

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

FACULTAD DE INFORMÁTICA

INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA LA
PREDICCIÓN Y CONTROL DEL ACABADO
SUPERFICIAL EN PROCESOS DE FRESADO
A ALTA VELOCIDAD

TESIS DOCTORAL

MARITZA CORREA VALENCIA

INGENIERO INDUSTRIAL

2010



Departamento de Inteligencia Artificial
Facultad de Informática

INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA LA PREDICCIÓN Y CONTROL DEL ACABADO SUPERFICIAL EN PROCESOS DE FRESADO A ALTA VELOCIDAD

Maritza Correa Valencia
Ingeniero Industrial

Directores:
Concepción Bielza Lozoya
Doctora en Informática
José Ramón Alique López
Doctor en Ciencias Físicas

2010

INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA LA PREDICCIÓN Y CONTROL DEL
ACABADO SUPERFICIAL EN PROCESOS DE FRESADO A ALTA
VELOCIDAD

Maritza Correa Valencia

Tribunal:

Presidente: D. Pedro Larrañaga Mugica

Vocales: D. João Gama
D. Joaquim De Ciurana Gay
D. Carlos Vila Pastor

Secretario: D. Juan Antonio Fernández del Pozo de
Salamanca

Suplentes: Dña. Teresa de Pedro Lucio
D. Manuel Gómez Olmedo

Acuerdan otorgar la calificación de:

Madrid, 28 de Mayo de 2010

*A mis padres: Alvaro y Rosalba, a mi hermana Sandra Bibiana
por su amor, confianza y apoyo constante e incondicional.*

Agradecimientos

Éste es un trabajo que me ha llevado varios años y por consiguiente hay muchas personas que me han acompañado y a quienes quiero dar las gracias. Estos agradecimientos van dirigidos a todos quienes de una u otra forma han colaborado para que esta tesis sea una realidad, perdonadme si dejo a alguien en el tintero, apelo a vuestra comprensión.

Voy a empezar por Concha Bielza, mi directora de tesis en la Universidad Politécnica de Madrid, artífice de que este trabajo haya llegado a buen fin. Es indudable que sin su buena guía y exigencia no hubiese conseguido finalizar esta investigación. Han sido muchos días los que ha dedicado a trabajar conmigo, algunas veces sacrificando tiempo de su descanso. Otras muchas me ha escuchado pacientemente no sólo sobre mis problemas en el desarrollo de la tesis, sino también sobre mi vida personal. Por estas y muchas otras razones, muchas gracias Concha.

Con mi otro director de tesis, José Ramón Alique, del Instituto de Automática Industrial, he tenido discusiones muy valiosas. Me ha brindado su apoyo y un entorno de trabajo óptimo para el desarrollo de esta tesis. Además, he tenido la suerte de pertenecer al grupo GAMHE que cuenta con una infraestructura excelente para el desarrollo de mi trabajo y un equipo humano muy profesional, quienes me han ayudado en el progreso de la tesis. Hemos compartido muchas reuniones técnicas y otras no tan técnicas. A Rodolfo, Raúl, Agustín, Fernando. A los compañeros del último año, sin olvidar a los anteriores miembros del grupo. A todos, gracias.

Otra persona muy importante para mí en estos años ha sido Pedro Larrañaga. Él fue pilar fundamental del último capítulo de esta tesis, relacionado con la optimización multiobjetivo, y otra base, a través de sus conferencias, libros y artículos, de mi formación en aprendizaje supervisado.

Estoy muy agradecida a Jorge Pamies (UNL, Portugal) y Endika Bengoetxea (Comisión Europea), quienes emitieron los informes como expertos externos de la tesis, que eran un requisito para el doctorado europeo.

También merecen mención especial quienes me brindaron ayuda desde su perspectiva mecánica en la evolución de esta investigación. Del ITESM (Méjico), Miguel Ramírez, con quien empecé la fase experimental, y Antonio Vallejo, de quien aprendí mucho, no sólo por sus conocimientos mecánicos sino por la forma ordenada y meticulosa de trabajo en el laboratorio.

Por otro lado, quiero manifestar un agradecimiento muy especial a João Gama quien me acogió en su grupo de investigación durante mi estancia

en Oporto de Septiembre a Diciembre de 2007. Me proporcionó ideas y opiniones muy constructivas en una fase crítica de este trabajo. A todos los miembros del LIACC, en especial a Rita, Pedro y Raquel. Compartimos muchos días de trabajo. Adicionalmente se unieron Jorge, Claudia y Eduardo, convirtiéndose todos ellos en el grupo embajador de Portugal. *Foi um prazer trabalhar e partilhar com vocês, obrigado meus amigos.*

También quiero dar las gracias a Carmen Lacave, de la UCLM, quien a través de muchos emails y alguna visita a Ciudad Real, me aclaró muchas dudas e hizo posible la mejor comprensión de mis primeros modelos de predicción del acabado superficial. Manuel Luque, de la UNED, también me ayudo mucho en mi inicio en este tema. Él me brinda su apoyo, no solo profesional, sino personal durante un período del desarrollo de esta tesis.

Especial gratitud a mis amigos, consejeros y soporte en algunas etapas en que estuve a punto de “tirar la toalla”, especialmente a Aridany, quien me ha ayudado enormemente, entre otras cosas con su magnífica *chikiteadora*.

Por último, mi familia, quienes a pesar de la distancia han sido fundamentales como apoyo a mi esfuerzo. Doy las gracias a mis padres Alvaro y Rosalba, y a mi hermana Sandra Bibiana, a quienes va dedicado este trabajo. A Alexis, por brindarme su alegría y darme estabilidad cuando más lo he necesitado. Él ha sido mi pilar emocional en estos 2 últimos y duros años. Gracias por estar ahí y aguantar pacientemente, en especial sacrificando la cantidad de tiempo que no pudimos estar juntos para poder alcanzar esta anhelada meta.

Resumen

El objetivo principal de esta tesis doctoral es profundizar en el análisis y diseño de un sistema inteligente para la predicción y control del acabado superficial en un proceso de fresado a alta velocidad, basado fundamentalmente en clasificadores Bayesianos, con el propósito de desarrollar una metodología que facilite el diseño de este tipo de sistemas.

El sistema, cuyo propósito es posibilitar la predicción y control de la rugosidad superficial, se compone de un modelo aprendido a partir de datos experimentales con redes Bayesianas, que ayudará a comprender los procesos dinámicos involucrados en el mecanizado y las interacciones entre las variables relevantes.

Dado que las redes neuronales artificiales son modelos ampliamente utilizados en procesos de corte de materiales, también se incluye un modelo para fresado usándolas, donde se introduce la geometría y la dureza del material como variables novedosas hasta ahora no estudiadas en este contexto. Por lo tanto, una importante contribución en esta tesis son estos dos modelos para la predicción de la rugosidad superficial, que se comparan con respecto a diferentes aspectos: la influencia de las nuevas variables, los indicadores de rendimiento y la interpretabilidad.

Uno de los principales problemas en la modelización con clasificadores Bayesianos es la comprensión de las enormes tablas de probabilidad a posteriori producidas. Introducimos un método de explicación que genera un conjunto de reglas obtenidas de árboles de decisión. Estos árboles son inducidos a partir de un conjunto de datos simulados generados de las probabilidades a posteriori de la variable clase, calculadas con la red Bayesiana aprendida a partir de un conjunto de datos de entrenamiento.

Por último, contribuimos en el campo multiobjetivo en el caso de que algunos de los objetivos no se puedan cuantificar como números reales, sino como intervalos de valores. Esto ocurre a menudo en aplicaciones de aprendizaje automático, especialmente las basadas en clasificación supervisada. En concreto, se extienden las ideas de dominancia y frontera de Pareto a esta situación. Se analiza su aplicación a la predicción de la rugosidad superficial en el caso de maximizar al mismo tiempo la sensibilidad y la especificidad del clasificador Bayesiano inducido, en vez de maximizar sólo la tasa de clasificaciones correctas. Los intervalos de estos dos objetivos provienen de un método de estimación honesta de ambos, como e.g. validación cruzada en k rodajas o bootstrap.

Abstract

The main objective of this PhD Thesis is to go more deeply into the analysis and design of an intelligent system for surface roughness prediction and control in the end-milling machining process, based fundamentally on Bayesian network classifiers, with the aim of developing a methodology that makes easier the design of this type of systems.

The system, whose purpose is to make possible the surface roughness prediction and control, consists of a model learnt from experimental data with the aid of Bayesian networks, that will help to understand the dynamic processes involved in the machining and the interactions among the relevant variables.

Since artificial neural networks are models widely used in material cutting processes, we also include an end-milling model using them, where the geometry and hardness of the piecework are introduced as novel variables not studied so far within this context. Thus, an important contribution in this thesis is these two models for surface roughness prediction, that are then compared with respect to different aspects: influence of the new variables, performance evaluation metrics, and interpretability.

One of the main problems with Bayesian classifier-based modelling is the understanding of the enormous posterior probability tables produced. We introduce an explanation method that generates a set of rules obtained from decision trees.

Such trees are induced from a simulated data set generated from the posterior probability distribution of the class variable, calculated with the Bayesian network learned from a training data set.

Finally, we contribute in the multi-objective field in the case that some of the objectives cannot be quantified as real numbers but as interval-valued functions. This often occurs in machine learning applications, especially those based on supervised classification. Specifically, the dominance and Pareto front ideas are extended to this setting. We analyze its application to the surface roughness prediction when maximizing simultaneously the sensitivity and specificity of the induced Bayesian network classifier, rather than only maximizing the correct classification rate. Intervals in these two objectives come from an honest estimation method of both objectives, like e.g. k-fold cross-validation or bootstrap.

Índice general

Índice general	v
1 INTRODUCCIÓN	1
1.1. Justificación	2
1.1.1. Máquina-herramienta en España	2
1.2. Objetivos	3
1.2.1. Objetivo general	3
1.2.2. Objetivos específicos	4
1.3. Metodología	5
1.3.1. Fundamentos teóricos	5
1.3.2. Trabajo experimental	5
1.3.3. Propuesta de modelo	7
1.3.4. Análisis de resultados	7
1.4. Estructura de la tesis	7
2 MECANIZADO A ALTA VELOCIDAD	11
2.1. Introducción	11
2.2. Nociones básicas del MAV	12
2.2.1. Mecanizado a alta velocidad	13
2.2.2. Factores del desarrollo del MAV	14
2.2.3. Proceso de arranque de viruta	16
2.3. Proceso de fresado	21
2.3.1. Condiciones de mecanizado	21
2.4. Calidad superficial en MAV	24
2.4.1. Parámetros para evaluar el acabado superficial	25
2.4.2. Métodos de medida del acabado superficial	27
2.4.3. Factores que influyen en la calidad superficial	31

2.5. Inteligencia artificial para predecir la calidad superficial	34
2.5.1. Técnicas más comunes usadas actualmente	35
2.6. Necesidad de modelos predictivos de calidad superficial	44
2.6.1. Modelos analíticos frente a modelos empíricos	45
2.6.2. Modelos estadísticos frente a modelos con IA	45
2.6.3. Modelos de redes Bayesianas	45
2.7. Conclusiones del capítulo	46
3 CLASIFICADORES BAYESIANOS PARA MODELIZAR Ra	47
3.1. Introducción	47
3.2. Experimentación	47
3.2.1. Preliminares	47
3.2.2. Plataforma experimental	48
3.2.3. Preprocesamiento de la señal	52
3.2.4. Planificación del experimento	53
3.3. RB como modelos predictivos de Ra	54
3.3.1. Clasificación supervisada	55
3.3.2. Redes Bayesianas para clasificación	56
3.3.3. Primera aproximación usando redes Bayesianas	58
3.3.4. Caso 1: Aprendiendo un clasificador naïve Bayes	61
3.3.5. Caso 2. Aprendiendo un clasificador TAN	63
3.3.6. Respuesta al ingreso de evidencia	65
3.4. Conclusiones del capítulo	68
4 REDES NEURONALES ARTIFICIALES PARA MODELIZAR Ra	71
4.1. Introducción	71
4.2. Modelizando Ra usando redes neuronales artificiales	72
4.2.1. Algoritmo <i>backpropagation</i>	72
4.2.2. Diseño experimental fraccional	73
4.2.3. Diseño experimental RSM	76
4.3. Modelizando Ra usando redes Bayesianas	81
4.4. Redes Bayesianas vs. redes neuronales artificiales	84
4.4.1. Medidas de rendimiento	84
4.4.2. Precisión de la clasificación	84

4.4.3.	Interpretabilidad	89
4.5.	Conclusiones del capítulo	90
5	EXPLICACIÓN DE UN CLASIFICADOR BAYESIANO MEDIANTE UN ÁRBOL DE DECISIÓN	93
5.1.	Introducción	94
5.2.	Explicación de una red Bayesiana: estado del arte	96
5.3.	Metodología propuesta para la explicación	101
5.3.1.	Entrenamiento de un clasificador Bayesiano	101
5.3.2.	Generación de datos de la distribución de probabilidad a posteriori de la variable clase	102
5.3.3.	Construcción de un árbol de decisión y sus reglas	103
5.4.	Aplicación a la modelización de <i>Ra</i>	104
5.5.	Conclusiones del capítulo	110
6	CLASIFICADORES BAYESIANOS MULTIOBJETIVO	111
6.1.	Incertidumbre, aprendizaje y optimización multiobjetivo: estado del arte	112
6.2.	El problema de optimización multiobjetivo	115
6.2.1.	Definición del problema	115
6.3.	Conceptos de Pareto en optimización multiobjetivo	115
6.4.	Conceptos de Pareto en optimización multiobjetivo con algunos objetivos dados en intervalos	116
6.5.	Resultados teóricos sobre el efecto del grado de dominancia α y nivel de confianza γ	118
6.6.	Aplicación a la predicción de <i>Ra</i>	121
6.6.1.	Efecto de α -dominancia en la predicción de la rugosidad superficial	121
6.6.2.	Ejemplo de la elección de un modelo óptimo	140
6.7.	Conclusiones del capítulo	143
7	CONCLUSIONS AND FUTURE WORK	145
7.1.	Conclusions	145
7.2.	Future work	149
	Bibliografía	151

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

La fabricación es de vital importancia en la Unión Europea debido a que genera alrededor de 27 millones de empleos y representa el 22% del PIB de la región. Dentro de la industria manufacturera, los procesos de mecanizado constituyen una etapa esencial puesto que son procesos muy utilizados y de los más críticos, en los cuales es imprescindible el uso de máquinas-herramienta.

Consultando a CECIMO (Asociación Europea de Fabricantes de MáquinaHerramienta), la demanda europea de máquina-herramienta en 2007 fue particularmente fuerte en los sectores de la energía (electricidad, nuclear, eólica), transporte (automoción, ferrocarril y marítimo) y en los sectores de ingeniería mecánica. Según palabras de Javier Eguren, presidente de CECIMO: *“Una vez más, la industria de máquinas-herramienta ha demostrado su condición de impulsora de la tecnología para la fabricación eficiente de bienes de consumo y capital (aviones, coches, trenes, teléfonos, sistemas de generación de energía, etc)”*.

Un aspecto que despertó gran atención en la feria internacional EMO (Exposición mundial de máquina-herramienta) 2007 en Hannover, apreciada como la principal feria para la máquina-herramienta y considerada la cumbre mundial del sector, fue el relativo al interés de los participantes en cuanto a técnicas y “prestaciones específicas” de las máquinas-herramienta.

Es de reseñar que España es el cuarto país productor de máquina-herramienta de la Unión Europea y el décimo del mundo, consultado en el informe de la asamblea general de primavera CECIMO - 2008.

1.1. Justificación

El interés de investigar en este área tiene dos apreciaciones principales:

- Desde el punto de vista científico, los procesos de mecanizado son muy atractivos ya que se caracterizan ante todo por su complejidad. La incertidumbre (vaguedad y ambigüedad), el conocimiento incompleto y las no-linealidades son algunas de sus características inherentes.
- Otra razón fundamental para investigar en esta área es su importancia industrial. En EEUU, por ejemplo, hay funcionando actualmente 2.5 millones de máquinas-herramienta. Los procesos de mecanizado representan el 20 % del coste total de toda la industria manufacturera. Por otra parte, en España el sector de la máquina-herramienta corresponde al 2.8 % de todas las máquinas producidas en el mundo de las cuales el 60 % se exporta a países de la Unión Europea.

1.1.1. Máquina-herramienta en España

Los fabricantes de máquina-herramienta están sometidos cada día a una competencia más feroz. Esta competencia se extiende también a la industria manufacturera española, cada día con más problemas para mantener su actividad en España ante la competencia de países como China o India, con tecnologías apreciables y mano de obra sumamente barata. Dotar a las máquinas-herramienta españolas de nuevas y exclusivas prestaciones constituiría el mejor argumento de venta en un mercado cada día más globalizado.

Esto se ha acentuado en los últimos años al haberse pasado de la producción en masa a la “personalización en masa”. Ya no se venden máquinas, ni siquiera procesos. Hoy se compran piezas, es decir, producción. El nuevo paradigma de mecanizado consistirá en “maximizar la tasa de arranque de material (TAM), minimizando la tasa de desgaste de la herramienta y manteniendo la calidad, tanto superficial como dimensional, de todas las piezas mecanizadas dentro de unas especificaciones deseadas” [de Lacalle y otros, 2004]. Éste será el objetivo a alcanzar en los próximos años en la automatización de los procesos de mecanizado. La productividad ya no es la única exigencia en el proceso. Hoy, la calidad constituye un objetivo esencial si no se quieren producir lotes completos

de piezas defectuosas [Contero y otros, 2002]. El lema *right first time* constituye una prioridad a nivel mundial.

Las numerosas exigencias impuestas a los sistemas de producción actuales han contribuido a que la industria se dirija hacia la automatización y el mecanizado desatendido para incrementar la productividad y fiabilidad, minimizando así los costes.

A fecha de hoy no se conoce un sistema que dé solución real al problema de predicción “en-proceso” del acabado superficial para fresado a alta velocidad y menos aún el planteamiento de un modelo que no esté referenciado solamente a una prueba de laboratorio. Es decir, un sistema capaz de predecir el acabado superficial de una pieza *durante* su fabricación y haciendo pruebas de laboratorio sobre, por ejemplo, diferentes durezas de material mecanizando geometrías diferentes.

Por lo anteriormente expuesto surge la motivación de esta investigación, en la que se busca alcanzar los objetivos que se detallan a continuación.

1.2. Objetivos

1.2.1. Objetivo general

El trabajo presentado en esta tesis se enmarca en el área de modelización y reconocimiento de patrones. Básicamente se plantea como objetivo fundamental la supervisión inteligente de un proceso complejo basada en modelos, desarrollando una metodología para la medición “en-proceso” del acabado superficial en una operación de fresado a alta velocidad. Para conseguirlo se utilizan métodos basados en aprendizaje automático que involucran el conocimiento del experto con el conocimiento físico del proceso, unido además a una técnica de fusión de sensores para identificar y conocer señales propias del corte de metales.

Para dar mayor claridad a este documento se presentan los tipos de variables a usar en adelante.

Las condiciones de corte son las que se pueden definir antes del proceso, como la tasa de avance, velocidad de rotación del husillo, profundidad de corte, etc. Los parámetros de corte son datos que pueden cambiarse en función de los cuales se pueden explicar características básicas del proceso, como por ejemplo la dureza del material a mecanizar. Las variables de estado son las que caracterizan la situación en etapas sucesivas del proceso, sujetas a los cambios que influyen en su condición. Algunas de ellas son las fuerzas,

vibraciones, aceleraciones, etc. Finalmente, las variables geométricas se refieren a la geometría de la pieza a mecanizar, como rectas, concavidades y convexidades.

1.2.2. Objetivos específicos

- Desde el punto de vista técnico, el objetivo primordial es contribuir a resolver el problema de la limitación de la productividad asociada a la calidad preestablecida por la industria, asistiendo al técnico-operario de la máquina-herramienta en la obtención de piezas con la calidad solicitada, ayudándole a elegir los parámetros y condiciones de corte iniciales para empezar su trabajo.
- Obtener una metodología válida para cualquier proceso de corte de materiales basada en el método científico experimental que combine el conocimiento del experto con el conocimiento físico de dicho proceso y las variables factibles de medición en la experimentación realizada.
- Incorporar las variables de estado del proceso.
- Validar la importancia de variables como geometría de la pieza y dureza del material incluidas en el modelo, novedoso en este ámbito.
- Obtener un modelo válido para la predicción de la rugosidad superficial (Ra)¹ a partir de datos experimentales con la ayuda de las redes Bayesianas, que contribuirá a comprender los procesos dinámicos que ocurren durante el mecanizado y la interacción entre las variables involucradas. Ésta es una técnica ampliamente difundida para diagnóstico médico pero poco explotada en otro tipo de aplicaciones como la que nos ocupa y que ha demostrado aportar muy buenos resultados y mayor conocimiento del problema modelizado.
- Obtener un modelo del proceso de fresado utilizando redes neuronales artificiales (RNAs), incluyendo la geometría de la pieza y la dureza del material. Las RNAs son una técnica ampliamente utilizada en procesos de corte de materiales. Esto nos permite hacer una comparativa entre esta técnica y las redes Bayesianas (RBs) para medir la influencia de las nuevas variables involucradas y los resultados generales del modelo con cada técnica.

¹Una de las formas de determinar la calidad superficial, respecto a su topología, es mediante el valor medio de la rugosidad superficial Ra

- Uno de los inconvenientes de las redes Bayesianas es la complejidad para explicar las tablas de probabilidades generadas. Como solución a este problema se propone un nuevo método de explicación que consiste en generar un conjunto de reglas obtenidas a partir de árboles de decisión. Estos árboles son inducidos a partir de un conjunto de datos generados de las probabilidades a posteriori de la variable clase, calculadas con una red Bayesiana aprendida a partir de un conjunto de datos experimentales.
- Finalmente, se hace una contribución a la optimización multi-objetivo en el caso de que los objetivos vengan dados por intervalos de valores. Concretamente, se extienden las ideas de dominancia y frontera de Pareto en este contexto. Su aplicación al acabado superficial se concreta en el estudio del caso en el que se han de maximizar dos objetivos: la sensibilidad y la especificidad, en lugar de únicamente el porcentaje de casos bien clasificados. Los intervalos de valores aparecen como resultado de una validación cruzada en 10 rodajas.

1.3. Metodología

Esta investigación se desarrolla en cuatro etapas principales, que se centran en el trabajo experimental buscando con ello que las propuestas que se presenten estén sustentadas no en apreciaciones subjetivas sino, principalmente, en resultados validados estadísticamente.

1.3.1. Fundamentos teóricos

En esta etapa se hace una revisión crítica de los elementos teóricos necesarios en la investigación. Se hace una exploración del estado del arte en modelos para la predicción de la rugosidad superficial, así como de las técnicas usadas y la experimentación realizada.

1.3.2. Trabajo experimental

Ésta es la fase inicial y parte muy importante de la investigación, ya que es la base de los modelos y a partir de la cual se pretende obtener resultados estadísticamente significativos.

Para el desarrollo de esta tesis se ha contado con la ayuda del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) en forma de beca predoctoral

para el desarrollo de tesis doctorales en líneas de investigación con interés para el sector industrial. El presente estudio se ha realizado dentro de los proyectos FIT-020500-2004-187 PREDAS: *Predicción in - process del acabado superficial en procesos de fresado a alta velocidad: Estudio de viabilidad usando técnicas de Inteligencia Artificial* del Plan Nacional de I+D (PROFIT) y DPI2003-07798-C04-01 AFAVE: *Automatización de los procesos de fresado a alta velocidad* del Plan Nacional I+D (CICYT), ambos desarrollados en el grupo GAMHE (Grupo de investigaciones avanzadas en la automatización de los procesos de mecanizado) dedicado a la automatización de los procesos de mecanizado a alta velocidad, dentro del Instituto de Automática Industrial (IAI) del CSIC, que cuenta con más de 20 años de experiencia en la línea de investigación “Optimización de los procesos de mecanizado”. Este grupo fue distinguido como “grupo de excelencia de la Comunidad de Madrid” en el período 2006-2009.

Algunos de los medios técnicos más importantes con los que cuenta el Instituto de Automática, usados en el desarrollo de la tesis se relacionan a continuación:

- Centro de mecanizado Kondia 1000 con CNC Siemens 840D
- 2 Sensores de emisión acústica Kistler 8152B118
- 2 Acelerómetros B&K4371 (XY)
- 1 Acelerómetro B&K4370 (Z)
- 1 Acelerómetro triaxial Endevco 5253A-100
- 3 Amplificadores Kistler 5011
- 2 Amplificadores de frecuencia Kistler 5125B
- 1 Amplificador Nexus 2693
- 1 sensor de fuerzas piezoeléctrico triaxial Kistler modelo 9257B

Para la adquisición de las señales:

- 2 Adaptadores de señal DBK17 de 4 canales
- 2 DaqBoard 2005
- 1 Compuscope 1602

- 1 DaqBoard 2000
- Paquetes de software de propósito general y específico.

1.3.3. Propuesta de modelo

El modelo propuesto está enmarcado en el modelizado estocástico por el alto grado de incertidumbre propio del mecanizado. Es un modelo probabilístico denominado redes Bayesianas que pueden incluir el conocimiento del experto y el conocimiento físico del proceso de corte de metales, aprendido a partir de datos experimentales. Como trataremos de clasificar la rugosidad superficial a partir de datos experimentales etiquetados, la técnica a usar serán clasificadores supervisados basados en redes Bayesianas.

1.3.4. Análisis de resultados

Los resultados se analizarán desde dos puntos de vista: conocimiento del experto y validación estadística.

1.4. Estructura de la tesis

La memoria se estructura en 7 capítulos, correspondiéndose en gran medida con las tareas planteadas en los objetivos descritos anteriormente y siguiendo las etapas de una “investigación experimental” [Rosas y Rivero, 1990].

- Capítulo 1 - Introducción.
En el capítulo 1 se presenta una breve introducción al tema de la tesis, se describen los objetivos planteados, la metodología utilizada y la estructura que tendrá la memoria.
- Capítulo 2 - Mecanizado a alta velocidad.
Está dedicado a estudiar en profundidad algunas nociones básicas del mecanizado a alta velocidad (MAV) y los factores que influyen en su desarrollo enfocándolos en el fresado a alta velocidad. Se hace una descripción de la calidad superficial y los parámetros que se usan para la evaluación del acabado superficial, tema concreto en el que se centra este trabajo. Además, se ofrece un estado del arte incluyendo

los trabajos más representativos en el campo de la supervisión de la calidad superficial en procesos de mecanizado.

Con este capítulo se pretende mostrar las dificultades inherentes a este problema debido a la gran complejidad del proceso de mecanizado, los inconvenientes para medir la calidad superficial en-proceso y las soluciones planteadas hasta el momento.

Como los resultados obtenidos hasta ahora no han sido del todo satisfactorios para la industria, se introduce la necesidad de modelos estocásticos, dada la incertidumbre del problema a modelar y se definen las diferencias entre los modelos. Dentro de los modelos estocásticos se eligieron los probabilísticos, concretamente redes Bayesianas. Éste es el preámbulo a la metodología propuesta.

- Capítulo 3 - Clasificadores Bayesianos para modelizar *Ra*.

En este capítulo se hace un análisis detallado de la metodología propuesta para el modelizado predictivo de la calidad superficial en procesos de fresado a alta velocidad.

Se hace una descripción del sistema de adquisición de datos: sensores y procesamiento de las señales medidas. Se detalla la fase experimental, fundamental en la obtención de datos óptimos para la elaboración de cualquier modelo empírico, se describe la primera fase experimental realizada empezando con su diseño, hasta el análisis y extracción de características de las señales medidas. Estos experimentos, realizados en nuestro laboratorio, son la base para la solución propuesta.

Se incluye además la introducción teórica a las redes Bayesianas y se expone la solución propuesta al problema de predicción de la rugosidad superficial por medio de un modelo empírico para la predicción en-proceso de la rugosidad superficial basado en redes Bayesianas.

Se muestran las características del modelo desarrollado, se detalla el algoritmo seleccionado, la estructura de la red y las fases de aprendizaje y entrenamiento. Se presenta además el análisis de los resultados obtenidos con los algoritmos naïve Bayes y TAN usados en el modelizado.

- Capítulo 4 - Redes neuronales artificiales para modelizar *Ra*.

Las redes neuronales artificiales han sido la técnica más usada hasta la fecha para la predicción de la calidad superficial en los trabajos presentados en la literatura científica. En este capítulo se describe la

segunda y tercera fase de experimentación construida a partir de dos diseños de experimentos: fraccional y RSM, con cuyos datos se hizo el modelizado. Se incluye un modelo desarrollado con RNAs que como novedad incluye las variables citadas anteriormente: geometría de la pieza a mecanizar y dureza del material. Este modelo es útil para verificar la importancia de estas variables en la estructura de la red y para contrastar los resultados obtenidos con un modelo usando RBs, herramienta novedosa en este ámbito. Para ello, se hicieron diferentes test de hipótesis para comparar los resultados de los dos modelos.

Para validar los modelos con RNAs y RBs se hizo una confirmación práctica que también se detalla en este capítulo. Todos los modelos desarrollados en esta memoria han sido implementados y evaluados realizando numerosos experimentos. Por razones de brevedad se muestran sólo las pruebas que nos han parecido más relevantes, cuyos resultados aparecen en las secciones dedicadas a la experimentación del capítulo 3.

- Capítulo 5 - Explicación de un clasificador Bayesiano mediante un árbol de decisión.

El principal problema de los modelos probabilísticos es entender los resultados producidos dado el gran tamaño de las tablas de probabilidades y la dificultad que conlleva su interpretación. Este capítulo es otra de las contribuciones valiosas de esta tesis. En él se desarrolla un método para explicar la salida de los clasificadores Bayesianos a partir de un conjunto de reglas obtenidas con árboles de decisión. Estos árboles son inducidos a partir de datos generados de las probabilidades a posteriori de la variable clase (la rugosidad superficial), calculados a partir de una red Bayesiana aprendida con datos de entrenamiento experimentales.

- Capítulo 6 - Optimización multi-objetivo.

En este capítulo se propone una solución novedosa a problemas de optimización multi-objetivo donde los objetivos son cuantificados como intervalos de valores en lugar de un número real. Concretamente, se extienden las ideas de dominancia y frontera de Pareto en este contexto. Su aplicación al acabado superficial se concreta en el estudio del caso en el que se han de maximizar dos objetivos: la sensibilidad y la especificidad, en lugar de únicamente el porcentaje de casos bien

clasificados. Los intervalos de valores aparecen como resultado de una validación cruzada en 10 rodajas.

- Capítulo 7 - Conclusiones y trabajo futuro.

Por último se presentan en este capítulo las conclusiones y algunas posibles líneas interesantes para continuar la investigación.

Capítulo 2

MECANIZADO A ALTA VELOCIDAD

En este capítulo se tratarán las nociones básicas del Mecanizado a Alta Velocidad (MAV) y los factores que han influido en su desarrollo. Se hará una descripción detallada del proceso del MAV como paso decisivo hacia el mecanizado optimizado, enfocando el estudio en el proceso de Fresado a Alta Velocidad (FAV). Se introducirá la problemática de la calidad superficial en el mecanizado a alta velocidad, el concepto de calidad industrial y su control, describiendo los parámetros de medición y los métodos para medir la rugosidad superficial. Por último se expondrán trabajos en los que se usan herramientas de inteligencia artificial para la detección de la calidad superficial.

2.1. Introducción

La revolución de la tecnología de fabricación en los últimos 30 años ha sido imparable. Esto unido a la globalización ha impulsado el desarrollo de la industria haciéndola cada vez más competitiva y con unos parámetros de calidad y costo más marcados. Las nuevas tecnologías aplicadas a la máquina-herramienta con la llegada del siglo XXI, ha permitido a los ingenieros realizar diseños complejos y estandarizar la fabricación de los productos con mejor economía. Ejemplo claro de este proceso son las soluciones conocidas como CAD/CAM (Computer-aided design/Computer-aided manufacturing) y el CNC (computer numerical control), tecnologías

clave en el proceso evolutivo de las máquinas-herramienta, ya que no sólo contribuyen al diseño de piezas complejas sino que pueden simularse productos antes de ser mecanizados. “La tendencia en la utilización de la máquina-herramienta cada vez está más enfocada hacia la eficiencia, rapidez y precisión en la producción de cada una de las piezas manufacturadas”¹.

Aunque la función básica de los centros de mecanizado es dar forma mediante un proceso de arranque de material, sus beneficios van más allá al lograrse la fabricación de moldes muy complejos. Cuando pensamos en industrias como la aeronáutica, automotriz o electrodomésticos, por poner algunos ejemplos, no serían lo que son hoy sin las máquinas-herramienta.

2.2. Nociones básicas del MAV

Antes de definir el mecanizado a alta velocidad es conveniente exponer lo que es una máquina-herramienta. Ésta es un dispositivo mecánico utilizado generalmente para producir componentes metálicos mediante la eliminación selectiva de material. El término máquina-herramienta frecuentemente se reserva para herramientas que utilizan una fuente de energía distinta del movimiento humano, pero también pueden ser movidas por personas si se instalan adecuadamente. Muchos historiadores de la tecnología consideran que las auténticas máquinas-herramienta nacieron cuando se eliminó la actuación directa del hombre en el proceso de dar forma o troquelar los distintos tipos de herramientas.

Las máquinas-herramienta pueden operarse manualmente o mediante control automático. Las primeras máquinas utilizaban volantes para ajustar su movimiento y poseían sistemas complejos de engranajes y palancas para controlar la máquina y las piezas en que trabajaban. Poco después de la II Guerra Mundial se desarrollaron los sistemas de control numérico. Las máquinas de control numérico utilizaban una serie de números perforados en una cinta de papel o tarjetas perforadas para controlar su movimiento. En los años 60 se añadieron computadoras para aumentar la flexibilidad del proceso. Tales máquinas se comenzaron a llamar máquinas CNC, o máquinas de Control Numérico por Computadora. Las máquinas CNC pueden repetir secuencias una y otra vez con precisión, y pueden producir piezas mucho más complejas que las que pueda hacer el operario más experimentado. Un ejemplo de estas máquinas se puede ver en la figura 2.1.

¹Entrevista a Ernesto Meier, Director General de la empresa Herramientas y Máquinas de Monterrey - México.



Figura 2.1: Centro de mecanizado Kondia 1000

2.2.1. Mecanizado a alta velocidad

El mecanizado también se ha visto influido por la evolución de la máquina-herramienta. Este cambio se ve reflejado con la llegada del llamado mecanizado a alta velocidad. Ésta es una tecnología de corte que abre las puertas al mecanizado de piezas y materiales que no podían ser tratados con el mecanizado convencional, como materiales de mucha dureza, paredes muy delgadas, etc.

El MAV está inmerso en un concepto más amplio y general: Mecanizado de Alto Rendimiento (MAR). Hoy en día este concepto está dirigido a mejorar dos aspectos básicos del proceso, según [de Lacalle y otros, 2004]:

- La productividad: asociada a la tasa de arranque de material (TAM) o cantidad de material eliminado por unidad de tiempo.
- La calidad: relativo a conseguir mayor precisión dimensional y menor rugosidad de las superficies.

En los últimos 10 años se ha conseguido una mejora substancial de los procesos. Esto se debe en parte a la incorporación de aleaciones de materiales como titanio, níquel y cobalto, que poseen mayores prestaciones mecánicas. Adicionalmente, las herramientas de corte también han mejorado con la aparición de nuevas calidades de metal duro y el uso de nuevos

recubrimientos que proporcionan mayor dureza y resistencia a altas temperaturas.

En el MAV la velocidad de corte es apreciablemente mayor que en el mecanizado tradicional, aunque no significa obligatoriamente mecanizar a altas revoluciones de husillo. Las condiciones del proceso (velocidad de corte, avance, velocidad de giro, profundidades de corte radial y axial, etc.) dependerán del material a mecanizar, así como de las máquinas y herramientas disponibles. El MAV entonces, podemos definirlo como la optimización del mecanizado con las posibilidades existentes, limitado por la pieza/material a mecanizar, las herramientas/máquinas y los sistemas de apoyo (CAD/CAM, CNC) disponibles.

El MAV ofrece una nueva forma de trabajar que supone un cambio de filosofía en la empresa. Normalmente en el MAV el gasto de tiempo en CAD/CAM es mucho mayor que en el mecanizado convencional y esto repercute en el hecho de tener más personal especializado en estas herramientas y menos a pie de máquina. También requiere una infraestructura diferente, como:

- Máquinas capaces de responder a las velocidades de mecanizado deseadas y al perfil objetivo (máquinas rígidas, precisas, seguras, etc.);
- Los CNC's deben ser capaces de prever cómo va a cambiar la trayectoria exigida a esa herramienta en el instante de tiempo siguiente (look ahead, nurbs, etc.);
- El CAD y CAM, sistemas usados frecuentemente para generar programas pieza (programas cuyas instrucciones se incluyen en el CNC), deben ser capaces de crear estrategias de corte adecuadas para el MAV; y,
- La herramienta, debe ser resistente al desgaste y adecuada para la operación requerida (aumentará la vida de las herramientas gracias a los recubrimientos químicos que protegen su superficie).

2.2.2. Factores del desarrollo del MAV

El MAV tiende a sustituir las pasadas de gran profundidad a baja velocidad de corte por muchas pasadas rápidas de menor profundidad de corte, aumentando la TAM. Las altas velocidades de corte y los elevados avances disminuyen las fuerzas de corte por lo cual se logran espesores de viruta más pequeños.

Algunos de los factores que han contribuido al desarrollo del MAV son:

- Incremento de la productividad;
- Menores vibraciones;
- Disminución de las fuerzas de corte en los materiales dúctiles, posibilidad de mecanizar paredes delgadas (0.2 mm);
- Mayor precisión de los contornos, mejor calidad superficial y tolerancias dimensionales más precisas;
- Reducción del tiempo de pulido;
- Mecanizado en una sola atada para el desbaste y acabado;
- Reducción del tiempo de mecanizado y costo global;
- Disminución del coeficiente de rozamiento viruta-herramienta;
- Evacuación casi total del calor por medio de la viruta;
- Aumento de la vida de la herramienta; y,
- Posibilidad de mecanizado de aceros duros ($>50\text{Hrc}$)² como si fuera mecanizado en caliente.

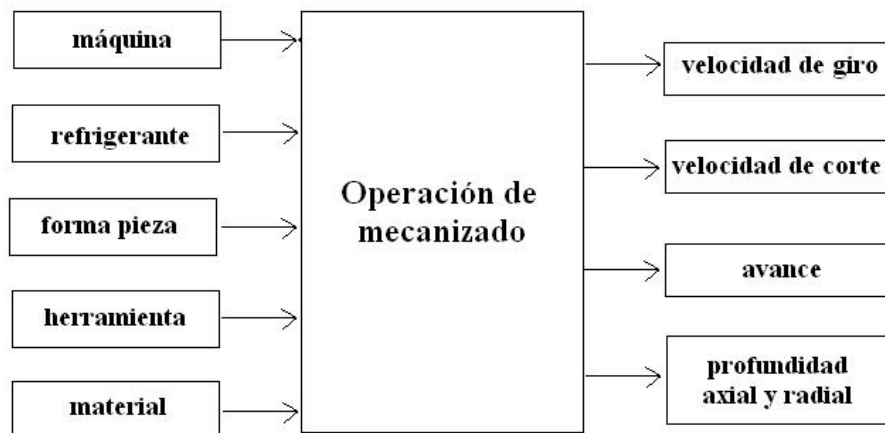


Figura 2.2: Factores de mecanizado y condiciones de corte

²Hrc = Dureza Rockwell C

Adicionalmente al desarrollo del MAV y dadas las nuevas exigencias de fabricación para conseguir resultados óptimos, deben analizarse varios factores de mecanizado como la máquina, la herramienta, el tipo de mecanizado: en seco o con refrigerante, el material a mecanizar y la forma de la pieza a mecanizar, véase figura 2.2. Estos factores deben conocerse para determinar las condiciones de corte necesarias:

- velocidad de giro del cabezal (rpm);
- velocidad de corte (V_c);
- avance (*feed rate*); y,
- profundidad de corte (profundidad de pasada axial a_p y radial a_e).

Hay factores que deben ser coordinados durante la programación de la producción considerando tres criterios: el tiempo de ciclo corto, relacionado directamente con el volumen de viruta extraído por minuto; los bajos costos por pieza, que se consiguen por la reducción (costos de máquina) en el tiempo de pieza; y la alta calidad de producción, que está restringida a las exigencias de calidad del producto.

Después de conocer un poco más el proceso de mecanizado en general y los factores que le afectan podemos definir en qué consiste un proceso de mecanizado por arranque de viruta, como el fresado.

2.2.3. Proceso de arranque de viruta

En el proceso de mecanizado por arranque de viruta se debe entender cómo actúan las fuerzas en el momento del corte formando la viruta.

El corte ortogonal se presenta cuando una viruta sale perpendicular a la arista y sufre una deformación plana. Entonces el fenómeno tiene una representación bidimensional, lo que facilita el análisis vectorial de las fuerzas y velocidades, estableciendo relaciones geométricas simples. En el caso general, la deformación no es bidimensional y debido a esto el corte es denominado tridimensional.

Análisis vectorial de las fuerzas

El modelo de formación de viruta es explicado detalladamente por [Groover, 2000], véase figura 2.3, usando el círculo de Merchant que es un método para calcular las diferentes fuerzas involucradas en el proceso de corte.

Este modelo parte de un plano de cizalladura del material con un ángulo de inclinación ϕ , ángulo de cizalladura, respecto a la línea de corte.

En el proceso se produce una fuerza de corte F_c y una fuerza de avance F_t según los planos horizontal y vertical respectivamente, unidas por un vector resultante R que corresponde a la fuerza total ejercida entre la herramienta y la pieza:

$$R = \sqrt{F_c^2 + F_t^2}$$

Según las direcciones del plano de cizalladura y su perpendicular tenemos el vector fuerza en el plano de cizalladura F_s y la fuerza normal al plano de cizalladura F_n .

Según las direcciones de la cara de ataque de la herramienta y su perpendicular encontramos la fuerza tangencial a la cara de ataque F y la fuerza normal a la cara de ataque N .

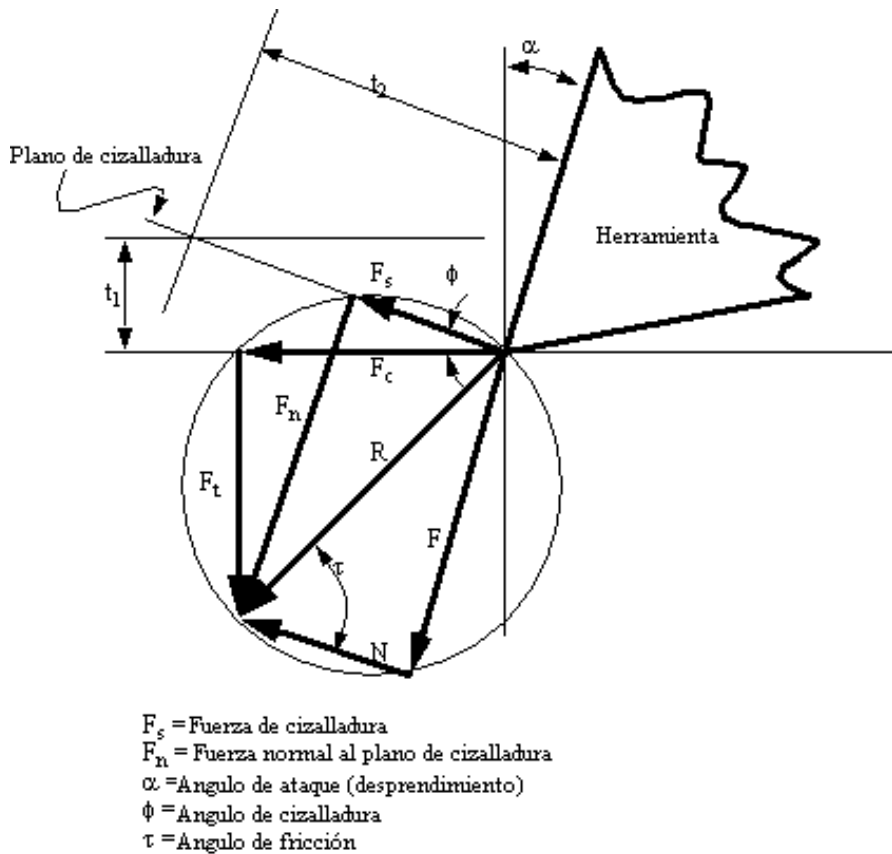


Figura 2.3: Esquema de las fuerzas en un corte ortogonal

Las fuerzas de avance y de corte pueden medirse con métodos experimentales como por ejemplo con dinamómetros extensiométricos o

piezoeléctricos. Como se muestra en las ecuaciones (2.1) también se pueden obtener relaciones analíticas entre las componentes de las fuerzas en el plano de corte, fuerza en el plano de corte F_s y fuerza normal al plano de corte F_n y las componentes de fuerza de corte F_c y fuerza de avance F_t :

$$\begin{aligned}
 F_s &= F_c \cos \phi - F_t \sin \phi \\
 F_n &= F_t \cos \phi + F_c \sin \phi \\
 F &= F_c \sin \alpha + F_t \cos \alpha \\
 N &= F_c \cos \alpha - F_t \sin \alpha
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

Tomando el concepto de coeficiente de rozamiento en deslizamiento (Coulomb) se asume que la fuerza aplicada en la cara de ataque F es proporcional a la fuerza normal N que la origina; de allí es posible calcular el coeficiente de rozamiento μ , ecuación (2.2), en la cara de ataque ($\mu = \tan \tau$), donde τ es el ángulo de rozamiento:

$$\mu = \frac{F}{N} = \frac{F_c \sin \alpha + F_t \cos \alpha}{F_c \cos \alpha - F_t \sin \alpha} = \frac{F_t + F_c \tan \alpha}{F_c - F_t \tan \alpha}
 \tag{2.2}$$

Es más fácil visualizar las fuerzas que intervienen en una operación de corte ortogonal, pero son muchas las operaciones en las que el corte es tridimensional, como en fresado con herramientas de múltiples aristas o dientes de corte.

