



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)

MÁSTER EN BIG DATA: TECNOLOGÍA Y ANALÍTICA
AVANZADA

DETECCIÓN DE ANOMALÍAS EN EL PROCESO DE LIOFILIZACIÓN MEDIANTE TÉCNICAS DE MACHINE LEARNING

Autor: Carmen García Prieto

Director: Mario Mariategui Llena

Madrid

Junio 2026

Declaro, bajo mi responsabilidad, que el Proyecto presentado con el título
DETECCIÓN DE ANOMALÍAS EN EL PROCESO DE LIOFILIZACIÓN MEDIANTE
TÉCNICAS DE MACHINE LEARNING

en la ETS de Ingeniería - ICAI de la Universidad Pontificia Comillas en el
curso académico 2025/26 es de mi autoría, original e inédito y
no ha sido presentado con anterioridad a otros efectos.

El Proyecto no es plagio de otro, ni total ni parcialmente y la información que ha sido
tomada de otros documentos está debidamente referenciada.

Carmen García

2da9d865-6ebf-4469-bd36-939e34076b31

Fdo.: Carmen García Prieto

Fecha: 28 / 06 / 2026

Autorizada la entrega del proyecto

EL DIRECTOR DEL PROYECTO

Mario Mariategui

066e46ce-09b9-428a-8412-0ee3b28ae16f

Fdo.: Mario Mariategui Llena

Fecha://

28 Jun 2026 16:04:051-0400

Vº Bº del Coordinador de Proyectos

Fdo.: Carlos Morrás Ruiz-Falcó

Fecha://

AUTORIZACIÓN PARA LA DIGITALIZACIÓN, DEPÓSITO Y DIVULGACIÓN EN RED DE PROYECTOS FIN DE GRADO, FIN DE MÁSTER, TESIS O MEMORIAS DE BACHILLERATO

1º. Declaración de la autoría y acreditación de la misma.

El autor D. Carmen García Prieto

DECLARA ser el titular de los derechos de propiedad intelectual de la obra: Detección de anomalías en el proceso de liofilización mediante técnicas de machine learning, que ésta es una obra original, y que ostenta la condición de autor en el sentido que otorga la Ley de Propiedad Intelectual.

2º. Objeto y fines de la cesión.

Con el fin de dar la máxima difusión a la obra citada a través del Repositorio institucional de la Universidad, el autor **CEDE** a la Universidad Pontificia Comillas, de forma gratuita y no exclusiva, por el máximo plazo legal y con ámbito universal, los derechos de digitalización, de archivo, de reproducción, de distribución y de comunicación pública, incluido el derecho de puesta a disposición electrónica, tal y como se describen en la Ley de Propiedad Intelectual. El derecho de transformación se cede a los únicos efectos de lo dispuesto en la letra a) del apartado siguiente.

3º. Condiciones de la cesión y acceso

Sin perjuicio de la titularidad de la obra, que sigue correspondiendo a su autor, la cesión de derechos contemplada en esta licencia habilita para:

- a) Transformarla con el fin de adaptarla a cualquier tecnología que permita incorporarla a internet y hacerla accesible; incorporar metadatos para realizar el registro de la obra e incorporar “marcas de agua” o cualquier otro sistema de seguridad o de protección.
- b) Reproducirla en un soporte digital para su incorporación a una base de datos electrónica, incluyendo el derecho de reproducir y almacenar la obra en servidores, a los efectos de garantizar su seguridad, conservación y preservar el formato.
- c) Comunicarla, por defecto, a través de un archivo institucional abierto, accesible de modo libre y gratuito a través de internet.
- d) Cualquier otra forma de acceso (restringido, embargado, cerrado) deberá solicitarse expresamente y obedecer a causas justificadas.
- e) Asignar por defecto a estos trabajos una licencia Creative Commons.
- f) Asignar por defecto a estos trabajos un HANDLE (URL *persistente*).

4º. Derechos del autor.

El autor, en tanto que titular de una obra tiene derecho a:

- a) Que la Universidad identifique claramente su nombre como autor de la misma
- b) Comunicar y dar publicidad a la obra en la versión que ceda y en otras posteriores a través de cualquier medio.
- c) Solicitar la retirada de la obra del repositorio por causa justificada.
- d) Recibir notificación fehaciente de cualquier reclamación que puedan formular terceras personas en relación con la obra y, en particular, de reclamaciones relativas a los derechos de propiedad intelectual sobre ella.

5º. Deberes del autor.

- El autor se compromete a:
 - a) Garantizar que el compromiso que adquiere mediante el presente escrito no infringe ningún derecho de terceros, ya sean de propiedad industrial, intelectual o cualquier otro.
 - b) Garantizar que el contenido de las obras no atenta contra los derechos al honor, a la intimidad y a la imagen de terceros.
 - c) Asumir toda reclamación o responsabilidad, incluyendo las indemnizaciones por daños, que pudieran ejercitarse contra la Universidad por terceros que vieran infringidos sus derechos e intereses a causa de la cesión.
 - d) Asumir la responsabilidad en el caso de que las instituciones fueran condenadas por infracción

de derechos derivada de las obras objeto de la cesión.

6º. Fines y funcionamiento del Repositorio Institucional.

La obra se pondrá a disposición de los usuarios para que hagan de ella un uso justo y respetuoso con los derechos del autor, según lo permitido por la legislación aplicable, y con fines de estudio, investigación, o cualquier otro fin lícito. Con dicha finalidad, la Universidad asume los siguientes deberes y se reserva las siguientes facultades:

- La Universidad informará a los usuarios del archivo sobre los usos permitidos, y no garantiza ni asume responsabilidad alguna por otras formas en que los usuarios hagan un uso posterior de las obras no conforme con la legislación vigente. El uso posterior, más allá de la copia privada, requerirá que se cite la fuente y se reconozca la autoría, que no se obtenga beneficio comercial, y que no se realicen obras derivadas.
- La Universidad no revisará el contenido de las obras, que en todo caso permanecerá bajo la responsabilidad exclusiva del autor y no estará obligada a ejercitar acciones legales en nombre del autor en el supuesto de infracciones a derechos de propiedad intelectual derivados del depósito y archivo de las obras. El autor renuncia a cualquier reclamación frente a la Universidad por las formas no ajustadas a la legislación vigente en que los usuarios hagan uso de las obras.
- La Universidad adoptará las medidas necesarias para la preservación de la obra en un futuro.
- La Universidad se reserva la facultad de retirar la obra, previa notificación al autor, en supuestos suficientemente justificados, o en caso de reclamaciones de terceros.

Madrid, a 28 de Junio de 2026

ACEPTA

Fdo.: Carmen García Prieto

Motivos para solicitar el acceso restringido, cerrado o embargado del trabajo en el Repositorio Institucional:



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA (ICAI)

MÁSTER EN BIG DATA: TECNOLOGÍA Y ANALÍTICA
AVANZADA

DETECCIÓN DE ANOMALÍAS EN EL PROCESO DE LIOFILIZACIÓN MEDIANTE TÉCNICAS DE MACHINE LEARNING

Autor: Carmen García Prieto

Director: Mario Mariategui Llena

Madrid

Junio 2026

Agradecimientos

En primer lugar, dar las gracias a mis padres por hacer posible esta etapa y por su apoyo incondicional.

En segundo lugar, quería agradecer también a Carlos Morrás por la organización del Máster, y a todos los profesores que han formado parte del mismo, tanto por la calidad de la formación como la ilusión con la que se han impartido las clases. Asimismo, agradezco también a Mario Mariategui por su tutorización durante las prácticas, por la confianza depositada en mí, por la autonomía y responsabilidad que se me ha dado, así como el seguimiento durante esta etapa.

Por último, quería agradecer a todos mis compañeros de clase por haber hecho que este año haya sido inolvidable más allá de lo académico, por todas las experiencias vividas durante este curso.

DETECCIÓN DE ANOMALÍAS EN EL PROCESO DE LIOFILIZACIÓN MEDIANTE TÉCNICAS DE MACHINE LEARNING

Autor: García Prieto, Carmen.

Director: Mariategui Llena, Mario.

Entidad Colaboradora: Wyeth Farma, S. A.

RESUMEN DEL PROYECTO

El objetivo de este trabajo consiste en el uso de técnicas de aprendizaje no supervisado para la detección temprana de anomalías en el sistema de refrigeración de un liofilizador industrial de la planta de fabricación de Pfizer. A partir de la comparativa de diferentes modelos distintos, se concluye que los autoencoders, especialmente el LSTM AE, son los más adecuados para este caso de uso, detectando correctamente la degradación progresiva del sistema en dos casuísticas reales de fugas.

Palabras clave: Liofilizador, Machine Learning, AVEVA PI System.

1. Introducción

Actualmente, el mantenimiento que se realiza de los equipos de la planta de Pfizer, en concreto de los liofilizadores, se trata de un mantenimiento preventivo semestral en el cual se realiza una búsqueda de fugas activa, donde se registra el estado actual del equipo. Sin embargo, se ha visto que el sistema de refrigeración, debido a su tiempo de vida útil, ha tenido fugas con impacto en el equipo entre mantenimientos preventivos, que se han tenido que solventar reactivamente: se actúa sobre los equipos de manera correctiva habiéndose producido ya una avería. No se aprovecha el conjunto de datos que los propios equipos generan continuamente, los cuales, si se analizasen, permitirían detectar desviaciones en el comportamiento del sistema con mucha antelación.

Actuar de manera temprana tiene una clara ventaja: el coste de la reparación es mucho menor que el de esperar a que el problema sea lo suficientemente grave como para requerir la visita del proveedor, que sea necesario sustituir una pieza completa, o incluso afectar a un ciclo de producción completo.

El liofilizador es una de las máquinas más críticas del proceso de producción. La liofilización se trata de un proceso de deshidratación el cual consiste en la congelación del producto, para la posterior eliminación del agua mediante sublimación, es decir, el paso del agua directamente de estado sólido a gaseoso sin pasar por el estado líquido. Por este motivo, se ha propuesto analizar los datos del proceso del liofilizador, centrandolo el análisis en el sistema de refrigeración del mismo, ya que se trata de un circuito que está en funcionamiento durante casi todas las fases del proceso, y por tanto es uno de los más críticos del sistema.

La detección temprana de anomalías conlleva un gran impacto en la operación de la planta. Entre los principales beneficios destacan los siguientes:

- Reducción del coste de reparación al intervenir antes de que el fallo sea más grave.

- Menor dependencia del proveedor externo para el diagnóstico y la resolución de incidencias.
- Mejor identificación la causa raíz, permitiendo tomar decisiones basadas en datos.
- Aumento de la vida útil de los equipos al evitar que operen en condiciones degradadas.
- Aumento de la fiabilidad del equipo y la seguridad del producto.
- Reducción del impacto mediambiental, al evitar fugas de gas refrigerante R-507.

2. Definición del proyecto

El objetivo del presente trabajo es desarrollar y comparar modelos de machine learning no supervisado para la detección de anomalías en el sistema de refrigeración del liofilizador a partir de los datos de proceso generados durante su funcionamiento.

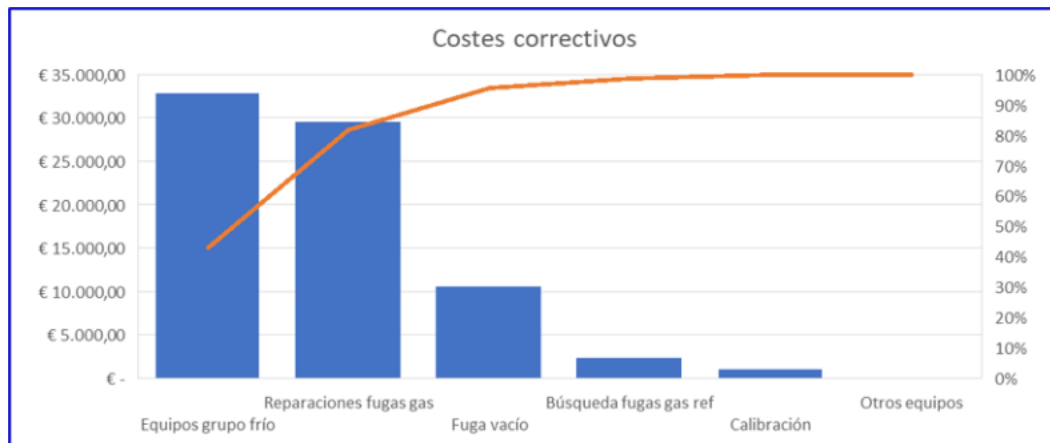


Figura 1. Diagrama de Pareto de los costes correctivos

Este trabajo se centra en la revisión del circuito de refrigeración ya que, tras analizar los modos de fallo del equipo, se ha observado que los fallos en el sistema de frío suponen más del 80% del total a nivel económico.

Para el desarrollo del proyecto, se ha acotado el análisis a la fase de secado del ciclo de esterilización SIP (Sterilization In Place), que tiene lugar antes de cada ciclo de liofilización para garantizar la esterilidad del equipo. Se ha limitado el alcance a esta única etapa ya que es idéntica para todos los ciclos de producción independientemente del producto que se vaya a fabricar.

Por otro lado, el objetivo es validar la metodología en este periodo para posteriormente extenderla a otras etapas del proceso que tengan un comportamiento similar, o a otros liofilizadores de la planta.

Los pasos para llegar al objetivo han sido los siguientes:

1. Delimitación temporal de la fase de estudio en cada ciclo y selección de las variables de interés.

2. Extracción de los datos almacenados mediante el AVEVA PI System con la herramienta de PI Datalink (extensión de Excel).
3. Segmentación de los ciclos en subfase transitoria y subfase estacionaria.
4. Implementación de diferentes modelos de aprendizaje no supervisado para diferentes datos de entrenamiento.
5. Evaluación y comparativa de los modelos mediante criterios adaptados al aprendizaje no supervisado.
6. Desarrollo de una interfaz gráfica de visualización de resultados.

3. Descripción del sistema

El sistema desarrollado implementa y compara diferentes modelos de machine learning no supervisado para la detección de anomalías en el sistema de refrigeración del liofilizador. Los modelos evaluados se organizan en tres categorías en función del nivel al que operan:

1. Modelos de instante a instante (PCA + SPE/T², Distancia de Mahalanobis, Autoencoder y SGD OC-SVM).
2. Modelos basados en características del ciclo completo (Isolation Forest, OC-SVM, LOF, Kernel PCA, GMM, Elíptico Envelope y SVDD).
3. Modelos de ventana temporal (CNN-1D AE y LSTM AE).

Todos los modelos se entrenan exclusivamente con ciclos de funcionamiento normal y se evalúan sobre dos casuísticas reales de fugas en el sistema de refrigeración: una fuga detectada en noviembre de 2025 y dos episodios de pérdida de refrigerante registrados en febrero de 2024.

4. Resultados

Tras evaluar el rendimiento de todos los modelos implementados, los modelos basados en características han sido descartados en su mayoría por problemas de sobreajuste o pérdida de discriminación derivados de la elevada dimensionalidad del vector de características respecto al número de ciclos disponibles.

Los modelos de instante a instante basados en PCA y Mahalanobis han sido igualmente descartados por su asunción de linealidad, mientras que el SGD OC-SVM no ha mostrado capacidad discriminativa suficiente.

Los modelos seleccionados como solución final son el Autoencoder, el CNN-1D AE y el LSTM AE, los tres basados en el error de reconstrucción y capaces de capturar relaciones no lineales entre variables. Estos modelos detectan correctamente la degradación progresiva del sistema en ambas casuísticas, con un máximo de uno o dos falsos positivos sobre los ciclos nominales, y clasifican correctamente el ciclo de referencia de funcionamiento normal. El LSTM AE destaca especialmente por su capacidad para capturar dependencias temporales de largo alcance, mostrando el mejor rendimiento global entre todos los modelos evaluados.

5. Conclusiones

Este Proyecto muestra la viabilidad de aplicar técnicas de machine learning no supervisado para la detección de anomalías en el sistema de refrigeración de un liofilizador industrial, a partir de sus datos de proceso generados durante su funcionamiento.

