



HAL
open science

Mesures aberrantes : détection, localisation, suppression, acceptation et robustesse

José Ragot

► **To cite this version:**

José Ragot. Mesures aberrantes : détection, localisation, suppression, acceptation et robustesse. 8ème Colloque Interdisciplinaire en Instrumentation, C2I 2019, Jan 2019, Bordeaux, France. hal-02013084

HAL Id: hal-02013084

<https://hal.science/hal-02013084>

Submitted on 10 Feb 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Mesures aberrantes : détection, localisation, suppression, acceptation et robustesse

José RAGOT¹

¹ Centre de Recherche en Automatique de Nancy. CRAN - CNRS UMR 7039. Université de Lorraine. 2, avenue de la Forêt de Haye, TSA 60604, 54 518 Vandoeuvre-lès-Nancy Cedex

Résumé

La détection de valeurs aberrantes et de mesures aberrantes en particulier, mais plus encore leur localisation, reste un préalable indispensable à leur utilisation dans tous les systèmes de surveillance. Cette détection/localisation ne peut se faire que si l'on dispose de comparaison des mesures en question avec des références. Dans certains cas, la priorité n'est pas directement la détection/localisation mais la réduction de l'influence des valeurs aberrantes dans les techniques de surveillance. A titre d'exemple on peut évaluer de façon robuste la corrélation entre deux séries temporelles corrompues par quelques valeurs aberrantes sans chercher à les éliminer dans une phase préalable. Dans cette communication, l'accent sera mis sur cette notion de robustesse au travers de quelques exemples.

1. Introduction

En raison de l'usage intensif des données, en particulier issues de capteurs, de l'accroissement de leur volume et de leur utilisation dans les outils de surveillance et de contrôle, le problème des valeurs aberrantes a pris une importance non négligeable durant les dernières décennies.

Remarque 1 Il conviendrait au préalable de définir ce qu'est une donnée aberrante. De façon très commune c'est une donnée qui est « distante » des autres observations effectuées sur le même phénomène. Force est de constater que cette définition reste incomplète et très subjective, la notion de distance étant à définir. De plus, la difficulté est accrue en présence de plusieurs données aberrantes dans un même échantillon. Dans la suite, on considère uniquement le cas de donnée aberrante isolée se distinguant du reste des données par son amplitude anormalement élevée.

La présence de valeurs anormales peut alors conduire à des estimations biaisées des paramètres caractérisant un système et à une interprétation des résultats qui peut être erronée conduisant ainsi à des prises de décision à risque. En dépit de la diversité des méthodes disponibles s'appuyant sur des outils statistiques bien établis [Nikulin : 2002, de Valle : 2018], force est de constater que de nombreux logiciels ne présentent que des techniques très partielles de traitement des incohérences de mesure. Cet article ne se veut pas être un recensement de ces outils, mais simplement sensibiliser le lecteur sur le problème des données aberrantes au travers de quelques exemples et situations simples. Habituellement, lorsqu'on procède à la critique et à la validation des mesures collectées sur un processus physique, on teste l'adéquation des mesures vis-à-vis du modèle du processus (phase de détection des incohérences) puis on ajuste ces mesures au moyen de termes correctifs de façon à vérifier le modèle (phase d'estimation de l'état du processus), ce qui revient à leur substitution pas des valeurs dites de remplacement réputées saines. Dans tous les cas, la détection de mesures aberrantes ne peut se faire que si l'on dispose de redondances d'information, ces dernières pouvant être d'origine temporelle, matérielle où logicielle. La redondance temporelle apparut dès lors que la variable mesurée suit une loi d'évolution temporelle. C'est le cas par exemple d'une variable en régime permanent dont le modèle temporel est connu ou peut être identifié ; ce modèle peut alors être mis à profit pour détecter les mesures aberrantes c'est-à-dire celles avec lesquelles il n'est pas compatibles. La redondance matérielle provient de l'utilisation simultanée de plusieurs capteurs pour mesurer une même grandeur. La détection d'une mesure aberrante donc provenant d'un capteur en défaut repose alors sur la comparaison des mesures entre elles et d'un vote majoritaire. Enfin la redondance logicielle exploite les propriétés du modèle du système sur lequel les données sont collectées, ce modèle reliant généralement un ensemble de variables décrivant son fonctionnement. Sous réserve de conditions structurelles à satisfaire, l'adéquation de mesures vis-à-vis du modèle peut être testée de façon à témoigner ou non de la présence éventuelle d'erreurs de mesure.

En ce qui concerne les aspects plus quantitatifs, la détection des erreurs de mesure est généralement complétée par une phase d'estimation de leurs amplitudes, ce qui permet alors de proposer des valeurs de substitution quelques fois accompagnées de leurs intervalles de confiance. La section 3 présentera cette possibilité au travers d'une procédure dite de réconciliation des données. Cette présentation n'a aucune portée générale, l'objectif étant seulement de donner quelques points de repère particuliers aux utilisateurs de moyens de mesure et d'insister sur l'aspect robustesse de quelques techniques de traitement de mesure [Korpela : 2016, Fellaou : 2016, Antolín : 2017, Hampel : 1971, Hubert : 2005].

2. Démarches générales

2.1. Différents types de valeurs aberrantes issues capteurs

La figure 1 illustre visualise deux types d'erreur dans le cas d'une variable à deux dimensions. Sont mis en évidence un biais affectant les deux directions de mesure et des erreurs à caractère aléatoire. Notons également la possibilité de biais non constant affectant les capteurs alors considérés comme des dérives. Les capteurs ayant délivré les mesures peuvent être caractérisé par leur justesse et leur fidélité comme indiqué dans le tableau 1. Selon l'usage qui en est fait, ces mesures pourront être traitées de façon à réduire l'influence des deux sources d'erreur. Bien évidemment la situation est plus complexe lorsqu'on s'intéresse à un réseau de capteurs équipant un processus physique, les défauts qui les affectent pouvant présenter des liens entre eux.

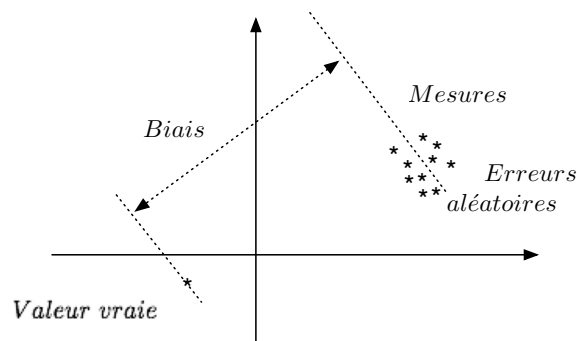


Fig 1. Différents type d'erreurs

Capteur	Erreurs systématiques	Erreurs aléatoires
juste mais non fidèle	réduites	importantes
fidèle mais non juste	importantes	faibles
juste et fidèle (précis)	faibles	faibles
ni juste, ni fidèle	importantes	importantes

Tableau 1 : Qualité d'un capteur

2.2. Démarche active : détection des valeurs aberrantes dans une série temporelle

Ce vocable désigne un ensemble de techniques capables de détecter et localiser les valeurs aberrantes dans une série d'observation. Une fois localisées, celles-ci peuvent être soit supprimées ce qui peut par la suite occasionner quelques difficultés de traitement, soit remplacées par des valeurs dites de substitution obtenues par exemple par interpolation grâce à des mesures saines voisines de celles qui ont été supprimées. De très nombreux tests statistiques ont été développés [Planchon : 2005, Billor : 2008] pour la détection de valeurs aberrantes (Dixon, Grubbs, Cochran, Tukey, Chauvenet, Tietjen-Moore, Student, Thompson ...) ainsi que des techniques de substitution (winsorising, trimming).

Pour le test de Dixon par exemple [Dixon : 1950], on considère les valeurs $x_i, i = 1, \dots, n$ d'une série rangées dans l'ordre croissant $x_1 < x_2 < \dots < x_n$. Le test de Dixon va détecter la (ou les) valeur(s) aberrante(s),

aux extrémités x_1 et x_n de la distribution à partir du rapport :

$$R = \frac{x_2 - x_1}{x_n - x_1} \quad (1)$$

Pour tester les hypothèses $\{H_0 : \text{la valeur douteuse n'est pas une valeur aberrante}\}$ et $\{H_1 : \text{la valeur douteuse est une valeur aberrante}\}$, on se fixe un seuil de risque α . La valeur critique $r_{1-\alpha}$, est définie par la probabilité $P(R \leq r_{1-\alpha}) = 1 - \alpha$ et elle est donnée par la table de Dixon. Si $R > r_{1-\alpha}$, on rejette H_0 et donc la valeur suspecte est aberrante. Si $R \leq r_{1-\alpha}$ on n'est pas en mesure de rejeter H_0 .