Corte tridimensional

En un proceso de mecanizado real, el proceso de deformación cortante no ocurre sobre un plano. Una geometría de la herramienta de corte, a través del ángulo de inclinación de la arista de corte (λ) y del ángulo de posición de la arista de corte (χ) obliga a la viruta a desviarse relativamente a la dirección perpendicular a la arista de corte provocando una variación de la longitud de contacto viruta/herramienta.

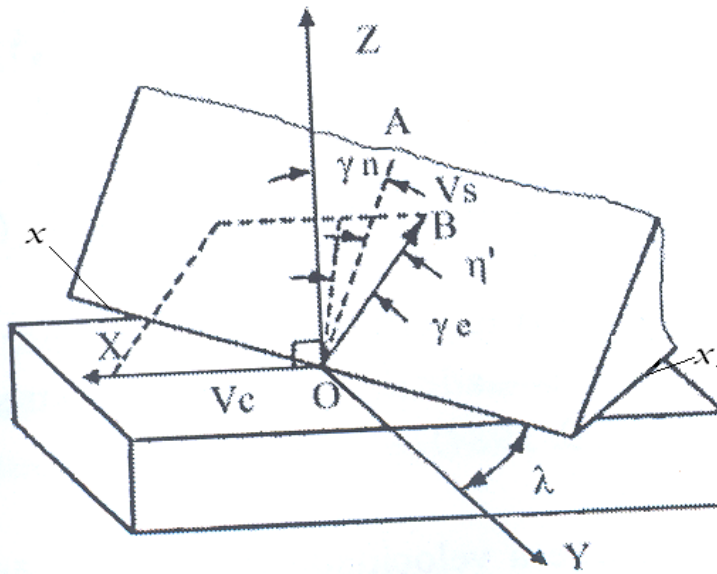


Figura 2.4: Esquema de las fuerzas en un corte tridimensional

En la figura 2.4 se muestra una geometría de corte tridimensional en que la viruta sufre un desvío η' . La viruta no resbala a lo largo de la cara de ataque de la herramienta por el recorrido perpendicular a la arista de corte OA, por el contrario, resbala por el recorrido OB, que está inclinado a la normal de un ángulo η' . El ángulo de ataque efectivo (γ^e) es el ángulo entre la dirección de salida de la viruta OB y la normal a la velocidad de corte (V_c) en el plano que contiene V_c y la velocidad de salida de la viruta (V_s). Este ángulo puede ser obtenido de la expresión (2.3) según [Shaw, 1984]:

$$\sin \gamma^e = \sin \eta' \sin \lambda + \cos \eta' \cos \lambda \sin \gamma^n \quad (2.3)$$

donde se puede considerar $\eta' = \lambda$

El efecto combinado del ángulo de la arista principal de corte (χ) y del ángulo de la arista secundaria de corte (χ_1) también cambia las condiciones de salida de la viruta. Aplicando la expresión (2.4) se puede cuantificar:

$$\eta' = \arctan \frac{\sin(\chi + \chi_1)}{\frac{2p}{a \sin \chi} + \cos(\chi + \chi_1)} \quad (2.4)$$

donde a es el avance y p la penetración. Así, conocidos los ángulos de inclinación (λ) y de ataque normal (γ^n) se puede determinar el ángulo de ataque efectivo (γ^e) a través de las ecuaciones (2.3) y (2.4) que aplicando

unas expresiones generales de corte ortogonal permiten prever la situación en corte tridimensional.

Formación de viruta

La viruta depende del tipo de material que se mecaniza y de las condiciones de corte de la operación. Según [Groover, 1997] hay tres tipos básicos de viruta, como muestra la figura 2.5:

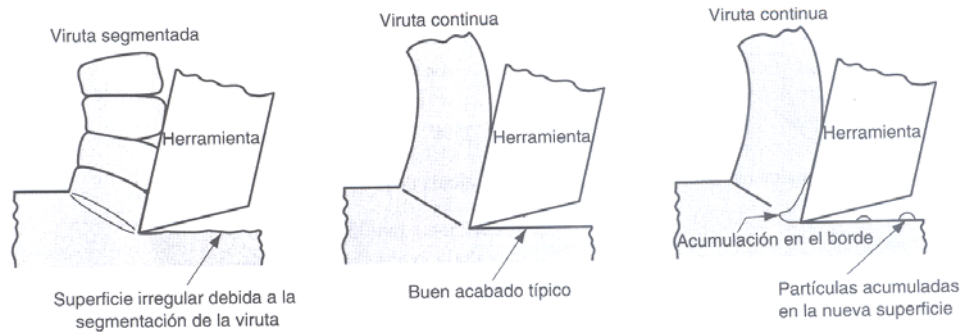


Figura 2.5: Tipos de formación de viruta

- Viruta segmentada (o de rotura) característica de materiales frágiles mecanizados a bajas velocidades.
- Viruta continua (o regular) cuando se mecanizan materiales dúctiles. Con velocidades de corte altas y profundidad pequeña se forman virutas largas y continuas. Este tipo de viruta es signo de buen acabado superficial.
- Viruta continua con acumulación en el borde (con adherencias) característica de materiales dúctiles mecanizados a bajas velocidades. La fricción entre la herramienta y la viruta puede causar acumulaciones de material. Cuando algunas de éstas se quedan en la superficie ésta queda rugosa.

Un ejemplo de tipos de viruta obtenidos en procesos de fresado puede verse en la figura 2.6.



Figura 2.6: Ejemplos de viruta obtenidas en fresado

2.3. Proceso de fresado

El fresado es un tipo de operación realizada por una máquina fresadora. Es la operación donde el elemento que se desplaza longitudinalmente es la pieza a dar forma. El material es levantado por una herramienta rotativa de arista múltiple. Cada arista de corte levanta una pequeña cantidad de material por cada rotación.

El fresado a alta velocidad consiste en aumentar la cantidad de viruta arrancada aumentando la velocidad de corte a la vez que se disminuye el esfuerzo. En la figura 2.7 se puede ver una imagen del proceso de fresado a alta velocidad.

2.3.1. Condiciones de mecanizado

Cuando se programa una operación de fresado, el programador debe tener algunos datos establecidos como velocidad de giro, avance, profundidad radial y axial de corte. Estos factores deben considerarse de acuerdo al objetivo que se quiera alcanzar durante el proceso de corte.

Si el criterio es un tiempo de ciclo (tiempo de mecanizado de una pieza en una máquina) corto, el factor que debe considerarse es el volumen de viruta extraído por minuto. Éste se calcula multiplicando la velocidad de avance por la profundidad o ancho de corte, incrementando el volumen extraído cuanto mayores sean estos valores. Esto sería una ventaja si no se conociera que altas velocidades de extracción de viruta hacen que el uso de

la herramienta también aumente, aumentando así mismo el tiempo de ciclo provocado por los cambios de herramienta.



Figura 2.7: Fresado a alta velocidad

Por el contrario, si se pretende reducir los costes de pieza, las condiciones de mecanizado deben ser programadas para disminuir el tiempo de pieza, que a su vez también reduce los costes de máquina. Sin embargo, los costes de herramienta aumentan a mayor uso.

Cuando se busca obtener alta calidad de producción, la exigencia de calidad es una variable que restringe la definición de los parámetros de corte, afectando principalmente el acabado superficial y las tolerancias dimensionales de la pieza terminada. Como se comentó anteriormente en este capítulo, el tipo de fresado afecta grandemente al acabado superficial, igual que la forma de la fresa y el tipo de perfil de corte empleado (material, forma del filo de corte).

La elección de la velocidad de giro determina la velocidad de corte V_c . Esta última es equivalente a la velocidad en superficie de la fresa, dependiendo no solamente de la velocidad de giro sino también del diámetro de la fresa. Normalmente está dada en revoluciones por minuto.

La velocidad de corte es:

$$V_c = \frac{\pi \times rpm \times \emptyset}{1000}$$

donde:

rpm revoluciones del cabezal en rpm.

\emptyset diámetro de la herramienta en mm.

V_c velocidad de corte en m/min.

El avance *feed rate* es un cálculo efectuado a partir del avance por diente de la herramienta f_z . Dada la importancia de saber la carga de viruta que recibe cada diente de la fresa, el avance por diente es la distancia que recorre un diente al entrar en contacto con el material. Así,

$$feed\ rate = f_z \times flutes \times rpm$$

donde:

f_z es avance por diente en mm/diente.

flutes número de dientes.

rpm revoluciones del cabezal en rpm.

feed rate velocidad de avance en mm/rpm

La profundidad axial a_p conocida también como profundidad de pasada y profundidad radial a_e o paso, representan la penetración de la herramienta en ambas direcciones. Estos parámetros tienen gran influencia en el caudal de viruta evacuado y en la rugosidad superficial de la pieza. Están representados en la figura 2.8, y se miden en mm.

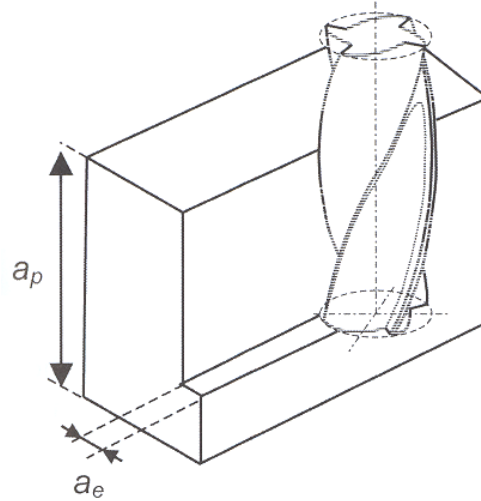


Figura 2.8: Profundidad de pasada axial a_p y radial a_e en una operación de fresado

2.4. Calidad superficial en MAV

La calidad superficial de una pieza se mide con la integridad superficial que aparte de la topología de la superficie, tiene en cuenta las propiedades mecánicas y metalúrgicas, muy importantes en la fatiga, resistencia a la corrosión o vida de servicio de la pieza. La topología de la superficie se identifica por su textura superficial, en la que se miden varias cantidades relacionadas con las desviaciones producidas en la pieza con respecto a la superficie nominal.

La rugosidad superficial es el parámetro más representativo para describir en parte la topología de la superficie, debido a su influencia directa en la fricción, fatiga y resistencias electrónica y térmica. Tiene gran repercusión en el mecanizado a alta velocidad.

La integridad superficial implica la evaluación de las capas sub-superficiales con respecto a sus propiedades mecánicas y metalúrgicas. Esta evaluación se lleva a cabo utilizando difracción de rayos X u otros que son técnicas intrínsecamente de laboratorio, implicando evidente esfuerzo y tiempo.

2.4.1. Parámetros para evaluar el acabado superficial

Para definir los parámetros usados en la medición del acabado superficial primero necesitamos definir el término superficie y el concepto de acabado superficial.

Se entiende por superficie un límite que separa un objeto de otro, forma o figura. La superficie es la apariencia exterior de una pieza. Estas superficies pueden ser nominales o reales. Una superficie nominal es la superficie que representa las especificaciones del diagrama de la pieza. La superficie nominal no tiene irregularidades y es geoméricamente perfecta. La superficie real de la pieza es producida por un proceso de mecanizado. La superficie real contiene imperfecciones. La desviación de la superficie nominal depende de las propiedades, composición y estructura del material en que fue hecho el objeto.

Una superficie medida es una representación de la superficie real obtenida con algún instrumento de medición, donde la superficie geométrica, las dimensiones y tolerancias geométricas son un gran subcampo en metrología con igual o mayor alcance y complejidad que el acabado superficial.

Existen instrumentos especializados en medir coordenadas, rugosidades y contorneado. Sin embargo, se genera algo de confusión y solapamiento entre mediciones geométricas y mediciones de acabado superficial. Hay que tener claros tres conceptos propios de la geometría: la forma, se refiere a la forma intencional de una superficie que difiere de una línea fija; las dimensiones, son los tamaños macroscópicos de una parte, por ejemplo diámetro o longitud; y la tolerancia, que es un intervalo especificado de dimensiones donde la pieza aún puede funcionar de forma aceptable.

En cuanto al acabado, hay diferentes tipos de imperfecciones en la superficie. La textura superficial está formada por una combinación de imperfecciones sobre la superficie de una pieza como la aspereza, ondulación, trazado y fallas:

- Rugosidad o aspereza son las irregularidades inherentes, finas, espaciadas ajustadamente, creadas por el proceso de producción.
- Ondulaciones son las irregularidades repetidas con espaciado mayor que las marcas de aspereza y que se producen por deflexiones y vibración de la máquina.
- Trazado es la dirección general del patrón creado por el proceso de producción.

- Fallas son irregularidades no intencionales de la superficie que pueden ser aleatorias o repetitivas, como grietas o imperfecciones.

Dentro de la textura superficial se ha elegido la rugosidad como el tipo de imperfección a medir para determinar el acabado superficial debido a su influencia directa en la fricción, fatiga y resistencias electrónica y térmica. Es cuantificado por parámetros relativos a características de la superficie y corresponde a la variación vertical sobre una distancia de medida. Estos parámetros son conocidos como R.

Tabla 2.1: Algunos parámetros R

Parámetros	Nombre	Estándar
Ra	Promedio de rugosidad	1,2,3,4
Rz	Promedio de máxima altura del perfil	1,3
Rq	Rugosidad RMS (Root Mean Square)	1,3,4
Rt	Máxima altura del perfil	1,3
$Rmax$	Profundidad de rugosidad máxima	1
Rp	Altura pico máximo del perfil	1,3,4
Rm	Profundidad de valle máximo del perfil	1,3,4

Algunos de los más conocidos parámetros se resumen en la tabla 2.1 donde los estándares corresponden a:

- 1: ASME B46.1-1995
- 2: ASME B46.1-1985
- 3: ISO 4287-1997
- 4: ISO 4287/1-1997

La medida usada más comúnmente en la industria es Ra . Éste es un parámetro de rugosidad reconocido y utilizado internacionalmente. La rugosidad superficial Ra es considerada como la media aritmética de los valles (en valor absoluto) y los picos de la superficie (área del perfil de rugosidad $f(x)$) medida en una longitud de evaluación (L) expresada en μm . Las normas ISO utilizan el término CLA (por su sigla en inglés Center Line Average). Ambas interpretaciones son idénticas. Véanse ecuación (2.5) y figura 2.9.

$$Ra = \frac{1}{L} \int_0^L |f(x)| dx \quad (2.5)$$

La unidad de medida de la rugosidad es la micra o micrón (1 micra = 1 μm = 0.000001 m = 0.001 mm). También se utiliza la micro pulgada en

países anglosajones. Según la norma ISO 4288:1996, los valores de Ra están entre $0.006 \mu m$ y $50 \mu m$ en procesos de mecanizado. Este parámetro es usado principalmente para supervisar el proceso de producción donde puede ocurrir un cambio gradual en el acabado superficial debido, por ejemplo, al desgaste de la herramienta de corte.

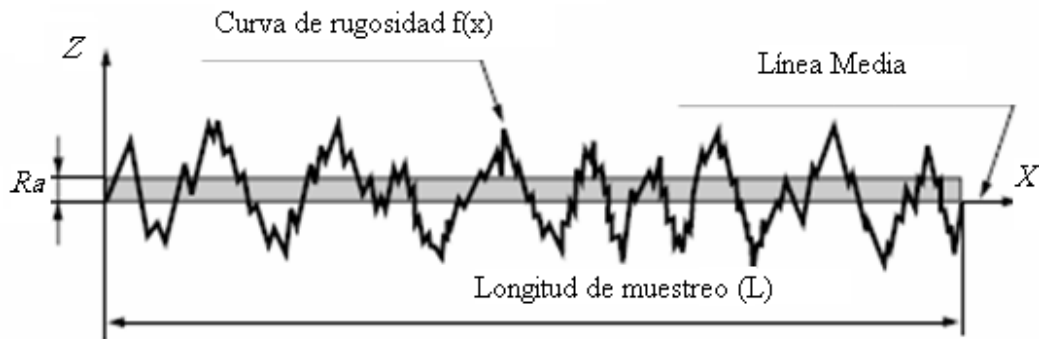


Figura 2.9: Gráfico de la rugosidad superficial promedio o Ra

Como Ra es un promedio (véase la figura 2.9), los defectos en la superficie no tienen mucha influencia en sus resultados. Por lo tanto, éste no se usa en la detección de defectos, ya que la medida de Ra no diferencia entre los picos y los valles.

2.4.2. Métodos de medida del acabado superficial

Básicamente los métodos para medir el acabado superficial están definidos por la técnica empleada: si son de contacto o de no contacto con la superficie. Los equipos de contacto son usados especialmente en investigación más que en entornos industriales, donde el método común para determinar la rugosidad está basado en el registro de perfiles de alturas con rugosímetros.

Métodos de no contacto

Hay métodos que no requieren contacto con la superficie a medir. Algunos detectan cambios en la superficie causados por la rugosidad o cambios en el ángulo del brillo después de la reflexión desde la superficie. Muchos perfiles ópticos usan algún tipo de interferómetro como los heterodinámicos, de fase cambiante, Mirau, Michelson, etc. Una técnica

que ha resultado de interés para el estudio de materiales es la microscopía confocal. Ésta es una mejora de técnicas clásicas de microscopía óptica. Su éxito se debe a la obtención de imágenes de mayor nitidez y contraste, así como a la posibilidad de obtener secciones ópticas de la muestra.

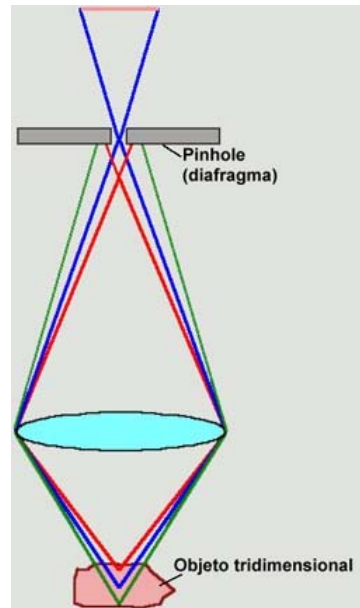


Figura 2.10: Esquema de planos focales

En el esquema de la figura 2.10 se muestra un objeto tridimensional (rosa) que tiene varios planos focales. La luz de todos los planos es refractada por la lente, pero sólo la que procede del plano central, que está en foco (haz azul), es capaz de pasar a través del pinhole dando lugar a una imagen nítida y perfectamente definida de las estructuras situadas en el plano focal sin interferencia de la luz procedente del resto del objeto. Para estudiar un objeto en microscopía confocal se toman imágenes procedentes de distintos planos focales. A cada una de éstas se las denomina sección óptica, porque equivale a la imagen obtenida al seccionar la muestra con un micrótopo. Con sistemas informáticos adecuados es posible realizar una reconstrucción tridimensional del objeto a partir de las distintas secciones ópticas.

Métodos de contacto

Todos los instrumentos de tipo contacto, que incluyen rugosímetros convencionales y microscopios de fuerza atómica tienen una aguja que toca la superficie. Las altas variaciones son medidas moviendo la aguja o la

superficie. Los movimientos de la aguja se convierten en señales eléctricas que luego son amplificadas, digitalizadas e introducidas al ordenador para analizar los datos.

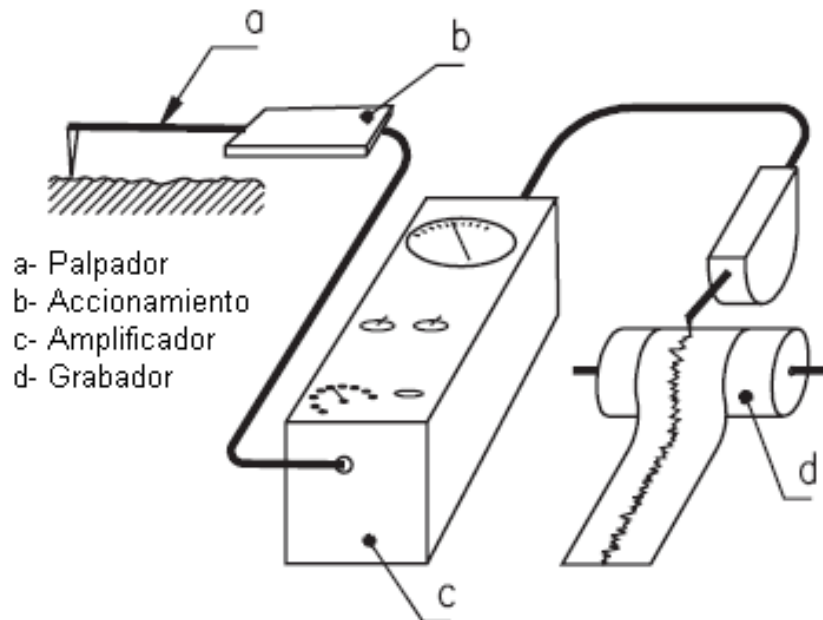


Figura 2.11: Esquema de funcionamiento de un rugosímetro

El rugosímetro, un instrumento ampliamente usado en la industria, es un dispositivo que utiliza una fina punta en contacto con la superficie a analizar haciendo un barrido controlado en línea recta y las variaciones de alturas se convierten en señales eléctricas que pueden ser registradas o graficadas. En la figura 2.11 se muestra un esquema del funcionamiento de estos dispositivos, donde cada literal corresponde a:

- a- Palpador o pick-up, se desliza sobre la superficie a verificar, llevando las señales de la aguja con punta de diamante hasta el amplificador.
- b- Unidad o mecanismo de accionamiento, que desplaza el palpador sobre la superficie con una velocidad constante y en una distancia deseada en línea recta.
- c- Amplificador que contiene una parte electrónica principal, dotada de un indicador de lectura que recibe las señales de la aguja, amplificándolas y calculándolas en función del parámetro elegido.

d- Grabador, puede ser una impresora, un PC o un accesorio del amplificador, en algunos casos incorporado en él.

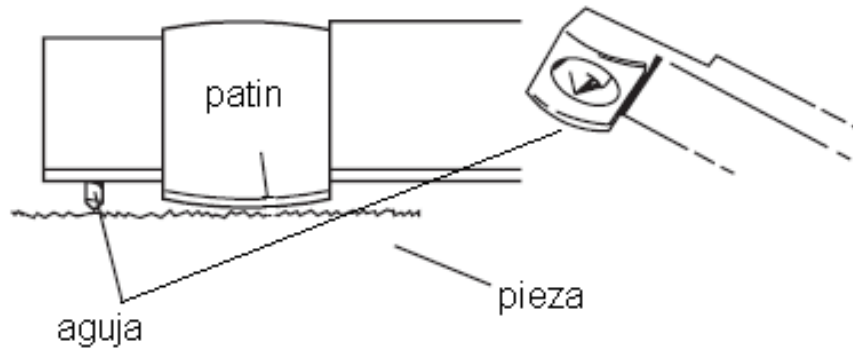


Figura 2.12: Esquema del palpador (izquierda), donde se aprecia un acercamiento de la aguja (derecha)

La figura 2.12 tiene un esquema más detallado del palpador donde se muestran las partes que lo componen en vistas frontal e inferior. En la figura 2.13 se muestra una fotografía del rugosímetro Surfcom 130 Karl Zeiss usado en nuestra experimentación. Éste es un instrumento que implica inspecciones post-proceso, dado que para poder medir la rugosidad en un pieza es necesario retirarla de la máquina, o por lo menos detenerla, si se usa un rugosímetro portátil.

Dependiendo del tipo de pieza que se esté elaborando, habrá algunas que requieran mejor acabado que otras. Debe tenerse en cuenta que la fricción y el desgaste entre dos superficies no lubricadas aumenta con la rugosidad superficial o que las superficies lisas reducen el peligro de ataque entre superficies no lubricadas.

Cuando una superficie es demasiado lisa es posible que no sostenga siquiera una película de aceite. Mientras que si una superficie es demasiado rugosa las crestas puntiagudas pueden romperse con ayuda de la capa de lubricante.



Figura 2.13: Rugosímetro Surfcom 130, usado en este trabajo para medir el acabado superficial

2.4.3. Factores que influyen en la calidad superficial

Las investigaciones iniciales sobre el tema de la calidad superficial se enfocaron en la definición de los factores que afectan a la rugosidad superficial. Unos de los pioneros fueron [Boothroyd y Knight, 1989] quienes dividieron la rugosidad superficial en:

- Ideal, es el resultado de la geometría de la herramienta y la velocidad de avance.
- Natural, es el resultado de irregularidades del proceso de corte, tales como vibraciones, defectos en la estructura del material, desgaste de herramienta e irregularidades en la formación de la viruta, entre otras.

Estos autores modelaron el valor promedio de la rugosidad superficial ideal con la ecuación (2.6):

$$Ra = \frac{feed\ rate^2}{32r} \quad (2.6)$$

donde *feed rate* es el avance, r el radio de la herramienta y Ra el valor promedio de rugosidad superficial.

Actualmente han surgido nuevas investigaciones en este área. Uno de los autores que más ha profundizado en el tema es [Pamies, 2001] quien clasificó los factores que afectan a la rugosidad superficial en:

- Factores del proceso: son los que afectan a la máquina-herramienta (como rigidez, sistemas de accionamiento, etc), a la pieza a mecanizar (geometría y material) y a la sujeción de la pieza a la máquina-herramienta (rigidez del montaje y acceso de la zona a mecanizar).

- Factores indirectos del proceso: son los que afectan a la herramienta (material, sujeción, geometría, desgaste y alineación de los filos de la herramienta) y a las condiciones de corte (parámetros de corte y estabilidad de corte).

El modelo que propone incluye valores de $Rmax$, como muestra la ecuación (2.7):

$$Rmax = \frac{feed\ rate^2}{4\emptyset} \quad (2.7)$$

donde *feed rate* es el avance y \emptyset el diámetro de la herramienta.

Otro trabajo importante es el de [Benardos y Vosniakos, 2003] quienes hacen una revisión del estado del arte en fresado y torneado, y resumen en dos los problemas principales de cara a la ingeniería de procesos de fabricación. Primero, determinar los valores de los parámetros del proceso que producen la calidad deseada del producto (especificaciones técnicas), y segundo, maximizar la productividad del sistema de fabricación de acuerdo con los recursos disponibles. Los autores clasifican los factores que afectan a la rugosidad superficial según la figura 2.14.

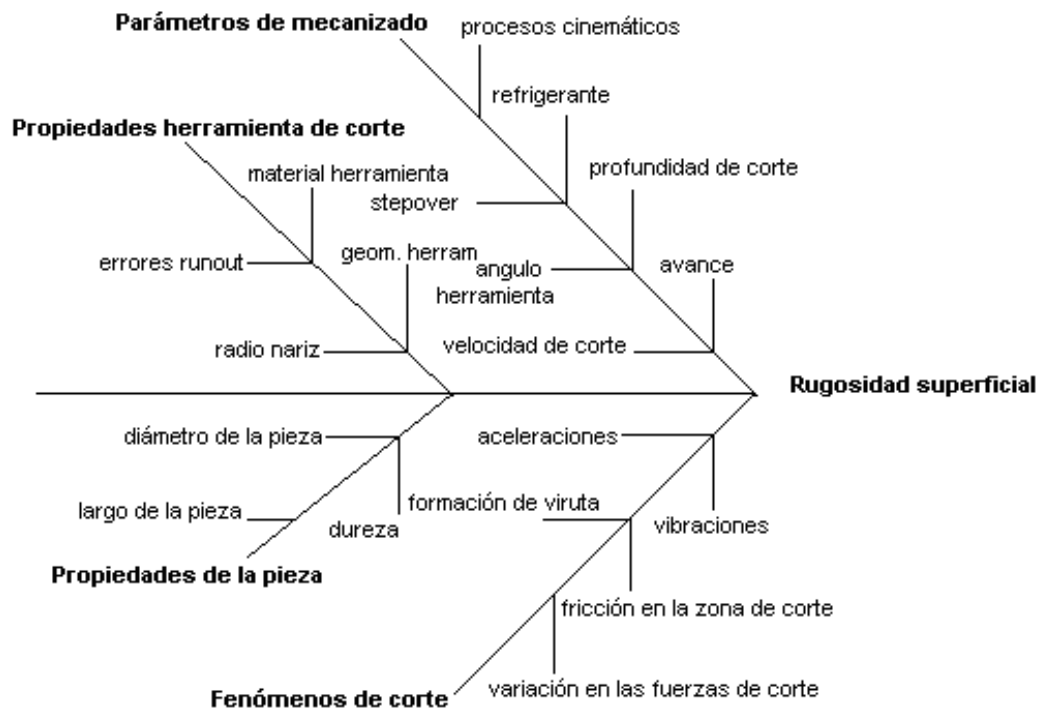


Figura 2.14: Diagrama causa-efecto con los factores que afectan la rugosidad superficial, adaptación de [Benardos y Vosniakos, 2003]

Aparte de las propiedades de la pieza, de la herramienta y los parámetros de corte hay varios factores que influyen en la calidad superficial. [Benardos y Vosniakos, 2003] identifican unos “fenómenos de corte” donde relacionan las vibraciones, aceleraciones, fricción y variación de las fuerzas, es decir, para nosotros, las variables de estado del proceso. Véase la figura 2.14.

Influencia del estado de la herramienta

En el proceso de corte, la herramienta está sometida a grandes esfuerzos lo que se ve reflejado en el desgaste de la misma. Actualmente el fallo de la herramienta de corte representa aproximadamente el 20% del tiempo muerto de la maquina-herramienta y el desgaste de herramienta impacta negativamente en la calidad final de los productos en términos de dimensiones, acabado final e integridad superficial [Liang y otros, 2002].

El mecanizar con una herramienta desgastada produce efectos indeseados, uno de los más importantes es el deterioro de la calidad superficial.

Los trabajos propuestos en la última década sobre supervisión del estado de la herramienta incluyen variables como el chatter o retemblado, el punto de rotura de la herramienta y desgaste de la herramienta, especialmente el desgaste acelerado. Ésta es una temática que corresponde a una línea de investigación en la mayoría de los casos tratada de manera independiente, dada su complejidad.

Algunos trabajos en los que se ha involucrado el estado de la herramienta serán descritos en la siguiente sección que corresponde a la descripción de técnicas de inteligencia artificial (IA) para medir la calidad superficial.

Nuestro estudio no involucra esta variable, ya que los ensayos que se han hecho han sido con herramientas nuevas.

Influencia de la estabilidad

En el caso del mecanizado a alta velocidad la estabilidad dinámica es importante por los requerimientos del sistema. Por ejemplo, las vibraciones pueden provocar que herramientas que usan recubrimientos duros se deterioren produciendo marcas en la superficie mecanizada.

Otro tipo de estabilidad que repercute en la calidad superficial es el chatter regenerativo, que corresponde a la fuerza generada cuando la herramienta entra en contacto con el material produciendo deflexión en la herramienta. Para algunas condiciones de corte esta interacción se puede desestabilizar pudiendo perder el contacto material-herramienta.

Sin embargo, existen mapas de estabilidad al chatter por medio de los cuales se puede identificar en qué zonas (condiciones de corte) no se presenta esa inestabilidad.

Al igual que en el caso del estado de la herramienta, existe una línea de investigación en el grupo GAMHE dedicada a esta temática.

Para nuestro estudio se usaron los mapas de estabilidad para verificar que los experimentos realizados, con las condiciones de corte seleccionadas, estaban en zonas libres de chatter.

2.5. Inteligencia artificial para predecir la calidad superficial

A continuación se presenta el estado del arte con los trabajos más relevantes usando técnicas de inteligencia artificial para resolver problemas propios del mecanizado y en particular del acabado superficial.

2.5.1. Técnicas más comunes usadas actualmente

En los últimos años se ha ampliado la investigación de temas referentes al mecanizado y corte de metales. Ésta incluye puntualmente la predicción del acabado superficial y más recientemente la predicción “en-proceso”. Sin embargo, el gran vacío en este universo de investigación es el desarrollo de un sistema como parte integrante de una máquina-herramienta inteligente.

En cuanto a los predictores, la mayoría se han propuesto para operaciones de torneado, se han expuesto ideas usando diferentes tipos de sensores, incluyendo fusión de ellos, aunado al uso de técnicas de modelizado. En el modelizado de sistemas complejos, todos los datos y observaciones disponibles son susceptibles de ser utilizados.

Las técnicas estadísticas son comúnmente usadas para desarrollar modelos con metodologías basadas en el diseño de experimentos y análisis de correlación, consiguiendo disminuir considerablemente la cantidad de experimentos y logrando reducir el número de datos de manera rigurosa. A pesar de esta ventaja, los modelos estadísticos clásicos, como la regresión lineal simple o la regresión múltiple, no han dado buenos resultados en la resolución de este tipo de problemas [Abouelatta y Mádl, 2001, Kirby y otros, 2004].

Dentro de las técnicas de IA usadas habitualmente se encuentran las Redes Neuronales Artificiales (RNAs), la más popular, con diferentes algoritmos de entrenamiento, siendo backpropagation el más usado y comprobado que aporta muy buenos resultados en el proceso de fresado [Correa, 2003], la lógica borrosa (LB), sistemas neuro-borrosos y últimamente los algoritmos genéticos (AGs).

Una de las principales desventajas de los trabajos que usan métodos de modelizado empírico y regresión es que muchos de estos estudios no son rigurosos en la evaluación de sus experimentos, adolecen de pruebas con diferentes patrones, pruebas estadísticas para determinar las características usadas, experimentos de simulación e independencia de los conjuntos de datos para pruebas de optimización [Benardos y Vosniakos, 2003]. Por consiguiente los datos y conclusiones obtenidas de ganancias y factores de interacción no son claramente examinados.

Se ha hecho una recopilación de los trabajos, a nuestro juicio, más innovadores usando diferentes técnicas para predecir la calidad superficial. Este estado del arte incluye trabajos desde finales de la década de los noventa hasta las propuestas más recientes.

[Szalay y otros, 1996] usando un sistema de inferencia borroso monito-

rizaron el acabado superficial sin mediciones geométricas durante el proceso de corte. El objetivo de su investigación fue la aplicación de la teoría de resonancia adaptativa para reconocer qué operación de mecanizado produce fallos en la superficie. Para los experimentos se usó una fresadora vertical, 4 herramientas de corte, un sensor de esfuerzos piezoeléctrico, un acelerómetro piezoeléctrico y un osciloscopio digital. Las pruebas fueron hechas con acero C45. Como entradas al sistema neuroborroso seleccionaron: tipo de herramienta, medida del esfuerzo de corte perpendicular al plano de mecanizado y vibraciones. La salida esperada fue el acabado superficial. El sistema creaba todas las posibles reglas. Después de dados los datos tomados en la prueba de mecanizado el módulo de aprendizaje neuronal ajustaba las funciones de pertenencia y daba las mejores reglas. Esta investigación usó una versión modificada del tipo de modelo de red neuronal ART2.

[Azouzi y Guillot, 1997] aplicaron una técnica de fusión de sensores para estimar el acabado superficial on-line y la desviación dimensional en un proceso de torneado. Este método combinaba técnicas de modelizado con redes neuronales y herramientas estadísticas. Las técnicas de percepción usadas en el mecanizado incluyeron esfuerzos de corte, vibración, emisión acústica y deflexiones de la herramienta. Se usaron acelerómetros, dinamómetro piezoeléctrico de 3 componentes, capacitores y transductores de emisión acústica. Como herramientas estadísticas usaron el análisis de covarianza, para medir el efecto promedio de todos los niveles y la correlación entre las medidas del sensor y la porción de la variación total observada. Usaron una red para estimar el acabado superficial tipo perceptrón multicapa con un algoritmo quasi-Newton. El propósito de este método de fusión de sensores consiste en seleccionar los sensores cuyas señales lleven la mejor información acerca del estado de la operación de mecanizado.

[Dolinsek y otros, 1999] propusieron el uso de RNAs como herramienta para monitorizar el acabado superficial. En su trabajo se propone el uso de emisores acústicos para el desarrollo de un “sensor inteligente” para monitorización de procesos de acabado en mecanizado. Los autores admiten que uno de los principales obstáculos en su investigación es la casi imposibilidad de construir un modelo físico de la señal de emisión acústica dado que las señales generadas en procesos de corte reales con estructuras de piezas complejas son continuos y aleatorios. También encontraron que el desgaste de la herramienta es uno de los factores más influyentes en el incremento de energía de la señal de emisión acústica. Adicionalmente, el sensor es sensible a las señales de emisión acústica obtenidas por el corte de

piezas de diferentes materiales y las variaciones de los parámetros de corte.

[Kim y Chu, 1999] propusieron un método, que llamaron, de superposición de textura donde la rugosidad superficial fue determinada considerando los efectos mezclados de las marcas del cortador, el desajuste vertical entre dientes (run-out) y las ondulaciones. El trabajo logra expresar la máxima rugosidad geométrica en función del avance por diente, el traslape (stepover), la profundidad de corte y la geometría de la herramienta y pieza de trabajo. Otro aspecto meritorio de este trabajo fue el desarrollo de un modelo analítico generalizado para el perfil del cortador basado en la parametrización del radio del filo de corte y el ángulo de inclinación del cortador. Los experimentos se hicieron en una operación de fresado con acero de 350 Brinell. Según los autores las marcas de corte y el run-out fueron factores importantes que influyeron en la calidad superficial.

[Pittner y otros, 2000] realizaron un estudio de correlación entre variables medidas en un proceso de torneado como la velocidad de corte, la velocidad de avance, el valor promedio de la raíz media cuadrática (RMS) de las señales de emisión acústica y una variable de estado del proceso como Ra , Rz y $Rmax$. La experimentación se hizo en un torno de 5HP mecanizando acero AISI 1054 con insertos de carburo. Usaron 5 velocidades de corte, 5 velocidades de avance, manteniendo constante la profundidad de corte. Cada vez que una medición era realizada, 3 grabaciones sucesivas de señales acústicas eran recolectadas a una frecuencia de 2 Mhz. Cada experimento tuvo una única combinación de velocidad de corte (V_c), fuerza (F) y promedio RMS de las señales de emisión acústica. Encontraron que V_c , F y el promedio RMS están muy correlacionados con los parámetros de acabado superficial.

Uno de los principales grupos de investigación en la temática de la predicción del acabado superficial on-line está en la universidad de Iowa, liderado por el Dr. J. Chen. Han publicado varios estudios sobre acabado superficial y estado de la herramienta, para torneado y fresado. Estos trabajos incluyen RNAs y redes neuro-borrosas. A continuación se describen 6 de los trabajos más representativos de este grupo.

[Tsai y otros, 1999] presentaron un sistema de predicción del acabado superficial en-proceso para el proceso de fresado empleando un acelerómetro y un sensor de proximidad para recolectar datos de vibración y rotación respectivamente. Utilizaron modelos de redes neuronales con 1 y 2 capas ocultas, con un algoritmo de entrenamiento *backpropagation*, con velocidad del husillo, avance, profundidad de corte y vibración promedio por revolución como entradas para predecir la rugosidad promedio (Ra).

También evaluaron un método de regresión lineal múltiple para comparar la eficiencia contra una RNA con arquitectura 4-7-7-1, siendo esta última más eficiente para predecir Ra . Las pruebas se realizaron con aluminio 6061 y herramientas de 4 filos.

[Lou y Chen, 1999] siguiendo la misma estructura anterior combinaron lógica borrosa con RNAs para predecir Ra . Usaron los mismos parámetros de entrada más un acelerómetro triaxial y un sensor de proximidad para medir la vibración causada por las fuerzas de corte.

[Lee y Chen, 2003] también usaron la técnica neuro-borrosa para predecir la rugosidad superficial en torneado. Demostraron que las vibraciones entre la herramienta y la pieza de trabajo durante el proceso de corte es una variable importante para predecir la rugosidad superficial. Utilizando el coeficiente de correlación de Pearson se determinó que la dirección radial (eje X) de vibración fue la variable más significativa para pronosticar el acabado superficial. En estos trabajos los experimentos fueron realizados considerando un mismo tamaño de radio nariz y material de la herramienta y un mismo material de la pieza de trabajo.

[Yang y Chen, 2004] propusieron un sistema para identificar la rugosidad superficial óptima en una operación de fresado aplicando la técnica conocida como diseño de experimentos de Taguchi [Montgomery, 1996] basado en técnicas de control off-line. El diseño se verificó satisfactoriamente para parámetros de corte óptimos, como $A_2B_3C_1D_2$: profundidad de corte = 0.02 pulgadas (A_2), velocidad de giro = 5000 rpm (B_3), velocidad de avance = 10 pulgadas/min (C_1) y diámetro de la herramienta = 0.75 pulgadas (D_2). Se calculó el valor medio de rugosidad superficial (promedio = 23μ pulgadas) con un nivel de confianza del 95 %.

[Yang y otros, 2006] propusieron un sistema de control adaptativo para operaciones de fresado. Este sistema se basa en el esquema de entrenamiento neuro-borroso propuesto por [Chen, 2000]. Las regiones borrosas fueron definidas para cada parámetro: velocidad de corte, tasa de avance, fuerza resultante en el plano de corte (F_{XY}), fuerza normal al plano de corte (F_Z), desviación de Ra (DRa) y desviación de la tasa de avance (Df). El sistema tiene dos subsistemas, uno para predicción de Ra en proceso y otro para control de la tasa de avance (Df) que se adapta basado en el Ra predicho.

[Kirby y otros, 2004] publicaron el desarrollo de un sistema para predicción de rugosidad superficial usando acelerómetros en una operación de torneado con técnicas de regresión múltiple. En 2006, los mismos autores [Kirby y otros, 2006] desarrollaron un sistema de control adaptativo que usa la misma técnica propuesta por [Chen, 2000] y desarrollada para

fresado por [Yang y otros, 2006]. Estos modelos requieren más flexibilidad para ser acondicionados a la industria. Hasta aquí algunos de los trabajos presentados por el grupo de la universidad de Iowa.

Por su parte [Abouelatta y Mádl, 2001] presentaron modelos de regresión lineal para predecir la rugosidad superficial basado en las vibraciones de la máquina-herramienta y los parámetros de corte en un proceso de torneado. El análisis de vibraciones que efectuó reveló que la fuerza dinámica por la variación del grueso de la viruta, actuando en la herramienta, relaciona la amplitud de la vibración de la herramienta con la resonancia y la variación de la frecuencia natural de la herramienta durante el corte. Las vibraciones resultantes en la herramienta se midieron con acelerómetros, en las direcciones de avance y profundidad radial. Presentaron 4 modelos diferentes para predecir Ra , Rt , Rsk (Rsk puede usarse para cuantificar la simetría de la superficie, se evalúa tomando “el cubo” de las alturas de la superficie) usando regresión lineal y análisis de correlación. El primer modelo tomando todas las variables definidas, el segundo descartando los parámetros de corte, el tercero usando los parámetros de corte con las variables relacionadas con la herramienta y con la pieza, y por último, el cuarto igual al anterior pero descartando los parámetros de corte considerando sólo el avance. Como se esperaba, se llegó a la conclusión de que los modelos dependientes de los parámetros de corte y las vibraciones de la herramienta son mucho más exactos que los dependientes solamente de los parámetros de corte. Otra conclusión encontrada fue que el máximo pico Rt depende mucho de la velocidad de corte rotacional y del diámetro de la pieza de trabajo.

[Chien y Chou, 2001] desarrollaron un algoritmo genético y una RNA incorporando la búsqueda de condiciones óptimas de corte para maximizar la TAM bajo restricciones de acabado superficial previsto y acabado superficial previsto asociado a la vida de la herramienta en un proceso de fresado en seco usando acero inoxidable. Los autores parten de una investigación inicial de [Chien y Yao, 1997] en la que usaron RNAs para desarrollar un modelo predictivo para prever los esfuerzos de corte y el acabado superficial de la pieza bajo condiciones de corte específicas. En el nuevo trabajo buscaron predecir el valor de vida de herramienta usando la velocidad de corte. Una vez encontrada la velocidad de corte que satisficiera la restricción de vida de herramienta, usaron el modelo con AG para obtener la TAM y las condiciones de corte óptimas. Las restricciones se definieron primero para la rugosidad superficial esperada (Ra). Después Ra se fijó en 2 mm y la vida de la herramienta en 30 o 60 min. Para medir la vida de la

herramienta se determinó como desgaste promedio en el flanco 0.3mm. Para las fuerzas on-line utilizaron dinamómetros y para la rugosidad off-line un rugosímetro.

