

Maschinelles Lernen für die Ingenieurwissenschaften

Marcus J. Neuer

Maschinelles Lernen für die Ingenieurwissenschaften

Einführung in physikalisch-informierte,
erklärbare Lernverfahren für KI in
technischen Anwendungen

Marcus J. Neuer
Research & Development
innoRIID
Düsseldorf, Deutschland

ISBN 978-3-662-68215-9 ISBN 978-3-662-68216-6 (eBook)
<https://doi.org/10.1007/978-3-662-68216-6>

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <https://portal.dnb.de> abrufbar.

© Der/die Herausgeber bzw. der/die Autor(en), exklusiv lizenziert an Springer-Verlag GmbH, DE, ein Teil von Springer Nature 2024

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsgesetz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung des Verlags. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von allgemein beschreibenden Bezeichnungen, Marken, Unternehmensnamen etc. in diesem Werk bedeutet nicht, dass diese frei durch jedermann benutzt werden dürfen. Die Berechtigung zur Benutzung unterliegt, auch ohne gesonderten Hinweis hierzu, den Regeln des Markenrechts. Die Rechte des jeweiligen Zeicheninhabers sind zu beachten.

Der Verlag, die Autoren und die Herausgeber gehen davon aus, dass die Angaben und Informationen in diesem Werk zum Zeitpunkt der Veröffentlichung vollständig und korrekt sind. Weder der Verlag noch die Autoren oder die Herausgeber übernehmen, ausdrücklich oder implizit, Gewähr für den Inhalt des Werkes, etwaige Fehler oder Äußerungen. Der Verlag bleibt im Hinblick auf geografische Zuordnungen und Gebietsbezeichnungen in veröffentlichten Karten und Institutionsadressen neutral.

Planung/Lektorat: Leonardo Milla

Springer Vieweg ist ein Imprint der eingetragenen Gesellschaft Springer-Verlag GmbH, DE und ist ein Teil von Springer Nature.

Die Anschrift der Gesellschaft ist: Heidelberger Platz 3, 14197 Berlin, Germany

Das Papier dieses Produkts ist recycelbar.

*Dieses Buch widme ich meiner großen Liebe,
Paula!*

Vorwort

Lieber Leser! Dieses Buch entstand aus der Vorlesungsreihe „Data-Mining im Umfeld technischer Prozess“, die ich in den letzten Jahren an der RWTH Aachen halten durfte. Immer wieder war großes Interesse der Studenten an den Lernverfahren zu erkennen. Mir wurde klar, obwohl es an guter Informatik-Fachliteratur hierzu nicht fehlt, dass es Sinn macht, Anwendung, Entwurf und Betrieb von derartigen Verfahren aus Sicht der technischen Anwendungen zu beschreiben. Dazu spielt gerade die praktische Umsetzung eine große Rolle.

Das Buch soll Studenten, die bisher nur wenig mit Machine Learning in Kontakt gekommen sind, einen Startpunkt geben und Ihnen mit einer ausgewählten Sammlung an lauffähigen Codefragmenten helfen, eigene Problemstellungen mit Lernverfahren zu bearbeiten. Dabei soll es genügend mathematische Grundlagen vermitteln, um Vertrauen in die Methodik zu schaffen, sowie die Programmierung hinreichend vollständig darstellen, um leicht darauf aufzubauen. Die hier gezeigten Grundlagen stellen daher nur eine Einführung dar.

Vom ersten Kapitel an liegt der Fokus auf physikalisch-informierten Verfahren und dem Aspekt der algorithmischen Erklärbarkeit. Sowohl die Struktur des Buches als auch die Inhalte der einzelnen Kapitel wurden auf diese thematische Zielsetzung ausgerichtet. So beinhaltet die Darstellung der mathematischen Grundlagen einen Schwerpunkt auf stochastischen Prozessen, um diese später in die physikalisch-informierten Lernverfahren zu integrieren. Hierzu ist eine konsequente Einbeziehung von Unsicherheiten, analytischen Ausdrücken und semantischen Werkzeugen unerlässlich.

Aus Gründen der besseren Lesbarkeit verwenden wir in diesem Buch überwiegend das generische Maskulinum. Dies impliziert immer beide Formen, schließt also die weibliche Form mit ein.