Como líneas de trabajo futuro se propone automatizar la extracción de datos desde el sistema AVEVA PI, la extensión de esta metodología a otras fases o liofilizadores, y la implementación del sistema en tiempo real.

6. Referencias

- [1] Satwaliya, D. S.; Thethi, H. P.; Dhyani, A.; Kiran, G. R.; Al-Tae, M.; Alazzam, M. B. “Predictive Maintenance using Machine Learning: A Case Study in Manufacturing Management”, *2023 3rd International Conference on Advance Computing and Innovative Technologies in Engineering (ICACITE)*, Greater Noida, India, 2023, pp. 872-876. doi: 10.1109/ICACITE57410.2023.10183012.

ANOMALY DETECTION IN THE FREEZE-DRYING PROCESS USING MACHINE LEARNING TECHNIQUES

Author: García Prieto, Carmen.

Supervisor: Mariategui Llena, Mario.

Collaborating Entity: Wyeth Farma, S. A.

ABSTRACT

This work proposes the use of unsupervised learning techniques for the early detection of anomalies in the refrigeration system of an industrial freeze-dryer at Pfizer. Based on the comparison of different models, it is concluded that autoencoders, especially the LSTM AE, are the most suitable for this use case, correctly detecting the progressive degradation of the system in two real leak scenarios.

Keywords: Freeze-dryer, Machine Learning, AVEVA PI System.

1. Introduction

Currently, the maintenance carried out on the equipment at the Pfizer plant, specifically on the freeze-dryers, consists of semi-annual preventive maintenance involving an active leak search, where the current state of the equipment is recorded. However, it has been observed that the refrigeration system, due to its service life, has experienced leaks between preventive maintenance intervals that have had to be addressed reactively: corrective action is taken after a failure has already occurred. The data continuously generated by the equipment itself is not being exploited; if analysed, it would allow deviations in system behaviour to be detected well in advance.

Acting early has a clear advantage: the cost of repair is much lower than waiting for the problem to become serious enough to require a supplier visit, a complete part replacement, or even the loss of an entire production cycle.

The freeze-dryer is one of the most critical machines in the production process. Freeze-drying is a dehydration process that consists of freezing the product and then removing the water by sublimation, i.e., the direct transition of water from solid to gaseous state without passing through the liquid state. For this reason, it has been proposed to analyse the process data of the freeze-dryer, focusing the analysis on its refrigeration system, as it is a circuit that operates during almost all phases of the process and is therefore one of the most critical components of the system.

Early anomaly detection has a significant impact on plant operations. The main benefits include:

- Reduction in repair costs by intervening before the failure becomes more severe.
- Lower dependence on external suppliers for diagnosis and incident resolution.
- Better identification of the root cause, enabling data-driven decision making.

- Increased equipment lifespan by preventing operation under degraded conditions.
- Improved equipment reliability and product safety.
- Reduced environmental impact by preventing leaks of R-507 refrigerant gas.

2. Project definition

The objective of this work is to develop and compare unsupervised machine learning models for anomaly detection in the freeze-dryer refrigeration system based on the process data generated during its operation.

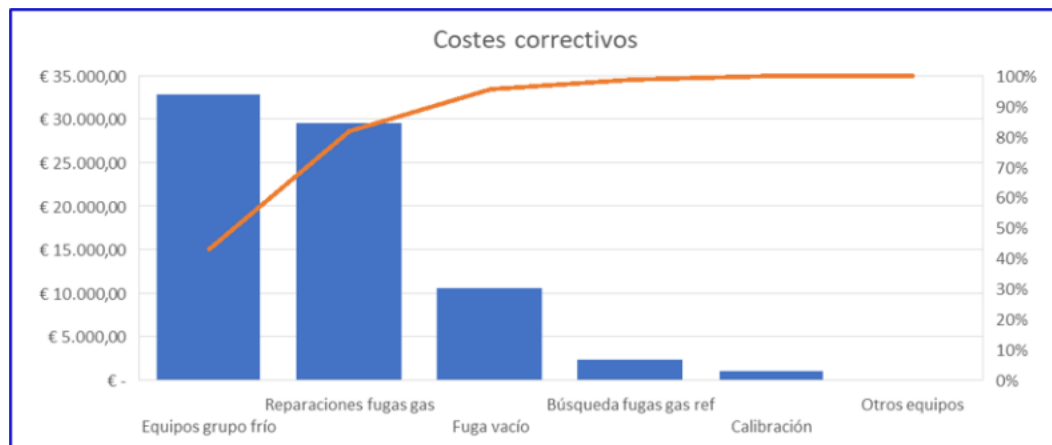


Figura 2. Pareto chart of corrective maintenance costs

This work focuses on the refrigeration circuit since, after analysing the equipment failure modes, it has been observed that failures in the refrigeration system account for more than 80% of the total economic impact.

For the development of the project, the analysis has been limited to the drying phase of the SIP (Sterilization In Place) sterilisation cycle, which takes place before each lyophilisation cycle to ensure the sterility of the equipment. The scope has been limited to this single stage as it is identical for all production cycles regardless of the product being manufactured.

Furthermore, the objective is to validate the methodology during this period in order to subsequently extend it to other process stages with similar behaviour, or to other freeze-dryers at the plant. The steps taken to achieve the objective were as follows:

1. Temporal delimitation of the study phase in each cycle and selection of the variables of interest.
2. Extraction of stored data using the AVEVA PI System with the PI Datalink tool (Excel extension).
3. Segmentation of cycles into transient and stationary sub-phases.
4. Implementation of different unsupervised learning models for different training datasets.
5. Evaluation and comparison of models using criteria adapted to unsupervised learning.
6. Development of a graphical results visualisation interface.

3. System description

The developed system implements and compares different unsupervised machine learning models for anomaly detection in the freeze-dryer refrigeration system. The evaluated models are organised into three categories according to the level at which they operate:

1. Point-in-time models (PCA + SPE/T², Mahalanobis Distance, Autoencoder and SGD OC-SVM).
2. Cycle-level feature-based models (Isolation Forest, OC-SVM, LOF, Kernel PCA, GMM, Elliptic Envelope and SVDD).
3. Temporal window models (CNN-1D AE and LSTM AE).

All models are trained exclusively on normal operating cycles and evaluated on two real refrigeration system leak scenarios: a leak detected in November 2025 and two refrigerant loss episodes recorded in February 2024.

4. Results

After evaluating the performance of all implemented models, the feature-based models were largely discarded due to overfitting or loss of discrimination resulting from the high dimensionality of the feature vector relative to the number of available cycles.

The point-in-time models based on PCA and Mahalanobis were similarly discarded due to their linearity assumption, while the SGD OC-SVM did not show sufficient discriminative capacity.

The models selected as the final solution are the Autoencoder, the CNN-1D AE and the LSTM AE, all three based on reconstruction error and capable of capturing non-linear relationships between variables. These models correctly detect the progressive degradation of the system in both scenarios, with a maximum of one or two false positives on nominal cycles, and correctly classify the reference cycle of normal operation. The LSTM AE stands out in particular for its ability to capture long-range temporal dependencies, showing the best overall performance among all evaluated models.

5. Conclusions

This project demonstrates the feasibility of applying unsupervised machine learning techniques for anomaly detection in the refrigeration system of an industrial freeze-dryer, based on the process data generated during its operation.

As future lines of work, it is proposed to automate data extraction from the AVEVA PI system, extend this methodology to other process phases or freeze-dryers, and implement the system in real time.

6. References

- [1] Satwaliya, D. S.; Thethi, H. P.; Dhyani, A.; Kiran, G. R.; Al-Tae, M.; Alazzam, M. B. "Predictive Maintenance using Machine Learning: A Case Study in Manufacturing Management", *2023 3rd International Conference on Advance Computing and Innovative Technologies in Engineering (ICACITE)*, Greater Noida, India, 2023, pp. 872-876. doi: 10.1109/ICACITE57410.2023.10183012.

Índice de la memoria

Capítulo 1. Introducción	6
1.1 Motivación del proyecto	6
1.2 Descripción de las tecnologías	7
1.2.1 Liofilizador	7
1.2.1.1 Sistema de refrigeración	10
1.2.2 AVEVA PI System	13
1.2.2.1 KEPServerEX	14
1.2.2.2 PI Connector for OPC UA	16
1.2.2.3 Consumo y explotación de datos del PI System	17
Capítulo 2. Machine learning en industria	18
2.1 Detección de anomalías mediante aprendizaje no supervisado	18
Capítulo 3. Definición del trabajo	21
3.1 Modelos implementados	22
3.1.1 Modelos basados en instantes	24
3.1.1.1 PCA + SPE / T^2	24
3.1.1.2 Mahalanobis	25
3.1.1.3 Autoencoder	25
3.1.1.4 SGD OCSVM	28
3.1.2 Modelos basados en características	29
3.1.2.1 Isolation Forest	30
3.1.2.2 OC-SVM	31
3.1.2.3 LOF	33
3.1.2.4 KPCA	35
3.1.2.5 GMM	36
3.1.2.6 Elliptic envelope	37
3.1.2.7 SVDD	38
3.1.3 Modelos basados en ventanas temporales	40
3.1.3.1 CNN-1D	40
3.1.3.2 LSTM AE	42
Capítulo 4. Análisis de Resultados	44

<i>Capítulo 5. Conclusiones y Trabajos Futuros.....</i>	<i>47</i>
<i>Capítulo 6. Bibliografía.....</i>	<i>48</i>

Índice de figuras

Figura 1. Diagrama de Pareto de los costes correctivos	13
Figura 2. Pareto chart of corrective maintenance costs	17
Figura 3. Esquema del liofilizador	9
Figura 4. Sistema de refrigeración del liofilizador	10
Figura 5. Arquitectura general del AVEVA PI System.....	14
Figura 6. Arquitectura hardware implantada en la compañía.....	15
Figura 7. PI Connector for OPC UA data flow	16
Figura 8. Resultado del autoencoder para el caso 1	28
Figura 9. Resultado del autoencoder para el caso 2	28
Figura 10. Resultados del SGD OC-SVM para el caso 1	29
Figura 11. Resultados del OC-SVM para el caso 1	32
Figura 12. Resultados del OC-SVM para el caso 2	33
Figura 13. Resultados del LOF para el caso 2	34
Figura 15. Resultados del Kernel PCA para el caso 1	36
Figura 14. Resultados del Kernel PCA para el caso 2	36
Figura 16. Resultados del SVDD para el caso 1	39
Figura 17. Resultados del SVDD para el caso 2	39
Figura 18. Resultados del CNN-1D AE para el caso 2	41
Figura 19. Resultados del CNN-1D AE para el caso 1	41
Figura 20. Resultados del LSTM AE para el caso 2	43
Figura 21. Resultados del LSTM AE para el caso 1	43
Figura 22. Resultados LSTM con el training set de último septiembre	45
Figura 23. Resultado del LSTM AE con el training set de todos los septiemres	46
Figura 24. Resultado del LSTM AE con el training set de todos los ciclos buenos.....	46

Índice de tablas

Tabla 1. Hiperparámetros por training set del Autoencoder 27

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Capítulo 1. INTRODUCCIÓN

En este capítulo se describe el contexto y la motivación de este proyecto, así como los fundamentos técnicos necesarios para su comprensión. Se presenta el funcionamiento del liofilizador, sus fases de operación, el sistema de refrigeración, las variables de proceso empleadas para el análisis, y el mecanismo de almacenamiento y extracción de datos.

1.1 MOTIVACIÓN DEL PROYECTO

En la planta biotecnológica de Pfizer no se cuenta con un análisis de datos industriales para la monitorización de los equipos de fabricación. Si bien se contemplan intervenciones preventivas con periodicidad semestral, el modelo de mantenimiento no permite anticipar las averías que puedan surgir en el período intermedio, debiendo recurrirse acciones correctivas ante su aparición. Sin embargo, los equipos producen una gran cantidad de datos de proceso, como presiones y temperaturas, los cuales son detectados mediante sensores instalados en los equipos y se envían a un historizador.

Este proyecto propone analizar los datos existentes del sistema de refrigeración del liofilizador, equipos de especial relevancia en la cadena de producción y con mayor incidencia de fallos registrada durante este último año. El objetivo del análisis es la detección de comportamientos anómalos antes de que estos deriven en una avería real, traducándose en reparaciones menos costosas, menor dependencia de asistencia técnica externa, y una mayor vida útil de la maquinaria.

Conviene destacar que, detrás de todo el desarrollo técnico del estudio, subyace una clara lógica de negocio: el sistema de refrigeración de un liofilizador industrial consta de compresores de alto coste, refrigerantes especializados y lotes de producción de elevado valor. Una avería no planificada puede implicar la sustitución de elementos críticos como compresores, condensadores, válvulas de expansión, recargas de gas refrigerante, o en el

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

peor de los casos, el impacto en un lote de producción. Este impacto económico es lo que convierte este trabajo en algo más interesante que un análisis técnico del equipo.

1.2 DESCRIPCIÓN DE LAS TECNOLOGÍAS

A continuación, se describen las principales tecnologías sobre las que se fundamenta el desarrollo del proyecto. En primer lugar, el liofilizador, equipo central del análisis; en segundo lugar, el sistema AVEVA PI, plataforma empleada para la adquisición y almacenamiento de los datos operacionales.

1.2.1 LIOFILIZADOR

El liofilizador es un equipo de deshidratación cuyo funcionamiento se basa en la liofilización, un proceso que consiste en eliminar el agua contenida en un producto mediante sublimación, pasando de estado sólido a gaseoso sin pasar por la fase líquida. Para ello, se mantiene la cámara del liofilizador donde se encuentra el producto con alto vacío, mientras que las bandejas se calientan de forma gradual para facilitar la sublimación del agua. El vapor generado es atrapado por un condensador interno que trabaja a muy baja temperatura.

Este proceso permite conservar las propiedades físicas, químicas y biológicas del producto, lo cual lo convierte en una tecnología especialmente utilizada en la industria farmacéutica y biotecnológica para la fabricación de medicamentos sensibles a el calor y la humedad.

La alternativa más sencilla y rápida sería eliminar el agua mediante evaporación, aplicando calor al producto. Sin embargo, este método no es viable para productos farmacéuticos y biotecnológicos, ya que estas temperaturas degradarían el principio activo y alterarían sus propiedades. La liofilización opera a bajas temperaturas y presiones reducidas, evitando someter el producto a condiciones térmicas y de humedad agresivas.

Antes de entrar en el liofilizador, el producto ya se encuentra dosificado en los viales correspondientes. De este modo, el equipo recibe bandejas con los viales cargados de

ERROR! Use the HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

producto, con el tapón parcialmente insertado para permitir la salida del vapor de agua durante las etapas de secado de la liofilización.