[Suresh y otros, 2002] plantearon una metodología de superficie de respuesta (RSM) con un modelo matemático de segundo orden en términos de los parámetros de mecanizado. Este modelo daba el factor de efectos de los parámetros individuales del proceso que luego se optimizaban con algoritmos genéticos para predecir la rugosidad. Las variables definidas en este trabajo fueron: velocidad de corte, velocidad de avance, profundidad de corte y radio de la herramienta. Hicieron 81 experimentos mecanizando Acero templado en un proceso de torneado para identificar la variación de todos los parámetros y estudiar su influencia en la rugosidad. Cada componente mecanizado fue tomado para medir la rugosidad superficial. Los modelos basaron su análisis en el coeficiente de regresión múltiple del modelo de primer orden que fue 0.653, no eficiente. El de segundo orden fue 0.801. Se buscaba reducir el tiempo de mecanizado para lograr una rugosidad superficial buena y alta TAM.

[Feng y Wang, 2003] presentaron un trabajo enfocado en el desarrollo de un modelo empírico para la predicción de la rugosidad superficial en torneado. Compararon un modelo de regresión lineal con uno de RNA usando las mismas variables entrada/salida en ambos modelos. Usaron el modelo de predicción de acabado superficial de [Boothroyd y Knight, 1989] $Ra = feed\ rate^2/32r$ (ecuación 2.6), donde *feed rate* es el avance y *r* es el radio de la herramienta, asumiendo un radio relativamente grande y una velocidad lenta. Del modelo de regresión se concluyó que la dureza del material y la profundidad de corte no producen un impacto significativo en la rugosidad superficial actuando individualmente. La dureza del material unida con el avance y con el radio de la herramienta, al igual que la profundidad de corte unida con la velocidad, tienen efecto significativo estadísticamente en la rugosidad superficial. Para el modelo con RNAs, se usó *backpropagation* con arquitectura 5-10-1. Para calificar los modelos tomaron 3 tipos de errores: error absoluto máximo, error absoluto mínimo y la raíz del error cuadrático medio. Como conclusiones en este trabajo se encontró que el modelo de RNAs tenía errores menores que el respectivo error del modelo de análisis de regresión. Pero los resultados obtenidos indicaron que no había diferencias significativas entre los modelos; desde el punto de vista de la modelización ambos tenían un comportamiento estadísticamente satisfactorio.

Otro grupo fuerte en este tema es el de la universidad de Purdue liderado

por el Dr. Shin. Han trabajado principalmente en la monitorización y control del acabado superficial durante el proceso de mecanizado utilizando sensores de ultrasonido [Coker y Shin, 1996]. El sistema ultrasónico es utilizado para medir la intensidad reflejada de los rayos (de ultrasonido) desde la superficie y así detectar los cambios causados en la superficie por la herramienta. También fue posible determinar el desgaste de la herramienta por medio de las mediciones del acabado de la superficie. Las experimentaciones fueron realizadas en aluminio 6061 con operaciones de planeado.

[Lee y otros, 2001] propusieron un algoritmo de simulación de la rugosidad superficial en fresado de alta velocidad basado en una señal de aceleración. Además, se usa un modelo geométrico del proceso de fresado desarrollado por [Kline y Devor, 1983] donde se toma en cuenta la compensación de eje paralelo del husillo. Utilizaron un acelerómetro ubicado en el husillo en la dirección Y. El algoritmo toma en cuenta las vibraciones del sistema del husillo que aparecen en el mecanizado a alta velocidad. Las entradas del modelo fueron la velocidad de rotación del husillo, el avance por diente, la profundidad radial y la profundidad axial. La salida medida y simulada fue Ra . El modelo geométrico utilizado calcula el radio de un diente en particular, la posición angular del cortador y el ángulo de acercamiento. El acelerómetro mide la señal de vibración y mediante un análisis de FFT (del inglés *Fast Fourier Transform*) se procesa la componente de máxima frecuencia. Las pruebas se hicieron en un centro de mecanizado Makino V-55 usando herramienta de 4 filos y diámetro 10 mm cortando un bloque de acero. Sus resultados fueron muy similares a los medidos concluyendo que las vibraciones fueron bien simuladas.

[López y otros, 2003] plantearon una metodología para caracterizar superficies mecanizadas identificando las componentes de la huella de la herramienta y las características de rugosidad asociadas al material a ser mecanizado. Propusieron un método de descomposición de frecuencias mediante transformada de Fourier, determinándose que la rugosidad está determinada por las primeras cinco componentes de baja frecuencia del espectro. Para el estudio se utilizó aluminio 6063 mecanizando una ranura por cada velocidad de avance. Se demostró que los valores de rugosidad Ra y Rz se incrementan a velocidades de avance bajas. En el experimento se mantuvieron constantes el radio de la herramienta, la rpm y la profundidad de corte.

[Dweiri y otros, 2003] realizaron trabajos donde demostraron la posible influencia del número de filos de la herramienta de fresado en la predicción del acabado superficial. Para ello desarrollaron un sistema de inferencia

neuroborroso adaptativo. El sistema tenía 3 entradas para sus funciones de pertenencia de avance, rpm y profundidad de corte. El sistema demostró que en ciertas condiciones de mecanizado se obtenía mejor acabado con una herramienta de fresado de 4 filos que en el caso de una herramienta de fresado de 2 filos.

[Jung y otros, 2005] desarrollaron un modelo analítico del acabado superficial para fresado con herramientas de bola. El método se basa en el modelizado de las alturas de las marcas de corte (cantos) que normalmente dejan este tipo de herramientas al mecanizar. Los ángulos de las helicoides de la herramienta se desprecian y se toma el modelo como si fueran planos con forma de medios discos. Las ecuaciones de los cantos fueron obtenidas en función del radio de la herramienta, el avance por diente y el ángulo de rotación de los flancos de corte.

[Quintana y otros, 2009] desarrollaron una aplicación para supervisar la rugosidad superficial basada en redes neuronales. La experimentación se realizó en un centro de mecanizado vertical cortando ranuras con herramienta de bola. Entrenaron una red neuronal con 250 datos en una estructura de 28 entradas, 20 capas ocultas y la rugosidad superficial Ra como salida. Las entradas incluían parámetros de proceso, características de la herramienta, propiedades del material y vibraciones de la máquina medidas con acelerómetros.

En la tabla 2.2 se presenta un resumen de los trabajos presentados en el estado del arte detallando las técnicas de modelización, el proceso al que han sido aplicados y las variables utilizadas. Las principales herramientas usadas en los más recientes trabajos significativos para predecir la rugosidad superficial son la regresión lineal o múltiple y las RNAs. No tienen presente frecuentemente el análisis mecánico del proceso cortante o la experiencia del experto en el proceso (operador, ingeniero de la producción o ingeniero mecánico). Éste era un punto fundamental para nosotros al escoger la herramienta para desarrollar un predictor óptimo de Ra .

En resumen, no hay acuerdo en el concepto de la predicción general y en los modelos a usarse, ya que en la investigación hecha hasta la fecha todavía no se han satisfecho las necesidades reales de la industria. Además, no hay un dispositivo fiable en el mercado para medir la rugosidad superficial en proceso. El uso de instrumentos para medir la rugosidad superficial fuera de línea significa que la eficiencia de la línea de producción se ve afectada debido a la falta de control en tiempo-real. Esto es especialmente evidente en el tiempo requerido para la inspección pos-proceso y en la pérdida de material y tiempo de producción en la fabricación de piezas defectuosas.

Tabla 2.2: Resumen del estado del arte

Referencia	Variables	Técnicas usadas	% Error	Proceso
[Szalay y otros, 1996]	Parámetros de corte, tipo de herramienta, fuerzas y vibraciones	Sistema neuro-borroso		Fresado
[Azouzi y Guillot, 1997]	Fuerzas de corte, vibraciones y deflexión de la herramienta	RNAs, análisis de covarianza y fusión sensores	Entre 2 y 25 %	Torneado
[Dolinsek y otros, 1999]	Emisión acústica y parámetros de corte	RNAs		Fresado
[Kim y Chu, 1999]	Avance por diente, stepover, profundidad de corte y geometría de la herramienta	Física		
[Pittner y otros, 2000]	Velocidad de corte, velocidad de avance y RMS de emisión acústica	Correlación	2 %	Torneado
[Tsai y otros, 1999]	Parámetros de corte, vibraciones	RNAs	5 %	Fresado
[Lou y otros, 1999]	Vibraciones, fuerzas de corte, rpm y profundidad de corte	RNAs y Lógica Borrosa	4 %	Fresado
[Lee y Chen, 2003]	Parámetros de corte y vibraciones	Sistema neuro-borroso y correlación	9.7 %	Torneado
[Yang y Chen, 2004]	Parámetros de corte, Ra deseada	Diseño de Taguchi		Fresado
[Yang y otros, 2006]	Velocidad de corte, avance, fuerzas de corte, desviación de Ra	Sistema neuro-borroso	9.22 %	Fresado
[Kirby y otros, 2004]	Parámetros de corte y acelerómetros	Regresión múltiple		Torneado
[Kirby y otros, 2006]	Parámetros de corte y acelerómetros	Sistema neuro-borroso		Torneado
[Abouelatta y Mádl, 2001]	Parámetros de corte y vibraciones	Regresión lineal		Torneado
[Chien y Chou, 2001]	Parámetros de corte	Algoritmos genéticos y RNAs	4 %	Fresado
[Chien y Yao, 1997]	Parámetros de corte	RNAs y algoritmos genéticos		Fresado
[Suresh y otros, 2002]	Velocidad de avance y de corte, profundidad de corte y radio de la herramienta	Superficie de respuesta, correlación y algoritmo genéticos		Torneado
[Feng y Wang, 2003]	Dureza del material, radio de la herramienta y parámetros de corte	Regresión lineal y RNAs	10 %	Torneado
[Coker y Shin, 1996]	Ultrasonido, parámetros de corte	Física		Fresado
[Lee y otros, 2001]	Vibraciones, rpm, avance por diente, profundidad radial y axial	Modelo geométrico y de simulación de [Kline y Devor, 1983]		Fresado
[López y otros, 2003]	Radio de herramienta, rpm, profundidad de corte y velocidad de avance	Análisis FFT		Fresado
[Dweiri y otros, 2003]	Parámetros de corte	Sistema neuro-borroso	5 %	Fresado
[Jung y otros, 2005]	Radio de herramienta, avance por diente, ángulo de rotación de la herramienta	Física		Fresado
[Quintana y otros, 2009]	Vibraciones, parámetros de corte, características de la herramienta y propiedades del material	RNAs		Fresado

2.6. Necesidad de modelos predictivos de calidad superficial

El principal problema para medir la calidad superficial de piezas mecanizadas, es que debe ser evaluada “pos-proceso” con instrumentos de sensibilidad micrométrica, lo que genera retrasos y pérdidas de tiempo dado que se requiere retirar la pieza de la línea de producción para su inspección. Aparte está la necesidad de implementar métodos estadísticos para el control de la calidad por la imposibilidad de medir todas las piezas que se producen [Logothetis y Wynn, 1995].

Para solucionar este problema se han desarrollado métodos para medir la calidad “en-proceso”. Algunos son físicos que involucran sistemas libres de contacto, de procedimiento óptico, con láser. Este tipo de sistemas han sido probados principalmente en ambientes de laboratorio que se alejan bastante de lo normal en cualquier taller. Sin embargo, se han ofertado productos con este tipo de soluciones, aunque es de extrañar que dentro de las restricciones de uso aparezcan cosas tan singulares en esta industria como “los materiales a medir deben ser poco reflectantes” o “las superficies deben estar secas y limpias”, limitaciones difíciles de conseguir en la mayoría de líneas de producción.

Otra solución planteada es modelizar el comportamiento de la rugosidad a partir de otras variables asociadas al proceso de corte usando técnicas de IA o estadísticas. Ésta es la opción escogida en esta tesis.

El mundo real tiende a ser muy complejo e impredecible, y los mecanismos o procesos que generan los datos son muchas veces desconocidos. Cuando son recolectadas variables físicas, los sensores no son ideales: de precisión finita, ruido, con restricciones de ancho de banda, etc., de modo que las mediciones no representan exactamente el fenómeno real. Una de las demandas en la ciencia es encontrar un modelo fiable a partir de datos.

Un modelo constituye una representación abstracta de un cierto aspecto de la realidad. En su estructura intervienen, por una parte, los elementos que caracterizan la realidad modelada y, por otra parte, las relaciones existentes entre ellos. La construcción de modelos revela, a veces, relaciones que no son evidentes a primera vista. Una vez construido el modelo, es posible extraer de él propiedades y características de las relaciones que de otra forma permanecerían ocultas.

Los modelos no reproducen la realidad, sino que pueden formular una planificación sobre ella, y siempre una hipótesis resultante de

una simplificación que resulta de prescindir de un cierto número de variables, lo que supone inevitablemente la no consideración de una serie de factores componentes de la realidad que realmente entran en juego [Checkland, 1997].

2.6.1. Modelos analíticos frente a modelos empíricos

Los modelos analíticos son deterministas y están basados en representaciones matemáticas del sistema a modelar. En algunos casos, como la predicción del acabado superficial, es imposible o muy difícil de modelar de forma analítica. Hay variables o estados del proceso que no se ven reflejados en las ecuaciones físicas del corte de metales. En estos casos la predicción, aunque se puede hacer de manera teórica, no es real, ya que no se manifiestan todas las características del proceso.

Por su parte, los modelos empíricos están fundamentados en observaciones directas, pero tienen de inconveniente que si los experimentos realizados en los que se basará el modelo, no se hacen con toda la rigurosidad científica requerida y partiendo de un diseño de experimentos apropiado, también conducirán a un modelo irreal.

2.6.2. Modelos estadísticos frente a modelos con IA

Cuando se modeliza estadísticamente puede verse qué variables forman parte del modelo y cómo. Son modelos explícitos, cosa que no es posible con algunas técnicas de IA como las redes neuronales.

La IA simula las actividades de los expertos y sus operaciones de razonamiento en varios ámbitos del conocimiento, pero cada vez más, la misma elaboración de conocimientos constituye su objetivo.

Existe una discusión respecto a qué es mejor, si un modelo estadístico o una red neuronal. La respuesta es que depende del problema: hay problemas en los que funciona mejor una red pero hay otros en los que funciona mejor un modelo estadístico. Conviene por tanto probar las dos metodologías.

2.6.3. Modelos de redes Bayesianas

Las técnicas de aprendizaje automático permiten aprender un modelo a partir de un conjunto de datos [Duda y otros, 2001]. Se han seleccionado las redes Bayesianas (RBs), ampliamente conocidas en el ámbito del diagnóstico médico. Son un caso particular de los modelos gráficos probabilísticos

[Larrañaga y Moral, 2008]. Algunas de sus más importantes características son que permiten aprender las relaciones de dependencia y causalidad entre las variables del problema, pueden combinar conocimiento experto con datos y pueden manejar bases de datos incompletas. Son estas características las que nos han llevado a la decisión de implementarlas en los procesos de producción.

2.7. Conclusiones del capítulo

A lo largo de este capítulo se ha presentado un breve resumen histórico de la evolución de la máquina-herramienta en las revoluciones industrial y electrónica.

Como marco teórico para el desarrollo del presente trabajo se han revisado las nociones básicas del mecanizado a alta velocidad como un proceso de arranque de viruta, identificando las variables que intervienen en él. También se han expuesto los componentes de la máquina-herramienta, herramientas, etc., así como los conceptos relacionados con la calidad superficial, formas de medirla, instrumentos usados en su medición y una discusión sobre la calidad industrial y los factores que afectan a la rugosidad superficial. Adicionalmente en este capítulo se ha presentado el estado del arte con algunos de los trabajos más relevantes usando técnicas de IA aplicadas a procesos de mecanizado y se ha expuesto la necesidad de incorporar modelos predictivos de calidad superficial.

Hasta el momento sólo se han descrito los esfuerzos enfocados a clasificar los factores que afectan a la calidad superficial. En los dos siguientes capítulos se mostrarán los trabajos encaminados a la obtención de modelos para clasificar la rugosidad superficial a partir de una serie de variables influyentes.

Capítulo 3

CLASIFICADORES BAYESIANOS PARA MODELIZAR R_a

3.1. Introducción

El objetivo principal de esta memoria es el desarrollo de una metodología para obtener modelos predictivos que pueda ser aplicada a procesos industriales de corte de metales. Para el caso concreto que nos compete, “modelizado de la rugosidad superficial en fresado a alta velocidad”, parte muy importante de esta metodología y antes del desarrollo de los modelos propiamente dichos es la fase experimental. En este capítulo se detalla la plataforma experimental con sus componentes, el diseño de experimentos y los modelos basados en clasificadores Bayesianos obtenidos a partir de dicha experimentación. Gran parte del contenido de este capítulo aparece publicado en [Correa y otros, 2008].

3.2. Experimentación

3.2.1. Preliminares

Los experimentos que se describirán más adelante en este capítulo fueron llevados a cabo en un centro de mecanizado Kondia HS1000 de 3 ejes, con velocidad máxima de husillo de 24000 rpm y equipado con

un controlador de arquitectura abierta Siemens Sinumerik 840D. Durante la primera fase experimental se usaron piezas de trabajo o perfiles, de $170 \times 100 \times 25$ mm (largo/ancho/alto) de acero F114, cortando ranuras con herramientas Karnash para end-mill modelo 30.6472 de dos filos, con 25° de ángulo de hélice y modelo 30.6455 de 6 filos, con 45° de ángulo de hélice, para ambos casos de diámetros 6, 8, 10 y 12 mm.

Para dar valor añadido a la experimentación, y con el objetivo de obtener un modelo general (enmarcado en un dominio específico) en las siguientes pruebas se incluyó la influencia de la geometría de la pieza a mecanizar y su dureza. Para hacer estos ensayos se acotó el subdominio particular al mecanizado de piezas dirigidas a los sectores aeronáutico y automotriz, seleccionando como material de trabajo el aluminio con durezas que van de 65 a 152 HB. Se hicieron pruebas en perfiles de aluminio cortando con herramientas Sandvik Coromant para end-mill de 2 filos, con 25° de ángulo de hélice y diámetros de herramienta que van de 8 a 20 mm. En la tabla 3.1 se relacionan los materiales y las herramientas utilizadas.

Tabla 3.1: Materiales de los perfiles y herramientas de corte

Aleación de Acero (HB)	Herramientas de corte (\varnothing mm)
LAM-F114 (145)	30.6472 (6, 8, 10, 12)
LAM-F114 (145)	30.6455 (6, 8, 10, 12)
Aleación de Aluminio	Herramientas de corte (\varnothing mm)
AW5083-H111 (70)	R216.32-08025 - AP12AH10F (8)
AW6082-T6 (95)	R216.32-10025 - AP14AH10F (10)
AW2024-T3 (110)	R216.32-12025 - AP16AH10F (12)
AW7022-T6 (139)	R216.32-16025 - AP20AH10F (16)
AW7075-T6 (157)	R216.32-20025 - AP20AH10F (20)

3.2.2. Plataforma experimental

La plataforma experimental, aparte del centro de mecanizado, está conformada por el sistema de adquisición de datos que incluye varias señales internas del CNC, sensores instalados en la máquina, amplificadores para acondicionamiento y filtrado de las señales adquiridas, una tarjeta de adquisición y un programa desarrollado en Labview¹ para controlar el sistema de adquisición. La figura 3.1 muestra la plataforma experimental completa.

¹Entorno de programación gráfica de National Instruments. <http://www.ni.com/labview/>



Figura 3.1: Plataforma experimental: A) Sensores en la mesa de trabajo. B) CNC. C) Amplificadores. D) Sistema de adquisición de señales. E) Ordenador industrial para manipulación de las señales adquiridas. F) Programa Labview.

Sensores

El uso de la fusión de sensores no es novedoso. Hay varios trabajos que incluyen esta técnica en el ámbito de procesos de corte de metales [Azouzi y Guillot, 1997, Dimla, 1999]. Nuestro trabajo se centra en el uso del dinamómetro, instalado en la mesa de trabajo del centro de mecanizado.

Dinamómetro (señales de fuerzas de corte)

Se ha demostrado que las fuerzas de corte son muy importantes en el proceso de corte de metales y pueden ser correlacionadas con la rugosidad superficial. Para medir las fuerzas de corte se usó un dinamómetro Kistler modelo 9257B. Éste es un dinamómetro universal con 3 componentes de cristal de cuarzo para la medición de las tres componentes ortogonales de una fuerza. La figura 3.2 muestra el dinamómetro en el que se fijó la pieza. Las principales características técnicas son: rango de medición: $\pm 5\text{kN}$ (F_x, F_y, F_z), calibración parcial: 0 a 50N, 0 a 100N, 0 a 500N, o 0

a 1000N, sobrecarga permitida: $\pm 7.5\text{kN}$ (F_x, F_y, F_z), sensibilidad: -7.5 pC/N (F_x, F_y) y -3.7 pC/N (F_z), frecuencia natural: 2.3 kHz (F_x, F_y) y 3.5 kHz (F_z), temperatura de operación: 0 a 70°C, dimensiones: 170 × 100 × 60mm (largo/ancho/alto) y peso: 7.3kg.

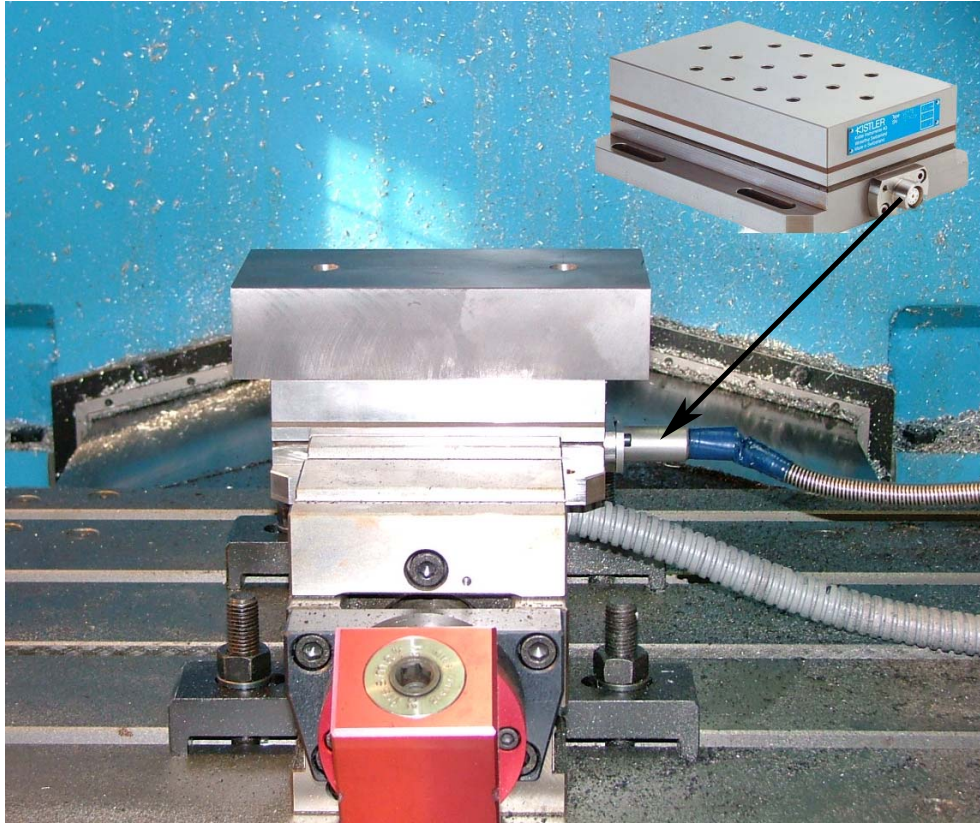


Figura 3.2: Sensor para la medición de fuerzas de corte

Amplificador

Para amplificar las señales de fuerza, se usó un amplificador multicanal de carga marca Kistler tipo 5070A. Los sensores de fuerza piezoeléctricos producen una carga eléctrica que varía en proporción directa a la carga actuante en el sensor. El amplificador de carga convierte la carga eléctrica en voltaje proporcional. Para el registro de las fuerzas dentro de un rango aceptable se configuró el amplificador multicanal con los parámetros mostrados en la tabla 3.2. El amplificador usado se muestra en la parte C de la figura 3.1.

Tabla 3.2: Parámetros configurados en el amplificador multicanal Kistler tipo 5070A

Parámetro	Fuerza X Canal 1	Fuerza Y Canal 2	Fuerza Z Canal 3
Sensibilidad (pC/N)	-7.4	-7.5	-3.7
Filtro paso alto	DC(Long)	DC(Long)	DC(Long)
Filtro paso bajo	OFF	OFF	OFF
Rango (N)	3000	3000	3000
Escala (N/V)	300	300	300

Tarjeta de adquisición

Las señales se adquirieron con una tarjeta *DAQ NI-6251* configurada para adquirir señales a una tasa de muestreo de 40KS/s. Esta tarjeta garantiza 16-bit de precisión y una tasa de muestreo de hasta 1.25MS/s. En la figura 3.1, parte **E**, se muestra la tarjeta.

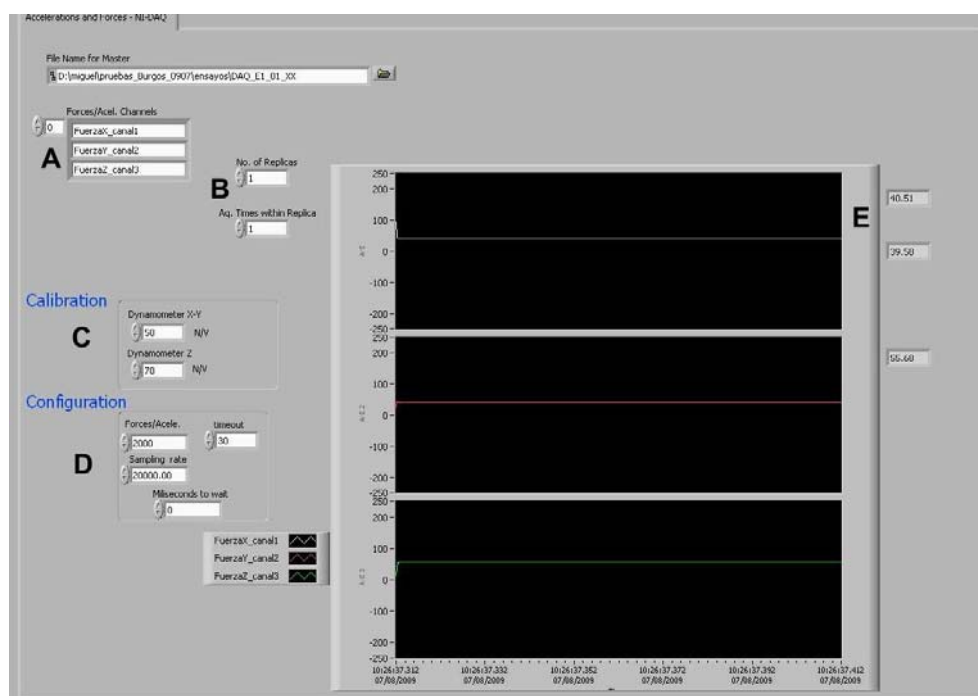


Figura 3.3: Interfaz del programa desarrollado en Labview para controlar la adquisición de señales: A) Configuración de los canales. B) Definición de replicas del experimento. C) Factores de conversión para las señales. D) Definición de la tasa de muestreo. E) Gráfica de la fuerza por cada eje F_x , F_y , F_z

Programa de adquisición

Se diseñó e implementó una interfaz para controlar, monitorizar y almacenar las señales tanto de los sensores como internas del CNC. Este programa se desarrolló en LabView, véase figura 3.3. Sus principales funciones son definir la configuración de cada canal de la tarjeta *NI – 6152*, controlar el inicio y parada del sistema de adquisición durante el proceso de mecanizado, especificar la tasa de muestreo para las tarjetas de adquisición, determinar el número de muestras adquiridas por cada canal y monitorizar gráficamente la señal en tiempo real durante el proceso de mecanizado.

3.2.3. Preprocesamiento de la señal

Las señales registradas durante el proceso de mecanizado tienen información con la que podemos asociar el estado de la máquina con el acabado superficial. Ésta información está representada en frecuencias, vibraciones, potencia consumida, etc. La medición adecuada de las señales, aparte de la selección de los sensores correctos, implica definir la frecuencia ideal para registrar la señal, tanto en el sensor determinado como en el amplificador.

Después de varias pruebas se determinó la tasa de muestreo correcta y los ajustes requeridos por los amplificadores. La señal de fuerza (dinamómetro) se registró con una tasa de muestreo de 40.000 Hz con el amplificador descrito en un apartado de la sección 3.2.2. La señal, en el dominio del tiempo, fue transformada al dominio de la frecuencia aplicando una transformada de Fourier. La figura 3.4 muestra el registro de las señales durante el proceso de corte con el ensayo 22 del diseño de experimento 1 (se explicará más adelante).

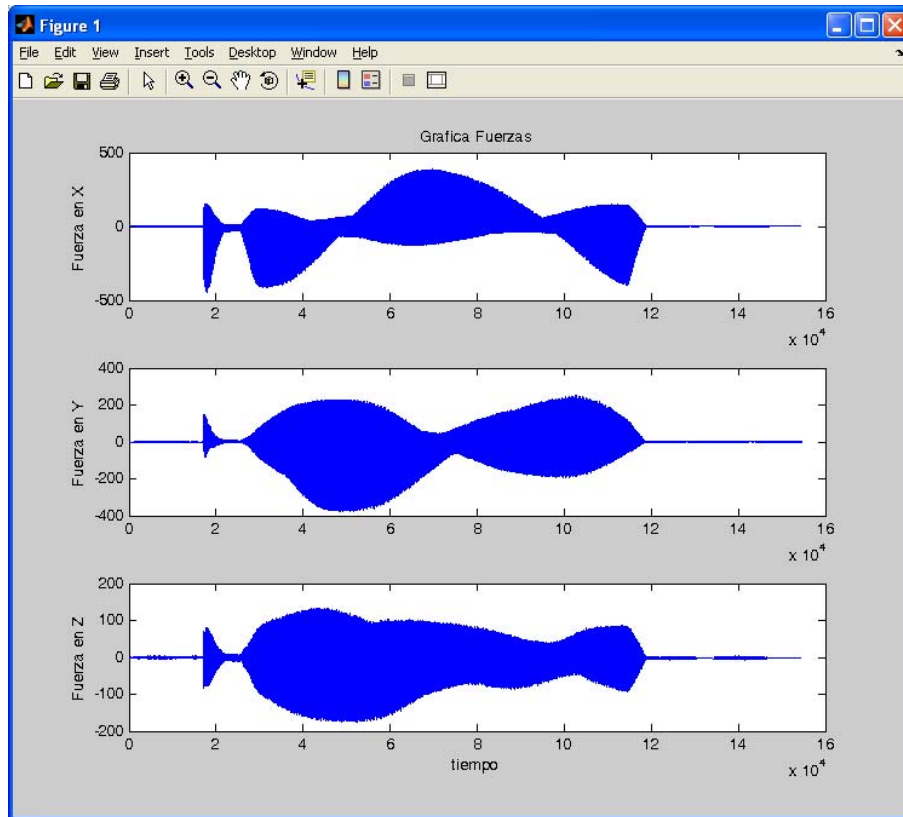


Figura 3.4: Señal de fuerzas por cada eje, adquirida durante el proceso de corte del experimento E1-22 (tabla 4.2).

3.2.4. Planificación del experimento

La planificación de los experimentos realizados a lo largo del desarrollo de la tesis ha pasado por varias etapas. Se hicieron 3 fases de experimentación: una inicial que permitió realizar el acercamiento al problema e identificar las variables medibles involucradas en el proceso de mecanizado seleccionado -fresado-, una segunda con un diseño de experimento factorial fraccional con la que se acotó el subdominio al que se dirigiría el modelo, y una tercera y última fase, con diseño de experimento de superficie de respuesta, con el cual se amplió el subdominio y sirvió para refinar el modelo previamente obtenido. Los dos últimos diseños se explicarán en el capítulo 4 (sección 4.2.2 y 4.2.3).

3.3. RB como modelos predictivos de Ra

Para construir el modelo de acercamiento al problema, en adelante experimento inicial, se empezó con la forma tradicional utilizada en la experimentación. Ésta se basa en estudiar los factores uno a uno, es decir, variando los niveles de un factor permaneciendo fijos los demás.

Para el experimento inicial, usando perfiles de acero F114, cada herramienta (\emptyset 6, 8, 10 y 12 mm separadas por familias de acuerdo al número de filos, 2 y 6) mecaniza una recta (ranura) con valores constantes de rpm y profundidad de corte, con incrementos de 25, 50 y 75 % de la velocidad inicial de *feed rate*. Después se mecanizan otras rectas incrementando los valores de rpm (bajo el mismo patrón de 25, 50 y 75 %) manteniendo constante los valores de *feed rate* y profundidad de corte. Para todos los experimentos se usaron herramientas nuevas y combinaciones de parámetros libres de chatter. En la tabla 3.3 se muestran los niveles usados en este experimento. De este experimento se obtuvo un conjunto de datos de 250 registros. Cada registro incluye la información de 7 variables: *Ra*, FT, a_p , *feed rate*, rpm, flutes y \emptyset , definidas más adelante en la sección 3.3.3.

Tabla 3.3: Experimento inicial

No. Prueba	Herramienta (ref/ \emptyset en mm)	rpm	avance (mm/rpm)
1	30.6472/6	15520	1600/2000/2400/2800
2	30.6472/6	19400	2200/2750/3300/3850
3	30.6472/8	11000	1500/1875/2250/2625
4	30.6472/8	15000	2000/2500/3000/3500
5	30.6472/10	9000	1300/1625/1950/2275
6	30.6472/10	12000	1700/2125/2550/2975
7	30.6472/12	7000	1200/1500/1800/2100
8	30.6472/12	10000	1600/2000/2400/2800
9	30.6455/6	11000	1700/2125/2550/2975
10	30.6455/6	13000	1700/2125/2550/2975
11	30.6455/8	8500	1700/2125/2550/3400
12	30.6455/8	10000	1700/2125/2550/2975
13	30.6455/10	6800	1700/2125/2550/2975
14	30.6455/10	8000	1700/2125/2550/2975
15	30.6455/12	5525	1530/1912/2295/2670
16	30.6455/12	6500	1530/1912/2295/2670

Esta metodología fue buena para empezar a conocer el problema pero presentaba inconvenientes como la necesidad de un gran número de pruebas

o que las conclusiones obtenidas en el estudio de cada factor tenían un campo de validez muy restringido. Tampoco fue posible estudiar la existencia de interacción entre los factores, ya que la variación se hizo solamente a un factor cada vez. En resumen por problemas de tiempo y costo fue imposible continuar con esta metodología.

Sin embargo, con esta experiencia se obtuvo un modelo inicial introduciendo las redes Bayesianas a este campo, siendo ésta una contribución importante de este capítulo.

Las redes Bayesianas tienen importantes aplicaciones prácticas y son muy competitivas frente a otros métodos de inteligencia artificial como las redes neuronales artificiales o los árboles de decisión [Perzyk y otros, 2005, Marchant y Onyango, 2003, Zhang y Bivens, 2007]. Un clasificador Bayesiano es una red Bayesiana aplicada a tareas de clasificación, donde cada ejemplo de entrenamiento cambia la probabilidad estimada de que una hipótesis sea correcta y el conocimiento a priori puede ser usado para determinar la probabilidad de una hipótesis. Una red Bayesiana puede clasificar nuevos casos combinando diferentes hipótesis probabilísticamente.

3.3.1. Clasificación supervisada

El desarrollo de sistemas basados en conocimiento motivó la investigación en el área de aprendizaje tratando de automatizar el proceso de adquisición de conocimiento, uno de los principales problemas encontrados en la construcción de tales sistemas. Un aspecto importante del aprendizaje inductivo es obtener un modelo del comportamiento de algunas variables desconocidas a partir de otras variables conocidas. Las redes Bayesianas proporcionan este tipo de información [Pearl, 1988].

Un problema de clasificación supervisada consiste en asignar a un vector de observaciones $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ una de r clases o etiquetas de la variable clase C . La clase verdadera se denota por c y toma valores en $\{1, 2, \dots, r\}$. Es decir, buscamos una función γ que asigna etiquetas a las observaciones:

$$\gamma : (x_1, \dots, x_n) \rightarrow \{1, 2, \dots, r\}$$

La matriz de costos refleja el costo asociado a los casos mal clasificados, donde $cos(s', s)$ indica el costo de clasificar un elemento de clase s (verdadera) en la clase s' (predicha).

Dadas las observaciones, se supone la existencia de una distribución de probabilidad conjunta desconocida sobre $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ y C :

$$p(x_1, \dots, x_n, c) = p(c|x_1, \dots, x_n)p(x_1, \dots, x_n) = p(x_1, \dots, x_n|c)p(c)$$

El objetivo es construir un clasificador que minimice el costo total esperado de los errores incurridos por el clasificador de Bayes:

$$\gamma(\mathbf{x}) = \arg \min_k \sum_{c=1}^r \cos(k, c)p(c|\mathbf{x})$$

Para una función de pérdida 0/1 (0 si $k = c$, 1 si $k \neq c$), el clasificador de Bayes busca asignar a \mathbf{x} la clase con la probabilidad a posteriori más alta

$$\gamma(\mathbf{x}) = \arg \max_c p(c|x_1, \dots, x_n)$$

La función de distribución conjunta $p(x_1, \dots, x_n, c)$ es desconocida y se puede estimar a partir de una muestra aleatoria simple $(\mathbf{x}^{(1)}, c^{(1)}), \dots, (\mathbf{x}^{(N)}, c^{(N)})$ extraída de esta función de distribución conjunta. La función γ puede usarse para asignar una etiqueta c a una observación no vista \mathbf{x} en la muestra aleatoria.

Por lo tanto, el problema es calcular $p(c|\mathbf{x})$. Esto se logra aplicando el teorema de Bayes.

3.3.2. Redes Bayesianas para clasificación

Una RB es un modelo gráfico probabilístico, un grafo acíclico dirigido que representa un conjunto de variables (nodos) y sus independencias condicionales probabilísticas (codificadas en sus arcos). Los nodos pueden representar cualquier tipo de variable: un parámetro medido, como Ra , una variable latente o una hipótesis. Existen algoritmos eficientes que realizan la inferencia y el aprendizaje en RBs [Neapolitan, 2004, Castillo y otros, 1997].

Si hay un arco del nodo A a otro nodo B, A se llama padre de B, y B es un hijo de A. El conjunto de nodos padre de un nodo x_i se denota como $padres(x_i)$. Un grafo acíclico dirigido es una RB relativo a un conjunto de variables si la distribución de probabilidad conjunta de las variables nodo puede escribirse como el producto de las distribuciones locales de cada nodo y sus padres como

$$P(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n P(x_i|padres(x_i))$$

El principio fundamental de un clasificador Bayesiano es la aplicación del teorema de Bayes. El teorema de Bayes, ecuación (3.1), calcula la probabilidad *a posteriori* $P(c_j|\mathbf{x}_i)$ con $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{in})$ a partir de las probabilidades condicionadas $P(\mathbf{x}_i|c_k)$ y las probabilidades a priori $P(c_k)$ como

$$P(c_j|\mathbf{x}_i) = \frac{P(\mathbf{x}_i|c_j)P(c_j)}{\sum_k P(\mathbf{x}_i|c_k)P(c_k)} \quad (3.1)$$

La probabilidad a posteriori $P(c_j|\mathbf{x}_i)$ es la probabilidad de que un ejemplo con características \mathbf{x}_i pertenezca a la clase c_j . La probabilidad a priori $P(c_j)$ es la probabilidad de que un ejemplo pertenezca a la clase c_j dado que no se tiene información sobre sus valores de las características. Las probabilidades de la ecuación (3.1) pueden ser estimadas a partir del conocimiento del experto o desde un conjunto de entrenamiento requerido para construir el clasificador, donde cada instancia i está dada por (\mathbf{x}_i, c_i) .

La regla de Bayes se usa para predecir la clase y clasificar cada nueva instancia, que es un ejemplo caracterizado solamente con los valores de las variables predictoras. Se le asigna una etiqueta de clase de acuerdo a la clase que tiene la máxima probabilidad a posteriori. Una propiedad útil de los clasificadores Bayesianos es que son óptimos en el sentido de que la tasa esperada de casos mal clasificados se reduce al mínimo [Ripley, 1996].

De los diferentes clasificadores Bayesianos, nos centraremos en dos estructuras específicas: Naïve Bayes y naïve Bayes aumentado a árbol (TAN, por su sigla en inglés). El primer paradigma [Minsky y Papert, 1969] es el modelo más simple. Se define por la conjunción entre la hipótesis de independencia condicional de las variables predictoras dada la clase, produciendo la siguiente factorización que se sustituye en la ecuación (3.1):

$$P(\mathbf{x}_i|c_j) = P(x_{i1}|c_j) \cdots P(x_{in}|c_j)$$

Aunque esta suposición se viola en numerosas ocasiones en dominios reales, el paradigma todavía funciona bien en muchas situaciones [Domingos y Pazzani, 1997, Hand y You, 2001]. El clasificador TAN [Friedman y otros, 1997] extiende el modelo naïve Bayes con una estructura de árbol en las variables predictoras. Este árbol se obtiene adaptando el algoritmo propuesto por [Chow y Liu, 1968], calculando la información mutua condicional para cada par de variables x, y dada la clase:

$$I_p(X, Y|c) = \sum_i \sum_j \sum_k P(x_i, y_j, c_k) \log \frac{P(x_i, y_j|c_k)}{P(x_i|c_k)P(y_j|c_k)}$$

La construcción del árbol que forman las variables predictoras de un TAN consta de varios pasos. Primero se calculan las cantidades de información mutua para cada par de variables X e Y condicionadas por la variable clase C . A continuación debe construirse un grafo no dirigido completo con n nodos, uno por cada una de las variables predictoras, donde el peso de cada arista está dado por la cantidad de información mutua condicionada a la variable clase entre las dos variables unidas por la arista. El algoritmo de Kruskal parte de los $n \cdot (n - 1)/2$ pesos obtenidos en el paso anterior para construir el árbol expandido de máximo peso, asignando las dos aristas de mayor peso al árbol a construir. Se examina la siguiente arista de mayor peso, y se añade al árbol (si no forma un ciclo, en cuyo caso se descarta y se examina la siguiente arista de mayor peso) hasta seleccionar $n - 1$ aristas. Un ejemplo de las estructuras naïve Bayes y TAN puede verse en la figura 3.5. En (A), la probabilidad a posteriori de la clase vendría dada por $P(c_j|x, y, z) \propto P(x|c_j)P(y|c_j)P(z|c_j)P(c_j)$ mientras que en (B) sería $P(c_j|x, y, z) \propto P(x|c_j)P(y|x, c_j)P(z|y, c_j)P(c_j)$.

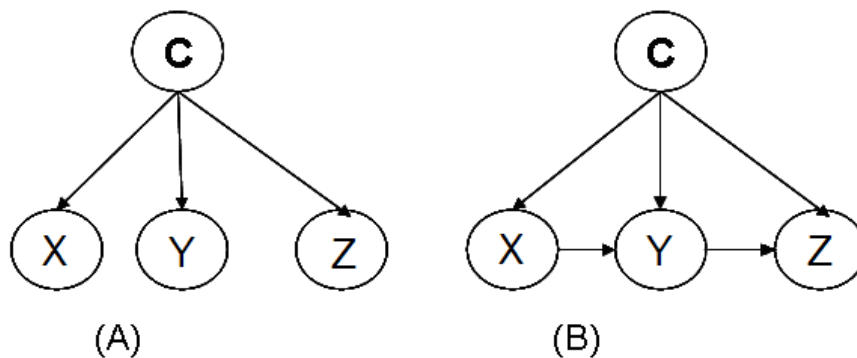


Figura 3.5: Ejemplo de redes Bayesianas con estructuras (A) naïve Bayes y (B) TAN

3.3.3. Primera aproximación usando redes Bayesianas

Como se mencionó anteriormente, lo que estamos buscando es un clasificador de Ra eficiente aprendido por medio de una red Bayesiana para intentar transmitir las relaciones físicas del proceso del mecanizado y otras relaciones no tan obvias (quizás estocásticas) entre las variables.

El objetivo final es desarrollar un sensor virtual para predecir Ra “en-proceso”, es decir, mientras el proceso de mecanizado esté ocurriendo.