Das Buch ist unterteilt in drei größere Abschnitte. Kap. 1 bis 3 bilden dabei eine Form von Einleitung. Sie behandeln den Umgang mit Daten, mathematische Hilfsmittel, um sie zu beschreiben, und letztlich Methoden, um sie gezielt anzupassen.

Kap. 4, 5 und 6 behandeln Machine Learning, beginnend mit überwachten Lernverfahren über unüberwachte Verfahren hin zu der Idee des physikalisch-informierten Lernens. Jede Methode wird dabei nicht nur dargestellt, sondern mit Codebeispielen unterstützt. Dieser Einsatz auf der Ebene der Programmierung ist hierbei von großer Bedeutung, da er das Verständnis vertieft und die spätere Anwendbarkeit überhaupt erst ermöglicht.

Es gibt dabei Ansätze, die wir bewusst ausgespart haben. So hätten Support Vector Machines (SVM), die Self-Organizing Map (SOM) von Kohonen oder auch Restricted Boltzmann Machines (RBM) durchaus in den Kontext gepasst. Eine gebührend ausführliche Darstellung hätte jedoch den Rahmen dieser Einführung verlassen und soll daher an anderer Stelle in Zukunft noch einmal aufgegriffen werden.

In allen Kapiteln wird Erklärbarkeit und physikalisches Grundverständnis immer wieder thematisch aufgegriffen. Kap. 7 schließt das Buch ab und behandelt diesen Aspekt aus verschiedenen Perspektiven. Wir zeigen nicht nur hilfreiche semantische Tools um Kontext und Wissensbezüge zu speichern, sondern wir widmen uns auch der Frage, welche Datentechnologien und Strategien Erklärbarkeit unterstützen.

Düsseldorf
Juli 2023

Marcus J. Neuer

Danksagung

Über die Zeit haben mich verschiedene Studenten mit Probelesen, Nachvollziehen der Beispiele und Fehlersuche im Quellcode bei der Realisation des Buches unterstützt. Hierfür möchte ich mich nachdrücklich bedanken, auch wenn ich hier nicht alle namentlich aufzählen kann.

Genauso möchte ich dem Team von Springer Nature für Ihre Betreuung, Tipps und Geduld bei der Erstellung dieses Buches danken.

Andreas Quick, Thomas George und Tobias Seitz von der iba AG haben häufig mit mir über die praktischen Aspekte von Lernverfahren und die Anforderungen von Industriekunden diskutiert. Für diese anregenden Diskussionen und Einblicke bin ich bis heute sehr dankbar.

Peter und Christian Henke haben mir bei der innoRIID GmbH die Möglichkeiten gegeben, viele meiner algorithmischen Ansätze für reale Produkte zu spezialisieren und diese somit zu kommerzialisieren. Hierbei konnte ich wertvolle Erkenntnisse darüber gewinnen, welche Verfahren wirklich robust sind und welche weniger für den praktischen Einsatz geeignet sind. Dafür danke ich ihnen und auch dem gesamten Team bei innoRIID.

Ich möchte mich auch ganz herzlich bei den vielen Kollegen des Betriebsforschungsinstituts (BFI) in Düsseldorf bedanken. Über die letzten Jahre fand ich hier eine wissenschaftliche Heimat, die es mir erlaubt hat, viele neue Themen kennen- und auch lehren zu lernen. Dr. Alexander Ebel hat mich sicherlich mit seiner Leidenschaft für semantische Technologien angesteckt. Ihm bin ich dankbar für die gemeinsamen Projekte, in denen wir Agententechnologien und semantische Konzepte zum realen Einsatz in der Industrie bringen konnten. Norbert Link stand mir häufig zur Seite, um über die Sinnhaftigkeit eines Algorithmus zu diskutieren. Von ihm habe ich viele Einblicke erhalten, um Methoden kritisch zu hinterfragen und Fehler aufzuspüren. Norbert Holzknicht weckte bei mir eine Faszination für industrielle Datensysteme und ermutigte mich, auch unkonventionelle Lösungswege zu nutzen. Dr. Andreas Wolff stand mir immer mit Rat und Tat zur Seite, vor allem was komplizierte mathematische Konzepte anging. Ihm bin ich für die vielen Diskussionen und Ideenrunden dankbar, die meinen Horizont jedes Mal erweitert haben. Letztlich möchte ich Prof. Dr. Harald Peters nennen, ohne den ich

wahrscheinlich nie meine akademischen Interessen wieder aufgegriffen hätte und der mich bis zum heutigen Tag immer unterstützt hat.