A titre d'exemple considérons la série :

$$4.4, 6.2, 6.25, 6.5, 6.8, 6.9, 7.0$$

pour laquelle $R = 0.69$. La valeur critique pour un niveau de confiance de 95% avec 7 observations est de 0.526. Comme R est supérieure à ce niveau de confiance, on peut suspecter la valeur 4.4 comme anormale avec une probabilité d'erreur de 0.05%.

Remarque 2 La formulation 1 pour la suspicion de la valeur la plus faible comme anormale s'applique bien évidemment à la valeur la plus grande. Pour cela il suffit de considérer le rapport

$$R = \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n - x_1}$$

Les techniques évoquées ci-dessus se généralisent au cas multivariable ou la détection porte sur plusieurs variables. A titre d'exemple considérons le système caractérisé par quatre variable et décrit par (2)

$$\begin{aligned} x_1^2 - x_2 + 2 \log x_3 &= 0 \\ x_2 + x_3 - x_4 &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Les mesures disponibles sont rassemblées dans la table 2 et l'on souhaite établir un diagnostic de cohérence de ces données. S'agissant d'une simulation, un défaut affecte x_2 pour l'observation 9 et un autre l'affecte x_3 pour l'observation 6. Pour cela on a calculé des résidus de modèle à partir des mesures c'est-à-dire $r_1 = x_1^2 - x_2 + 2 \log x_3$ et $r_2 = x_2 + x_3 - x_4$. Les équations (2) peuvent être combinées de façon additive, ce qui fait disparaître la variable x_2 :

$$x_1^2 + 2 \log x_3 + x_3 - x_4 = 0 \quad (3)$$

et permet d'évaluer le résidu $r_3 = x_1^2 + 2 \log x_3 + x_3 - x_4$ à partir des mesures sans utiliser celle de x_2 . Finalement, la validité des mesures est mise en évidence par les valeurs absolues des trois résidus dont la valeurs sont indiquées dans la table 3 et illustrée graphiquement à la figure (2). Les trois résidus den modèles sont sensiblement nuls sauf pour les deux observations 6 et 9. L'observation 6 déclenche de façon significative les trois résidus, alors que l'observation 9 ne déclenche que les résidus r_1 et r_2 . Ceci est expliquée par la table 4 dite de signatures des défauts potentiels δx_i dont le rôle est fondamental pour caractériser la détection et l'isolabilité des défauts de mesure. Les croix témoignent de la sensibilité des résidus aux défauts, l'absence de sensibilité étant marquée par un point. Les sensibilités des défauts δx_i sont toutes différentes ce qui montre le caractère isolable des défauts de mesure, ce qui ne serait pas le cas si seuls les deux premiers résidus r_1 et r_2 avaient été utilisés car dans ce cas δx_2 et δx_3 auraient eu la même signature.

x_1	0.94	1.87	1.66	2.13	1.82	1.47	1.60	1.85	1.82	1.50	1.50	1.55	1.20	0.88	1.35
x_2	0.61	1.47	2.00	2.16	2.07	1.79	1.47	1.17	1.66	0.67	0.50	0.36	0.26	0.18	0.12
x_3	0.87	0.35	0.69	0.29	0.53	1.33	0.60	0.33	0.30	0.45	0.42	0.36	0.56	0.74	0.43
x_4	1.49	1.82	2.69	2.45	2.59	2.62	2.07	1.51	1.20	1.13	0.92	0.72	0.81	0.92	0.55

Table 2 : mesures disponibles au cours du temps

r_1	0.00	0.02	0.01	0.01	0.01	1.09	0.01	0.00	0.71	0.02	0.08	0.02	0.02	0.01	0.00
r_2	0.00	0.01	0.02	0.04	0.02	0.50	0.03	0.01	0.75	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01
r_3	0.01	0.03	0.03	0.05	0.03	1.58	0.03	0.01	0.05	0.01	0.07	0.02	0.03	0.02	0.00

Table 3 : résidus indicateurs de défauts

	δx_1	δx_2	δx_3	δx_4
r_1	×	×	×	.
r_2	.	×	×	×
r_3	×	.	×	×

Table 4 : signature des défauts de mesure

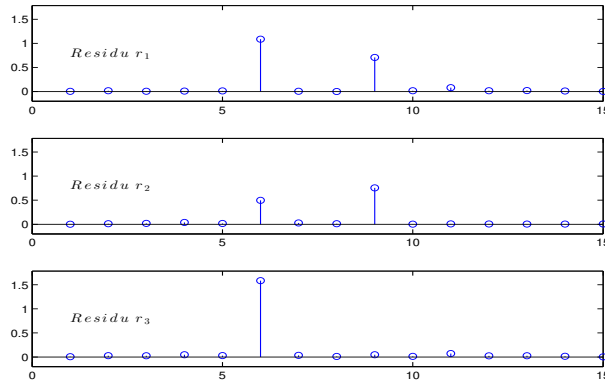


Fig. 2. Termes correctifs

2.3. Démarche active : détection de valeurs aberrantes dans un système multicapteurs

Dans ce qui suit, on résume la technique de l'espace de parité [Potter : 1977] qui repose sur la construction du vecteur de parité dont la structure s'établit à partir des équations du système dont on veut surveiller la consistance des mesures. Considérons, à un instant particulier, le système de mesure (ici linéaire) :

$$x_m = Cx + \varepsilon + Fd, \quad x \in \mathcal{R}^n, x_m \in \mathcal{R}^m, d \in \mathcal{R}^p, \varepsilon \in \mathcal{R}^n, m > n \quad (4)$$

où $x_m(k)$ est le vecteur de mesure, $x(k)$ le vecteur des variables à mesurer, $d(k)$ le vecteur des défauts et $\varepsilon(k)$ le vecteur des bruits de mesure. C est la matrice caractérisant le système de mesure et F est la matrice des directions des défaillances. Pour détecter la présence de défaillances, on cherche à établir des relations de redondance analytique entre les mesures qui sont indépendantes des grandeurs inconnues x mais qui restent sensibles aux défauts d . Pour cela, on définit le vecteur parité :

$$p = Wx_m \quad (5)$$

où W est une matrice de projection orthogonale à C , ce qui entraîne à partir de (4) par simple multiplication par W :

$$p = We + WFd \quad (6)$$

L'expression (5) constitue la forme dite de "calcul" du vecteur parité à partir des mesures $x_m(k)$ alors que l'expression (6) explique l'influence des défauts $d(k)$ sur le vecteur parité par l'intermédiaire de la matrice WF . En l'absence d'erreur de mesure $e(k)$ et de défaillance $d(k)$ le vecteur parité est nul. Dans cette situation particulière, l'équation (7) traduit l'ensemble des redondances qui lient les mesures $x_m(k)$:

$$Wy = 0 \quad (7)$$

Considérons, par exemple, le système de mesures :

$$x_m = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 2 \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \varepsilon + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} d \quad (8)$$

On obtient

$$W = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 2 & -1 & 0 \\ -2 & 0 & 4 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

ce qui permet d'expliciter le vecteur parité sous les deux formes suivantes :

$$p = \begin{bmatrix} -x_{m,1} + 2x_{m,3} - x_{m,4} \\ -2x_{m,1} + 4x_{m,3} - x_{m,5} \end{bmatrix} \quad (9a)$$

$$p = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e + \begin{bmatrix} -2 & -2 \\ -2 & 0 \end{bmatrix} d \quad (9b)$$

La forme (9a) permet le calcul du vecteur parité à partir des mesures disponibles ; comme les erreurs e sont en général à valeur moyenne nulle ou de faibles amplitudes, la forme (9b) est utilisable pour détecter et estimer les défauts éventuels d . De façon plus précise, si l'influence de $e(k)$ est négligée on peut facilement estimer les défauts d à partir de p lui même évalué à partir des mesures :

$$d = \begin{bmatrix} x_{m,1} - 2x_{m,3} + x_{m,5}/2 \\ 2x_{m,3} - x_{m,1} + x_{m,4} - x_{m,5} \end{bmatrix} \quad (10)$$

Cette procédure de l'espace de parité s'étend aux relations non linéaires et dynamiques décrivant des systèmes de mesure.

2.4. Démarche active : remplacement des valeurs aberrantes

On cherche à éliminer et à remplacer les valeurs aberrantes dans un signal temporel avec une déformation "minimale" du signal utile. Une idée de base est la médiane d'un échantillon qui est beaucoup moins sensible aux valeurs extrêmes que la moyenne. On peut alors écarter les observations les plus éloignées de la médiane et cet ébarbage est connu sous le nom de trimming [Dogru : 2017] dans la littérature anglo-saxonne et de winsorizing dans le cas où l'on reconstitue, à partir des valeurs restantes, les valeurs écartées.