Por lo que respecta al proceso de liofilización, este se desarrolla en cuatro etapas principales:

1. **Congelación:** el producto es enfriado hasta alcanzar temperaturas muy por debajo de 0°C, formando una estructura sólida congelada.
2. **Preparación de condensador y evacuación:** se enfría el condensador (el cual durante la sublimación es el encargado de atrapar el vapor de agua), y se realiza la evacuación en el conjunto de cámara y condensador, llegando a un alto vacío.
3. **Secado primario:** se aporta calor de forma controlada del tal forma que el hielo presente en el producto sublima directamente a vapor de agua, sin pasar por el estado líquido. Esta etapa permite eliminar aproximadamente el 90% del agua inicial del producto. El vapor generado sale a través de la abertura mantenida en los tapones de los viales y viaja hasta ser capturado por el condensador.
4. **Secado secundario:** se incrementa progresivamente la temperatura manteniendo las condiciones de alto vacío, eliminando el agua residual que no ha sido posible eliminar durante el secado primario.
5. **Tratamiento final:** una vez finalizado el proceso, los viales son taponados y se procede a la rotura de vacío mediante la aireación de la cámara.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Por lo que respecta a el modelo del equipo analizado, se trata de un Lyomega 2 200-STE & Peripheral Units Freeze Dryer de TELSTAR INDUSTRIAL S.L. En la siguiente imagen se representan los principales componentes del equipo, los cuales se describen seguidamente:

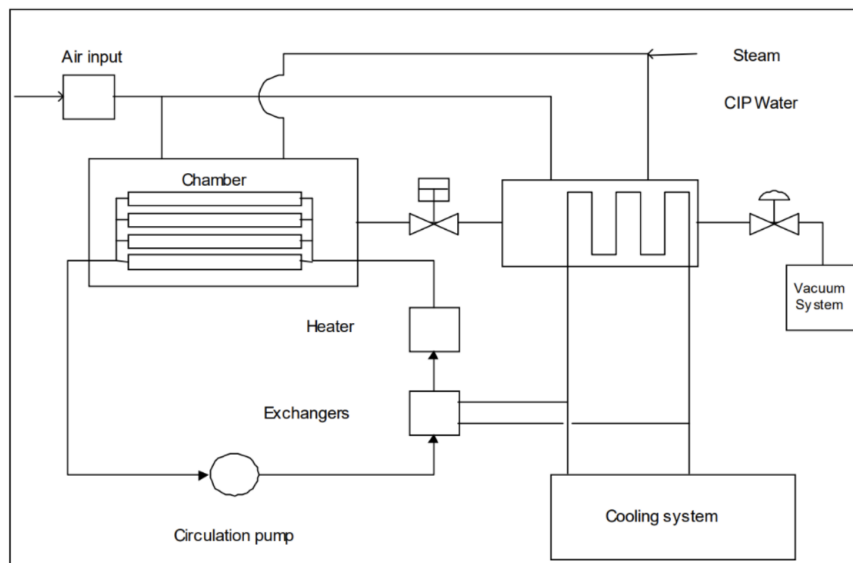


Figura 3. Esquema del liofilizador

Cámara: compartimento donde se alojan las bandejas con los viales los cuales contienen el producto.

Bandejas: superficies sobre las que se depositan los viales con el producto.

Condensador: elemento encargado de capturar el vapor de agua generado durante el proceso de sublimación, operando a muy bajas temperaturas para garantizar la solidificación del vapor y evitar que este llegue al sistema de vacío.

Sistema de vacío: mantiene la presión de vacío en el interior de la cámara.

Intercambiadores y calefactor: sistemas encargados de regular la temperatura del fluido que circula por las bandejas, aportando el calor necesario para el proceso de sublimación.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Bomba de circulación: impulsa el fluido térmico a través del circuito de bandejas e intercambiadores.

Sistema de refrigeración: proporciona el frío necesario tanto para la congelación del producto como para el mantenimiento del condensador a la temperatura requerida. El presente trabajo se centra en el estudio de este sistema.

1.2.1.1 Sistema de refrigeración

El sistema de refrigeración es uno de los subsistemas más críticos del equipo, ya que es responsable de generar y mantener las condiciones de frío necesarias que hacen posible el proceso de liofilización. De su correcto funcionamiento depende tanto la calidad del producto final, como la eficiencia energética y la fiabilidad operativa del liofilizador. En la Figura 4 se presenta un esquema simplificado del circuito frigorífico.

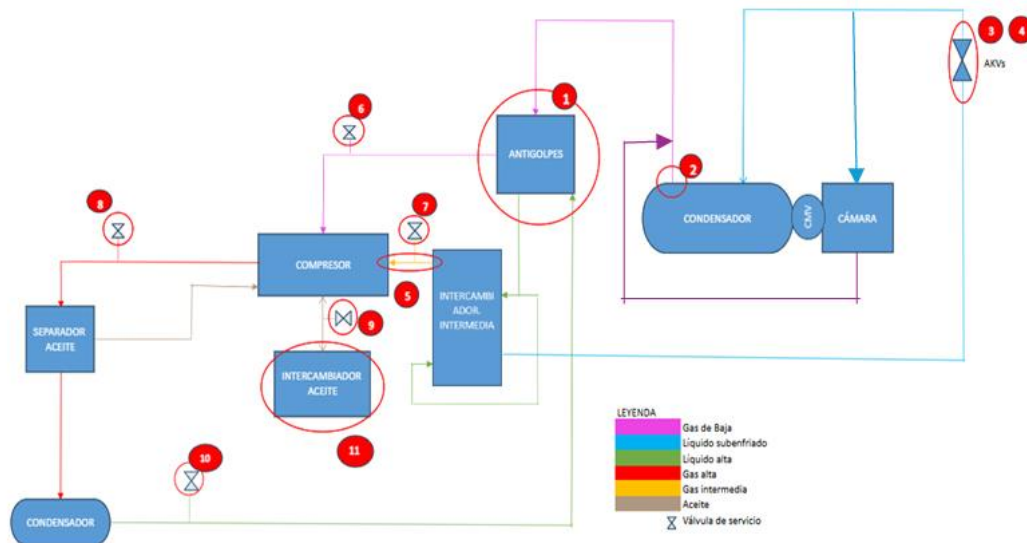


Figura 4. Sistema de refrigeración del liofilizador

Este sistema está compuesto por tres circuitos frigoríficos independientes que operan en paralelo, cada uno formado por su propio compresor, condensador y válvula de expansión. El número de circuitos activos varía en función de la fase del proceso: durante la congelación solamente uno de los compresores está en funcionamiento dando servicio a las bandejas dónde se encuentra le producto, mientras que durante las etapas de secado primario y

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

secundario entran en funcionamiento los tres compresores simultáneamente para dar servicio de frío al condensador (donde se captura el agua sublimada en las etapas de secado).

El principio de funcionamiento se basa en un ciclo termodinámico de refrigeración por compresión de vapor, en el que cual el fluido refrigerante circula continuamente a través de las siguientes cuatro etapas:

1. **Compresión:** el refrigerante entra al compresor en estado de vapor a baja presión y es comprimido hasta alcanzar altas presiones y temperaturas, tras pasar previamente por el separador de aceite.
2. **Condensación:** el refrigerante en estado de vapor a alta presión cede calor al condensador, transformándose en líquido a alta presión.
3. **Subenfriamiento:** el líquido a alta presión atraviesa el antigolpes y el intercambiador intermedio, donde se produce un enfriamiento adicional, obteniéndose líquido subenfriado, que posteriormente es dirigido hacia las válvulas de expansión. En esta etapa, además, se genera la corriente de gas intermedia que retorna al compresor.
4. **Expansión:** el líquido subenfriado atraviesa las válvulas de expansión (AKV), donde sufre una caída brusca de presión, quedando en condiciones de absorber calor.
5. **Evaporación:** el refrigerante absorbe calor de las bandejas de la cámara durante la congelación, o en el condensador durante los secados, evaporándose y regresando al compresor como vapor a baja presión.

Las variables seleccionadas para la modelización del comportamiento en condiciones normales del sistema han sido seleccionadas con los ingenieros de proceso expertos en este circuito. Se trata de un total de 35 variables: 11 asociadas a cada uno de los tres circuitos de refrigeración y 2 variables globales correspondientes a la cámara del liofilizador

Variables por circuito de refrigeración:

- Presión de aspiración: presión del refrigerante a la entrada del compresor.
- Presión de descarga: presión del refrigerante a la salida del compresor.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

- Presión intermedia: presión del refrigerante en la etapa intermedia del compresor de doble etapa.
- Presión en el filtro de aceite: presión del refrigerante a la salida del filtro de aceite.
- Presión del refrigerante aspiración frío condensador: presión del refrigerante a la salida del evaporador (circuito condensador).
- Presión del refrigerante aspiración frío fluido: presión del refrigerante a la salida del evaporador (circuito fluido bandejas).
- Temperatura de aspiración: temperatura del refrigerante a la entrada del compresor.
- Temperatura de descarga: temperatura del refrigerante a la salida del compresor.
- Temperatura del refrigerante en el condensador: temperatura del refrigerante en el condensador del circuito frigorífico.
- Temperatura del refrigerante aspiración frío condensador: temperatura del refrigerante a la salida del evaporador (circuito condensador).
- Temperatura del refrigerante aspiración frío a fluido: temperatura del refrigerante a la salida del evaporador (circuito fluido bandejas).

Variables globales:

- Presión de vacío: presión dentro de la cámara.
- Temperatura del fluido: temperatura del fluido que circula dentro de las bandejas.

Para el desarrollo del presente trabajo, se ha acotado el análisis a la fase de secado del ciclo de esterilización SIP (Sterilization In Place), la cual es ejecutada previamente a cada ciclo de liofilización con el objetivo de garantizar la esterilidad del equipo. La delimitación del estudio a esta etapa permite reducir la variabilidad entre ciclos, ya que se trata de una fase que se repite de manera idéntica independientemente del producto que posteriormente va a ser liofilizado.

Por el contrario, el análisis del sistema durante el propio proceso de liofilización implicaría la necesidad de diferenciar entre los distintos productos procesados, aumentando la variabilidad entre las muestras sin aportar un valor añadido. La evaluación del circuito de

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

refrigeración resulta más adecuada durante una de las fases del SIP; en este caso, se ha seleccionado la fase de secado debido a que ha presentado incidencias durante el último año. Durante esta etapa, el sistema opera de forma estándar con sus tres circuitos frigoríficos independientes funcionando simultáneamente.

1.2.2 AVEVA PI SYSTEM

El sistema empleado para la adquisición y almacenamiento de datos industriales es el AVEVA PI System, implantado en la empresa en el año 2020.

AVEVA PI System constituye uno de los estándares de referencia para la gestión de datos en tiempo real y series temporales en entornos industriales. Se trata de una plataforma integrada de gestión de datos formada por diferentes herramientas software diseñadas para recopilar, almacenar, contextualizar, visualizar y distribuir información operativa a los distintos usuarios de la organización [1].

Los datos generados por procesos industriales presentan ciertas características particulares, tales como una elevada frecuencia de adquisición, gran volumen de información, y una amplia variedad de distintas fuentes de origen. Para dar respuesta a estas necesidades, AVEVA PI System incorpora tecnologías específicamente desarrolladas para la gestión eficiente de este tipo de datos.

Este sistema es capaz de recopilar datos en tiempo real procedentes de una amplia variedad de fuentes industriales. Dispone de un gran conjunto de interfaces y conectores capaces de conectarse a: sensores, sistemas de control, PLC (*Programmable Logic Controllers*), sistemas SCADA (*Supervisory Control and Data Acquisition*), DCS (*Distributed Control Systems*), dispositivos IIoT (*Industrial Internet of Things*), bases de datos, archivos de texto, servidores OPC, entre otros.

Toda esta información recopilada se centraliza en el AVEVA PI Server, también llamado PI Data Archive, el cual constituye el repositorio central de la plataforma. Este servidor, implantado en una infraestructura *on-premise*, actúa como una fuente única de información,

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

permitiendo el almacenamiento de grandes volúmenes de datos históricos, su contextualización mediante metadatos y su disponibilidad para el resto de aplicaciones del sistema [2].

Complementando al PI Data Archive, el sistema dispone de Asset Framework (AF) Server, cuya función principal es contextualizar y estructurar la información almacenada mediante metadatos, jerarquías de activos, relaciones entre equipos, etc. De este modo, la información puede organizarse facilitando su interpretación por parte de los usuarios.

En la Figura 5 se ilustra una arquitectura genérica del sistema AVEVA PI:

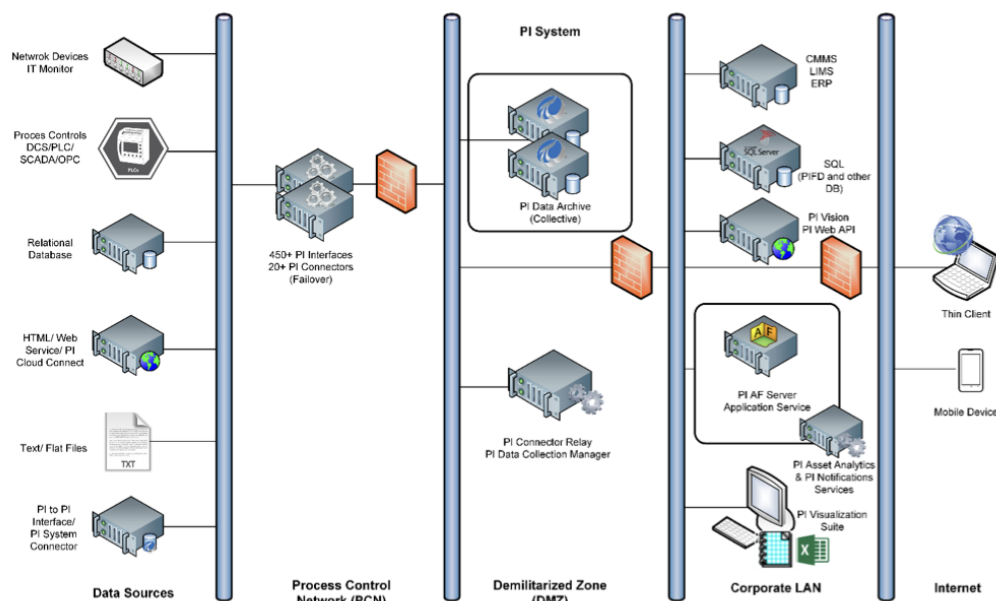


Figura 5. Arquitectura general del AVEVA PI System

1.2.2.1 KEPServerEX

Por lo que respecta a la arquitectura implementada en la compañía, es importante destacar la existencia de un servidor intermedio KEPServerEX, entre los equipos de la planta y el PI Data Archive. Este servidor actúa de intermediario, recopilando los datos procedentes de las distintas máquinas con diferentes protocolos de comunicación, y exponiéndolos mediante el

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

estándar OPC UA para su posterior historización en el PI Data Archive mediante el PI Connector for OPC UA. De esta manera se evita tener que configurar conexiones específicas para cada máquina o sistema desde el PI System.

En la Figura 6 se muestra la arquitectura de datos implantada en la planta:

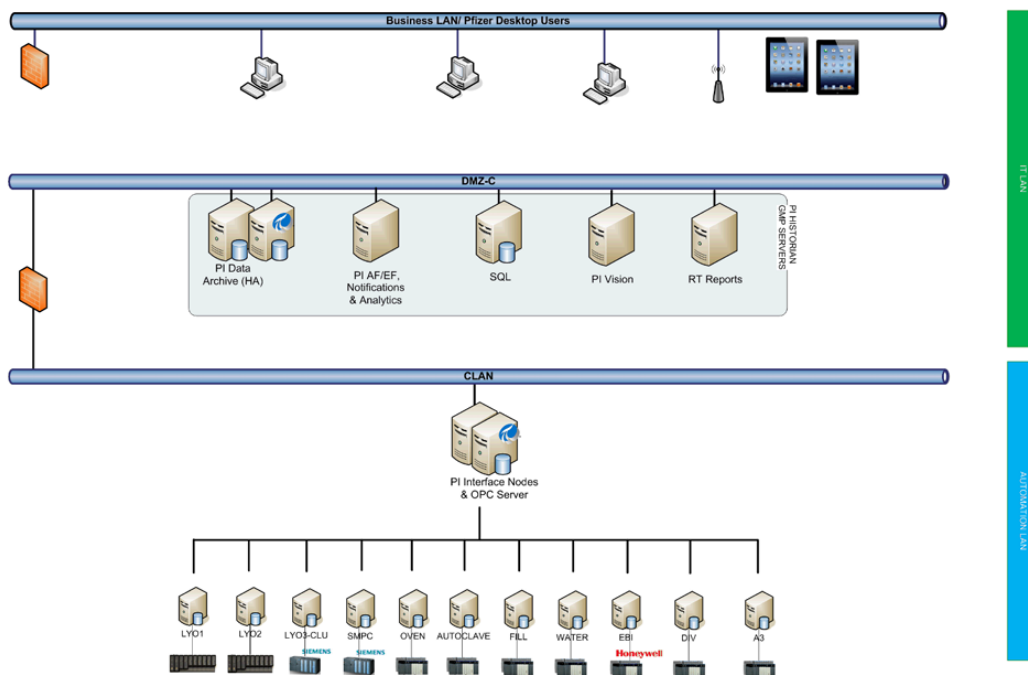


Figura 6. Arquitectura hardware implantada en la compañía

Como se puede apreciar en la imagen, la infraestructura dispone de un servidor KEPServerEx principal y otro redundante para garantizar una alta disponibilidad del servicio. De forma análoga, la arquitectura cuenta con un PI Data Archive primario y un PI Data Archive secundario, configurados en redundancia con el objetivo de asegurar la disponibilidad de los datos ante fallos de alguno de los servidores.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

1.2.2.2 PI Connector for OPC UA

Por lo que respecta a la herramienta encargada de transferir los datos desde KEPServerEX al PI System, se emplea el PI Connector for OPC UA, el cual actúa como enlace entre ambos sistemas. Las variables expuestas por el KEPServerEX en formato OPC UA son capturadas por el PI Connector y transferidas al Data Archive, donde son almacenadas como PI Points. En la Figura 7 se observa la arquitectura de este sistema.

