

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Konnektionistische Systeme	1
1.2	Verarbeitung hochdimensionaler Datensätze	2
1.3	Multivariate Datenverarbeitung	3
1.4	Maschinelles Lernen	4
1.5	Entwicklungstendenzen der Lernstrategien	6
1.6	Notwendige Eigenschaften	8
1.6.1	Ursache und Wirkung	8
1.6.2	Voraussetzungen zur Realisierung der Modelle	9
1.7	Gestaltung des Verarbeitungsprozesses	10
1.7.1	Grenzen des Maschinenlernens	10
1.7.2	Notation und Beispiele	10
1.8	Die drei Hauptteile dieses Buches	11
1.8.1	Kapitelübersicht	11
1.8.2	Problemfelder und Fragen zum Thema maschinelles Lernen	15
	Literatur	16
2	Methoden des maschinellen Lernens	17
2.1	Verschiedene Methoden	17
2.2	Freiheitsgrade und Trainingsphase	19
2.3	Themen zur Gestaltung eines adaptiven Systems	20
2.4	Künstliche neuronale Netze	22
2.5	Weiterentwickelte künstliche neuronale Netze	23
2.6	Stützvektormethoden	26
2.7	Dimensionsreduktion	29
2.8	Modularisierte künstliche neuronale Netze	29
2.9	Kombinierte künstliche neuronale Netze	30
	Literatur	32

3	Anforderungen zur Gestaltung eines adaptiven Systems	37
3.1	Gestaltung neuer Verfahren	37
3.2	Konzeptionelle Anforderungen	39
3.3	Trennung von Trainings- und Arbeitseinheit	41
3.3.1	Trainingsphase	42
3.3.2	Arbeitsphase	43
	Literatur	44
4	Ein Klassifizierungsverfahren im Überblick	45
4.1	Arbeitsteilung und Modularisierung	45
4.2	Realisierungsaspekte	48
4.3	Anforderungen an die Trainings- und Arbeitseinheit	48
4.4	Organisationsstruktur	49
	Literatur	51
5	Messtechnik und maschinelles Lernen	53
5.1	Automatische Messsysteme	53
5.2	Messfehler	54
5.2.1	Fehlerursachen	55
5.2.2	Erfassung von Messdaten	57
5.2.3	Messsystem mit Störquellen	57
5.2.4	Statische Messfehler	60
5.2.5	Dynamische Messfehler	61
5.3	Quantitative Erfassung der Messfehler	63
5.3.1	Auswirkung der verschiedenen Arten von Messfehlern	64
5.3.2	Wahrscheinlichkeit und Varianz	64
5.3.3	Umfang und Verteilung der Messwerte	67
5.4	Messfehler bei verschiedenen Aufgaben	69
5.5	Limitierte Online-Anpassung	70
5.6	Messsignalüberwachung	70
	Literatur	71
6	Metrik für multidimensionale Daten	73
6.1	Abstandsmaße	73
6.1.1	Datenpunkte im Merkmalsraum	74
6.1.2	Nächste Nachbarpunkte	74
6.1.3	Distanzmetriken	75
6.1.4	Geometrie n-dimensionaler Räume	78
6.1.5	Metrische Eigenschaften	80
6.1.6	Abstandsmessung und Anzahl der Dimensionen	80
6.1.7	Kontrasterhöhung und Rauschen	83
6.2	Berechnungsaufwand und Speicherplatzbedarf	83