Une moyenne winsorisée ou "rognée" d'ordre $\{r, s\}$ désigne le remplacement des r observations les plus petites et des s plus grandes, où r et s sont des entiers. Considérons les valeurs x_{i+j} , $j = -m, \dots, m$ d'un signal à filtrer où l'indice courant i correspond au centre d'une fenêtre mobile de taille $n = 2m + 1$. La valeur filtrée est définie par :

$$\hat{x}_i = \frac{1}{n} \left(r x_{i-m+r} + \sum_{j=-m+r}^{m-s} x_{i+j} + s x_{i+m-s} \right) \quad (11)$$

La réjection des points extrêmes nécessite de fixer les paramètres r et s et ceci peut être fait de façon adaptative par exemple en rejetant les points qui s'écartent de la moyenne de plus de k fois l'écart-type calculé sur la fenêtre considérée.

Remarque 3 Dans le cas où le nombre de points rejetés n'est pas entier, on peut définir une moyenne winsorisée à $2a\%$ qui implique le remplacement d'un pourcentage $2a$ donné de valeurs des deux extrémités des données. Dans le cas d'un filtre symétrique $r = s$, on a :

$$\hat{x}_i = \frac{1}{(1-2a)n} \left((1-f)x_{i-m+r} + \sum_{j=-m+r+1}^{m-r-1} x_{i+j} + (1-f)x_{i+m-r} \right), \quad f = an - r \quad (12)$$

A titre d'exemple, avec $m = 4$, $a = 0.3$, $r = 2$, on obtient le filtre:

$$\hat{x}_i = \frac{1}{3.6} (0.3x_{i-2} + x_{i-1} + x_i + x_{i+1} + 0.3x_{i+2}), \quad i > 3 \quad (13)$$

La figure (3) est une illustration du remplacement des valeurs aberrantes selon les techniques de trimming et de filtrage médian. Bien évidemment la largeur de fenêtre du filtre est le paramètre clef de ces techniques.

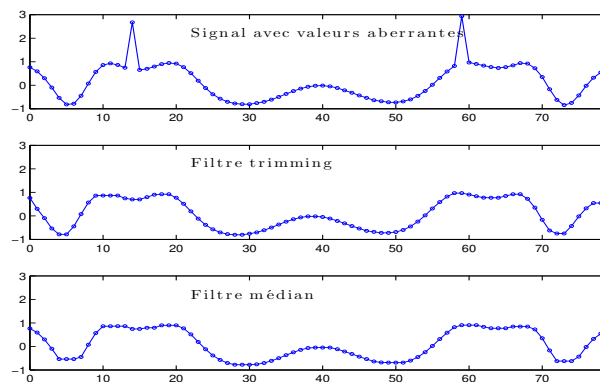


Fig. 3. Filtrage des valeurs aberrantes

2.5. Démarche passive : acceptation des valeurs aberrantes et robustesse

A l'encontre de la démarche précédente, on ne cherche pas ici à supprimer les valeurs aberrantes mais à réduire leurs effets indésirables lors de leur utilisation. Ainsi, lorsqu'on utilise des données dont certaines sont aberrantes pour identifier les paramètres d'un système, on peut essayer de construire un algorithme d'estimation qui minimise directement l'influence des données aberrantes sur ces paramètres. A titre d'exemple bien connu, rappelons le cas de la moyenne robuste en utilisant le filtre médian qui permet d'éliminer l'influence des valeurs aberrantes sans chercher à en expliciter leur présence. Deux outils seront rappelés pour atteindre un certain niveau de robustesse dans les traitements : les distributions contaminées et les M-estimateurs.

- Distributions contaminées [Du : 2018, Deleforge : 2015]

Un modèle dit contaminé suppose qu'en moyenne, une grande partie μ des données est générée à partir d'un modèle classique à erreur normale. Les autres données, correspondant à la fraction $(1 - \mu)$ de l'ensemble des N données, peuvent être affectées par un bruit anormal généré par une distribution de caractéristiques différentes. A titre d'exemple, la distribution prenant en compte les deux types d'erreurs peut être :

$$p(\epsilon) = \mu \mathcal{N}(0, \sigma_1^2) + (1 - \mu) \mathcal{N}(0, \sigma_2^2) \quad (14)$$

Ce type de modèle de distribution, après un réglage adéquat de μ, σ_1, σ_2 se révèle performant en identification en présence de mesures aberrantes [Du : 2018]. Pour illustrer son application, considérons le cas simple de l'estimation de la moyenne d'un échantillon de taille N en présence de valeurs aberrantes, le but étant bien sûr que cette estimation soit peu sensible aux valeurs aberrantes. La fonction de vraisemblance de cet échantillon s'explique :

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \prod_{i=1}^N (\mu p_{1,i} + (1 - \mu) p_{2,i}) \\ p_{1,i} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} \exp\left(-\frac{(x_i - m)^2}{2\sigma_1^2}\right) \\ p_{2,i} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \exp\left(-\frac{(x_i - m)^2}{2\sigma_2^2}\right) \end{aligned} \quad (15)$$

où m est la moyenne à estimer et σ_1, σ_2 les écart-types de la distribution contaminée. Le maximum de la fonction de vraisemblance par rapport à m est obtenu pour :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N w_i(m) (x_i - m) &= 0 \\ w_i(m) &= \mu \frac{p_{1,i}}{\sigma_1^2} + (1 - \mu) \frac{p_{2,i}}{\sigma_2^2} \end{aligned} \quad (16)$$

Compte tenu des expressions de $p_{1,i}$ et $p_{2,i}$ (15) qui dépendent de m , l'équation non linéaire (16) est résolue de manière itérative par rapport à m .

Le tableau 5 montre un résultat d'estimation de la moyenne d'un échantillon de 60 valeurs et par extension de son écart-type. Les deux premières lignes sont relatives à l'évaluation standard sans et avec valeurs aberrantes. L'évaluation robuste indiquée à la troisième ligne montre des estimés proches de ceux obtenus en l'absence de valeurs aberrantes témoignant ainsi du caractère robuste de la méthode. La figure (4) visualise les 60 valeurs de l'échantillon avec ses données aberrantes et les poids $w_i(m)$ utilisés pour le calcul de la moyenne qui permettent également de localiser les données aberrantes.

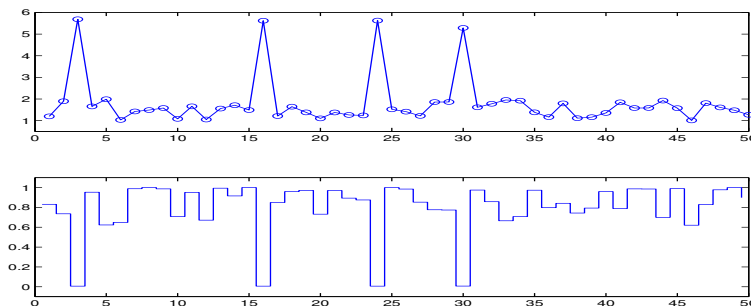


Fig. 4. Données avec valeurs aberrantes

	Moyenne	Ecart-type
sans val.aberr. Evaluation standard	1.501	0.277
avec val.aberr. Evaluation standard	1.821	1.145
avec val. aberr. Evaluation robuste	1.501	0.282

Table 5. Estimation robuste d'une moyenne et d'un écart type

- M-estimateurs [Brown : 2005, Huber : 1954]

Les M-estimateurs ont été introduits dans [Huber : 1954] sous la forme d'une généralisation de l'estimation par maximum de vraisemblance à la minimisation d'une fonction ρ sur l'ensemble des données disponibles $z_i, i = 1, \dots, N$. Ainsi, le (ou les) M-estimateur associé aux données et à la fonction ρ est estimé par :

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmin}_{\theta} \left(\sum_{i=1}^N \rho(z_i, \theta) \right) \quad (17)$$

Un exemple bien connu est la fonction de Cauchy ou de Lorenz :

$$\rho(x_i, y_i, a, b) = \frac{c^2}{2} \log \left(1 + \left(\frac{\varepsilon_k}{c} \right)^2 \right) \quad (18)$$

où $\varepsilon_k = y_k - ax_k - b$ est une image des erreurs de modèle lors de la représentation de données par une droite. La sensibilité de ρ vis-à-vis des erreurs ε s'explique :

$$\frac{\partial \rho}{\partial \varepsilon_k} = \frac{\varepsilon_k}{1 + \left(\frac{\varepsilon_k}{c} \right)^2} \quad (19)$$

et permet de conclure qu'une grande erreur $\varepsilon \gg c$ produit une insensibilité faible de $\hat{\theta}$ et qu'un erreur faible $\varepsilon \ll c$ donne une sensibilité de l'ordre de ε . Ainsi, le choix du seuil c , à la charge de l'utilisateur, conditionne la robustesse de l'estimateur vis-à-vis des erreurs aberrantes. A partir de (17) et (18) le lecteur pourra de lui-même établir les équations d'optimalité des paramètres a et b du modèle de régression :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N w_k(a, b)(y_k - ax_k - b)x_k &= 0 \\ \sum_{k=1}^N w_k(a, b)(y_k - ax_k - b) &= 0 \end{aligned} \quad (20)$$

avec l'expression suivante des poids :

$$w_k(a, b) = \frac{1}{1 + \left(\frac{y_k - ax_k - b}{c} \right)^2} \quad (21)$$

On peut résoudre le système non linéaire (19, 20) par un simple mécanisme d'itérations à partir d'un choix initial des poids w_k par exemple à la valeur unité. Ce système est à rapprocher de celui obtenu par une méthode de moindres carrés ordinaires, la seule différence étant l'utilisation de poids adaptés [Holland : 1977]. Sur la figure (5), le graphe de gauche montre la disposition de 20 couples de points $\{x_i, y_i\}$ dont deux sont visiblement aberrants, le graphe de gauche indique les droites de régression obtenues par une régression ordinaire (tracé en rouge) et une régression robuste (tracé en bleu). Les paramètres vrais a et b du système sont 1 et 0.5, ceux obtenus par moindres carrés ordinaires 1.171 et 0.608, ceux issus de la procédure robuste étant 1.089 et 0.506, ce qui met en évidence le bien-fondé de l'estimateur robuste.