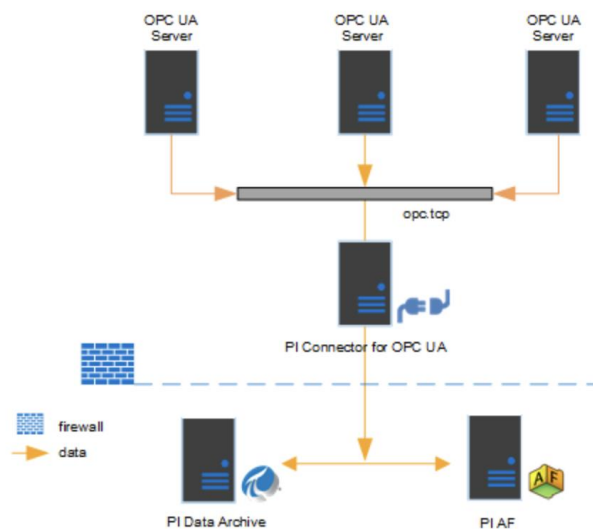


Figura 7. PI Connector for OPC UA data flow

Para la configuración de las variables a incorporar al PI System, el conector permite explorar el espacio de direcciones OPC UA disponible en KEPServerEX y exportar las definiciones de tipo (*Type Definitions*) a un archivo CSV. Posteriormente, dicho archivo puede ser editado para seleccionar las variables de interés y reimportado al conector, lo que permite la creación automática de las correspondientes variables en el PI System [3].

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

1.2.2.3 Consumo y explotación de datos del PI System

Una vez los datos han sido almacenados en el PI Data Archive, estos pueden ser consumidos mediante diferentes herramientas de la plataforma. Las dos principales vías para acceder a esta información de las que se dispone en la compañía son PI Vision y PI Datalink.

PI Vision es una herramienta web de visualización y creación de dashboards facilitando la monitorización de procesos industriales, ya que permite una visualización tanto en tiempo real como histórica, además de la creación de cuadros de mando personalizados, entre otras muchas funcionalidades [4].

Pi Datalink es un complemento de Microsoft Excel que permite recuperar información directamente desde el PI System a una hoja de cálculo. Con esta herramienta es posible obtener series temporales de cualquier variable definiendo un rango temporal y una frecuencia de muestreo si se desea.

Para la obtención de datos en el presente proyecto se ha empleado la herramienta PI Datalink, definiendo el inicio y el fin de cada ciclo de la fase analizada. Los datos han sido extraídos con un intervalo de muestreo de 2 segundos, obteniéndose así información ya muestreada y depurada para su posterior análisis.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Capítulo 2. MACHINE LEARNING EN INDUSTRIA

La Industria 4.0, también denominada Cuarta Revolución Industrial, hace referencia a la incorporación de las tecnologías digitales en entornos de fabricación, tales como el IoT (Internet of Things), el big data, la computación en la nube, entre otras [5]. Esta transformación es llevada a cabo mediante la integración de sensores en los distintos equipos de producción, sistemas de comunicación, y herramientas de análisis de los datos obtenidos de la maquinaria de producción.

Esta evolución en la industria ha convertido la aplicación de técnicas de machine learning como uno de los enfoques fundamentales para la optimización de procesos, aprovechando la información generada por los equipos continuamente y transformándola en conocimiento útil para la toma de decisiones sobre los mismos. La implementación de estos algoritmos ha demostrado ser capaz de reducir los tiempos de paradas no planificadas y los costes de mantenimiento, mejorando al mismo tiempo la eficiencia global de las operaciones productivas [6].

Diferentes estudios han analizado la aplicación de estas técnicas en los sistemas de refrigeración, demostrando la viabilidad de emplear modelos de detección de anomalías basados en machine learning para detectar fallos tempranos en este tipo de circuitos [7,8].

2.1 DETECCIÓN DE ANOMALÍAS MEDIANTE APRENDIZAJE NO SUSPENSADO

La detección de anomalías consiste en identificar patrones en los datos operacionales de un equipo que se desvían de su comportamiento habitual. Para abordar este problema mediante técnicas de machine learning, se pueden considerar tres enfoques principales: el aprendizaje supervisado, el semi-supervisado y el no supervisado.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

El aprendizaje supervisado requiere disponer de los datos etiquetados, con ejemplos claros tanto de correcto funcionamiento como de situaciones de fallo. El aprendizaje semi-supervisado se basa en el uso de un conjunto pequeño de datos etiquetados asociados normalmente al comportamiento normal del sistema, junto con una gran cantidad de datos no etiquetados. Sin embargo, en entornos industriales, así como en el contexto de este proyecto, es difícil disponer de un dataset de datos completamente etiquetados, ya que en numerosas ocasiones ni siquiera se conocen todos los tipos de fallo posibles que pueden desarrollarse en los equipos. Por esta razón, los métodos de aprendizaje no supervisados son los más empleados para este tipo de estudios. Este aprendizaje se basa en métodos que entrenan únicamente con datos de funcionamiento normal, aprendiendo una representación del estado habitual del sistema a partir de la cual cualquier desviación significativa puede ser detectada [9].

Dentro del aprendizaje no supervisado, existe una amplia variedad de técnicas aplicables a datos industriales, que van desde métodos basados en densidad y distancia hasta modelos probabilísticos y redes neuronales profundas. La revisión llevada a cabo por Nassif et al. [10] identifica hasta 29 modelos distintos de machine learning empleados en este ámbito, reflejando la diversidad de enfoques existente.

Para comprender mejor el problema de detección de anomalías, es importante distinguir algunos de los distintos tipos que se pueden encontrar en datos operacionales de un equipo industria [11]:

Anomalías puntuales: valores aislados que se desvían significativamente del comportamiento normal, como puede ser un pico en la presión de un compresor.

Anomalías contextuales: valores que solo resultan anómalos en su contexto temporal, como puede ser un valor de una presión que sería normal durante el arranque del equipo, pero sería anómalo durante su régimen estacionario.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Anomalías colectivas: secuencias de valores que individualmente parecen normales, pero que en su conjunto representan un patrón no común.

Anomalías en tendencia: representan una deriva temporal de una variable a lo largo del tiempo como posible indicativo del deterioro de alguna parte del equipo.

Anomalías multivariable: se dan cuando una variable de forma aislada parece que tiene un comportamiento normal, pero su relación con otras variables resulta anómala.

Conocer bien el tipo de anomalía que puede manifestarse en un sistema es clave a la hora de seleccionar el modelo de detección más adecuado, aunque en la mayoría de los casos es necesario evaluar y comparar diversas opciones para identificar la solución más adecuada. No obstante, la elección del modelo no depende únicamente del tipo de anomalía esperada, ya que la aplicación de técnicas de aprendizaje no supervisado en entornos industriales presenta otra serie de retos adicionales que influyen directamente en la eficacia del modelo.

En primer lugar, la definición del umbral de detección, que establece a partir de qué grado de desviación se considera que un comportamiento es anómalo. Una definición del umbral demasiado estricta puede dar lugar a un número de elevado de falsas alarmas, mientras que si el umbral es demasiado permisivo, puede hacer que desviaciones reales pasen desapercibidas.

En segundo lugar, la interpretabilidad de los resultados. Algunos de estos modelos, especialmente los más complejos como los autoencoders o las redes LSTM, actúan como una caja negra, lo que dificulta entender qué criterio interno ha seguido el modelo para marcar un comportamiento como anómalo.

En tercer lugar, la calidad de los datos de entrenamiento. En el ámbito del machine learning es ampliamente conocido el principio “*garbage in, garbage out*”, que establece que la calidad de un modelo está directamente condicionada por la calidad de los datos con los que se entrena. Si los datos empleados para el entrenamiento del modelo no recogen toda la variabilidad del equipo, o si contienen ciclos anómalos no identificados, el modelo no

***ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR
HERE.***

aprenderá correctamente el funcionamiento del sistema. En este trabajo, este ha sido uno de los aspectos más críticos y que más problemas ha ocasionado, ya que el conjunto de datos de entrenamiento que tuviesen con seguridad un funcionamiento correcto era muy limitado.

*ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR
HERE.*

Capítulo 3. DEFINICIÓN DEL TRABAJO

Para alcanzar el objetivo del presente proyecto se han definido las siguientes líneas de trabajo:

Extracción y preprocesado de datos: Los datos de proceso han sido extraídos del sistema de historización mediante la herramienta de PI Datalink, obteniendo un total de 35 variables a analizar muestreadas cada 2 segundos. El análisis se divide en dos subfases en función del comportamiento del sistema: subfase A (transitoria), los tres circuitos de refrigeración trabajan para alcanzar unos setpoints en las dos variables globales del sistema (presión y temperatura de la cámara); y subfase B (estacionaria), en donde el sistema mantiene esos setpoints de forma continua. Cada ciclo es segmentado en ambas subfases para su análisis independiente.

Implementación y comparativa de modelos: Se han implementado y evaluado diferentes modelos de detección de anomalías no supervisados, validando los resultados con ciclos de funcionamiento anómalo conocido. Para ello, se han abarcado tres enfoques principales: modelos de instante a instante, modelos basados en estadísticos del ciclo completo y modelos de ventana temporal. Cada modelo se entrena con tres conjuntos de entrenamiento: el último mes de septiembre disponible (~9 ciclos), todos los septiembrs del histórico (~30 ciclos), y un conjunto de ciclos representativos distintos meses y años (~94 ciclos), definido con los ingenieros de proceso como representativo del correcto funcionamiento del sistema. El objetivo de analizar los distintos training sets es observar si se aprecia una deriva temporal en el sistema que impida emplear datos antiguos

Cada modelo se entrena y evalúa de forma independiente para cada subfase. El objetivo es identificar qué combinación de modelo y conjunto de entrenamiento ofrece una mejor capacidad para detectar desviaciones en el sistema antes de que se conviertan en una avería, minimizando al mismo tiempo las falsas alarmas sobre los ciclos nominales.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Desarrollo de una interfaz de monitorización: Los resultados se visualizan mediante una aplicación web desarrollada con Streamlit que permite analizar ciclos nuevos. La herramienta ofrece dos niveles de análisis: una comparativa global en la que se pueden visualizar uno o varios ciclos y comparar su puntuación de anomalía frente a los ciclos nominales para todos los modelos simultáneamente, y un análisis de ciclo individual donde se muestra el diagnóstico de las variables que mayor grado de anomalía presentan.

Es importante destacar que el proyecto cuenta con ciertas limitaciones las cuales conviene tener en cuenta a la hora de evaluar los resultados:

- A pesar de tener conocimiento sobre algunas incidencias ocurridas durante el periodo analizado, no se dispone de un registro completo de anomalías para todos los ciclos, lo que limita la evaluación de los modelos mediante métricas supervisadas.
- Se cuenta con un número limitado de ciclos nominales para el entrenamiento de los modelos, debido a la deriva temporal observada en el comportamiento del sistema entre distintos años, lo que dificulta el uso de datos históricos de periodos alejados como referencia de normalidad.
- La extracción de datos se realiza manualmente mediante PI Datalink, una extensión de Excel conectada al AVEVA PI Server, por lo que no existe un mecanismo de actualización en tiempo real que permita la monitorización continua del sistema de manera automática.

3.1 MODELOS IMPLEMENTADOS

Se han implementado y evaluado diferentes modelos de detección de anomalías no supervisados, organizados en tres categorías según el nivel al que opera cada uno:

- **Instante a instante:** evalúan cada punto temporal de forma independiente: PCA + SPE/T², Mahalanobis, Autoencoder y SGD OC-SVM.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

- **Ciclo completo:** representan cada ciclo como un vector de características y evalúan el ciclo como una única observación: Isolation Forest, OC-SVM, LOF, Kernel PCA, GMM, Elliptic Envelope y SVDD.
- **Ventana temporal:** operan sobre secuencias de instantes consecutivos capturando la forma de las curvas temporales: CNN-1D AE, LSTM AE.

Para cada modelo se han evaluado dos casuísticas distintas, ambas relacionadas con fugas en el sistema de refrigeración:

Caso 1: El 25 de noviembre de 2025 se detectó una fuga en uno de los circuitos de refrigeración del sistema. Se analiza si los modelos son capaces de identificar una degradación progresiva del comportamiento del sistema en los ciclos previos a dicha fecha.

Caso 2: Durante el mes de febrero de 2024 fue necesario recargar el refrigerante en dos ocasiones debido a fugas en el sistema. Se evalúa si los modelos son capaces de detectar este comportamiento anómalo y si las señales de degradación eran ya observables desde el mes de enero.

Para entrenar modelos de detección de anomalías de forma robusta es necesario disponer del mayor número posible de ciclos de funcionamiento normal. En el presente trabajo se han definido tres conjuntos de entrenamiento distintos. El primero, denominado último septiembre, está compuesto únicamente por los ciclos del mes de septiembre del último año disponible (~9 ciclos). El segundo, denominado todos los septiembrs, agrupa los ciclos de septiembre de todos los años del histórico (~26 ciclos), aprovechando que tras la revisión exhaustiva realizada cada agosto se tiene total certeza de que estos ciclos corresponden a un funcionamiento correcto del equipo. El tercero, denominado ciclos buenos, está formado por ciclos de distintos meses y años definidos conjuntamente con los ingenieros de proceso, de los cuales se tiene una alta certeza de que representan un comportamiento normal del sistema (~94 ciclos), aunque no pueden garantizarse al 100%.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

A pesar de haber evaluado los modelos con los tres conjuntos, los resultados que se presentan a continuación corresponden al conjunto de ciclos buenos por ser el más representativo.

En las gráficas que se muestran para evaluar los modelos, las barras azul claro representan los ciclos de entrenamiento, mientras que las barras azul oscuro corresponden a los ciclos que se están evaluando. La altura de cada barra representa el grado de anomalía del ciclo, siendo una barra más alta indicativa de un comportamiento más alejado del funcionamiento normal aprendido durante el entrenamiento.

3.1.1 MODELOS BASADOS EN INSTANTES

3.1.1.1 PCA + SPE / T²

El Análisis de Componentes Principales (PCA) es una técnica de reducción de dimensionalidad que transforma las 35 variables originales en un conjunto de componentes principales (PCs) ortogonales, ordenados de mayor a menor varianza explicada. En este primero modelo, el PCA se emplea para construir dos estadísticos de detección complementarios: el SPE (*Squared Prediction Error*) y la T² de Hotelling.

El SPE cuantifica el error de reconstrucción al proyectar un instante del ciclo nuevo en este espacio reducido de componentes principales y reconstruirlo en el espacio original. Si el instante corresponde a un normal, la reconstrucción es buena y el error es bajo. Por el contrario, si el instante presenta alguna anomalía, el modelo lo reconstruye mal y el error de reconstrucción es elevado. Este estadístico permite detectar si las relaciones entre variables se mantienen dentro de los patrones habituales aprendidos durante el entrenamiento.

Por otro lado, la T² de Hotelling complementa al SPE, ya que mide si, a pesar de que el instante haya sido reconstruido correctamente, está en una zona inusual dentro del espacio normal aprendido. Este estadístico detectaría como anómalo el caso de un instante en el cual las correlaciones entre variables se mantienen, pero los valores absolutos están fuera del rango habitual.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

A pesar de ser un modelo de referencia y de servir como baseline para el presente trabajo, presenta ciertas limitaciones para este caso de uso. Asumir linealidad entre variables lo hace menos adecuado para un sistema termodinámico con relaciones no lineales entre variables. Por esta razón, no se profundizará en el análisis de resultados de este modelo.