Ein letzter großer Dank gilt dem Institut für Theoretische Physik I der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf. Speziell Prof. Dr. K.-H. Spatschek und Dr. E. Laedke haben mir grundlegende algorithmische und mathematische Werkzeuge vermittelt, die mich bis heute in meinem Beruf begleiten, was mich zutiefst dankbar macht.

Ich möchte mich bei meinen Eltern bedanken, die mir so vieles im Leben möglich machten und immer für mich da sind. Sie unterstützten jeden meiner Lebensträume und haben somit auch einen großen Anteil an dieser Arbeit.

Meiner Frau Stephanie Paula Neuer ist dieses Buch nicht nur gewidmet, ich danke ihr für ihre liebevolle Unterstützung, für den Wind in meinen Segeln und natürlich die vielen Stunden, in denen sie mir half Fehler zu finden und ausmerzen. Ohne sie wäre das Buch so nicht möglich gewesen.

im Düsseldorf
Juli 2023

Marcus J. Neuer

Inhaltsverzeichnis

1	Daten als Grundlage von Modellen	1
1.1	Datenbasierte Modellierung.	2
1.1.1	Der Begriff Modell.	2
1.1.2	White-Box-, Grey-Box- und Black-Box-Modelle	4
1.1.3	Kritik an der datenbasierten Modellierung	4
1.2	Klassifikation von Daten	5
1.2.1	Geschichtliche Einordnung des Begriffs Data	5
1.2.2	Daten in unserer heutigen Zeit.	6
1.2.3	Strukturelle Klassifikation	6
1.2.4	Quantitative Kategorisierung von Daten	8
1.2.5	Qualitative Kategorisierung von Daten	8
1.2.6	Zeitreihen	10
1.2.7	Skalen und das Skalenniveau.	11
1.3	Data Mining als systematischer Prozess	14
1.3.1	Was ist Data Mining?.	14
1.3.2	Schritte, um Data Mining durchzuführen	16
1.3.3	Schlüsse aus Daten ziehen	17
1.3.4	Industrielles Data Mining und der CRISP-DM	18
1.4	Praktischer Umgang mit Daten in Python	21
1.4.1	Programme in diesem Buch.	21
1.4.2	Bibliotheken für Python.	21
1.4.3	Erklärbare Daten in Python	22
	Literatur.	25
2	Mathematische Beschreibung von Daten	27
2.1	Grundlagen der Stochastik.	28
2.1.1	Wahrscheinlichkeit.	28
2.1.2	Mengen	29
2.1.3	Wahrscheinlichkeitsdefinition nach Laplace	30
2.1.4	Ereignis-, Ergebnis- und Wahrscheinlichkeitsräume	31
2.1.5	Axiome von Kolmogorov	32

2.1.6	Bedingte Wahrscheinlichkeit und der Satz von Bayes.	34
2.1.7	Stochastischer Prozess	36
2.1.8	Berücksichtigung der Wahrscheinlichkeitsdichte in den Daten.	38
2.2	Stochastik von Daten	39
2.2.1	Stochastik des Abtastprozesses	39
2.2.2	Das Nyquist-Theorem	40
2.2.3	Unterscheidung von Unsicherheiten	42
2.3	Statistische Werkzeuge zum Umgang mit Daten.	43
2.3.1	Vektorielle Darstellung einer einzelnen Datenreihe	43
2.3.2	Erwartungswert	43
2.3.3	Varianz	45
2.3.4	Empirische Varianz	46
2.3.5	Momente einer Wahrscheinlichkeitsverteilung	46
2.3.6	Ausgesuchte Wahrscheinlichkeitsverteilungen	47
2.3.7	Matrixdarstellung mehrerer Messreihen	49
2.3.8	Kovarianz und Kovarianzmatrix	50
2.3.9	Korrelation und Korrelationsmatrix.	51
	Literatur.	54
3	Datenvorverarbeitung	57
3.1	Ziele der Vorverarbeitung.	58
3.2	Datenbereinigung.	59
3.2.1	Entfernen von fehlerhaften Datenpunkten.	59
3.2.2	Fehlende Daten	62
3.2.3	Aufspüren und Eliminieren von Duplikaten	62
3.3	Normalisierung	63
3.3.1	Gründe für die Normalisierung von Daten	63
3.3.2	Typen von Normalisierungen.	63
3.3.3	Anwendung der Normalisierung	64
3.4	Filterung von Daten	68
3.4.1	Gleitender Mittelwert.	68
3.4.2	Faltung	69
3.4.3	Der Median Filter.	70
3.5	Triggerung	71
3.5.1	Zeitreihen und repetitive Daten	71
3.5.2	Implementation des Triggers	72
3.6	Transformationen.	74
3.6.1	Differentiation der Daten	74
3.6.2	Funktionale Transformation.	76
3.6.3	Fourier-Transformation	77
3.6.4	Wavelet-Transformation.	81

