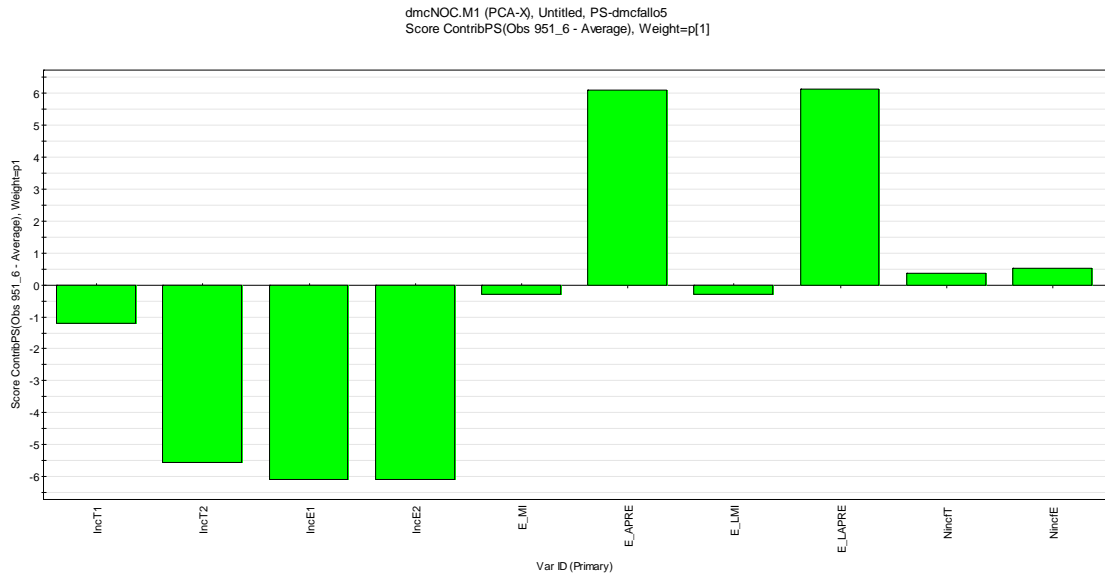


Figura 6.21 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de fuera de control en el gráfico T_A^2 y la componente 1.

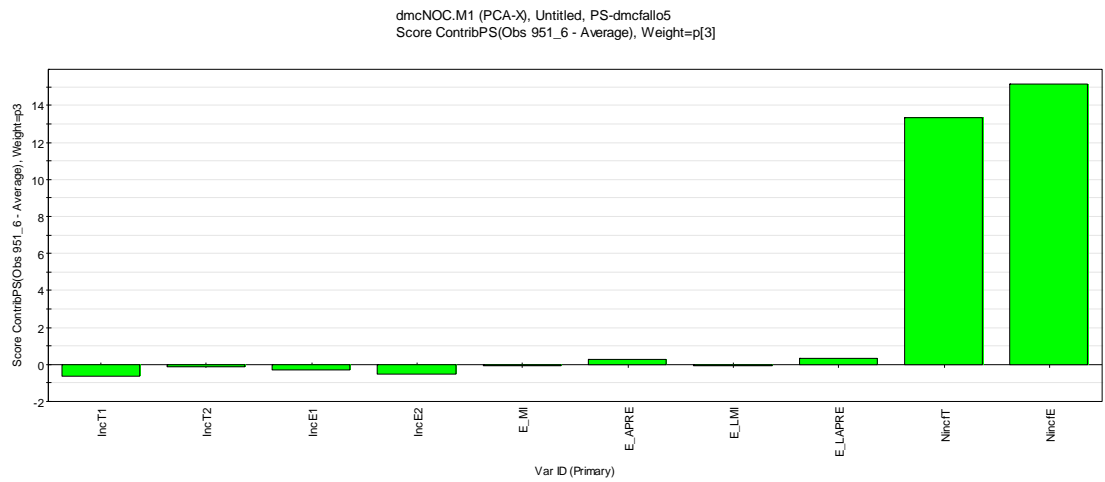


Figura 6.22 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de fuera de control en el gráfico T_A^2 y la componente 3.

6.5.3 Fallo en el lazo de control de *TEMPERATURA*

Otro de los fallos potenciales que se ha simulado es un posible error en el lazo de control de temperatura de magnitud $\delta=1$. El desfase entre el valor observado y el valor verdadero de la T , se puede expresar de la siguiente forma:

$$T_{t \text{ observado}} = T_{t \text{ real}} + \delta I[t] \quad (6.3)$$

donde:

$$I[t] = 0 \quad \text{si } t < 30$$

$$I[t] = 1 \quad \text{si } t \geq 30$$

En la figura 6.23, se muestran los gráficos de control T_A^2 y DModX. El problema se detecta también aquí, en el gráfico de la T_A^2 , en el mismo periodo en el que se ha producido el fallo y en el DmodX un período después. Respecto a los resultados obtenidos por Capilla *et al.* 1999, el fallo se detecta un periodo antes. Detectar lo antes posible la perturbación tiene gran importancia, ya que permite subsanar el problema tan pronto como se presenta, reduciéndose al máximo el intervalo de tiempo en el que el proceso produce producto fuera de especificaciones. Incluso es posible actuar antes de que el controlador empiece la acción de compensar la perturbación producida, lo que conllevaría una reducción considerable de producto fuera de especificaciones.

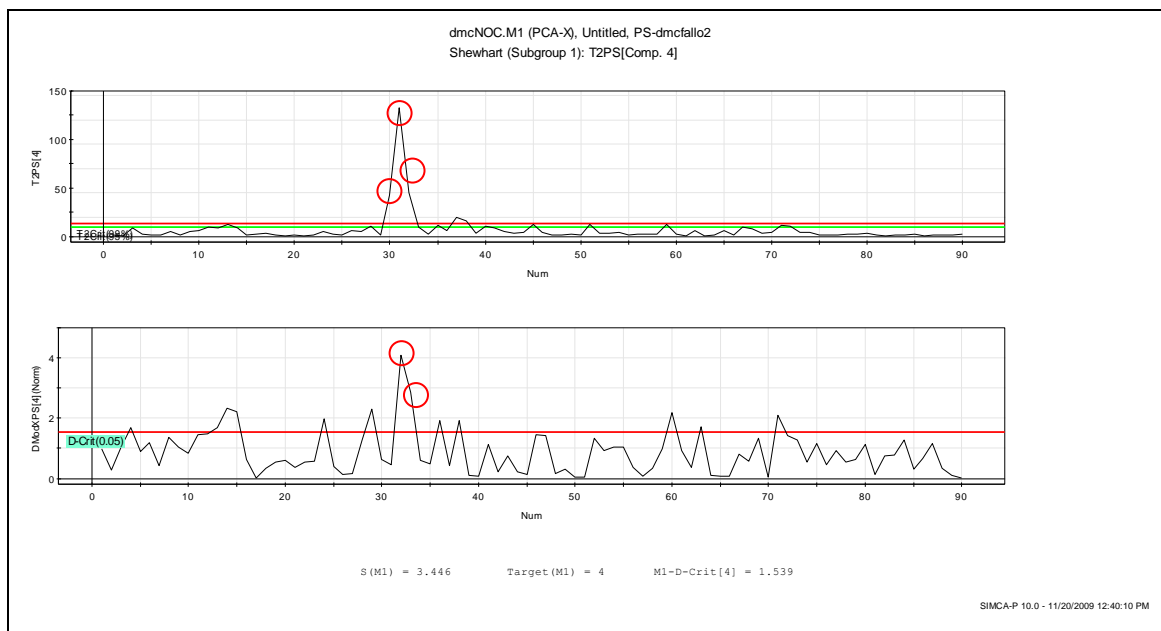


Figura 6.23 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de un fallo en el lazo de control de *TEMPERATURA*: gráficos T_A^2 y $DModX$.

En los controles rutinarios, se han obtenido los gráfico de *scores*, en las diferentes CP y en el de la cuarta CP frente a la tercera t_4 / t_3 (ver figura 6.24), se ve cómo el proceso deambula durante tres periodos fuera de la elipse de control T_A^2 (99%) a partir de la observación 30, para regresar a la misma en la observación 33. Esto indica que el proceso se ha salido de control.

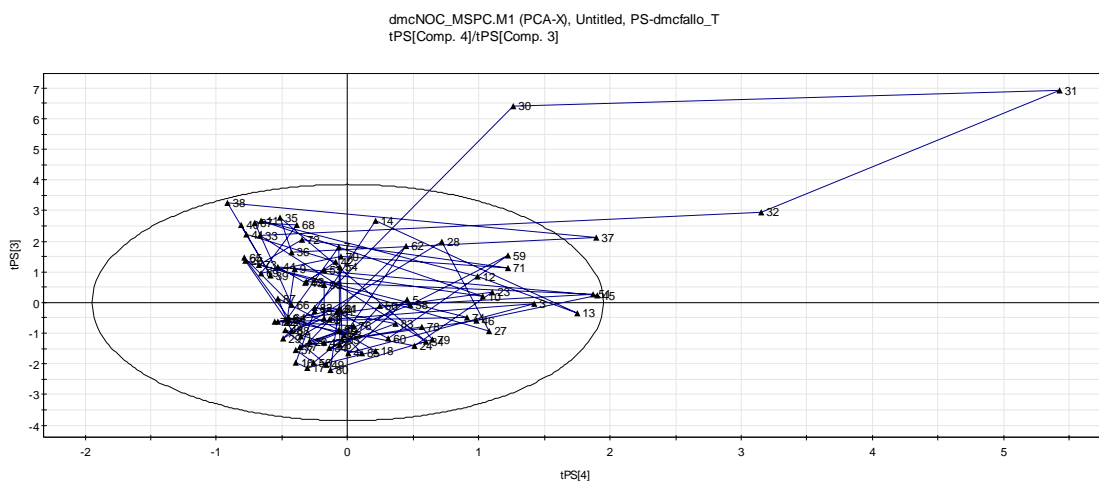


Figura 6.24 Gráfico de *scores PCA*, de la tercera CP frente a la tercera, t_4 / t_3 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: error sensor *TEMPERATURA*.

Una vez se ha detectado el fallo, para diagnosticar la posible causa, se analizan los *scores* en las observaciones donde se ha detectado el problema. En este caso, el *score* más elevado de los que componen la T_A^2 es el de la cuarta componente. Por ello, se examina el gráfico de contribuciones de las variables originales a dicho *score*, en estas observaciones anómalas. En la figura 6.25, se ve el gráfico de contribución en la CP 4. La contribución de la norma del vector de ajustes de la temperatura es la más destacada.

La CP 2, es la que le sigue a la CP 4 en contribución a la T_A^2 . En el gráfico de contribuciones para las observaciones en $t = 30$ y $t = 31$ (ver figuras 6.26 y 6.27) se ve que las variables con mayor contribución al *score* son el ajuste de temperatura *incTI*, seguida de los errores del *MI*, es decir, E_MI ; E_LMI . En la observación 31 se agrava el problema y el error del *MI* es todavía mayor.

En la figura 6.28 se muestra el gráfico de contribución de la observación $t = 30$ y la componente 3, que también ha contribuido a aumentar la T_A^2 . Se observa que las variables registradas que contribuyen principalmente a la T_A^2 , son las normas de los vectores de ajustes de la temperatura y del caudal de etileno, siendo relativamente mayor la contribución correspondiente a la primera.

Por lo tanto, es probable que en estas variables se haya reflejado el fallo, apuntando todo a la temperatura, por lo que se trata de inspeccionar lo relacionado con la temperatura y el *MI* hasta diagnosticar el problema y solucionarlo. Este patrón de contribuciones nos podría permitir en el futuro diagnosticar este tipo de problema.

El fallo en el sensor de temperatura hace que el resultado de la acción de control en $t = 30$, no sea adecuado, puesto que el sensor no va bien, y dejará la temperatura del proceso un grado por debajo de lo recomendable. Vemos que el proceso se ha salido de control y permanece así en $t = 31$ y $t = 32$, que son los periodos que el controlador necesita para llevar el proceso a su funcionamiento normal. Los gráficos de *scores* y los de control T_A^2 y SPE nos han ayudado a detectarlo y los gráficos de contribuciones nos ayudan a diagnosticarlo. El sistema integrado MESPC que se propone ayudará a detectar y corregir el fallo, tan pronto como se produce. Si como ocurre en esta simulación no se elimina inmediatamente, el controlador llevará el proceso a su región de operación normal, pero durante 3 periodos ($t = 30, 31$ y 32) aumentará el error en *MI*

además de que durante estos periodos habrá mayor esfuerzo de control que puede llevar algún coste asociado.

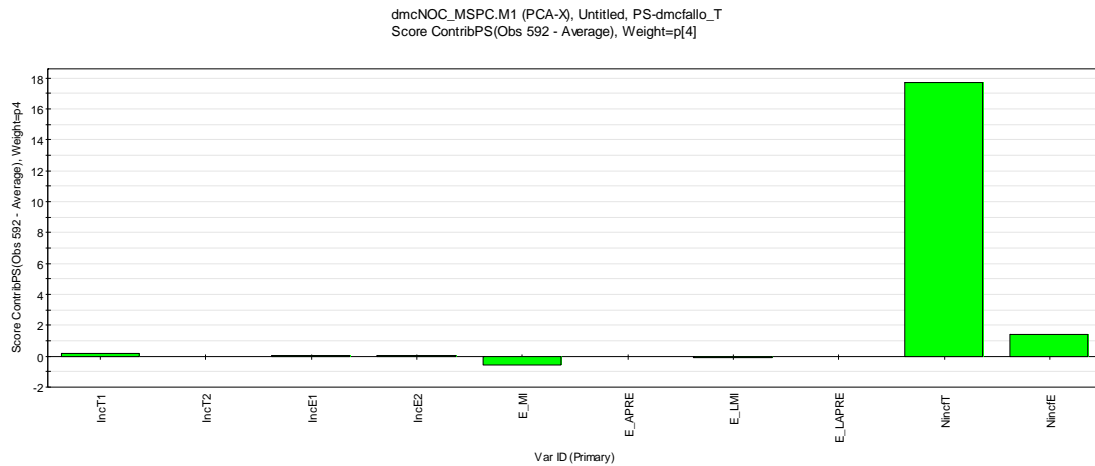


Figura 6.25 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 31$, y la componente 4.

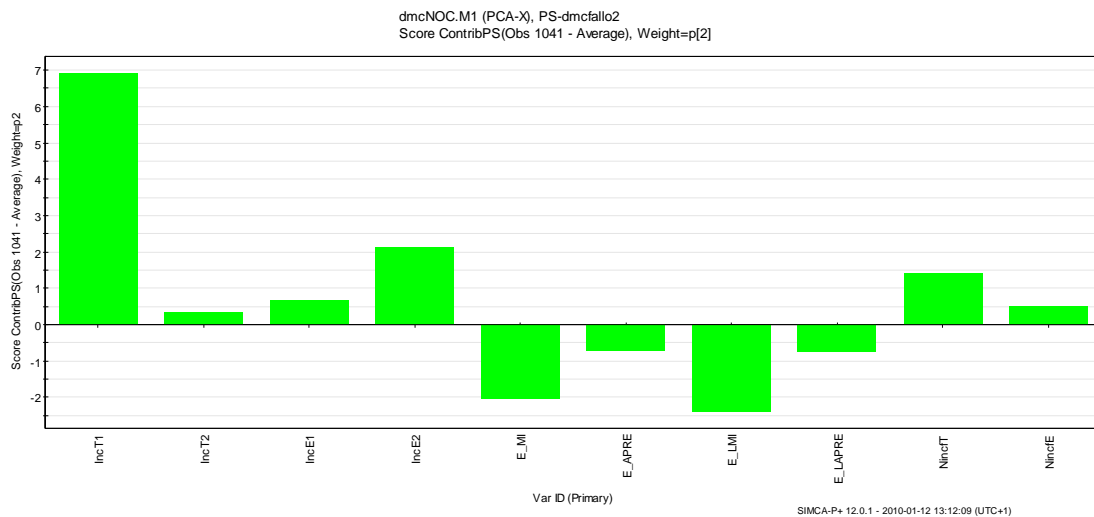


Figura 6.26 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$ y la componente 2.

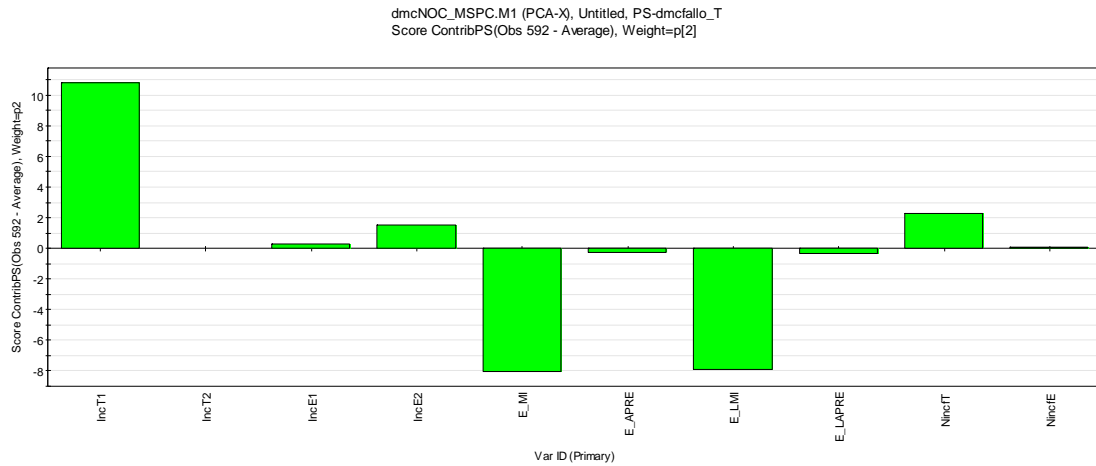


Figura 6.27 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 31$ y la componente 2.

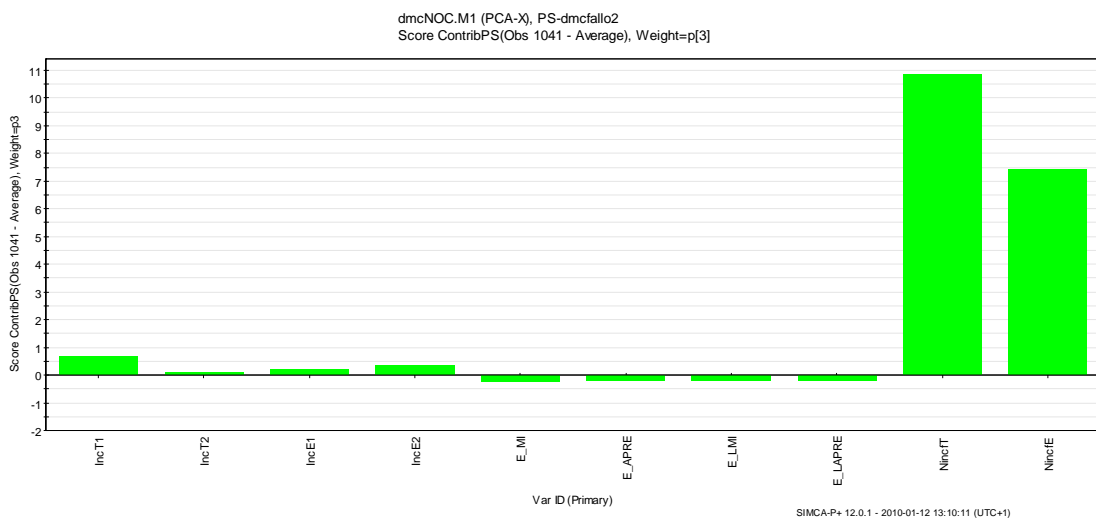


Figura 6.28 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de salida de control en el gráfico T^2 y la componente 3.