3. Réconciliation de données en présence de mesures aberrantes

3.1. Principe de base de la réconciliation de données

La réconciliation de données, [King : 2017, Behnami : 2016], a pour but de rendre compatibles les mesures effectuées sur un système avec son modèle, ce dernier étant supposé exact car établi à partir de lois de conservation de matière ou d'énergie [Guo : 2016]. A ce titre, les méthodes de réconciliation se rapprochent parfaitement des méthodes d'estimation d'état. Une conséquence importante de la réconciliation est la détection de valeurs de mesures aberrantes. En effet les valeurs réconciliées peuvent être comparées aux mesures ; les écarts constatés peuvent être analysés, les plus grands d'entre eux pouvant témoigner de la

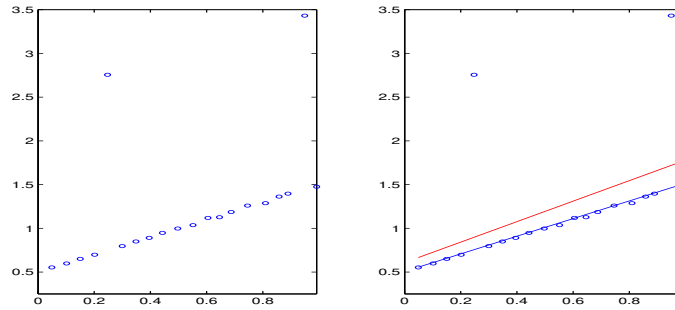


Figure 5. Régression robuste

présence de mesures aberrantes. On évoquera dans cette section la formulation la plus simple dans le cadre d'un système à modèle linéaire liant les grandeurs vraies x^* :

$$M x^* = 0, \quad x^* \in \mathcal{R}^v, \quad M \in \mathcal{R}^{n \times v} \quad (22)$$

dont les mesures x_m sont définies sous la forme additive vis-à-vis de bruits ε liés à l'instrumentation :

$$x_m = x^* + \varepsilon, \quad (23)$$

Généralement les mesures ne vérifient pas le modèle (22) du système et le principe de réconciliation vise à les corriger par pour satisfaire ce modèle. Les mesures étant supposées non totalement aberrantes, les grandeurs corrigées souvent leur rester proches et pour cette raison de proximité, l'estimé \hat{x} minimise le critère ici choisi quadratique

$$\Phi = \|x_m - x^*\|^2 \quad (24)$$

est défini par :

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \arg \max_{x^*} \Phi \quad \text{sous } M \hat{x} = 0 \\ &= (I - M^T (M M^T)^{-1} M) x_m \end{aligned} \quad (25)$$

Cette expression fournit donc une estimation des grandeurs vraies cohérente au sens de la satisfaction du modèle du système et par conséquent une estimation des corrections qui ont été apportées aux mesures :

$$\tilde{x} = x_m - \hat{x} \quad (26)$$

L'analyse des amplitudes des termes correctifs renseigne sur l'amplitude des erreurs et de leur répartition. Pour préciser ce point, la situation qui nous intéresse est celle de la présence de $q < v$ mesures aberrantes se traduisant par la définition suivante :

$$x_m = x^* + \varepsilon + F d, \quad F \in \mathcal{R}^{v \times p}, d \in \mathcal{R}^q \quad (27)$$

où la matrice F donne les directions d'influence des défauts de mesure d sur les mesures x_m . Il est alors possible de préciser l'expression des termes correctifs et le lecteur pourra vérifier à partir de (24, 25, 26) l'expression suivante de l'estimé :

$$\tilde{x} = M^T (M M^T)^{-1} M \varepsilon + M^T (M M^T)^{-1} M F d \quad (28)$$

où apparaît l'influence des "petites" erreurs ε à caractère aléatoire et celle plus importante des défauts d . L'interprétation de (27) en terme de performance de détection et d'isolation des défauts d est à consulter dans ([Maquin : 1991, Romagnoli : 2000]). De façon très succincte, les erreurs ε étant de faibles amplitudes, on peut écrire :

$$\tilde{x} \sim M^T (M M^T)^{-1} M F d \quad (29)$$

Par conséquent le défaut d_i (la i ème composante de d est détectable si la i ème colonne de la matrice $M^T (M M^T)^{-1} M F$ est non nulle. L'isolation du ou des défauts dépend bien évidemment de la structure de cette même matrice, la pratique montre que en général le défaut d influence malheureusement plusieurs termes correctifs ce qui peut rendre l'isolation difficile. D'une certaine façon cette procédure de réconciliation ne présente pas les caractères de robustesse souhaités en ce sens que les défauts sont corrigés mais au détriment de leur dissémination sur l'ensemble des variables. Ceci justifie le paragraphe suivant qui présente une approche robuste au problème de réconciliation des mesures, la robustesse permettant de ne pas disséminer les défauts de mesure sur l'ensemble des variables lors de la procédure de réconciliation. De ce fait la correction des mesures est faite essentiellement sur celles sujettes à des défauts.

3.2. Réconciliation robuste de données

De nombreux développements complètent le principe de base que nous venons de rappeler. Ils sont nés de la nécessité de pouvoir appliquer ce principe à des situations et des données réelles, situations qui ne respectent pas toujours les hypothèses de base précédemment utilisées. C'est ainsi que des extensions ont permis de s'intéresser aux systèmes dynamiques [Chinen : 2016], aux systèmes non linéaires [Guo : 2016, Cencic : 2018], à la présence d'erreurs de mesure bornées [Mandel : 1998], à la présence de paramètres mal connus [Zhang : 2017], à l'estimation de la précision des mesures [Poulin : 2009], à la réconciliation des données de façon simultanée à l'estimation des paramètres du système [Guo : 2016, Francken : 2009], à la localisation de défauts de mesure [Llanos : 2017], à la prise en compte de mesures manquantes [Imtiaz : 2004]. Dans ce paragraphe, le point particulier de la robustesse de la réconciliation vis-à-vis des mesures aberrantes est abordé. Pour introduire cette problématique, rappelons que la réconciliation repose sur la minimisation d'un critère formé à partir des écarts entre estimés et mesures. La validité et le caractère optimal de cette approche sont éminemment liés à l'hypothèse forte de normalité des erreurs de mesure. Dans la pratique, cette hypothèse peut être mise en défaut en présence de grosses erreurs qui constituent des valeurs aberrantes. Pour prendre en compte directement la présence des grosses erreurs, une loi de distribution des erreurs plus appropriée est utilisée. La classe des M-estimateurs fournit des estimées robustes vis-à-vis des grosses erreurs. Considérons à nouveau le cas de mesure $x_m = x^* + \varepsilon$, les composantes de ε étant notée ε_i . Le critère d'estimation s'écrit :

$$\Phi = \frac{c^2}{2} \sum_{i=1}^v \log \left(1 + \left(\frac{\varepsilon_i}{c} \right)^2 \right) \quad (30)$$

Rappelons le rôle important joué par la constante c dans ce critère en ce qui concerne le poids donné aux différentes erreurs ε_i . Il apparaît clairement que les erreurs d'amplitudes supérieures à c (18) sont davantage prise en compte dans Φ que celles d'amplitudes plus faibles c'est-à-dire inférieures à c . De ce fait, la minimisation de Φ tend à réduire l'influence des grosses erreurs sur les estimés.

La formulation précédente (23, 24) peut alors être reconduite en prenant en compte le modèle (21) et la fonction objectif (30). On laisse le soin au lecteur de retrouver l'estimé suivant :

$$\begin{aligned} \hat{x} &= (I - WM^T(MWM^T)^{-1}M) x_m \\ W &= I + \frac{1}{c^2} \text{diag}(\varepsilon \otimes \varepsilon) \\ \varepsilon &= x_m - \hat{x} \end{aligned} \quad (31)$$

où l'opérateur \otimes permet de faire le produit terme à terme de deux vecteurs. Le système non linéaire (31) est résolu par rapport à \hat{x} de façon itérative à partir d'un choix initial de la matrice des poids W par exemple la matrice identité.