3.1.1.2 Mahalanobis

La distancia de Mahalanobis mide la distancia de cada instante temporal al centroide de los datos de entrenamiento, teniendo en cuenta las correlaciones entre todas las variables. A diferencia del PCA + SPE/T², no requiere reducción de la dimensionalidad ni elegir el número de componentes principales, garantizando que se trabaja con todas las variables sin descartar información.

Durante el entrenamiento, el modelo estima el centroide y la matriz de covarianza inversa de todos los instantes nominales. En la evaluación, se calcula la distancia de cada instante del ciclo nuevo al centroide. Si la distancia media del ciclo nuevo supera el umbral aprendido por los datos de entrenamiento, el ciclo es considerado anómalo.

A pesar de que existen estudios que demuestran la utilidad de la distancia de Mahalanobis-Taguchi para detección de anomalías en sistemas industriales, como el sistema de Mahalanobis-Taguchi (MTS) [8], en el presente trabajo se emplea la distancia de Mahalanobis en su forma estándar, sin etapa de selección de variables. Esto implica trabajar con las 35 variables disponibles, al no disponer de conocimiento previo sobre qué variables son determinantes para cada modo de fallo posible. En este contexto, el modelo asume linealidad entre las variables y que la distribución del comportamiento normal sigue una distribución gaussiana multivariante, limitando la capacidad del modelo para capturar correctamente el espacio de comportamiento normal en sistemas con relaciones no lineales entre variables.

3.1.1.3 Autoencoder

Un autoencoder es una red neuronal que aprende a comprimir los datos de entrada en una representación de menor dimensionalidad mediante un codificador (encoder), y a

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

reconstruirlos a partir de dicha representación mediante un decodificador (decoder). El entrenamiento de este modelo consiste en minimizar el error de reconstrucción sobre los instantes nominales de forma iterativa, aprendiendo qué combinaciones de valores de las 35 variables son normales. A la hora de evaluar con un ciclo nuevo, un instante anómalo genera un error de reconstrucción elevado dado que la red no ha sido expuesta a esa combinación de valores durante el entrenamiento.

La ventaja principal que tiene este modelo respecto al PCA + SPE/T², se basa en su capacidad de captar tanto relaciones lineales como no lineales al emplear funciones de activación no lineales en cada capa. La red neuronal empieza entrenando con pesos aleatorios, propaga los instantes nominales por la red calculando el error de reconstrucción, y ajusta los pesos mediante *backpropagation* para reducir el error hasta converger.

Este modelo se describe con una mayor profundidad que los anteriores debido a que constituye el modelo base de detección de anomalías mediante redes neuronales, empleado en diversos estudios [8], y cuya arquitectura sustenta los modelos de ventana temporal desarrollados posteriormente en este trabajo, el CNN-1D AE y el LSTM AE.

Este modelo cuenta con distintos hiperparámetros que condicionan su efectividad. El primero de ellos es el *bottleneck*, que determina la dimensionalidad de la representación comprimida de las 35 variables. Cuanto más pequeño sea el *bottleneck*, más selectivo será el modelo y mejor capacidad tendrá para detectar las anomalías, pero aumenta el riesgo de detectar falsos positivos en ciclos nominales. Por otro lado, un *bottleneck* de mayor tamaño, hace al modelo es más permisivo, reduciendo los falsos positivos pero pudiendo empeorar la capacidad de detección de los ciclos anómalos.

El segundo hiperparámetro importante a la hora de diseñar el modelo es la dimensión de la capa oculta, que determina la capacidad de la red para aprender transformaciones complejas entre la entrada y el *bottleneck*. Una capa oculta grande permite al modelo capturar relaciones más complejas entre las variables, aumentando el riesgo de *overfitting*. Por el

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

contrario, una capa oculta demasiado pequeña puede dar lugar a *underfitting*, ya que limita la capacidad del modelo para aprender el funcionamiento del sistema.

Otros parámetros relevantes a la hora de diseñar el modelo son el tamaño del conjunto de datos de entrenamiento y el número de épocas sobre las que itera. Una combinación de dataset de entrenamiento reducido junto con un número de épocas elevado dará lugar a *overfitting* debido a que el modelo se memorizará los datos y no generalizará. Por el contrario, un número de épocas insuficiente junto con un dataset demasiado grande, dará lugar a *underfitting* impidiendo que el modelo se aprenda los patrones.

Para este modelo se han evaluado distintas combinaciones de hiperparámetros en función del conjunto de entrenamiento empleado, seleccionando finalmente los siguientes:

	<i>Último Septiembre</i>	<i>Todos los Septiembrs</i>	<i>Conjunto "buenos" ciclos</i>
Dimensión del bottleneck	12	8	6
Dimensión de la capa oculta	20	16	14
Épocas de entrenaminto	50	100	150
Tamaño del lote	64	256	512
Tasa de aprendizaje	1e-3	1e-3	1e-3
Early stopping	5	10	15
Validation set	0.2	0.1	0.1

Tabla 1. Hiperparámetros por training set del Autoencoder

La tabla siguiente recoge los hiperparámetros seleccionados para cada conjunto de entrenamiento tras evaluar distintas combinaciones. Se puede observar que, a medida que aumenta el tamaño del conjunto de entrenamiento, el bottleneck y la capa oculta se reducen progresivamente, forzando al modelo a aprender una representación más generalizada y reduciendo el riesgo de sobreajuste. Por el contrario, el número de épocas, el tamaño del lote

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

y la paciencia del early stopping aumentan con el tamaño del conjunto, permitiendo un entrenamiento más estable. La tasa de aprendizaje se mantiene constante en todos los casos.

En las siguientes figuras se puede observar los resultados de este modelo para ambos casos de estudio:

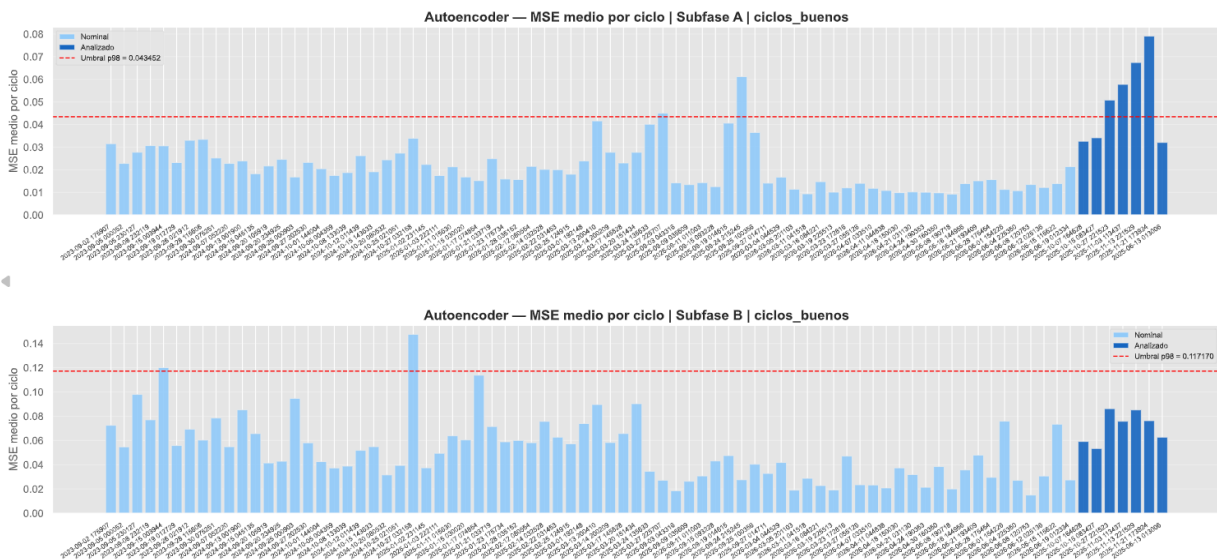


Figura 8. Resultado del autoencoder para el caso 1

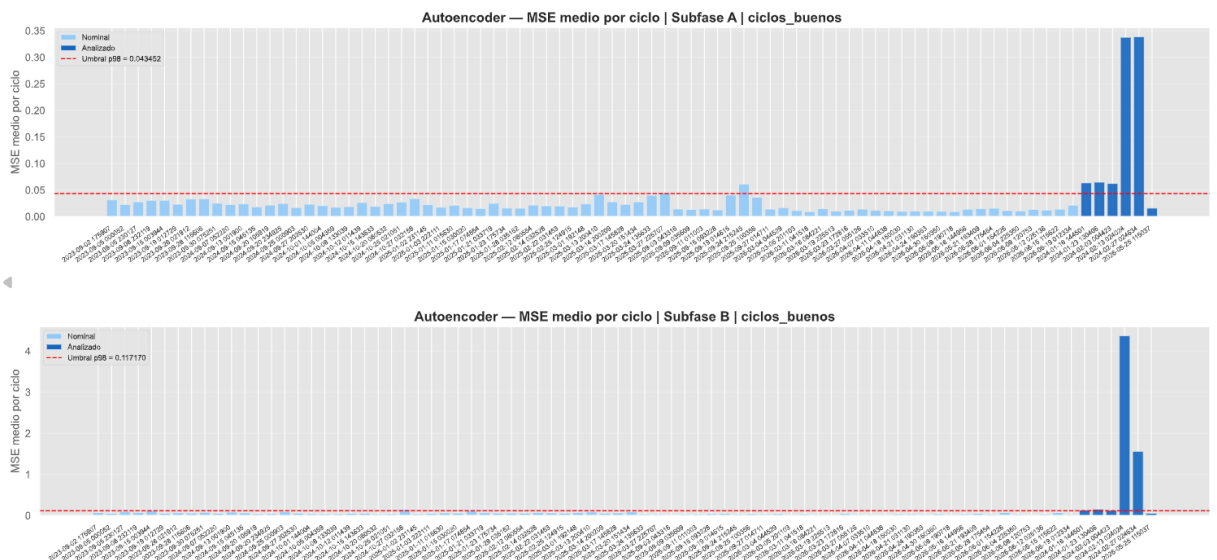


Figura 9. Resultado del autoencoder para el caso 2

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Los resultados obtenidos con el autoencoder son los primeros que muestran una capacidad de detección de gran fiabilidad, sirviendo como punto de partida para el desarrollo de arquitecturas más complejas que incorporen temporalidad, como el CNN-1D AE y el LSTM AE.

3.1.1.4 SGD OCSVM

El OC-SVM (One-Class Support Vector Machine) aprende una frontera en un espacio transformado mediante un kernel que separa los datos normales del origen, considerando anómalo todo instante que queda fuera de esa frontera. La versión SGD (Stochastic Gradient Descent) utiliza el método Nyström para aproximar el kernel RBF y entrena mediante descenso de gradiente estocástico, permitiendo su aplicación a nivel de instante con un coste computacional asumible, a diferencia del OC-SVM clásico que tiene un coste cuadrático con el número de muestras.

El hiperparámetro más crítico en este modelo es ν , que define la fracción máxima de instantes nominales que pueden quedar fuera de la frontera aprendida. Valores bajos de este parámetro generan una frontera es más estricta, mientras que valores más altos, hacen la frontera más flexible y tolerante a la variabilidad del sistema.

Con este modelo se ha observado que las anomalías prácticamente no se detectan y se detectan todos los ciclos muy similares por lo que se descarta.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Tras evaluar los resultados obtenidos, el modelo no ha sido capaz de discriminar correctamente los ciclos anómalos conocidos, clasificando de forma similar tanto los ciclos nominales como los anómalos. Por esta razón, el SGD OC-SVM se descarta como modelo de detección de anomalías en el presente trabajo.

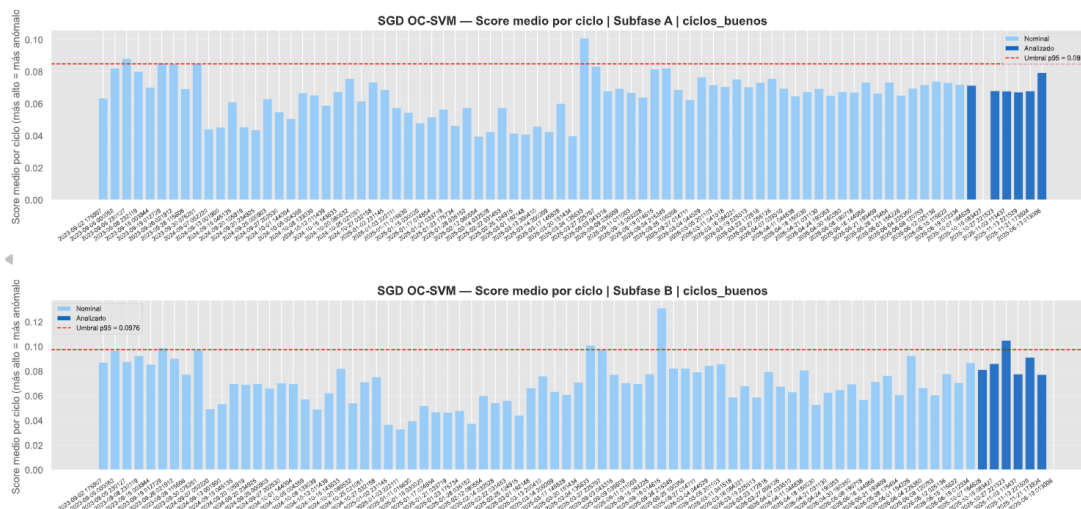


Figura 10. Resultados del SGD OC-SVM para el caso 1

3.1.2 MODELOS BASADOS EN CARACTERÍSTICAS

En los modelos basados en características, a diferencia de los modelos de instante a instante, cada ciclo es representado mediante un vector de 142 características, compuesto por 4 estadísticos por variable (media, desviación típica, percentil 5 y percentil 95) más la duración de cada una de las dos subfases, evaluando el ciclo completo como una única observación. La selección de estos 4 estadísticos por variable se basa en buscar un equilibrio entre la capacidad descriptiva del vector de representación del ciclo, y la complejidad del modelo condicionado por el reducido tamaño de los conjuntos de entrenamiento disponibles. No obstante, la proporción entre el número de características y el número de ciclos disponibles para entrenar no es la más adecuada, ya que un vector de 142 características sigue siendo demasiado grande para un modelo que cuenta con 94 muestras para ser entrenado, dando lugar al fenómeno conocido como maldición de la dimensionalidad. Sin embargo, limitar más el número de características implicaría prescindir de información relevante para la caracterización del comportamiento del ciclo.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Una alternativa habitual para abordar este problema consiste en la aplicación de técnicas de reducción de dimensionalidad, como el Análisis de Componentes Principales (PCA), antes de entrenar los modelos. No obstante, este enfoque presenta una limitación relevante en el contexto de detección de anomalías: dado que el PCA da más peso a las componentes de mayor varianza, existe el riesgo de descartar información de variables que, en condiciones normales, presentan una baja variabilidad, pero no por ello menos importantes ante la detección de comportamientos anómalos del sistema. Por esta razón, se ha decidido preservar el vector completo de características en los modelos evaluados, los cuales pueden incrementar significativamente su potencial en situaciones con un mayor número de datos en el conjunto de entrenamiento.

3.1.2.1 Isolation Forest

Isolation Forest [13] ha sido el primer modelo basado en características seleccionado por ser de los más interpretables y comúnmente usado como baseline en comparativas de detección de anomalías. A diferencia de la mayoría de los enfoques existentes para la detección de anomalías, que construyen un comportamiento normal e identifican como anómalos los datos nuevos que no se ajusten a dicho comportamiento, Isolation Forest propone un enfoque distinto ya que aísla directamente las anomalías en lugar de modelar el comportamiento normal.

Este algoritmo se basa en la construcción de un conjunto de árboles aleatorios, seleccionando en cada nodo una variable y un valor de corte aleatoriamente. Los ciclos anómalos, al presentar características distintas al resto, son aislados con un número menor de particiones, resultando en árboles de menor profundidad. Por el contrario, los ciclos que presentan un comportamiento normal requieren un mayor número de particiones para conseguir aislarse del resto, dando lugar a árboles de mayor profundidad. La puntuación de anomalía se calcula en función de la profundidad media a la que es aislado el ciclo dentro del conjunto de árboles.