- 3.7 Quantifikation der stochastischen Eigenschaften. 84
 - 3.7.1 Histogramme 84
 - 3.7.2 Identifikation der Wahrscheinlichkeitsverteilung
mittels Kerndichteschätzer. 85
- 3.8 Kenngrößen aus Daten ermitteln 88
 - 3.8.1 Statistische Kenngrößen. 88
 - 3.8.2 Prozessorientierte Kenngrößen 88
- Literatur. 91
- 4 Überwachtes Lernen 93**
 - 4.1 Lernen 93
 - 4.1.1 Was bedeutet überhaupt Lernen? 93
 - 4.1.2 Verschiedene Formen des maschinellen Lernens. 95
 - 4.2 Strategie des überwachten Lernens 95
 - 4.2.1 Algorithmische Vorüberlegung 95
 - 4.2.2 Klassifikation und Regression 97
 - 4.2.3 Trainingsdaten und Testdaten 98
 - 4.3 Evolutionäres Lernen 99
 - 4.3.1 Idee der evolutionären Veränderung 99
 - 4.3.2 Implementation eines einfachen, evolutionären
Algorithmus 100
 - 4.3.3 Zwischenspeichern der besten Veränderung 101
 - 4.4 LMS-adaptiver Filter 103
 - 4.4.1 Theorie des LMS-Algorithmus für das Lernen
auf einen Zielwert 103
 - 4.4.2 Implementation des LMS-Algorithmus 105
 - 4.4.3 NLMS-Algorithmus durch Normalisierung
der Eingangsvariablen 106
 - 4.4.4 Training 106
 - 4.4.5 Anwendungen und Eigenschaften des
adaptiven Filters. 107
 - 4.4.6 Hyperparameter des LMS-adaptiven Filters 107
 - 4.5 Neuronale Netze. 108
 - 4.5.1 Das Neuron 108
 - 4.5.2 Vernetzung von Neuronen 109
 - 4.5.3 Aktivierungsfunktionen 111
 - 4.5.4 Training neuronaler Netze 113
 - 4.5.5 Optimierung als Hyperparameter. 114
 - 4.5.6 Einfaches Klassifikationsnetz mit Scikit-Learn 115
 - 4.5.7 Klassifikationsnetz in Keras. 116
 - 4.5.8 Regressionsnetz in Keras 119
 - 4.5.9 Überanpassung und Kreuzvalidierung 122
 - 4.6 Rekurrente Neuronale Netze 124
 - 4.6.1 Rückkopplung in neuronalen Netzstrukturen 124

4.6.2	Gates zur Steuerung des Informationsflusses innerhalb des Neurons	126
4.6.3	Neuronales Netz mit langem Kurzzeitgedächtnis (LSTM)	127
4.6.4	Implementation eines LSTM-Netzes	128
4.7	Entscheidungsbäume	131
4.7.1	Grundlegende Idee des Entscheidungsbaums	131
4.7.2	Entropie und Information Gain	133
4.7.3	Klassifikations- und Regressionsbäume	139
4.7.4	Anwendungsbeispiel mit Scikit-Learn	140
4.7.5	Implementation eines einfachen Entscheidungsbaums	140
4.7.6	Der Gini-Koeffizient für Entscheidungsbäume	145
	Literatur	148
5	Unüberwachtes Lernen	151
5.1	Unüberwachte Lernparadigmen	152
5.2	Hauptkomponentenanalyse, Principal Component Analysis (PCA)	153
5.2.1	Eigenschaften der Kovarianzmatrix	153
5.2.2	Eigenraum	154
5.2.3	Eigenraum der Kovarianzmatrix	155
5.2.4	Eigenraumreduktion	156
5.2.5	Implementation über Scikit-Learn	157
5.2.6	Diskussion der PCA	159
5.3	K-Means-Clusterverfahren	161
5.3.1	Finden von Clusterzentren	161
5.3.2	Implementation mit Scikit-Learn	162
5.3.3	Batch K-Means	163
5.4	Der t-Distributed-Stochastic-Neighbour-Embedding- Algorithmus (t-SNE)	164
5.4.1	Idee hinter t-SNE	164
5.4.2	Anwendung der t-SNE Implementation in Scikit-Learn	165
5.4.3	Vor- und Nachteile von t-SNE	167
5.5	Autoencoder	168
5.5.1	Topologie eines Autoencoders	168
5.5.2	Latenter Raum	169
5.5.3	Anomalieerkennung	170
5.5.4	Implementation in Keras	170
5.5.5	Klassifizierung im latenten Raum	173
5.5.6	Unsicherheit im AE	175
5.5.7	Erkennung einer unbekanntes Anomalie	175
5.5.8	Kombination von Verfahren	180
	Literatur	182