Remarque 4 Le principe de réconciliation des données précédent s'étant aux systèmes non linéaires et aux systèmes dynamiques. Par soucis de concision évoquons le cas des systèmes bilinéaires pour lesquels les modèles font intervenir des produits de variables. Ceci est très fréquent dans le domaine chimique ou minéralurgique lorsqu'on établit des bilan matière en flux total et en flux partiel. Dans ce cas, si x et y désignent par exemple le vecteur des débits et le vecteur des concentrations en une espèce chimique ou minérale, à l'image de l'équation (22) s'écrivent : $Mx^* = 0$ et $Mx^* \otimes y^* = 0$. Les équations de mesures deviennent alors $x_m = x^* + \varepsilon_x$ et $y_m = y^* + \varepsilon_y$. Cela permet de généraliser le critère Φ (30) puis les expressions (31) afin d'obtenir les estimés \hat{x} et \hat{y} . L'application numérique qui suit illustre ce cas.

3.3. Application et discussion

La figure (6) schématise un réseau de transport de matière dans le domaine de l'industrie chimique, constitué de neuf unités de production et seize voies de connection entre ces unités. La loi de conservation des flux de matière permet d'écrire, en régime permanent, le système d'équations (32) reliant les débits x_i^* et les teneurs y_i^* en une espèce chimique.

Les mesures (x_m, y_m) de ces seize variables pendant une période temporelle donnée sont consignées dans le tableau (6). Le but de la validation de données est double : détecter les mesures aberrantes (ici, deux biais d'amplitudes respectives 12 et 6 affectent les mesures de la deuxième composante de x et de la onzième composante de y), proposer des valeurs de remplacement aux mesures aberrantes. De façon à mettre en évidence l'apport de la technique robuste, ce tableau montre les résultats d'estimation des variables x et y d'une part par moindres carrés robuste (*MCR*) d'autre part par moindres carrés ordinaires (*MC*).

Concernant les estimations de la variable x par *MCR*, on constate que sa deuxième composante est la plus corrigée, les autres composantes n'étant que faiblement corrigées. Les résultats sont assez différents avec *MC* où non seulement la deuxième composante de x est corrigée mais aussi les composantes 3, 4 et 5. Il en

est de même pour la variable y . La robustesse est traduite par le fait qu'une mesure en défaut est corrigée sans pour autant corriger les mesures saines. On notera aussi que les termes correctifs avec MCR sont tout à fait en rapport avec l'amplitude des défauts simulés ce qui n'est pas le cas avec MC .

La figure (7) donne une vue d'ensemble des termes correctifs en valeur absolue (T.C.) des variables x et y et ceci pour les deux techniques MCR et MC . Cette figure ne fait que traduire graphiquement les résultats du tableau (6) et met bien en évidence la localisation correcte des corrections des deux défauts de mesure. Pour juger d'un effet moyen des procédure MCR et MC 12 simulations ont été faites avec les mêmes variables x et y en défaut mais en générant des bruits de mesure aléatoire de faible amplitude. La figure (8) visualise les termes correctifs moyens issus de ces 12 simulations et confirme si besoin était la pertinence de l'approche robuste pour la détection de défauts de mesure.

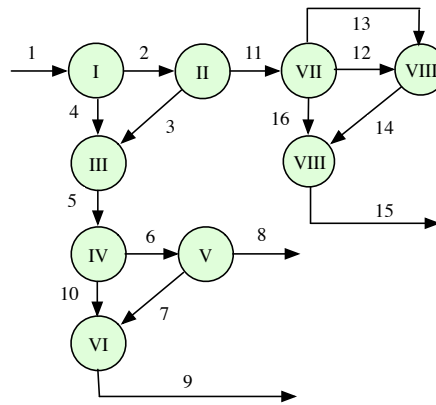


Figure 6. Réseau de transport de matière

$$\begin{cases}
 x_1^* - x_2^* - x_4^* = 0 \\
 x_2^* - x_3^* - x_{11}^* = 0 \\
 x_3^* - x_4^* - x_5^* = 0 \\
 x_5^* - x_6^* - x_{10}^* = 0 \\
 x_6^* - x_8^* - x_7^* = 0 \\
 x_7^* + x_{10}^* - x_9^* = 0 \\
 x_{11}^* - x_{12}^* - x_{13}^* - x_{16}^* = 0 \\
 x_{12}^* + x_{13}^* - x_{14}^* = 0 \\
 x_{16}^* + x_{14}^* - x_{15}^* = 0
 \end{cases}
 \quad
 \begin{cases}
 x_1^* y_1^* - x_2^* y_1^* - x_4^* y_4^* = 0 \\
 x_2^* y_2^* - x_3^* y_3^* - x_{11}^* y_{11}^* = 0 \\
 x_3^* y_3^* - x_4^* y_4^* - x_5^* y_5^* = 0 \\
 x_5^* y_5^* - x_6^* y_6^* - x_{10}^* y_{10}^* = 0 \\
 x_6^* y_6^* - x_8^* y_8^* - x_7^* y_7^* = 0 \\
 x_7^* y_7^* + x_{10}^* y_{10}^* - x_9^* y_9^* = 0 \\
 x_{11}^* y_{11}^* - x_{12}^* y_{12}^* - x_{13}^* y_{13}^* - x_{16}^* y_{16}^* = 0 \\
 x_{12}^* y_{12}^* + x_{13}^* y_{13}^* - x_{14}^* y_{14}^* = 0 \\
 x_{16}^* y_{16}^* + x_{14}^* y_{14}^* - x_{15}^* y_{15}^* = 0
 \end{cases}
 \quad (32)$$

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
x_m	53.59	79.38	57.64	10.95	44.59	60.25	34.36	26.37	21.89	12.65	9.79	16.35	3.10	19.25	9.25	9.68
\hat{x}_{MCR}	55.10	66.52	57.30	11.42	45.89	59.44	34.28	25.16	20.73	13.55	9.22	16.15	2.97	19.12	9.22	9.90
\hat{x}_{MC}	57.02	71.83	61.31	14.81	46.50	59.74	34.28	25.46	21.04	13.24	10.52	16.82	3.21	20.03	10.52	9.51
y_m	8.38	7.11	6.11	1.22	7.03	6.99	3.98	10.44	3.03	6.04	18.82	6.91	2.39	6.02	11.59	0.20
\hat{y}_{MCR}	8.00	6.85	6.03	1.27	7.22	6.93	4.21	10.64	3.06	5.97	11.90	6.61	2.34	5.95	11.90	0.41
\hat{y}_{MC}	8.51	7.02	5.73	1.32	7.14	6.88	4.16	10.55	3.01	5.99	14.54	8.04	2.61	7.17	14.54	0.99

Tableau 6. Débits et concentrations mesurés et estimés

4. Analyse en Composantes Principales Robuste

L'Analyse en Composantes Principales (ACP) est un outil statistique largement utilisé pour l'analyse de données collectées sur des systèmes en cours de fonctionnement afin de surveiller leur comportement. Utilisée à ses débuts comme outil de réduction dimensionnelle, elle a fait l'objet de nombreux développements notamment en étendant sa portée aux systèmes à comportement non linéaire et dynamique. Cependant, d'un point de vue statistique, l'un des inconvénients majeurs de l'approche ACP ordinaire résulte de son utilisation de techniques d'estimation par moindres carrés, techniques qui échouent souvent à s'affranchir des biais de mesures accidentels ce qui est malheureusement assez fréquent sur le plan pratique. Cependant un

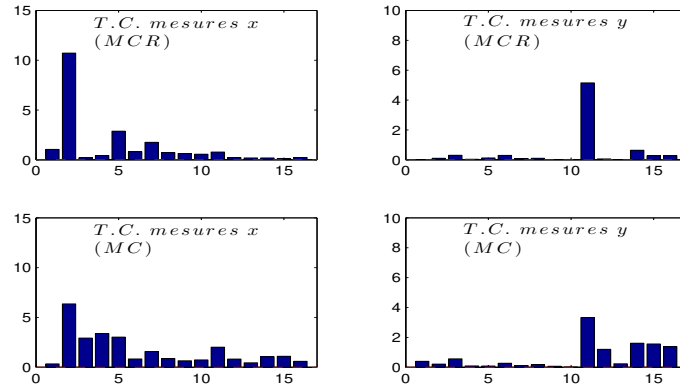


Figure 7. Termes correctifs

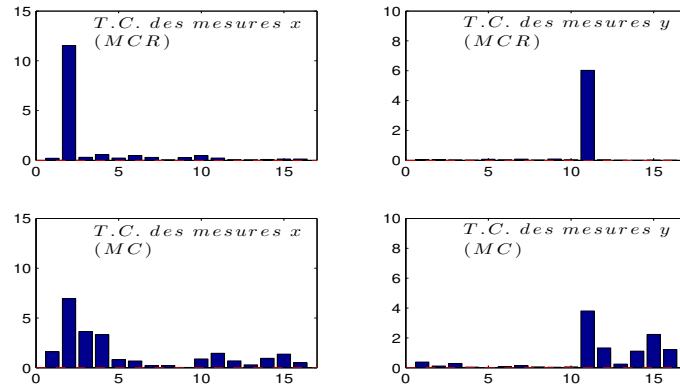


Figure 8. Termes correctifs. Moyenne sur 12 cas

modèle ACP peut être construit à partir des données sans filtrage préalable, cette construction étant robuste vis-à-vis de la présence de grosses erreurs. Le modèle ACP obtenu étant sain, c'est-à-dire non (ou peu) contaminé par les valeurs aberrantes, son utilisation pour le diagnostic (détection et localisation de défauts de mesure) est alors efficace.