6.3	Vergleich der Metriken	85
6.4	Metrik für das Nächste-Nachbarn-Verfahren	86
6.4.1	Metrik für multidimensionale Daten beim NN-Verfahren	88
6.4.2	Zahlenbereich des Punkterraums	89
	Literatur	91
7	Glättung einer Mannigfaltigkeit	93
7.1	Indizierung und Ordnung der Trainingsdaten	94
7.2	Besonderheiten bei spektralen Methoden	95
7.3	Vorgaben zur Glättung	96
7.4	Krümmung und Komplexität	96
7.5	Füllwertmethode	97
7.5.1	Einprägen der maximal zulässigen Krümmung	98
7.5.2	Anzahl der nächsten Nachbarpunkte	99
7.5.3	Feinstruktur des Modells.....	101
7.6	Bereiche der nächsten Nachbarschaft der Datenpunkte	102
7.6.1	Verbinden von Datenmengen	103
7.6.2	Verbindung zu einer Mannigfaltigkeit.....	103
7.6.3	Mono- und Multiklassenverarbeitung	104
7.6.4	Rücktransformation und Transformationsmatrix	105
7.6.5	Überlappende Bereiche	106
7.6.6	Zugehörigkeitswert.....	107
	Literatur	108
8	Distanz- und Ähnlichkeitsmaße	111
8.1	Zugehörigkeitsgrad und Ähnlichkeitsmessung	111
8.1.1	Skalenniveau	112
8.1.2	Voraussetzungen zur Nutzung von Ähnlichkeitsmaßen	112
8.1.3	Speicherung der Charakteristika.....	113
8.1.4	Definition von Ähnlichkeit.....	113
8.2	Rezeptiver Bereich	114
8.2.1	Kontur einer Mannigfaltigkeit	115
8.2.2	Fester Grenzwert der Zugehörigkeit	116
8.2.3	Variabler Grenzwert der Zugehörigkeit	119
8.2.4	Zugehörigkeitsgrad.....	120
8.3	Aggregation der Charakteristika	122
8.4	Richtungskosinus und Richtungskomponenten	122
8.5	Richtungsmaße	124
8.5.1	Richtungskosinus im euklidischen Raum	124
8.5.2	Richtungskomponenten im L^1 -Raum	125
8.5.3	Richtungsänderung im L^1 -Raum	125
8.6	Dominanz der größten Koeffizienten	127

8.6.1	Vermeidung störender Komponenten	127
8.6.2	Gütekriterien für Ähnlichkeitsmaße	128
8.7	Verschiedene Darstellungsarten der Eingangsdaten im Merkmalsraum	129
8.8	Dominante Komponenten und Bereichsgrenzen einer Mannigfaltigkeit	130
8.8.1	Ähnlichkeitsprüfung	130
8.8.2	Mehrstufiger Zugehörigkeitstest	132
	Literatur	133
9	Wavelet-Transformation	135
9.1	Allgemeine Definition	136
9.1.1	Distanzerhaltung	136
9.1.2	Genutzte Eigenschaft der Wavelet-Transformation	137
9.1.3	Wavelet-, Fourier- und andere Transformationen	138
9.2	Wavelet-Funktionen	138
9.3	Haar-Wavelet	140
9.4	Perfekte Lokalität	140
9.5	Auswahl von Wavelet-Koeffizienten	141
9.6	Multiklassenmannigfaltigkeit	142
9.7	Bildung eines Eingangsvektors	142
	Literatur	145
10	Nächste-Nachbarn-Verfahren und Dimensionsreduktion	147
10.1	Nächste-Nachbarn-Verfahren	148
10.1.1	Dimensionsreduktion	149
10.1.2	Favorisiertes Verfahren zur Dimensionsreduktion	151
10.2	Voraussetzungen und Vorteile der Dimensionsreduktion	151
10.3	Anwendung spektraler Methoden	154
10.3.1	Innere Dimensionalität	154
10.3.2	Abfolge der Datenpunktpositionen auf der Referenzskala	155
10.4	Verschiedene Methoden	157
10.4.1	Varianten und Erweiterungen	157
10.4.2	Die Basismethoden	158
10.4.3	Grundsätzliche Arbeitsweise	161
10.4.4	Auftretende Probleme	165
10.5	Aufgabenbezogene Einsatzbedingungen	167
10.6	Vermeidung numerischer Instabilität	169
10.7	Spektrale Methoden zur Dimensionsreduktion	170
10.7.1	Schritt 1: Bestimmung der nächsten Nachbarpunkte	171
10.7.2	Schritt 2: Bestimmung der Rekonstruktionsgewichte	173