VARIABLES PREDICTORAS

Las principales relaciones entre los datos de corte en el proceso de fresado son explicados por las siguientes fórmulas:

$$V_c = \frac{\emptyset \times \pi \times rpm}{1000}$$

$$feed\ rate = fz \times flutes \times rpm$$

$$TAM = a_p \times a_e \times feed\ rate$$

donde:

V_c = velocidad de corte ($m\ min^{-1}$)

rpm = velocidad de giro (rpm)

$feed\ rate$ = avance de la máquina ($mm\ min^{-1}$)

fz = avance por diente ($mm\ diente^{-1}$)

\emptyset = diámetro de la herramienta (mm)

$flutes$ = filos, corresponde al número total de dientes

a_p = profundidad de corte axial (mm)

a_e = profundidad de corte radial (mm)

TAM = tasa de arranque de material ($mm^3\ min^{-1}$)

El clasificador fue desarrollado usando el programa Elvira [Elvira, 2002]. Este programa, desarrollado en Java, está disponible en Internet. Se diseñó para editar y realizar inferencias con redes de Bayesianas y diagramas de influencia, y también para aprender redes Bayesianas a partir de un archivo de datos, como en nuestro caso.

Para construir la red se tomaron siete variables medidas dentro y fuera del proceso de fresado. El promedio de rugosidad superficial, Ra , fue seleccionado como la variable *clase*, y fue la única variable medida post-proceso.

La fuerza de corte (FT) se midió durante el proceso de corte, una vez se habían fijado los siguientes parámetros de corte: profundidad de corte (a_p), velocidad de avance ($feed\ rate$) y velocidad de giro (rpm). Finalmente, se incluyeron dos variables de la herramienta: número de dientes ($flutes$) y diámetro de la herramienta (\emptyset).

Preferimos utilizar redes Bayesianas donde todas las variables son discretas. Por ello seleccionamos el algoritmo K-means [MacQueen, 1967] para discretizar $feed\ rate$ y Ra , y el algoritmo Fuzzy K-means [Duda y otros, 2001] para discretizar rpm y FT , todos con $K=4$. Las otras variables ya eran

discretas. El criterio para la elección de estos algoritmos de discretización se debe a que por la naturaleza del proceso, aunado con el conocimiento del experto, es posible definir a priori intervalos para agrupar los datos de la muestra según la variable a tratar. Véase la tabla 3.4. El algoritmo K-means, ecuación (3.2), es un algoritmo basado en atributos para agrupar objetos en K particiones. Es una variante del algoritmo *expectation-maximization* cuyo objetivo es determinar las K medias de los datos generados de una distribución Gaussiana. Asume que los atributos del objeto forman un espacio vectorial. El objetivo es minimizar la varianza total intra-grupo o la función error cuadrático:

$$J = \sum_{i=1}^K \sum_{\mathbf{x}_j \in S_i} \|\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i\|^2 \quad (3.2)$$

donde hay K grupos (clusters) $S_i, i = 1, 2, \dots, K$ y $\boldsymbol{\mu}_i$ es el centroide o punto medio de todos los puntos $\mathbf{x}_j \in S_i$.

El algoritmo comienza con la partición de los puntos de entrada en K conjuntos iniciales, de forma aleatoria o usando alguna heurística. Entonces se calcula el punto medio, o centroide, de cada conjunto. Se construye una nueva partición asociando cada punto con el centroide más cercano. Después los centroides son recalculados para los nuevos grupos, y se repite el algoritmo aplicando alternativamente estos dos pasos hasta la convergencia. La convergencia se alcanza cuando los puntos no cambian más de grupo (o, alternativamente, no cambian los centroides).

En el algoritmo Fuzzy K-means, dado un conjunto de r clases, c_1, c_2, \dots, c_r , y un conjunto $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ de N ejemplos, desde una perspectiva borrosa se considera que un ejemplo \mathbf{x}_j puede pertenecer a más de una clase. Esta pertenencia se mide por lo que se conoce como *grado de pertenencia*, $P(c_i|\mathbf{x}_j)$, indicando cuánto de la muestra \mathbf{x}_j pertenece a la clase c_i . Las clases están caracterizadas por un vector llamado centro de clase, $\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \dots, \mathbf{m}_r$. El algoritmo Fuzzy K-means busca el mínimo global de la siguiente función de coste de heurística [Duda y otros, 2001]:

$$J_D = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^N [P(c_i|\mathbf{x}_j)]^b \|\mathbf{x}_j - \mathbf{m}_i\|^2$$

donde b es un parámetro libre, elegido para ajustar el solapamiento o mezcla de diferentes clases. Si b es 0, J_D es un simple criterio de error de suma de cuadrados con cada patrón asignado a una clase; si $b > 1$, cada patrón puede pertenecer a más de una clase.

Tabla 3.4: Agrupación para cada variable después de aplicar los correspondientes algoritmos de discretización

Variable	Etiqueta	Límite inferior	Límite superior
<i>FT</i> (N)	<35	6.68	35.02
	<56	35.02	56.17
	<73	56.17	73.33
	< 142	73.33	142.31
<i>rpm</i>	Slow	5520	7964
	Medium	7964	10758
	Semi-quick	10758	14813
	Quick	14813	19400
<i>feed rate</i>	< 1000	300	1000
	< 2050	1000	2050
	< 2775	2050	2775
	< 3850	2775	3850
<i>Ra</i>	Smooth	0.7	1.1
	Fine	1.1	2.1
	Semi-fine	2.1	5.1
	Medium	5.1	8.5

Las etiquetas de la clase *Ra*, véase la tabla 3.4, fueron asignadas de acuerdo al valor medio de la rugosidad (μm) establecido con el estándar ISO 1302:2002. Éstas son: Mirror ($0.10\mu m$), Polished ($0.20\mu m$), Ground ($0.40\mu m$), Smooth ($0.80\mu m$), Fine ($1.60\mu m$), Semi-fine ($3.20\mu m$), Medium ($6.30\mu m$), Semi-rough ($12.50\mu m$), Rough ($25\mu m$) y Clean ($50\mu m$). En nuestro caso tomamos el rango de Smooth a Medium por la operación (fresado) y el tipo de material (acero) usados en este experimento.

3.3.4. Caso 1: Aprendiendo un clasificador naïve Bayes

La primera red se obtuvo con la estructura del clasificador naïve Bayes. Se aplicó la corrección de Laplace definida en la fórmula (3.3) para la estimación de las probabilidades [Cestnik, 1990]. Ésta es una buena opción, ya que nuestros datos de entrenamiento no tienen representantes de todas las posibles combinaciones de variables. La corrección de Laplace asegura asignar una proporción de participación incluso a los casos que no están presentes en el momento del entrenamiento pero que sí pueden aparecer en el futuro.

$$p_i = \frac{n_i + 1}{N + |X_i|} \quad (3.3)$$

donde p_i es la estimación de la probabilidad de que una variable X_i tome su valor x_i , n_i es el número de veces que hemos observado $X_i = x_i$ en el conjunto de datos de tamaño N y $|X_i|$ es el número de posibles valores que la variable X_i puede tomar.

La red generada utilizando Elvira, en modo de inferencia, se muestra en la figura 3.6. Cada nodo muestra la probabilidad a priori sin introducir ninguna evidencia. De esta manera, inicialmente la probabilidad de que la herramienta tenga 6 filos es 0.26 y 0.74 es la probabilidad de que la herramienta tenga 2 filos. Con Elvira también es posible detectar el efecto causal entre nodos, mostrado como diferentes tipos de arcos. La red aprendida en la figura 3.6 solamente indica una relación positiva entre Ra y el nodo $flutes$ (arco discontinuo). Esto significa que valores altos de Ra hacen más probable valores altos de $flutes$. Sin embargo, la relación entre Ra y el resto de variables: velocidad de avance, rpm , FT , profundidad axial de corte a_p y diámetro (\emptyset) resultó ser ni positivo ni negativo, i.e. indefinido (arcos continuos).

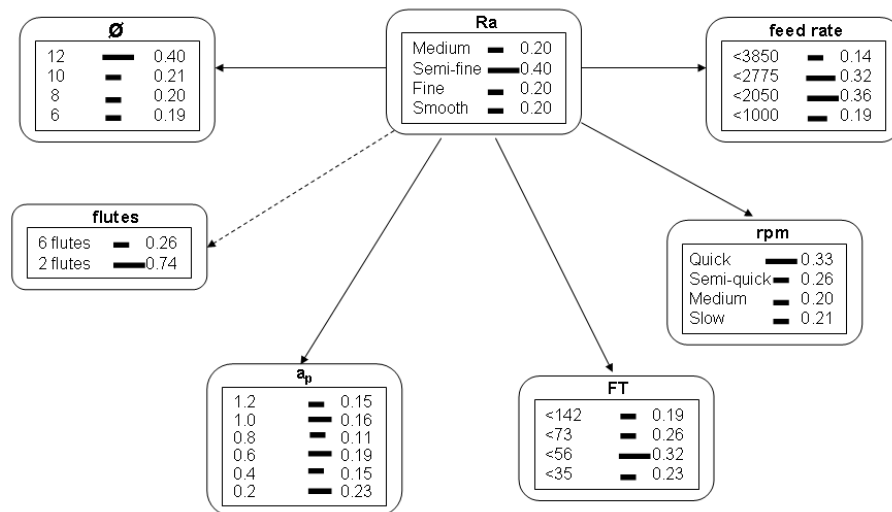


Figura 3.6: Red Bayesiana usando naïve Bayes en modo inferencia. En cada nodo se muestran las probabilidades a priori

Partiendo de que el objetivo de un modelo de clasificación consiste en clasificar correctamente casos nuevos, no debe hacerse la validación sobre los mismos datos con los que se creó el clasificador. Por ello se

tomó como método de validación el K-Fold Cross-Validation o validación cruzada de K rodajas [Stone, 1974]. Éste consiste en dividir el conjunto total de casos en K subconjuntos disjuntos. De los K subconjuntos, un solo subconjunto se reserva como datos de validación para probar el modelo, y los restantes subconjuntos se utilizan como datos de entrenamiento. El proceso de validación cruzada se repite K veces, con cada uno de los K subconjuntos usado solamente una vez como datos de validación. Después los K resultados de las rodajas pueden ser promediados (o combinados de otro modo) para producir una sola estimación.

Después de la validación se genera una matriz de confusión. Ésta es una tabla de contingencia cruzando la variable derivada de la salida de la clasificación producida por el modelo con la variable que fue la verdadera clasificación. Los resultados se muestran la tabla 3.5.

Tabla 3.5: Matriz de confusión usando naïve Bayes

REAL →	Medium	Semi-fine	Fine	Smooth
ASIGNADO ↓				
Medium	31	0	0	0
Semi-fine	19	85	14	0
Fine	0	6	25	1
Smooth	0	9	11	49

La precisión del clasificador naïve Bayes fue 76 %. Éste es un estimador honesto de la verdadera tasa de error, i.e. un indicador de cómo de bueno es el clasificador o la probabilidad de que clasifique correctamente nuevos casos.

Analizando la matriz de confusión se encontró que la precisión fue mejor para la clase Smooth (98 % de los casos fueron apropiadamente clasificados), clase Semi-fine (85 % clasificados correctamente) y Medium (62 %). Sin embargo, había mayor confusión en la clase Fine. En este caso, 50 % fueron clasificados correctamente, mientras que 28 % de Fine se clasificó como Semi-fine y 22 % como Smooth.

3.3.5. Caso 2. Aprendiendo un clasificador TAN

La segunda red se obtuvo con la estructura TAN. La figura 3.7 muestra las probabilidades marginales de cada una de las variables involucradas. La red TAN muestra la relación existente entre sus nodos, no únicamente con la variable clase. Esto proporciona más información sobre la relación de

Tabla 3.6: Matriz de confusión usando TAN

REAL →	Medium	Semi-fine	Fine	Smooth
ASIGNADO ↓				
Medium	35	0	0	0
Semi-fine	12	83	5	1
Fine	3	14	40	4
Smooth	0	3	5	45

La tabla 3.6 muestra los resultados. La matriz de confusión muestra una precisión de 81.2 %, superior que en el caso 1. Analizando esta matriz los resultados generalmente mejoran, aunque el porcentaje de clasificaciones correctas para algunas clases decrecen ligeramente. Esta precisión es similar a los resultados usando otro tipo de modelos, véase la tabla 2.2, con la ventaja de que con este modelo se pueden analizar los resultados en detalle.

El porcentaje de casos correctamente clasificados para la clase Fine se incrementa considerablemente de 50 % a 80 %. Para la clase Smooth el porcentaje de clasificaciones correctas decrece de 98 % a 90 %, para la clase Semi-fine de 85 % a 83 %, y para la clase Medium, se incrementa de 62 % a 70 %.

3.3.6. Respuesta al ingreso de evidencia

Ahora podemos aprovechar las diferentes consultas que podemos hacer a la red. En primer lugar, el modelo puede inferir lo que valen las probabilidades a priori (se muestra como barras oscuras) de cada valor de Ra sin introducir ninguna evidencia. Segundo, introducimos alguna evidencia en los nodos *feed rate*, *rpm* y *FT* (nodos sombreados), y la red calcula las probabilidades a posteriori de cada valor de Ra dada esta evidencia (barras grises claro). Todos los resultados se resumen en la tabla 3.7.

Tabla 3.7: Probabilidades de Ra calculadas a partir de los datos iniciales, sin instanciaciones (segunda columna) y después de introducir evidencia en las variables $feed\ rate$, rpm , y FT (columnas 3-5)

Clases de Ra	Probabilidades a priori	EJEMPLO 1 Instanciar $feed\ rate$ a < 3850	EJEMPLO 2 Instanciar rpm a Quick	EJEMPLO 3 Instanciar FT a < 56, rpm a Quick y $feed\ rate$ a < 2775
Medium	0.20	0.27	0.15	0.01
Semi-fine	0.40	0.65	0.46	0.20
Fine	0.20	0.05	0.13	0.01
Smooth	0.20	0.03	0.26	0.78

La segunda columna de la tabla 3.7 resume las probabilidades marginales asignadas a cada clase de Ra sin introducir ninguna evidencia (probabilidades a priori). La moda se ubica en la clase Semi-fine, con una probabilidad 0.4. Las columnas 3 y 4 de la tabla 3.7 muestran las probabilidades a posteriori después de incorporar evidencia sobre $feed\ rate$ (< 3850) y sobre rpm (Quick), respectivamente. Cada vez que se instancia un nodo, éste se sombrea en la figura respectiva.

De acuerdo con la salida del modelo, cuando $feed\ rate$ se incrementa a < 3850 (Ejemplo 1), hay una probabilidad de 0.65 de que Ra esté alcanzando el rango Semi-fine (véase la figura 3.8).

Del mismo modo, el valor de Ra se ve afectado cuando la velocidad del husillo (rpm) se aumenta al rango Quick (Ejemplo 2), ya que la probabilidad de Ra perteneciente a la clase Semi-fine cambia de 0.40 a 0.46, mientras que en la clase Smooth se mueve 0.20 a 0.26 (véase la figura 3.9).

Teniendo en cuenta que con el efecto de rpm la probabilidad más alta (0.47) en la variable $feed\ rate$ estaba en el rango < 2775 y en la variable FT estaba en el rango < 56 (con una probabilidad de 0.29), estas 3 variables fueron instanciadas así simultáneamente (columna 5 de la tabla 3.7) (Ejemplo 3). La calidad (Ra) subió al rango Smooth con una probabilidad de 0.78 (véase la figura 3.10).

Ahora, para comprobar que el modelo cumple con la física del proceso, vamos a preguntar a la red lo que sucede cuando la variable $flutes$ se instancia primeramente a 6. Físicamente hablando, rpm y $feed\ rate$ deberían aumentar la probabilidad de estar en sus rangos de valores más rápidos,

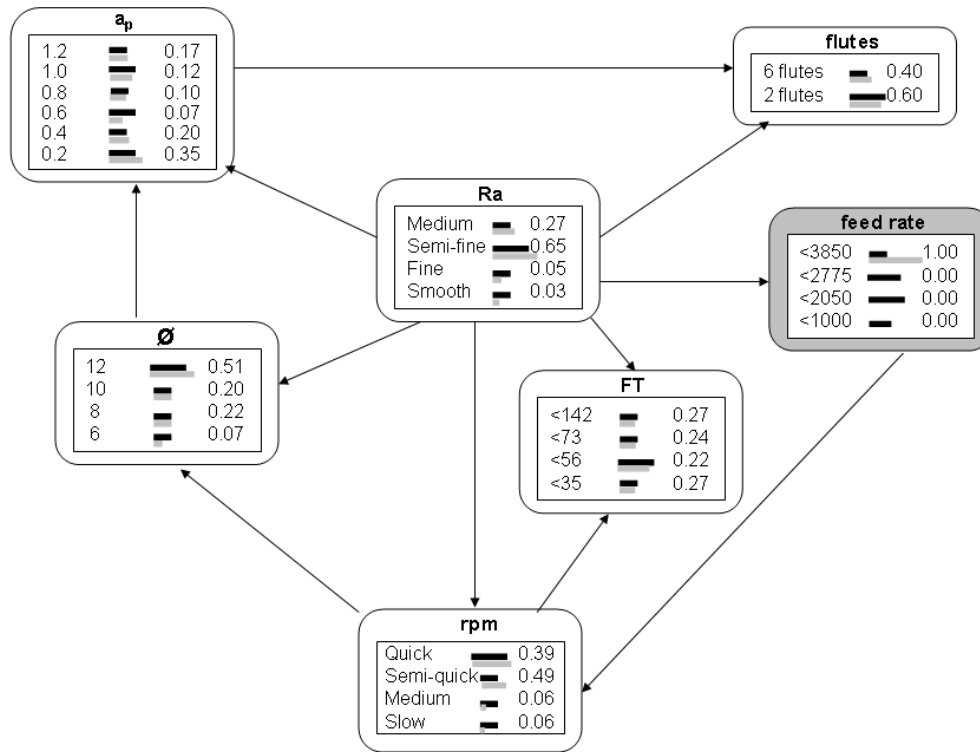


Figura 3.8: Clasificador TAN instanciando *feed rate* a <3850 (Ejemplo 1). Las probabilidades a posteriori de cada variable dada esta evidencia se muestran como una barra en gris

con respecto a las probabilidades a priori de la figura 3.7, como el modelo realmente indica: *rpm* se mueve a Quick (probabilidad 0.40) o Semi-quick (probabilidad 0.33) y *feed rate* a < 3850 (probabilidad 0.19), mientras que *Ra* está en Fine (0.18) o Smooth (0.08). Segundo, si se instancia *flutes* a 2, *rpm* se encuentra en Medium (0.29) o Semi-quick (0.25) y *feed rate* es < 1000 (0.35), mientras *Ra* está en Fine (0.21) o Smooth (0.25). En ambos casos los otros nodos (FT, a_p y \emptyset) también cambian su probabilidad influidos por la variable instanciada. Otra prueba trató de demostrar que *rpm* aumenta si *feed rate* es instanciada y sus valores se incrementan, ya que estas variables tienen una relación física directa, como se mostró en la sección 3.3.3.

Trabajando en orden inverso, este modelo también puede ser usado para obtener los parámetros de corte y de la herramienta. Esto se hace instanciando *Ra* en el nivel objetivo. Por ejemplo, si queremos que *Ra*

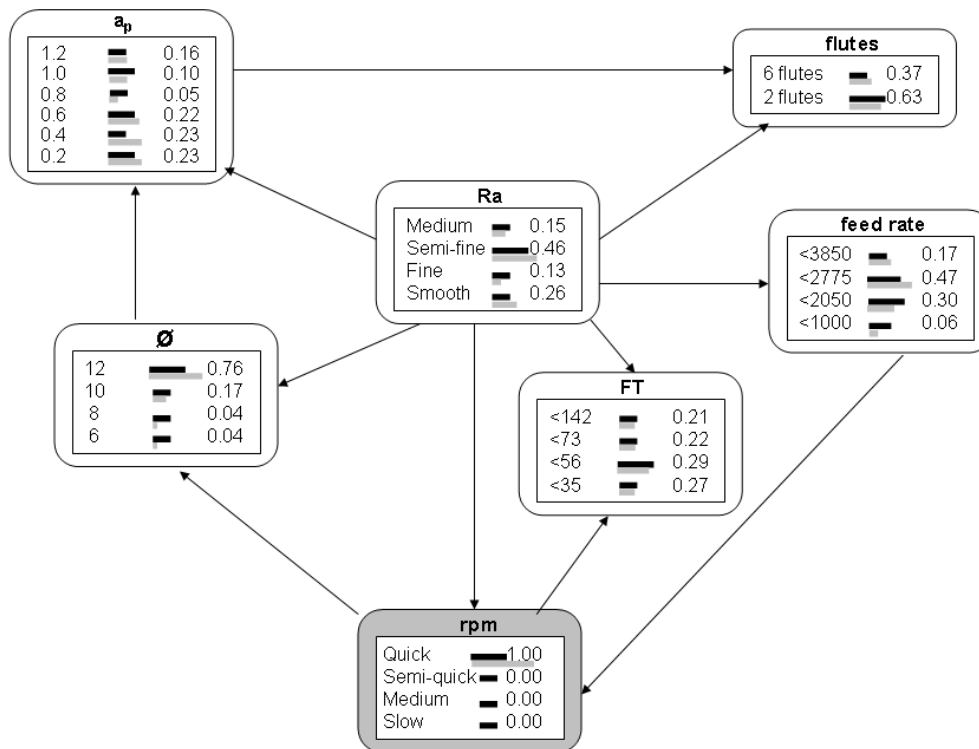


Figura 3.9: Clasificador TAN instanciando el nodo *rpm* a Quick (Ejemplo 2). Las probabilidades a posteriori de cada variable dada esta evidencia se muestran como una barra en gris

esté en la clase Fine, el modelo recomienda $a_p = 1.0$ (probabilidad 0.43), $rpm = \text{Medium}$ (probabilidad 0.43), $feed\ rate < 1000$ (probabilidad 0.46) y herramienta de 10 mm de diámetro (probabilidad 0.47) con 2 filos (probabilidad 0.73), como se podría demostrar en el laboratorio.

3.4. Conclusiones del capítulo

El uso de clasificadores Bayesianos para modelizar la rugosidad superficial en un proceso de fresado es un avance importante para alcanzar el mecanizado óptimo. En este capítulo se ha realizado un análisis del uso de redes Bayesianas con las estructuras Naïves Bayes y TAN para desarrollar modelos empíricos que estimen el acabado superficial, específicamente *Ra*, en procesos de mecanizado, usando datos obtenidos en el proceso de corte.

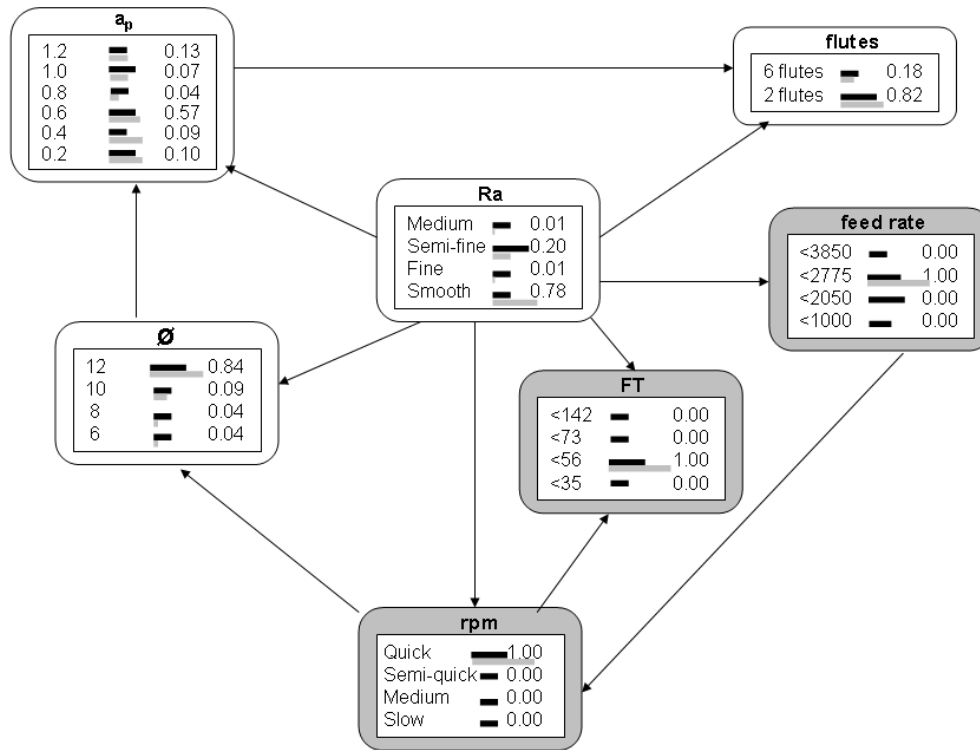


Figura 3.10: Clasificador TAN instanciando el nodo *rpm* a Quick, *FT* a < 56 y *feed rate* a < 2775 (Ejemplo 3). Las probabilidades a posteriori de cada variable dada esta evidencia se muestran como una barra en gris

Las variables definidas para cada nodo son las mismas independientemente del método usado para obtener la red. Las diferencias significativas están en las relaciones entre los nodos de la red en las estructuras aprendidas y, por consiguiente, en sus probabilidades inferidas.

Las redes Bayesianas han demostrado ser una herramienta muy útil para proporcionar conocimiento en el desarrollo de un predictor de *Ra*, ya que se encontraron relaciones interesantes entre los nodos. Según el conocimiento del experto, algunas de esas relaciones son evidentes en el proceso, aunque no tengan ninguna relación matemática en las fórmulas que definen el proceso de corte de metales.

El tiempo de procesamiento para cada clasificador manejando un fichero de 250 registros fue de 150 ms para naïve Bayes y 78 ms para TAN en un ordenador a 1.2 GHz con 1GB de memoria RAM. Desde el punto de vista del rendimiento, el clasificador TAN es mejor porque genera

una red más completa que naïve Bayes y el tiempo de procesamiento es menor. Los resultados de las dos estructuras se compararon realizando inferencias. Ambos modelos proporcionaron una predicción satisfactoria estadísticamente.

Con otras técnicas de IA usadas para predecir Ra , por ejemplo RNAs, la tasa de error está en el rango de 2 a 25 % (véase la tabla 2.2). A pesar de ser la fase inicial del estudio, el modelo reporta un promedio de precisión en la clasificación de 81.2 %, teniendo la clase Smooth la mejor precisión de 90 %. También, podemos hacer diferentes preguntas a la red e inferir la distribución de Ra dada alguna evidencia o conocimiento sobre el resto de variables. Además, el modelo puede usarse para recomendar los valores de cada variable que, con cierta probabilidad, dan un nivel deseado de Ra .

Nuestro modelo sin duda contribuye a un mejor conocimiento y entendimiento del proceso, con variables no tenidas en cuenta en estudios anteriores, como la geometría a mecanizar.

Se pueden añadir a la red otras características del proceso para mejorar el rendimiento del modelo. Por ejemplo, el tipo de material que va a ser mecanizado y la geometría de las piezas, etc. La relación entre estas variables, y entre ellas y el valor de Ra , aún no se ha investigado. Este reto se tratará de resolver en el siguiente capítulo.

Capítulo 4

REDES NEURONALES ARTIFICIALES PARA MODELIZAR R_a

En este capítulo se presentan dos modelos para predicción de R_a desarrollados usando redes neuronales artificiales (Multi Layer Perceptron), un fuerte competidor ampliamente usado en este campo, y redes Bayesianas (Tree Augmented Network) entrenados con datos de pruebas reales. Se consiguen buenos resultados de precisión en ambos modelos aunque se demuestra la superioridad de las redes Bayesianas no sólo en la bondad del clasificador sino principalmente en su interpretabilidad. El contenido de esta capítulo aparece publicado en [Correa y otros, 2009].

4.1. Introducción

Como ya se comentó en el capítulo 2 se han publicado varios trabajos usando diferentes técnicas, donde las más frecuentemente usadas son las redes neuronales artificiales (RNAs) [Huang y Chen, 2003, Samson y Chen, 2003, Tsai y otros, 1999] y la regresión lineal simple y múltiple [Abouelatta y Mádl, 2001, Feng y Wang, 2003, Kirby y otros, 2004]. Sin embargo, los modelos desarrollados han sido enfocados a entornos muy reducidos y con experimentación bastante limitada. Como se mencionó en la sección 2.6 es necesario desarrollar métodos para medir la calidad “en-proceso” y, como se indica en el apartado 2.6.3, para ello aprovechamos

las ventajas del aprendizaje automático, en concreto las redes Bayesianas (véase la sección 3.3.2).

4.2. Modelizando Ra usando redes neuronales artificiales

Una RNA es un modelo matemático o computacional basado en redes neuronales biológicas. Consiste en un grupo interconectado de neuronas artificiales y procesa la información usando una aproximación conexionista a la computación. En la mayoría de casos, una RNA es un sistema adaptable que cambia su estructura basado en información interna o externa que fluye a través de la red durante la fase de aprendizaje [Hecht-Nielsen, 1990].

Una RNA habitualmente organiza sus unidades en varias capas. La primera capa o capa de entrada, las capas intermedias o capas ocultas, que no están siempre presentes porque a veces no son necesarias, y la última o capa de salida. La información que será analizada se presenta (o alimenta) a las neuronas de la primera capa y luego se propaga a las neuronas de la segunda capa para su posterior procesamiento. Estos resultados son propagados a la siguiente capa y así sucesivamente, hasta la última, convirtiendo la información en la salida de la red. El objetivo de una RNA es descubrir alguna asociación entre los patrones de entrada y de salida.

4.2.1. Algoritmo backpropagation

El algoritmo *backpropagation* es un método de aprendizaje supervisado, una implementación de la regla Delta. Es más usado para redes feed-forward (redes que no tienen feedback, o simplemente, que no tienen bucles de conexiones). El término es una abreviatura de “propagación de errores hacia atrás”. *Backpropagation* requiere que todas las funciones de transferencia usadas por las neuronas artificiales (o “nodos”) sean diferenciables [Hagan y otros, 1996].

Backpropagation se utiliza para calcular el gradiente del error de la red con respecto a sus pesos modificables. Este gradiente casi siempre se utiliza en un algoritmo estocástico simple de descenso del gradiente para encontrar los pesos que minimizan el error. *Backpropagation* puede tener algunos problemas prácticos, de quedarse atrapado en un mínimo local y de no saber cuándo el procedimiento ha convergido.

Es importante señalar que las redes *backpropagation* son necesariamente perceptrones multicapa (MLP), por lo general con una capa de entrada, una oculta y una de salida. Pueden ser representadas como una función:

$$c_k = f_k \left(\alpha_k + \sum_{j \rightarrow k} w_{jk} f_j \left(\alpha_j + \sum_{i \rightarrow j} w_{ij} x_i \right) \right)$$

donde w_{ij} (w_{jk} respectivamente) son los pesos que conectan la entrada i con la capa oculta k (conecta la capa oculta j con las capas de salida k , respectivamente), α son los sesgos y f son las funciones de activación.

Para que la capa oculta proporcione una función útil, las redes multicapa deben tener funciones de activación no lineales para las múltiples capas: una red multicapa utilizando sólo funciones de activación lineales es equivalente a una red lineal de una sola capa. Comúnmente se usan funciones de activación no lineales como la función logística, la función softmax y la función Gaussiana.

El algoritmo *backpropagation* para calcular un gradiente ha sido redescubierto varias veces y es un caso especial de un técnica más general llamada *diferenciación automática* (AD) [Griewank, 2000]. Fundamental a AD es la descomposición de diferenciales proporcionados por la regla de la cadena. Para la composición simple $f(x) = g(h(x))$, la regla de la cadena da $\frac{df}{dx} = \frac{dg}{dh} \frac{dh}{dx}$.

Usualmente hay dos modos AD diferentes, la acumulación adelante (o modo hacia adelante) y la acumulación inversa (o modo inverso, que se utiliza para el algoritmo *backpropagation*). La acumulación adelante especifica una regla de la cadena cruzada de derecha a izquierda, es decir, $\frac{dh}{dx}$ se calcula primero y después $\frac{dg}{dh}$, y la acumulación inversa es cruzada de izquierda a derecha.

4.2.2. Diseño experimental fraccional

La importancia de incluir técnicas de diseño de experimentos se basan en que éstas permiten estudiar simultáneamente los efectos de todos los factores de interés, son más eficaces y proporcionan mejores resultados con menor coste.

Se continúa la experimentación, iniciada en el capítulo 3, haciendo un diseño factorial. Ésta es una estrategia experimental, mejor que la tradicional, utilizada ampliamente en experimentos en los que intervienen varios factores para estudiar el efecto conjunto de ellos sobre una respuesta (factorial general). En un experimento factorial se miden, en cada réplica

del experimento, todas las posibles combinaciones de los niveles de los factores, el efecto de un factor está representado en el cambio en la respuesta producido por un cambio en el nivel del factor. El número de factores de un diseño factorial 2^k , donde k es el número de factores, incrementa la cantidad de réplicas del experimento para realizar todas las combinaciones posibles de los niveles de los factores. Esto resulta muy costoso para la investigación, por lo cual en experimentos de investigación industrial se usa ampliamente el diseño factorial *fraccional* $2^{(k-p)}$, donde los $(k - p)$ factores identificados como importantes se investigan más profundamente.



Figura 4.1: Diseño de la geometría de los perfiles en el diseño de experimento 1

Se diseñó el experimento usando un diseño factorial fraccional con 8 factores (variables del proceso) a dos niveles cada uno, $2^{(8-3)}$, para un total de 32 experimentos. En este diseño la geometría se representó en 2 formas: islas (convexo) y cajas (cóncavo), como se muestra en la figura 4.1, con profundidades de corte máximas de 10 mm usando herramientas Sandvik de 2 filos. Las 8 variables o factores seleccionados fueron: avance por diente (fz), velocidad de corte (V_c), profundidad de corte axial (a_p), diámetro de la herramienta (\emptyset), profundidad de corte radial (a_e), dureza del material (HB), radio de la geometría (*Radio*) y curvatura de la geometría (*geom*). En la tabla 4.1 se resumen los niveles utilizados en este experimento y en la tabla 4.2 se muestra la planificación del experimento. La figura 4.1 muestra las geometrías seleccionadas en este experimento.

Tabla 4.1: Factores y niveles usados en el DoE del experimento 1

<i>Factores</i>	<i>fz</i>	<i>diam</i>	<i>ae</i>	<i>HB</i>	<i>geom (1/Radio)</i>
Unidades	mm/diente	mm	mm	Brinell	Islas (-), Cajas (+)
Niveles	0.04	12	1	65	-0.050
	0.04	12	1	65	+0.050
	0.13	16	5	70	-0.025
	0.13	16	5	70	+0.025

Tabla 4.2: Planificación del experimento 1

Exp.	<i>fz</i> (mm/diente)	<i>Vc</i> (m/min)	<i>ap</i> (mm)	<i>diam</i> (mm)	<i>ae</i> (mm)	<i>HB</i> (Brinell)	<i>geom</i> (mm)	<i>rpm</i>
E1-1	0.04	500	5	12	1	65	-0.050	13263
E1-2	0.13	500	5	12	1	145	-0.025	13263
E1-3	0.04	850	5	12	1	145	+0.025	22547
E1-4	0.13	850	5	12	1	65	+0.050	22547
E1-5	0.04	500	10	12	1	145	+0.050	13263
E1-6	0.13	500	10	12	1	65	+0.025	13263
E1-7	0.04	850	10	12	1	65	-0.025	22547
E1-8	0.13	850	10	12	1	145	-0.050	22547
E1-9	0.04	500	5	16	1	65	+0.025	9947
E1-10	0.13	500	5	16	1	145	+0.050	9947
E1-11	0.04	850	5	16	1	145	-0.050	16910
E1-12	0.13	850	5	16	1	65	-0.025	16910
E1-13	0.04	500	10	16	1	145	-0.025	9947
E1-14	0.13	500	10	16	1	65	-0.050	9947
E1-15	0.04	850	10	16	1	65	+0.050	16910
E1-16	0.13	850	10	16	1	145	+0.025	16910
E1-17	0.04	500	5	12	5	65	+0.050	13263
E1-18	0.13	500	5	12	5	145	+0.025	13263
E1-19	0.04	850	5	12	5	145	-0.025	22547
E1-20	0.13	850	5	12	5	65	-0.050	22547
E1-21	0.04	500	10	12	5	145	-0.050	13263
E1-22	0.13	500	10	12	5	65	-0.025	13263
E1-23	0.04	850	10	12	5	65	+0.025	22547
E1-24	0.13	850	10	12	5	145	+0.050	22547
E1-25	0.04	500	5	16	5	65	-0.025	9947
E1-26	0.13	500	5	16	5	145	-0.050	9947
E1-27	0.04	850	5	16	5	145	+0.050	16910
E1-28	0.13	850	5	16	5	65	+0.025	16910
E1-29	0.04	500	10	16	5	145	+0.025	9947
E1-30	0.13	500	10	16	5	65	+0.050	9947
E1-31	0.04	850	10	16	5	65	-0.050	16910
E1-32	0.13	850	10	16	5	145	-0.025	16910

Aparte de estos factores, se usaron los parámetros de corte: velocidad de giro (*rpm*), velocidad de avance (*feed rate*) y las fuerzas resultantes en el plano de corte (F_{XY}).

4.2.3. Diseño experimental RSM

Hicimos un diseño de experimentos de superficie de respuesta RSM, como se indicó en la sección 3.2.4. Antes se seleccionó el conjunto de variables características descartando algunas menos relevantes. La bondad del subconjunto de variables se evaluó usando un método de filtrado, i.e. ordenando las variables en términos de alguna métrica usualmente basada en características intrínsecas de los datos calculadas a partir de estadísticos sencillos sobre la distribución empírica [Inza y otros, 2004]. En este caso se usó la ganancia de información con respecto a Ra (la variable clase). La ganancia de información $I(Ra, X)$ es la diferencia entre la entropía de Ra y la entropía condicional de Ra dado X , para cualquier variable X . Para este proceso se usó un paquete gratuito de aprendizaje automático escrito en Java, Weka¹, desarrollado en la universidad de Waikato (Nueva Zelanda).

Se seleccionaron 5 variables: fz , ae , $diam$, HB , $geom$. Dieron lugar a una combinación de características del radio y curvatura. Éstas se usaron en este segundo experimento.

Para ampliar el conjunto de datos se hizo una tercera ronda de experimentos donde se aplicó una metodología de superficie de respuesta [Myers y Montgomery, 2002] usando las 5 variables seleccionadas, esta vez con 5 niveles. En la tabla 4.3 se hace un resumen de estos niveles. Los parámetros de corte seleccionados fueron rpm y F_{XY} .

Tabla 4.3: Factores y niveles usados en el DoE del experimento 2

<i>Factores</i>	<i>fz</i>	<i>diam</i>	<i>ae</i>	<i>HB</i>	<i>geom (1/Radio)</i>
Unidades	mm/diente	mm	mm	Brinell	Convexo (-)
Niveles					Cóncavo (+)
	0.025	8	1	67	-0.042
	0.050	10	2	92	-0.021
	0.750	12	3	94	0
	0.100	16	4	145	+0.021
	0.130	20	5	152	+0.042

En total con este diseño se hicieron 26 experimentos; se muestran en la tabla 4.4, con 3 réplicas para estimar el error. Las geometrías seleccionadas en este experimento se muestran en la figura 4.2.

¹<http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/>



Figura 4.2: Diseño de la geometría de los perfiles en el diseño de experimento 2

Resumiendo, se recogieron 1262 casos (matriz de 1262 filas por 8 columnas), a partir de las variables comunes en ambos experimentos para construir los modelos, i.e. para aprender y probar la red.

Para entrenar la red se usaron 7 variables de entrada (en-proceso) y la rugosidad superficial (Ra) como salida (post-proceso) medidas en un proceso de fresado. En la tabla 4.5 finalmente se resumen las variables usadas con sus intervalos asignados. Para este caso se tomó el rango de Ra de Mirror a Smooth, ya que con la operación de fresado y el tipo de material usado en los experimentos (con aluminio) solamente es posible obtener valores máximos de Ra en el rango $[0.10, 1.50)$, véase en detalle en la descripción de los diseños de experimentos. Las etiquetas de *geom* corresponden a: *Slot* = recta, *Convex--* = geometría convexa con ángulos grandes, *Concave++* = geometría cóncava con ángulos grandes, *Convex-* = geometría convexa con ángulos pequeños y *Concave-* = geometría cóncava con ángulos pequeños, véanse las figuras 4.1 y 4.2.

Tabla 4.4: Planificación del experimento 2

Exp.	fz (mm/diente)	$diam$ (mm)	ae (mm)	HB (Brinell)	$geom$ (mm)	rpm
E2-1	0.100	16	2	145	+0.021	18000
E2-2	0.100	10	4	145	+0.021	18000
E2-3	0.050	16	4	145	-0.021	18000
E2-4	0.100	16	4	92	-0.021	18000
E2-5	0.100	16	2	92	-0.021	18000
E2-6	0.100	10	2	92	+0.021	18000
E2-7	0.050	10	2	145	-0.021	18000
E2-8	0.050	10	4	92	+0.021	18000
E2-9	0.050	16	2	145	+0.021	18000
E2-10	0.100	10	4	145	-0.021	18000
E2-11	0.050	16	4	92	+0.021	18000
E2-12	0.050	10	2	92	-0.021	18000
E2-13	0.025	12	3	94	0.000	18000
E2-14	0.130	12	3	94	0.000	18000
E2-15	0.075	8	3	94	0.000	22500
E2-16	0.075	20	3	94	0.000	15000
E2-17	0.075	12	1	94	0.000	18000
E2-18	0.075	12	5	94	0.000	18000
E2-19	0.075	12	3	67	0.000	18000
E2-20	0.075	12	3	152	0.000	18000
E2-21	0.075	12	3	94	-0.042	18000
E2-22	0.075	12	3	94	0.042	18000
E2-23	0.075	12	3	94	0.000	18000
E2-24	0.075	12	3	94	0.000	18000
E2-25	0.075	12	3	94	0.000	18000
E2-26	0.075	12	3	94	0.000	18000

Se construyó una RNA perceptron multicapa con una topología 7-11-4, i.e. 7 nodos de entrada, una capa oculta con 11 neuronas y una capa de salida con 4 neuronas para predecir el valor de la clase *Ra*. Este tipo de red ya fue usada con éxito en un trabajo anterior en procesos de fresado [Correa, 2003]. Se usó una función de activación sigmoide en todas las capas, momento 90 % y tasa de aprendizaje 1 %. Las variables de entrada utilizadas en la primera capa son las mismas variables de entrada en la RB (véase la siguiente sección) y la capa de salida corresponde con los 4 estados de la

clase *Ra*: Mirror, Polished, Ground, Smooth, véase la figura 4.3.

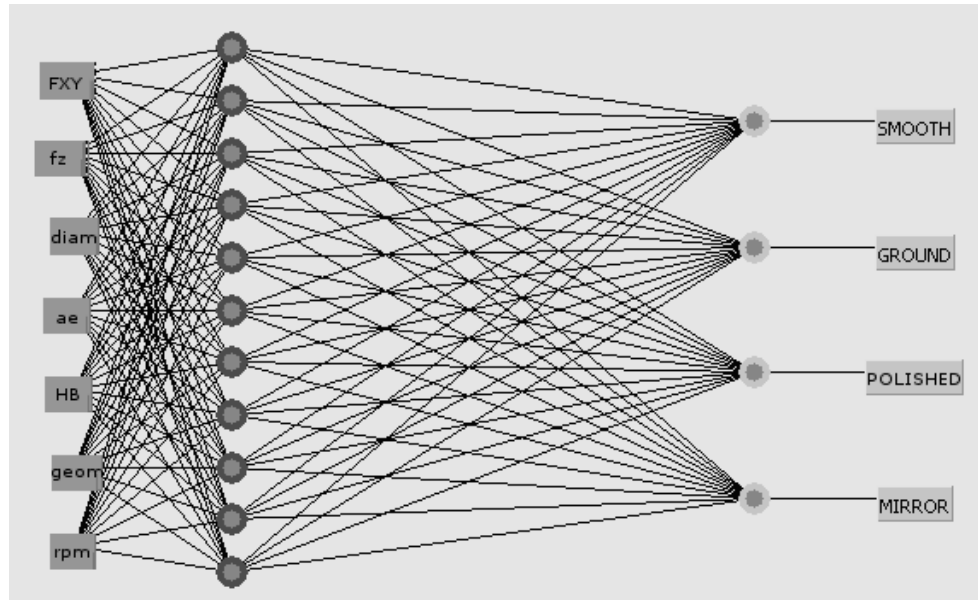


Figura 4.3: Red neuronal artificial con topología 7-11-4 usando algoritmo *backpropagation*

Tabla 4.5: Variables e intervalos asignados

Estados	Variables y dominios							
	$F_{XY}(N)$ [inf,sup)	f_z (mm/diente) [inf,sup)	diam mm	ae mm	HB (Brinell) [inf,sup)	geom (mm) Etiqueta [inf,sup)	rpm [inf,sup)	Ra (μm) Etiqueta [inf,sup)
0	[22,79)	[0.0250,0.0460)	8	1	[65,92)	Convez - - [-50,-30)	[15000,17500)	Mirror [0.10,0.25)
1	[79,88)	[0.0460,0.0670)	10	2	[92,94)	Convez - [-30,-10)	[17500,20000)	Polished [0.25,0.35)
2	[88,100)	[0.0670,0.0880)	12	3	[94,109)	Slow [-10,10)	[20000,22500)	Ground [0.35,0.75)
3	[100,148)	[0.0880,0.1090)	16	4	[109,111)	Concave + [10,30)		Smooth [0.75,1.50)
4	[148,178)	[0.1090,0.1300]	20	5	[111,145)	Concave + + [30,50]		
5	[178,208)				[145,152)			
6	[208,228)							
7	[228,275)							
8	[275,324)							
9	[324,488]							

4.3. Modelizando Ra usando redes Bayesianas

Como se mencionó se tomaron 7 variables, medidas dentro y fuera del proceso de fresado, para construir la estructura de la red. El promedio de rugosidad superficial, Ra , se seleccionó como la variable clase, que fue la única variable postproceso.