6.5.4 Deriva en el MI

Se ha considerado una causa especial que produce un desplazamiento permanente en el MI , de magnitud moderada $\delta=0.05$ ($\approx \sigma_{a_i}$) desde el periodo $t=30$ en adelante. Este cambio podría ser inducido por ejemplo por periodos de transición entre la activación de un catalizador y la de otro. Esta perturbación puede expresarse como:

$$MI_t = MI_{t-1} + (\omega_{11,1} + \omega_{11,2}B)\nabla T_{t-1} + (\omega_{12,1} + \omega_{12,2}B)\nabla E_{t-1} + a_{1t} + \delta I[t] \tag{6.4}$$

donde

$$I[t] = 0 \quad \text{si } t < 30$$

$$I[t] = 1 \quad \text{si } t \geq 30$$

La figura 6.29 muestra los resultados de la monitorización del proceso bajo esta perturbación. En esta ocasión se ha utilizado un gráfico EWMA multivariante para monitorizar la T_A^2 , ya que resulta más adecuado para detectar desviaciones permanentes de pequeña magnitud. Pese a esta pequeña magnitud, el fallo se detecta en este gráfico dos periodos después de haberse producido el problema. En cambio, el gráfico DModX tarda bastante más en señalarlo, ya que no se manifiesta hasta el periodo $t=36$.

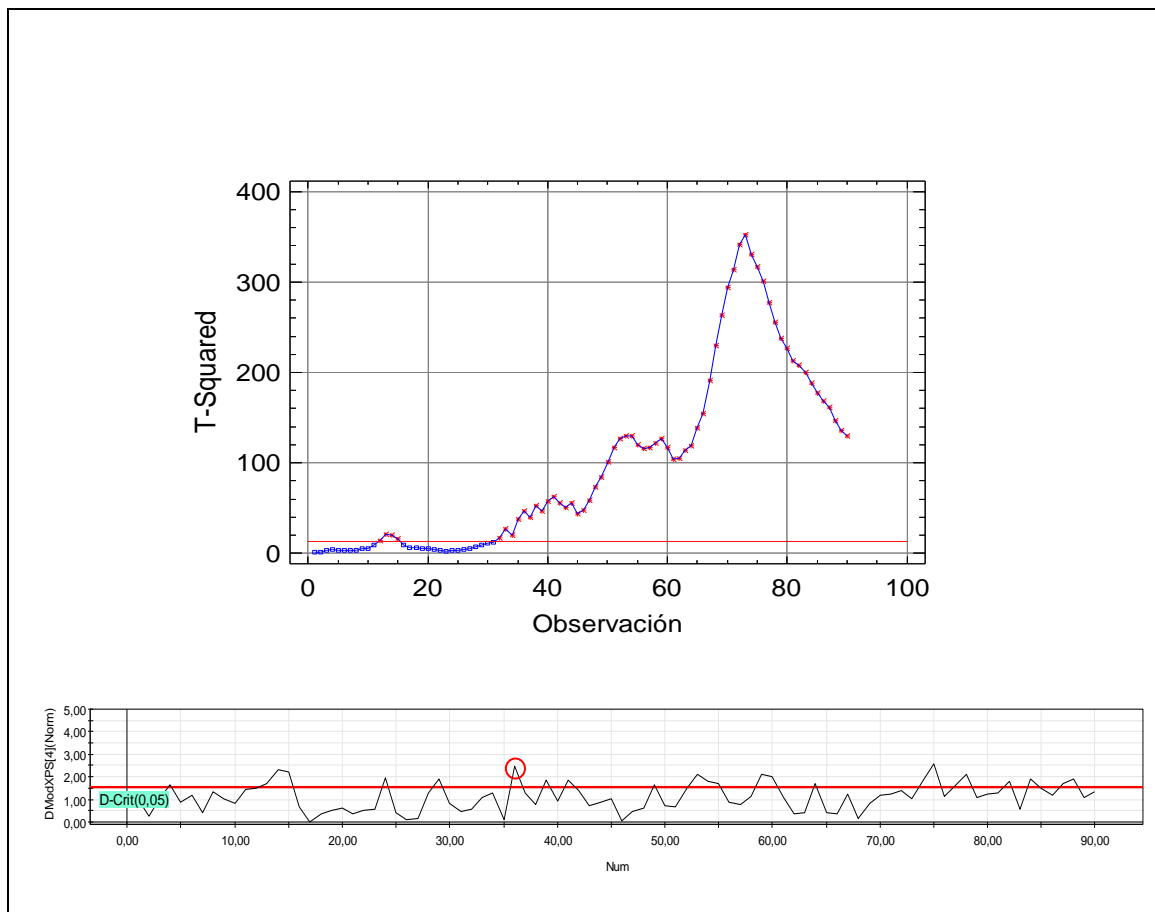


Figura 6.29 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de un cambio permanente en el MI : gráficos $MEWMA-T_A^2$ y DModX.

Para ver cómo evoluciona el proceso en presencia de esta perturbación se ha obtenido el gráfico de *scores* en las CP t_2 / t_1 , que se muestra en la figura 6.30a. A partir del punto 47 (ver figura 6.30b) el proceso se sale de la elipse de control. En este caso al proceso le cuesta más volver al estado de control.

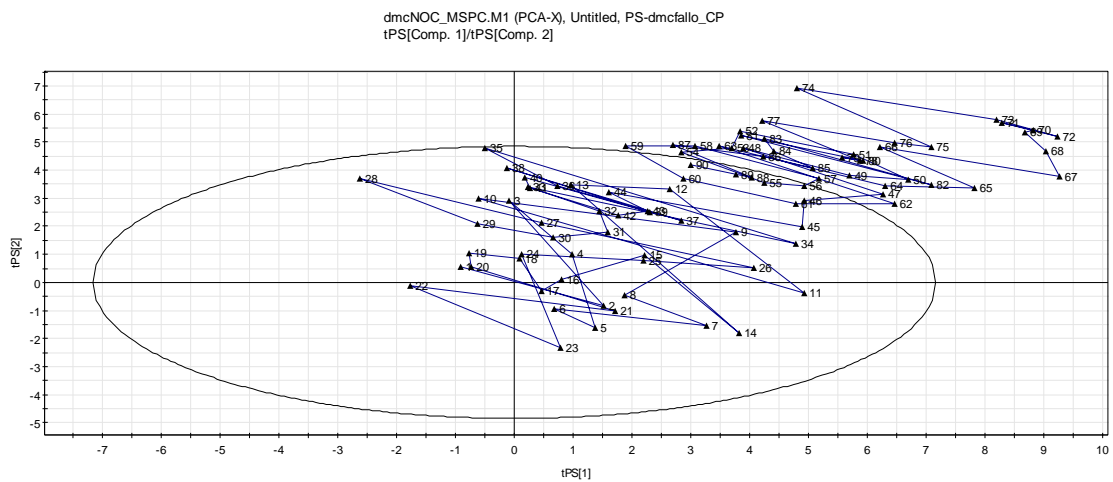


Figura 6.30a . Gráfico de *scores* PCA, de la segunda CP frente a la primera, t_2 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: deriva en el *MI*.

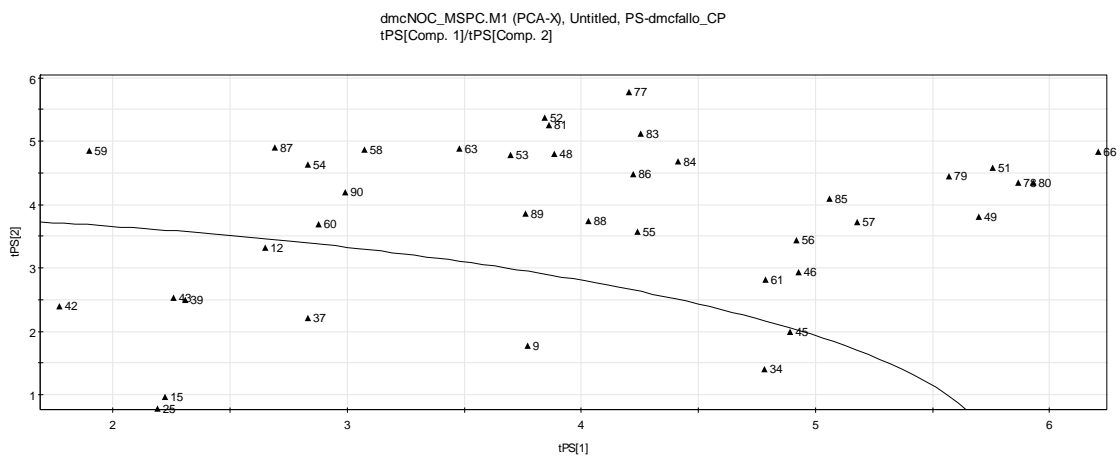


Figura 6.30b Gráfico de *scores* PCA ampliado, de la segunda CP frente a la primera, t_2 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: desplazamiento permanente en el *MI*.

El gráfico de contribución a la T_A^2 y la componente 2, se puede ver en la figura 6.31. Las contribuciones de $incT1$, y de los errores del MI , E_{MI} ; E_{LMI} tienen mayor magnitud que la contribución promedio. Se refleja que existen algo anómalo en las variables MI y T que hay que investigar.

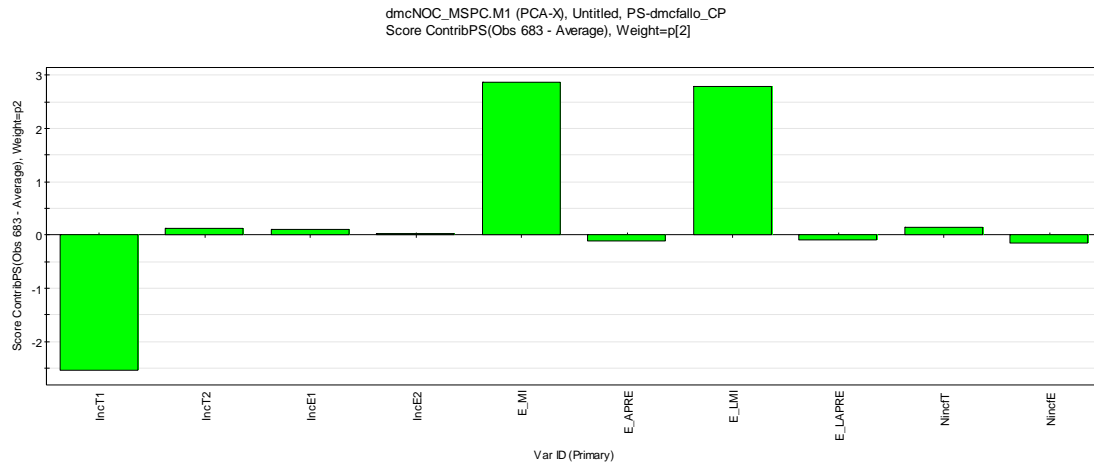


Figura 6.31 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 32$, y la componente 2.

6.5.5 Cambio parcial en los parámetros del modelo del APRE

Se ha estudiado el funcionamiento de los procedimientos de control propuestos cuando ocurren cambios en los parámetros del modelo de la variable de salida APRE. Se supone que existes algunas discrepancias entre los parámetros del modelo de función de transferencia estimado y real. El controlador se diseña asumiendo que la dinámica real del proceso viene dada por el modelo del proceso obtenido en el Capítulo 4. Este fallo pondrá a prueba la robustez del controlador frente a errores en el modelo.

El modelo estimado es:

$$\nabla APRE_t = (\omega_{21,1} + \omega_{21,2}B)\nabla T_{t-1} + \omega_{22,1}\nabla E_{t-1} + \frac{1}{(1-\phi B)} a_{2t} \tag{6.5}$$

Ecuación del modelo real:

$$\frac{\dot{\omega}_{21,1} - \omega_{21,1}}{\omega_{21,1}} = 3 \quad \frac{\dot{\omega}_{22,1} - \omega_{22,1}}{\omega_{22,1}} = 3 \quad \forall t \geq 30$$

Los gráficos de control T_A^2 y $DModX$ se muestran en la figura 6.32, en la que se puede ver que se produce la señal en la observación 35 en el gráfico de la T_A^2 de Hotelling y un periodo después en el gráfico $DModX$.

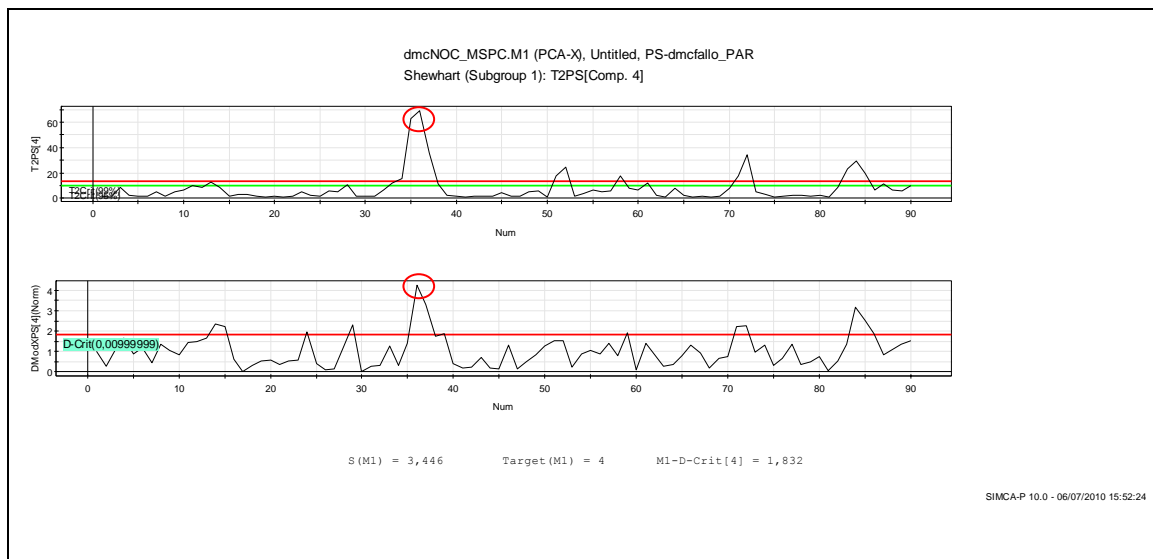


Figura 6.32 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de discrepancias entre el modelo real y estimado del proceso: gráficos T_A^2 y $DModX$.

En la figura 6.33 se puede ver la evolución del proceso, a partir del instante $t = 34$, se sale de la elipse T_A^2 de Hotelling (99%), por la acción del controlador vuelve a la región de funcionamiento normal, pero como el problema persiste, se sale de nuevo en distintas ocasiones. Se muestra el gráfico de *scores* para la CP 3 vs CP 1, por ser en este plano donde mejor se ve esta evolución del proceso.

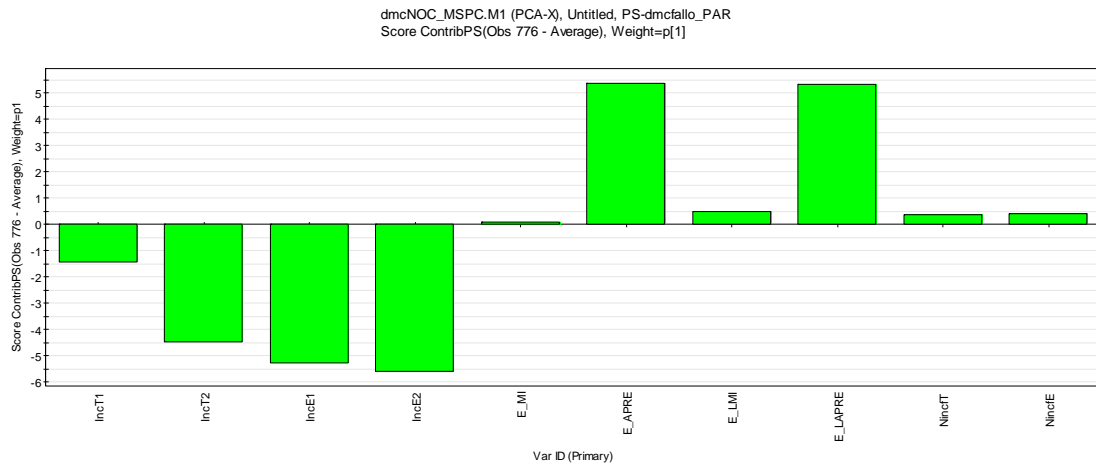


Figura 6.34 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 35$, y la componente 1.

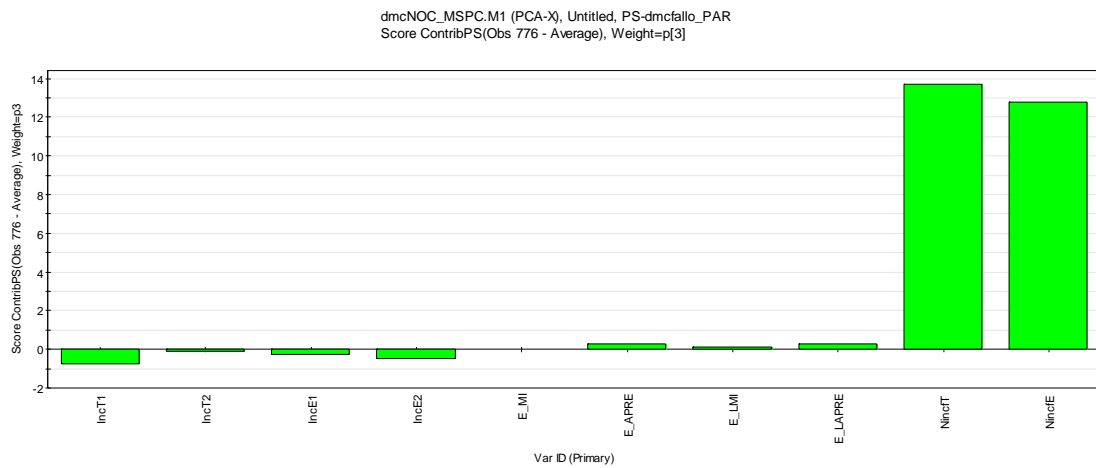


Figura 6.35 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 35$, y la componente 3.

6.6 RESUMEN

El objetivo general tanto del SPC como del APC, es optimizar el funcionamiento de los procesos, reduciendo la variabilidad de las características resultantes en torno a los valores deseados. El fundamento de ambas disciplinas parte de la idea de que todo proceso presenta variaciones en su funcionamiento. Estas variaciones pueden afectar en mayor o en menor medida a la calidad final del producto y a su productividad. Ambas metodologías conceptualizan los procesos y su control de diferentes formas, se originaron en diferentes sectores industriales y han evolucionado de forma independiente, hasta que se dedujo el interés de integrarlas en los procesos, tomando las ventajas de ambas metodologías. Hasta ahora los trabajos de desarrollo de la integración de APC y SPC se han venido haciendo en el ámbito de sistemas SISO, siendo muy escasos los trabajos realizados en los procesos MIMO.

En este capítulo se ha desarrollado un sistema de control integrado MESPC en un proceso MIMO de polimerización de polietileno de alta densidad. Para implementar la componente MSPC de este sistema integrado se han empleado métodos estadísticos multivariantes de proyección en estructuras latentes y para la componente de control automático el MPC.

En primer lugar se ha estimado un modelo NOC-PCA del proceso en condiciones normales de operación. Se ha simulado el proceso regulado mediante MPC, empleando el controlador DMC, sintonizado en el Capítulo 4 según los valores de los parámetros de diseño óptimos desde el punto de vista del rendimiento del control, y obtenidos, mediante un diseño de experimentos. Se han seleccionado 10 variables derivadas del controlador, a partir de las que se ha generado un conjunto de datos que constituyen las observaciones de referencia, que definen las variaciones que el proceso puede presentar cuando está funcionando normalmente, es decir únicamente bajo causas comunes de variabilidad. El modelo NOC-PCA estimado a partir de estas observaciones tiene cuatro componentes obtenidas por validación cruzada. El modelo obtenido explica el 99.5% ($R^2 = 0.995$) de la suma de cuadrados y predice el 97.1% ($Q^2 = 0.971$) por lo que es un modelo muy bueno. Con los gráficos de dispersión de los *scores* en las CP, se ha podido observar cómo evoluciona el proceso normalmente y con los gráficos de *loadings* se ha podido estudiar cómo las variables originales, derivadas del control, forman las CP de manera que estas pueden incluso tener un sentido físico, que ayuda a entender mejor el

proceso y el procedimiento de control “integrado”. Estos gráficos resultan muy útiles a la hora de estudiar las relaciones espaciales y la estructura de correlación entre las variables. El modelo NOC-PCA nos permite saber las direcciones de mayor variabilidad y nos ha dado una visión global del sistema de control.