10.7.3	Schritt 3: Optimierung I, Normalisierung	174
10.7.4	Invarianz gegenüber Rotationen und Reskalierungen	175
10.7.5	Schritt 4: Optimierung II, Eigenwertanalyse	176
10.7.6	Schritt 5: Rekonstruktion im niedrigdimensionalen Raum	179
	Literatur	183
11	Modellbildung	187
11.1	Modellkomplexität	187
11.2	Bedingungen und Phasen der Modellerstellung	188
11.3	Der Bias-Varianz-Konflikt	189
11.4	Auswirkungen bei der Modellbildung	190
11.4.1	Strukturierung eines Modells	191
11.4.2	Bias-Varianz-Analyse	193
11.4.3	Einstellung der Modellkomplexität	194
11.5	Test eines Modells	195
11.5.1	Validierung	195
11.5.2	Kreuzvalidierung	196
11.6	Komplexe Modelle	198
11.7	Gruppenbildung	199
	Literatur	201
12	Datenvorverarbeitung	203
12.1	Anforderungen an die Datenvorverarbeitung	203
12.1.1	Generalisierung um ein Ensemble von Erwartungswerten	205
12.1.2	Ermittlung der Messunsicherheit	208
12.2	Eindimensionale Datensätze	210
12.2.1	Begriffe, Verteilung, Testverfahren	210
12.2.2	Zuordnung, Signifikanzniveau und Varianz der Messdaten	212
12.3	Multidimensionale Datensätze	212
12.3.1	Reduzierung auf eine univariate Verteilung	213
12.3.2	Fehlereinflüsse und Struktur einer Mannigfaltigkeit	213
12.3.3	Manhattan-Distanz	215
12.3.4	Ordnen und Glätten der Daten	217
12.4	Schwellenwert zur Erkennung von Ausreißern	218
12.4.1	Ausreißertest	219
12.4.2	Bestimmung des Medians	219
12.4.3	Anweisungsliste zur Datenaufbereitung	220
12.4.4	Messwerte und multidimensionaler Median	222
12.4.5	Ausreißer entfernen	224
12.4.6	Doppel- oder nahezu gleiche Werte	225
12.4.7	Maximale Distanz zwischen den Datenpunkten	226

12.4.8	Lücken und Sprünge in einer Distanzliste ergänzen	227
12.4.9	Kennwerte des aufbereiteten Trainingsdatensatzes	227
12.5	Rezeptiven Bereich definieren	229
12.5.1	Anwendung des Verfahrens auf einen größeren Datensatz	230
12.5.2	Rezeptiver Bereich	230
12.6	Eindimensionale Referenzskala für alle Trainingsdatenpunkte	235
	Literatur	237
13	Merkmalsraum	239
13.1	Vorbereitung eines Trainingsdatensatzes	239
13.2	Transformation von Gruppendaten	240
	Literatur	243
14	Assoziationsraum	245
14.1	Optimierung eines Trainingsdatensatzes	245
14.1.1	Darstellung eines Merkmals mit Messwerten	247
14.1.2	Darstellung in Form von Wavelet-Koeffizienten	247
14.1.3	Darstellung in Form von Fourier-Koeffizienten	248
14.1.4	Darstellung in Form von Eigenwerten	250
14.2	Ermittlung von Rekonstruktionsgewichten	251
14.2.1	Rekonstruktionsgewichte in der Trainingsphase	251
14.2.2	Rekonstruktionsgewichte in der Arbeitsphase	251
14.2.3	Einstellung der Modellkomplexität durch Ausblendung	251
14.2.4	Einstellung der Modellkomplexität durch Mittelung	252
14.3	Rezeptive Bereiche zuordnen	253
14.3.1	Einzelne rezeptive Bereiche von Gruppen	255
14.3.2	Komplexer rezeptiver Bereich mehrerer Gruppen	255
14.3.3	Skalierung und Anpassung	255
14.3.4	Skalierung und Anpassung mit transformierten Daten	259
14.3.5	Skalierung und Anpassung direkter oder normierter Messwerte	259
14.3.6	Skalierung und Anpassung komplexer Eingangsdaten	259
14.4	Abbildungsfehler	259
14.4.1	Rekonstruktionsfehler im Assoziationsraum	259
14.4.2	Rekonstruktionsfehler im Darstellungsraum	260
14.4.3	Abbildungsgenauigkeit dimensionsreduzierter Daten	262
	Literatur	264
15	Darstellungsraum	265
15.1	Generalisierung im Darstellungsraum	266
15.1.1	Abbildungsgenauigkeit und Darstellung	266
15.1.2	Anpassung an die Form der Ausgangsfunktion	269