No obstante, en el contexto de este trabajo, el elevado número de características respecto al número de ciclos disponibles limita la efectividad del modelo, siendo uno de los principales

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

factores que condicionan el resultado. Este algoritmo ha sido implementado con distintos hiperparámetros, pero no se ha logrado un resultado lo suficientemente satisfactorio, ya que se trata de un algoritmo muy sensible a la maldición de la dimensionalidad al depender de encontrar cortes relevantes en un espacio de alta dimensión, por lo que clasifica todos los ciclos parecidos al perder capacidad discriminativa.

3.1.2.2 OC-SVM

El OC-SVM (One-Class Support Vector Machine) a nivel de ciclo completo es la versión basada en características del SGD OC-SVM descrito anteriormente. En este caso, cada ciclo es representado mediante un vector de 142 características y el modelo aprende una frontera en el espacio kernel que delimita el comportamiento normal. Dicha frontera queda definida únicamente por los *vectores soporte*, que son los ciclos nominales situados en el límite de la frontera, sin que el resto de los ciclos de entrenamiento influyan en su forma.

Este modelo presenta un trade-off entre simplicidad y complejidad de la frontera aprendida. Con un número reducido de vectores soporte, la frontera resulta demasiado simple dando lugar a *underfitting*, incluyendo tanto ciclos nominales como anómalos y perdiendo capacidad de detección. Por el contrario, con un número demasiado elevado de vectores soporte, la frontera se ajusta en exceso a los ciclos de entrenamiento, dando lugar a *overfitting* y generando regiones irregulares en las que ciclos normales pueden ser detectados como anómalos. Para encontrar el punto óptimo, el modelo necesita suficientes ciclos de entrenamiento diversos, dado que con conjuntos de entrenamiento muy reducidos el sobreajuste es inevitable, independientemente de los hiperparámetros del modelo. Por este motivo, se ha descartado los training sets basados únicamente en los datos del último mes de septiembre o de todos los septiembres.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Para el train set ciclos_buenos se ha realizado un grid search de hiperparámetros variando el valor de ν entre 0.05 y 0.30 y γ entre 0.0001 y 0.05, evaluando en total 36 combinaciones. Los resultados muestran que ninguna combinación permite eliminar simultáneamente los falsos positivos en nominales y mantener una detección adecuada de los ciclos anómalos. Con valores bajos de γ la frontera memoriza los datos de entrenamiento generando falsos positivos, y con valores de γ altos la frontera es tan simple que pierde capacidad discriminativa. Por estos motivos, a pesar de mostrar cierta capacidad de detección en casos en los que las anomalías están bien definidas, el OC-SVM no ha demostrado ser el enfoque más adecuado. Al igual que el modelo anterior, es posible que su potencial incremente significativamente cuando se disponga de un mayor volumen de ciclos de funcionamiento normal para el entrenamiento.

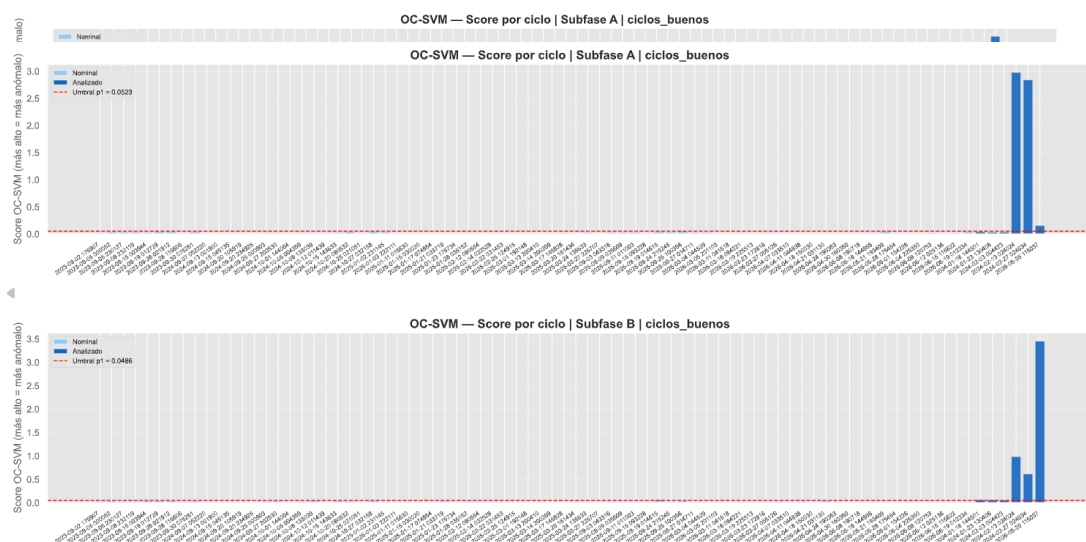


Figura 12. Resultados del OC-SVM para el caso 2

Los resultados del OC-SVM muestran un comportamiento dispar entre ambas casuísticas:

- En el caso 1, el modelo detecta correctamente la degradación progresiva del sistema en los ciclos previos a la fuga de noviembre de 2025, clasificando además correctamente el último ciclo como normal.
- En el caso 2, sin embargo, el modelo genera un falso positivo sobre el ciclo de mayo de 2026, clasificándolo como anómalo cuando debería ser normal. Asimismo, el modelo presenta cierto sobreajuste al asignar puntuaciones muy bajas a los ciclos de

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

entrenamiento y valores muy elevados a los ciclos evaluados, aunque debe tenerse en cuenta que la anomalía del caso 2 fue especialmente severa, ya que hubo que recargar todo el refrigerante.

A pesar de mostrar una capacidad de detección razonable en el caso 1, el falso positivo observado impide clasificarlo como un modelo robusto para este caso de uso.

3.1.2.3 LOF

El LOF (Local Outlier Factor) es un algoritmo de detección de anomalías basado en densidad local. A diferencia de otros algoritmos como el Isolation Forest, que evalúa cada ciclo de forma global, el LOF compara la densidad local de cada ciclo con la de sus vecinos más cercanos. Un ciclo es considerado anómalo cuando su densidad local es significativamente inferior a la de sus vecinos, encontrándose en una región del espacio de características menos poblada que los ciclos que lo rodean.

La principal ventaja de este algoritmo es que es capaz de reconocer múltiples comportamientos normales dentro de un mismo conjunto de entrenamiento, sin tener que ceñirse específicamente a un único comportamiento. El modelo no asume que todos los datos normales forman un único grupo, sino que es capaz de identificar como normales distintos grupos siempre que estos estén suficientemente representados en el conjunto de entrenamiento.

El hiperparámetro más importante de este modelo es k , que define el número de vecinos más cercanos a considerar para calcular la densidad local. Valores bajos de este hiperparámetro hacen que el modelo compare cada ciclo con pocos vecinos, pudiendo dar lugar a *overfitting*. Por otro lado, un valor de k elevado hace que el modelo compare cada ciclo con muchos vecinos, pudiendo dar lugar a *underfitting* ya que el modelo se vuelve demasiado permisivo.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

No obstante, este modelo presenta limitaciones al igual que el resto de modelos de características, ya que sufre de maldición de la dimensionalidad. El concepto de densidad local pierde significado en espacios de dimensiones tan elevadas ya que las diferencias entre distancias tienden a reducirse.

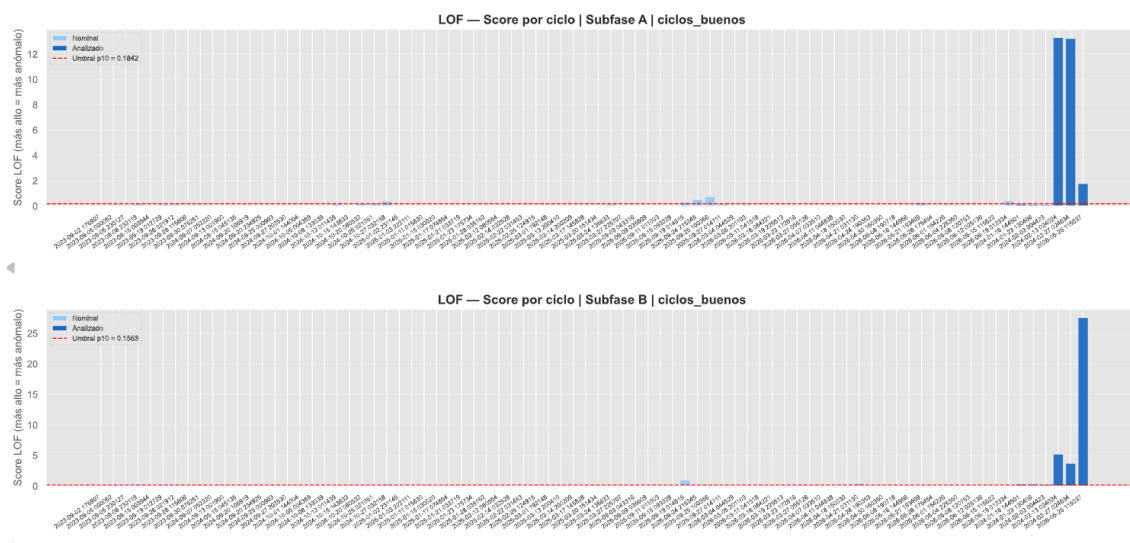


Figura 13. Resultados del LOF para el caso 2

Al igual que el OC-SVM, el LOF detecta correctamente la anomalía progresiva en el caso 1 pero genera un falso positivo sobre el ciclo de mayo de 2026 en el caso 2, además de presentar cierto sobreajuste, por lo que se descarta por los mismos motivos.

3.1.2.4 KPCA

El Kernel PCA es una extensión no lineal del PCA clásico que, mediante el uso de un kernel, proyecta los datos en un espacio de mayor dimensionalidad donde las relaciones no lineales entre variables pueden ser capturadas. La detección de anomalías funciona igual que con el PCA clásico, ya que se basa en el error de reconstrucción al intentar proyectar un ciclo nuevo de vuelta al espacio original: si el ciclo es normal, la reconstrucción es precisa; si es anómalo, el error de reconstrucción es elevado.

La diferencia entre el Kernel PCA y el autoencoder es que este primero es un modelo más sencillo y con menos parámetros, ya que no requiere un proceso de entrenamiento iterativo

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

mediante retropropagación. El autoencoder, sin embargo, aprende la transformación de forma adaptativa a partir de los datos, teniendo una mayor flexibilidad pero también mayor riesgo de sobreajuste con conjuntos de entrenamiento más pequeños. Por esta razón, el Kernel PCA puede resultar más estable que el autoencoder cuando el número de ciclos de entrenamiento es limitado. Adicionalmente, es importante señalar que el Kernel PCA incorpora una reducción de dimensionalidad, lo que lo diferencia del resto de modelos basados en características evaluados en este trabajo, que emplean el vector completo de 142 características.

Los resultados del Kernel PCA muestran un comportamiento similar al de los modelos anteriores: detección correcta de la degradación progresiva en el caso 1 y falso positivo sobre el ciclo de mayo de 2026 en el caso 2 con cierto sobreajuste, por lo que por el momento se descarta este modelo. En las figuras ilustradas a continuación se puede observar este comportamiento del modelo:

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

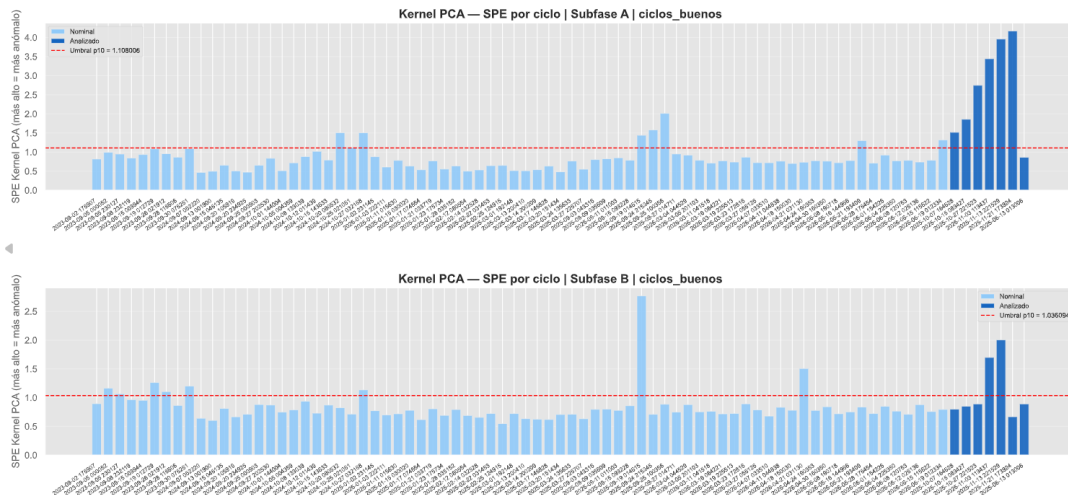


Figura 14. Resultados del Kernel PCA para el caso 1

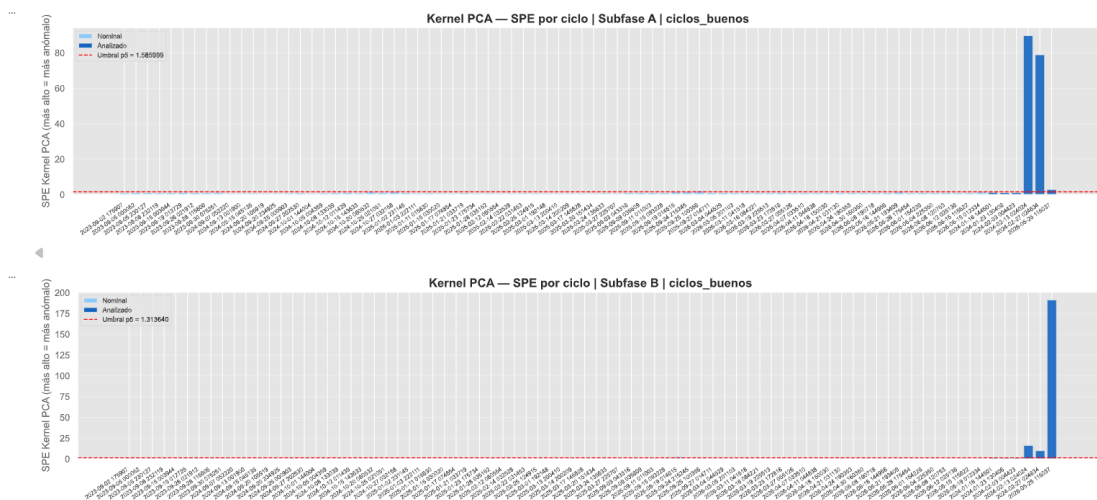


Figura 15. Resultados del Kernel PCA para el caso 2

3.1.2.5 GMM

GMM (Gaussian Mixture Modes) es un modelo probabilístico que representa la distribución de los datos de entrenamiento como una combinación de varias distribuciones gaussianas. A diferencia de Mahalonobis, que asume que los datos siguen una única distribución gaussiana, el GMM permite modelar varios regímenes de comportamiento normal en vez de ceñirse solo a uno. A cada ciclo nuevo que llega para ser evaluado, se le puntúa basándose en la probabilidad de que haya sido generado por alguna de las gaussianas aprendidas durante el entrenamiento.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

El hiperparámetro más relevante de este modelo es el número de componentes gaussianas que determina cuántos grupos de comportamiento normal puede haber. Con pocas componentes el modelo puede no capturar toda la variabilidad del sistema, dando lugar a *underfitting*. Por el contrario, si el número de componentes es demasiado elevado, puede dar lugar a *overfitting*, especialmente si los conjuntos de entrenamiento son de tamaño reducido.

Al igual que Mahalanobis, GMM asume que los datos siguen distribuciones gaussianas, limitando su capacidad en sistemas con otro tipo de distribuciones. No obstante, su capacidad para modelar distintos regímenes de comportamiento normal lo convierte en un modelo más flexible y adecuado en comparación con otros modelos.