A partir del modelo NOC-PCA se han construido los gráficos de control T_A^2 de Hotelling y de distancia al modelo DmodX que constituyen el corazón del esquema de monitorización propuesto, que actúa de supervisor del proceso y del controlador. La monitorización tiene como objetivo comprobar en tiempo real, si el proceso de polimerización PEAD y el controlador DMC están funcionando normalmente y detectar y diagnosticar lo más pronto posible los fallos que se puedan producir. Este procedimiento de monitorización resulta más potente que los métodos MSPC basados en las variables originales, ya que al emplear los estadísticos de distancia al modelo y de la T_A^2 , y los gráficos de contribución correspondientes, detectarán no solo las alteraciones en las variables individuales, sino también los cambios en la estructura de correlaciones entre las variables, aumentando la sensibilidad para detectar posibles fallos e identificar las variables responsables en cada caso.

El elemento principal del sistema MESPC es el proceso PEAD, del que se requiere que opere eficaz y eficientemente produciendo producto de buena calidad, con un nivel de productividad alto. Para compensar las causas comunes de variabilidad se instala el controlador DMC, que recibe información de los sensores, analizadores en línea o de las determinaciones en laboratorio, para mediante actuadores mantener el proceso estable alrededor de las consignas. El módulo MSPC, recibe las consignas e información del controlador DMC, de los actuadores y de los sensores del proceso, lo que le permite detectar y diagnosticar las causas especiales de variabilidad, tanto del proceso como del controlador. Se supervisa tanto el rendimiento y robustez del controlador, como la calidad del producto y la productividad. El MSPC actúa pues como un controlador de alto nivel monitorizando todo el sistema. A lo que hay que añadir que toda la información generada ayuda a conocer más el proceso y mejorarlo continuamente.

Una vez obtenido el modelo de referencia NOC-PCA, se calculan a partir de este modelo, los límites de los gráficos de control multivariantes T_A^2 y SPE. Cuando una nueva observación \mathbf{x}_t está disponible, se proyecta sobre el modelo PCA, obteniéndose los *scores* y los residuos correspondientes, a partir de los cuales se calculan los

estadísticos T_A^2 y DModX que se representan en los correspondientes gráficos. De esta manera, la información contenida en las K variables originales se resume en estos dos índices. Una vez que se detecta una salida de control, el diagnóstico se lleva a cabo en dos pasos, primero se obtiene un gráfico de contribución que indique la/s variable/s que contribuyen en mayor medida numéricamente a la señal y después se tiene que tratar de averiguar qué ha pasado en el proceso para que estas variables no tengan un comportamiento normal. También resulta útil seguir la evolución del proceso con los gráficos de dispersión de los *scores* PCA.

Se ha evaluado el funcionamiento del sistema de control MESPC integrado propuesto, simulando el proceso funcionando en ciclo cerrado y monitorizado, en presencia de causas especiales de variabilidad. Los fallos simulados son problemas potenciales que se pueden presentar en el proceso PEAD. Se ha visto que el sistema actúa eficaz y eficientemente tanto compensando las perturbaciones de diferentes tipos como detectando y diagnosticando problemas y eventos de carácter esporádico.

En la metodología MSPC propuesta, basada en las variables latentes se dispone de nuevas herramientas estadísticas y de un conjunto de gráficos que sirven para el conocimiento del proceso, aunque sea complejo, seguir su evolución, para la detección y el diagnóstico de fallos, incluso del propio controlador predictivo y para el diagnóstico de fallos para lo cual, los gráficos de contribuciones pueden ser una herramienta muy útil. Se puede recopilar una base de patrones de contribuciones de fallos conocidos que nos permitan fácilmente diagnosticar cuál ha sido la causa de cualquier incidente especial. La detección y eliminación de los problemas, proporciona una disminución importante de la variabilidad. Estas herramientas permiten conocer más a fondo el proceso y mejorarlo continuamente.

CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS

En este capítulo se han resumido las conclusiones y contribuciones de investigación de esta tesis y algunos comentarios sobre líneas futuras de trabajo. Las conclusiones y las contribuciones de la tesis se resumen en el apartado 7.1. En el apartado 7.2 se describen las líneas futuras de investigación que ha dejado abiertas este trabajo.

7.1 CONCLUSIONES y CONTRIBUCIONES

Las conclusiones y contribuciones de esta tesis se han ido mostrando al final de cada capítulo. No obstante, se recogen aquí todas juntas en este capítulo para facilitar su lectura.

Del **Capítulo 2**. Es posible reducir sustancialmente la variabilidad de las características de calidad de los productos fabricados, tanto a corto plazo como a largo plazo, integrando procedimientos APC y SPC, lo que permite tanto la optimización como la mejora continua de la calidad. De este modo se hace viable la monitorización de procesos dinámicos, mejorando su capacidad, reduciendo las falsas alarmas y aumentando la escasa potencia que tienen los gráficos de control estadístico cuando se usan las técnicas tradicionales de SPC en estos contextos.

Se han establecido los paralelismos entre el algoritmo de control DMC y los métodos estadísticos aplicados, como nexo entre metodologías que pertenecen a diferentes áreas de conocimiento. Se ha demostrado que ciertos métodos estadísticos aplicados tales como la estimación por mínimos cuadrados, la regresión contraída (*ridge regression*), el algoritmo Levenberg-Marquardt para resolver mínimos cuadrados no lineales o el PCA, métodos cuyo funcionamiento está contrastado, ocupan un lugar destacado en la estructura del DMC. Esta vinculación podría estar relacionada con el éxito que ha tenido el DMC en la solución de problemas de control de procesos industriales donde otras propuestas han fallado.

Normalmente la monitorización y el control automático de los procesos han sido vistos como problemas independientes. En las escasas investigaciones existentes, para

procesos MIMO, en las que se utilizan ambos tipos de control no se ha estudiado desde una visión global e integrada de todo el sistema de control, sino que se enfatiza en algún aspecto importante del control, ya sea automático o estadístico.

El desarrollo y la aplicación de la metodología MESPC, supone integrar el sistema de regulación en otro de monitorización, que supervisa tanto el funcionamiento del proceso como el del propio controlador automático. Intervienen pues muchos temas de modelización, de control y de monitorización, algunos de los cuales han sido poco tratados en la bibliografía existente sobre estas cuestiones, habiendo una necesidad de más investigación en esta área. Todos estos temas han sido tratados en esta tesis.

Del **Capítulo 4**. Se ha estimado un modelo del proceso industrial de obtención de PEAD en continuo. Se ha abordado el problema de la existencia de autocorrelación en las variables de proceso y de calidad que se observan a intervalos de tiempo discretos y con inercias mayores que la frecuencia de muestreo. También se ha abordado el problema de la posible correlación entre las variables de salida, que hace adecuada la estimación conjunta para mejorar la precisión de las estimaciones. Para diseñar el sistema de control integrado se han tomados dos variables de salida, *MI* y *APRE*, la primera es la variable de calidad más importante del PEAD y la segunda es una variable que mide la productividad del proceso, aspecto este último que es innovador ya que estas variables se miden pero no se suelen controlar.

Se ha identificado, estimado y validado el modelo del proceso mediante dos metodologías que se han comparado. La metodología Box-Jenkins para la obtención de la *función de transferencia múltiple* en forma parsimoniosa, y la metodología de series temporales multivariantes TS-PLS para obtener el modelo del proceso en forma de *función de respuesta a impulsos*.

Tras presentar las ideas básicas que hay detrás de ambas metodologías, y discutir sus ventajas y sus limitaciones, se han comparado teniendo en cuenta distintos aspectos como son la simplicidad del proceso de modelado en las etapas de identificación, estimación y validación del modelo, así como la utilidad de las herramientas gráficas que proporcionan, la bondad de ajuste obtenida, la simplicidad de la estructura matemática del modelo, etc.

La metodología Box-Jenkins produce modelos más parsimoniosos porque proporciona la posibilidad de expresar la *función de transferencia múltiple* como un cociente de polinomios de matrices de coeficientes y permite expresar explícitamente el ruido con un modelo ARIMA vectorial, mientras que en la metodología TS-PLS se identifica directamente la *función de respuesta a impulsos finita* no parsimoniosa frecuentemente sobreparametrizada. Aunque por medio de TS-PLS, el proceso de estimación es más sencillo, si el modelo tiene muchos coeficientes, se producirá mucha incertidumbre y predicciones menos precisas. A pesar del mayor esfuerzo de modelado necesario para identificar la *función de transferencia múltiple* de Box y Jenkins, esta última se recomienda cuando la estructura del proceso es razonablemente simple y la inercia del proceso no es demasiado importante.

TS-PLS proporciona un conjunto de herramientas gráficas muy útiles para el estudio descriptivo del modelo, permitiendo seguir su evolución, y detectar cualquier anomalía del proceso gráficamente. En cambio, la metodología Box-Jenkins usa métodos más complejos y sofisticados de detección, identificación, estimación y eliminación de valores anómalos, pero más fundamentados desde el punto de vista de la inferencia estadística.

El gráfico de coeficientes de regresión PLS facilita la identificación de la *función de respuesta a impulsos*, siendo su utilidad la misma que la función de correlación cruzada (usada en la metodología Box-Jenkins) cuando las variables de entrada son independientes. La metodología Box-Jenkins es más sensible a la presencia de colinealidad entre las variables de entrada. Las dos metodologías funcionan bien determinando las variables y los retardos a ser considerados en la especificación del modelo, ya que los resultados obtenidos por ambos métodos son consistentes.

Como conclusión general, la metodología Box-Jenkins es el mejor enfoque para identificar la *función de transferencia múltiple* en procesos MIMO cuando el número tanto de variables de entrada como de salida es reducido. Sin embargo, incluso en este contexto TS-PLS se puede usar como herramienta complementaria para conocer mejor el proceso y detectar valores anómalos. En cambio, cuando se trata de procesos con gran número de variables de entrada y de salida con problemas de colinealidad y funciones de transferencia complejas, la metodología de elección es TS-PLS, dada la complejidad (e incluso la inviabilidad) que supondría el uso de la metodología Box-Jenkins.

A partir de este modelo de *función transferencia múltiple* Box-Jenkins se ha derivado la *función de respuesta a escalón* cuya formulación es necesaria para utilizarla en el algoritmo de control DMC para predecir la respuesta del sistema.

Del **Capítulo 5**. Se ha diseñado y sintonizado el controlador DMC, mediante un diseño de experimentos factorial fraccionado 2^{6-1} para el estudio simultáneo de los efectos de todos los parámetros de diseño del controlador en su rendimiento, lo que es una de las aportaciones de esta tesis, ya que habitualmente el sintonizado se hace de forma empírica. Se han identificado y cuantificado los efectos que los factores de diseño del controlador DMC tienen sobre las pautas de variabilidad de variables que miden el rendimiento del control automático del proceso, con el fin de obtener las condiciones operativas óptimas. El diseño de experimentos produce datos experimentales altamente informativos. En este trabajo, estos datos se han obtenido por simulación, y se han analizado por dos métodos estadísticos diferentes, el método ANOVA y la regresión PLS, que se han comparado desde distintos puntos de vista, como son los resultados obtenidos, la sencillez del procedimiento de análisis, la capacidad de predicción, la capacidad de ajuste, la estimación multivariante de las variables respuesta y, las herramientas gráficas disponibles.

Se han obtenido para todas las variables respuesta los efectos de los factores e interacciones de orden 2 significativas (valor- $p < 0.05$). El factor cuyo efecto simple ha resultado ser de mayor magnitud para todas las variables respuesta, ha sido el factor de ponderación de las acciones de control del caudal de etileno, λ_E . Por otro lado, el factor de ponderación de las acciones de control de la temperatura, λ_T , tiene también efecto en todos los casos, pero menor que el efecto anterior. De la comparación de estos efectos, se ha deducido que la temperatura tiene mayor capacidad de control sobre las variables controladas que el caudal de etileno.

Las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas α_{MI} y α_{APRE} , influyen también sobre todas las variables de rendimiento del sistema de control. Cuando se quiere reducir la variabilidad de las variables de salida *MI* y *APRE*, dicha variabilidad se transmite a las variables manipuladas. Una excepción es el efecto de α_{MI} sobre la variabilidad de la temperatura, ya que cuanto más se quiere reducir el error del *MI*, el movimiento de la temperatura tiene que ser más suave.

Los horizontes de predicción HP y de control HC, influyen únicamente sobre la variabilidad del caudal de etileno. Debido a que este tiene menor capacidad de control sobre las variables controladas, ejerce un control más agresivo que el de la temperatura, por ello probablemente sí que le influyan los horizontes HP y HC. Poniendo unos límites adecuados a la longitud de estos horizontes, se consigue un controlador más robusto, capaz de manejar las restricciones en las entradas y en las salidas.

Se han encontrado muchas interacciones entre los parámetros de diseño del controlador DMC, siendo la más importante la existente entre las constantes de ponderación de las acciones de control, λ_T y λ_E , ello hace que las condiciones operativas óptimas no sean siempre las esperadas intuitivamente.

Se han encontrado las condiciones operativas óptimas de sintonizado del controlador DMC que minimizan la variabilidad de las variables controladas y que por lo tanto maximizan el rendimiento del controlador. Se debe escoger en todo caso el nivel bajo de los esfuerzos de control λ_T y λ_E , el nivel alto de la constante de ponderación de errores α_{MI} , si se quiere hacer más énfasis en el control de la variable de calidad MI o su nivel bajo si se quiere hacer más énfasis en la variable de productividad APRE, y siempre el nivel bajo de la constante de ponderación de errores α_{APRE} . Se ha constatado que algunas veces las interacciones entre factores ejercen un efecto más importante que los efectos de cada factor individualmente.

Por otro lado, se han encontrado también las condiciones operativas óptimas que minimizan las acciones de control de la variable manipulada T , que lógicamente son condiciones contrapuestas a las descritas en el párrafo anterior para el control del MI , salvo para λ_E que es la misma. También son contrapuestas a las del control del $APRE$, salvo para α_{MI} y λ_E que son las mismas.

Las condiciones operativas óptimas que minimizan las acciones de control en la variable manipulada E , incluyen las referidas al horizonte de predicción HP y al horizonte de control HC, factores que únicamente han influido sobre los movimientos del caudal de etileno. Ambos deben ser de 2 periodos que coincide con la inercia de esta variable de entrada en el modelo del MI . De esta forma se suaviza el movimiento de control del caudal de etileno. Las condiciones óptimas para las constantes de ponderación de los errores deben de ser lo más bajas posibles, al igual que la constante λ_T y lógicamente λ_E tiene que estar a nivel alto para que se restrinja el movimiento de E .

Se enfatiza en la importancia esencial, para el logro de una calidad competitiva, de las actividades que se desarrollan en las fases de diseño de procesos y en el diseño de su control.

De la comparación de las metodologías ANOVA y PLS se obtienen las siguientes conclusiones:

Con la regresión PLS se puede obtener un modelo conjunto para todas las variables respuesta, mientras que con la regresión MLR, se obtiene un modelo para cada variable respuesta, por lo tanto PLS puede modelar la correlación entre las variables respuesta. Las herramientas gráficas que proporciona PLS permiten visualizar rápidamente las relaciones entre todos los factores y las variables respuesta, y las agrupaciones de variables correlacionadas. También se visualizan los factores de mayor peso en el modelo. Los cuatro pares de variables latentes ofrecen la posibilidad de visualizar la estructura de correlación entre los factores y las respuestas, mediante el diagrama de dispersión de los *scores*.

Mediante ambas metodologías, se han obtenido todos los factores e interacciones que influyen sobre las variables respuesta, así como la magnitud y signo de sus efectos y las condiciones operativas óptimas, los resultados han sido consistentes para ambas, aunque el enfoque es diferente. La visualización de los efectos mediante las herramientas gráficas del PLS facilita la interpretación del modelo y enriquece las conclusiones. Todo ello hace del PLS una metodología realmente interesante, sobre todo cuando crece el número de variables que intervienen en el modelo.

Del **Capítulo 6**. En este capítulo se ha desarrollado el sistema de control integrado MESPC en el proceso MIMO de obtención del PEAD. Para implementar la componente MSPC de este sistema integrado se han empleado métodos estadísticos de proyección en estructuras latentes Lsb-MSPC y para implementar la componente de control automático el MPC.

En primer lugar se ha estimado un modelo NOC-PCA del proceso en condiciones normales de operación. Se ha simulado el proceso en ciclo cerrado mediante MPC, empleando el controlador DMC, sintonizado según los valores de los parámetros de diseño óptimos obtenidos en el capítulo anterior. El modelo NOC-PCA estimado tiene una capacidad de ajuste $R^2 = 0.995$ y una capacidad de predicción $Q^2 = 0.971$. Con los

gráficos de dispersión de los *scores* en las CP, se ha podido observar cómo evoluciona el proceso y con los gráficos de *loadings* se ha podido estudiar cómo las variables originales, derivadas del control, forman las CP de manera que estas pueden incluso tener un sentido físico, lo que ayuda a entender mejor el proceso y el procedimiento de control. Estos gráficos resultan muy útiles a la hora de estudiar las relaciones espaciales y la estructura de correlación entre las variables. El modelo NOC-PCA nos permite saber las direcciones de mayor variabilidad y ha proporcionado una visión global del sistema de control.

A partir del modelo NOC-PCA se han construido los gráficos de control T_A^2 de Hotelling y de distancia al modelo DmodX que constituyen el corazón del esquema de monitorización propuesto, que actúa de supervisor del proceso y del controlador. La monitorización tiene como objetivo comprobar en tiempo real, si el proceso de polimerización PEAD y el controlador DMC, está funcionando normalmente y detectar y diagnosticar lo más pronto posible los fallos que se puedan producir, antes de que pueda ser fabricado mucho producto fuera de especificaciones. Este procedimiento de monitorización resulta más potente que los métodos MSPC basados en las variables originales, ya que al emplear los estadísticos de distancia al modelo y de la T_A^2 , y los gráficos de contribución correspondientes, se detectarán no solo las alteraciones en las variables individuales, sino también los cambios en la estructura de correlaciones entre las variables, aumentando la sensibilidad para detectar posibles fallos e identificar las variables responsables en cada caso.

Una vez obtenidos los límites de los gráficos de control multivariantes T_A^2 y SPE, cuando una nueva observación \mathbf{z}_t está disponible, se proyecta sobre el modelo PCA, obteniéndose los *scores* y los residuos correspondientes, a partir de los cuales se calculan los estadísticos T_A^2 y DModX que se representan en estos gráficos. De esta manera, la información contenida en las K variables originales se resume en estos dos índices. Cuando se detecta una salida de control, el diagnóstico se lleva a cabo en dos pasos, primero se obtiene un gráfico de contribución que indique la/s variable/s que contribuyen en mayor medida numéricamente a la señal y después se tiene que tratar de averiguar qué ha pasado en el proceso para que estas variables no tengan un comportamiento normal. También resulta útil seguir la evolución del proceso con los gráficos de dispersión de los *scores* PCA.

Finalmente, se ha evaluado el funcionamiento del sistema de control MESPC integrado propuesto, simulando el proceso funcionando en ciclo cerrado y monitorizado, en presencia de causas especiales de variabilidad. Los fallos simulados son problemas potenciales que se pueden presentar en el proceso PEAD. Se ha visto que el sistema actúa eficaz y eficientemente tanto compensando las perturbaciones de tipo impulso, escalón, desviaciones sostenidas o derivas, como detectando y diagnosticando problemas de cambio del modelo del proceso.

El elemento principal del sistema MESPC es el proceso PEAD, del que se requiere que opere eficaz y eficientemente produciendo producto de buena calidad, con un nivel de productividad alto. Para compensar las causas comunes de variabilidad se instala el controlador DMC, que recibe información de los sensores, analizadores en línea o de las determinaciones en laboratorio, para mediante actuadores mantener el proceso estable alrededor de las consignas. El módulo MSPC, recibe las consignas e información del controlador DMC, de los actuadores y de los sensores del proceso, lo que le permite detectar y diagnosticar las causas especiales de variabilidad, tanto del proceso como del controlador. Se supervisa tanto el rendimiento y robustez del controlador, como la calidad del producto y la productividad. El MSPC actúa pues como un controlador de alto nivel monitorizando todo el sistema. Toda la información generada ayuda a conocer más el proceso y mejorarlo continuamente.