La figura 4.4 muestra la estructura TAN aprendida. Se ilustran las relaciones y el tipo de efecto causal que existe entre sus nodos. Proporciona más información sobre la relación de cada variable con la clase y sobre la relación entre las variables predictoras que las RNAs, que funcionan como una caja negra. Es interesante ver cómo la relación física entre $geom$, fz y F_{XY} es evidente de la estructura de la RB. Más allá de la obvia dependencia de todas las variables con Ra , $geom$ y F_{XY} están también influenciadas por la dureza del material (HB). Como se comentó anteriormente, hay relaciones no evidentes no deducibles desde cualquier ecuación física del proceso de corte. Además, el avance por diente (fz) está directamente relacionado con HB . Por último, la velocidad de giro (rpm) y la profundidad de corte radial (ae) dependen probabilísticamente del diámetro de la herramienta ($diam=\emptyset$), ya que estas variables están físicamente asociadas con el diámetro.

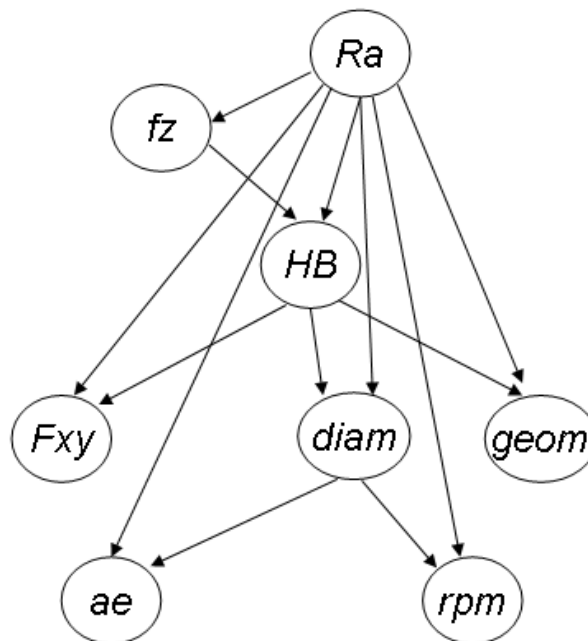


Figura 4.4: Red Bayesiana usando el algoritmo TAN

La red TAN aprendida también implica la estimación de todas las distribuciones de probabilidad condicionada de cada variable dados sus padres, i.e. su parte cuantitativa. Véase, por ejemplo, la tabla 4.6, que muestra la distribución de HB dado Ra y fz . En cualquier RB podemos razonar en cualquier dirección, preguntando a la red sobre cualquier probabilidad marginal o cualquier probabilidad a posteriori dada alguna evidencia (observación). Un ejercicio sobre esto se hizo en la sección 3.3.6.

4.4. Redes Bayesianas vs. redes neuronales artificiales

Se presenta a continuación una comparativa de las dos técnicas, TAN y RNAs, demostrando la superioridad del TAN. En la literatura conocida no se han comparado estas dos técnicas para la solución de este tipo de problema, aunque obviamente estos modelos han sido comparados en otros campos como por ejemplo en la modelización de procesos de fabricación [Perzyk y otros, 2005], discriminación de plantas, malas hierbas y tierra en imágenes a color [Marchant y Onyango, 2003], y modelización del tiempo de respuesta de sistemas orientados al servicio [Zhang y Bivens, 2007]. Las dos se han usado en forma combinada en [Antal y otros, 2003] para la clasificación de tumores de ovario.

4.4.1. Medidas de rendimiento

Se usó de nuevo el método *K-fold cross-validation* para estimar las medidas de rendimiento [Stone, 1974]. En ambos modelos se tomó $K=10$ y la misma semilla en la selección de la aleatoriedad para determinar las particiones. Así, se tienen las mismas particiones para ambos clasificadores y por lo tanto los resultados de clasificación pueden considerarse como ejemplos pareados.

Existen varias pruebas estadísticas para comparar una medida de rendimiento de dos clasificadores sobre una sola base de datos [Demšar, 2006]. Además hay varias medidas de rendimiento para comparar la bondad de un clasificador. En este trabajo se usa la precisión de la clasificación o porcentaje de observaciones bien clasificadas. Finalmente se analiza la interpretabilidad de ambos modelos.

4.4.2. Precisión de la clasificación

Las matrices de confusión muestran la precisión del clasificador, véanse las tablas 4.7 y 4.8. La RB muestra mejores resultados que el clasificador RNA, con una precisión de 96.3 % y 94.8 %, respectivamente. Si se analizan los resultados por cada clase de *Ra* se puede observar que para la mayoría es mejor la RB. En el caso de Smooth 100 % de los casos están bien clasificados por la RB frente al 89 % de la RNA. De manera similar, en Ground solamente hay un caso mal clasificado por la RB, frente a los 9 casos mal clasificados por la RNA. La misma situación se presenta en Polished

con 17 casos mal clasificados por la RB (3.4 %) comparado con los 30 casos mal clasificados por la RNA (6 %). Solamente en el caso de *Ra* Mirror los resultados de la RNA son ligeramente mejores con 94 % de precisión frente al 92.5 % de la RB.

Tabla 4.7: Matriz de confusión usando RBs (TAN)

REAL →	Smooth	Ground	Polished	Mirror
ASIGNADO ↓				
Smooth	18 (100 %)	0	0	0
Ground	0	359 (99.7 %)	1 (0.3 %)	0
Polished	0	2(0.4 %)	493(96.6 %)	15(3 %)
Mirror	0	0	28 (7.5 %)	346 (92.5 %)

Tabla 4.8: Matriz de confusión usando RNAs

REAL →	Smooth	Ground	Polished	Mirror
ASIGNADO ↓				
Smooth	16 (89 %)	0	2 (11 %)	0
Ground	1 (0.5 %)	351 (97.5 %)	8 (2 %)	0
Polished	2 (0.4 %)	3 (0.6 %)	480 (94.8 %)	25 (5 %)
Mirror	0	2 (0.5 %)	22 (5.5 %)	350 (94 %)

Las medidas de mérito de cada clasificador se resumen en la tabla 4.9. Las fórmulas para calcular los indicadores son las siguientes:

$$\text{TP Rate} = \frac{TP}{TP+FN}$$

$$\text{FP Rate} = \frac{FP}{TN+FP}$$

$$\text{Recall} = \text{TP Rate}$$

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP+FP} \times 100$$

$$\text{F-measure} = \frac{2 \cdot \text{Recall} \cdot \text{Precision}}{\text{Recall} + \text{Precision}}$$

$$\text{Accuracy} = \frac{TP+TN}{TP+FN+FP+TN}$$

$$\text{Kappa} = \frac{P(A)-P(E)}{1-P(E)}$$

donde TP= verdaderos positivos, TN = verdaderos negativos, FP= falsos positivos, FN= falsos negativos.

Tabla 4.9: Resumen de las medidas de mérito para cada clasificador

Medida	RB	RNA
Ejemplos correctamente clasificados	1216 (96.35 %)	1197 (94.84 %)
Ejemplos incorrectamente clasificados	46 (3.64 %)	65 (5.15 %)
Estadístico Kappa	0.94	0.92
Error absoluto medio (MAE)	0.03	0.04
Raíz error cuadrático medio (RMSE)	0.13	0.14
Error absoluto relativo(RAE)	10.41 %	13.05 %
Raíz error cuadrático relativo (RRSE)	32.66 %	33.70 %

En índice *Kappa* introducido por [Cohen, 1960] es una medida de fiabilidad que proporciona una escala de concordancia entre un par de clasificadores al clasificar respectivamente N casos en K categorías mutuamente exclusivas de la variable clase C. El índice *Kappa* únicamente tiene en consideración si hay o no acuerdo, es decir, si se clasifica o no la instancia en la misma clase (nivel de concordancia entre clasificadores). Para determinar hasta qué punto la concordancia observada es superior a la que se espera obtener por puro azar, se define el índice de concordancia Kappa como:

$$Kappa = \frac{P(A) - P(E)}{1 - P(E)}$$

donde $P(A)$ es un estimador de la probabilidad de que dos clasificadores coincidan, y $P(E)$ es la probabilidad de que el acuerdo sea aleatorio. $P(A)$ se obtendrá como producto de las probabilidades de cada clasificador si ambos son independientes. El índice *Kappa* tiene un valor de 1 cuando un par de clasificadores están en total acuerdo, y los valores menores que cero (negativos) cuando no hay acuerdo en la clasificación de la misma instancia por un par de clasificadores. En base a la escala propuesta por [Landis y Kock, 1977] para valorar el grado de acuerdo entre los clasificadores también se puede considerar un grado de concordancia insignificante en el rango (0 - 0.2], un grado bajo en el rango (0.2 - 0.4], un grado de concordancia moderado en el rango (0.4 - 0.6] y bueno y muy bueno en los rangos (0.6 - 0.8] y (0.8 - 1], respectivamente.

De los anteriores valores en la tabla 4.9 podemos concluir que el clasificador RB tiene mejores indicadores que la RNA, no solamente reflejado en el estadístico Kappa sino en las bajas tasas de MAE y RMSE.

En la figura 4.5 se muestra más detalladamente la precisión para la clase *Ra*. Las barras oscuras corresponden al modelo con RBs, mientras que las barras punteadas corresponden al modelo con RNAs. Nótese que, aunque la precisión parece bastante similar con ambos clasificadores, la RB da mejores medidas de rendimiento que la RNA.

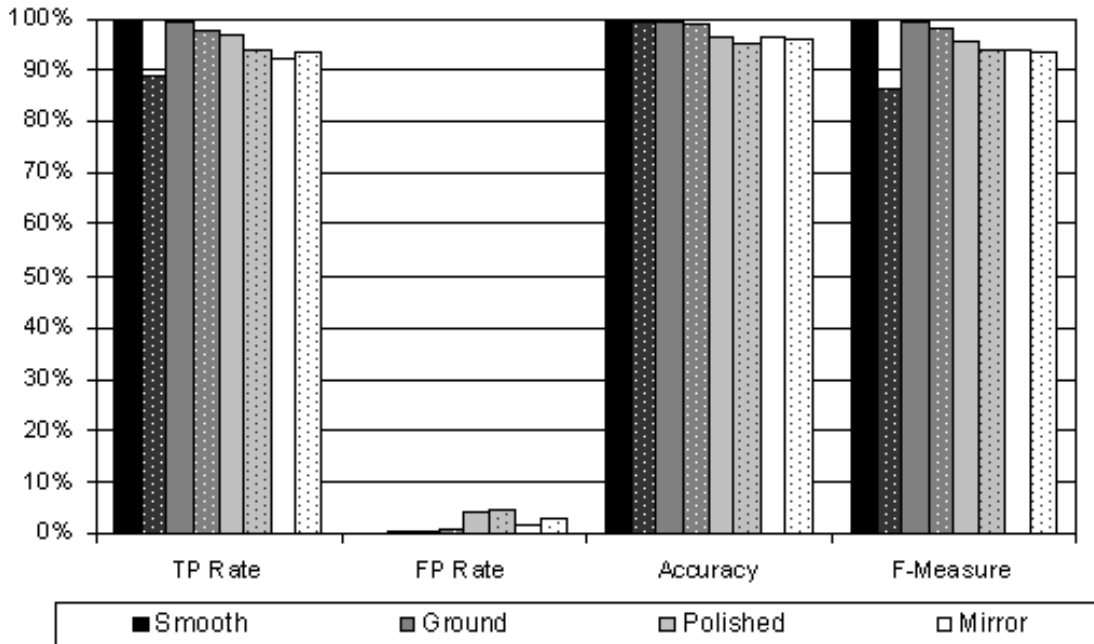


Figura 4.5: Precisión detallada por clase

Para determinar la significación estadística del rendimiento estimado de ambos modelos, se establecieron dos pruebas estadísticas para evaluar si un modelo supera o no al otro en la predicción del *Ra*.

Primero se tomaron los resultados pareados del K-fold cross-validation. Un “t-test pareado” a una cola, cuya hipótesis nula fue que la precisión media del clasificador con RB es igual a la precisión media del clasificador con RNA, produjo un p-valor de ≈ 0.001 . Este p-valor indica que la hipótesis nula debe ser rechazada, concluyendo que la precisión de la RB es estadísticamente superior a la precisión de la RNA. Los valores para obtener estos resultados se muestran en la tabla 4.10, donde p_i^A (p_i^B) es una estimación de la probabilidad de clasificar correctamente nuevos casos

cuando la RB (RNA respectivamente) fue testeada usando la partición i (es necesario recordar que el resto de datos fueron usados para el entrenamiento).

Tabla 4.10: Resumen del t-test pareado

Fold	RB p_i^A	RNA p_i^B	RB - RNA $p_i^A - p_i^B$
1	0.94338	0.93224	0.01114
2	0.96905	0.94576	0.02328
3	0.94842	0.95018	-0.00175
4	0.96994	0.94024	0.02971
5	0.97331	0.93801	0.03531
6	0.96095	0.93166	0.02929
7	0.95064	0.91633	0.03430
8	0.95805	0.91207	0.04598
9	0.95805	0.94543	0.01261
10	0.94153	0.93926	0.00227
Mean			0.02221
Standard deviation			0.01555
t			4.51683

Adicionalmente se calculó el test de *McNemar* [McNemar, 1947, Sheskin, 2000] basado en una prueba χ^2 de bondad de ajuste que compara la distribución de los esperados bajo la hipótesis nula y los observados. Bajo la hipótesis nula, los dos algoritmos deberían tener la misma tasa de error, lo que significa que $n_{01} = n_{10}$, donde n_{01} corresponde al número de ejemplos mal clasificados por la RB pero no por la RNA y n_{10} es el número de ejemplos mal clasificados por la RNA pero no por la RB. Si la hipótesis nula es cierta, el estadístico siguiente se distribuye con una distribución χ^2 con 1 grado de libertad. Incluye una corrección por continuidad de Yates para tener en cuenta que el estadístico es discreto mientras que la distribución χ^2 es continua:

$$\frac{(|n_{01} - n_{10}| - 1)^2}{n_{01} + n_{10}} = \frac{(|6 - 25| - 1)^2}{6 + 25} = 10.45$$

Este resultado proporciona un p-valor $\ll 0.05$. Así, la hipótesis nula puede ser rechazada a favor de la hipótesis de que los 2 algoritmos actúan de forma diferente, y la RB es superior.

4.4.3. Interpretabilidad

Las RNAs tienen la desventaja de no tener un razonamiento simbólico y una representación semántica. Una RNA generalmente toma la forma de un modelo de “caja negra” en el sentido de que las relaciones no lineales de causa y efecto no son fácilmente interpretables, lo que hace difícil explicar los resultados.

Por otro lado, la principal ventaja de las RBs es que el razonamiento se basa en un modelo de mundo-real. El sistema tiene total comprensión de los procesos implicados en vez de una mera asociación de datos y suposiciones. Esto se combina con una fuerte teoría probabilística posibilitando a las RBs dar una interpretación objetiva.

Se puede preguntar a una RB cuestiones que incluyen observaciones o evidencia para encontrar la probabilidad *a posteriori* de cualquier variable o conjunto de variables dada alguna evidencia. Esto hace posible diferentes tipos de razonamiento.

Un tipo de pregunta es el *razonamiento predictivo* o inferencia causal. Por ejemplo, se puede preguntar “¿Cuál es la probabilidad de cada clase *Ra* dados ciertos requisitos de fabricación?” Esto es una predicción de efectos. Supongamos que se necesita producir una pieza de 40 mm de radio de aluminio con *HB* 67 Brinell y geometría cóncava (*geom* = Concave++), habría que preguntar a la RB el cálculo de $P(Ra | HB = 67, geom = Concave++)$. Propagando esta evidencia, la red calcula las siguientes probabilidades de *Ra*: Mirror con una probabilidad de 0.25, Polished con una probabilidad de 0.57, Ground con probabilidad de 0.01, y Smooth con probabilidad de 0.17. Con estos requisitos las probabilidades más altas dan buenas calidades. Este razonamiento es correcto dado que se corresponde con valores obtenidos en las pruebas experimentales.

También se puede hacer preguntas de *razonamiento diagnóstico* como, “¿cuáles son las probabilidades de las variables no observadas si *Ra* está restringida?” Supongamos que se necesita fabricar una pieza con *Ra* = Mirror, y se necesita saber las recomendaciones del modelo con respecto a *geom*, *HB* y *fz* para conseguir ese tipo de acabado *Ra*. Se debe calcular $P(geom, HB, fz | Ra = Mirror)$.

Más aún, otra ventaja de las RBs es la posibilidad de encontrar la explicación más probable o *inferencia abductiva*. En nuestro caso, buscamos las configuraciones de las tres variables con mayor probabilidad. La recomendación de la red para obtener este estado de *Ra* es fabricar piezas con material de dureza blanda, 65-92 Brinell, geometría convex++

y fz en $[0.08, 0.10)$, con una probabilidad de 0.22. Por otro lado, si se necesita fabricar una pieza con $Ra=Ground$, preguntamos a la RB sobre $P(\text{geom}, HB, fz | Ra=Ground)$. La recomendación de la red es material de dureza media, 94-109 Brinell, la geometría en Slots (ranuras o rectas) y fz en $[0.04, 0.06)$, con una probabilidad de 0.56.

Una abducción total encuentra la configuración de todas las variables no observadas que maximiza la probabilidad de la evidencia, es decir, $\arg \max_{x_1, \dots, x_n} P(x_1, \dots, x_n | Ra = Mirror)$. En este caso, la configuración más probable está en *diam* a 12 mm, *ae* a 2 mm, *HB* a 5 (109 a 111 Brinell), F_{XY} a 9 (324 a 488 N), *geom* a *Slot*, *fz* a 2 ($[0.06, 0.08)$ mm/diente) y *rpm* a 1 (15000 a 17500 rpm). Esto significa que para obtener una pieza con $Ra=Mirror$, la anterior configuración es la más probable configuración de las restantes 7 variables.

4.5. Conclusiones del capítulo

La RNA es un modelo utilizado frecuentemente para predecir la calidad superficial en procesos de mecanizado. En este capítulo, se propone utilizar RBs en su lugar, mostrando una serie de ventajas sobre las RNAs y extendiendo el dominio de aplicación para incluir características, no encontradas fácilmente en estudios experimentales, que influyen en la rugosidad superficial, como la geometría de la pieza y la dureza del material a mecanizar.

Después de validar ambos modelos con los mismos datos y técnica (K-fold cross-validation), las RBs consiguen mejores resultados desde el punto de vista de la bondad del clasificador aplicado al problema de la predicción de la calidad en procesos de fresado a alta velocidad. Los resultados han sido confirmados por varios tests de hipótesis.

En cuanto al tiempo necesario para construir el modelo, las RBs también superan a las RNAs, necesitando 0.08 segundos de CPU y 12.69 segundos de CPU, respectivamente, en un ordenador Dell Dimension a 3 GHz con 1.5 GB de RAM.

El procedimiento de optimización de una RNA no garantiza la convergencia a un mínimo global. No hay métodos fundamentados de selección de los parámetros de la red (número de capas ocultas, número de nodos en la(s) capa(s) oculta(s), funciones de activación). Por otra parte, las RBs tienen un procedimiento de construcción fácil y rápido, sin ajuste de parámetros. Es de resaltar en favor de las RNAs, que los requerimientos

de memoria, representados por los parámetros de una forma analítica, son menores que para las RBs, representados por tablas de probabilidad condicionada. Sin embargo, esto no es una cuestión relevante hoy en día donde la memoria de ordenador es barata y extensa.

Las velocidades relativas de funcionamiento siguen el mismo patrón. Por lo tanto, la RB se puede implementar fácilmente como una simple tabla look-up, y es intrínsecamente rápido. Sin embargo, la RNA requiere una serie de multiplicaciones y sumas a la hora de la evaluación, que lo hacen relativamente lento si se necesitan predicciones de alta intensidad.

Ambos modelos de clasificación son simples de usar, pero las RBs pueden ser más fácil de entender por los seres humanos. Los modelos con RNAs trabajan como una caja negra. Sin embargo, las RBs son amigables e intuitivas para ayudar a los usuarios a actualizar los modelos y aumentar la confianza en la corrección del modelo que finalmente se adopte. Encontrar los factores que determinan la rugosidad superficial puede ayudar a optimizar el fresado a alta velocidad, que es extensible a otras aplicaciones industriales. Más aún, las RBs soportan inferencia en cualquier dirección, proporcionando respuestas a cualquier tipo de consulta, no sólo acerca de la rugosidad superficial, sino también, teniendo en cuenta alguna evidencia, sobre diferentes variables predictoras. Debido a que éstas recogen estos diferentes tipos de razonamiento para inferir el conocimiento, las RBs son modelos útiles con poder de representación significativo. De la comparación realizada en este capítulo, las RBs son preferibles a las RNAs.

Como se ha demostrado a lo largo de este capítulo la modelización con redes Bayesianas es una herramienta que ayuda a mejorar el proceso de fresado. La interpretabilidad de estas redes las convierte en un instrumento que da soporte al operario de la máquina-herramienta, por ejemplo para determinar los parámetros de corte que debe programar al iniciar el proceso de corte cuando quiere alcanzar una determinada calidad. Otro ejemplo de aplicación es cuando se tienen restricciones de fabricación (en cuanto a dureza de material, herramienta, geometría de la pieza a fabricar, por nombrar algunas). El modelo proporciona recomendaciones sobre las calidades a obtener cuando se seleccionan diferentes combinaciones de estas restricciones, pudiendo planificar la fabricación más conveniente antes de empezar el mecanizado.

Ésta es una forma de perfeccionar considerablemente el proceso de fresado, ya que con los modelos existentes actualmente es imposible ver la influencia de las variables sobre la calidad de la pieza, con lo cual se optimiza el proceso.

Una línea futura que nos planteamos a partir de los resultados conseguidos en este capítulo es hacer control del proceso usando *data stream* [Gama y Gaber, 2007]. Pensamos en aplicar esta técnica ya que los volúmenes de datos generados en los procesos de corte de metales son muy grandes. Plantearíamos buscar puntos donde se reconoce un cambio en el flujo de datos para asociarlo con el estado del proceso.

Capítulo 5

EXPLICACIÓN DE UN CLASIFICADOR BAYESIANO MEDIANTE UN ÁRBOL DE DECISIÓN

Uno de los principales problemas con el modelizado es entender los resultados producidos y hacer generalizaciones. En modelizado probabilístico, las probabilidades de salida no son fáciles de interpretar, incluso para un experto, dado que el experto tiene amplios conocimientos del dominio del problema, pero no necesariamente conocimientos estadísticos que le ayuden a extraer conclusiones de las tablas de probabilidades generadas (a veces enormes).

De allí la imperiosa necesidad de construir modelos fácilmente explicables con resultados generalizables. En este capítulo se presenta una metodología para explicar clasificadores Bayesianos a partir de una serie de reglas obtenidas de árboles de decisión. Estos árboles se inducen de un conjunto de datos simulados generados a partir de las probabilidades a posteriori de la variable clase, calculadas con la red Bayesiana aprendida de un conjunto de datos de entrenamiento. La aplicación de esta metodología al problema del acabado superficial ha demostrado ser útil para mejorar la interpretabilidad de los resultados del modelo.

El contenido de este capítulo se basa en [Correa y Bielza, 2009].

5.1. Introducción

La ventaja clave de tener un modelo formal es que puede predecir el comportamiento de un sistema natural en un momento futuro y controlar sus salidas aplicando entradas apropiadas. Hay varias razones para adoptar los modelos basados en redes probabilísticas como solución a problemas no lineales: ellas, particularmente los clasificadores, son muy fáciles de construir; tienen buen comportamiento en muchas aplicaciones, y son muy intuitivos [Acid y otros, 2005]. En capítulos anteriores se ha dejado constancia de ello.

Sin embargo, la teoría de probabilidad es difícil de entender para personas sin un conocimiento profundo del tema, y es necesario encontrar métodos de explicación para ayudar a interpretar las tablas de probabilidad. Además, el objetivo general detrás de los métodos de explicación es ayudar al usuario a entender las conclusiones del modelo.

Antes de revisar los métodos de explicación existentes, definiremos el término *explicación*. Éste está vinculado al entendimiento y la descripción, pero no tiene un solo significado. Por ejemplo, algunos investigadores reivindican que la explicación consiste en buscar las causas de un hecho. Otros hacen una distinción entre explicación y comprensión. Algunos científicos consideran las explicaciones como inferir leyes básicas simplemente y las condiciones que describen un proceso [Salmon, 1984].

En el caso de las redes Bayesianas, un tipo de redes probabilísticas, la explicación se refiere a ayudar al usuario a entender la estructura de la red y los parámetros. La estructura codifica las (in)dependencias condicionales entre las variables aleatorias que definen el problema. Los parámetros son probabilidades condicionales que muy a menudo forman grandes tablas de probabilidad condicionada que son muy difíciles de manejar y entender.

Una explicación debería considerar su contenido, cómo interactúa con el usuario y su usuario objetivo. [Lacave y Díez, 2002] presentan una revisión detallada de los métodos de explicación en redes Bayesianas teniendo en cuenta estas tres características. Se describen a continuación someramente.

El contenido de la explicación depende de su objetivo. En redes Bayesianas, se pueden explicar 3 elementos. El primero es la *evidencia*, donde se determinan los valores de la variable no observada que justifican la evidencia observada. Estos valores se llaman *explicación*, y el proceso de inferencia subyacente se llama *abducción*. En el capítulo anterior se vieron ejemplos. El segundo es el *modelo*, donde se muestra la información contenida en la base de conocimiento mientras se construye el modelo. Esta

explicación se llama *estática* [Henrion y Druzdzel, 1991]. El tercero es el *razonamiento*, donde se justifican los resultados del modelo y el proceso de razonamiento que los produjeron. Esto se hace mientras se evalúa y se hace funcionar el modelo para identificar errores y resultados no esperados por el usuario. También incluye los análisis de sensibilidad. Esta explicación se llama *dinámica*.

Hay dos posibles categorías de detalle en una explicación. Las explicaciones a *nivel micro* desarrollan las variaciones que ocurren en un nodo particular de una red Bayesiana cuando sus vecinos varían. Las explicaciones a *nivel macro* analizan las principales líneas del razonamiento (unos cuantos caminos en una red Bayesiana) que llevan a una conclusión particular [Sember y Zukerman, 1990].

En cuanto a cómo la explicación interactúa con el usuario, esto depende de si el usuario puede pedir al modelo una explicación de un menú de opciones fijo, o planteando preguntas o incluso teniendo alguna clase de diálogo en lenguaje natural para entender cada pregunta y respuesta. Además, las explicaciones pueden presentarse en diferentes formatos: verbalmente, gráficamente... Las probabilidades pueden expresarse de una manera cuantitativa exacta o de una manera cualitativa aproximada usando expresiones lingüísticas como “casi seguro”, “raramente”, “muy probablemente” (en [Wallsten y Budescu, 1995] puede verse una revisión).

Por último, otra característica de los métodos de explicación es la adaptación al usuario, i.e. la capacidad del modelo para adaptarse a las necesidades y expectativas del usuario. Esto depende del conocimiento que el usuario tenga sobre el dominio del problema y sobre el método de razonamiento (sin experiencia, avanzado, experto).

Las explicaciones también deberían ayudar a validar e identificar posibles errores del modelo, así como a profundizar en el conocimiento y simplificar la toma de decisiones. Aún no se ha encontrado un método satisfactorio que sea significativo para datos probabilísticos de cualquier dominio general.

Para explicar datos probabilísticos de cualquier dominio de aplicación son necesarias explicaciones del razonamiento a nivel macro. Estas explicaciones son muy interactivas. En este capítulo se propone una metodología para generalizar un modelo de clasificación Bayesiano explicando las tablas de probabilidad a posteriori de una red Bayesiana (entrenada con datos experimentales) por medio de reglas deducidas de un árbol de decisión inducido a partir de un juego de datos generado de las tablas de probabilidad.

Las reglas deducidas estarán disponibles en un formato de intervalo,

y la explicación no se limitará al lenguaje de un dominio particular que puede obstruir su comprensión. Las probabilidades se expresarán de una manera cuantitativa exacta, ya que sus expresiones verbales pueden generar malentendidos [Bryant y Norman, 1980].

5.2. Explicación de una red Bayesiana: estado del arte

La explicación del razonamiento en redes Bayesianas se centra en una sola variable “hipótesis”. La mayoría de las herramientas para redes Bayesianas resumen los resultados del proceso de inferencia mostrando la probabilidad de los estados de cada variable. A continuación se analizan los trabajos relacionados que incluyen algún tipo de explicación.

El sistema NESTOR [Cooper, 1984], una de las primeras redes Bayesianas, generaba una explicación cualitativa verbal de la evidencia y una hipótesis dada. La interacción con el usuario estaba basada en preguntas predeterminadas. Esto es una desventaja.

En sistemas como GLADYS [Spiegelhalter y Knill-Jones, 1984] y PATHFINDER [Heckerman, 1991] la explicación se basaba en asignar un peso de la evidencia, propuesto por [Good, 1977], a cada descubrimiento mostrando la probabilidad de las posibles respuestas. Las explicaciones eran en forma textual y las probabilidades en formato numérico. No había interacción con los usuarios.

[Strat y Lowrance, 1989] propusieron un método basado en la teoría de Dempster-Shafer para generar explicaciones. El objetivo del razonamiento evidencial es evaluar el efecto de todos los fragmentos disponibles de evidencia en una hipótesis, usando el conocimiento específico del dominio. Variando los parámetros de entrada y recalculando las salidas, el análisis de sensibilidad puede explicar la interacción de la evidencia y su impacto en las conclusiones. La interacción con el usuario es a través de preguntas predefinidas.

[Elsaesser y Henrion, 1990] propusieron un método para generar explicaciones lingüísticas que consistía en rellenar una plantilla con términos de lenguaje natural representando los datos probabilísticos y sus variaciones. Probabilidades muy altas (0.91 a 0.99) se denotaban como casi seguro, probabilidades altas (0.82 a 0.90) como muy probable, y valores de probabilidad bajos (0.09 a 0.18) como improbables o muy improbables (0.01 a 0.08). Estas categorías se definieron usando un conjunto de reglas heurísticas para

describir los cambios en las probabilidades, por ejemplo, “Si $A \rightarrow B$ y B es cierto, entonces A es casi seguro que existe”. El objetivo de este método de explicación es principalmente la descripción verbal de los resultados del proceso de razonamiento en lugar de la comprensión del proceso. Además, estas explicaciones son a nivel micro.

[Henrion y Druzdzel, 1991] propusieron una explicación del razonamiento probabilístico. Definieron un escenario como una asignación de valores a las variables relevantes para una cierta conclusión, ordenados de tal manera que forman una historia coherente -historia causal, si es posible- compatible con la evidencia. En este caso, la explicación a nivel macro (varias variables) toma la forma de texto en lenguaje natural para explicar el escenario, mientras que la probabilidad se expresa numéricamente. El usuario no tiene que estar familiarizado con el razonamiento probabilístico para entender las explicaciones, aunque el conocimiento de los métodos de propagación le ayudaría a entender las explicaciones.

[Suermondt, 1992] propuso un método llamado INSITE para identificar los descubrimientos que influyen en la probabilidad a posteriori de una hipótesis dada. Con este método además es posible buscar caminos desde la evidencia hasta una variable de interés. El trabajo analiza la importancia de los caminos en la adquisición del resultado de la inferencia, y determina la posibilidad de los caminos que están en conflicto con el resultado. Estos caminos se muestran gráficamente, y se presenta una descripción verbal a petición del usuario. El objetivo de este método es obtener una comprensión del razonamiento. El inconveniente es la complejidad computacional. Aumenta con el número de nodos y arcos en la red.

[Haddawy y otros, 1997] desarrollan una herramienta, BANTER, para ayuda a la decisión y la enseñanza, centrada en la medicina. Esta herramienta funciona como cualquier red donde los nodos pueden ser clasificados como hipótesis, observaciones y pruebas. Dado un elemento de evidencia, el sistema ofrece la probabilidad de una hipótesis, o selecciona la prueba más probable que confirma o rechaza un posible diagnóstico. Usando una modificación de [Suermondt, 1992], el sistema puede generar explicaciones verbales identificando los descubrimientos más influyentes. La desventaja es que ofrece demasiada información que a veces es irrelevante para la conclusión y difícil de entender.

[Lacave y otros, 2007] presentan un método para explicar redes Bayesianas y diagramas de influencia implementado en la herramienta Elvi-

ra¹ (utilizada en el capítulo 3), usado para construir modelos médicos y para enseñar razonamiento probabilístico a estudiantes de grado y postgrado. En el caso de las redes Bayesianas, Elvira ofrece una explicación a nivel micro verbal y gráfica, de nodos y enlaces dados. Puede mostrar varios casos de evidencia simultáneamente y es capaz de codificar el signo y la magnitud de las influencias con el color y el grosor de los enlaces. Las explicaciones del nodo pueden desplegarse verbalmente, donde el nombre, estados, padres e hijos, probabilidades a priori y posteriori están disponibles. En la explicación de los enlaces, la magnitud de la influencia (MI) para el enlace $A \rightarrow C$ es

$$MI(A, C) = \max_{c, a, \mathbf{b}} |P(C \geq c|a, \mathbf{b}) - P(C \geq c|a_0, \mathbf{b})|,$$

donde a_0 es el valor normal de A , i.e. el estado que representa la ausencia de anomalía. MI mide hasta qué punto una cierta causa A puede mover a C de su estado de normalidad a un estado de anomalía. La desventaja de esta sistema es que se centra en fines médicos, y la explicación está en un lenguaje restringido a este dominio. Éste es un obstáculo para su uso en otros entornos.

Muchos autores se han centrado en la explicación de evidencia, en la que queremos explicar por qué un subconjunto de variables observadas (instanciadas) tomó valores específicos usando las asignaciones de (algunas de) las otras variables.

Así, la mayoría de las propuestas se basan en la búsqueda de la explicación más probable (MPE) y sus variantes: k explicaciones más probables [de Campos y otros, 2001], máximo a posteriori (MAP) [Shimony, 1991], explicación más relevante (MRE) [Yuan y Lu, 2008]. Otros están interesados en la sensibilidad de una explicación con respecto a la evidencia y en la comparación de dos explicaciones posibles, ordenándolas con el factor de Bayes [Jensen, 2001, Yuan y Lu, 2007].

[Flores y otros, 2005] y [Nielsen y otros, 2008] también se ocuparon de la explicación de la evidencia. [Flores y otros, 2005] construyeron un conjunto de mejores explicaciones tratando de que sean concisas, resumiendo los resultados en un árbol de explicación. Entre todas las explicaciones representadas en este árbol, la mejor es la de mayor probabilidad a posteriori del camino de la explicación dada la evidencia. [Nielsen y otros, 2008] modificaron este enfoque para el caso de RBs causales. Además, también se permitió a las variables observadas ser seleccionadas como parte de la explicación.

¹<http://www.ia.uned.es/~elvira/>

Nuestro enfoque se diferencia de esas aproximaciones basadas en árboles, [Flores y otros, 2005] y [Nielsen y otros, 2008]. Nosotros nos centramos en la explicación del proceso de razonamiento, no en la explicación de la evidencia. Nuestras RBs no son causales, por lo general diseñadas por expertos, sino aprendidas de los datos. No buscamos la mejor explicación entre todas las representadas por el árbol; usamos el árbol completo para explicar (resumir) el conjunto completo de distribuciones de probabilidad condicionadas de la clase dado el resto (o algunas) de las variables.

En la tabla 5.1 se presenta un resumen de los trabajos presentados en el estado del arte de la explicación de una red Bayesiana detallando el nivel de explicación, el formato de presentación y la forma de interactuar con el usuario.

Tabla 5.1: Resumen del estado del arte

Autor/Año	Explicación	Formato	Interacción con el usuario
[Cooper, 1984]	Cualitativa	Verbal	Preguntas predefinidas
[Spiegelhalter y Knill-Jones, 1984] y [Heckerman, 1991]	Asignando pesos de evidencia a cada descubrimiento, mostrando la probabilidad de las posibles respuestas	Verbal y probabilidad numérica	No hay
[Strat y Lowrance, 1989]	Usa conocimiento específico del dominio	Verbal	Preguntas predefinidas
[Elsaesser y Henrion, 1990]	Descripción de los resultados en lugar de la comprensión del proceso, nivel micro	Verbal	Rellenando una plantilla
[Henrion y Druzdzel, 1991]	Texto en lenguaje natural para explicar el escenario, nivel macro	Verbal y probabilística	Informe en lenguaje natural
[Suermondt, 1992]	Comprensión del razonamiento y conflictos	Verbal y gráfica	Gráficamente y descripción verbal
[Haddawy y otros, 1997]	Probabilidad de hipótesis	Verbal	Por medio de informes
[Lacave y otros, 2007]	Razonamiento probabilístico, nivel micro	Verbal y gráfica	Gráfica y descripción verbal
[de Campos y otros, 2001]	Explicación más probable (MPE)	Probabilidad numérica	No hay
[Shimony, 1991]	Máximo a posteriori (MAP)	Probabilidad numérica	No hay
[Yuan y Lu, 2008]	Explicación más relevante (MRE)	Probabilidad numérica	No hay
[Flores y otros, 2005]	Explicación de la evidencia con árboles	Probabilidad numérica	No hay
[Nielsen y otros, 2008]	Explicación de la evidencia para RBs causales	Probabilidad numérica	No hay
[Jensen, 2001] y [Yuan y Lu, 2007]	Comparación de dos explicaciones posibles	Probabilidad numérica	No hay

5.3. Metodología propuesta para la explicación

Describimos una metodología de explicación para clasificadores basados en redes Bayesianas. La metodología combina las probabilidades de salida de la red Bayesiana con los árboles de decisión. Se demuestra que la información de las probabilidades a posteriori se combina con los árboles de decisión para la elaboración de reglas que pueden ayudar al usuario a comprender más fácilmente las decisiones adoptadas, resultando así en un método de explicación.

La metodología propuesta para la explicación del modelo clasificador Bayesiano se resume como sigue:

- Paso 1: Construir un clasificador Bayesiano con datos de un experimento.
- Paso 2: Generar un nuevo conjunto de datos a partir de la tabla de probabilidad a posteriori obtenida del modelo anterior.
- Paso 3: Construir un árbol de decisión con este nuevo conjunto de datos.
- Paso 4: Transformar los resultados del árbol en reglas.

Cada paso se detalla en las siguientes secciones.

5.3.1. Entrenamiento de un clasificador Bayesiano

El primer paso es aprender un clasificador de red Bayesiana, en cualquiera de sus tres modelos principales, naïve Bayes, TAN (explicados en la sección 3.3) o BAN. Los clasificadores naïve-Bayes aumentados a red Bayesiana (BAN) extienden los TAN permitiendo a los atributos formar un grafo arbitrario (red Bayesiana) en lugar de un árbol [Friedman y otros, 1997]. Aprender tales estructuras es más costoso. El algoritmo de aprendizaje de BAN es exactamente igual que el de aprender un TAN, excepto que se invoca a un algoritmo de aprendizaje de RB sin restricciones en lugar de a un algoritmo de aprendizaje de árboles. Un ejemplo de estructura BAN puede verse en la figura 5.1.

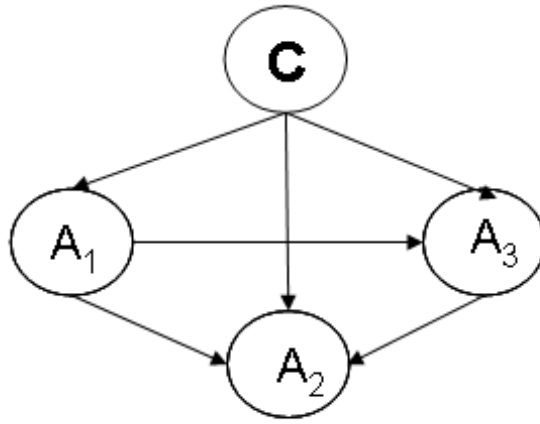


Figura 5.1: Ejemplo de red Bayesiana con estructura BAN

Una vez que el clasificador se ha aprendido, los métodos de propagación de probabilidad [Lauritzen y Spiegelhalter, 1988] pueden inferir la distribución de probabilidad a posteriori deseada, $p(c|\mathbf{x})$, en nuestro problema de clasificación. Desde esta distribución se inicia el próximo paso.

5.3.2. Generación de datos de la distribución de probabilidad a posteriori de la variable clase

Se puede usar un enfoque general para la generación de variables aleatorias. Dado que en redes Bayesianas se suponen discretas las variables aleatorias, se puede elegir el método de la transformada-inversa discreta (véase e.g. [Law y Kelton, 1991]). Dado \mathbf{x} , se tienen las probabilidades $p(C = 1|\mathbf{x}), \dots, p(C = r|\mathbf{x})$, que se denotarán $p_1^{\mathbf{x}}, \dots, p_r^{\mathbf{x}}$, respectivamente. El método directo de la transformada-inversa para generar de $p(C|\mathbf{x})$ es como sigue:

1. Generar $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$
2. Devolver $C = i$ satisfaciendo $\sum_{j=1}^{i-1} p_j^{\mathbf{x}} \leq U < \sum_{j=1}^i p_j^{\mathbf{x}}$

Para evitar el (a veces) tiempo consumido de búsqueda del paso 2, las $p_j^{\mathbf{x}}$ puede ordenarse inicialmente en orden decreciente para que sea probable que la búsqueda termine después de un número más pequeño de comparaciones.

Este proceso nos proporciona una muestra $c_1^{\mathbf{x}}, \dots, c_{N_{\mathbf{x}}}^{\mathbf{x}}$ de tamaño $N_{\mathbf{x}}$ de la variable aleatoria $C|\mathbf{x}$. Sin embargo, para cada \mathbf{x} , tenemos una (diferente)

distribución de probabilidad. Toda esta información se incluye en la tabla completa de probabilidad condicionada de $p(C|\mathbf{x})$.

Por lo tanto, debemos tener en cuenta la probabilidad de cada \mathbf{x} , $p(\mathbf{x})$, para obtener el conjunto final de muestras de $p(C|\mathbf{x})$ cuando \mathbf{x} también varía. $p(\mathbf{x})$ también la proporciona la red Bayesiana.

Así, si \mathbf{X} denota la variable aleatoria n -dimensional tomando valores (x_1, \dots, x_n) , el procedimiento completo para generar valores aleatorios de $p(C|\mathbf{X})$ con tamaño N es:

Para cada \mathbf{x} ,

1. Calcular el entero $N_{\mathbf{x}}$ más cercano a $N \cdot p(\mathbf{x})$
2. Generar $c_1^{\mathbf{x}}, \dots, c_{N_{\mathbf{x}}}^{\mathbf{x}} \sim p(C|\mathbf{x})$ como se explicó anteriormente.

La muestra final tendrá tamaño $N = \sum_{\mathbf{x}} N_{\mathbf{x}}$. Estos serán los datos utilizados para inducir el árbol de decisión en el próximo paso.

5.3.3. Construcción de un árbol de decisión y sus reglas

Los árboles de decisión son una técnica de clasificación de minería de datos muy popular. Pertenecen a los métodos de aprendizaje inductivo automático que usan ejemplos etiquetados (clasificación supervisada). Dividen el espacio de entrada en regiones locales identificadas por una secuencia de divisiones recursivas.

Se ha seleccionado el algoritmo C4.5 [Quinlan, 1993], una mejora del algoritmo ID3. C4.5 se basa en la utilización del ratio de ganancia (gain ratio) para decidir qué variable es la mejor para dividir la parte de datos que llega a un nodo en particular. Este enfoque evita la desventaja del algoritmo ID3 que favorece la elección de variables con muchos valores posibles.