No obstante, al evaluar los resultados obtenidos, el modelo presenta un claro problema de sobreajuste independientemente del conjunto de entrenamiento y de los hiperparámetros empleados. El modelo necesita estimar una matriz de covarianza de 142x142 parámetros, lo que requiere muchos más ciclos de entrenamiento que características, de lo cual no se dispone en este contexto. Por este motivo, se descarta como modelo de detección de anomalías para el presente trabajo.

3.1.2.6 Elliptic envelope

Elliptic Envelope es un modelo estadístico que asume que los datos siguen una única distribución gaussiana multivariante, al igual que Mahalanobis, y ajusta un elipsoide que engloba la mayor parte de los ciclos nominales. Un ciclo nuevo se considera anómalo cuando queda fuera del elipsoide, que es cuando su distancia al centroide de los datos de entrenamiento supera cierto umbral.

Este algoritmo tiene una clara ventaja frente a Mahalanobis, que es que incorpora estimadores robustos de la media y la covarianza, siendo menos sensible a que pueda encontrarse algún ciclo anómalo en el entrenamiento. En este trabajo esta es una característica importante ya que no es posible garantizar al 100% que los datos de entrenamiento tienen todos un comportamiento correcto.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Sin embargo, al evaluar este modelo se ha observado un claro problema de sobreajuste independientemente de los hiperparámetros empleados, al igual que se ha dado con el GMM. Con los conjuntos de entrenamiento basados en datos de septiembre, el modelo clasifica todos los ciclos de entrenamiento como normales y todos los ciclos evaluados como anómalos, sin capacidad discriminativa real. Con el conjunto de ciclos buenos la situación mejora ligeramente, aunque los resultados siguen sin ser suficientemente fiables. Por este motivo, se descarta el modelo para los datos actuales, a pesar de poder funcionar correctamente si se dispusiese de más datos de entrenamiento.

3.1.2.7 SVDD

SVDD (Support Vector Data Description) es un modelo similar al OC-SVM, con la diferencia de que en lugar de aprender una frontera de separación respecto al origen del espacio kernel, aprende la hiperesfera de menor radio centrada en los propios datos de entrenamiento que engloba la mayor parte de los ciclos nominales. Un ciclo nuevo se considera anómalo cuando queda fuera de dicha hiperesfera, que es cuando su distancia al centro de la esfera supera el radio aprendido durante el entrenamiento.

El hiperparámetro más relevante en este modelo es el parámetro C, el cual controla el tamaño de la hiperesfera. Un valor bajo de C genera una hiperesfera más pequeña y estricta, aumentando el riesgo de que ciclos normales sean detectados como anómalos. Por el contrario, un valor más alto hace la hiperesfera más permisiva, reduciendo la capacidad discriminativa.

Los resultados ilustrados en las Figuras 16 y 17 muestran que el modelo es capaz de detectar la degradación progresiva del sistema en los ciclos previos a la fuga de noviembre de 2025, con puntuaciones de anomalía que van aumentando progresivamente hasta superar el umbral en los ciclos más cercanos al fallo. Sin embargo, al igual que ocurre con el Kernel PCA, el modelo marca el ciclo de mayo de 2026 como anómalo cuando debería ser normal. Esto parece indicar que el modelo es algo sensible a ciclos que no ha visto durante el entrenamiento, aunque sean perfectamente normales.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

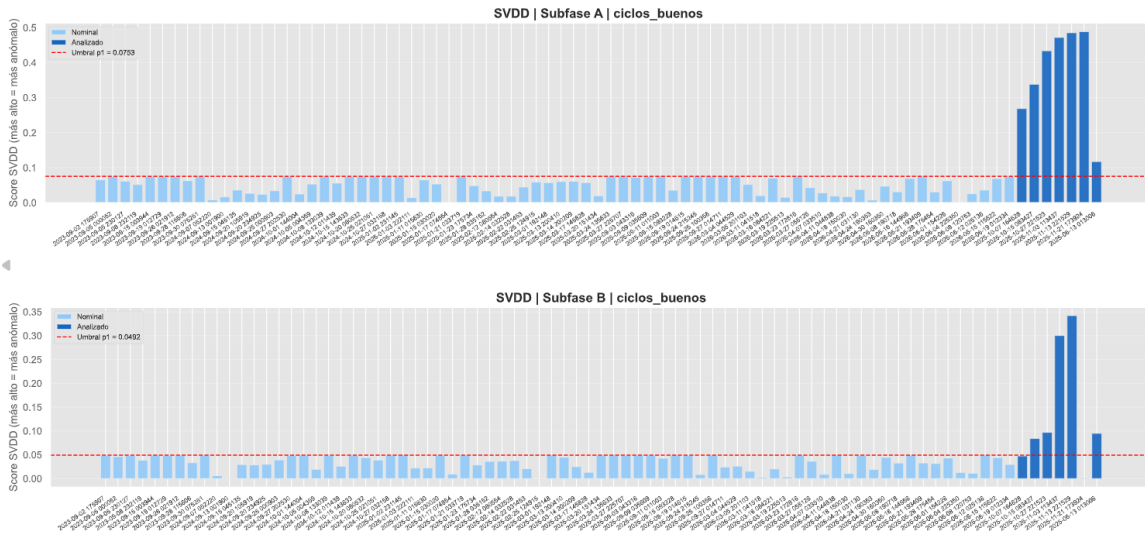


Figura 16. Resultados del SVDD para el caso 1

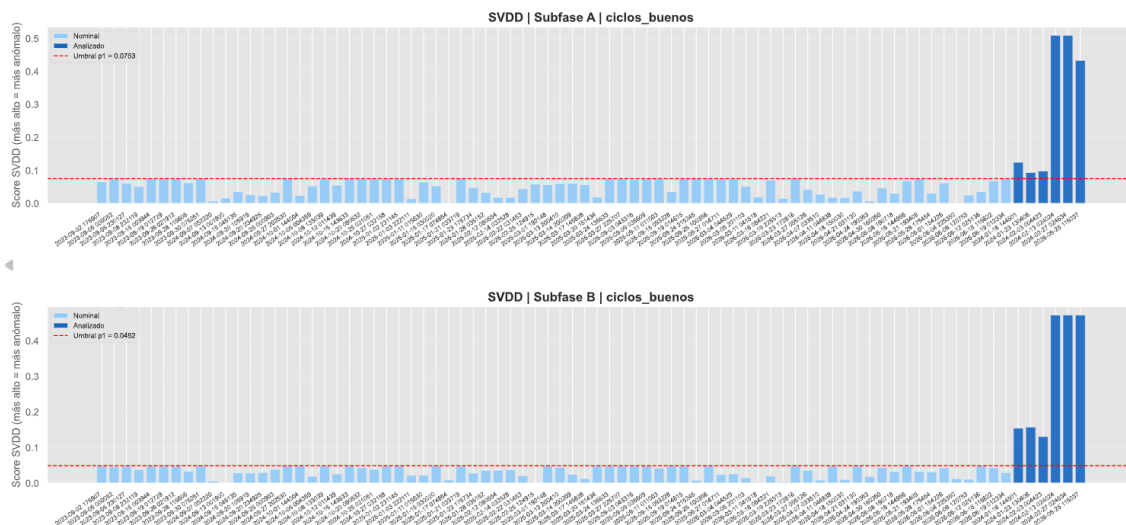


Figura 17. Resultados del SVDD para el caso 2

3.1.3 MODELOS BASADOS EN VENTANAS TEMPORALES

Todos los modelos descritos anteriormente presentan una limitación común: ninguno de ellos tiene en cuenta la evolución temporal del ciclo. Los modelos de instante a instante evalúan cada punto de forma independiente, sin tener en consideración lo que ha ocurrido en los instantes anteriores; mientras que los modelos basados en características resumen el ciclo completo en un vector de estadísticos. Sin embargo, en un sistema termodinámico

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

como el analizado en este estudio, muchas anomalías no se detectan como valores puntuales fuera de rango, sino como patrones temporales extraños.

Para abordar este problema, los modelos de ventana temporal trabajan sobre secuencias de W instantes consecutivos, en dónde cada ventana captura la evolución temporal de las 35 variables durante cada ventana, permitiendo al modelo aprender patrones temporales locales.

Para la construcción de las ventanas de entrenamiento, se extraen ventanas de cada ciclo de forma independiente, con el objetivo de evitar que una ventana contenga instantes de dos ciclos distintos. Una vez extraídas todas las ventanas de los datos de entrenamiento, estas se juntan para formar el conjunto de entrenamiento del modelo.

3.1.3.1 CNN-1D

El CNN-1D Autoencoder es una arquitectura de red neuronal que combina capas convolucionales unidimensionales con la estructura de codificador-decodificador del autoencoder. A diferencia del autoencoder denso, que procesa cada instante de forma independiente, el CNN-1D trabaja sobre ventanas de W instantes consecutivos, aprendiendo patrones temporales locales característicos del comportamiento normal del sistema, tales como formas de onda, pendientes, oscilaciones y transiciones entre estados. Si una ventana tiene un comportamiento extraño, el error de reconstrucción será elevado, indicando un comportamiento probablemente anómalo.

Una arquitectura convolucional tiene una mayor estabilidad con conjuntos de entrenamiento reducidos y un menor coste computacional que una arquitectura recurrente, siendo suficiente para capturar dependencias temporales de corto alcance como picos o pendientes bruscas. Las dependencias temporales de mayor alcance son abordadas por el modelo LSTM Autoencoder descrito en el siguiente apartado.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

El tamaño de la ventana temporal W es el hiperparámetro más relevante de este modelo, ya que determina el alcance temporal que el modelo es capaz de capturar. Una ventana demasiado pequeña puede no detectar patrones que se manifiestan en ventanas más largas, mientras que una ventana demasiado grande aumenta el coste computacional y puede dificultar el aprendizaje de patrones locales.

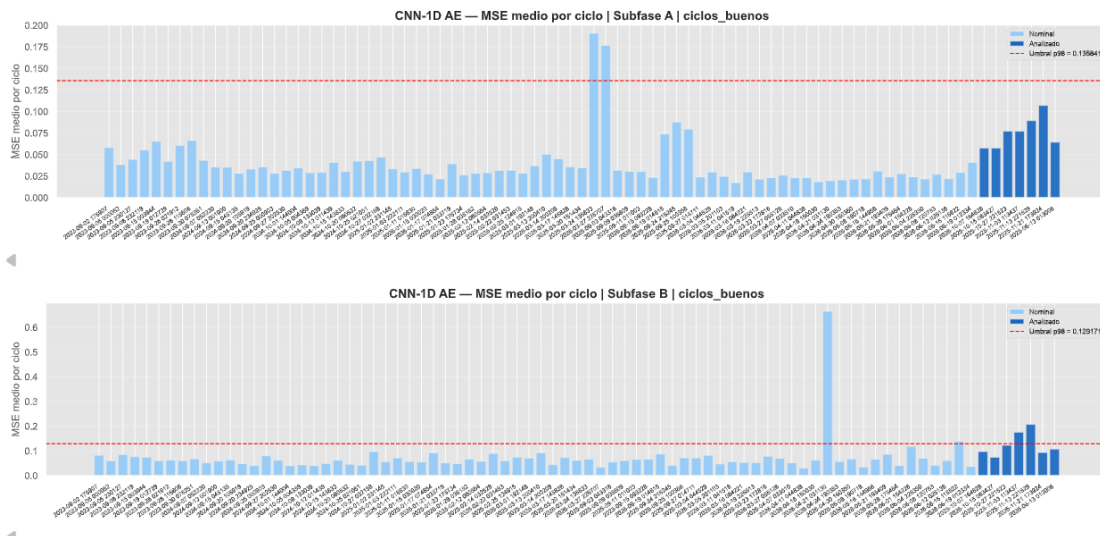


Figura 18. Resultados del CNN-1D AE para el caso 1

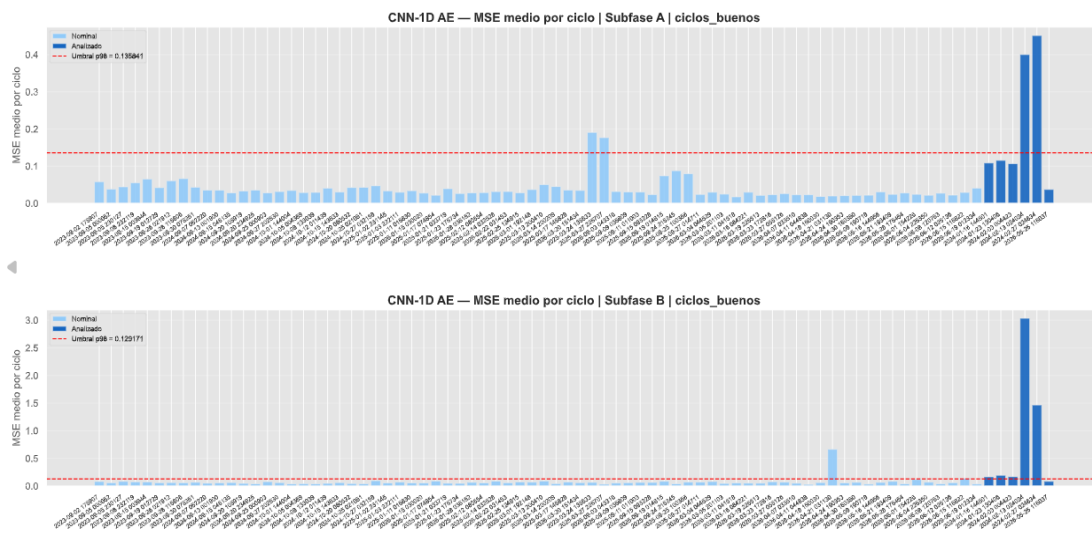


Figura 19. Resultados del CNN-1D AE para el caso 2

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

3.1.3.2 LSTM AE

El LSTM AE (Long Short-Term Memory Autoencoder) es una arquitectura que combina la estructura de codificados-decodificador del autoencoder con capas recurrentes LSTM, diseñadas para capturar dependencias temporales de largo alcance. A diferencia del CNN-1D, este modelo es capaz de aprender cómo evoluciona el sistema a lo largo del tiempo.

Al igual que en el modelo anterior, la detección de anomalías se basa en el error de reconstrucción de cada ventana. Sin embargo, el LSTM emplea ventanas de mayor tamaño pudiendo aprender mejor las dependencias entre variables. Esta característica hace a este modelo especialmente bueno para la subfsae B de los ciclos a analizar, ya que las secuencias son más largas y se pueden detectar anomalías como desviaciones graduales en el comportamiento estacionario. No obstante, las anomalías con periodicidad superior al tamaño de la ventana, como pueden ser oscilaciones con periodo superior a 2 minutos, pueden no ser detectadas por este modelo. Para este tipo de situaciones, los modelos basados en características son una mejor opción.