En la metodología integrada propuesta, se dispone de nuevas herramientas estadísticas y de un conjunto de gráficos que resultan muy útiles. Permiten seguir su evolución, facilitan la detección y el diagnóstico de fallos, incluso del propio controlador predictivo. Se puede recopilar una base de patrones de contribuciones de fallos conocidos que dejan sus huellas en los gráficos, y que permitan diagnosticar fácilmente cuál ha sido la causa de cualquier incidente especial. La detección y eliminación de los problemas, proporciona una disminución importante de la variabilidad

De esta tesis se desprende el interés y la utilidad de realizar investigaciones conjuntas en las que participen las dos áreas de conocimiento implicadas, la de ingeniería de sistemas y automática y la de la estadística industrial. Se ha constatado que el objetivo primordial en el control de procesos es el mismo para ambas áreas, pero al conceptualizar el proceso y su control de forma diferente, se hace difícil la comunicación entre áreas. A menudo se formalizan los mismos conceptos de forma muy

diferente y con nomenclaturas muy dispares. Se ha constado que los conocimientos de una de las áreas hacen avanzar más rápidamente a los conocimientos de la otra y viceversa. Se podrían pues desarrollar nuevas propuestas en el control de procesos de forma más eficiente y que llegaran a ser aplicadas en las industrias más rápidamente, aunando los conocimientos, la experiencia y optimizando los recursos de ambas áreas.

7.2 LÍNEAS FUTURAS

En la implementación del MPC, obtener el modelo del proceso es el paso que más tiempo consume y con mucho el más crítico. En el capítulo 4 de esta investigación se han comparado las metodologías de series temporales multivariantes de Box-Jenkins y TS-PLS para obtener el modelo del proceso industrial y se ha llegado a la conclusión de que para procesos MIMO, con pocas variables de entrada y salida, con no demasiados coeficientes en la función de transferencia por presentar poca inercia y estructuras de datos no demasiado complejas, resulta más adecuada la metodología Box-Jenkins. En cambio, si se trata de procesos a gran escala, altamente automatizados, con muchas variables de entrada y de salida, con estructuras de datos complejas, variables que presentan además de autocorrelaciones, correlaciones cruzadas, y datos faltantes o que incorporan mucho ruido, sería recomendable utilizar la metodología TS-PLS. Debido a la naturaleza multivariante de los datos, las variables están altamente correlacionadas, y la dimensión efectiva del espacio en el que se mueven es muy pequeña. Los métodos Lsb (métodos basados en estructuras latentes) pueden transformar datos ruidosos y con alta correlación en un conjunto informativo de datos más pequeño. Una extensión natural de este trabajo, sería desarrollar la metodología integrada propuesta en un proceso complejo de este tipo, modelando el proceso con TS-PLS y teniendo en cuenta que va a ser utilizado para realizar predicciones a varios pasos, según una ventana de predicción que depende de las dinámicas del proceso. La identificación teniendo en cuenta el control, trata de crear sinergias entre los algoritmos de identificación y de control, siguiendo una estrategia CRI (*Control relevant identification*) que proporcionaría un modelo acorde a la función de coste del controlador.

En el capítulo 5, se ha diseñado un controlador multivariable DMC, diseñado para ejecutar el control en el espacio de las variables originales, derivando las matrices

dinámicas usadas para realizar las predicciones varios pasos adelante, a partir del modelo paramétrico del proceso. Cuando los procesos son del tipo descrito en el apartado anterior, diseñar el controlador en el espacio de las variables originales es complicado. Además de la existencia de alta correlación, en procesos con mucha dinámica, se desea realizar el control sobre una amplia ventana de control, lo que incorpora muchos grados de libertad que tiene que manejar el algoritmo de optimización y su correspondiente método numérico, lo que tiene una gran complejidad computacional. Diseñar el controlador MPC en el espacio de las variables latentes LV-MPC, reduce los grados de libertad y en consecuencia disminuye dicha complejidad. Una línea de trabajo sería por tanto diseñar el algoritmo de control MPC en el espacio de las variables latentes, a partir del modelo TS-PLS CRI propuesto en el párrafo anterior. Las transformaciones necesarias entre las variables originales y las latentes son complejas, los controladores derivados pueden tener problemas de robustez, por lo que se requiere mucho trabajo de investigación en este campo. Si las dos líneas de trabajo se abordan conjuntamente, intentando crear sinergias entre la identificación y los algoritmos de control, se podría llegar a resultados muy interesantes.

En los capítulos 4, 5 y 6, se han utilizado métodos de proyección en las variables latentes. Son métodos que reducen la dimensión del espacio de las variables originales, a un espacio de menor dimensión, por lo que son metodologías que permiten abordar el modelado, el control y monitorización de procesos multivariados a gran escala. Un aspecto crucial al utilizar estos métodos de estructuras latentes es el número de componentes principales que se retienen al reducir la dimensión del espacio de las variables originales, ya que su capacidad de predicción es esencial para su buen funcionamiento y para poder aplicarse en planta, por lo que se necesita más investigación en mejorar los métodos de retención de componentes, con la finalidad de extraer la máxima información y el menor ruido, es decir mejorar la capacidad de predicción.

BIBLIOGRAFÍA CITADA

Adams, B. M. and Tseng, I. T. (1998), "Robustness of Forecast-Based Monitoring Systems," *Journal of Quality Technology*, 30, 328-339.

Alamo, T., Ferramosca, A., González, A.H., Limon, D. and Odloak, D. (2014), "A gradient-based strategy for the one-layer RTO + MPC controller," *Journal of Process Control*, Volume 24, Issue 4, April 2014, Pages 435-447.

Albertos, P. and Ortega, R. (1989), "On generalized predictive control: Two alternative formulations," *Automatica*, 25, 753-755.

AlGhazzawi, A. and Lennox, B. (2008), "Monitoring a complex refining process using multivariate statistics," *Control Engineering Practice*, 16, 294-307.

-----(2009), "Model predictive control monitoring using multivariate statistics," *Journal of Process Control*, 19, 314-327.

Allen, D. M. (1974), "The Relationship between Variable Selection and Data Augmentation and a Method for Prediction," *Technometrics*, 16, 397-402.

Alt, F. B. (1985), "Multivariate Quality Control," in *Encyclopedia of the Statistical Sciences*, N. L. Johnson, S. Kotz, and C. R. Read (eds.), New York: John Wiley.

Alwan, A. J. and Alwan, L. C. (1994), "Monitoring Autocorrelated Processes Using Multivariate Quality Control Charts," in *Proceedings of the Decision Sciences Institute Annual Meeting* (ed.) pp. 2106-2108.

Alwan, L. C. and Roberts, H. V. (1988), "Time-series modeling for statistical process control," *Journal of Business & Economic Statistics*, 6, 87-95.

Alwan, L. C. (1992), "Effects of Autocorrelation on Control Chart Performance," *Communications in Statistics - Theory and Methods*, 21, 1025-1049.

Apley, D. W. and Shi, J. J. (1999), "The GLRT for statistical process control of autocorrelated processes," *IIE Transactions*, 31, 1123-1134.

Apley, D. W. and Tsung, F. (2002), "The autoregressive T^2 chart for Univariate Autocorrelated Processes," *Journal of Quality Technology*, 34, 80-96.

Arteaga, F. and Ferrer, A. (2002), "Dealing with Missing Data in MSPC: Several Methods, Different Interpretations, Some Examples," *J.Chemom.*, 16, 408-418.

Arteaga, F. and Ferrer, A. J. (2009), "Missing Data," in *Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis*, S. Brown, Tauler, and B. Walczak (eds.), Oxford: Elsevier.

Åström, K. J. (1967), "Computer control of a paper machine - an application of linear stochastic control.," *IBM Journal of Research & Development*, 11, 389-405.

----- (1970), *Introduction to Stochastic Control Theory*, New York: Academic Press.

Åström, K. J. and Wittenmark, B. (1989), *Adaptive control*, Reading, MA: Addison-Wesley.

Åström, K. J. and Hägglund, T. (1995), *PID Controllers: Theory, Design, and Tuning*, Research Triangle Park, N.C.: Instrument Society of America.

Åström, K. J. (1996), "Adaptive control around 1960," *IEEE Control Systems*, 16, 44-49.

Badgwell, T. A. (1997), "Robust model predictive control of stable linear systems," *Int. Journal of Control*, 68, 797-818.

Bagshaw, M. and Johnson, R. A. (1975), "The Effect of Serial Correlation on the Performance of CUSUM Test II," *Technometrics*, 17, 73-80.

Barnard, G. A. (1959), "Control charts and stochastic processes," *Journal of the Royal Statistical Society B*, 21, 239-271.

Bartlett, M. S. (1946), "On the Theoretical Specification of Sampling Properties of Autocorrelated Time Series," *Journal of Royal Statistical Society, Series B*, 8, 27-41.

----- (1966), *An Introduction to Stochastic Processes with Special Reference to Methods and Applications*, Cambridge, England: Cambridge University Press.

Bellman, R. An introduction to the theory of dynamic programming. RAND Corp Report. 1953.

Bemporad, A. and Morari, M. (1999), *Robust model predictive control: A survey*. In: *Robustness in Identification and Control*, Springer-Verlag.

----- (1999), "Robust model predictive control: A survey," in *Robustness in Identification and Control*, A. Garulli, A. Tesi, and A. Vicino (eds.), Springer-Verlag.

Bergh, L. G. and MacGregor, J. F. (1987), "Constrained minimum variance controllers: internal model structure and robustness properties," *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 26, 1558-1564.

Bersimis, S., Psarakis, S., and Panaretos, J. (2007), "Multivariate Statistical Process Control Charts: An Overview," *Qual. Reliab. Eng. Int.*, 23, 517-543.

Berthouex.P.M., Hunter, W. H., and Pallensen, L. (1978), "Monitoring Sewage Treatment Plants: Some Quality Control Aspects," *Journal of Quality Technology*, 10, 139-149.

Bhater, J. R. (1963), "Control charts and the minimizations of costs," *Journal of the Royal Statistical Society, series B* , 25, 49-80.

Box G.E.P. (1954), "Some Theorems on Quadratic Forms Applied in the Study of Analysis of Variance Problems: Effect of Inequality of Variance in One-Way Classification," *Ann.Math.Stat.*, 25, 290-302.

Box G.E.P. (1991), "Feedback control by manual adjustment," *Quality Engineering*, 4, 143-151.

Box G.E.P. and Cox, D. R. (1964), "An Analysis of Transformations," *Journal of Royal Statistical Society,B*, 26, 211-252.

Box G.E.P. and Draper, N. R. (1968), *Evolutionary Operation*, New York: Wiley.

Box G.E.P. and Hunter J.S. (1961a), "The 2^{k-p} fractional factorial designs. Part 1," *Technometrics*, 3, 311-351.

-----(1961b), "The 2^{k-p} fractional factorial designs. Part 2," *Technometrics*, 4, 449-458.

Box G.E.P. and Jenkins, G. M. (1962), "Some statistical aspects of adaptive optimization and control," *Journal of the Royal Statistical Society B*, 24, 297-343.

-----(1963), "Further contributions to adaptive quality control: simultaneous estimation of dynamics: no-zero costs," in: ISI Bulletin, pp. 943-974. Ottawa, Canada.

Box G.E.P. and Jenkins, G. M. (1976), *Time Series Analysis: Forecasting and Control*, San Francisco: Holden-Day.

Box G.E.P. and Kramer, T. (1992), "Statistical Process Monitoring and Feedback Control-A Discussion," *Technometrics*, 34, 251-267.

Box G.E.P. and Luceño, A. (1994), "Selection of Sampling Interval and Action Limit for Discrete Feedback Adjustment," *Technometrics*, 36, 369-378.

Box G.E.P. and Luceño, A. (1995), "Discrete Proportional-Integral Control With Constrained Adjustment," *Journal of the Royal Statistical Society D - The Statistician*, 44, 479-495.

-----(1997a), *Statistical Control by Monitoring and Feedback Adjustment*, Wiley.

-----(1997b), "Discrete proportional-integral adjustment and statistical process control," *Journal of Quality Technology*, 29, 248-260.

Box G.E.P. and MacGregor, J. F. (1974), "The analysis of closed-loop dynamic stochastic system," *Technometrics*, 16, 391-398.

----- (1976), "Parameter estimation with closed-loop operating data," *Technometrics*, 18, 371-380.

Box G.E.P. and Tiao, G. C. (1975), "Intervention Analysis With Applications to Economics and Environmental Problems," *Journal of American Statistical Association*, 70, 70-79.

Box G.E.P., Coleman, D. E., and Baxley, R. V., Jr. (1997), "A comparison of Statistical Process Control and Engineering Process Control," *Journal of Quality Technology*, 29, 128-130.

Box G.E.P., Hunter, W. G., and Hunter J.S. (1978), *Statistics for Experimenters*, New York: John Wiley & Sons.

Box G.E.P., Jenkins, G. M., and Reinsel, G. C. (1994), *Time Series Analysis. Forecasting and Control*, 3rd edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs.

Box G.E.P., Hunter J.S., and Hunter, W. G. (2005), *Statistics for Experimenters. Design, Innovation, and Discovery*, Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc.

Box G.E.P., Jenkins, G. M., and Reinsel, G. C. (2008), *Time Series Analysis: Forecasting and Control*, 4th edition, Wiley.

Box G.E.P., Luceño, A., and Paniagua-Quiñones, M. C. (2009), *Statistical Control by Monitoring and Feedback Adjustment*, New Jersey: Wiley.

Breiman, L. and Friedman, J. (1997), "Predicting Multivariate Responses in Multiple Linear Regression," *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, 59, 3-54.

Bro, R. (2009), "PLS Works," *J.Chemom*, 23, 69-71.

Bro, R., Kjeldahl, K., Smilde, A. K., and Kiers, H. A. L. (2008), "Cross-Validation of Component Models: A Critical Look at Current Methods," *Anal.Bioanal.Chem.*, 390, 1241-1251.

Burnham, A., Viveros, R., and MacGregor, J. (1996), "Frameworks for Latent Variable Multivariate Regression," *J.Chemometrics*, 10, 31-45.

Camacho, E. F. (1993), "Constrained generalized predictive control," *IEEE Transactions on Automatic Control*, 38, 327-332.

Camacho, E. F. and Bordóns, C. (1995), *Model Predictive Control in the Process Industry*, Springer.

-----(2007), *Model Predictive Control*, Springer London.

Capilla, C. Aportaciones al conocimiento de las propiedades estadísticas de los gráficos de control para la media. 1991. Universidad Politécnica de Valencia. Tesis doctoral.

Capilla, C., Ferrer, A., Romero, R., and Hualda, A. (1999), "Integration of Statistical and Engineering Process Control in a Continuous Polymerization Process," *Technometrics*, 41, 14-28.

Castagliola, P. (2000), "X-bar control chart for skewed populations using a scaled weighted variance method," *International Journal of Reliability, Quality and Safety Engineering*, 7, 237-252.

-----(2001), "Control charts for data having a symmetrical distribution with a positive kurtosis," in *Recent Advances in Reliability and Quality Engineering*, Pham H (ed.), Singapore: World Scientific.

Castagliola, P. and Tsung, F. (2005), "Autocorrelated SPC for Non-Normal Situations," *Quality & Reliability Engineering International*, 21, 131-161.

Chan, L. K. and Li, G. Y. (1994), "A multivariate control chart for detecting linear trends," *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, 23, 997-1012.

Chang, I., Tiao, G. C., and Chen, C. (1988), "Estimation of Time Series Parameters in the Presence of Outliers," *Technometrics*, 30, 193-204.

Charnes, J. M. (1995), "Tests for special causes with multivariate autocorrelated data," *Computers and Operational Research*, 22, 443-453.

Chen, S., Billings, S. A., and Grant, P. M. (1990), "Non-linear system identification using neural networks," *Int.J.Control*, 51, 1191-1214.

Chen, C. and Liu, L.-M. (1993a), "Forecasting Time Series with Outliers," *Journal of Forecasting*, 12, 13-35.

-----(1993b), "Joint Estimation of Model Parameters and Outlier Effects in Time Series," *Journal of American Statistical Association*, 88, 284-297.

Chen, H. and Allgöwer, F. (1998), "A quasi-infinite horizon nonlinear model predictive control scheme with guaranteed stability," *Automatica*, 14, 1205-1217.

Chow, C. M. and Clarke, D. W. (1994), "Actuator nonlinearities in predictive control," in *Advances in Model-Based Predictive Control*, D. W. Clarke (ed.), Oxford University Press.

Chow, C. M., Kuznetsov, A. G., and Clarke, D. W. Application of generalized predictive control to the benchmark paper machine. Clarke, D. W. *Advances in*

Model-Based Predictive Control. Technical Report OUEL 2017/94. 1994. Oxford, Department of Engineering Science. University of Oxford.

Chow, G. C. and Fair, R. C. (1973), "Maximum Likelihood Estimation of Linear Equation Systems with Autoregressive Residuals," *Annals of Economic and Social Measurement*, 2, 17-28.

Clarke, D. W. and Hasting-James, R. (1971), "Design of digital controllers for randomly disturbed systems," *Proceedings of Institution of Electrical Engineers*, 118, 1503-1506.

Clarke, D. W. and Gawthrop, P. J. (1975), "Self-tuning controller," *Proceedings of Institution of Electrical Engineers*, 122, 929-934.

Clarke, D. W., Mohtadi, C., and Tuffs, P. S. (1987), "Generalized Predictive Control. Part I. The Basic Algorithm," *Automatica*, 23, 137-148.

-----(1987), "Generalized predictive control. Part II: extensions and interpretations," *Automatica*, 23, 149-160.

Clarke, D. W. (1988), "Application of generalized predictive control to industrial processes," *IEEE Control Systems Magazine*, 138, 49-55.

Clarke, D. W. Adaptive generalized predictive controller. Technical Report OUEL 1879/91. 1991. Oxford, Department of Engineering Science. University of Oxford.

-----(1994), "Advances in model-based predictive control," in: *Advances in Model-Based Predictive Control*, D. W. Clarke (ed.), Oxford: Oxford University Press.

Colosimo B.M., Pan R., and del Castillo, E. (2004), "A sequential Markov Chain Monte Carlo approach to setup process adjustment over a set of lots," *Journal Applied Statistics*, 31, 499-520.

Constable, G. K. and Yen, V. (1991), "Autocorrelation and Control," in: ASQC Quality Congress Transactions, Milwaukee, WI, (EE.UU.), pp. 375-382.

Crosier, R. B. (1988), "Multivariate Generalisations of Cumulative Sum Quality-Control Schemes," *Technometrics*, 30, 291-303.

Cutler, C. R. and Ramaker, B. L. (1979), "Dynamic Matrix Control- a computer control algorithm," in: Proceedings of the 86th National Meeting of the AIChE, Los Angeles, CA, 1979; paper 51b.

-----(1980), "Dynamic matrix control - a computer control algorithm," in: Proceedings of the Joint Automatic Control Conference (JACC). San Francisco, CA, USA.

Cutler, C. R., Morshedi, A. M., and Haydel, J. (1983), "An industrial perspective on advanced control," in; In AIChE annual meeting, Washington, DC, October 1983.

Cutler, C. R. Dynamic Matrix Control. 1983. University of Houston. Ph.D. Thesis.

Dayal, B. S., MacGregor, J. F., Taylor, P. A., Kildaw, R., and Marcikic, S. (1994), "Application of Feedforward Neural Networks and Partial Least Squares Regression for Modelling Kappa Number in a Continuous Kamyr Digester," *Pulp & Paper Canada*, 95, 26-32.

Dayal, B. S. Multivariate Statistical Regression Methods for Process Modelling and Experimental Design. 1996. McMaster University. Ph. D. Thesis.

del Castillo E. (2002), *Statistical Process Adjustment for Quality Control*, New York, NY: John Wiley & Sons.

del Castillo E., Pan R., and Colosimo B.M. (2003), "Small sample comparison of some process adjustment methods," *Communications in Statistics, Simulation and Computation*, 32, 923-942.

del Castillo, E. (2006), "Statistical process adjustment: a brief retrospective, current status, and some opportunities for further work," *Statistica Neerlandica*, 60, 309-326.

del Castillo, E. (1998), "A note on two process adjustment models," *Quality and Reability Engineering International*, 14, 23-28.