El algoritmo C4.5 además poda el árbol de clasificación. La poda se basa en un test de hipótesis que evalúa si una determinada rama debe ser expandida o no. Esto elimina sub-árboles, reduce la varianza y generaliza mejor.

Los árboles de decisión son buenos para aproximar funciones objetivo con valores discretos (como nuestra función γ , véase sección 3.3.1) en dominios complejos donde no hay separación lineal. Adicionalmente, pueden ser transformados en conjuntos de reglas de decisión (si-entonces) que mejoran el entendimiento humano [Mitchell, 1997].

En nuestro caso, desarrollamos un árbol de decisión del conjunto de datos obtenido en el paso anterior. Este conjunto representa una muestra

de la distribución a posteriori de la variable clase dada cualquier observación \mathbf{x} , donde la probabilidad de cada \mathbf{x} se ha tenido en cuenta en el proceso de muestreo.

El árbol de decisión explicará el contenido de la tabla de probabilidad a posteriori concisa y jerárquicamente. Puesto que las reglas son muy intuitivas y sencillas de obtener a partir de los árboles de decisión, esta transformación en reglas de decisión como generalizaciones es el paso final.

5.4. Aplicación a la modelización de Ra

En esta sección se presenta la utilidad de la metodología propuesta aplicada al problema que venimos tratando, el modelizado óptimo para predecir “en-proceso” la calidad superficial Ra en piezas de aluminio mecanizadas. Para la aplicación de la metodología se han tomado los datos recogidos de 2 diseños de experimentos detallados en las secciones 4.2.2 y 4.2.3. Las etiquetas de la clase Ra se usaron según lo definido en la sección 3.3.3. Todas las variables usadas y sus intervalos aparecerán en la tabla 4.5.

El paso 1 da lugar a la red aprendida en la sección 4.3, cuya estructura se mostró en la figura 4.4. Por tanto, se escogió una estructura TAN.

Dada esta red, para el paso 2 estamos interesados en la probabilidad de Ra dada cualquier combinación de las variables restantes. Antes de generar los nuevos datos, se descartó la creación de instancias de la variable F_{XY} , ya que ésta se mide “en-proceso” en función de otras variables, lo que hace imposible la introducción de evidencia en ella. Parte de la tabla de la probabilidad de Ra dadas fz , $diam$, ae , HB , $geom$ y rpm se muestra en la tabla 5.2. Esta tabla tiene 45000 ($= 5 \times 5 \times 5 \times 6 \times 5 \times 3 \times 4$) entradas haciendo necesario un método de explicación de toda esta información.

Otro caso que no es interesante es cuando la evidencia se introduce al mismo tiempo en todas las variables, dado que no da información. Estos casos también fueron eliminados.

Tabla 5.2: Parte de la tabla de $P(Ra|fz, diam, ae, HB, geom, rpm)$. Etiquetas de Ra : S=Smooth, G=Ground, P=Polished, M=Mirror; etiquetas de $geom$: $CX - -$ =Convexo- -, $CV + +$ =Cóncavo+, $CX -$ =Convexo-, $CV +$ =Cóncavo+, $Slot$ = recta

ID	fz $\times 10^{-2}$	$diam$	ae	HB	$geom$	rpm $\times 10^3$	Ra			
							S	G	P	M
1	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$CX - -$	[15,17.5)	0	.13	.01	.86
2	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$CX - -$	[17.5,20)	0	0	.38	.61
3	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$CX - -$	[20,22.5)	0	0	.02	.98
4	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$CV + +$	[15,17.5)	.60	.02	.03	.35
5	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$CV + +$	[17.5,20)	.25	0	.60	.15
6	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$CV + +$	[20,22.5)	.61	0	.03	.36
7	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$Slot$	[15,17.5)	.02	.07	.08	.83
8	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$Slot$	[17.5,20)	0	0	.81	.18
9	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$Slot$	[20,22.5)	.03	0	.08	.89
10	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$CX -$	[15,17.5)	.20	.10	.02	.68
11	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$CX -$	[17.5,20)	.10	0	.55	.35
12	[2.5,4.6)	8	1	[65,92)	$CX -$	[20,22.5)	.22	0	.03	.75
.
.
.
44992	[10.9,13)	20	5	[145,152)	$Slot$	[15,17.5)	.17	.82	0	.01
44993	[10.9,13)	20	5	[145,152)	$Slot$	[17.5,20)	.15	.69	.09	.07
44994	[10.9,13)	20	5	[145,152)	$Slot$	[20,22.5)	.13	.63	.01	.23
44995	[10.9,13)	20	5	[145,152)	$CV +$	[15,17.5)	.01	0	0.91	.08
44996	[10.9,13)	20	5	[145,152)	$CV +$	[17.5,20)	.06	.07	.76	.11
44997	[10.9,13)	20	5	[145,152)	$CV +$	[20,22.5)	.06	0	0.76	.18
44998	[10.9,13)	20	5	[145,152)	$CV + +$	[15,17.5)	.01	.01	.12	.86
44999	[10.9,13)	20	5	[145,152)	$CV + +$	[17.5,20)	.02	0	.08	.90
45000	[10.9,13)	20	5	[145,152)	$CV + +$	[20,22.5)	0	.01	.22	.77

De la tabla de probabilidad a posteriori y usando el método explicado en la sección 5.3.2, se generaron nuevos datos obteniendo un conjunto de datos de $N=46655$ casos. Con este conjunto de datos simulados que contiene instancias de las 7 variables predictoras y sus correspondientes etiquetas de Ra , se construyó un árbol de decisión usando el algoritmo C4.5 con poda (paso 3).

Se seleccionó post-poda evaluando la conveniencia de expandir algunos nodos, fijando el factor de confianza para la poda en 10 %, disminuyendo considerablemente el tamaño del árbol, sin detrimento de la precisión. Un factor de confianza inferior debe incurrir en más poda.

El factor de confianza para la operación de poda, define la probabilidad de error que se permite a la hipótesis de que el empeoramiento debido a esta poda sea significativo. A probabilidad menor, se exigirá que la diferencia en los errores de predicción antes y después de podar sea más significativa para no podar. El tiempo de procesamiento fue de 13.28 segundos en una CPU P4 a 3.06 GHz para la generación de un árbol de tamaño 951 (número de nodos) y 476 hojas, con una restricción de 20 datos por hoja.

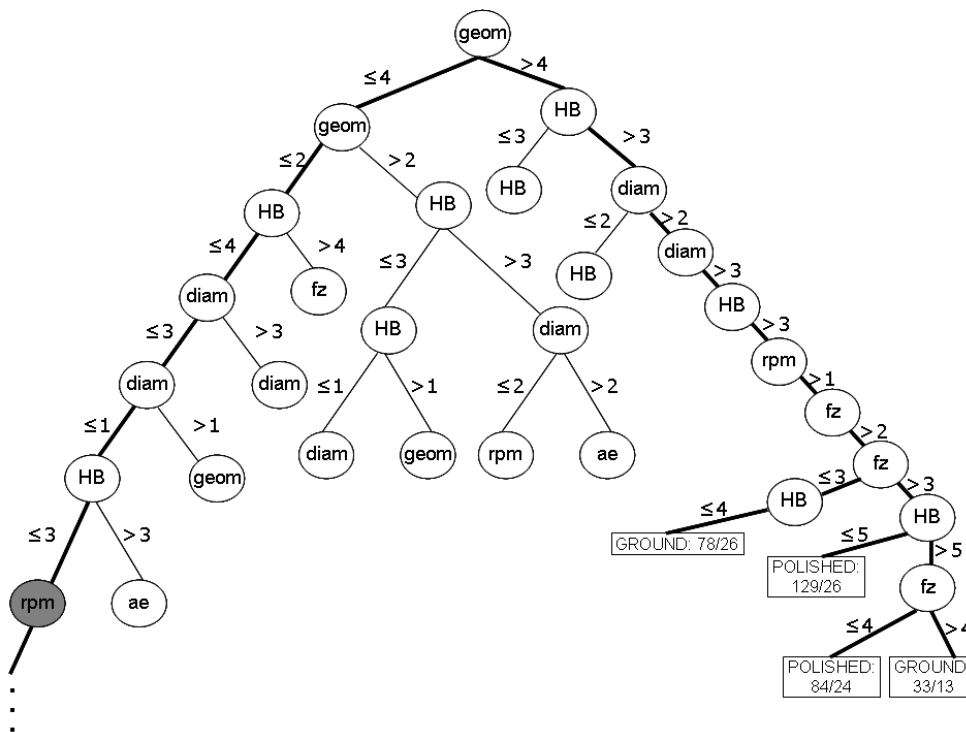


Figura 5.2: Árbol de decisión con una rama expandida mostrando algunas reglas (últimas reglas a la derecha)

Se usó de nuevo el método de validación cruzada con K-rodajas para estimar honestamente la precisión del modelo, es decir, el porcentaje de observaciones clasificadas correctamente. El modelo se validó con $K = 10$.

Con este árbol se obtuvo un 78 % de precisión en el modelo después de la validación, con 76 % de ejemplos correctamente clasificados para Mirror, 81 % para Polished, 77 % para Ground y 76 % para Smooth. Parte del árbol de decisión inducido se muestra en las figuras 5.2 y 5.3.

Para el paso 4 final, se dedujo una regla para cada camino desde la raíz del árbol a un nodo hoja. El antecedente de esta regla es una conjunción de valores de los atributos (variables predictoras) localizados en los nodos del árbol, y el consecuente es la decisión a la cual la hoja del árbol o clasificación se refiere. La tabla 5.3 muestra algunas de las reglas obtenidas.

La primera regla en la tabla (camino más a la izquierda en las figuras 5.2 y 5.3), representada en forma verbal, es la siguiente: si $geom \leq [10, 30)$ mm y $geom \leq [-30, -10)$ mm y $HB \leq [109, 111)$ Brinell y $diam \leq 12$ mm y $diam \leq 8$ y $HB \leq [94, 109)$ y $rpm \leq [15000, 17500)$ y $HB > [92, 94)$ entonces $Ra=Smooth$, con 382 ejemplos clasificados correctamente por la regla y 52 mal clasificados, es decir, 87 % de precisión. Véanse las cajas en las hojas de la figura 5.3. Esta regla podría ser interpretada como: Mecanizando geometrías convexas con radios $\leq [-30, 10)$ mm en materiales blandos ($HB \leq [94, 109)$), con herramientas de diámetro pequeño (≤ 8 mm) y velocidad de giro $\leq [15000, 17500)$ rpm, entonces $Ra=Smooth$. La segunda regla es: si $geom \leq [10, 30)$ mm y $geom \leq [-30, -10)$ mm y $HB \leq [109, 111)$ Brinell y $diam \leq 12$ mm y $diam \leq 8$ y $HB \leq [94, 109)$ y $rpm \leq [15000, 17500)$ y $HB \leq [92, 94)$ y $geom > [-50, -30)$ mm se espera $Ra=Smooth$, con 147 ejemplos clasificados correctamente por esta regla y 39 mal clasificados (79 % de precisión). La interpretación es muy parecida a la regla anterior ya que solamente cambia la dureza del material ($\leq [92, 94)$).

En la tercera regla, la medida de Ra es mejor: si $geom \leq [10, 30)$ mm y $geom \leq [-30, -10)$ mm y $HB \leq [109, 111)$ Brinell y $diam \leq 12$ mm y $diam \leq 8$ mm y $HB \leq [94, 109)$ y $rpm \leq [15000, 17500)$ y $HB \leq [92, 94)$ y $geom \leq [-50, -30)$ mm y $HB > [65, 92)$, entonces $Ra=Mirror$, con 54 ejemplos clasificados correctamente por esta regla y 17 mal clasificados (76 % de precisión). En este caso la regla podría interpretarse como: para mecanizar geometrías convexas con radio $\leq [-50, 30)$ mm en material blando ($HB \leq [92, 94)$), diámetro de herramienta pequeño (≤ 8 mm) y velocidad de giro $\leq [15000, 17500)$ rpm, se espera $Ra=Mirror$.

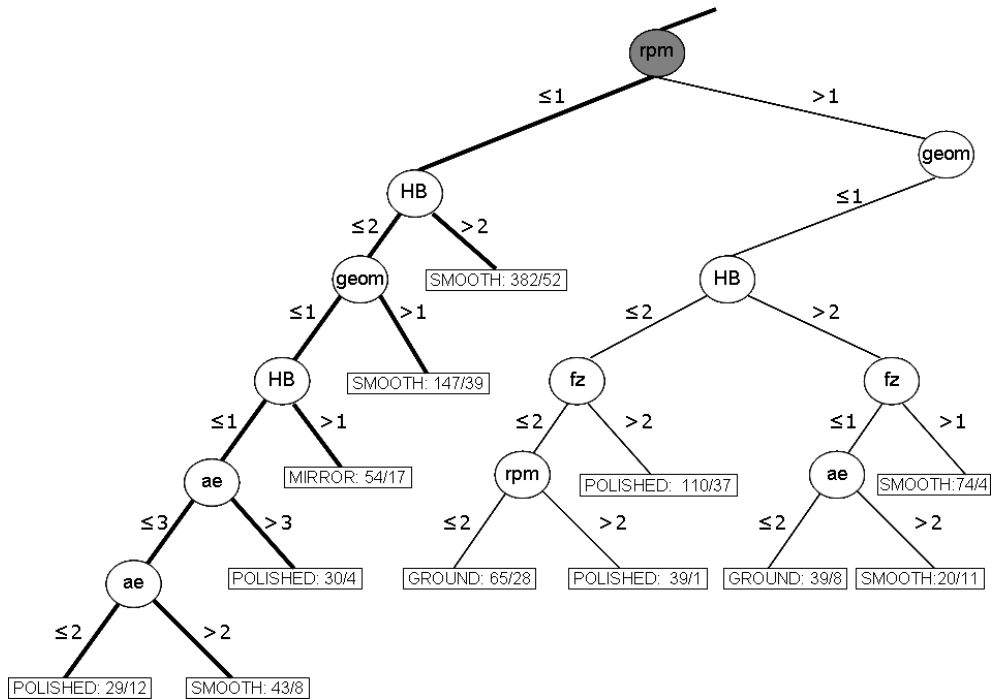


Figura 5.3: Árbol de decisión con una rama expandida mostrando algunas reglas (primeras reglas a la izquierda)

Estas reglas muestran cómo el modelo puede clasificar nuevos casos y su precisión de clasificación. Después de seguir todos los caminos hasta alcanzar las hojas, se obtuvieron 476 reglas. Analizando las reglas obtenidas, surgen algunas ideas generales proporcionando conocimiento sobre el proceso como:

- Herramientas con diámetro grande y material duro conducen a mejores medidas de Ra .
- Mecanizando geometrías cóncavas y ranuras en materiales duros producirá mejor calidad superficial.
- Las velocidades de giro lentas producen peores calidades.
- Con geometrías convexas se obtienen peores calidades, sin importar la dureza del material que se use.

Tabla 5.3: Algunas de las reglas obtenidas del árbol de decisión

Camino	Regla
1	Si $geom \leq 4$ y $geom \leq 2$ y $HB \leq 4$ y $diam \leq 3$ y $diam \leq 1$ y $HB \leq 3$ y $rpm \leq 1$ y $HB > 2$ entonces Ra : <i>Smooth</i>
2	Si $geom \leq 4$ y $geom \leq 2$ y $HB \leq 4$ y $diam \leq 3$ y $diam \leq 1$ y $HB \leq 3$ y $rpm \leq 1$ y $HB \leq 2$ y $geom > 1$ entonces Ra : <i>Smooth</i>
3	Si $geom \leq 4$ y $geom \leq 2$ y $HB \leq 4$ y $diam \leq 3$ y $diam \leq 1$ y $HB \leq 3$ y $rpm \leq 1$ y $HB \leq 2$ y $geom \leq 1$ y $HB > 1$ entonces Ra : <i>Mirror</i>
4	Si $geom \leq 4$ y $geom \leq 2$ y $HB \leq 4$ y $diam \leq 3$ y $diam \leq 1$ y $HB \leq 3$ y $rpm \leq 1$ y $HB \leq 2$ y $geom \leq 1$ y $HB \leq 1$ y $ae > 3$ entonces Ra : <i>Polished</i>
5	Si $geom \leq 4$ y $geom \leq 2$ y $HB \leq 4$ y $diam \leq 3$ y $diam \leq 1$ y $HB \leq 3$ y $rpm \leq 1$ y $HB \leq 2$ y $geom \leq 1$ y $HB \leq 1$ y $ae \leq 3$ y $ae > 2$ entonces Ra : <i>Smooth</i>
6	Si $geom \leq 4$ y $geom \leq 2$ y $HB \leq 4$ y $diam \leq 3$ y $diam \leq 1$ y $HB \leq 3$ y $rpm \leq 1$ y $HB \leq 2$ y $geom \leq 1$ y $HB \leq 1$ y $ae \leq 3$ y $ae \leq 2$ entonces Ra : <i>Polished</i>
7	Si $geom \leq 4$ y $geom \leq 2$ y $HB \leq 4$ y $diam \leq 3$ y $diam \leq 1$ y $HB \leq 3$ y $rpm > 1$ y $geom \leq 1$ y $HB > 2$ y $fz > 1$ entonces Ra : <i>Smooth</i>
8	Si $geom \leq 4$ y $geom \leq 2$ y $HB \leq 4$ y $diam \leq 3$ y $diam \leq 1$ y $HB \leq 3$ y $rpm > 1$ y $geom \leq 1$ y $HB > 2$ y $fz \leq 1$ y $ae > 2$ entonces Ra : <i>Smooth</i>
9	Si $geom \leq 4$ y $geom \leq 2$ y $HB \leq 4$ y $diam \leq 3$ y $diam \leq 1$ y $HB \leq 3$ y $rpm > 1$ y $geom \leq 1$ y $HB > 2$ y $fz \leq 1$ y $ae \leq 2$ entonces Ra : <i>Ground</i>
.	.
.	.
.	.
474	Si $geom > 4$ y $HB > 3$ y $diam > 2$ y $diam > 3$ y $HB > 3$ y $rpm > 1$ y $fz > 2$ y $fz > 3$ y $HB \leq 5$ entonces Ra : <i>Polished</i>
475	Si $geom > 4$ y $HB > 3$ y $diam > 2$ y $diam > 3$ y $HB > 3$ y $rpm > 1$ y $fz > 2$ y $fz > 3$ y $HB > 5$ y $fz \leq 4$ entonces Ra : <i>Polished</i>
476	Si $geom > 4$ y $HB > 3$ y $diam > 2$ y $diam > 3$ y $HB > 3$ y $rpm > 1$ y $fz > 2$ y $fz > 3$ y $HB > 5$ y $fz > 4$ entonces Ra : <i>Ground</i>

5.5. Conclusiones del capítulo

La metodología propuesta es un método de explicación a nivel micro conducido por reglas tomadas de un árbol de decisión. Esta metodología es una forma útil de reducir y explicar la complejidad de las tablas de probabilidad a posteriori calculadas por una red Bayesiana. La información se transmite con mayor claridad al experto quien encuentra más fácil entender los resultados.

La metodología proporciona una forma compacta de la enorme tabla de probabilidad del modelo de predicción de Ra en pocas reglas (476), donde cada una lleva a una comprensión más profunda y facilita la interpretación. Las reglas obtenidas fueron validadas por el conocimiento de un experto.

Otra ventaja de esta metodología es que la explicación es generalmente aplicable a cualquier entorno. No se ve limitada por un vocabulario específico, presentando el resultado final por medio de reglas e intervalos de pertenencia.

Capítulo 6

CLASIFICADORES BAYESIANOS MULTIOBJETIVO

En un problema de optimización se busca una solución que represente el valor óptimo para una función objetivo. El ejemplo más simple es teniendo un único objetivo representado por una función del tipo $f : X \rightarrow Y$ donde $X \subset \mathbb{R}$ e $Y \subset \mathbb{R}$, es decir, el dominio y la imagen de la función son reales y su valor óptimo será un mínimo o máximo de la función.

Sin embargo, en muchos problemas del mundo real se requiere optimizar más de un objetivo teniendo entonces un problema de optimización multiobjetivo [Steuer, 1986].

Algunas características de este tipo de problemas son trabajar en un espacio multidimensional de funciones o carecer de una única solución al problema. Por ejemplo, en un típico problema de fabricación se busca minimizar el coste y maximizar la producción. Esto genera conflicto entre los objetivos que hará que la mejora de uno de ellos empeore el otro, por lo que se tendrían dos soluciones optimizando dos objetivos diferentes y no se podría decidir qué solución es la mejor globalmente.

En optimización multiobjetivo se busca optimizar una función de la forma $\mathbf{f} : X \rightarrow Y$ donde $X \subset \mathbb{R}^n$ e $Y \subset \mathbb{R}^m$. La noción de óptimo se modifica, ya que normalmente no es posible encontrar una única solución que sea óptima para todas las m dimensiones a optimizar.

Para resolver un problema de optimización multiobjetivo, los algoritmos tradicionales lo transforman en un problema de optimización uniobjetivo,

utilizando algún criterio de preferencias, encontrando una única solución de compromiso, esto es, una solución con valores aceptables en todos los objetivos según el criterio de preferencias establecido. Si se quiere más de una solución es necesario modificar el criterio de preferencias y ejecutar de nuevo el algoritmo, generando cada vez una nueva solución.

Para solucionar el inconveniente de múltiples ejecuciones se ha propuesto utilizar algoritmos de simulación [Martín y otros, 2005] y algoritmos evolutivos en optimización multiobjetivo [Deb, 2001, Coello y otros, 2002]. Se pueden obtener múltiples soluciones en una sola ejecución del algoritmo. A partir de este conjunto de soluciones se puede escoger la mejor, en caso de que exista, según el criterio de preferencias.

No obstante, aunque los algoritmos evolutivos aporten una solución a la optimización multiobjetivo, aún existe un vacío en esta problemática. Hasta este momento todos los planteamientos alrededor de la optimización multiobjetivo se han propuesto sobre objetivos cuantificados como un único número real. Dado que la metodología desarrollada a lo largo de esta memoria usa modelos de clasificación supervisada donde un modelo solución tiene al menos dos objetivos (maximizar la sensibilidad y especificidad) y adicionalmente estos objetivos debido al proceso de validación inherente no se pueden cuantificar como un único número real, se hace necesario plantear un nuevo concepto de optimización multiobjetivo que incluya soluciones cuantificadas en un intervalo de valores.

En este capítulo se propone una novedosa idea, basándose en conceptos de la teoría de Pareto, a los problemas de optimización multiobjetivo donde algunos de los objetivos son cuantificados como intervalos.

6.1. Incertidumbre, aprendizaje y optimización multiobjetivo: estado del arte

Las investigaciones en optimización multiobjetivo se han centrado en objetivos cuantificados como un único número real. Hay en la literatura pocos trabajos en los cuales se han planteado objetivos en forma de intervalos o con datos ruidosos. A continuación se detallan algunos trabajos interesantes, desde nuestro punto de vista, relacionados con esta temática.

[Teich, 2001] introduce el criterio de dominancia probabilística como una extensión de la definición de dominancia de Pareto a la optimización multiobjetivo, como valores objetivo que son restringidos por intervalos. A cada objetivo considerado incierto se le asocia una variable aleatoria con

distribución uniforme en un intervalo. Utilizando esta distribución se obtiene la probabilidad de que una solución uniobjetivo domine a otra (en función del solapamiento entre sus intervalos). La extensión al caso multiobjetivo asume que los objetivos son independientes utilizando el producto de las probabilidades anteriores.

[Hughes, 2001] considera el caso de las funciones objetivo de los algoritmos evolutivos. Observa que éstas están sujetas a errores y trata de comparar sus distribuciones subyacentes (asume que son gaussianas) para establecer la probabilidad de dominancia. Como [Teich, 2001], la extensión a múltiples objetivos se basa en la hipótesis de independencia entre ellos. Una revisión de ideas análogas a estos dos últimos trabajos aparece en [Tan y Goh, 2008].

[Jin y Sendhoff, 2008] revisan la optimización multiobjetivo basada en las ideas de Pareto para resolver problemas de aprendizaje automático. De especial interés resulta la parte dedicada a la selección de modelos, donde proponen como objetivos la complejidad del modelo y la precisión.

[Sánchez y otros, 2005] implementaron un algoritmo de optimización evolutivo para seleccionar modelos de redes neuronales feed-forward con 2 capas ocultas. Usaron los valores de sensibilidad y especificidad (multiobjetivo) como indicadores de calidad. Los posibles valores de ambos se muestran en forma de soluciones óptimas de Pareto.

[Zhao, 2007] expuso una aproximación de programación genética multiobjetivo facilitando la toma de decisiones para especificar las preferencias parciales de objetivos conflictivos, como falsos negativos frente a falsos positivos, sensibilidad frente a especificidad, y sensibilidad frente a precisión, para reducir el número de soluciones. Define los casos en los cuales un árbol de decisión domina a otro según se considere la importancia de la sensibilidad o la especificidad.

[García-Nieto y otros, 2009] propusieron un algoritmo genético multiobjetivo para la selección de genes de conjuntos de datos de microarrays. El algoritmo realiza la selección del número de genes usando la sensibilidad y la especificidad, como indicadores de calidad, de la prueba de clasificación elaborada con SVM.

Hay varios trabajos en los que han usado la sensibilidad y la especificidad como indicadores de calidad de los modelos, siendo tomados como objetivos a maximizar pero no simultáneamente. Por otro lado no hay muchos trabajos en los que se definan estos objetivos en forma de intervalos. La aproximación más cercana a la nuestra es la propuesta de [Teich, 2001], aunque tiene una forma diferente de definir los objetivos, sin tener en cuenta el intervalo de confianza como se expone más adelante en este capítulo en la sección 6.4.

6.2. El problema de optimización multiobjetivo

6.2.1. Definición del problema

El problema de optimización multiobjetivo general se puede definir según [Osyczka, 1985] como *“encontrar un vector de variables de decisión que satisfagan un cierto conjunto de restricciones y optimice un conjunto de funciones objetivo. Estas funciones forman una descripción matemática de los criterios de rendimiento que suelen estar en conflicto unos con otros y que se suelen medir en unidades diferentes. El término “optimizar” en este caso toma pues un significado diferente al del caso de problemas monoobjetivo”*.

Es decir, se trata de encontrar el vector $\mathbf{x}^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)^T$ que optimice la función vectorial $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x}))^T$, tal vez sujeto a ciertas restricciones.

Los múltiples objetivos establecen en el espacio de búsqueda un orden parcial, no total. Encontrar el óptimo global de un problema de optimización multiobjetivo es un problema NP-completo [Bäck, 1996].

6.3. Conceptos de Pareto en optimización multiobjetivo

Sin pérdida de generalidad, tratamos de minimizar, suponiendo que tenemos m objetivos $f_i(\mathbf{x})$, con $i \in M = \{1, \dots, m\}$. Se definen 4 conceptos relacionados con la teoría de Pareto [Pareto, 1896].

Definición 1. (Conceptos de Pareto)

1. *Dominancia de Pareto.* Una solución \mathbf{x} se dice que (Pareto) domina a una solución \mathbf{y} , denotada como $\mathbf{x} \succ \mathbf{y}$, sii

$$\forall i \in M : f_i(\mathbf{x}) \leq f_i(\mathbf{y}) \text{ y } \exists j \in M : f_j(\mathbf{x}) < f_j(\mathbf{y})$$

2. *Solución óptima de Pareto.* Una solución \mathbf{x} se dice que es óptima de Pareto sii $\nexists \mathbf{y}$ con $\mathbf{y} \succ \mathbf{x}$.
3. *Conjunto óptimo de Pareto.* Es el conjunto \mathcal{P}_S de todas las soluciones óptimas de Pareto: $\mathcal{P}_S = \{\mathbf{x} | \nexists \mathbf{y} \text{ con } \mathbf{y} \succ \mathbf{x}\}$.
4. *Frente óptimo de Pareto.* Es el conjunto \mathcal{P}_F de todos los valores de la función objetivo correspondientes a las soluciones en \mathcal{P}_S :

$$\mathcal{P}_F = \{(f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})) | \mathbf{x} \in \mathcal{P}_S\}.$$

6.4. Conceptos de Pareto en optimización multiobjetivo con algunos objetivos dados en intervalos

En problemas de optimización multiobjetivo estándar, se supone que $f_i(\mathbf{x})$ son números reales $\forall i \in M$. Sin embargo, en muchos problemas de optimización multiobjetivo vinculados a aplicaciones de aprendizaje automático, especialmente las basadas en clasificación supervisada, algunos de los objetivos no se pueden cuantificar como números reales. Un ejemplo es el caso del diagnóstico médico. El interés típico puede ser minimizar el costo de los exámenes médicos y al mismo tiempo maximizar la sensibilidad y la especificidad del clasificador inducido. Estos dos últimos objetivos deben ser estimados usando un método de estimación honesta como validación cruzada con k-rodajas, bootstrap, etc. Como resultado de estas estimaciones obtendríamos un intervalo en lugar de un número real.

El objetivo de esta propuesta es extender los últimos cuatro conceptos relacionados con la teoría de Pareto a problemas de optimización multiobjetivo donde algunos de los objetivos son cuantificados como intervalos.

Supongamos ahora que tenemos m objetivos $f_i(\mathbf{x})$, con $i \in M = M_P \cup M_I = \{1, \dots, r, r+1, \dots, m\}$, que, sin pérdida de generalidad, tratamos de minimizar. Los primeros r objetivos ($i \in M_P$) corresponden a funciones reales $f_i(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, r$, cuantificados como puntos, mientras que los

últimos $m - r$ objetivos ($i \in M_I$) corresponden a objetivos cuantificados como intervalos, $(\inf f_i(\mathbf{x}), \sup f_i(\mathbf{x}))$, $i = r + 1, \dots, m$.

La extensión de los últimos cuatro conceptos es la siguiente.

Definición 2. (Dominancia estricta de Pareto para objetivos en intervalos de valores)

1. *Dominancia estricta de Pareto. Una solución \mathbf{x} se dice que (Pareto) domina estrictamente a una solución \mathbf{y} , denotada como $\mathbf{x} \succ \mathbf{y}$, sii*

$$\begin{aligned} \forall i \in M_P : f_i(\mathbf{x}) \leq f_i(\mathbf{y}) \quad \text{y} \quad \forall i \in M_I : \sup f_i(\mathbf{x}) \leq \inf f_i(\mathbf{y}), \text{ y} \\ \exists j \in M_P : f_j(\mathbf{x}) < f_j(\mathbf{y}) \quad \text{o} \quad \exists j \in M_I : \sup f_j(\mathbf{x}) < \inf f_j(\mathbf{y}) \end{aligned}$$

2. *La solución óptima estricta de Pareto, el conjunto óptimo de Pareto estricto y el frente óptimo de Pareto estricto se enuncian como en la definición 1.*

Otra posible generalización de los cuatro conceptos debilita la anterior permitiendo cierto grado de solapamiento entre los intervalos. En esta propuesta, éste es el tipo de dominancia que nos interesa.

Definición 3. (Dominancia de Pareto de grado α para objetivos en intervalos de valores)

1. *Dominancia de Pareto de grado α ($\alpha \in [0, 1]$). Una solución \mathbf{x} se dice que (Pareto) domina con grado α ($\alpha \in [0, 1]$) a una solución \mathbf{y} , o \mathbf{x} α -domina \mathbf{y} para abreviar, denotado como $\mathbf{x} \succ_\alpha \mathbf{y}$, sii*

$$\begin{aligned} \forall i \in M_P : f_i(\mathbf{x}) \leq f_i(\mathbf{y}) \quad \text{y} \quad \forall i \in M_I : 1 - \frac{\sup f_i(\mathbf{x}) - \inf f_i(\mathbf{y})}{\sup f_i(\mathbf{x}) - \inf f_i(\mathbf{x})} \geq \alpha, \text{ y} \\ \exists j \in M_P : f_j(\mathbf{x}) < f_j(\mathbf{y}) \quad \text{o} \quad \exists j \in M_I : 1 - \frac{\sup f_j(\mathbf{x}) - \inf f_j(\mathbf{y})}{\sup f_j(\mathbf{x}) - \inf f_j(\mathbf{x})} > \alpha \end{aligned}$$

2. *Solución óptima de Pareto de grado α . Una solución \mathbf{x} se dice que es óptima de Pareto de grado α sii $\nexists \mathbf{y}$ con $\mathbf{y} \succ_\alpha \mathbf{x}$.*
3. *Conjunto óptimo de Pareto de grado α . Es el conjunto \mathcal{P}_S^α de todas las soluciones óptimas de Pareto de grado α : $\mathcal{P}_S^\alpha = \{\mathbf{x} | \nexists \mathbf{y} \text{ con } \mathbf{y} \succ_\alpha \mathbf{x}\}$.*
4. *Frente óptimo de Pareto de grado α . Es el conjunto \mathcal{P}_F^α de todos los valores de la función objetivo correspondientes a las soluciones en \mathcal{P}_S^α :*

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_F^\alpha = \{(f_1(\mathbf{x}), \dots, f_r(\mathbf{x}), (\inf f_{r+1}(\mathbf{x}), \sup f_{r+1}(\mathbf{x})), \dots, \\ (\inf f_m(\mathbf{x}), \sup f_m(\mathbf{x})) | \mathbf{x} \in \mathcal{P}_S^\alpha\}. \end{aligned}$$

Nótese que si $\sup f_i(\mathbf{x}) \leq \inf f_i(\mathbf{y})$, entonces el cociente no es positivo y el resultado es mayor o igual a 1. En este caso, ponemos $\alpha = 1$. Por lo tanto, la definición 2 está incluida en la definición 3 más general cuando $\alpha = 1$. También, nótese que

$$1 - \frac{\sup f_i(\mathbf{x}) - \inf f_i(\mathbf{y})}{\sup f_i(\mathbf{x}) - \inf f_i(\mathbf{x})} \geq \alpha \Leftrightarrow \frac{\inf f_i(\mathbf{y}) - \inf f_i(\mathbf{x})}{\sup f_i(\mathbf{x}) - \inf f_i(\mathbf{x})} \geq \alpha$$

Una idea intuitiva del significado de los diferentes valores de α , utilizando este último cociente, se muestra en la figura 6.1. Una definición más general sería permitir diferentes valores de α para diferentes objetivos cuantificados en intervalos de valores.

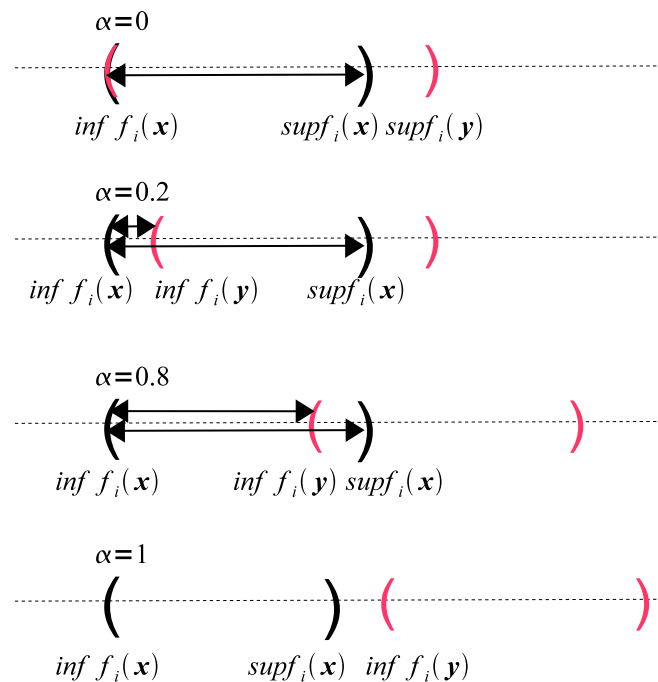


Figura 6.1: Diferentes situaciones de α -dominancia

6.5. Resultados teóricos sobre el efecto del grado de dominancia α y nivel de confianza γ

Volviendo al campo de la clasificación supervisada, supongamos que tenemos m métricas de evaluación del rendimiento $f_1, \dots, f_r, f_{r+1}, \dots, f_m$, donde las primeras r son un valor real mientras el resto, f_{r+1}, \dots, f_m , se

dan como intervalos: $(\inf f_i(\mathbf{x}), \sup f_i(\mathbf{x}))$, $i = r + 1, \dots, m$. Aquí los puntos \mathbf{x} denotarán los posibles modelos de clasificación entre los que se elegirá uno óptimo, en el sentido de Pareto. Esos intervalos pueden ser el resultado de un intervalo de confianza para la métrica que queremos estimar. Así, si la métrica $f_i(\mathbf{x})$ se estima con base en una validación cruzada en k rodajas, primero ejecutamos k experimentos obteniendo $f_i^{(1)}(\mathbf{x}), \dots, f_i^{(k)}(\mathbf{x})$. Luego, el intervalo de confianza para el valor esperado $f_i(\mathbf{x})$ con un nivel de confianza de $(1 - \delta)$ se aproxima por

$$(\inf f_{i,\delta}(\mathbf{x}), \sup f_{i,\delta}(\mathbf{x})) = (\bar{f}_i(\mathbf{x}) - z_{\frac{\delta}{2}} \frac{S_i(\mathbf{x})}{\sqrt{k}}, \bar{f}_i(\mathbf{x}) + z_{\frac{\delta}{2}} \frac{S_i(\mathbf{x})}{\sqrt{k}}) \quad (6.1)$$

donde $\bar{f}_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k f_i^{(j)}(\mathbf{x})$ es la media muestral, $S_i^2(\mathbf{x})$ es la cuasivarianza muestral, y $z_{\frac{\delta}{2}}$ verifica que $P(Z > z_{\frac{\delta}{2}}) = \frac{\delta}{2}$, con $Z \sim N(0, 1)$. Aunque vamos a utilizar aquí la muestra procedente de una validación cruzada en k rodajas, los resultados seguirán siendo válidos para muestras procedentes de otros métodos de estimación como e.g. bootstrap.

Para simplificar, denotamos $\gamma = 1 - \delta$. En (6.1), tendríamos $(\inf f_{i,\gamma}(\mathbf{x}), \sup f_{i,\gamma}(\mathbf{x}))$ y $z_{\frac{1-\gamma}{2}}$. Ahora extendemos la notación de dominancia $\mathbf{x} \succ_{\alpha} \mathbf{y}$ para incluir el nivel de confianza γ como $\mathbf{x} \succ_{\alpha,\gamma} \mathbf{y}$. Además, agregamos γ al conjunto óptimo de Pareto correspondiente, $\mathcal{P}_S^{\alpha,\gamma}$, y al frente óptimo de Pareto $\mathcal{P}_F^{\alpha,\gamma}$.

Primero analizamos el efecto de cambiar el valor de γ , para un α fijo, con respecto a la relación de dominancia y al conjunto óptimo de Pareto. En segundo lugar, realizamos un análisis similar manteniendo un valor fijo para γ y cambiando α .

Proposición 1. *Para cualquier solución \mathbf{x} e \mathbf{y} tal que $\mathbf{x} \succ_{\alpha,\gamma_1} \mathbf{y}$, entonces $\mathbf{x} \succ_{\alpha,\gamma_2} \mathbf{y}$ para cualquier $\gamma_2 < \gamma_1$ siempre que $\bar{f}_i(x) < \bar{f}_i(y)$, para todo $i \in M_I$. Por consiguiente, $\mathcal{P}_S^{\alpha,\gamma_2} \subset \mathcal{P}_S^{\alpha,\gamma_1}$.*

Demostración. Comenzamos con el caso especial de $\alpha = 1$. Puesto que suponemos que $\mathbf{x} \succ_{\alpha=1,\gamma_1} \mathbf{y}$ (véase la definición 2), esto implica que $\exists i \in M_I$ tal que

$$\sup f_{i,\gamma_1}(\mathbf{x}) < \inf f_{i,\gamma_1}(\mathbf{y}).$$

Como $z_{\frac{1-\gamma_1}{2}} > z_{\frac{1-\gamma_2}{2}}$, entonces $\inf f_{i,\gamma_1}(\mathbf{y}) < \inf f_{i,\gamma_2}(\mathbf{y})$. De igual manera, $\sup f_{i,\gamma_2}(\mathbf{x}) < \sup f_{i,\gamma_1}(\mathbf{x})$. Por lo tanto,

$$\sup f_{i,\gamma_2}(\mathbf{x}) < \sup f_{i,\gamma_1}(\mathbf{x}) < \inf f_{i,\gamma_1}(\mathbf{y}) < \inf f_{i,\gamma_2}(\mathbf{y}).$$

Esto significa que $\mathbf{x} \succ_{\alpha=1, \gamma_2} \mathbf{y}$.

Para el caso donde $\alpha < 1$, como suponemos que $\mathbf{x} \succ_{\alpha, \gamma_1} \mathbf{y}$ (véase la definición 3), se tiene que

$$\frac{\sup f_{i, \gamma_1}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma_1}(\mathbf{y})}{\sup f_{i, \gamma_1}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma_1}(\mathbf{x})} \leq 1 - \alpha$$

Usando (6.1), este cociente es

$$\frac{\bar{f}_i(\mathbf{x}) + z_{\frac{1-\gamma_1}{2}} \frac{S_i(\mathbf{x})}{\sqrt{k}} - \bar{f}_i(\mathbf{y}) + z_{\frac{1-\gamma_1}{2}} \frac{S_i(\mathbf{y})}{\sqrt{k}}}{2z_{\frac{1-\gamma_1}{2}} \frac{S_i(\mathbf{x})}{\sqrt{k}}} = \frac{\bar{f}_i(\mathbf{x}) - \bar{f}_i(\mathbf{y})}{2z_{\frac{1-\gamma_1}{2}} \frac{S_i(\mathbf{x})}{\sqrt{k}}} + \frac{\frac{S_i(\mathbf{x}) + S_i(\mathbf{y})}{\sqrt{k}}}{2 \frac{S_i(\mathbf{x})}{\sqrt{k}}} \quad (6.2)$$

De igual manera, para γ_2 tenemos

$$\frac{\sup f_{i, \gamma_2}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma_2}(\mathbf{y})}{\sup f_{i, \gamma_2}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma_2}(\mathbf{x})} = \frac{\bar{f}_i(\mathbf{x}) - \bar{f}_i(\mathbf{y})}{2z_{\frac{1-\gamma_2}{2}} \frac{S_i(\mathbf{x})}{\sqrt{k}}} + \frac{\frac{S_i(\mathbf{x}) + S_i(\mathbf{y})}{\sqrt{k}}}{2 \frac{S_i(\mathbf{x})}{\sqrt{k}}} \quad (6.3)$$

El segundo sumando es el mismo en ambos casos (6.2) y (6.3). El primer sumando tiene un numerador negativo y para el denominador, sabemos que $z_{\frac{1-\gamma_1}{2}} > z_{\frac{1-\gamma_2}{2}}$. Por lo tanto, el primer sumando en (6.2) es mayor que el primer sumando en (6.3). Por lo tanto,

$$\frac{\sup f_{i, \gamma_2}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma_2}(\mathbf{y})}{\sup f_{i, \gamma_2}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma_2}(\mathbf{x})} < \frac{\sup f_{i, \gamma_1}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma_1}(\mathbf{y})}{\sup f_{i, \gamma_1}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma_1}(\mathbf{x})} \leq 1 - \alpha$$

Esto significa que $\mathbf{x} \succ_{\alpha, \gamma_2} \mathbf{y}$.

Por último, para demostrar que $\mathcal{P}_S^{\alpha, \gamma_2} \subset \mathcal{P}_S^{\alpha, \gamma_1}$, supongamos que $\mathbf{z} \in \mathcal{P}_S^{\alpha, \gamma_2}$ y $\mathbf{z} \notin \mathcal{P}_S^{\alpha, \gamma_1}$. Entonces, existe \mathbf{w} tal que $\mathbf{w} \succ_{\alpha, \gamma_1} \mathbf{z}$. Pero hemos demostrado que esto implica que $\mathbf{w} \succ_{\alpha, \gamma_2} \mathbf{z}$, que a su vez significa que $\mathbf{z} \notin \mathcal{P}_S^{\alpha, \gamma_2}$, lo que contradice la hipótesis. ■

Proposición 2. Para cualquier solución \mathbf{x} e \mathbf{y} tal que $\mathbf{x} \succ_{\alpha_1, \gamma} \mathbf{y}$, entonces $\mathbf{x} \succ_{\alpha_2, \gamma} \mathbf{y}$ para cualquier $\alpha_2 < \alpha_1$. Por consiguiente, $\mathcal{P}_S^{\alpha_2, \gamma} \subset \mathcal{P}_S^{\alpha_1, \gamma}$.