El hiperparámetro más crítico de este modelo es el número de unidades de las capas LSTM (32 y 16 unidades en el codificador), que determina la capacidad del modelo para aprender representaciones temporales complejas. La arquitectura empleada es compacta, con el objetivo de maximizar la estabilidad del entrenamiento con los conjuntos de datos disponibles. Este modelo es especialmente sensible al tamaño del conjunto de entrenamiento, siendo el conjunto de ciclos buenos el más adecuado para garantizar un entrenamiento estable, y por lo tanto el conjunto que se empleará para entrenamiento.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

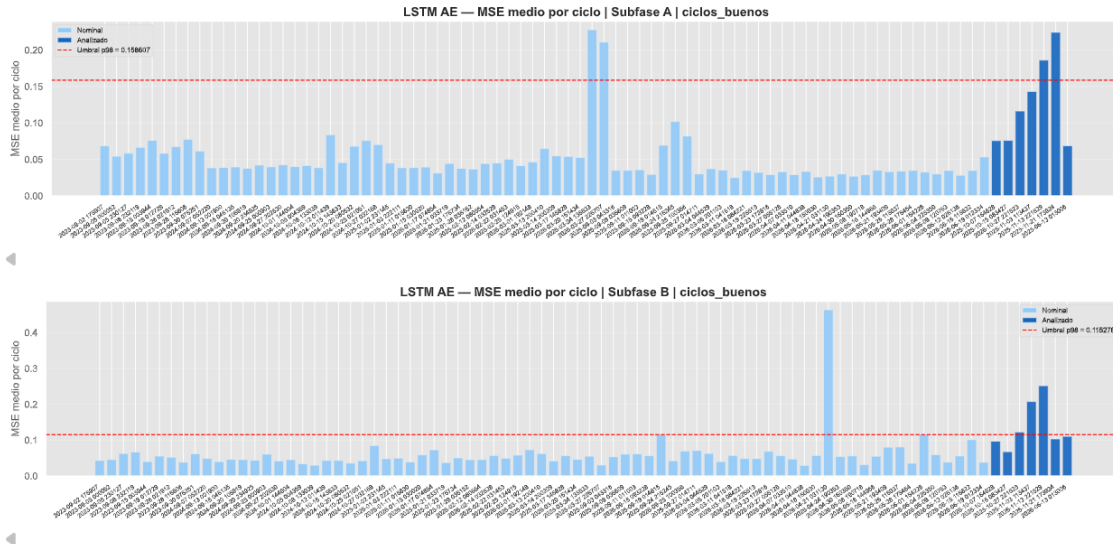


Figura 20. Resultados del LSTM AE para el caso 1

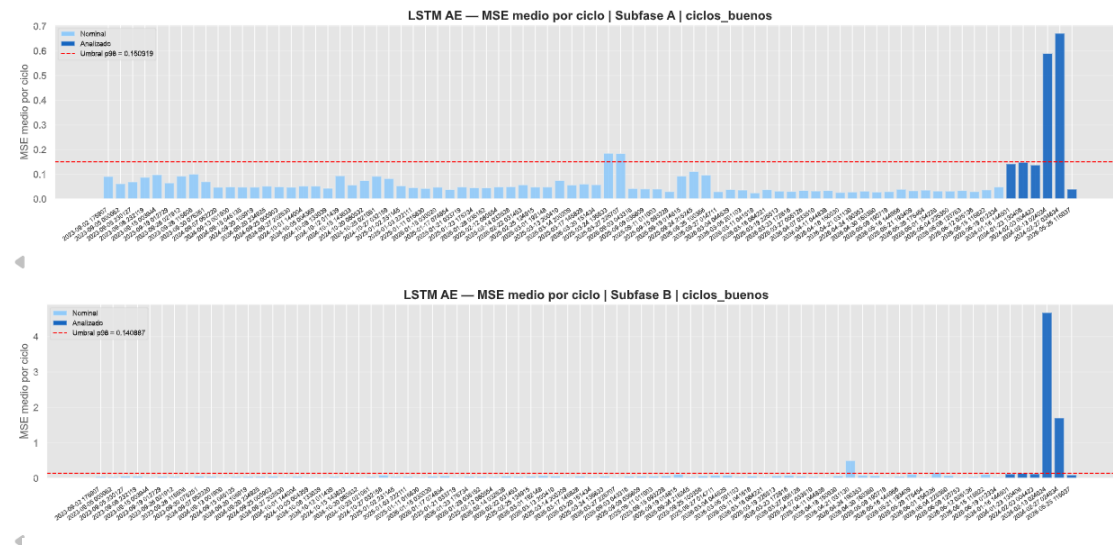


Figura 21. Resultados del LSTM AE para el caso 2

*ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR
HERE.*

Capítulo 4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Tras evaluar los resultados de los diferentes modelos para las distintas casuísticas, se ha decidido descartar los siguientes modelos:

- **PCA + SPE/T²**: descartado por su asunción de linealidad entre las variables.
- **Distancia de Mahalanobis**: descartado por su asunción de linealidad y distribución gaussiana multivariante.
- **SGD OC-SVM**: descartado por no contar con suficiente capacidad discriminativa.
- **Isolation Forest**: descartado por no contar con suficiente capacidad discriminativa debido a la maldición de la dimensionalidad
- **OC-SVM, LOF, Kernel PCA, SVDD**: descartados por detectar un falso positivo en un comportamiento claramente normal del sistema, además de presentar cierto sobreajuste.
- **GMM, Elliptic Envelope**: descartados por presentar un claro sobreajuste al por la dificultad de estimar los parámetros de las distribuciones gaussianas y la matriz de covarianza no es viable con estas dimensiones.

Por lo que respecta a la diferencia entre las subfases, lo que se ha observado a lo largo del desarrollo del proyecto es que las anomalías tienden a detectarse mejor durante la subfase A. Además, por lo general los modelos las detectan de manera parecida, no se ha encontrado especialmente algún caso en el cual un modelo detecte perfectamente la subfase b y otro la subfase A.

Se ha demostrado que los algoritmos que emplean el autoencoder como base del modelo presentan los mejores resultados, ya que detectan las anomalías sin ningún problema, mientras que a su vez carecen prácticamente de falsos positivos. Por este motivo, se han seleccionado dichos modelos como los más adecuados para la detección de anomalías en este sistema.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

En concreto se destaca el correcto funcionamiento del CNN-1D AE y del LSTM AE, ya que, a pesar de que el autoencoder denso funciona muy bien, es cierto que en la Subfase B del caso 1 no detecta realmente la anomalía.

A continuación se muestran los resultados obtenidos para el LSTM AE para los tres conjuntos de entrenamiento. En el primero conjunto de entrenamiento se puede observar un claro sobreajuste del modelo, en el segundo conjunto de entrenamiento funciona bastante bien, pero es cierto que el número de ciclos para entrenar el modelo es bastante limitado, y el tercer conjunto de entrenamiento con todos los ciclos buenos es el visto anteriormente.

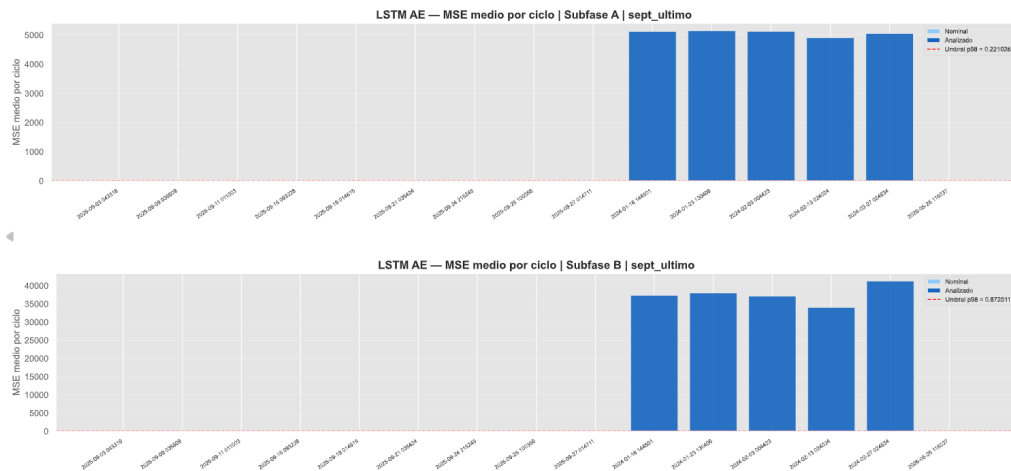


Figura 22. Resultados LSTM con el training set de último septiembre

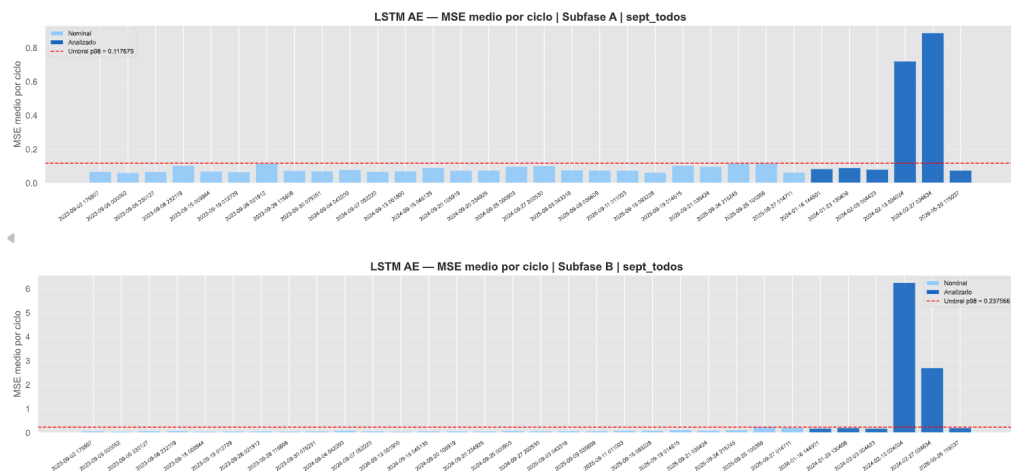


Figura 23. Resultado del LSTM AE con el training set de todos los septiembres

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

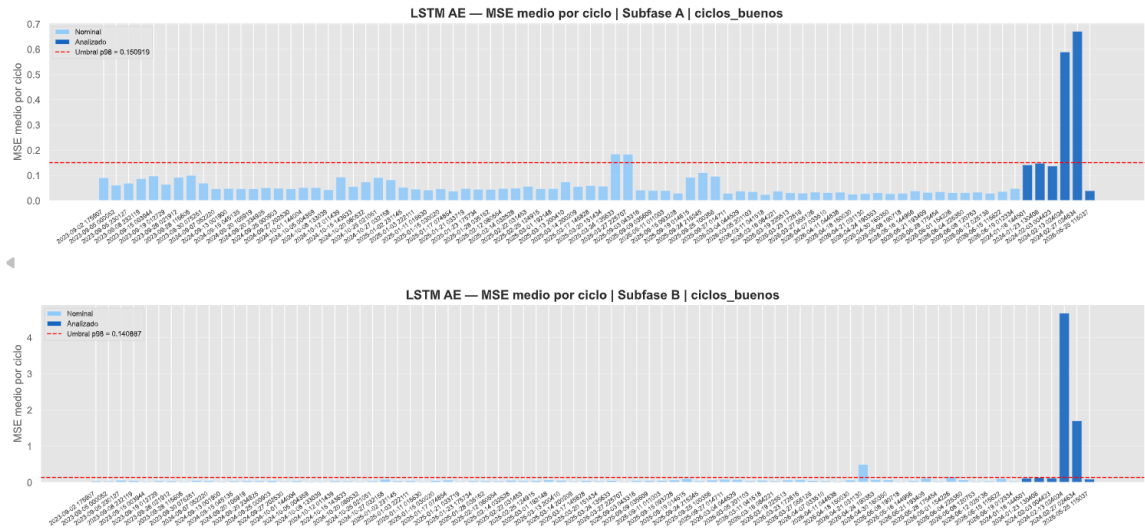


Figura 24. Resultado del LSTM AE con el training set de todos los ciclos buenos

*ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR
HERE.*

Capítulo 5. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

El objetivo principal de este trabajo ha sido desarrollar un sistema de detección de anomalías para el sistema de refrigeración en el proceso de liofilización mediante técnicas de machine learning. Para ello, se ha llevado a cabo el preprocesado y el análisis exploratorio de los datos de proceso, el diseño de diferentes modelos de detección de anomalías y la evaluación del rendimiento de cada modelo en base a dos casuísticas reales.

Los resultados obtenidos concluyen que los objetivos planteados al inicio del proyecto se han alcanzado de manera satisfactoria. Se ha demostrado que los modelos basados en autoencoder son los mejores para la detección de anomalías en este caso. Entre ellos, el CNN-1D AE y el LSTM AE han demostrado obtener los mejores resultados.

No obstante, este trabajo presenta un margen de mejora abriendo diversas líneas de investigación futuras, entre ellas las siguientes:

- Automatización del proceso de adquisición de datos, ya que actualmente es realizado mediante PI Datalink transfiriendo los datos a un .csv, lo cual limita la escalabilidad del proyecto.
- Extender el trabajo a otros liofilizadores de la planta, así como otras fases del proceso de liofilización que se comporte de manera similar.
- También sería conveniente ampliar el conjunto de datos de entrenamiento según se van produciendo más ciclos con comportamiento correcto a lo largo del tiempo. Un mayor volumen de datos permitiría mejorar la robustez y la capacidad de generalización de los modelos.
- Validar el sistema frente a un mayor número de casuísticas y tipos de anomalías.
- Implementar el sistema para la monitorización en tiempo real dando lugar a un mantenimiento predictivo de los equipos.

ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR HERE.

Capítulo 6. BIBLIOGRAFÍA

- [2] AVEVA. “AVEVA PI System”, AVEVA Official Website. aveva.com/en/info/aveva-pi-system
- [3] AVEVA. “PI Server Data Sheet”, AVEVA Documentation. aveva.com/content/dam/aveva/documents/perspectives/datasheets/Datasheet_PIServer.pdf
- [4] AVEVA. “PI Connector for OPC UA (Gen 1) Documentation”, AVEVA Documentation. docs.aveva.com/bundle/pi-connector-for-opc-ua-gen-1/page/1024536.html
- [5] AVEVA. “PI Vision Data Sheet”, AVEVA Documentation. aveva.com/content/dam/aveva/documents/perspectives/datasheets/Datasheet_PIVision.pdf
- [6] Ynzunza Cortés, C. B.; Izar Landeta, J. M.; Bocarando Chacón, J. G.; Aguilar Pereyra, F.; Larios Osorio, M. “El Entorno de la Industria 4.0: Implicaciones y Perspectivas Futuras”, *Conciencia Tecnológica*, núm. 54, 2017, Instituto Tecnológico de Aguascalientes, México. Disponible en: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=94454631006>.
- [7] Satwaliya, D. S.; Thethi, H. P.; Dhyani, A.; Kiran, G. R.; Al-Tae, M.; Alazzam, M. B. “Predictive Maintenance using Machine Learning: A Case Study in Manufacturing Management”, *2023 3rd International Conference on Advance Computing and Innovative Technologies in Engineering (ICACITE)*, Greater Noida, India, 2023, pp. 872-876. doi: 10.1109/ICACITE57410.2023.10183012.
- [8] Holly, S.; Heel, R.; Katic, D.; Schoeffl, L.; Stiftinger, A.; Holzner, P.; Kaufmann, T.; Haslhofer, B.; Schall, D.; Heitzinger, C.; Kemnitz, J. "Autoencoder based Anomaly Detection and Explained Fault Localization in Industrial Cooling Systems", *European Conference of the Prognostics and Health Management Society 2022*. arXiv:2210.08011.
- [9] Jin, X.; Chow, T. W. S. "Anomaly Detection of Cooling Fan and Fault Classification of Induction Motor using Mahalanobis–Taguchi System", *Expert Systems with Applications*, vol. 40, núm. 15, pp. 5787-5795, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2013.04.024>.
- [10] Zipfel, J.; Verworner, F.; Fischer, M.; Wieland, U.; Kraus, M.; Zschech, P. "Anomaly Detection for Industrial Quality Assurance: A Comparative Evaluation of Unsupervised Deep Learning Models", *Computers & Industrial Engineering*, vol. 177, 109045, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.cie.2023.109045>.

***ERROR! USE THE HOME TAB TO APPLY TÍTULO 1 TO THE TEXT THAT YOU WANT TO APPEAR
HERE.***

- [11] Nassif, A. B.; Talib, M. A.; Nasir, Q.; Dakalbab, F. M. "Machine Learning for Anomaly Detection: A Systematic Review", *IEEE Access*, vol. 9, pp. 78658–78700, 2021.
<https://doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3083060>.
- [12] Blázquez-García, A.; Conde, A.; Mori, U.; Lozano, J. A. "A Review on Outlier/Anomaly Detection in Time Series Data", *ACM Computing Surveys*, vol. 54, núm. 3, 2021.
<https://doi.org/10.1145/3444690>
- [13] [Ref] Liu, F. T.; Ting, K. M.; Zhou, Z. H. "Isolation Forest", *2008 Eighth IEEE International Conference on Data Mining*, pp. 413–422, 2008.
<https://doi.org/10.1109/ICDM.2008.17>