Deming, W. E. (1986), *Out of the Crisis*, Cambridge, MA: MIT Center for Advanced Engineering Study.

Dempster, A. P., Laird, N., and Rubin, D. B. (1977), "Maximum likelihood estimation for incomplete data, via de EM algorithm," *J.Royal Stat.Soc.B*, 39, 1-38.

Eastment, H. T. and Krzanowski, W. J. (1982), "Crossvalidatory choice of the number of components from a principal component analysis," *Technometrics*, 24, 73-77.

Ellis, M., Durand, H., and Christofides, P.D. (2014), "A tutorial review of economic model predictive control methods," *Journal of Process Control*, 24, 1156-1178.

Eriksson, L., Johansson, N., Kettaneh-Wold, N., and Wold, S. (1999), *Introduction to Multi-and Megavariate Data Analysis using Projection Methods (PCA & PLS)*, Umea (Sweden): Umetrics.

Eriksson, L., Johansson, E., Kettaneh-Wold, N., and Wold, S. (2001), *Multi- and Megavariate Data Analysis: Principles and Applications*, Umea: Umetrics AB.

Espinosa, J. and Vandewalle, J. (1999), "The use of convex programming on fuzzy model based predictive control. In: Proc. IEEE International Symposium on Intelligent Control Intelligent Systems and Semiotics (ISIC-ISAS-1999)," pp. 411-416.

-----(1999), Espinosa, J. and J. Vandewalle (1999a). "Constrained predictive control using fuzzy models, ". In: Proc. 8th. International Fuzzy Systems Association World Congress (IFSA-99), pp. 649-654. Taipei, Taiwan.

Faltin, F. W., Hahn, G. J., Tucker, W. T., and Vander Wiel, S. A. (1993), "Algorithmic Statistical Process Control: Some Practical Observations," *International Statistical Review*, 61, 67-80.

Faltin, F. W., Mastrangelo, C. M., Runger, G. C., and Ryan, T. P. (1997), "Considerations in the Monitoring of Autocorrelated and Independent Data," *J.Qual.Technol.*, 29, 131-133.

Feld'baum, A. A. (1965), *Optimal Control Theory*, New York: Academic Press.

Ferrer, A., Romero, R., Zúnica, L. R., and Capilla, C. (1997), "Monitorización estadística de procesos regulados," in: XXIII Congreso Nacional de Estadística e I.O, pp. 10:7-10:8. Valencia (España).

Ferrer, A., Capilla, C., Romero, R., and Martín, J. (1998), "Developing Optimal Regulation and Monitoring Strategies to Control a Continuous Petrochemical Process," in *Quality Improvement Through Statistical Methods*, Bovas Abraham (ed.), Boston, MA, (EE.UU.): Birkhäuser.

Ferrer, A. (2004), "Control Estadístico de Procesos con Dinámica: Revisión del Estado del Arte y Perspectivas de Futuro," *Estadística Española*, 46, 19-47.

-----(2007), "Multivariate Statistical Process Control Based on Principal Component Analysis (MSPC-PCA): Some Reflections and a Case Study in an Autobody Assembly Process. Qual. Eng.," *Qual.Eng.*, 19, 311-325.

Ferrer, A., Barcelo´, S., and Hermenegildo, F. (2000), "Engineering Statistical Process Control (ESPC) in a Tile Industry", in: Proceedings of the Industrial Statistics in Action, pp. 145-158. 2000 International Conference. University of Newcastle upon Tyne, Newcastle,

Ferrer, A. J. (2009), "Statistical Control of Measures and Processes," in: *Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis*, S. Brown, R. Tauler, and B. Walczak (eds.), Oxford: Elsevier.

Fisher, R. A. (1925), *Statistical Methods for Research Workers*, Edinburgh: Tweeddale Court: Oliver and Boyd.

Frank, I. E. and Friedman, J. H. (1993), "A statistical view of some chemometrics regression tools (with discussion)," *Technometrics*, 35, 109-148.

Froisy, J. B. (1994), "Model predictive control: past, present and future," *ISATransactions.Elsevier Science*, 33, 235-243.

----- (2006), "Model predictive control—Building a bridge between theory and practice," *Computers and Chemical Engineering* 30 (2006) 1426-1435, 30, 1426-1435.

García-Muñoz, S., MacGregor, J. F., and Kourti, T. (2004), "Model Predictive Monitoring for Batch Processes," *Ind.Eng.Chem.Res.*, 43, 5929-5941.

García, C. E. and Morshedi, A. M. (1986), "Quadratic programming solution of dynamic matrix control (QDMC)," *Chemical Eng.Comm.*, 46, 73-87.

García, C. E., Prett, D. M., and Morari, M. (1989), "Model predictive control: Theory and practice - a survey," *Automatica*, 25, 335-348.

Geisser, S. A. (1974), "A predictive approach to the random effect model," *Biometrika*, 61, 101-107.

Geladi, P. and Kowalski, B. R. (1986), "Partial Least-Squares Regression: a tutorial," *Analytica Chimica Acta*, 185, 1-17.

Genceli, H. and Nikolaou, M. (1993), "Robust stability analysis of constrained II-norm model predictive control," *AIChE Journal*, 39, 1954-1965.

----- (1995), "Design of robust constrained model-predictive controllers with volterra series," *AIChE Journal*, 41, 2098-2107.

----- (1996), "New approach to constrained predictive control with simultaneous model identification," *AIChE Journal*, 42, 2857-2869.

Goldsmith, P. L. and Whitfield, H. (1961), "Average Run Lengths in Cumulative Chart Quality Control Schemes," *Technometrics*, 13, 20.

Golshan, M., MacGregor, J. F., Bruwer, M., and Mhaskar, P. (2010), "Latent Variable Model Predictive Control (LV-MPC) for trajectory tracking in batch processes," *Journal of Process Control*, 20, 538-550.

Granger, C. W. J. and Newbold, P. (1986), *Forecasting Economic Time Series*, Academic Press, Inc., New York.

Grosdidier, P., Froisy, B., and Hammann, M. (1988), "The IDCOM-M controller," in McAvoy, T. J., Arkun, Y., and Zafiriou, E. (eds.) pp. 31-36.

Grubbs, F. E. (1983), "An optimum procedure for setting machines or adjusting processes. Industrial Quality Control 1954. Reprinted in," *Journal of Quality Technology*, 15, 186-189.

Haiqing, L. (2000), *Special measurement technology and application*, Hangzhou: Zhejiang University Press.

Han, D. and Tsung, F. (2005), "Comparison of the cuscore, GLRT and CUSUM control charts for detecting dynamic mean change," *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, 57, 531-522.

Hannan, E. J. (1971), "The Identification Problem for Multiple Equation System with Moving Average Errors," *Econometrica*, 39, 751-765.

Harrington, H. J. (1991), *Business Process Improvement*, New York: McGraw-Hill.

Harris, T. J., MacGregor, J. F., and Wright, J. D. (1980), "Self-Tuning and Adaptive Controllers: An Application to Catalytic Reactor Control," *Technometrics*, 22, 153-164.

Harris, T. J. and MacGregor, J. F. (1987), "Design of Multivariable Linear-Quadratic Controllers Using Transfer Functions," *AIChE Journal*, 33, 1481-1495.

Harris, T. J. and Ross, W. H. (1991), "Statistical Process Control Procedures for Correlated Observations," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 69, 48-57.

Hawkins, D. M. and Olwell, D. H. (1998), *Cumulative Sum Charts and Charting for Quality Improvement*, New York, NY: Springer Verlag.

Hendry, D. F. (1971), "Maximum Likelihood Estimation of Systems of Simultaneous Regression Equations with Errors Generated by Vector Autoregressive Process," *International Economic Review*, 12, 257-272.

Hillmer, S. C. and Tiao, G. C. (1979), "Likelihood Function of Stationary Multiple Autoregressive-Moving Average Models," *Journal of the American Statistical Association*, 74, 652-660.

Hillmer, S. C., Bell, W. R., and Tiao, G. C. (1983), *Modeling Considerations in the Seasonal Adjustment of Economic Time Series*, Washington, D.C.: US Bureau of the Census.

Hoerl, A. E. and Kennard, R. W. (1970), "Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems," *Technometrics*, 8, 27-51.

Hoerl, R. W. and Palm, A. C. (1992), "Discussion: Integrating SPC and APC," *Technometrics*, 34, 268-272.

-----(1997), "Discussion of Statistical Process Monitoring and Feedback Adjustment - A Discussion por G.E.P. Box y T. Kramer," *Technometrics*, 34, 268-272.

Hotelling, H. (1947), "Multivariate Quality Control," in *In Techniques of Statistical Analysis*, C. H. M. W. W. A. Eisenhart (ed.), New York: MacGraw-Hill.

Höskuldsson, A. (1988), "PLS Regression Methods," *Journal of Chemometrics*, 2, 211-228.

- Huang, B., Shah, S. and Kwok, K. (1997), "Good, bad or optimal? performance assessment of MIMO processes," *Automatica*, 33(6), 1175–1183.
- Hunter J.S. (1986), "Exponentially Weighted Moving Average," *J.Qual.Technol.*, 18, 203-210.
- , Beyond the Shewhart SPC Paradigm. Presentation, given at the Department of Statistics, Southern Methodist University, Dallas, Texas. Dallas Texas. 1994.
- Isermann, R. (1991), *Digital Control Systems*, Berlín: Springer-Verlag.
- Jackson, J. E. and Mudholkar, G. S. (1979), "Control Procedures for Residuals Associated with Principal Component Analysis," *Technometrics*, 21, 341-349.
- Janakiram, M. and Keats, J. B. (1998), "Combining SPC and EPC in a Hybrid Industry," *Journal of Quality Technology*, 30, 189-200.
- Jenkins, G. M. and McLeod, G. (1982), *Case Studies in Time Series Analysis*, Lancaster (United Kingdom): Gwilym Jenkins & Partners Ltd.
- Jiang, W., Tsui, K.-L., and Woodall, W. H. (2000), "A New SPC Monitoring Method: The ARMA Chart," *Technometrics*, 42, 319-410.
- Jiang, W. and Tsui, K.-L. (2002), "SPC monitoring of MMSE- and PI-controlled processes," *Journal of Quality Technology*, 34, 384-398.
- Jiang, W. (2004), "Multivariate control charts for monitoring autocorrelated processes," *Journal of Quality Technology*, 36, 367-379.
- Johnson, N. L. (1949), "Systems of frequency curves generated by methods of translation," *Biometrika*, 36, 149-176.
- Johnson, R. A. and Bagshaw, M. (1974), "The Effect of Serial Correlation on the Performance of CUSUM Tests," *Technometrics*, 16, 103-112.
- Johnston, J. (1984), *Econometric Methods*, New York: McGraw-Hill.
- Jones, L. A., Champ, C. W., and Rigdon, S. E. (2001), "The performance of exponentially weighted moving average charts with estimated parameters," *Technometrics*, 43, 156-167.
- Kalgonda, A. A. and Kulkarni, S. R. (2004), "Multivariate quality control chart for autocorrelated processes," *Journal of Applied Statistics*, 131, 317-327.
- Kalman, R. E. (1958), "Design of a self-optimizing control system," *Transactions ASME*, 80, 468-478.
- (1960), "A new approach to linear filtering and prediction problems," *Transactions ASME Journal of Basic Engineering*, 82, 35-45.

Kandananond, K. Performance Characterization of Integrated Statistical Process Control Systems. 2007. Wichita State University. Ph. D. Thesis.

Keats, B. J. and Montgomery, D. C. (1991), *Statistical Process Control in Manufacturing*, Nueva York: Marcel Dekker.

Keats, B. J. and Hubele, N. F. (1991), *Statistical Process Control in Automated Manufacturing*, Nueva York: Marcel Dekker.

Keyser, R. M. C. D. (1991), "Basic principles of model based predictive control," in: 1st. European Control Conference, pp. 1753-1758.

Kinnaert, M. (1989), "Adaptive generalised predictive controller for MIMO systems," *Int.Journal of Control*, 50, 161-172.

Knoth, S., Morais, M. C., Pacheco, A., and Schmid, W. (2009), "Misleading signals in simultaneous residual schemes for the mean and variance of a stationary process," *Communications in Statistics - Theory and Methods*, 38, 2923-2943.

Kohn, R. (1979), "Identification Results for ARMAX Structures," *Econometrica*, 47, 1295-1304.

Kourti, T. and MacGregor, J. F. (1995), "Process analysis, monitoring and diagnosis, using multivariate projection methods," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 28, 3-21.

-----(1996), "Multivariate SPC Methods for Process and Product Monitoring," *Journal of Quality Technology*, 28, 409-428.

Kourti, T. (2002), "Process analysis and abnormal situation detection: from theory to practice," *IEEE Control Systems Magazine*, 22, 10-25.

-----(2004), "Process Analytical Technology and Multivariate Statistical Process Control. Index of Wellness of Product and Process -Part 1," *J.Process Anal.Technol.*, 1, 13-19.

-----(2005), "Application of Latent Variable Methods to Process Control and Multivariate Statistical Process Control in Industry," *Int.J.Adapt.Control Signal Process.*, 19, 213-246.

-----(2006), "Process Analytical Technology Beyond Real-Time Analyzers: The Role of Multivariate Analysis," *Crit.Rev.Anal.Chem.*, 36, 257-278.

-----(2009), "Multivariate Statistical Process Control and Process Control, Using Latent Variables," in *Comprehensive Chemometrics:: Chemical and Biochemical Data Analysis*, S. Brown, R. Tauler, and B. Walczak (eds.), Oxford: Elsevier.

Kouvaritakis, B., Rossiter, J. A., and Ju, G. J. (1997), "Robust stable generalised predictive control," *Int.Journal of Control*, 67, 411-434.

Kresta, J., MacGregor, J. F., and Marlin, T. E. (1991), "Multivariate Statistical Monitoring of Process Operating Performance," *Can.J.Chem.Eng.*, 69, 35-47.

Krieger, C. A., Champ, C. W., and Alwan, L. C. (1992), "Monitoring an Autocorrelated Process.," in University of Pittsburgh (ed.) pp. 71-78.

Krzanowski, W. J. (1987), "Cross-validation in Principal Component Analysis," *Biometrics*, 43, 575-584.

Ku, W., Storer, R. H., and Georgakis, C. (1995), "Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 30, 179-196.

Kulahci, M. and Borrór, C. (2008), "Advanced Statistical Process Control," in: *In Statistical Practice in Business and Industry*, S. G. T. S. D. M. Coleman (ed.), West Sussex, UK: Wiley.

Kuznetsov, A. G. and Clarke, D. W. (1994), "Application of constrained GPC for improving performance of controlled plants," in *Advances in Model-Based Predictive Control*, D. W. Clarke (ed.), Oxford University Press.

Laurí, D., Marínez, M., Salcedo, J. V., and Sanchis, J. (2010), "PLS-based model predictive control relevant identification: PLS-PH algorithm," *Chemom.Intell.Lab.Syst.*, 100, 118-126.

Laurí, D., Rossiter, J. A., Sanchis, J., and Martínez, M. (2010), "Data-driven latent-variable model-based predictive control for continuous processes," *Journal of Process Control*, 20, 1207-1219.

Lee, J. H. and Yu, Z. (1997), "Worst-case formulations of model predictive control for systems with bounded parameters," *Automatica*, 33, 763-781.

Lemos, J. M. and Mosca, E. (1985), "A multipredictor based LQ self-tuning controller," in: IFAC Symp. on identification and system parameter estimation. York, UK.

Lian, Z., Colosimo, B. M., and Del Castillo E. (2005), "Setup adjustment of multiple lots using a sequential Monte Carlo method," *Technometrics*, 48, 373-385.

Limon, D., Alamo, T., Pereira, M., Ferramosca, A., Gonzalez, A.H., and Odloak, D. (2013), "Integrating the RTO in the MPC: An adaptive gradient-based approach," in: European Control Conference (ECC). Zurich (Switzerland), pp.7-12.

Lin, W. S. W. and Adams, B. M. (1996), "Combined Control Charts for Forecast-Based Monitoring Schemes," *J.Qual.Technol.*, 28, 289-301.

Linkens, D. A. and Mahfouf, M. (1994), "Generalized predictive control (GPC) in clinical anaesthesia," in: *Advances in Model-Based Predictive Control*, D. W. Clarke (ed.), Oxford University Press.

Liu, G. P., Kadiramanathan, V., and Billings, S. A. (1998), "Predictive control for non-linear systems using neural networks," *Int.J.Control*, 71, 1119-1132.

Liu, H. R., Chou, C. Y., and Chen, C. H. (2003), "The effect of correlation on the economic design of warning limit X-bar charts," *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 22, 306-312.

Liu, L.-M. and Hudak, G. B. (1992), *Forecasting and Time Series Analysis using the SCA Statistical System*, Chigago, Illinois: Scientific Computing Associates.

Liu, L.-M. (2006), *Time Series Analysis and Forecasting*, Scientific Computing Associates.

Liu, L.-M. and Hudak, G. B. (1985), "Unified Econometric Model Building Using Simultaneous Transfer Function Equations," in *Time Series Analysis: Theory and Practice*, O.D.Andersen (ed.), Amsterdam: Elsevier Science Publishers.

Liu, R. Y. and Tang, J. (1996), "Control Charts for Independent and Dependent Measurements Based on Bootstrap Methods," *J.Am.Stat.Assoc.* 91, 1694-1700.

Ljung, L. (1987), *System Identification: Theory for the User*, Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall.

----(1991), "Issues in System Identification. " *IEEE Control SystemsMagazine*, 11, 25-29.

----(1999), *System identification: theory for the U user*, Upper Saddle River, NJ.: Prentice-Hall.

Lowry, C. A., Woodall, W. H., Champ, C. W., and Rigdon, S. E. (1992), "A Multivariate Exponentially Weighted Moving Average Control Chart," *Technometrics*, 34, 53.

Lu, C. W. and Reynolds, M. R. J. (1999), "Control Charts for Monitoring the Mean and Variance of Autocorrelated Processes," *Journal of Quality Technology*, 31, 259-274.

----(1999), "EWMA Control Charts for Monitoring the Mean of Autocorrelated Processes," *Journal of Quality Technology*, 31, 166-188.

----(2001), "CUSUM chart for monitoring autocorrelated processes," *Journal of Quality Technology*, 33, 316-334.

Luceño, A. (1998), "Performance of Discrete Feedback Adjustment Schemes With Dead Band, Under Stationary versus Nonstationary Stochastic Disturbance," *Technometrics*, 40, 223-233.

Luceño, A. and Box G.E.P. (2000), "Influence of the sampling interval, decision limit and autocorrelation on the average run length in CUSUM charts," *Journal of Applied Statistics*, 27, 177-183.

MACC (1965), GAUSHAUS. *Nonlinear Least Squares*, Madison: Madison Academic Computing Center, University of Wisconsin.

MacGregor, J. F. (1976), "Optimal choice of the sampling interval for discrete process control," *Technometrics*, 18, 151-160.

MacGregor, J. F. and Tidwell, P. W. (1977), "Discrete Stochastic Control with Input Constraints," *Proceedings of Institution of Electrical Engineers*, 124, 732-734.

MacGregor, J. F. (1988), "On-Line Statistical Process Control," *Chemical Engineering Progress*, 84, 21-31.

MacGregor, J. F. and Harris, T. J. (1990), "Discussion of Exponentially Weighted Moving Average Control Schemes: Properties and Enhancements por J.M. Lucas y M.S. Saccucci.," *Technometrics*, 32, 1-29.

MacGregor, J. F. (1990), "A different view of the funnel experiment," *Journal of Quality Technology*, 22, 255-259.

-----(1991), "Discussion of Some Statistical Process Control Methods for Autocorrelated Data por D.C. Montgomery y C.M. Mastrangelo," *Journal of Quality Technology*, 23, 198-199.

MacGregor, J. F., Jaeckle, C., Kiparissides, C., and Koutoudi, M. (1994), "Process Monitoring and Diagnosis by Multi-Block PLS Methods," *Journal of the American Institute of Chemical Engineers*, 40, 826-838.

MacGregor, J. F. and Kourti, T. (1995), "Statistical Process Control of Multivariate Processes," *Control Engineering Practice*, 3, 403-414.

MacGregor, J. F. (1996), "On-Line Process Data to Improve Quality. Is There a Role for Statisticians? Are They Up for the Challenge?," *ASQC Stat.Div.Newsl.*, 16, 6-13.