Demostración. Es directa, ya que se tiene que

$$\frac{\sup f_{i, \gamma}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma}(\mathbf{y})}{\sup f_{i, \gamma}(\mathbf{x}) - \inf f_{i, \gamma}(\mathbf{x})} \leq 1 - \alpha_1 < 1 - \alpha_2.$$

■

6.6. Aplicación a la predicción de Ra

En la solución al problema que hemos estado tratando a lo largo de esta memoria, la predicción de la calidad superficial en MAV, se ha obtenido un modelo de clasificación supervisada. Véase el modelo naïve Bayes de la sección 3.3.4, el modelo TAN de las secciones 3.3.5 y 4.3, y el modelo de red neuronal de la sección 4.2.3. Tratamos ahora de maximizar la sensibilidad y especificidad de los mejores modelos, siendo necesario usar la propuesta de optimización multiobjetivo en intervalos planteada en la sección 6.4.

Definición 4. *Definición de α -dominancia para un caso de maximización.*

Como la teoría anterior se formuló para el caso de minimización, enunciamos aquí la equivalente para maximización, que es la que nos interesa en esta aplicación.

En un problema donde los objetivos se han de maximizar, decimos que una solución \mathbf{x} domina a otra solución \mathbf{y} con grado α , ($\alpha \in [0, 1]$), o \mathbf{x} α -domina a \mathbf{y} para abreviar, denotado como $\mathbf{x} \succ_{\alpha} \mathbf{y}$, si

$$\begin{aligned} \forall i \in M_P : f_i(\mathbf{x}) \geq f_i(\mathbf{y}) \quad y \quad \forall i \in M_I : 1 - \frac{\sup f_i(\mathbf{y}) - \inf f_i(\mathbf{x})}{\sup f_i(\mathbf{y}) - \inf f_i(\mathbf{y})} \geq \alpha, \quad y \\ \exists j \in M_P : f_j(\mathbf{x}) > f_j(\mathbf{y}) \quad o \quad \exists j \in M_I : 1 - \frac{\sup f_j(\mathbf{y}) - \inf f_j(\mathbf{x})}{\sup f_j(\mathbf{y}) - \inf f_j(\mathbf{y})} > \alpha \end{aligned}$$

6.6.1. Efecto de α -dominancia en la predicción de la rugosidad superficial

Se partió del conjunto de datos experimentales obtenidos de los diseños de experimentos expuestos en las secciones 4.2.2 y 4.2.3 identificando solamente 2 clases. Los datos con etiquetas de clase *Mirror* y *Polished* se agruparon en una sola (el valor de clase a predecir), de igual forma que *Ground* y *Smooth*. Con estos datos se hizo un entrenamiento usando el algoritmo naïve Bayes selectivo [Langley y Sage, 1994] consiguiendo un conjunto de 128 modelos, cada uno con un valor de sensibilidad y especificidad distinto. Los 128 corresponden a 2^7 posibles modelos en los que las 7 variables predictoras pueden o no formar parte del modelo. De igual manera se hizo un entrenamiento con el algoritmo TAN obteniendo en este caso los 336 modelos posibles (48 posibles árboles no dirigidos x 7 variables). Además, se han hecho pruebas sobre los datos combinados de ambos algoritmos, es decir, con un conjunto de 464 modelos.

Se desarrolló un programa en Matlab aplicando la idea de optimización multiobjetivo en intervalos expuesta previamente. Se hicieron diferentes pruebas con 10 valores de α entre 0.10 y 1.00 con cambios de 0.10 en 0.10 y 4 niveles de confianza $\gamma = 0.90, 0.93, 0.95$ y 0.98 . Los objetivos definidos son los valores de sensibilidad y especificidad resultantes de la validación cruzada de 10-rodajas.

Tabla 6.2: Resultados de la dominancia de Pareto de grado α e intervalo de confianza con nivel γ con naïve Bayes, donde ND= No Dominados y D= Dominados

$\alpha \backslash \gamma$		0.90	0.93	0.95	0.98
0.10	ND	12	12	12	13
	D	116	116	116	115
0.20	ND	13	14	14	15
	D	115	114	114	113
0.30	ND	16	17	18	18
	D	112	111	110	110
0.40	ND	18	18	20	20
	D	110	110	108	108
0.50	ND	20	22	22	23
	D	108	106	106	105
0.60	ND	22	23	23	23
	D	106	105	105	105
0.70	ND	23	23	23	24
	D	105	105	105	104
0.80	ND	23	23	25	26
	D	105	105	103	102
0.90	ND	23	24	25	26
	D	105	104	103	102
1.00	ND	24	25	25	28
	D	104	103	103	100

En los resultados que muestra la tabla 6.2 se puede ver cómo se cumple la proposición 2. Es decir, cuando $\alpha_2 < \alpha_1$ el conjunto óptimo de Pareto del primero está incluido en el segundo. En nuestro ejemplo para $\alpha=1.10$ hay 12 (ND) elementos en el conjunto óptimo de Pareto si $\gamma \neq 0.98$, mientras que para $\alpha=0.20$ con el mismo valor de γ se conservan los elementos del conjunto óptimo de Pareto inicial, incrementando en algunos casos en uno o

más elementos. Esta tendencia se mantiene con los resultados del algoritmo TAN, véase la tabla 6.3, y cuando se juntan ambos algoritmos, véase la tabla 6.4.

Tabla 6.3: Resultados de la dominancia de Pareto de grado α e intervalo de confianza con nivel γ con todos los modelos TAN, donde ND= No Dominados y D= Dominados

$\alpha \backslash \gamma$		0.90	0.93	0.95	0.98
0.10	ND	10	10	10	10
	D	326	326	326	326
0.20	ND	11	11	11	12
	D	325	325	325	324
0.30	ND	11	12	12	12
	D	325	324	324	324
0.40	ND	12	12	12	12
	D	324	324	324	324
0.50	ND	12	12	12	12
	D	324	324	324	324
0.60	ND	12	12	12	12
	D	324	324	324	324
0.70	ND	12	12	12	13
	D	324	324	324	323
0.80	ND	12	12	12	13
	D	324	324	324	323
0.90	ND	12	12	12	14
	D	324	324	324	322
1.00	ND	12	12	12	15
	D	324	324	324	321

Tabla 6.4: Resultados de la dominancia de Pareto de grado α e intervalo de confianza con nivel γ con los algoritmos naïve Bayes y TAN juntos, donde ND= No Dominados y D= Dominados

$\alpha \backslash \gamma$		0.90	0.93	0.95	0.98
0.10	ND	11	11	11	11
	D	453	453	453	453
0.20	ND	12	12	12	13
	D	452	452	452	451
0.30	ND	12	13	13	13
	D	452	451	451	451
0.40	ND	14	14	14	14
	D	450	450	450	450
0.50	ND	14	14	14	14
	D	450	450	450	450
0.60	ND	14	15	15	15
	D	450	449	449	449
0.70	ND	15	15	15	16
	D	449	449	449	448
0.80	ND	15	15	15	16
	D	449	449	449	448
0.90	ND	15	15	17	17
	D	449	449	447	447
1.00	ND	15	15	18	18
	D	449	449	446	446

De las tablas 6.2, 6.3 y 6.4 también se observa cómo aplicando el concepto de α -dominancia, a medida que disminuye el valor de γ se decrementa la cantidad de no-dominados, es decir, la cantidad de modelos que conforman el conjunto óptimo de Pareto (proposición 1).

En las figuras 6.2 a 6.7 se aprecia más claramente la diferencia en la composición del frente de Pareto para $\alpha=0.1, 0.9, 1.0$ y $\gamma=0.9$ y el frente de Pareto con $\alpha=0.1, 0.9, 1.0$ y $\gamma=0.98$ para el modelo naïve Bayes. Es de destacar que la cantidad de modelos que conforma el frente de Pareto con $\alpha=0.1$ se duplica cuando $\alpha=1.0$ manteniendo el mismo nivel de confianza γ . En contraposición, cuando disminuye el nivel de confianza de $\gamma=0.98$ a $\gamma=0.90$ se reduce la cantidad de modelos del frente de Pareto, aunque de forma menos acusada.

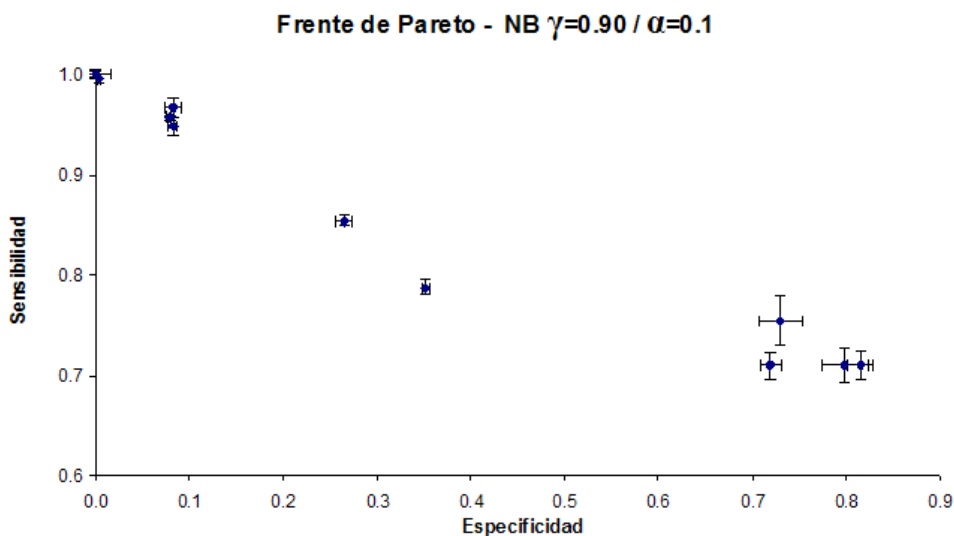


Figura 6.2: Frente de Pareto con el algoritmo NB con $\gamma = 0.90$ y $\alpha = 0.10$

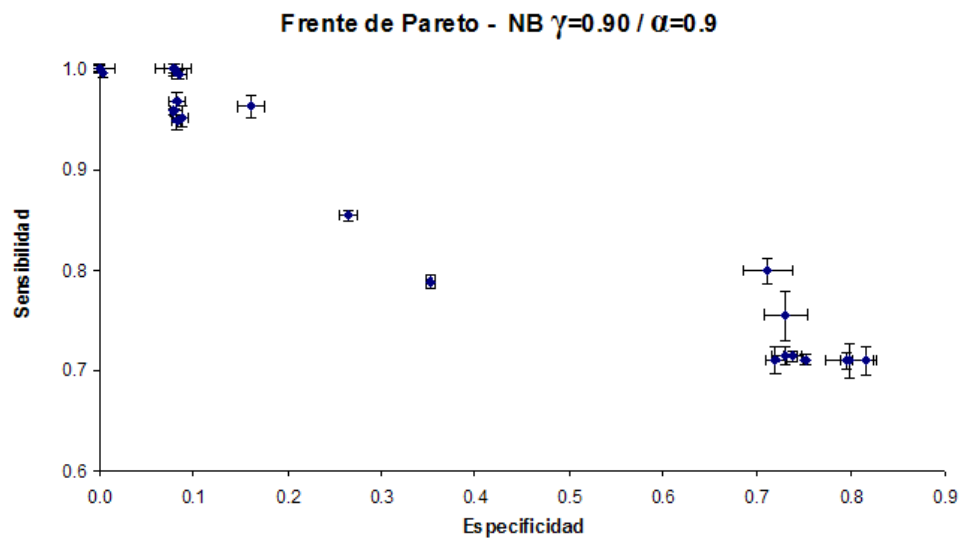


Figura 6.3: Frente de Pareto con el algoritmo NB con $\gamma = 0.90$ y $\alpha = 0.90$

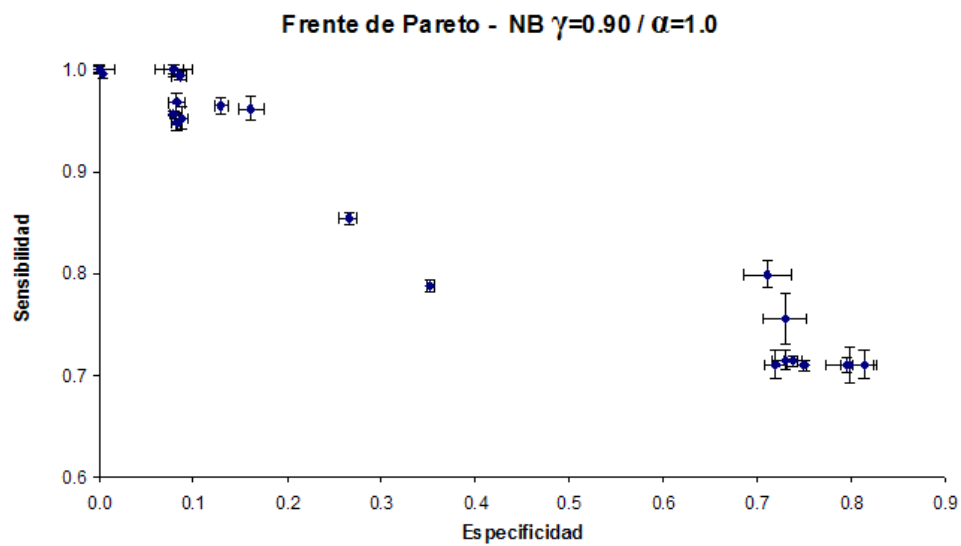


Figura 6.4: Frente de Pareto con el algoritmo NB con $\gamma = 0.90$ y $\alpha = 1.0$

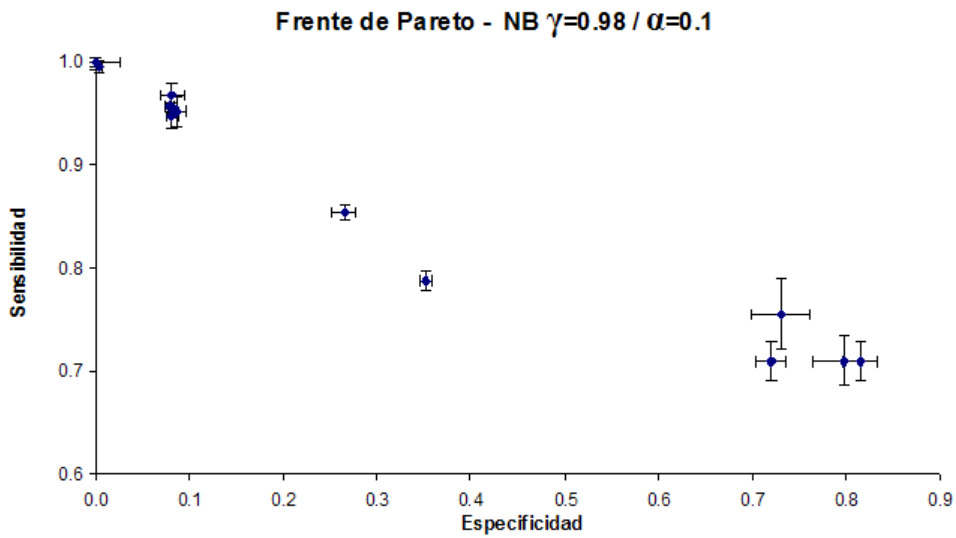


Figura 6.5: Frente de Pareto con el algoritmo NB con $\gamma = 0.98$ y $\alpha = 0.10$

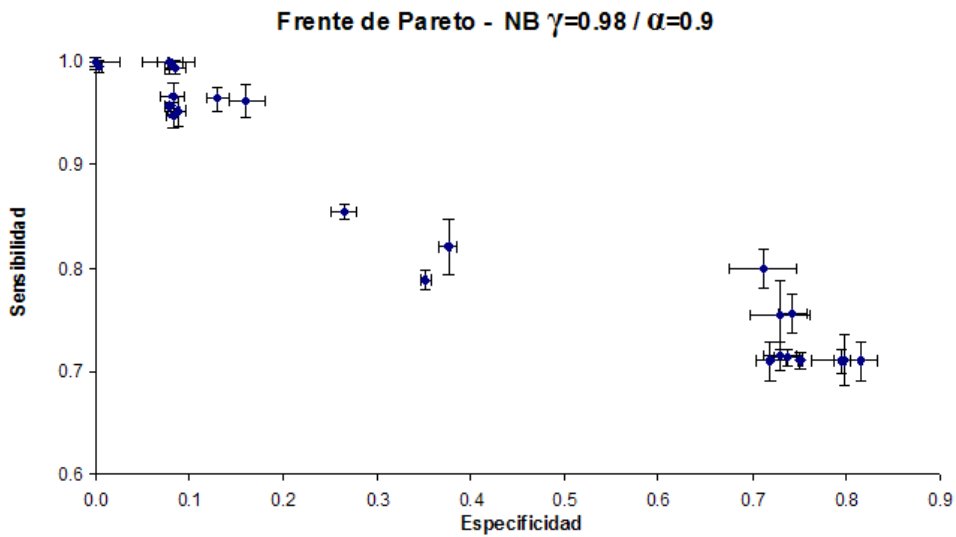


Figura 6.6: Frente de Pareto con el algoritmo NB con $\gamma = 0.98$ y $\alpha = 0.90$

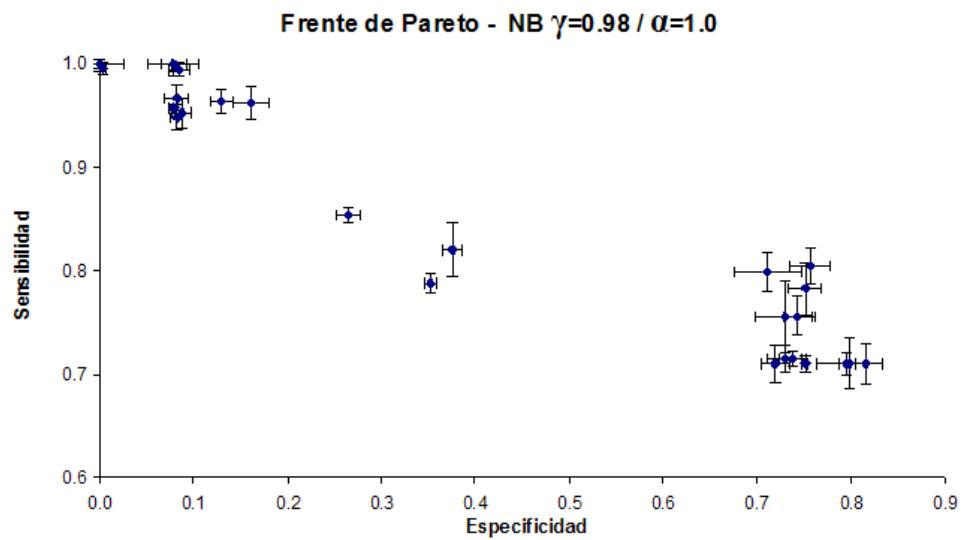


Figura 6.7: Frente de Pareto con el algoritmo NB con $\gamma = 0.98$ y $\alpha = 1.0$

Similar tendencia se ve en las gráficas obtenidas con el algoritmo TAN, figuras 6.8 a 6.13, y en las gráficas donde se combinaron los resultados de los algoritmo NB y TAN, figuras 6.14 a 6.19.

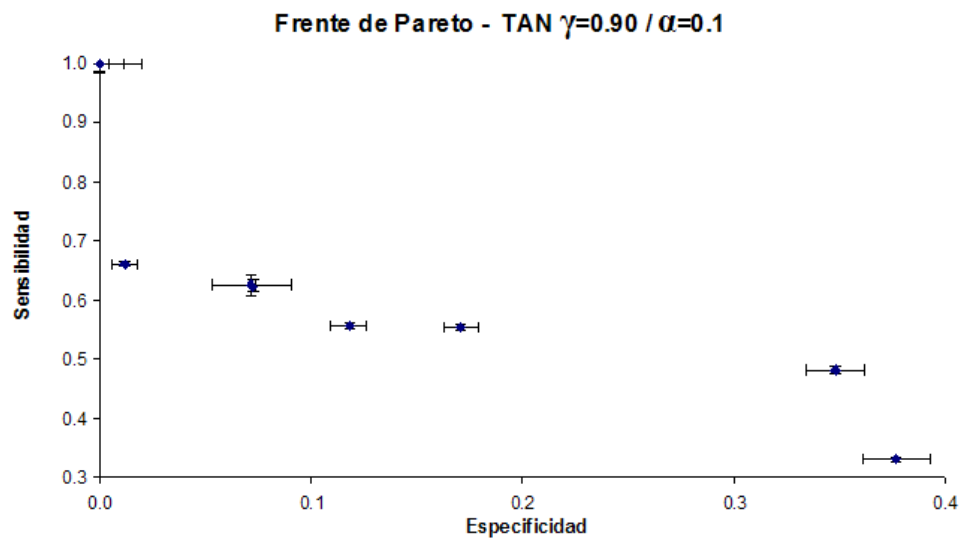


Figura 6.8: Frente de Pareto con el algoritmo TAN con $\gamma = 0.90$ y $\alpha = 0.10$

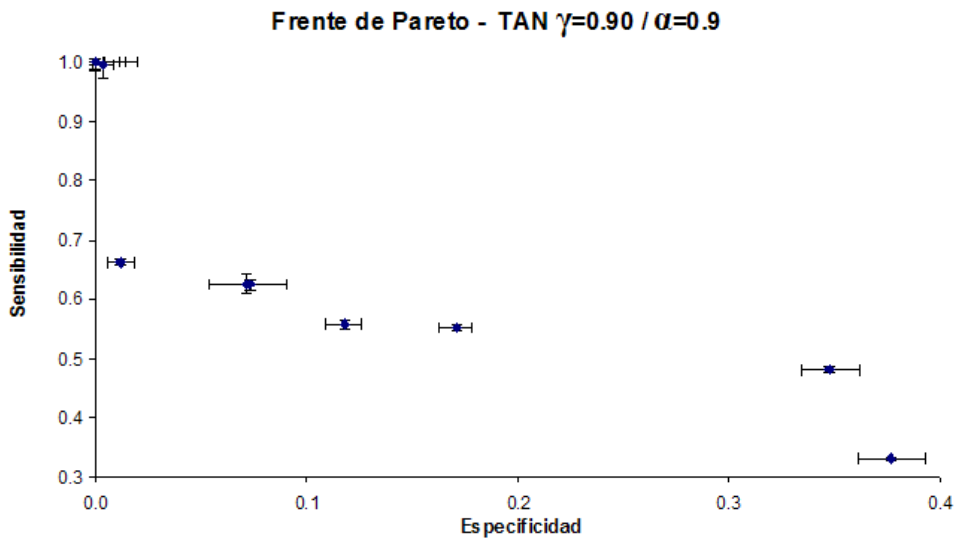


Figura 6.9: Frente de Pareto con el algoritmo TAN con $\gamma = 0.90$ y $\alpha = 0.90$

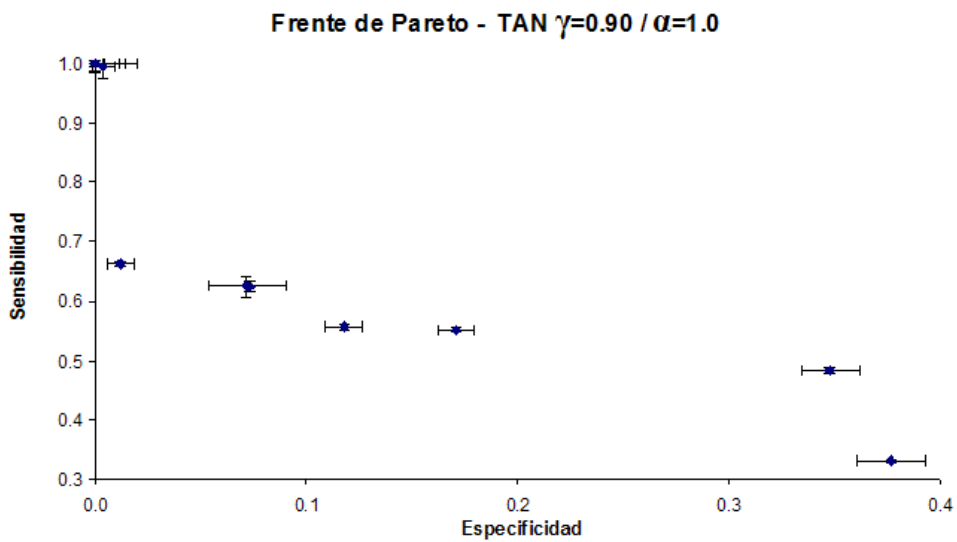


Figura 6.10: Frente de Pareto con el algoritmo TAN con $\gamma = 0.90$ y $\alpha = 1.0$

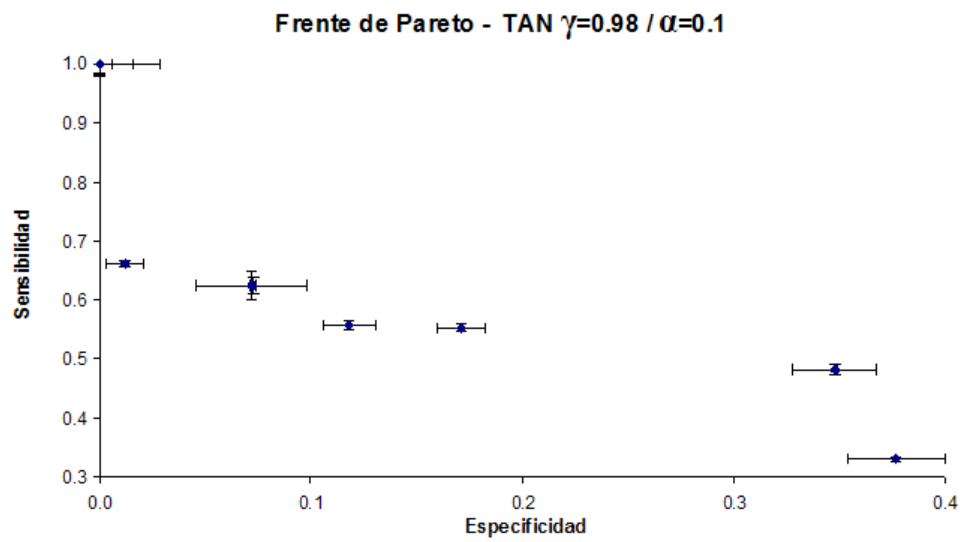


Figura 6.11: Frente de Pareto con el algoritmo TAN con $\gamma = 0.98$ y $\alpha = 0.10$

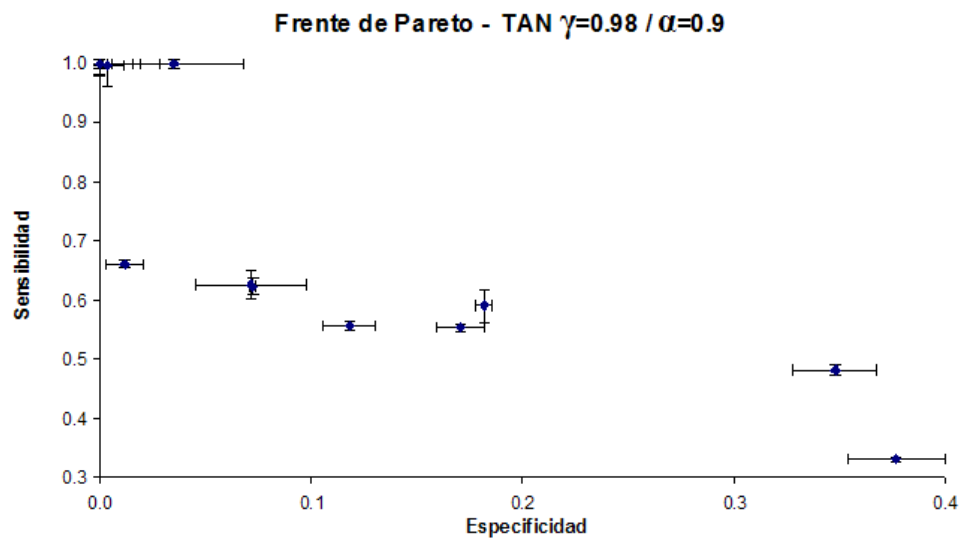


Figura 6.12: Frente de Pareto con el algoritmo TAN con $\gamma = 0.98$ y $\alpha = 0.90$

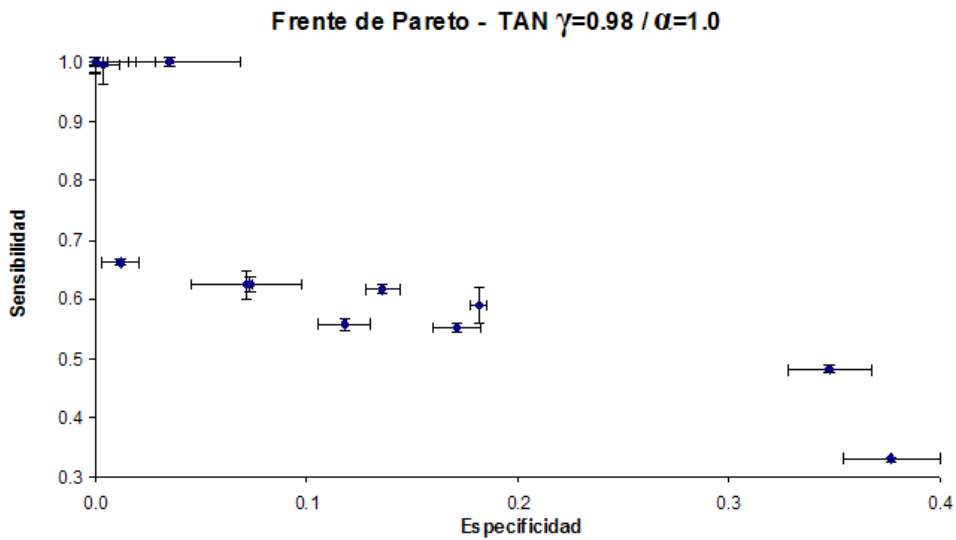


Figura 6.13: Frente de Pareto con el algoritmo TAN con $\gamma = 0.98$ y $\alpha = 1.0$

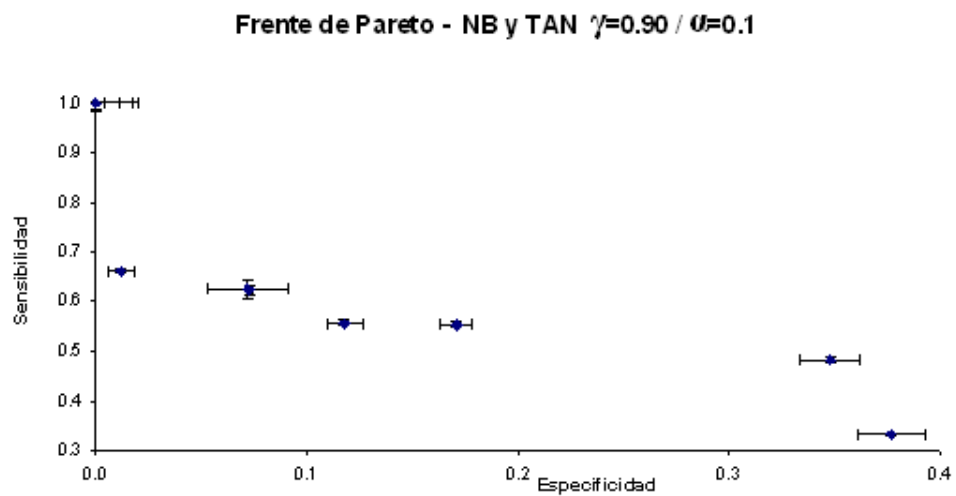


Figura 6.14: Frente de Pareto combinando los resultados de los algoritmos NB y TAN con $\gamma = 0.90$ y $\alpha = 0.10$

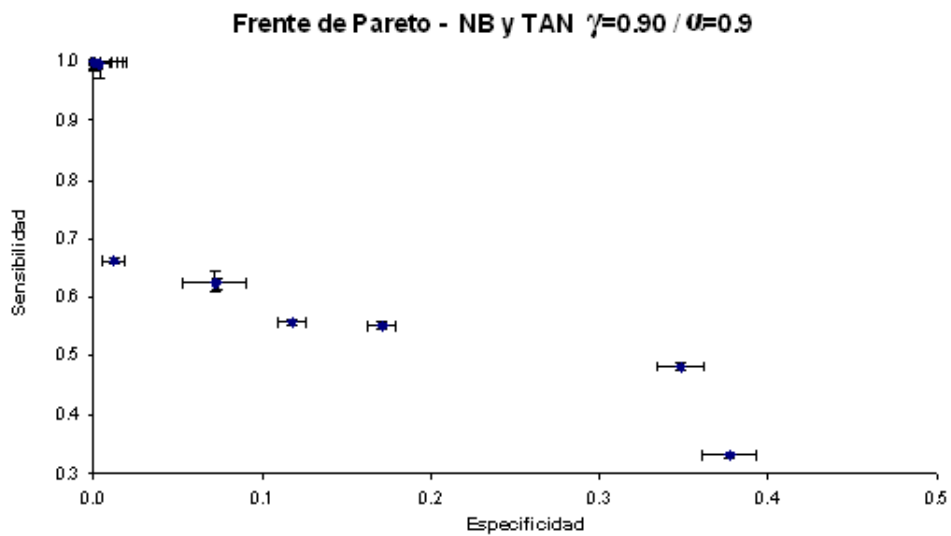


Figura 6.15: Frente de Pareto combinando los resultados de los algoritmos NB y TAN con $\gamma = 0.90$ y $\alpha = 0.90$

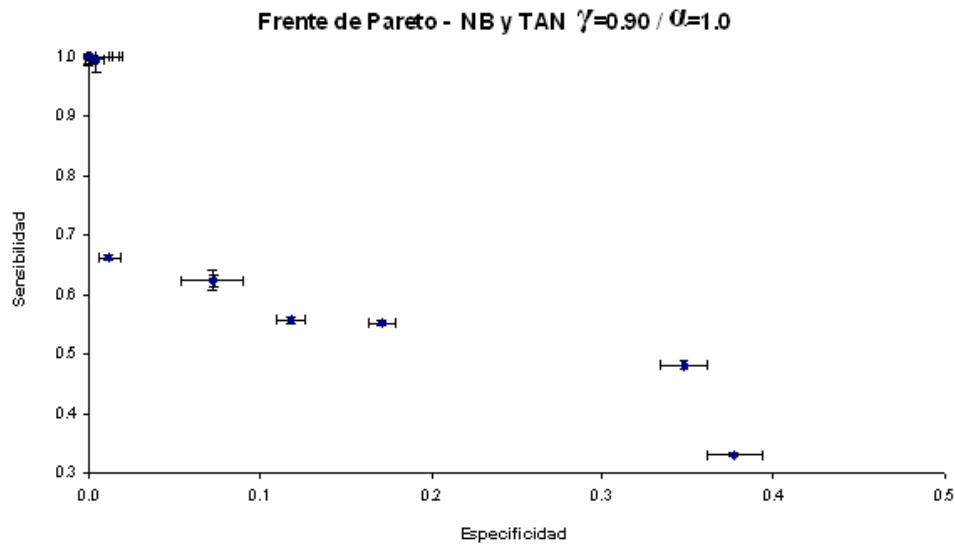


Figura 6.16: Frente de Pareto combinando los resultados de los algoritmos NB y TAN con $\gamma = 0.90$ y $\alpha = 1.0$

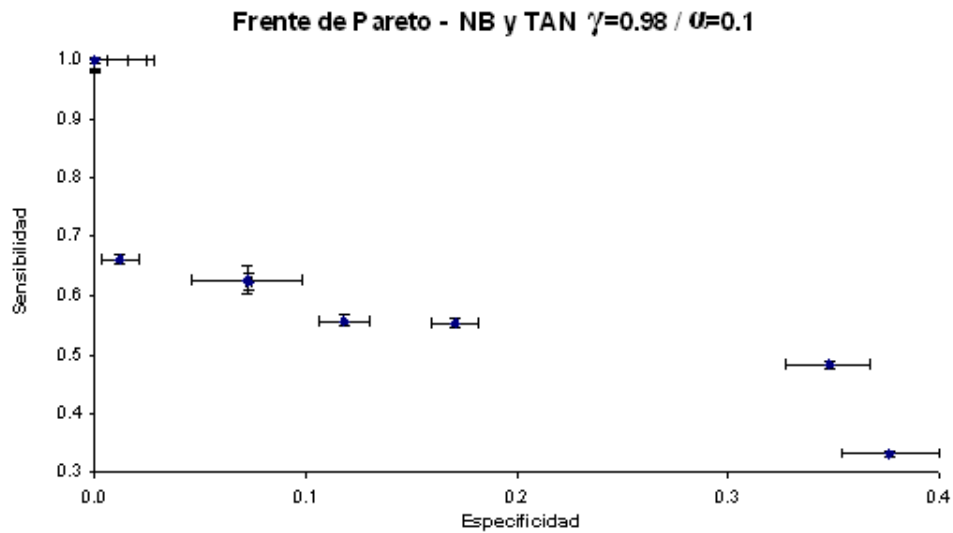


Figura 6.17: Frente de Pareto combinando los resultados de los algoritmos NB y TAN con $\gamma = 0.98$ y $\alpha = 0.10$

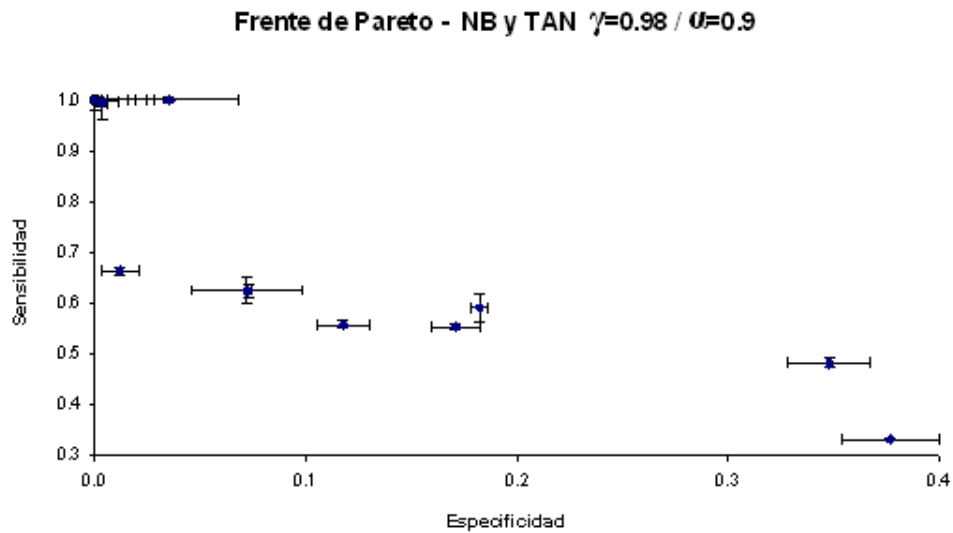


Figura 6.18: Frente de Pareto combinando los resultados de los algoritmos NB y TAN con $\gamma = 0.98$ y $\alpha = 0.90$

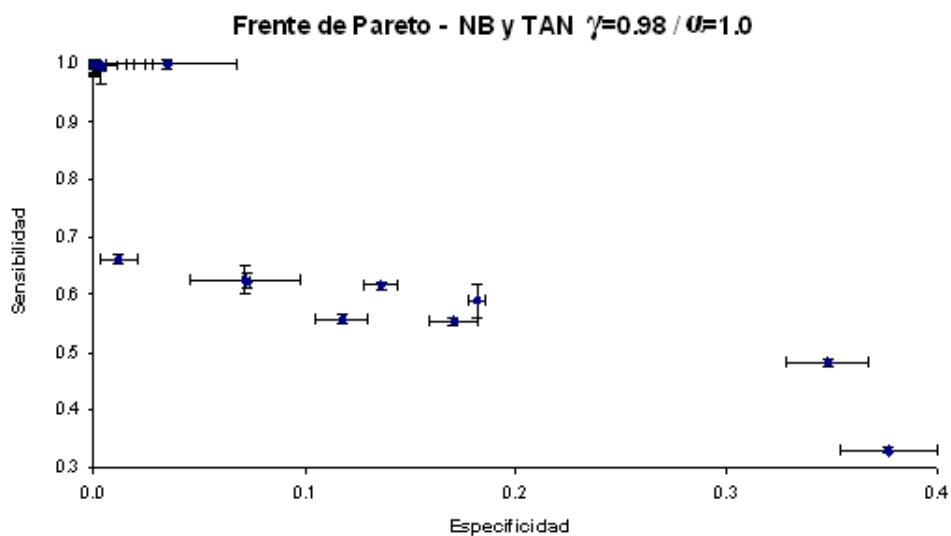


Figura 6.19: Frente de Pareto combinando los resultados de los algoritmos NB y TAN con $\gamma = 0.98$ y $\alpha = 1.0$

En la tabla 6.5 se muestra un ejemplo más detallado de la proposición 1 usando los resultados del algoritmo TAN con $\alpha = 1$ y variando los valores del nivel de confianza γ . Es decir, de los modelos de la última fila de la tabla 6.2. En lugar de especificar el número total de modelos detallamos qué modelos son (su identificador). Se observa cómo cambian muy poco los modelos no dominados aunque se cambie la confianza. La cantidad de no dominados aumenta cuando $\gamma = 0.98$. Los números en negrita representan los identificadores de los modelos en $\mathcal{P}_S^{\alpha,\gamma}$ y los números marcados en rojo representan los nuevos modelos que entran al $\mathcal{P}_S^{\alpha=1,\gamma}$ al aumentar el nivel de confianza γ .

Tabla 6.5: Ejemplo de la proposición 1: identificador de los modelos en el conjunto óptimo de Pareto variando γ y con $\alpha = 1$ con el algoritmo TAN. Los números marcados en rojo representan nuevos modelos que entran al $\mathcal{P}_S^{\alpha=1,\gamma}$ al cambiar el nivel de confianza

	$\alpha=1.00$			
	$\gamma=0.90$	$\gamma=0.93$	$\gamma=0.95$	$\gamma=0.98$
	3	3	3	3
	23	23	23	23
				29
	80	80	80	80
	86	86	86	86
	127	127	127	127
	130	130	130	130
				158
	159	159	159	159
	160	160	160	160
	189	189	189	189
				199
	257	257	257	257
	282	282	282	282
	285	285	285	285
Total	12	12	12	15

De las tablas 6.2, 6.3, 6.4 y con los resultados más detallados de la tabla 6.5 podemos concluir que en este caso estudio el nivel α de solapamiento de los intervalos es más influyente que el nivel γ de confianza.

Otra comprobación de la proposición 2 presentada en la sección 6.5 se muestra en las tablas 6.6, 6.7, 6.8 de los conjuntos óptimos de Pareto con los algoritmos NB, TAN y juntando ambos algoritmos con nivel de confianza $\gamma = 0.98$ y variando α . Es decir, los modelos de la última columna de las tablas 6.1, 6.2 y 6.3, respectivamente. En este último caso (uniendo los 2 algoritmos) merece la pena comentar el porcentaje de modelos que se conserva con cada algoritmo según su valor de α , véase la tabla 6.9. Por ejemplo en la primera columna de la tabla 6.8, cuando $\alpha=0.1$, el primer valor corresponden a modelos NB, es decir que de los 13 modelos reportados en la columna 1 de la tabla 6.5, al unir los dos clasificadores se conserva el 8 % de ellos, mientras que en el caso de los modelos TAN, de los 10 reportados en la columna 1 de la tabla 6.6 se conserva el 100 %. Estos promedios fueron calculados para todos los valores de α con $\gamma=0.98$. En promedio se conserva el 11 % de los modelos entrenados con el algoritmo naïve Bayes y el 98 % con el algoritmo TAN.