4.1. Brefs rappels sur l'Analyse en Composantes Principales

En pratique, on dispose d'une matrice de données $x \in \mathcal{R}^{N \times n}$, de vecteurs lignes X_i^T , qui rassemble les N mesures effectuées sur les n variables du système. Pour rechercher l'ensemble des axes principaux, on procède de la façon suivante :

- évaluer la matrice des variances et covariances expérimentales des données centrées :

$$\Sigma = X^T X \quad (33)$$

- résoudre par rapport à P et Λ l'équation :

$$\Sigma P = P \Lambda \quad (34)$$

$P \in \mathcal{R}^{n \times n}$ étant la matrice des vecteurs propres p_i de Σ et $\Lambda \in \mathcal{R}^{n \times n}$ celle, diagonale, de ses valeurs propres λ_i .

On peut également montrer que :

$$X = T P^T \quad T = X P \quad (35)$$

Les relations (33) trouvent leur intérêt lorsqu'on diminue la dimension de l'espace de représentation. Une fois déterminé le nombre ℓ de composantes à retenir, la matrice X des données peut être approximée. Pour cela la matrice des vecteurs propres est partitionnée sous la forme :

$$P = (\hat{P} \quad \tilde{P}) \quad \hat{P} \in \mathcal{R}^{n \times \ell} \quad (36)$$

A partir de la décomposition (35), on peut alors expliciter la partie \hat{X} des données expliquées par les ℓ premiers vecteurs propres et la partie résiduelle \tilde{X} expliquée par les composantes restantes :

$$\hat{X} = X\hat{P}\hat{P}^T = X \sum_{i=1}^{\ell} p_i p_i^T \quad (37)$$

$$\tilde{X} = X - \hat{X} = X(I - \hat{P}\hat{P}^T) \quad (38)$$

La section suivante montre comment appliquer ces relations à une nouvelle observation dont on veut éprouver la consistance.

4.2. Analyse en Composantes Principales Robuste

Une difficulté majeure de l'ACP provient de sa sensibilité aux valeurs aberrantes. Afin de réduire cette sensibilité, différentes techniques sont utilisables et notamment celle qui consiste à réaliser l'ACP directement sur les données éventuellement contaminées par les valeurs aberrantes en utilisant un algorithme robuste à ces valeurs aberrantes. Dans [Fekri : 2003] les auteurs définissent une matrice de variances et covariances "locale" en ce sens que la forme proposée tend à privilégier la contribution d'observations proches au détriment d'observations éloignées dues à la présence de valeurs aberrantes. Cette matrice notée Σ^r est définie de la façon suivante en fonction des observations x_i^T (les lignes de la matrice X) :

$$\Sigma^r = \frac{\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N w_{i,j} (x_i - x_j)(x_i - x_j)^T}{\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N w_{i,j}} \quad (39)$$

$$w_{i,j} = \exp\left(-\frac{\beta}{2} (x_i - x_j)^T V^{-1} (x_i - x_j)\right) \quad (40)$$

β étant un paramètre à régler pour obtenir effectivement une réduction de l'influence des observations éloignées, les auteurs préconisant une valeur voisine de 2. Les décompositions (30) à (33) sont alors faites en utilisant Σ^r à la place de Σ .

Insistons sur le fait que le modèle ACP ainsi construit est robuste vis-à-vis des défauts de mesure en raison même du modes de calcul de la matrice Σ^r des variances-covariances. Comme indiqué avec (38), cette robustesse est conditionnée en partie par le choix du paramètre β mais dépend aussi fortement de la proportion de mesures saines par rapport aux mesures avec défauts.

4.3. Principe de reconstruction d'une variable

Connaissant le modèle ACP robuste, la cohérence d'un nouveau vecteur de mesure x peut être maintenant éprouvée. En considérant les résultats précédents, on peut écrire la décomposition suivante :

$$x = \hat{x} + \tilde{x} \quad (41a)$$

$$\hat{x} = C^{(\ell)} x \quad (41b)$$

$$\tilde{x} = (I - C^{(\ell)}) x \quad (41c)$$

$$C^{(\ell)} = \hat{P}\hat{P}^T \quad (41d)$$

dans laquelle \hat{x} et \tilde{x} sont respectivement la projection de x sur les espaces engendrés par les ℓ composantes principales et les $n - \ell$ composantes restantes (espace résiduel). L'analyse de l'amplitude des composantes de \tilde{x} , voire celles de \hat{x} , peut révéler la présence de défauts de mesure. Notons que \hat{x} est obtenu à partir de toutes les composantes du vecteur de mesure x . Par conséquent, la présence d'une valeur aberrante dans le vecteur d'observation x rend l'estimé \hat{x} sensible à cette valeur et pour s'en affranchir on peut essayer d'exprimer cet estimé en utilisant une partie seulement du vecteur d'observation x .

A partir de (41b), cherchons à estimer une composante particulière du vecteur x par exemple la r -ième. En notant c_{ij} les éléments de la matrice $C^{(\ell)}$, la r -ième composante de \hat{x} (9b) s'explique :

$$z_r = \sum_{j=1, j \neq r}^n c_{rj} x_j + c_{rr} x_r \quad (42)$$

où l'on a particularisé la contribution de la r -ième composante de la mesure pour des raisons qui vont être justifiées. Si l'on souhaite ne pas utiliser la r -ième composante x_r de la mesure x , on peut remplacer, dans le membre de droite de l'équation (42), x_r par \hat{z}_r , ce qui donne (à la condition $c_{rr} \neq 1$) l'estimé recherché :

$$\hat{z}_r = \frac{(c_{-r}^T \quad 0 \quad c_{+r}^T)}{1 - c_{rr}} x \quad (43)$$

où les indices $-r$ and $+r$ sont respectivement utilisés pour construire un vecteur formé par les $r - 1$ premiers et les $n - r$ derniers éléments du vecteur c_r . Ainsi, la r -ième composante de x est estimée en utilisant toutes ses composantes sauf la r -ième. Si uniquement cette r -ième composante de x est entachée d'erreur, alors l'estimation obtenue n'est pas sensible à cette erreur. Il est alors possible d'appliquer l'ACP aux données x dans lesquelles la r -ième composante de x a été reconstruite grâce au modèle ACP réduit à ℓ composantes principales robustes et aux $n - 1$ autres composantes de x . Cette reconstruction partielle du vecteur de mesure est notée :

$$\hat{x}_r^{(\ell)} = (x_{-r}^T \quad \hat{z}_r \quad x_{+r}^T)^T \quad (44)$$

où (ℓ) rappelle la sélection de ℓ composantes principales pour reconstruire les données et que l'indice r est celui de la variable non utilisée pour la reconstruction. Dans l'objectif du diagnostic, il convient d'analyser l'estimé (43). En fait, il s'avère plus intéressant d'analyser la projection de cet estimé dans l'espace résiduel et ceci pour les n reconstructions possibles selon la valeur de l'indice r . Ces projections s'explicitent :

$$\tilde{x}_r^{(\ell)} = (I - C^{(\ell)}) \hat{x}_r^{(\ell)} \quad r = 1, \dots, n \quad (45)$$

Après report de (44) dans (45), on peut montrer que :

$$\begin{aligned} \tilde{x}_r^{(\ell)} &= P_r^{(\ell)} x \\ P_r^{(\ell)} &= (I - C^{(\ell)}) \left(I + \frac{\xi_r \xi_r^T C^{(\ell)}}{1 - \xi_r^T C^{(\ell)} \xi_r} \right) (I - \xi_r \xi_r^T) \end{aligned} \quad (46)$$

Remarque 5 La matrice $P_r^{(\ell)}$ jouit de propriétés particulières. Le lecteur pourra vérifier que :

$$P_r^{(\ell)} \xi_r = 0 \quad (47)$$

$$\xi_r^T P_r^{(\ell)} = 0 \quad (48)$$

Remarque 6 La reconstruction proposée avec (46) porte sur une seule composante du vecteur de mesure. Moyennant une hypothèse classique d'observabilité, il est possible de reconstruire plusieurs variables à la fois de ce même vecteur de mesure. Cette extension est particulièrement utile en présence de plusieurs mesures en défaut simultanément [Ragot : 2013], [Benaïcha : 2012], [Benaïcha : 2013].