MacGregor, J. F., Bruwer, M., and Golshan, M. System and method for the model predictive control of batch processes using latent variable dynamic models. [US 20090287320 A1]. 2009. EEUU.

MacGregor, J. F., Bruwer, M., Miletic, I., Cardin, M., and Liu, Z. (2015), "Latent Variable Models and Big Data in the Process Industries," in: Elsevier (ed.) pp. 520-524.

Maner, B. R., Doyle, B. A., Ogunnaike, B. A., and Pearson, R. K. (1996), "Nonlinear model predictive control of a simulated multivariable polymerization reactor using second-order Volterra models," *Automatica*, 32, 1285-1301.

Maragah, H. D. and Woodall, W. H. (1992), "The effect of autocorrelation on the retrospective X-chart," *Journal of Statistical Computing and Simulation*, 40, 29-40.

Marlin, T. E. (1995), *Process Control. Designing Processes and Control Systems for Dynamic Performance*, Mc Graw-Hill.

Marquis, P. and Broustail, J. P. (1998), "SMOC, a bridge between state space and model predictive controllers: Application to the automation of a hydrotreating unit," in McAvoy, T. J., Arkun, Y., and Zafiriou, E. (eds.) pp. 37-43.

Martens, H. and Naes, T. (1989), *Multivariate Calibration*, New York: Wiley.

Martín, J., Capilla, C., Ferrer, A., and Romero, R. (1997), "Aplicación de un controlador *bi-input* a un proceso industrial continuo," in: XXIII Congreso Nacional de Estadística e Investigación Operativa, pp. 10:7-10:8. Valencia (España).

Martín, J., Ferrer, A., Capilla, C., and Romero, R. (1998), "Análisis del comportamiento de un controlador *bi-input* en un proceso industrial continuo cuando se producen causas especiales," in: XXIV Congreso Nacional de Estadística e I.O, pp. 45-46. Almería (España).

Martínez, M., Senet, J. S., and Blasco, F. X. (1996), "A comparative study of classical vs genetic algorithm optimization applied in GPC controller," in: IFAC World congress.

-----(1998), "Generalized predictive control using genetic algorithms (GAGPC)," *Engineering applications of artificial intelligence*, 11, 355-368.

Mason, R. L., Chou, Y. M., Sullivan, J. H., Stoumbos, Z., and Young, J. C. (2003), "Systematic Patterns in T^2 charts," *Journal of Quality Technology*, 35, 47-58.

Massy, W. F. (1965), "Principal components regression in exploratory statistical research," *J.Am.Stat.Assoc.*, 60, 234-246.

Mastrangelo, C. M. and Montgomery, D. C. (1995), "SPC with correlated observations for the chemical and process industries," *International Journal of Reliability, Quality and Safety Engineering*, 11, 78-89.

Mastrangelo, M. C., Runger, G. C., and Montgomery, D. C. (1996), "Statistical process monitoring with principal components," *Quality and Reliability Engineering International*, 12, 203-210.

Mayne, D. Q. (1997), "Nonlinear model predictive control: An assessment," in pp. 217-231.

Mayne, D. Q., Rawlings, J. B., Rao, C. V., and Sokaert, P. O. M. (2000), "Constrained model predictive control: Stability and optimality." *Automatica*, 36, 789-814.

Megías, D., Serrano, J., and Prada, C. d. (2001), "Min-max constrained infinite horizon model predictive control: standard vs. feedback formulation," in: European Control Conf. (ECC-01). Porto (Lisbon), pp. 3765-3770.

Messina, W. S., Montgomery, D. C., Keats, J. B., and Runger, G. C. (1996), "Strategies for Statistical Monitoring of Integral Control for the Continuous Process Industries," in: *Statistical Applications in Process Control*, J. B. Keats and D. C. Montgomery (eds.), New York: Marcel Dekker.

Miletic, I., Quinn, S., Dudzic, M., Vaculik, V., and Champagne, M. (2004), "An Industrial Perspective on Implementing On-Line Applications of Multivariate Statistics," *J.Process Control*, 14, 821-836.

Miller, P., Swanson, R., and Heckler, C. F. (1993), "Contribution Plots: the Missing Link in Multivariate Quality Control," in Annual Fall Technical Conference of the American Society for Quality Control (Milwaukee WI) and the American Statistical Association (Alexandria VA) (ed.).

Montgomery, D. C. and Mastrangelo, C. M. (1991), "Some statistical process control methods for autocorrelated data," *J.Qual.Technol.*, 23, 179-193.

Montgomery, D. C., Keats, B. J., Runger, G. C., and Messina, W. S. (1994), "Integrating Statistical Process Control and Engineering Process Control," *Journal of Quality Technology*, 26, 79-87.

Montgomery, D. C., Runger, G. C., and Hubele, N. F. (1998), *Engineering Statistics*, New York: Wiley&Sons.

Montgomery, D. C. (2005), *Introduction to Statistical Quality Control*, New York: John Wiley & Sons, Inc.

Morari, M., García, C. E., Pretti, D. M., and Lee, J. J. (2004), *Model Predictive Control*, Prentice Hall PTR.

Morari, M. and Lee, J. H. (1999), "Model predictive control: Past, present and future," *Computers and Chemical Engineering*, 23, 667-682.

Mosca, E. (1995), *Optimal, predictive, and adaptive control*, Prentice-Hall.

Moyne, J., del Castillo, E., and Hurwitz, A. M. (2001), *Run to Run Control in Semiconductor Manufacturing*, Boca ratón, Florida (FL): CRC Press.

Muske, K. R. and Rawlings, J. B. (1993), "Model predictive control with linear models," *AIChE Journal*, 39, 268-287.

Nahas, E. P., Henson, M. A., and Seborg, D. E. (1992), "Nonlinear internal model control strategy for neural network models," *Comp.Chem.Eng.*, 16, 1039-1057.

Nelson, P. R. C., Taylor, P., and MacGregor, J. F. (1996), "Missing Data Methods in PCA and PLS: Score Calculations with Incomplete Observations," *Chemom.Intell.Lab.Syst.*, 35, 45-65.

Nembhard, H. B. and Mastrangelo, C. M. (1998), "Integrated Process Control for Startup Operations," *Journal of Quality Technology*, 30, 201-210.

Nikolaou, M. and N (1998), *Model predictive controllers: A critical synthesis of theory and industrial needs*, Academic Press.

Nomikos, P. and MacGregor, J. F. (1995), "Multivariate SPC Charts for Monitoring Batch Processes," *Technometrics*, 37, 41-59.

Odelson, B. J. and Rawlings, J. B. (2003), "Online monitoring of MPC disturbance models from closed-loop data," in: Proceedings of the American control conference, pp. 2714-2719.

Ogunnaike, B. A. (1986), "Dynamic Matrix Control: A Nonstochastic, Industrial Process Control Technique with Parallels in Applied Statistics," *Ind.Eng.Chem.Fundam.*, 25, 712-718.

Onnen, C., Babuska, R., Kaymak, U., Sousa, J. M., Verbruggen, H. B., and Isermann, R. (1997), "Genetic algorithms for optimization in predictive control," *Control Engineering Practice*, 5, 1363-1372.

Ordys, A. W. and Clarke, D. W. (1993), "A state-space description for GPC controllers," *Int.J.Systems Sci.*, 24, 1727-1744.

Padgett, C. S., Thombs, L. A., and Padgett, W. S. (1992), "On the α -risks for Shewhart Control Charts," *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, 21, 1125-1147.

Page, E. S. (1954), "Continuous Inspection Schemes," *Biometrika*, 41, 110-115.

-----(1961), "Cumulative Sum Control Charts," *Technometrics*, 3, 1-9.

Palm, A. C. (1990), "SPC Versus Automatic Process Control," in: ASQC Quality Congress Transactions, pp. 694-699. San Francisco, (EE.UU).

Pan, R. and del Castillo, E. (2003), "Integration of Sequential Process Adjustment and Process Monitoring Techniques," *Quality and Reability Engineering International*, 19, 371-386.

Pan, R. and del Castillo, E. (2004), "Scheduling methods for the setup adjustment problem," *International Journal of Productions Research*, 41, 1467-1481.

Pan, X. and Jarrett, J. E. (2004), "Applying state space to SPC: monitoring multivariate time series," *Journal Applied Statistics*, 131, 397-418.

-----(2007), "Using vector autoregressive residuals to monitor multivariate processes in the presence of serial correlation," *International Journal of Production Economics*, 106, 204-216.

----- (2007), "Monitoring variability and analyzing multivariate autocorrelated processes," *Journal of Applied Statistics*, 34, 459-469.

----- (2012), "Why and how to use vector autoregressive models for quality control: the guideline and procedures," *Quality & Quantity*, 46, 935-948.

Pankrazt, A. (1983), *Forecasting with Univariate Box-Jenkins Models: Concepts and Cases*, New York: Wiley.

----- (1991), *Forecasting with Dynamic Regression Models*, New York: Wiley.

Park, C. (2010), "Linear filter model representation for integrated process control with repeated adjustments and monitoring," *Journal of the Korean Statistical Society*, 39, 177-187.

Pearson, K. (1901), "On lines and planes of closest fit to systems of points in space," *Philosophical Magazine*, 6, 559-572.

Peña, D. (1998), *Estadística. Modelos y Métodos. Modelos Lineales y Series Temporales*, Madrid: Alianza Editorial.

Peña, D. (2005), *Análisis de Series Temporales*, Alianza Editorial.

Pérez de Madrid, A. Aplicación de técnicas de programación dinámica a control predictivo basado en modelos. 1995. Universidad Nacional de Educación a Distancia. Facultad de Ciencias. Madrid. Tesis doctoral.

Phillips, C. L. and Parr, J. M. (1995), *Signals, systems and transforms*, Prentice Hall.

Picasso, B., De Vito, D., Scattolini, R., Colaneri, P. (2010), "An MPC approach to the design of two-layer hierarchical control systems," *Automatica*, 46, 823-831.

Pignatiello, J. J. Jr. and Runger, G. C. (1990), "Comparisons of Multivariate CUSUM Charts," *J. Qual. Technol.*, 22, 173-186.

Prett, D. M. and Morari, M. (1987), "Process Control Research: Industrial and Academic Perspectives," in: *The Shell Process Control Workshop*, pp. 355-360. Butterworths, Boston (USA).

Psarakis, S. and Papaleonida, G. E. A. (2007), "SPC Procedures for Monitoring Autocorrelated Processes," *Quality Technology & Quantitative Management*, 4, 501-540.

Qin, S. J. and Badgwell, T. A. (1997), "An overview of industrial model predictive control technology," in Kantor, J. C., García, C. E., and Carnahan, B. (eds.) pp. 232-256.

----- (1998), *An overview of nonlinear model predictive control applications*, Ascona, Switzerland.

-----(2003), "A survey of industrial model predictive control technology," *Control Engineering Practice*, 11, 733-764.

Qin, S. J. and Lee, J. H. (2001), "Overview of industrial model predictive control," in: Taiwan MPC Workshop.

Quenouille, M. E. (1949), "Approximate Tests of Correlation in Time-series," *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, B11, 68-84.

Ramos, P. F., Morais, M. C., Pacheco, A., and Schmid, W. (2012), "Assessing the Impact of Autocorrelation in Misleading Signals in Simultaneous Residual Schemes for the Process Mean and Variance: A Stochastic Ordering Approach," in *Frontiers in Statistical Quality Control 10*, Hans-Joachim Lenz, Wolfgang Schmid, and Peter-Theodor Wilrich (eds.), Physica-Verlag HD.

Rao, C. V. and Rawlings, J. B. (1998), "Optimization strategies for linear model predictive control," in: 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems. Georgakis, C. (ed.) pp. 41-46.

Rawlings, J.B., Angeli, D., Bates, C.N. (2012), "Fundamentals of economic model predictive control," in: 51st IEEE Annual Conference on Decision and Control (CDC). Maui (USA), pp.3851-3861.

Rawlings, J. B. and Muske, K. R. (1993), "Stability of constrained receding horizon control," *IEEE Trans.on Automatic Control*, 38, 1512-1516.

Rawlings, J. B., Meadows, E. S., and Muske, K. R. (1994), "Nonlinear model predictive control: A tutorial and survey," in: Proc. Int. Symp. Adv. Control of Chemical Processes (ADCHEM). Kyoto (Japan).

Reinsel, G. C. (1979), "FIML Estimation of the Dynamic Simultaneous Equations Model with ARMA Disturbances," *Journal of Econometrics*, 9, 263-281.

-----(1997), *Elements of Multivariate Time Series Analyses*, Springer.

Richalet, J., Rault, A., Testud, J. L., and Papon, J. (1976), "Algorithmic control of industrial processes," in: Proc.of the 4th IFAC Symposium on Identification and System Parameter Estimation. Tbilisi (Georgia), pp. 1119-1167.

-----(1978), "Model predictive heuristic control: Applications to industrial processes," *Automatica*, 14, 413-428.

Richalet, J. (1993), "Industrial applications of model based predictive control," *Automatica*, 29, 1251-1274.

Roberts, S. (1959), "Control Chart Tests Based on Geometric Moving Averages," *Technometrics*, 42, 97-102.

- Romero, R. (2000), *Calidad Total, Estadística y Método Científico*. Real Academia de Cultura Valenciana. Discurso nº 35.
- Romero, R. and Zúnica, L. R. (2008), *Métodos Estadísticos en Ingeniería*, Universidad Politécnica de Valencia.
- Rossiter, J. A., Kouvaritakis, B., and Dunnet, R. M. (1991), "Application of generalized predictive control to a boiler turbine unit for electricity generation," *IEE Proceedings-D*, 138, 59-67.
- Rotem, Y., Wachs, A., and Lewin, D. R. (2000), "Ethylene compressor monitoring using model-based PCA," *AIChE Journal*, 46(9), 1825–1836.
- Rouhani, R. and Mehra, R. K. (1982), "Model algorithmic control: Basic properties," *Automatica*, 18, 401-414.
- Runger, G. C., Willemain, T. R., and Prabhu, S. (1995), "Average Run Lengths for CUSUM Control Charts Applied to Residuals," *Communications in Statistics -Theory and Methods*, 24, 273-282.
- Runger, G. C. (1996), "Multivariate statistical process control for autocorrelated processes," *International Journal of Production Research*, 34, 1715-1724.
- Salcedo, J. V. and Martínez, M. (2000), "Control predictivo generalizado con índice de coste modular," in: *Seminario Anual de Automática, Electrónica Industrial e Instrumentación (SAAEI'00)*. Terrassa (España).
- Sanchis, J. GPC mediante descomposición en valores singulares (SVD). 2002. Universitat Politècnica de Valencia. Tesis doctoral.
- Schmid, W. (1995), "On the run length of a Shewhart chart for correlated data," *Statistical Papers*, 36, 111-130.
- Scokaert, P. O. M. and Rawlings, J. B. (1998), "Constrained linear quadratic regulation," *IEEE Transactions on Automatic Control*, 43, 1163-1169.
- Shewhart, W. A. (1931), *Economic Control of Quality of Manufactured Product*, Pricenton, NJ: Van Nostrand Reeditado por American Society of Quality en 1980 Milwaukee, WI.
- Simon, H. (1956), "Dynamic programming under uncertainty with a quadratic criterion function," *Econometrica*, 24, 74-81.
- Skägerberg, B., MacGregor, J. F., and Kiparissides, C. (1992), "Multivariate Data Analysis Applied to Low-Density Polyethylene Reactors," *Chemom.Intell.Lab.Syst.*, 14, 341-356.

- Snoussi, A., El Ghourabi, M., and Limam, M. (2005), "On SPC for short run autocorrelated data," *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, 34, 219-234.
- Snoussi, A. (2011), "SPC for short-run multivariate autocorrelated processes," *Journal of Applied Statistics*, 38, 2303-2312.
- Stanfelj, N., Martin, T. E., and MacGregor, J. F. (1991), "Monitoring and Diagnosing Process Control Performance: The Single Loop Case," in: Proceedings of the American Control Conference, IEEE, pp. 2886-2892. Boston, MA, (EE.UU.)
- Stone, M. (1974), "Cross-validatory choice and assessment of statistical predictions," *Journal of Royal Statistical Society, B*, 36, 111-133.
- Superville, C. R. and Adams, B. M. (1994), "An Evaluation of Forecast-Based Quality Control Schemes," *Communications in Statistics- Simulation and Computation*, 23, 645-661.
- Theil, H. (1957), "A note on certainty equivalence in dynamic planning," *Econometrica*, 25, 346-349.
- Timmer, D. H. and Pignatiello, J. J. (2003), "Change point estimates for the parameters of an AR(1) process," *Quality and Reliability Engineering International*, 19, 355-369.
- Tippett, M.J., Bao, J. (2015), "Reconfigurable distributed model predictive control," *Chemical Engineering Science*, 136, 2–19.
- Tracy, N. D., Young, J. C., and Mason, R. L. (1992), "Multivariate Control Charts for Individual Observations," *J.Qual.Technol.*, 24, 88-95.
- Trietsch, D. (1998), "The harmonic rule for process setup adjustment with quadratic loss," *Journal of Quality Technology*, 30, 75-84.
- (2000), "Process setup adjustment with quadratic loss," *IIE Transactions*, 32, 299-307.
- Tsang, T. T. C. and Clarke, D. W. (1988), "Generalized predictive control with input constraints," *IEE Proceedings*, 135, 451-460.
- Tsung, F. (1998), "On the Efficiency and Robustness of Discrete Proportional-Integral Control Schemes," *Technometrics*, 40, 214-222.
- Tsung, F. and Shi, J. J. (1999), "Integrated design of run to run PID controllers and SPC monitoring for process disturbance rejection," *IIE Transactions*, 31, 517-527.
- Tuan, H.D., Savkin, A., Nguyen, T.N., Nguyen, H.T. (2015), "Decentralised model predictive control with stability constraints and its application in process control," *Journal of Process Control*, 26, 73-89.

Tucker, W. T., Faltin, F. W., and Vander Wiel, S. A. (1993), "Algorithmic Statistical Process Control: An Elaboration," *Technometrics*, 35, 363-375.

Vall, K. D. (1976), "FIML Estimation of Rational Distributed Lag Structural Form Models," *Annals of Economic and Social Measurement*, 5, 53-64.

VanBrackle, L. N. and Reynolds, M. R. J. (1997), "EWMA and CUSUM Control Charts in the Presence of Correlation," *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, 26, 979-1008.

Vander Wiel, S. A. and Vardeman, S. B. (1992), "Discussion of Statistical Process Monitoring and Feedback Adjustment - A Discussion» por G.E.P. Box y T.Kramer," *Technometrics*, 34, 278-281.

Vander Wiel, S. A., Tucker, W. T., Faltin, F. W., and Doganaksoy, N. (1992), "Algorithmic Statistical Process Control: Concepts and an Application," *Technometrics*, 34, 286-297.

Vander Wiel, S. A. (1996), "Modelling Processes That Wander Using Moving Average Models," *Technometrics*, 38, 139-151.

Vanhatalo, E. and Kulahci, M. (2014), "The Effect of Autocorrelation on the Hotelling T^2 Control Chart," *Qual.Reliab.Eng.Int.*

-----(2015), "Impact of Autocorrelation on Principal Components and Their Use in Statistical Process Control," *Quality & Reliability Engineering International*.

Vasilopoulos, A. V. and Stamboulis, A. P. (1978), "Modification of Control Chart Limits in the Presence of Data Correlation," *Journal of Quality Technology*, 10, 20-23.

Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Yin, K., and Kavuri, S. N. (2003), "A Review of Process Fault Detection and Diagnosis. Part I: Quantitative Model-Based Methods," *Comput.Chem.Eng.*, 27, 311.

Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., and Kavuri, S. N. (2003), "A Review of Process Fault Detection and Diagnosis. Part II. Qualitative Models and Search Strategies," *Comput.Chem.Eng.*, 27, 313-326.

Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Kavuri, S. N., and Yin, K. A. (2003), "Review of Process Fault Detection and Diagnosis. Part III:Process History Based Methods," *Comput.Chem.Eng.*, 27, 327-346.

Wang, F. K. (2005), "A simple data transformation for auto-correlated data for SPC," *International Journal of Production Research*, 43, 981-989.