Tabla 6.6: Ejemplo de la proposición 2: modelos en el conjunto óptimo de Pareto con $\gamma=0.98$, variando α usando el algoritmo naïve Bayes. Los números marcados en rojo representan nuevos modelos que entran al $\mathcal{P}_S^{\alpha, \gamma=0.98}$ al cambiar el nivel de dominancia α

		$\gamma=0.98$								
	$\alpha=0.10$	0.20	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.00
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
			3	3	3	3	3	3	3	3
4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4
8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
14	14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
										20
23	23	23	23	23	23	23	23	23	23	23
26	26	26	26	26	26	26	26	26	26	26
		27	27	27	27	27	27	27	27	27
				28	28	28	28	28	28	28
29	29	29	29	29	29	29	29	29	29	29
								34	34	34
35	35	35	35	35	35	35	35	35	35	35
			38	38	38	38	38	38	38	38
					39	39	39	39	39	39
				44	44	44	44	44	44	44
53	53	53	53	53	53	53	53	53	53	53
					68	68	68	68	68	68
								69	69	69
										78
			80	80	80	80	80	80	80	80
87	87	87	87	87	87	87	87	87	87	87
93	93	93	93	93	93	93	93	93	93	93
					100	100	100	100	100	100
101	101	101	101	101	101	101	101	101	101	101
		103	103	103	103	103	103	103	103	103
							127	127	127	127
Total	13	15	18	20	23	23	24	26	26	28

Tabla 6.7: Ejemplo de la proposición 2: modelos en el conjunto óptimo de Pareto con $\gamma=0.98$, variando α usando el algoritmo TAN. Los números marcados en rojo representan nuevos modelos que entran al $\mathcal{P}_S^{\alpha, \gamma=0.98}$ al cambiar el nivel de dominancia α

		$\gamma=0.98$								
	$\alpha=0.10$	0.20	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.00
	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
	23	23	23	23	23	23	23	23	23	23
							29	29	29	29
	80	80	80	80	80	80	80	80	80	80
	86	86	86	86	86	86	86	86	86	86
	127	127	127	127	127	127	127	127	127	127
	130	130	130	130	130	130	130	130	130	130
									158	158
	159	159	159	159	159	159	159	159	159	159
	160	160	160	160	160	160	160	160	160	160
	189	189	189	189	189	189	189	189	189	189
										199
		257	257	257	257	257	257	257	257	257
	282	282	282	282	282	282	282	282	282	282
		285	285	285	285	285	285	285	285	285
Total	10	12	12	12	12	12	13	13	14	15

Tabla 6.8: Ejemplo de la proposición 2: modelos en el conjunto óptimo de Pareto con $\gamma=0.98$, variando α usando el algoritmo naïve Bayes y TAN juntos. Los números marcados en rojo representan nuevos modelos que entran al $\mathcal{P}_S^{\alpha, \gamma=0.98}$ al cambiar el nivel de dominancia α

		$\gamma=0.98$								
	$\alpha=0.10$	0.20	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.00
	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		26	26	26	26	26	26	26	26	26
						29	29	29	29	29
	131	131	131	131	131	131	131	131	131	131
	151	151	151	151	151	151	151	151	151	151
							157	157	157	157
	208	208	208	208	208	208	208	208	208	208
	214	214	214	214	214	214	214	214	214	214
	255	255	255	255	255	255	255	255	255	255
	258	258	258	258	258	258	258	258	258	258
									286	286
	287	287	287	287	287	287	287	287	287	287
	288	288	288	288	288	288	288	288	288	288
	317	317	317	317	317	317	317	317	317	317
										327
				385	385	385	385	385	385	385
	410	410	410	410	410	410	410	410	410	410
		413	413	413	413	413	413	413	413	413
Total	11	13	13	14	14	15	16	16	17	18

Tabla 6.9: Porcentaje de conservación de modelos según el algoritmo de aprendizaje

		$\gamma=0.98$									
Algoritmo \ α		0.10	0.20	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.00
naïve		8	13	11	10	9	13	12	11	11	11
Bayes (%)											
TAN (%)		100	92	92	100	100	100	100	100	100	100

6.6.2. Ejemplo de la elección de un modelo óptimo

Con un ejemplo práctico para explicar la selección de un modelo óptimo, tomemos el frente óptimo de Pareto obtenido con el algoritmo NB. Remitiéndonos a la tabla 6.6 vemos los conjuntos óptimos de Pareto para $\gamma=0.98$ y diferentes valores de α , es decir, $\mathcal{P}_S^{\alpha, \gamma=0.98}$. En la tabla 6.10 se detallan los datos que forman las figuras 6.20 y 6.21. En ellas se presentan los frentes óptimos de Pareto de los valores correspondientes a las soluciones $\mathcal{P}_S^{\alpha=0.1, \gamma=0.98}$ y $\mathcal{P}_S^{\alpha=1.0, \gamma=0.98}$ respectivamente, de donde se obtendrán los modelos que darán las recomendaciones que deberá adoptar el usuario.

Se han destacado con un círculo rojo los modelos (los números de modelo aparecen entre paréntesis) con valores de sensibilidad y especificidad mayores a 0.7. Observamos cómo con $\alpha=0.1$ se tienen 4 modelos posibles (4, 23, 35 y 87) de donde elegir, mientras que con $\alpha=1.0$ tenemos 12 posibilidades (3, 4, 20, 23, 34, 35, 38, 39, 78, 80, 87 y 103) donde los valores de sensibilidad y especificidad son mayores a 0.7.

Entre todos estos modelos supongamos que el usuario está satisfecho con el modelo 87, que ofrece una sensibilidad media del 81.5% y una especificidad media del 71%. El modelo se selecciona para todos los grados de α -dominancia y con una confianza alta ($\gamma=0.98$). Este modelo escoge las variables F_{XY} , fz , HB y $geom$ para la clasificación del Ra . Los valores de sus dos objetivos significa que entre los ejemplos de la clase Mirror-Polished, el 81.5% de ellos se espera que se clasifiquen como tales, mientras que el clasificador clasificaría correctamente el 71% de los ejemplos de la clase Ground-Smooth. Si al usuario le interesa únicamente la clasificación correcta de la clase Ground-Smooth, sería más apropiado escoger otro modelo como el 28, el 44 o el 100.

Una vez encontrado un buen modelo se pueden realizar las preguntas pertinentes para su interpretación, tal como se expuso en la sección 4.4.3.

Tabla 6.10: Datos para construir el gráfico del conjunto óptimo de Pareto con $\gamma=0.98$ y $\alpha=0.1$ y 1.0 usando el algoritmo naïve Bayes

$\alpha=0.1$			$\alpha=1.0$		
Modelo	Sensibilidad media	Especificidad media	Modelo	Sensibilidad media	Especificidad media
1	0.000	1.000	1	0.000	1.000
2	0.352	0.788	2	0.352	0.788
			3	0.751	0.710
4	0.720	0.710	4	0.720	0.710
8	0.087	0.952	8	0.087	0.952
14	0.082	0.948	14	0.082	0.948
			20	0.751	0.783
23	0.799	0.710	23	0.799	0.710
26	0.003	0.995	26	0.003	0.995
			27	0.085	0.994
			28	0.079	1.000
29	0.000	1.000	29	0.000	1.000
			34	0.743	0.756
35	0.730	0.755	35	0.730	0.755
			38	0.730	0.715
			39	0.738	0.714
			44	0.079	1.000
53	0.082	0.967	53	0.082	0.967
			68	0.161	0.962
			69	0.376	0.820
			78	0.757	0.805
			80	0.796	0.710
87	0.815	0.710	87	0.815	0.710
93	0.265	0.854	93	0.265	0.854
			100	0.079	1.000
101	0.079	0.957	101	0.079	0.957
			103	0.712	0.799
			127	0.130	0.964

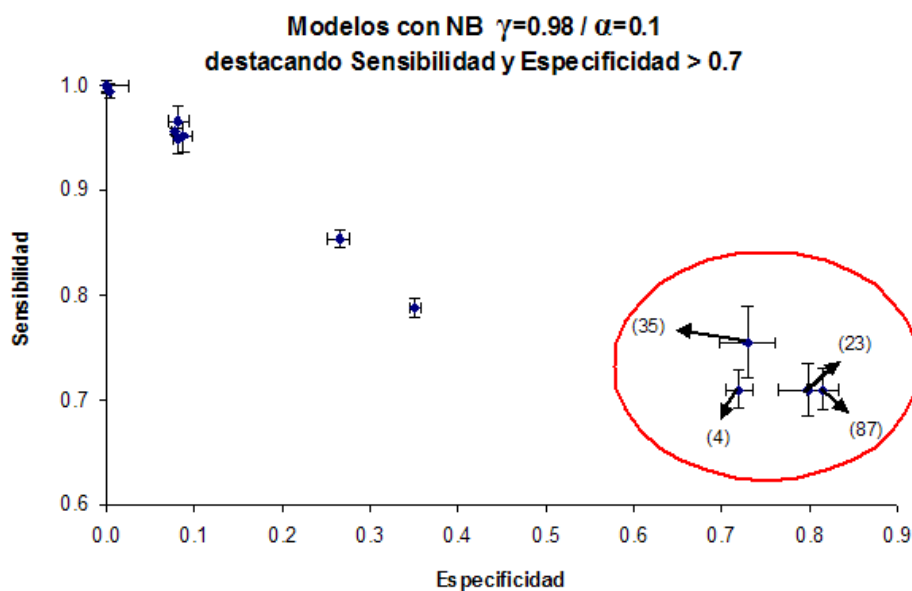


Figura 6.20: Modelos que conforman el frente de Pareto con los resultados del algoritmo NB con $\gamma=0.98$ y $\alpha=0.10$, destacando en un círculo rojo los que tienen sensibilidad y especificidad mayor a 0.70

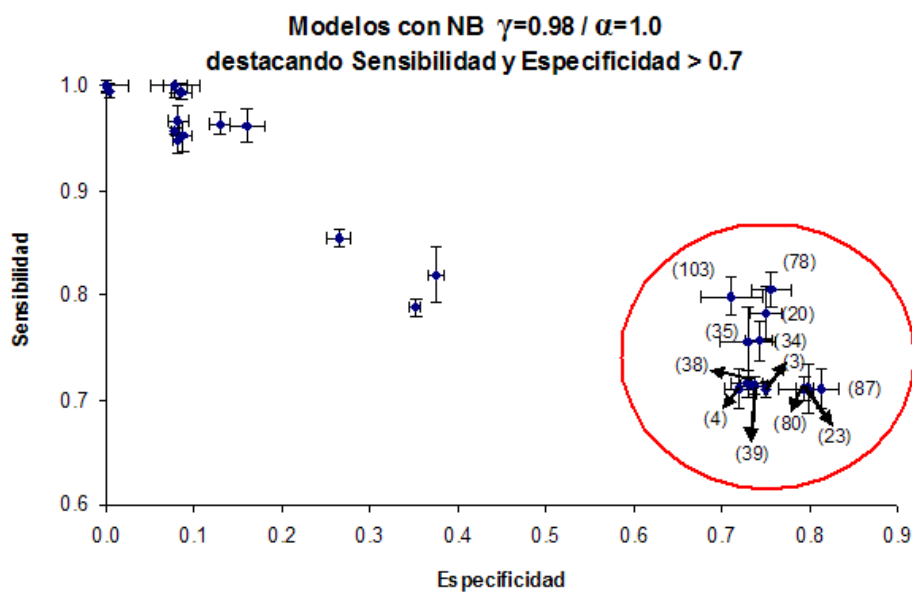


Figura 6.21: Modelos que conforman el frente de Pareto con los resultados del algoritmo NB con $\gamma=0.98$ y $\alpha=1.0$, destacando en un círculo rojo los que tienen sensibilidad y especificidad mayor a 0.70

6.7. Conclusiones del capítulo

Los problemas de optimización multiobjetivo son frecuentes en cualquier problema del mundo real, son inherente a los procesos de fabricación donde el ejemplo más típico está relacionado con la minimización del coste y la maximización de la producción. En muchos casos, especialmente en los vinculados al aprendizaje automático, concretamente a clasificación supervisada, es imposible cuantificar los objetivos como números reales. Por ejemplo cuando se requiere maximizar la sensibilidad y especificidad del clasificador inducido, donde se utilizan métodos de estimación honesta para estimar estos objetivos. Bajo esta circunstancia se obtendría un intervalo en lugar de un número real.

Se presenta una extensión de la teoría de Pareto aplicada a los objetivos dados en intervalos incluyendo la definición novedosa de dominancia de grado α y nivel de confianza γ en la optimización multiobjetivo.

Se confirman las proposiciones sobre dominancia de Pareto de grado α e intervalo de confianza γ presentadas en la sección 6.5.

Se presenta un ejemplo práctico para la selección de buenos modelos que maximicen la sensibilidad y especificidad aplicados a la predicción de la rugosidad superficial Ra , donde se muestra la ventaja de tener varios clasificadores para la toma de decisiones y no restringirse a un único modelo.

De las tablas 6.2, 6.3, 6.4 y con los resultados más detallados de la tabla 6.5 podemos concluir que en este caso de estudio el nivel α de solapamiento de los intervalos es más influyente que el nivel γ de confianza.

Capítulo 7

CONCLUSIONS AND FUTURE WORK

To conclude this dissertation we present the main findings of this research and the possible lines of investigation that are open to continue this research in the future.

7.1. Conclusions

The main objective of this thesis was to develop a methodology for the “in-process” measurement of the surface finish in a high speed milling operation. We have used based methods on machine learning combining expert knowledge and physical knowledge of the process. Chapter 1, section 1.2.2, set out the specific research objectives. Below we present the main findings of our work in accordance with these goals:

1. We studied the state of the art related to artificial intelligence tools used in surface quality detection (Chapter 2). The main conclusions of this study are:
 - The main tools used in the most recent significant works to predict surface roughness are linear or multiple regression, and artificial neural networks (ANNs). The models using such tools often do not include either the mechanical analysis of cutting process or process expertise (of operators, production engineers

or mechanical engineers). This was a key consideration in our choice of tool to develop a good predictor of Ra .

- There is no agreement on the concept of general prediction, or on the models to be used, since research has not yet satisfied industry's needs. Also, there is no reliable device on the market to measure in-process surface roughness. The use of off-line instruments to measure surface roughness affects production line efficiency due to the lack of real-time control. This is particularly evident in the time spent on post-process inspection and the material and production time wasted on the production of defective pieces.
2. To fulfil this requirement we have introduced the use of Bayesian classifiers to model surface roughness in the milling process. This is an important advance towards optimal machining. In Chapter 3 we analysed the use of Bayesian networks with the Naïve Bayes and TAN structures to develop empirical models that predict surface finish, using experimental data on the cutting process. The findings were published in [Correa y otros, 2008]. In this respect, the most significant characteristics of the proposed model are:
- Bayesian networks have proved to be a very useful tool for providing knowledge to develop an Ra predictor, since interesting relationships between nodes were found. Expert knowledge suggests that some such relationships are evident in the process, even though they do not have any mathematical relationship in the formulas that define the metal cutting process.
 - The variables defined for each node are the same irrespective of the method used to obtain the network (Naïve Bayes and TAN). The significant differences lie in the relationships among the network nodes in the learned structures and, consequently, in their inferred probabilities.
 - With other AI techniques used to predict Ra , the error rates range from 2 to 25%. Even though this analysis was run, at an early stage of the study, our model reports an average classification accuracy of 81.2%, where the Smooth class had the best accuracy of 90%. Also, given some evidence or knowledge of the other variables, we can run different network queries and infer the Ra distribution. Furthermore, the model can be used to

recommend the values of each variable that yield, with certain probability, a desired Ra level. Our model definitely improves the knowledge of the process with variables not taken into account in previous studies.

3. We ran a comparative analysis of two models for Ra prediction developed using ANNs (*Multi Layer Perceptron*), a strong competitor in widespread use in this field, and Bayesian networks (TAN), presented in Chapter 4. This research was published in [Correa y otros, 2009]. The main findings of this comparison are detailed below:

- An ANN is a model often used to predict surface quality in machining processes. We propose using BNs instead, illustrating a number advantages that they have over ANNs and extending the application domain to include features that influence surface roughness, not easily found in the experimental studies, like the geometry of the workpiece and the hardness of material to be machined.
- After validating both models with the same data and technique (K-fold cross-validation), BNs achieve the best results from the point of view of classifier goodness applied to the problem of quality prediction in high speed milling. The results have been confirmed by several hypothesis tests.
- As for the time it takes to build the model, BNs also outperform ANNs.
- The ANN optimization procedure does not guarantee the convergence to a global minimum. There are no well-founded methods of choosing the network parameters (number of hidden layers, number of nodes in the hidden layer(s), form of activation functions). On the other hand, BNs have an easy and fast construction procedure, without tuning parameters. Note, in favor of ANNs, that the memory requirements, represented by parameters in an analytical form, are smaller than for BNs, represented by conditional probability tables. However, this is not such a key question nowadays when computer memory is cheap and extensive.
- Relative speeds of operation follow the same pattern. Thus, the BN can be easily implemented as a simple table look-up, and

it is intrinsically fast. However, the ANN requires a number of multiplications and additions at evaluation time, rendering it comparatively slow if high intensity predictions are required.

- Both classifier models are simple to use, but the humans find BNs easier to understand. ANN models work like a black box. In contrast, friendly and intuitive BNs help users to update models and increase confidence in the correctness of the model to be finally adopted. Finding factors that determine surface roughness can help to optimize high-speed milling, which is extensible to other industrial applications. Moreover, BNs support inference in any direction providing responses to any kind of query, not just about surface roughness but also, given some evidence, about different predictor variables. Because they capture these different types of reasoning to infer knowledge, BNs are useful models with significant representation power. From the comparison performed in this chapter, BNs are preferable over ANNs.
4. One of the main problems with modelling is to understand the results produced and to be able to make generalizations. In probabilistic modelling, the a posteriori obtained probabilities are not easy to interpret, even for experts. Even though experts have extensive knowledge of the problem domain, they do not necessarily have the statistical expertise to draw conclusions from the (sometimes huge) probability tables generated. Chapter 5 presents a decision-tree-based method for explaining a Bayesian classifier. This research was published as UPM technical report (TR:UPM-FI-DIA/2009-3) and is now under review for publication in *International Journal of Pattern Recognition and Artificial Intelligence*.
- The proposed methodology is a micro-level explanation method driven by rules taken from a decision tree. This methodology is a useful way of reducing and explaining the complexity of a posteriori probability tables calculated by a Bayesian network. The information is conveyed more clearly to the expert, who finds it easier to understand the results.
 - This methodology provides a compact form of the huge probability table for Ra prediction as a few rules, where each rule leads to a deeper understanding and facilitates interpretation. The rules were validated using expert knowledge.

- Another advantage of this methodology is that the means of explanation is generally applicable to any environment. It is not constrained by a specific vocabulary, and uses rules and membership intervals to display the final result.
5. To finish this thesis, we propose to extend the ideas of dominance borrowed from multiobjective optimization to the case of interval-valued objectives. Since the methodology developed throughout this report uses supervised classification, where a model should maximize more than one objective (e.g. sensitivity and specificity), and, these objectives cannot, due to validation process, be quantified as a single real number, it is necessary to outline a new concept of multiobjective optimization that includes interval-valued solutions. This new idea is expounded in Chapter 6.
- These intervals can be the result of a confidence interval for the metric that is to be estimated. Also some overlap among intervals is permitted when considering non-dominated. We examine the effect of these two parameters: overlap and confidence level.
 - Extending the concepts of Pareto's theory, we prove theoretical results applied to the supervised classification field, where we have several real and interval-valued performance evaluation metrics.
6. Finally, as regards control, models developed to predict surface roughness provide open-loop control, since the control actions are represented as suggestions that the operator decides whether or not to put into practice.

7.2. Future work

The models built as part of the research discussed throughout this thesis do not include tool wear, since the tests have been run on new tools. Note, however, that the GAMHE group at the Institute of Industrial Automation is pursuing a line of research looking into this topic. There are future plans to integrate a tool status monitoring module as input for the surface roughness predictor.

At present the group has a more complete sensors system, including vibrations and position signals, that will also be covered in future work.

It is intended to apply the methodology described in this thesis to ultra precision mechanical micromachining operations, for which purpose the laboratory tests are already underway. It is important to emphasize that the use of Bayesian networks in an industrial environment is very new and has been well received by the scientific community, as expressed at a number of congresses at which the ideas set out here were explained.

Of course other classification models not yet used within this industrial field (e.g. support vector machines, logistic regression) could be tried. Also, rather than discretizing the continuous predictor variables, modern approaches that approximate continuous distributions (e.g. mixtures of gaussians, mixtures of truncated exponentials, mixture of polynomials, kernel-based densities) could be incorporated in our Bayesian models.

As regards the explanation trees, mining their resulting set of rules with e.g. a genetic algorithms, could be interesting to identify non-redundant rules.

Another important ongoing line of research is to use evolutionary algorithms for interval-valued multiobjective optimization. This is a cutting-edge field at present and promises to return important results. In our case they were not necessary, because, thanks to the problem size, we were able to build all the possible selective naïve Bayes and TAN models.

Finally, the development of a knowledge-based system including databases of tools, materials, processes, etc., together with the results of the Bayesian models discussed above would serve as a meta-model in this context.

Bibliografía

- [Abouelatta y Mádl, 2001] Abouelatta, O. y Mádl, J. (2001). Surface roughness prediction based on cutting parameters and tool vibrations in turning operations. *Journal of Materials Processing Technology*, 118:269–277. [citado en la p. 35, 39, 43, 71]
- [Acid y otros, 2005] Acid, S., de Campos, L., y Castellano, J. (2005). Learning Bayesian network classifiers: Searching in a space of partially directed acyclic graphs. *Machine Learning*, 59:213–235. [citado en la p. 94]
- [Antal y otros, 2003] Antal, P., Fannes, G., Timmerman, D., Moreau, Y., y de Moor, B. (2003). Bayesian applications of belief networks and multilayer perceptrons for ovarian tumor classification with rejection. *Artificial Intelligence in Medicine*, 29:39–60. [citado en la p. 84]
- [Azouzi y Guillot, 1997] Azouzi, R. y Guillot, M. (1997). On-line prediction of surface finish and dimensional deviation in turning using neural network based sensor fusion. *The International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 37(93):1201–1217. [citado en la p. 36, 43, 49]
- [Bäck, 1996] Bäck, T. (1996). *Evolutionary Algorithms in Theory and Practice*. Oxford University Press. [citado en la p. 115]
- [Benardos y Vosniakos, 2003] Benardos, P. y Vosniakos, G. (2003). Predicting surface roughness in machining: A review. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 43:833–844. [citado en la p. 32, 33, 35]
- [Boothroyd y Knight, 1989] Boothroyd, G. y Knight, W. (1989). *Fundamentals of Machining and Machine Tools*. Marcel Dekker, New York. [citado en la p. 31, 40]
- [Bryant y Norman, 1980] Bryant, G. y Norman, G. (1980). Expressions of probability: Words and numbers. *New England Journal of Medicine*, 302(7):411. [citado en la p. 96]

- [Castillo y otros, 1997] Castillo, E., Gutiérrez, J., y Hadi, A. (1997). *Sistemas Expertos y Modelos de Redes Probabilísticas*. Academia de Ingeniería, Madrid. [citado en la p. 56]
- [Cestnik, 1990] Cestnik, B. (1990). Estimating probabilities: A crucial task in machine learning. *Proceedings of the Ninth European Conference on Artificial Intelligence*, pages 147–149. [citado en la p. 61]
- [Checkland, 1997] Checkland, P. (1997). *Pensamiento de Sistemas, Práctica de Sistemas*. Wiley. [citado en la p. 45]
- [Chen, 2000] Chen, J. (2000). An effective fuzzy-nets training scheme for monitoring tool breakage. *Journal of Intelligent Manufacturing*, 11:85–101. [citado en la p. 38]
- [Chien y Chou, 2001] Chien, W. y Chou, C. (2001). The prediction model for machinability of 304 stainless steel. *Journal of Materials Processing Technology*, 118:442–447. [citado en la p. 39, 43]
- [Chien y Yao, 1997] Chien, W. y Yao, C. (1997). The development of the predictive model for metal machining parameters based on artificial neural network and genetic algorithm. *Proceedings of the 14th Mechanical Engineering, CSME*, pages 468–475. [citado en la p. 39, 43]
- [Chow y Liu, 1968] Chow, C. y Liu, C. (1968). Approximating discrete probability distributions. *IEEE Transactions on Information Theory*, 14:462–467. [citado en la p. 57]
- [Coello y otros, 2002] Coello, C., VanVeldhuizen, D., y Lamont, G. (2002). *Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems*. Kluwer Academic Publishers. [citado en la p. 112]
- [Cohen, 1960] Cohen, J. (1960). A coefficient of agreement for nominal scales. *Educational and Psychological Measurement*, 20(1):37–46. [citado en la p. 86]
- [Coker y Shin, 1996] Coker, S. y Shin, Y. (1996). In-process control of surface roughness due to tool wear using a new ultrasonic system. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, 36(3):411–422. [citado en la p. 41, 43]
- [Contero y otros, 2002] Contero, M., Company, P., Vila, C., y Aleixos, N. (2002). Product data quality and collaborative engineering. *IEEE Computer Graphics and Applications*, 22(3):32–42. [citado en la p. 3]
- [Cooper, 1984] Cooper, G. (1984). *NESTOR: A computer-based medical diagnostic aid that integrates causal and diagnostic knowledge*. PhD Thesis, Stanford University, CA. [citado en la p. 96, 100]

- [Correa, 2003] Correa, M. (2003). Estudio de Técnicas de Inteligencia Artificial Aplicadas al Modelado del Proceso de Fresado. Master's thesis, Universidad Politécnica de Madrid. [citado en la p. 35, 78]
- [Correa y Bielza, 2009] Correa, M. y Bielza, C. (2009). Explanation of a Bayesian network classifier by means of decision trees. Technical Report UPM-FI/DIA/2009-3, Universidad Politécnica de Madrid. Enviado a International Journal of Pattern Recognition and Artificial Intelligence. [citado en la p. 93]
- [Correa y otros, 2009] Correa, M., Bielza, C., y Pamies-Teixeira, J. (2009). Comparison of Bayesian networks and artificial neural networks for quality detection in a machining process. *Expert Systems with Applications*, 36:7270–7279. [citado en la p. 71, 147]
- [Correa y otros, 2008] Correa, M., Bielza, C., Ramírez, M., y Alique, J. (2008). A Bayesian network model for surface roughness prediction in the machining process. *International Journal of Systems Science*, 39(12):1181–1192. [citado en la p. 47, 146]
- [de Campos y otros, 2001] de Campos, L., Gámez, J., y Moral, S. (2001). Simplifying explanations in Bayesian belief networks. *International Journal of Uncertainty, Fuzziness and Knowledge-Based Systems*, 9(4):461–489. [citado en la p. 98, 100]
- [de Lacalle y otros, 2004] de Lacalle, L. L., Sánchez, J., y Lamikiz, A. (2004). *Mecanizado de Alto Rendimiento*. Ediciones Técnicas Izaro S.A. [citado en la p. 2, 13]
- [Deb, 2001] Deb, K. (2001). *Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithms*. John Wiley and Sons. [citado en la p. 112]
- [Demšar, 2006] Demšar, J. (2006). Statistical comparison of classifiers over multiple data sets. *Journal of Machine Learning Research*, 7:1–30. [citado en la p. 84]
- [Dimla, 1999] Dimla, D. (1999). Application of perceptron neural networks to tool-state classification in a metal-turning operation. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 12:471–477. [citado en la p. 49]
- [Dolinsek y otros, 1999] Dolinsek, S., Kopac, J., Viharos, Z., y Monostori, L. (1999). An intelligent ae sensor for the monitoring of finish machining process. In *Second International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials*, volume 2, pages 847–853. [citado en la p. 36, 43]

- [Domingos y Pazzani, 1997] Domingos, P. y Pazzani, M. (1997). On the optimality of the simple Bayesian classifier under zero-one loss. *Machine Learning*, 29:103–130. [citado en la p. 57]
- [Duda y otros, 2001] Duda, R., Hart, P., y Stork, D. (2001). *Pattern Classification*. Wiley, New York. [citado en la p. 45, 59, 60]
- [Dweiri y otros, 2003] Dweiri, F., Al-Jarrah, M., y Al-Wedyan, H. (2003). Fuzzy surface roughness modeling of CNC down milling of alumic-79. *Journal of Materials Processing Technology*, 133:266–275. [citado en la p. 41, 43]
- [Elsaesser y Henrion, 1990] Elsaesser, C. y Henrion, M. (1990). Verbal expressions for probability updates: How much more probable is “much more probable”? *Uncertainty in Artificial Intelligence*, 5(1):319–330. [citado en la p. 96, 100]
- [Elvira, 2002] Elvira, C. (2002). Elvira: An environment for creating and using probabilistic graphical models. In *Proceedings of the First European Workshop on Probabilistic Graphical Models (PGM’02)*, pages 1–11, Cuenca, Spain. [citado en la p. 59]
- [Feng y Wang, 2003] Feng, C. y Wang, X. (2003). Surface roughness predictive modelling: Neural networks versus regression. *IIE Transactions*, 35:11–27. [citado en la p. 40, 43, 71]
- [Flores y otros, 2005] Flores, J., Gámez, J., y Moral, S. (2005). Abduction inference in Bayesian networks: Finding a partition of the explanation space. In *8th European conference on symbolic and quantitative approaches to reasoning with Uncertainty, ECSQARU’05*, pages 63–75. [citado en la p. 98, 99, 100]
- [Friedman y otros, 1997] Friedman, N., Geiger, D., y Goldszmidt, M. (1997). Bayesian network classifiers. *Machine Learning*, 29:131–163. [citado en la p. 57, 101]
- [Gama y Gaber, 2007] Gama, J. y Gaber, M. (2007). *Learning from Data Streams*. Springer. [citado en la p. 92]
- [García-Nieto y otros, 2009] García-Nieto, J., Alba, E., Jourdan, L., y Talbi, E. (2009). Sensitivity and specificity based multiobjective approach for feature selection: Application to cancer diagnosis. *Information Processing Letters*, (109):887–896. [citado en la p. 113, 114]
- [Good, 1977] Good, I. (1977). Explicativity: A mathematical theory of explanation with statistical applications. *Proceedings of the Royal Statistical Society*, 354:303–330. [citado en la p. 96]

- [Griewank, 2000] Griewank, A. (2000). *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*. SIAM. [citado en la p. 73]
- [Groover, 1997] Groover, M. (1997). *Fundamentals of Modern Manufacturing Materials, Processes, and Systems*. Prentice Hall. [citado en la p. 20]
- [Groover, 2000] Groover, M. (2000). *Fundamentals of Modern Manufacturing*. John Wiley and Sons, New York. [citado en la p. 16]
- [Haddawy y otros, 1997] Haddawy, P., Jacobson, J., y Kahn, C. (1997). Banter: a Bayesian network tutoring shell. *Artificial Intelligence in Medicine*, 10:177–200. [citado en la p. 97, 100]
- [Hagan y otros, 1996] Hagan, M., Demuth, H., y Beale, M. (1996). *Neural Network Design*. PWS Publishing Company. [citado en la p. 72]
- [Hand y You, 2001] Hand, D. y You, K. (2001). Idiot’s Bayes -not so stupid after all? *International Statistical Review*, 69:385–398. [citado en la p. 57]
- [Hecht-Nielsen, 1990] Hecht-Nielsen, R. (1990). *Neurocomputing*. Addison-Wesley. [citado en la p. 72]
- [Heckerman, 1991] Heckerman, D. (1991). *Probabilistic Similarity Networks*. MIT Press, Cambridge, MA. [citado en la p. 96, 100]
- [Henrion y Druzdzel, 1991] Henrion, M. y Druzdzel, M. (1991). Qualitative propagation and scenario-based approaches to explanation of probabilistic reasoning. *Machine Intelligence and Pattern Recognition*, 12:17–32. [citado en la p. 95, 97, 100]
- [Huang y Chen, 2003] Huang, B. y Chen, J. (2003). An in-process neural network-based surface roughness prediction system using a dynamometer in end milling operations. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, 21:339–347. [citado en la p. 71]
- [Hughes, 2001] Hughes, E. (2001). Evolutionary multi-objective ranking with uncertainty and noise. In Zitzler, E., editor, *LNCS 1993*, pages 329–343. EMO 2001, Springer-Verlag. [citado en la p. 113, 114]
- [Inza y otros, 2004] Inza, I., Larrañaga, P., Blanco, R., y Cerrolaza, A. (2004). Filter versus wrapper gene selection approaches in dna microarray domains. *Artificial Intelligence in Medicine*, 31:91–103. [citado en la p. 76]
- [Jensen, 2001] Jensen, F. (2001). *Bayesian Networks and Decision Graphs*. Springer. [citado en la p. 98, 100]

- [Jin y Sendhoff, 2008] Jin, Y. y Sendhoff, B. (2008). Pareto-based multiobjective machine learning: An overview and case studies. *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics - part C: Applications and Reviews*, 38(3):397–415. [citado en la p. 113, 114]
- [Jung y otros, 2005] Jung, T., Yang, M., y Lee, K. (2005). A new approach to analysing machined surfaces by ball-end milling, part i: Formulation of characteristics lines of cut remainder. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 25(9-10):833–840. [citado en la p. 42, 43]
- [Kim y Chu, 1999] Kim, B. y Chu, C. (1999). Texture prediction of milled surfaces using texture superposition method. *Computer-Aided Design*, 31:485–494. [citado en la p. 37, 43]
- [Kirby y otros, 2006] Kirby, D., Chen, J., y Zhang, J. (2006). Development of a fuzzy-nets-based in-process surface roughness adaptive control system in turning operations. *Expert Systems with Applications*, 30(4):592–604. [citado en la p. 38, 43]
- [Kirby y otros, 2004] Kirby, D., Zhang, Z., y Chen, J. (2004). Development of an accelerometer-based surface roughness prediction system in turning operations using multiple regression techniques. *Journal of Industrial technology*, 20(4):1–8. [citado en la p. 35, 38, 43, 71]
- [Kline y Devor, 1983] Kline, W. y Devor, R. (1983). Effect of runout on cutting geometry and forces in end milling. *International Journal of Machine Tool Design & Research*, 23(2):123–140. [citado en la p. 41, 43]
- [Lacave y Díez, 2002] Lacave, C. y Díez, F. (2002). A review of explanation methods for Bayesian networks. *The Knowledge Engineering Review*, 17(2):107–127. [citado en la p. 94]
- [Lacave y otros, 2007] Lacave, C., Luque, M., y Díez, F. (2007). Explanation of Bayesian networks and influence diagrams in elvira. *IEEE Systems, Man and Cybernetics. Part B*, 37(4):952–965. [citado en la p. 97, 100]
- [Landis y Kock, 1977] Landis, J. y Kock, G. (1977). The measurement of observer agreement for categorical data. *Biometrics*, 33(1):159–174. [citado en la p. 86]
- [Langley y Sage, 1994] Langley, P. y Sage, S. (1994). Induction of selective Bayesian classifiers. In *10th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, pages 399–406. [citado en la p. 121]

- [Larrañaga y Moral, 2008] Larrañaga, P. y Moral, S. (2008). Probabilistic graphical models in artificial intelligence. *Applied Soft Computing*, 17(3):326–339. [citado en la p. 46]
- [Lauritzen y Spiegelhalter, 1988] Lauritzen, S. y Spiegelhalter, D. (1988). Local computations with probabilities on graphical structures and their application to expert systems. *Journal of the Royal Statistical Society B*, 50:157–224. [citado en la p. 102]
- [Law y Kelton, 1991] Law, A. y Kelton, W. (1991). *Simulation Modeling and Analysis*. 2nd ed. New York: McGraw-Hill. [citado en la p. 102]
- [Lee y otros, 2001] Lee, K., Kang, M., Jeong, Y., Lee, D., y Kim, J. (2001). Simulation of surface roughness and profile in high-speed end milling. *Journal of Materials Processing Technology*, 113:410–415. [citado en la p. 41, 43]
- [Lee y Chen, 2003] Lee, S. y Chen, J. (2003). On-line surface roughness recognition system using artificial neural networks system in turning operations. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 22:498–509. [citado en la p. 38, 43]
- [Liang y otros, 2002] Liang, S., Hecker, R., y Landers, R. (2002). Machining process monitoring and control: The state-of-the-art. *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, pages 1–12. [citado en la p. 33]
- [Logothetis y Wynn, 1995] Logothetis, N. y Wynn, H. P. (1995). *Quality through Design: Experimental Design, Off-line Quality Control, and Taguchi's Contributions*. Oxford University Press, USA. [citado en la p. 44]
- [Lou y otros, 1999] Lou, M., Chen, J., y Li, C. (1999). Surface roughness prediction technique for CNC end-milling. *Journal of Industrial Technology*, 15(1):1–6. [citado en la p. 43]
- [Lou y Chen, 1999] Lou, S. y Chen, J. (1999). In-process surface roughness recognition system in end-milling operations. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 15(3):200–209. [citado en la p. 38]
- [López y otros, 2003] López, F., Cavazos, R., y Delgado, M. (2003). Caracterización de superficies maquinadas por medio de parámetros de rugosidad. *Ingenierías*, 6(18):62–68. [citado en la p. 41, 43]
- [MacQueen, 1967] MacQueen, J. (1967). Some methods for classification and analysis of multivariate observations. *Proceedings of the 5th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, 1:281–297. [citado en la p. 59]

- [Marchant y Onyango, 2003] Marchant, J. y Onyango, C. (2003). Comparison of a Bayesian classifier with a multilayer feed-forward neural network using the example of plant/weed/soil discrimination. *Computers and Electronics in Agriculture*, 39:3–22. [citado en la p. 55, 84]
- [Martín y otros, 2005] Martín, J., Bielza, C., y Insua, D. R. (2005). Approximating nondominated sets in continuous multiobjective optimization problems. *Naval Research Logistics*, 52(5):469–480. [citado en la p. 112]
- [McNemar, 1947] McNemar, Q. (1947). Note on the sampling error of the difference between correlated proportions or percentages. *Psychometrika*, 12:153–157. [citado en la p. 88]
- [Minsky y Papert, 1969] Minsky, M. y Papert, S. (1969). *Perceptrons: An Introduction to Computational Geometry*. MIT Press, Cambridge, MA. [citado en la p. 57]
- [Mitchell, 1997] Mitchell, T. (1997). *Machine Learning*. McGraw-Hill. [citado en la p. 103]
- [Montgomery, 1996] Montgomery, D. (1996). *Introduction to Statistical Quality Control*. John Wiley and Sons. [citado en la p. 38]
- [Myers y Montgomery, 2002] Myers, R. y Montgomery, D. (2002). *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*. John Wiley and Sons. [citado en la p. 76]
- [Neapolitan, 2004] Neapolitan, R. (2004). *Learning Bayesian Networks*. Prentice Hall. [citado en la p. 56]
- [Nielsen y otros, 2008] Nielsen, U., Pellet, J., y Elisseeff, A. (2008). Explanation trees for causal Bayesian networks. In *24th Conference on Uncertain in Artificial Intelligence UAI'08*, pages 1–8. [citado en la p. 98, 99, 100]
- [Osyczka, 1985] Osyczka, A. (1985). *Multicriteria optimization for engineering design*. In *Design Optimization*. J.S. Gero, Academic Press. [citado en la p. 115]
- [Pamies, 2001] Pamies, J. (2001). *Fundamentos Físicos do Corte dos Metais*. Edinova. [citado en la p. 32]
- [Pareto, 1896] Pareto, V. (1896). *Cours D'Economie Politique*. Rouge, Lausanne, Switzerland. [citado en la p. 115]
- [Pearl, 1988] Pearl, J. (1988). *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems: Networks of Plausible Inference*. Morgan Kaufmann, San Francisco, CA. [citado en la p. 55]

- [Perzyk y otros, 2005] Perzyk, M., Biernacki, R., y Kočański, A. (2005). Modeling of manufacturing processes by learning systems: The naïve Bayesian classifier versus artificial neural networks. *Journal of Materials Processing Technology*, 164-165:1430–1435. [citado en la p. 55, 84]
- [Pittner y otros, 2000] Pittner, S., Kamarthi, S., Wongsiripatanakul, P., y Wongvasu, N. (2000). Correlation between acoustic emission statistics and surface roughness in finish turning. *Tools and Manufacture*, 35:1077–1086. [citado en la p. 37, 43]
- [Quinlan, 1993] Quinlan, J. (1993). *C4.5: Programs for Machine Learning*. Morgan Kaufmann Publishers. [citado en la p. 103]
- [Quintana y otros, 2009] Quintana, G., Garcia-Romeu, M., y Ciurana, J. (2009). Surface roughness monitoring application based on artificial neural networks for ball-end milling operations. *Journal of Intelligent Manufacturing*, (DOI 10.1007/s10845-009-0323-5). [citado en la p. 42, 43]
- [Ripley, 1996] Ripley, B. (1996). *Pattern Recognition and Neural Networks*. Cambridge University Press. [citado en la p. 57]
- [Rosas y Rivero, 1990] Rosas, L. y Rivero, H. (1990). *Iniciación al Método Científico Experimental*. Trillas Ed. [citado en la p. 7]
- [Salmon, 1984] Salmon, W. (1984). *Scientific Explanation and the Causal Structure of the World*. Princeton University Press. [citado en la p. 94]
- [Samson y Chen, 2003] Samson, S. y Chen, J. (2003). On-line surface roughness recognition system using artificial networks system in turning operations. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 22:498–509. [citado en la p. 71]
- [Sember y Zukerman, 1990] Sember, P. y Zukerman, I. (1990). Strategies for generating micro explanations for Bayesian belief networks. *Proceedings of the 5th Workshop on Uncertainty in Artificial Intelligence*, 5:295–302. [citado en la p. 95]
- [Shaw, 1984] Shaw, M. (1984). *Metal Cutting Principles*. Oxford University Press, London. [citado en la p. 19]
- [Sheskin, 2000] Sheskin, D. (2000). *Handbook of Parametric and Nonparametric Statistical Procedures*. Chapman and Hall, Boca Ratón, second edition. [citado en la p. 88]
- [Shimony, 1991] Shimony, S. (1991). Explanation, irrelevance, and statistical independence. In *AAAI Proceedings*, pages 482–487. [citado en la p. 98, 100]

- [Sánchez y otros, 2005] Sánchez, M., Ortiz, M., Sarabia, L., y Lleti, R. (2005). On Pareto-optimal fronts for deciding about sensitivity and specificity in class-modelling problems. *Analytica Chimica Acta*, (544):236–245. [citado en la p. 113, 114]
- [Spiegelhalter y Knill-Jones, 1984] Spiegelhalter, D. y Knill-Jones, R. (1984). Statistical and knowledge-based approaches to clinical decision support systems with an application in gastroenterology. *Journal of the Royal Statistical Society A*, 147(1):35–77. [citado en la p. 96, 100]
- [Steuer, 1986] Steuer, R. E. (1986). *Multiple Criteria Optimization: Theory, Computation and Application*. Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics. John Wiley. [citado en la p. 111]
- [Stone, 1974] Stone, M. (1974). Cross-validatory choice and assessment of statistical predictions. *Journal of the Royal Statistical Society B*, 36:211–147. [citado en la p. 63, 84]
- [Strat y Lowrance, 1989] Strat, T. y Lowrance, J. (1989). Explaining evidential analysis. *International Journal of Approximate Reasoning*, 3(4):229–353. [citado en la p. 96, 100]
- [Suermondt, 1992] Suermondt, H. (1992). *Explanation in Bayesian Belief Networks*. PhD thesis, Stanford University. [citado en la p. 97, 100]
- [Suresh y otros, 2002] Suresh, P., Rao, P. V., y Deshmurh, S. (2002). A genetic algorithmic approach for optimization of surface roughness prediction model. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 42(6):675–680. [citado en la p. 40, 43]
- [Szalay y otros, 1996] Szalay, T., Alpek, F., Monostori, L., Markos, S., y Viharos, Z. (1996). Investigation of machined surfaces using artificial intelligence methods. *Proceedings of the IXth International Conference on Cutting Tools*, pages 635–640. [citado en la p. 35, 43]
- [Tan y Goh, 2008] Tan, K. y Goh, C. (2008). Handling uncertainties in evolutionary multi-objective optimization. In Zurada, J., editor, *LNCS 5050*, pages 262–292. WCCI 2008, Springer-Verlag. [citado en la p. 113, 114]
- [Teich, 2001] Teich, J. (2001). Pareto-front exploration with uncertain objectives. In Zitzler, E., editor, *LNCS 1993*, pages 314–328. EMO 2001, Springer-Verlag. [citado en la p. 112, 113, 115]
- [Tsai y otros, 1999] Tsai, Y., Chen, J., y Lou, S. (1999). An in-process surface recognition system based on neural networks in end-milling cutting operations.

- International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 39(4):583–605. [citado en la p. 37, 43, 71]
- [Wallsten y Budescu, 1995] Wallsten, T. y Budescu, D. (1995). A review of human linguistic probability processing: General principles and empirical evidence. *The Knowledge Engineering Review*, 10(1):43–62. [citado en la p. 95]
- [Yang y Chen, 2004] Yang, J. y Chen, J. (2004). A systematic approach for identifying optimum surface roughness performance in end-milling operations. *Journal of Industrial Technology*, 17(2):1–8. [citado en la p. 38, 43]
- [Yang y otros, 2006] Yang, L., Chen, J., Chow, H., y Lin, C. (2006). Fuzzy-nets-based in-process surface roughness adaptive control system in end-milling operations. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 28(3-4):236–248. [citado en la p. 38, 39, 43]
- [Yuan y Lu, 2007] Yuan, C. y Lu, T. (2007). Finding explanations in Bayesian networks. In *18th International Workshop on Principles of Diagnosis*, pages 414–419. [citado en la p. 98, 100]
- [Yuan y Lu, 2008] Yuan, C. y Lu, T. (2008). A general framework for generating multivariate explanations in Bayesian networks. In *Proceedings of the 23th AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 1:1119–1124. [citado en la p. 98, 100]
- [Zhang y Bivens, 2007] Zhang, R. y Bivens, A. (2007). Comparing the use of Bayesian networks and neural networks in response time modeling for service-oriented systems. *Proceedings of the 2007 Workshop on Service-oriented Computing Performance: Aspects, Issues, and Approaches*, pages 67–74. [citado en la p. 55, 84]
- [Zhao, 2007] Zhao, H. (2007). A multi-objective genetic programming approach to developing Pareto optimal decision trees. *Decision Support Systems*, (43):809–826. [citado en la p. 113, 114]