6	Physikalisch-informiertes Lernen	185
6.1	Einführung	185
6.1.1	Was ist physikalisch-informiertes Lernen?	186
6.1.2	Ein einfaches, motivierendes Beispiel	187
6.1.3	Kontinuierliche Veränderung in der Prozesskette	189
6.1.4	Statistische Balance	190
6.1.5	Gründe für physikalisch-informiertes, maschinelles Lernen.	190
6.2	Datenanreicherung	191
6.2.1	Optimierte Wahl der Vorverarbeitung	191
6.2.2	Expertenwissen über Datenobjekte	192
6.2.3	Automatische Optimierung der Datenanreicherung bei binärer Klassifizierung	193
6.3	Einbettung von analytischen Ausdrücken in Neuronale Netze	194
6.3.1	Automatische Ableitung.	195
6.3.2	Einbinden einer Funktion als Optimierungsziel	196
6.3.3	Integration einer Funktion	198
6.3.4	Integration einer gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung	202
6.4	Stochastische Methoden zur Integration von Unsicherheit in den Lernprozess	204
6.4.1	Berücksichtigung von Unsicherheit in den Eingangsdaten	204
6.4.2	Quantifikation der Unsicherheit aus den gelernten Ergebnissen	207
6.4.3	Stochastische Anreicherung von Zielvariablen	209
6.4.4	Mixture-Density-Netze (MDN)	212
6.5	Prozesskorridore	216
6.5.1	Wahrscheinlichkeitsdichten durch 2D-Histogramme	216
	Literatur.	222
7	Erklärbarkeit	223
7.1	Semantische Ordnungsstrukturen zur Digitalisierung von Bedeutung	223
7.1.1	Semantik	224
7.1.2	Übersicht über die semantischen Konzepte	225
7.1.3	Alphabete und Wörter	226
7.1.4	Vokabular	227
7.1.5	Synonymer Ring	227
7.1.6	Taxonomien	229
7.1.7	Ontologien	232
7.2	Sensitivitätsanalyse	235
7.2.1	Störungstheoretischer Ansatz.	236
7.2.2	Störung eines Entscheidungsbaum	237

- 7.3 Erklärbares maschinelles Lernen 238
 - 7.3.1 Ebenen der Erklärbarkeit 239
 - 7.3.2 Praktische Umsetzung von Erklärbarkeit 241
 - 7.3.3 Kausalität in der technischen Prozesskette 245
 - 7.3.4 Geschäftsverständnis 247
- Literatur 248

- Anhang A: Grundlagen in Python 249**
- Stichwortverzeichnis 257**

Abkürzungsverzeichnis

AE	Autoencoder
DGL	Differentialgleichung
IG	Information Gain, Informationsgewinn
KNN	Künstliches Neuronales Netz
LSTM	Long Shortterm Memory, langes Kurzzeitgedächtnis
MDN	Mixture-Density-Netzwerk, ein neuronales Netz mit gemischten Dichten
MLP	Multi-Layer Perceptron, ein mehrschichtiges, vollständig verknüpftes Netz
NN	Neuronales Netz
PCA	Principal Component Analysis, Hauptkomponentenanalyse
PINN	Physikalisch-informiertes neuronales Netz
Xtest	Testdaten der Eingangsvariablen
Xtrain	Trainingsdaten der Eingangsvariablen
Ytest	Testdaten der Label/Zielvariablen
Ytrain	Trainingsdaten der Label/Zielvariablen