Wardell, D. G., Moskowitz, H., and Plante, R. D. (1994), "Run Length Distributions of Special-Cause Control Charts for Correlated Processes," *Technometrics*, 36, 3-17.

Wierda, S. J. (1994), "Multivariate Statistical Process Control-Recent Results and Directions for Future Research," *Statistica Neerlandica*, 48, 147-168.

Wilkstrom, C., Albano, C., Eriksson, L., Friden, H., Johansson, E., Nordahl, A., Rannar, S., Sandberg, M., Kettaneh-Wold, N., and Wold, S. (1998), "Multivariate process and quality monitoring applied to an electrolysis process: Part II. Multivariate time-series analysis of lagged latent variables," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 42, 233-240.

Winkel, P. and Zhang, N. F. (2004), "Serial correlation of quality control data - on the use of proper control charts," *Scandinavian Journal of clinical & Laboratory Investigation*, 64, 195-203.

Wise, B. M., Veltkamp, D. J., Ricker, N. L., Kowalski, B. R., Barnes, S., and Arakali, V. (1991), "Application of Multivariate Statistical Process Control (MSPC) to the West Valley Slurry-Red Ceramic Melter Process," in *Proc. Waste Management 91*. Tucson, Arizona (USA).

Wold, H. (1966a), "Non-linear estimation by iterative least square procedures," in *Research Papers in Statistics*, F. David (ed.), New York: John Wiley.

-----(1966b), "Estimation of principal components and related models by iterative least squares.," in *Multivariate Analysis*, P. R. Krishnaiah (ed.), New York: Academic Press.

Wold, H. (1973), "Non-linear iterative partial least squares (NIPALS) Modelling. Some current developments," in *Multivariate Analysis*, P. R. Krishnaiah (ed.), New York: Academic Press.

-----(1975), "Quantitative sociology," in *International perspectives on mathematical and statistical modeling.*, H. Blalock, A. Aganbegian, F. Borodkin, R. Boudon, and V. Capecchi (eds.), New York: Academic Press.

-----(1975), "Soft modeling by latent variables: the non-linear iterative partial least square (NIPALS) approach.," in: *Perspectives in probability and statistics: Papers, in Honour of M.S. Bartlett on the occasion of his Sixty-fifth Birthday.*, J. Gani (ed.), London: Applied Probability Trust, Academic.

-----(1984), "PLS Regression," in: *Encyclopedia of Statistical Sciences*, S. Kotz and N. L. Johnson (eds.), New York: John Wiley.

Wold, S., Høy, M., Martens, H., Trygg, J., Westad, F., MacGregor, J., and Wise, B. M. (2009), "The PLS Model Revisited," *J.Chemom.*, 23, 67-68.

Wold, S. (1976), "Pattern Recognition by Means of Disjoint Principal Component Models," *Pattern Recognition*, 8, 127-139.

-----(1978), "Cross-Validatory Estimation of the Number of Components Models," *Technometrics*, 20, 397-405.

Wold, S., Albano, C., Dunn, I. W. J., Edlund, U., Esbensen, K., Geladi, P., Hellberg, S., Johansson, E., Lindberg, W., and Sjöström, M. (1984), "Multivariate Data Analysis in Chemistry," in: *Chemometrics: Mathematics and Statistics in Chemistry*, B. R. Kowalski (ed.), Dordrecht, Holland: D. Reidel Publishing Company.

Wold, S., Wold, H., Dunn, W. J., and Ruhe, A. (1984), "The collinearity problem in linear regression. The partial least squares (PLS) approach to generalized inverses," *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 5, 735-743.

Woodall, W. H. and Montgomery, D. C. (1999), "Research Issues and Ideas in Statistical Process Control," *Journal of Quality Technology*, 31, 376-386.

Woodall, W. H. (2000), "Controversies and Contradictions in Statistical Process Control," *Journal of Quality Technology*, 32, 341-350.

Woodall, W. H. and del Castillo, E. (2014), "An overview of George Box's contributions to process monitoring and feedback adjustment," *Applied stochastic models in business and industry*, 30, 53-61.

Yoon, S. and MacGregor, J. F. (2000), "Relationships between Statistical and Causal Model-Based Approaches to Fault Detection and Isolation," *Am.Inst.Chem.Eng.J.*, 46, 1813-1824.

Yousfi, C. and Tournier, R. (1991), "Steady-state optimization inside model predictive control," in: *Proceedings of ACC'91*, pp. 1866-1870. Boston, MA.

Zafra-Cabeza, A., Maestre, J.M., Ridao, M.A., Camacho, E.F. Sánchez, L. (2011), "A hierarchical distributed model predictive control approach to irrigation canals: A risk mitigation perspective," *Journal of Process Control*, 21, 787-799.

Zamarreño, J. M. Identificación y control predictivo basado en modelos mediante red neuronal en espacio de estados. 1996. Universidad de Valladolid. 1996. Tesis doctoral.

Zellner, A. and Palm, F. (1974), "Time Series Analysis and Simultaneous Equation Econometric Models," *Journal of Econometrics*, 2, 17-54.

Zellner, A. (1979), "Statistical Analysis of Econometric Models," *Journal of American Statistical Association*, 74, 628-651.

Zhang, H. and Lennox, B. (2004), "Integrated condition monitoring and control of fed-batch fermentation processes," *Journal of Process Control*, 14, 41-50.

Zhang, N. F. (1997), "Detection capability of residual control chart for stationary process data." *Journal of Applied Statistics*, 24, 475-492.

-----(1998), "A Statistical Control Chart for Stationary Process Data," *Technometrics*, 40, 24-38.

Zhao, M., Ding, B. (2015), "Predictive control for constrained nonlinear systems with decoupled local dynamics," *ISA Transactions*, 55, 1-12.

Zheng, A. and Morari, M. (1995), "Stability of model predictive control with mixed constraints," *IEEE Trans.on Automatic Control*, 40, 1810-1823.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Abraham, B. and Ledolter, J. (1983), *Statistical Methods for Forecasting*, Illinois: Scientific Computing Associates.

Akram, M. A., Saif, A.-W. A., and Rahim, M. A. (2012), "Quality monitoring and process adjustment by integrating SPC and APC: a review," *Int.J.Industrial and Systems Engineering*, 11, 375-405.

Atienza, O. O., Tang, L. C., and Ang, B. W. (2002), "A CUSUM scheme for autocorrelated observations," *Journal of Quality Technology*, 34, 187-199.

Bard, Y. (1974), *Nonlinear Parameter Estimation*, New York: Academic Press.

Bartlett, M. S. (1995), *Stochastic Processes*, Cambridge: Cambridge University Press.

Basseville, M. and Nikiforov, I. I. (1993), *Detection of Abrupt Changes: Theory and Application*, Prentice Hall.

Beck, Y. V. and Arnold, K. J. (1997), *Parameter Estimation in Engineering and Science*, New York: Wiley.

Bergh.L.G. and MacGregor, J. F. (1987), "Spatial Control of Sheet and Film Forming Processes," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 65, 148-155.

Camacho, J., Ferrer, A., and Martínez, J. M. (2014), *Batch Processes - Monitoring and Process Understanding: Monitoring and Process Understanding - Latent Structure Based Methods*, Wiley-VCH Verlag GmbH.

Christobeck, M. A. A comparison of the effectiveness of statistical process control charts. 2002. Temple University. Ph. D. Thesis.

Crowder, S. V. Kalman Filtering and Statistical Process Control. 1986. Iowa State University. Ph. D. Thesis.

Cryer, I. (1986), *Time Series Analysis*, Boston: Duxbury Press.

Dayal, B. S. and MacGregor, J. F. (1996), "Identification of Finite Impulse Response Models: Methods and Robustness Issues," *Ind.Eng.Chem.Res.*, 35, 4078-4090.

-----(1997), "Multi-output process identification," *Journal of Process Control*, 7, 269-282.

Draper, N. and Smith, H. (1998), *Applied Regression Analysis*, New York: John Wiley & Sons.

Ferrer, A. (2007), "Multivariate Statistical Process Control Based on Principal Component Analysis (MSPC-PCA): Some Reflections and a Case Study in an Autobody Assembly Process. Qual. Eng.," *Qual.Eng.*, 19, 311-325.

Gourieroux, C. and Monfort, A. (1997), *Time Series and Dynamic Models*, Cambridge: Cambridge University Press.

Höskuldsson, A. (1996), *Prediction Methods in Science and Technology*, Copenhagen, Denmark: Thor Publishing.

Hudak, G. B. and Liu, L.-M. (1991), *The SCA Statistical System. Reference Manual for General Statistical Analysis*, Oak Brook, Illinois: Scientific Computing Associates.

Jackson, J. E. (1991), *A User's Guide To Principal Components*, New York: John Wiley & Sons.

Janakiram, M. Statistical and Engineering Process Control Integration Strategies for Constrained Controllers. 2001. Arizona State University. Ph. D. Thesis.

Jenkins, G. M. (1979), "Multivariate stochastic (multiple output) models," in: *Practical Experiences with Modelling and Forecasting Time Series*, Gwilym Jenkins & Partners Ltd.

-----(1979), *Practical Experiences with Modelling and Forecasting Time Series*, Jersey, Channel Islands (United Kingdom): Gwilym Jenkins & Partners Ltd.

Kelly, S. J., MacGregor, J. F., and Hoffman, T. W. (1987), "Control of a Continuous Polybutadiene Polymerization Reactor Train," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 65, 852-857.

Kramer, T. T. Process Control from an Economic Point of View. 1989. University of Wisconsin - Madison. Ph. D. Thesis.

Lakshminarayanan, S., Shah, S. L., and Nandakumar, K. (1997), "Modeling and control of multivariable processes: dynamic PLS approach," *AIChE Journal*, 43, 2307-2322.

Liu, L.-M. and Hanssens, D. M. (1982), "Identification of Multiple-Input Transfer Function Models," *Communications in Statistics*, A11, 297-314.

Liu, L.-M. (1986), *Multivariate Time Series Analysis Using vector Arma Models*, Scientific Computing Associates Corp.

-----(1991), "Use of Linear Transfer Function Analysis in Econometric Time Series Modelling," *Statistica Sinica*, 1, 503-525.

Liu, L.-M. (1997), "Sales Forecasting Using Multi-Equation Transfer Function Models," *Journal of Forecasting*, 6, 223-238.

-----(1997), *Forecasting and Time series Analysis using the SCA Statistical System*, Illinois: Scientific Computing Associates.

-----(2001), *Effective Forecasting and Time Series Data Mining Using an Expert System Approach*, Illinois, Chicago: Scientific Computing Associates Corp.

Lütkepohl, H. (1993), *Introduction to Multiple Time Series Analysis*, Springer-Verlag.

MacGregor, J. F. and Wong, A. K. L. (1980), "Multivariate Model Identification and Stochastic Control of a Chemical Reactor," *Technometrics*, 22, 453-464.

MacGregor, J. F. (1987), "Interface between SPC and Process Control," *Computers and Systems Technology Divisions Communications.A.I.Ch.E.*, 10, 9-20.

MacGregor, J. F. and Taylor, P. A. (1990), *Advanced Process Control. An intensive Short Course. Digital Computer Techniques for Process Identification and Control*, Hamilton, Ontario. Canadá: McMaster University.

Montgomery, D. C., Johnson, L. A., and Gardiner, J. S. (1990), *Forecasting & Time Series Analysis*. McGraw-Hill, Inc.

Montgomery, D. C. and Runger, G. C. (1994), *Applied Statistics and Probability for Engineers*, New York: Wiley&Sons.

Montgomery, D. C. (2001), *Design and Analysis of Experiments*, New York: John Wiley&Sons.

Peña, D. (1999), *Estadística. Modelos y Métodos. Fundamentos*, Alianza Editorial.

-----(2001), *Fundamentos de Estadística*, Madrid: Alianza Editorial.

Peña, D., Tiao, G. C., and Tsay, R. S. (2001), *A Course in Time Series Analysis*, New York: John Wiley & Sons, Inc.

Romero, R. (1992), *Control Avanzado de Procesos. Modulo I*, Valencia: Universidad Politécnica de Valencia.

Ryan, T. P. (1989), *Statistical Methods for Quality Improvement*, Wiley Series.

Tiao and Box G.E.P. (1981), "Modelling Multiple Time Series with Applications," *Journal of American Statistical Association*.

Tiao and G.C. (1985), "Autoregressive Moving Average Models, Intervention Problems and Outlier Detection in Time Series," in: *Handbook of Statistics 5*, E. J. Hannan, P. R. Krishnaiah, and M. M. Rao (eds.), Amsterdam: Elsevier Science Publishers B.V.

Tsung, F. (1999), "Improving Automatic-Controlled Process Quality using Adaptative Principal Component Monitoring," *Qual.Reliab.Engng.Int*, 15, 135-142.

Uriel, E. (1985), *Análisis de series temporales. Modelos ARIMA*, Madrid: Paraninfo.

Uriel, E. and Peiró, A. (2000), *Introducción al análisis de series temporales*, Madrid: Editorial AC.

Wei, W. W. S. (2002), *Time Series Analysis. Univariate and Multivariate Methods*. Pearson.Addison Wesley.

West, D., Dellana, S., and Jarrett, J. (2002), "Transfer Function Modeling of Processes With Dynamic Inputs," *Journal of Quality Technology*, 34, 315-326.

Wold, S., Sjöström, M., and Eriksson, L. (1999), "PLS in Chemistry," in: *The Encyclopedia of Computational Chemistry*, P. v. R. Scheleyer, N. L. Allinger, T. Clark, J. Gasteiger, P. A. Kollman, and P. R. Schaefer (eds.), Chichester: John Wiley&Sons.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Gráfico de control estadístico Shewhart	22
Figura 2.2 El problema que se presenta cuando se usan dos gráficos de control, uno por cada variable en vez de uno multivariante.....	25
Figura 2.3 Estructura matricial \mathbf{X}_t de las observaciones MSPC para cada instante t	27
Figura 2.4 Matrices del modelo PCA	38
Figura 2.5 Representación gráfica de las matrices de relaciones PLS. Los <i>scores</i> PLS están almacenados en las matrices \mathbf{T} y \mathbf{U} , los <i>loadings</i> de \mathbf{X} en \mathbf{P} , los pesos de \mathbf{X} en \mathbf{W} , los pesos de \mathbf{Y} en \mathbf{C} . La variación residual está contenida en las matrices residuales \mathbf{E} y \mathbf{F}	42
Figura 2.6 Monitorización de datos autocorrelacionados mediante modelos ARIMA. .	60
Figura 2.7 Metodología MPC. La predicción de la salida del proceso es la base del control predictivo.....	72
Figura 2.8 Estructura general del modelo predictor	74
Figura 2.9. Genealogía aproximada de los algoritmos MPC lineales (Fuente: Qin y Badgwell 2003)	85
Figura 2.10 Horizonte de control móvil (Fuente: Morari <i>et al.</i> 2004).....	94
Figura 2.11 Evolución del número de condición de la matriz $(G^T G)$ para distintos horizontes de predicción y de control de un proceso 2×2	116
Figura 2.12 Modelo de función de transferencia dinámica.	131
Figura 2.13 Esquema de un proceso regulado: control <i>feedback</i>	135
Figura 3.1 Diagrama del proceso Philips de obtención del PEAD.....	155
Figura 3.2 Reactor en lazo del proceso Philips de obtención del PEAD	155
Figura 3.3 Esquema de obtención de los datos del proceso	156
Figura 3.4 Ejemplo de los datos de entradas y salidas de una campaña de fabricación: a) T_t , MI_t b) E_t , MI_t c) T_t , $APRE_t$ y d) E_t , $APRE_t$	157
Figura 4.1 Gráfico de las series de temperatura T_t de las diferentes campañas.....	195
Figura 4.2 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de temperatura T_t de las distintas campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$). (t es el periodo de muestreo)..	196
Figura 4.3 Gráficos de las series de temperatura diferenciadas ∇T_t de las diferentes campañas.	198
Figura 4.4 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de temperatura ∇T_t de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).....	199
Figura 4.5 Gráfico de las series de caudal de etileno E_t de las diferentes campañas. .	202
Figura 4.6 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de caudal de etileno E_t de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).	203
Figura 4.7 Gráfico de las series de caudal de etileno diferenciadas ∇E_t de las diferentes campañas.	204

Figura 4.8 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de caudal de etileno ∇E_t de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).	205
Figura 4.9 Gráfico de las series de índice de fluidez MI_t de las diferentes campañas.	207
Figura 4.10 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de caudal de etileno MI_t de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).	208
Figura 4.11 Gráfico de las series de $APRE_t$ de las diferentes campañas.	210
Figura 4.12 Funciones de autocorrelación simple y parcial de las series de $APRE_t$ de las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas rojas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).	212
Figura 4.13 Gráfico de las series de $\nabla APRE_t$ de las diferentes campañas.	213
Figura 4.14 Esquema del proceso en bucle cerrado.	219
Figura 4.15 Funciones de correlación cruzada estimadas entre ∇MI y ∇T para las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas discontinuas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).	223
Figura 4.16 Funciones de correlación cruzada estimadas entre ∇MI y ∇E para las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas discontinuas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).	224
Figura 4.17 Funciones de correlación cruzada estimadas entre $\nabla APRE$ y ∇T para las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas discontinuas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).	225
Figura 4.18 Funciones de correlación cruzada estimadas entre $\nabla APRE_t$ y ∇E_t para las diferentes campañas. Los coeficientes que sobrepasan los límites (líneas discontinuas) son estadísticamente diferentes de cero (valores- $p < 0.05$).	226
Figura 4.19 Gráfico de <i>scores</i> (PLS) y de contribución de $\nabla APRE_t$ en la primera y la tercera componente de la campaña 2 (arriba): gráfico de contribuciones para la diferencia entre las observaciones 23 y 24 (centro); datos tratados (bajo).	250
Figura 4.20 Gráfico de <i>scores</i> (PCA) para $\nabla APRE_t$ en la primera y la segunda componente y las mismas variables <i>input</i> usadas en el modelo PLS para la campaña 2	251
Figura 4.21 Decalado de las variables input x_{it} originales	252
Figura 4.22 Gráfico de coeficientes β_{CS} PLS estimados para el modelo de ∇MI_t . Campaña 5.	254
Figura 4.23 Funciones de correlación cruzada entre ∇MI_t y ∇E_t y, entre ∇MI_t y ∇T_t , respectivamente. Campaña 5.	254
Figura 4.24 Gráfico de coeficientes β_{CS} del modelo para ∇MI_t y para las campañas 0, 2, 4 y 5.	258
Figura 4.25 Gráfico de coeficientes β_{CS} del modelo para $\nabla APRE_t$ y para las campañas 0, 2, 4 y 5.	259
Figura 4.26 Análisis de residuos del modelo estimado de la Campaña 2.	260
Figura 5.1 Gráfico de Daniel: Efectos significativos	281

Figura 5.2 Diagrama de Pareto de los efectos significativos (valor-p<0.05) estandarizados sobre <i>ECM_MI</i> . La línea vertical señala el límite de significación.	281
Figura 5.3 Trayectoria promedio del <i>MI</i> alrededor de su valor nominal (gráfico superior) y <i>ECM_MI</i> en las pruebas del diseño en las que λ_T y λ_E han estado a nivel alto (+).	283
Figura 5.4 Efecto de la interacción $\lambda_T * \lambda_E$ sobre <i>ECM_MI</i>	283
Figura 5.5 Efectos de las interacciones $\alpha_{MI} * \lambda_E$ y $\alpha_{APRE} * \lambda_E$ sobre <i>ECM_MI</i>	284
Figura 5.6 Efecto de la interacción $\alpha_{MI} * \lambda_T$ sobre <i>ECM_MI</i>	285
Figura 5.7 Residuos del modelo ajustado para <i>ECM_MI</i> en función del número de la prueba del diseño.	286
Figura 5.8 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>ECM_MI</i>	286
Figura 5.9 Diagrama de Pareto de los efectos significativos (valor-p < 0.05) estandarizados sobre <i>VAR_MI</i> . La línea vertical señala el límite de significación.	288
Figura 5.10 Gráfico de la interacción λ_T y λ_E	289
Figura 5.11 Gráfico de las interacciones significativas (valor-p<0.05) entre los distintos factores simples. C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas <i>MI</i> y <i>APRE</i> respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.	289
Figura 5.12 Residuos del modelo ajustado para <i>VAR_MI</i> en función del número de la prueba del diseño.	290
Figura 5.13 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>VAR_MI</i>	290
Figura 5.14 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre <i>ECM_APRE</i> . La línea vertical señala el límite de significación (valor-p < 0.05).	292
Figura 5.15 Gráfico de las interacciones significativas (valor-p < 0.05) entre los distintos factores simples. C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas <i>MI</i> y <i>APRE</i> respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.	293
Figura 5.16 Residuos del modelo ajustado para <i>ECM_APRE</i> en función del número de la prueba del diseño.	293
Figura 5.17 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>ECM_APRE</i>	294
Figura 5.18 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre <i>VAR_APRE</i> . La línea vertical señala el límite de significación (valor-p < 0.05).	296
Figura 5.19 Gráfico de las interacciones significativas (valor-p < 0.05) entre los distintos factores simples. C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas <i>MI</i> y <i>APRE</i> respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.	296