4.4. Détection et localisation de mesures aberrantes

Pour préciser la façon de détecter les défauts de mesure, considérons le cas d'une donnée saine x^* corrompue par un bruit de valeur moyenne nulle ϵ et un défaut d'amplitude d agissant dans la direction ξ_f (d et ξ_f n'étant pas connu) :

$$x_m = x^* + \epsilon + \xi_f d \quad (49)$$

Dans cette expression x^* est la vraie valeur (et donc satisfait au modèle ACP), ξ_f est le vecteur nul excepté sa f -ième composante égale à l'unité et x_m est une observation disponible de x^* . En vertu de (46), le résidu calculé en reconstruisant uniquement la r^{me} composante de x s'explique :

$$\tilde{x}_r^{(\ell)} = P_r^{(\ell)} (x^* + \epsilon + \xi_f d) = P_r^{(\ell)} (\epsilon + \xi_f d) \quad (50)$$

dont l'espérance mathématique vaut :

$$\mathcal{E}(\tilde{x}_r^{(\ell)}) = P_r^{(\ell)} \xi_f d \quad (51)$$

ce qui met en relief le rôle joué par la f^{me} colonne de la matrice de projection $P_r^{(\ell)}$. On peut généraliser cette analyse en calculant les matrices de projection pour les différentes directions envisageables de défaut ξ_r , $r = 1..n$ ainsi que les résidus qui en résultent. L'analyse de ces résidus, grâce aux propriétés (45) et (46), permet alors de détecter et localiser le défaut s'il existe. En effet, considérons toutes les reconstructions possibles $r = 1..n$. A partir de (51) pour les différentes matrices de projection on peut énoncer les deux règles :

R_1 : si la direction de reconstruction ξ_r est celle du défaut, c'est-à-dire si $r = f$, alors toutes les composantes du vecteur $P_r^{(\ell)} \xi_f$ sont nulles et $\mathcal{E}(\tilde{x}_r^{(\ell)}) = 0$

R_2 : si la direction de reconstruction ξ_r est différente de celle du défaut, alors les composantes du vecteur $P_r^{(\ell)} \xi_f$ ne sont pas a priori nulles, sauf la r^{me} composante.

Ainsi, l'analyse des amplitudes des résidus $\tilde{x}_r^{(\ell)}$ pour $r = 1..n$ est révélatrice de la présence de défauts et permet de déterminer la composante de la mesure affectée par ce défaut.

4.5. Exemple

Un exemple simple construit à partir de quatre variables (x_1 , x_2 , x_3 et x_4) et de deux modèles est utilisé. La matrice X des données comporte $N = 240$ mesures :

$$X = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ \dots & & & \\ x_{N,1} & x_{N,2} & x_{N,3} & x_{N,4} \end{pmatrix} \quad (52)$$

définies de la façon suivante :

$$\begin{aligned} x_{i,1} &= v_i^2 + 1 + \sin(0.1i), & v_i &\sim \mathcal{N}(0, 1) \\ x_{i,2} &= u_i, & x_{i,3} &= -2u_i, & x_{i,4} &\sim \mathcal{N}(0, 1) \end{aligned} \quad (53)$$

A ces quatre variables sont ajoutées des réalisations de variables distribuées selon des lois normales centrées de même écart-type égal à 0.02. La variable x_4 , indépendante des autres variables, joue uniquement un rôle "perturbateur" pour l'ACP. De façon simpliste, on peut considérer que le processus en question comporte une entrée (x_1) et deux sorties (x_2 , x_3).

Un biais d'amplitude constante 3 simule la présence de valeurs aberrantes δx_1 , δx_2 , δx_3 affectant les variables x_1 , x_2 et x_3 : des observations 24 à 44 pour x_1 , de 80 à 100 pour x_2 , de 140 à 160 pour x_3 . La figure 9 montre l'évolution des variables centrées par leurs moyennes respectives. Il est important de noter que 60 observations contiennent des valeurs anormales et que ainsi 25 pour-cent des données sont contaminées par ces valeurs. L'objectif est de les détecter et surtout de les localiser.

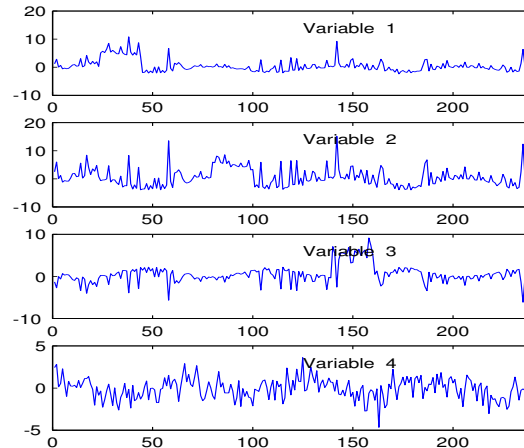
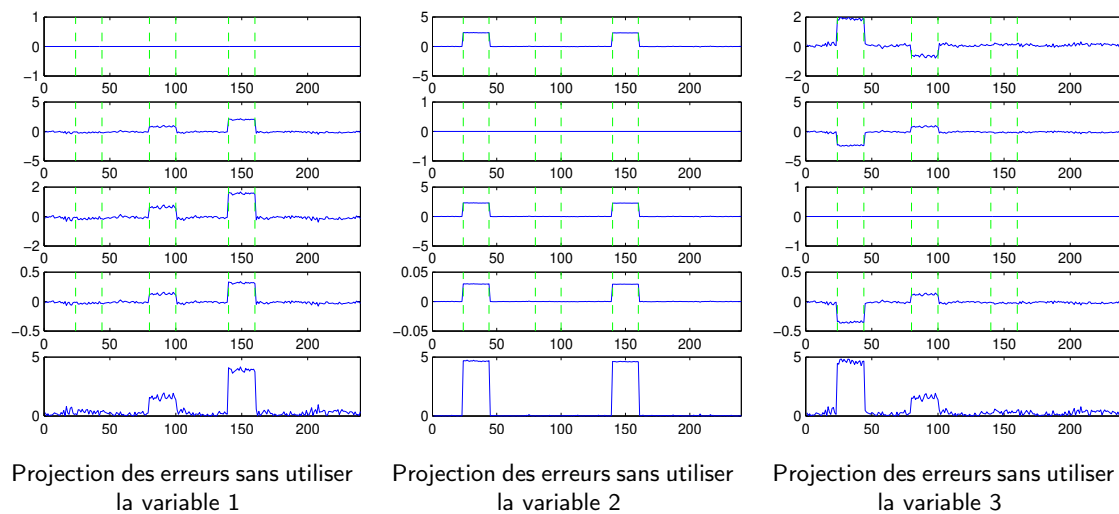


Figure 9. Données

En utilisant les données brutes (figure 9), nous avons déterminé le modèle *ACP* robuste en appliquant les propositions de la section 3. L'analyse de la décroissance des valeurs propres normalisées de la matrice des variances et covariances (85.94, 13.99, 0.04, 0.03), permet de limiter à deux, sans ambiguïté, le nombre de composantes principales à retenir. Les graphiques 1 à 4 de la figure 10 visualisent les quatre résidus $\tilde{x}_{11}, \tilde{x}_{12}, \tilde{x}_{13}, \tilde{x}_{14}$ relatifs à $(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3, \tilde{x}_4)$, définis en (46), et obtenus par projection des reconstructions de toutes les variables sans utiliser la variable 1. Pour cela, (46) a été utilisé avec la matrice de projection $P_1^{(\ell)}$ avec la direction $\xi_1 = (1 \ 0 \ 0 \ 0)^T$. Le cinquième graphe de la figure 10 résulte d'un "ou" logique entre les quatre graphes précédents et traduit donc l'existence d'une projection non nulle pour l'une des quatre reconstructions.

De façon semblable les figures 11 et 12 ont été construites avec les directions respectives $\xi_2 = (0 \ 1 \ 0 \ 0)^T$ et $\xi_3 = (0 \ 0 \ 1 \ 0)^T$.

Pour analyser ces projections, considérons le premier intervalle temporel 24 - 44 où un défaut a été appliqué sur la variable x_1 . Les quatre projections sont sensiblement nulles (figure 10) ce que visualise directement le dernier graphe de cette figure. Deux hypothèses peuvent être énoncées : absence de défaut ou présence d'un défaut dans la direction ξ_1 c'est-à-dire affectant la variable x_1 . L'examen de la figure 11 toujours pour l'intervalle temporel 24 - 44 révèle des projections non nulles donc l'existence d'un défaut. Comme la projection relative à la deuxième variable est nulle, c'est donc cette variable qui est en défaut. La détection et l'isolation de défaut de mesure pour cet intervalle est ainsi réalisée et peut être reconduite pour les autres intervalles temporels.