Figura 5.20 Residuos del modelo ajustado para <i>VAR_APRE</i> en función del número de la prueba del diseño.	297
Figura 5.21 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>VAR_APRE</i>	297
Figura 5.22 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre <i>MAX_INCT</i> . La línea vertical señala el límite de significación (valor-p < 0.05).	300
Figura 5.23 Gráfico de las interacciones significativas (valor-p < 0.05) entre los distintos factores simples. C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas <i>MI</i> y <i>APRE</i> respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.	300
Figura 5.24 Residuos del modelo ajustado para <i>MAX_INCT</i> en función del número de la prueba del diseño.	301
Figura 5.25 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>MAX_INCT</i>	301
Figura 5.26 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre <i>VAR_INCT</i> . La línea vertical señala el límite de significación (valor-p < 0.05).	303
Figura 5.27 Gráfico de las interacciones significativas (valor-p < 0.05) entre los distintos factores simples. C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas <i>MI</i> y <i>APRE</i> respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.	303
Figura 5.28 Residuos del modelo ajustado para <i>VAR_INCT</i> en función del número de la prueba del diseño.	304
Figura 5.29 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>VAR_INCT</i>	304
Figura 5.30 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre <i>MED_INCT</i> . La línea vertical señala el límite de significación (valor-p < 0.05).	306
Figura 5.31 Gráfico de las interacciones significativas (valor-p < 0.05) entre los distintos factores simples. A: HP, es el Horizonte de Predicción; C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas <i>MI</i> y <i>APRE</i> respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.	306
Figura 5.32 Residuos del modelo ajustado para <i>MED_INCT</i> en función del número de la prueba del diseño.	307
Figura 5.33 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>MED_INCT</i>	307
Figura 5.34 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre <i>MAX_INCE</i> . La línea vertical señala el límite de significación (valor-p < 0.05).	309
Figura 5.35 Gráfico de las interacciones significativas (valor-p < 0.05) entre los distintos factores simples. A: HP, es el Horizonte de Predicción; B: HC es el Horizonte de Control; C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas <i>MI</i> y <i>APRE</i> respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes	

del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.	310
Figura 5.36 Residuos del modelo ajustado para <i>MAX_INCE</i> en función del número de la prueba del diseño.	310
Figura 5.37 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>MAX_INCE</i>	311
Figura 5.38 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre <i>VAR_INCE</i> . La línea vertical señala el límite de significación (valor-p < 0.05).	313
Figura 5.39 Gráfico de las interacciones significativas (valor-p < 0.05) entre los distintos factores simples. A:HP, es el Horizonte de Predicción; B:HC es el Horizonte de Control; C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas <i>MI</i> y <i>APRE</i> respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.	313
Figura 5.40 Residuos del modelo ajustado para <i>VAR_INCE</i> en función del número de la prueba del diseño.	314
Figura 5.41 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>VAR_INCE</i>	314
Figura 5.42 Diagrama de Pareto de los efectos estandarizados sobre <i>MED_INCE</i> . La línea vertical señala el límite de significación (valor-p < 0.05).	316
Figura 5.43 Gráfico de las interacciones significativas (valor-p<0.05) entre los distintos factores simples. A:HP, es el Horizonte de Predicción; B:HC es el Horizonte de Control; C: α_{MI} y D: α_{APRE} son las constantes de ponderación de los errores de las variables controladas <i>MI</i> y <i>APRE</i> respectivamente; E: λ_T y F: λ_E son las constantes del esfuerzo de control de las variables manipuladas temperatura y caudal de etileno respectivamente.	317
Figura 5.44 Residuos del modelo ajustado para <i>MED_INCE</i> en función del número de la prueba del diseño.	317
Figura 5.45 Gráfico probabilístico normal de los residuos del modelo ajustado para <i>MED_INCE</i>	318
Figura 5.46 Diagrama del algoritmo NIPALS esquematizado.....	327
Figura 5.47 Medidas de bondad de ajuste $R_{Ycum}^2(a)$ y de predicción $Q_{cum}^2(a)$ acumulados en las 4 <i>componentes</i> PLS.	333
Figura 5.48 Medidas de bondad de ajuste $R_{VYcum}^2(4)$ y de predicción $Q_{VYcum}^2(4)$ individuales acumuladas para cada variable respuesta en las 4 <i>componentes</i> PLS.	335
Figura 5.49 Diagramas de dispersión de “scores” <i>u</i> vs. <i>t</i> de las dos primeras dimensiones del modelo PLS.	336
Figura 5.50 Diagramas de dispersión de “scores” <i>u</i> vs. <i>t</i> de las componentes 3 y 4 del modelo PLS.	337
Figura 5.51 Diagramas de <i>loadings</i> (variables respuesta en rojo, factores en negro). Primera componente vs. segunda componente del modelo PLS.	339

Figura 5.52 Diagramas de <i>loadings</i> . Cuarta componente vs. tercera componente del modelo PLS.	339
Figura 5.53 Diagramas de <i>loadings</i> primera componente vs. segunda componente del modelo PLS. Interpretación respuestas <i>ECM_MI</i> y <i>VAR_MI</i>	341
Figura 5.54 Diagramas de <i>loadings</i> . Cuarta componente vs. tercera componente del modelo PLS. Interpretación respuestas <i>ECM_MI</i> y <i>VAR_MI</i>	342
Figura 5.55 Diagramas de <i>loadings</i> . segunda componente vs. primera componente del modelo PLS. Interpretación respuestas <i>ECM_A</i> y <i>VAR_A</i>	343
Figura 5.56 Diagramas de <i>loadings</i> . Segunda componente vs. primera componente del modelo PLS. Interpretación respuestas <i>MAX_INCT</i> ; <i>VAR_INCT</i> y <i>MED_INCT</i>	344
Figura 5.57 Diagramas de <i>loadings</i> . De la segunda componente vs. primera componente del modelo PLS. Interpretación respuestas <i>MAX_INCE</i> ; <i>VAR_INCE</i> y <i>MED_INCE</i> ..	345
Figura 5.58 Diagramas de <i>loadings</i> . Cuarta componente vs. Tercera componente del modelo PLS. Interpretación respuestas <i>MAX_INCE</i> ; <i>VAR_INCE</i> y <i>MED_INCE</i>	346
Figura 6.1 Medidas de bondad de ajuste $R_{x_{cum}}^2(a)$ y de predicción $Q_{cum}^2(a)$ acumulados en las 4 <i>componentes</i> NOC-PCA.	355
Figura 6.2 Gráfico de <i>scores PCA</i> , de la segunda CP frente a la primera t_2 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 95%.....	356
Figura 6.3 Gráfico de <i>scores PCA</i> , de la segunda CP frente a la primera t_2 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 99%.....	356
Figura 6.4 Gráfico de <i>loadings PCA</i> , de la segunda componente frente a la primera.	357
Figura 6.5 Gráfico de <i>loadings PCA</i> , de la cuarta componente frente a la tercera.	357
Figura 6.6 Proyección de las observaciones de referencia sobre los gráficos T_A^2 y DModX.....	358
Figura 6.7 Esquema de monitorización propuesto	360
Figura 6.8 Procedimiento de monitorización propuesto.....	360
Figura 6.9 Sistema de control integrado MESPC propuesto.....	362
Figura 6.10 Gráfico de las series temporales superpuestas de las 10 variables registradas. No se revelan con claridad los fallos que se están produciendo.	364
Figura 6.11 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de sendos errores de medida del <i>MI</i> en $t=30$ y en $t=130$: gráficos T_A^2 y <i>DModX</i>	364
Figura 6.12 Gráfico de <i>scores PCA</i> , de la segunda CP frente a la primera, t_2 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: error <i>MI</i>	366
Figura 6.13 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de fuera de control en el gráficos T_A^2 y la componente 2.	366
Figura 6.14 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de fuera de control en el gráfico T_A^2 y la componente 4.	367
Figura 6.15 Gráfico de control Shewhart de la variable <i>incTI</i>	368
Figura 6.16 Gráfico de control Shewhart de la variable <i>NincT</i>	368

Figura 6.17 Gráfico de control Shewhart de la variable E_{MI}	369
Figura 6.18 Gráfico de control Shewhart de la variable E_{LMI}	369
Figura 6.19 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de un error de obtención del $APRE$: gráficos T_A^2 y $DModX$	370
Figura 6.20 Gráfico de $scores PCA$, de la segunda CP frente a la primera, t_2 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: error $APRE$	371
Figura 6.21 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de fuera de control en el gráfico T_A^2 y la componente 1.....	372
Figura 6.22 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de fuera de control en el gráfico T_A^2 y la componente 3.	372
Figura 6.23 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de un fallo en el lazo de control de $TEMPERATURA$: gráficos T_A^2 y $DModX$	374
Figura 6.24 Gráfico de $scores PCA$, de la tercera CP frente a la tercera, t_4 / t_3 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: error sensor $TEMPERATURA$	374
Figura 6.25 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 31$, y la componente 4.....	376
Figura 6.26 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$ y la componente 2.....	376
Figura 6.27 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 31$ y la componente 2.....	377
Figura 6.28 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 30$, en la que se ha producido la señal de salida de control en el gráfico T^2 y la componente 3.	377
Figura 6.29 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de un cambio permanente en el MI : gráficos $MEWMA-T_A^2$ y $DModX$	378
Figura 6.30a . Gráfico de $scores PCA$, de la segunda CP frente a la primera, t_2 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: deriva en el MI	379
Figura 6.31 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 32$, y la componente 2.....	380
Figura 6.32 Funcionamiento de los procedimientos de monitorización en presencia de discrepancias entre el modelo real y estimado del proceso: gráficos T_A^2 y $DModX$. ..	381
Figura 6.33 Gráfico de $scores PCA$, de la tercera CP frente a la primera, t_3 / t_1 . Región elíptica de confianza calculada al 99%. Simulación fallo: cambio parcial parámetros modelo $APRE$	382

Figura 6.34 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 35$, y la componente 1.....	383
Figura 6.35 Contribución de las variables registradas al estadístico T_A^2 , en la observación $t = 35$, y la componente 3.....	383

LISTA DE TABLAS

Tabla 2.1 Principales índices de funcionamiento	77
Tabla 2.2 Breve historia del MPC (L: Lineal; SS: Espacio de estados; FIR: Respuesta impulsional; FSR: Respuesta a escalón; FT: Función de transferencia; ISE: Error cuadrático integral; I: entrada; O: salida; M: Cambio en la entrada; N: intervalo horizonte de predicción)	81
Tabla 2.3 Aplicaciones más importantes que implementan el MPC lineal y sus fabricantes.....	89
Tabla 2.4 Aplicaciones más importantes que implementan el MPC no lineal y sus fabricantes.....	90
Tabla 2.5 Analogías entre el algoritmo de control DMC y los métodos estadísticos. .	120
Tabla 4.1 Parámetros estadísticos básicos de las series de temperatura T_t de las diferentes campañas.....	194
Tabla 4.2 Varianzas residuales estimadas de los modelos ARIMA (0,1,0) para las series de T_t	200
Tabla 4.3 Parámetros estadísticos básicos de las series de temperatura E_t de las diferentes campañas.....	201
Tabla 4.4 Varianzas residuales estimadas de los modelos ARIMA (0,1,0) para las series de E_t	206
Tabla 4.5 Parámetros estadísticos básicos de las series de índice de fluidez MI_t de las diferentes campañas.....	206
Tabla 4.6 Parámetros y varianzas residuales estimados de los modelos ARMA (1,0) de las series MI_t para las diferentes campañas	209
Tabla 4.7 Parámetros estadísticos básicos de las series de índice de fluidez $APRE_t$ de las diferentes campañas.....	210
Tabla 4.8 Varianzas residuales estimadas de los modelos ARIMAS para las series de $APRE_t$	213
Tabla 4.9 Parámetros estimados (estimación ecuación a ecuación) del modelo ∇MI_t (ecuación 4.79) para las 5 campañas estudiadas (desviaciones típicas entre paréntesis). R^2 : bondad del ajuste (%). NS: no significativo estadísticamente, valor- $p > 0.05$	230
Tabla 4.10 Parámetros estimados (estimación ecuación a ecuación) del modelo $\nabla APRE_t$ (ecuación 4.80) para las 5 campañas estudiadas (desviaciones típicas entre paréntesis). R^2 : bondad del ajuste (%). NS: no significativo estadísticamente, valor- $p > 0.05$	231
Tabla 4.11 Parámetros estimados (estimación conjunta) del modelo ∇MI_t (ecuación 4.81) para las 5 campañas estudiadas (desviaciones típicas entre paréntesis). R^2 : bondad del ajuste (%). NS: no significativo estadísticamente, valor- $p > 0.05$	232
Tabla 4.12 Parámetros estimados (estimación conjunta) del modelo $\nabla APRE_t$ (ecuación 4.81) para las 5 campañas estudiadas (desviaciones típicas entre paréntesis). R^2 : bondad del ajuste (%). NS: no significativo estadísticamente, valor- $p > 0.05$	233
Tabla 4.13 Matrices de varianzas-covarianzas y de correlaciones residuales estimadas para las cinco campañas.	234

Tabla 4.14 Análisis de residuos del modelo <i>función de transferencia múltiple</i> estimado de la Campaña 0.	238
Tabla 4.15 Análisis de residuos del modelo <i>función de transferencia múltiple</i> estimado de la Campaña 2.	239
Tabla 4.16 Análisis de residuos del modelo <i>función de transferencia múltiple</i> estimado de la Campaña 3.	240
Tabla 4.17 Análisis de residuos del modelo <i>función de transferencia múltiple</i> estimado de la Campaña 4.	241
Tabla 4.18 Análisis de residuos del modelo <i>función de transferencia múltiple</i> estimado de la Campaña 5.	242
Tabla 4.19 Parámetros estimados del modelo ∇MI_t (ecuación (4.92)) para las 4 campañas estudiadas. R^2_x : bondad de ajuste para las entradas. R^2_y : bondad de ajuste para la salida. Q^2 : bondad de predicción de la salida. NS: estadísticamente no significativo, p -value>0.05.	256
Tabla 4.20 Parámetros estimados del modelo $\nabla APRE_t$ (ecuación (4.94)) para las 4 campañas estudiadas. R^2_x : bondad de ajuste para las entradas. R^2_y : bondad de ajuste para la salida. Q^2 : bondad de predicción de la salida. NS: estadísticamente no significativo, p -value>0.05.	257
Tabla 5.1 Variables Respuesta del experimento de optimización del sintonizado del controlador DMC.	267
Tabla 5.2 Factores controlados del experimento de optimización del sintonizado del controlador DMC.	269
Tabla 5.3 Niveles ensayados de los factores controlados del experimento de optimización del sintonizado del controlador DMC.	269
Tabla 5.4 Esquema de la fracción factorial 2^{6-1}_{VI}	271
Tabla 5.5 Efectos estimados (ANOVA) significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre el <i>ECM_MI</i> acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.	280
Tabla 5.6 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para <i>ECM_MI</i>	286
Tabla 5.7 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la <i>Varianza del MI</i> acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.	288
Tabla 5.8 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para <i>VAR_MI</i>	290
Tabla 5.9 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre el Error Cuadrático Medio del <i>APRE</i> acompañados de sus desviaciones típicas muestrales. También se ha considerado la interacción CE (valor-p= 0.054) y el efecto simple de α_{MI} que pese a no ser significativo interviene en dicha interacción.	292
Tabla 5.10 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para el modelo <i>ECM_APRE</i>	294
Tabla 5.11 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre el <i>Varianza del APRE</i> acompañados de sus desviaciones típicas muestrales. El efecto simple de α_{MI} ha sido considerado pese a no ser significativo por el hecho de intervenir en la interacción CE, que sí es significativa.	295

Tabla 5.12 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para <i>VAR_APRE</i>	297
Tabla 5.13 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre el Máximo Incremento de la <i>Temperatura</i> , acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.	298
Tabla 5.14 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para <i>MAX_INCT</i>	301
Tabla 5.15 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la Varianza del Incremento de la <i>Temperatura</i> , acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.	302
Tabla 5.16 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para <i>VAR_INCT</i>	304
Tabla 5.17 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la Media del Incremento de la <i>Temperatura</i> , acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.	305
Tabla 5.18 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para <i>MED_INCT</i>	307
Tabla 5.19 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la Máximo Incremento del Caudal de <i>Etileno</i> , acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.	308
Tabla 5.20 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para <i>MAX_INCE</i>	311
Tabla 5.21 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la Varianza del Incremento del Caudal de <i>Etileno</i> , acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.	312
Tabla 5.22 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para <i>VAR_INCE</i>	314
Tabla 5.23 Efectos estimados significativos (valor-p < 0.05) de los factores sobre la Media del Incremento del Caudal de <i>Etileno</i> , acompañados de sus desviaciones típicas muestrales.	315
Tabla 5.24 Coeficientes R^2 y Q^2 , y Desviación Típica Residual $\hat{\sigma}$ estimada del modelo para <i>MED_INCE</i>	318
Tabla 5.25 Condiciones operativas óptimas de los parámetros de diseño del controlador DMC para minimizar <i>ECM_MI VAR_MI ECM_APRE VAR_APRE</i> . Los signos: - (nivel bajo) y + (nivel alto) indican los niveles óptimos de los factores controlados (tabla 5.3).	321
Tabla 5.26 Condiciones operativas óptimas de los parámetros de diseño del controlador DMC para las variables respuesta relacionadas con la dispersión de las variables manipuladas <i>T</i> y <i>E</i> . Los signos: - (nivel bajo) y + (nivel alto) indican los niveles óptimos de los factores controlados (tabla 5.3).	321
Tabla 5.27 Medidas de bondad de ajuste R^2 , R^2_{adj} y de bondad de predicción Q^2 para las repuestas relacionadas con las variables controladas.	322

Tabla 5.28 Medidas de bondad de ajuste R^2 , R_{adj}^2 y de bondad de predicción Q^2 para las repuestas relacionadas con las variables manipuladas.	323
Tabla 5.29 Medidas de bondad de ajuste $R_y^2(a)$ y de predicción $Q^2(a)$ de cada componente “a” significativa y acumuladas $R_{ycum}^2(a)$ y $Q_{cum}^2(a)$ del modelo <i>PLS</i>	333
Tabla 5.30 Medidas de bondad de ajuste $R_{VYcum}^2(4)$; bondad de ajuste ajustada $R_{VYcum;adj}^2(4)$ y bondad de predicción $Q_{VYcum}^2(4)$ acumuladas en 4 componentes, para las repuestas relacionadas con las variables controladas del sistema de control.	334
Tabla 5.31 Medidas de bondad de ajuste $R_{VYcum}^2(4)$; bondad de ajuste ajustada $R_{VYcum;adj}^2(4)$ y bondad de predicción $Q_{VYcum}^2(4)$ acumuladas en 4 componentes, para las repuestas relacionadas con las variables manipuladas del sistema de control.	334
Tabla 6.1 Variables derivadas del sistema de control seleccionadas para estimar el modelo NOC-PCA de referencia y sus abreviaturas. HP y HC, son los horizontes de predicción y de control, del controlador.	354
Tabla 6.2 Medidas de bondad de ajuste $R_x^2(a)$ y de predicción $Q^2(a)$ de cada componente “a” significativa y acumuladas $R_{xcum}^2(a)$ y $Q_{cum}^2(a)$ del modelo NOC-PCA.	355