5. Conclusion

Quoique très incomplète, cette présentation a voulu attirer l'attention du lecteur sur la présence de valeurs aberrantes dans les mesures. Deux points de vue sont présentés, le premier relatif à la localisation de ces valeurs aberrantes puis à leur remplacement par des valeurs de substitution, le deuxième relevant de leur accommodation c'est-à-dire de leur acceptation en minimisant leur influence dans le processus d'estimation. Ce deuxième point de vue a été détaillé d'une part dans une procédure de validation de mesures robuste et dans l'utilisation de l'analyse en composantes principale robuste, la robustesse étant à comprendre en terme de réduction d'influence des valeurs aberrantes.

References

- [Antolín : 2017] M. Antolín, E. Del Barrio, J-M. Loubes. A data driven trimming procedure for robust classification. 2017. < hal – 01437147 >
- [Behnami : 2016] M. Behnami, R. Shakerkhatibi, K.Z. Dehghanzadeh, S. Benis, S. Derafshi, E. Fatehifar. The implementation of data reconciliation for evaluating a full-scale petrochemical wastewater treatment plant. Environmental Science and Pollution Research, 23, 22586-22595, 2016.
- [Benaïcha : 2012] A. Benaïcha, G. Mourot, K. Benothman, J. Ragot. Détermination de modèles ACP pour la détection et la localisation de défauts de capteurs. Journal Européen des Systèmes Automatisés, 46(1):9-32, 2012.
- [Benaïcha : 2013] Ben Aïcha A, Mourot G., Benothman K., Ragot J. Determination of Principal Component Analysis models for sensor fault detection and isolation. International Journal of Control, Automation and Systems, 11(2), 296-305, 2013.

- [Billor : 2008] N. Billor, G. Kiral. A Comparison of Multiple Outlier Detection Methods for Regression Data. *Communications in Statistics, Simulation and Computation*, 37 (3), 521-545, 2008.
- [Brown : 2005] C.L. Brown, R.F. Brcich, A.M. Zoubir. Adaptive M-Estimators For Robust Covariance Estimation. <http://asmda2005.enst-bretagne.fr/IMG/pdf/proceedings/872.pdf>.
- [Cencic : 2018] O. Cencic, R. Frühwirth. Data reconciliation of non-normal observations with nonlinear constraints, *Journal of Applied Statistics*, 2018.
- [Chinen : 2016] A.S. Chinen, J.C. Morgan, B.P. Omell, D. Bhattacharyya, D.C. Miller. Dynamic Data Reconciliation and Model Validation of a MEA-Based CO₂ Capture System using Pilot Plant Data, *IFAC-PapersOnLine*, 49(7) 639-644, 2016.
- [Dai : 2016] X. Dai, L. Jin, A. Shi, L. Shi. Outlier detection and accommodation in general spatial models. *Statistical Methods and Applications*, 25:453-475, 2016.
- [Deleforge : 2015] A. Deleforge, F. Forbes, and R. Horaud. High-dimensional regression with Gaussian mixtures and partially-latent response variables. *Statistics and Computing*, 25 (5), 893-911, 2015.
- [Dixon : 1950] W.J. Dixon. *The Annals of Mathematical Statistics*. 21(4), 488-506, 1950.
- [Dogru : 2017] F.Z. Dogru, O. Arslan. Robust mixture regression modeling using the least trimmed squares (LTS)-estimation method. *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, 2017.
- [Du : 2018] S.S. Du, Y. Wang, S. Balakrishnan, P. Ravikumar, A. Singh. Robust Nonparametric Regression under Huber's contamination Model, arXiv:1805.10406, 2018.
- [Fekri : 2003] M. Fekri, A. Ruiz-Gazen. Robust weighted orthogonal regression in the errors-in-variables model. *Journal of Multivariate Analysis* 88, 89-108, 2003.
- [Fellaou : 2016] S. Fellaou, T. Bounahmidi. Mass Balance Reconciliation for Bilinear Systems: A Case Study of a Raw Mill Separator in a Typical Moroccan Cement Plant. *Engineering, Technology & Applied Science Research*, 6(3), 2016.
- [Fearnhead : 2017] P. Fearnhead & G. Rigai. Change point Detection in the Presence of Outliers. *Journal of the American Statistical Association*, 2017.
- [Francken : 2009] J. Francken, D. Maquin, J. Ragot, B. Bèle. Simultaneous data reconciliation and parameter estimation. Application to a basic oxygen furnace., *IFAC Proceedings Volumes*, 42 (19), 86-91, 2009.
- [Grubbs : 1969] F.E. Grubbs. Procedures of Detection Outlying Observations in Samples, *Technometrics*, 4(1), 1-21, 1969.
- [Guo : 2016] S. Guo, P. Liu, Z. Li. Inequality constrained nonlinear data reconciliation of a steam turbine power plant for enhanced parameter estimation. *Energy* 103:215-230, 2016.
- [Hampel : 1971] F.R. Hampel. A general qualitative definition of robustness. *The Annals of Mathematical Statistics*, 42(6), 1887-1896, 1971.
- [Holland : 1977] P.W. Holland, R.E. Welsch. Robust regression using iteratively reweighted least squares. *Commun. Statistics-Theory and Methods*, A6: 813-827, 1977.
- [Horton : 2001] J. Horton, R.L. Stuart. Multiple imputation in practice: comparison of software packages for regression models with missing variables. *The American Statistician* 2001;55:244-254.
- [Huber : 1954] P.J. Huber. Robust estimation of location parameter. *The Annals of Mathematical Statistics*, 35(1), 73-101, 1964.
- [Hubert : 2005] M. Hubert, P.J. Rousseeuw, K. Van den Branden. ROBPCA: a New Approach to Robust Principal Component Analysis. *Technometrics*, 47, 64-79, 2005.
- [Imtiaz : 2004] S.A. Imtiaz, S.L. Shah, S. Narasimhan. Missing Data Treatment Using Iterative PCA and Data Reconciliation, *IFAC Proceedings Volumes*, 37(9), 2004.
- [King : 2017] M. King. *Data Reconciliation. in Statistics for Process Control Engineers: A Practical Approach*, John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, UK, 2017.
- [Korpela : 2016] T. Korpela, O. Suominen, Y. Majanne, V. Laukkanen, P. Lautala. Robust data reconciliation of combustion variables in multi-fuel fired industrial boilers. *Control Engineering Practice*, 55, 101-115, 2016.

- [Llanos : 2017] C.E. Llanos, M.C. Sánchez, R.A. Maronna. A robust methodology for the sensor fault detection and classification of systematic observation errors. *Computer Aided Chemical Engineering*, 40, 1525-1530, 2017.
- [Mandel : 1998] D. Mandel, A. Abdollahzadeh, D. Maquin, J. Ragot. Data Reconciliation by Inequality Balance Equilibration: a LMI Approach. *International Journal of Mineral Processing*, 53, 157-169, 1998.
- [Maquin : 1991] D. Maquin, J. Ragot. Comparison of gross errors detection methods in process data. 30th IEEE Conference on Decision and Control, 2253-2261, Brighton, 1991.
- [Nikulin : 2002] M. Nikulin, A. Zerbé. Détection des observations aberrantes par des méthodes statistiques. *Revue de statistique appliquée*, 50(3), 25-51, 2002.
- [Planchon : 2005] V. Planchon. Traitement des valeurs aberrantes : concepts actuels et tendances générales. *Biotechnology, Agronomy, Society and Environment*, 9(1), 19-34, 2005.
- [Potter : 1977] J.E. Potter, M.C. Suman. Thresholdless redundancy management with arrays of skewed instruments. *Integrity in electronic flight control systems. AGARDograph*, 224:15-25, 1997.
- [Poulin : 2009] É. Poulin, D. Hodouin, L. Lachance. Estimation of Measurement Error Variances in Data Reconciliation Using a Flow Distribution Model, *IFAC Proceedings Volumes*, 42(10), 976-981, 2009.
- [Ragot : 2013] J. Ragot. Analyse en composantes principales - Application à la détection et à l'isolation des défauts. Journée d'étude "Surveillance des procédés industriels", ISA France, Nancy, 17 octobre 2013.
- [Romagnoli : 2000] J.A. Romagnoli, M.C. Sanchez. *Data Processing and Reconciliation for Chemical Process Operations*. San Diego, Academic Press, 2000.
- [de Valle : 2018] E.C. do Valle, R. de Araújo Kalid, A.R. Secchi, A. Kiperstok. Collection of benchmark test problems for data reconciliation and gross error detection and identification. *Computers & Chemical Engineering*, 111, 134-148, 2018.
- [Zhang : 2017] Z.Zhang, Y.Y. Chuang, J.Chen. Using clustering based logical equation set to decompose large scale chemical processes for parallel solving data reconciliation and parameter estimation problem, *Chemical Engineering Research and Design*, 120, 396-409, 2017.