15.2	Klassifizierung	270
15.3	Ermittlung des Zugehörigkeitsgrades	270
15.3.1	Erkennung von Ausreißern bei einer Sensorfusion	272
15.3.2	Zuordnungsgrad klassifizierter Messdaten	274
15.4	Visualisierung der Messdaten	275
	Literatur	277
16	Diversitäre Messmethoden	279
16.1	Hybride Messstrukturen	280
16.2	Interpreteranweisungen zur Gestaltung der Auswertung	280
16.3	Verwaltung der Klassifizierungsergebnisse	281
16.4	Adaptives System zur Klassifizierung	281
16.5	Anwendungen	283
	Literatur	283
17	Simulation und Test	285
17.1	Codierung	285
17.1.1	Pseudocode des Moduls Trainingsphase	286
17.1.2	Pseudocode des Moduls Arbeitsphase	286
17.2	Simulation	286
17.2.1	Trainingsphase mit synthetischen Daten	287
17.2.2	Störeinflüsse	294
17.2.3	Hohe Rauschpegel	294
17.2.4	Ungleiche Anzahl der nächsten Nachbarn in Trainings- und Arbeitsphase	296
17.2.5	Abweichungen und Fehlertoleranzen	297
17.3	Interne Validierung	298
17.4	Externe Validierung	299
	Literatur	300
18	Hardware und Realisierung	301
18.1	Bausteine und Steuerungsstrukturen	301
18.2	Realisierung	303
18.2.1	Angabe von Rechenaufwand und Speicherplatzbedarf	303
18.2.2	Arbeitsteilung und Modularisierung bei Anwendungen	305
18.2.3	Aufwand in der Trainingsphase	305
18.2.4	Rechenkapazität und Software	313
18.2.5	Aufwand in der Arbeitsphase	313
18.2.6	Arbeitsphase bei voller Dimensionalität	315
18.2.7	Arbeitsphase bei reduzierter Dimensionalität	315
18.2.8	Klassifizierung	317
18.2.9	Fusion von Sensorsignalen	317

18.2.10	Realisierung mit Einzelplatzrechner	318
18.3	Arbeitsteilung und Entwicklungsumgebung	320
18.3.1	Kommunikation zwischen Lern- und Arbeitseinheit	321
18.3.2	Grafische Bedienoberfläche	321
18.3.3	Trainings- und Arbeitsdatensatz	322
18.3.4	Trainingsphase	322
18.3.5	Schritte in der Arbeitsphase	322
18.3.6	Speicherprogrammierbare Steuerungen	323
18.3.7	Realisierung mit Mikrokontroller	325
18.3.8	Realisierung mit komplexen Bausteinen	328
18.3.9	Realisierungsaspekte	329
Literatur	331
19	Datenanalyse	333
19.1	Grafik zur Darstellung von Klassifizierungsergebnissen	333
19.2	Bedeutung der Abkürzungen bei der ROC-Analyse	333
19.3	Monoklassen-Klassifizierung	335
19.4	Multiklassenklassifizierung	335
19.5	Erstellung und Anwendung von ROC-Kurven	335
19.6	Auswertung und Darstellung	337
19.6.1	Mono- und Multiklassen im Darstellungsraum	337
19.6.2	Multiklassenklassifizierung zur Auswertung von Zuständen	337
Literatur	338
20	Einsatzgebiete	339
20.1	Verschiedene Einsatzgebiete	339
20.2	Eigenständige Systeme	340
20.3	Gestaffelte Prozedur bei der Suche nach Zugehörigkeiten	340
20.4	Verbundsysteme	341
Literatur	342
21	Zusammenfassung der Ergebnisse	343
21.1	Anwendererfahrungen bei der Klassifizierung von Spektren	343
21.2	Ergebnisse und Vergleich	344
21.2.1	Künstliches neuronales Netz	345
21.2.2	Stütz-Vektor-Methode	345
21.2.3	Multivariate adaptive Einbettung	345
21.3	Erreichte Funktionalität	348
21.4	Beiträge zu aktuellen Entwicklungen	349
21.5	Vorteile	351
21.6	Ergebnisse	351

21.7	Zukünftige Entwicklungen.....	353
21.8	Abschließende Bemerkungen	354
	Literatur	355
Anhang A:	Datensatztabellen	357
Anhang B:	Untersuchungsergebnisse	359
Anhang C:	Mathematische Zusammenhänge	367
Anhang D:	Übersicht Künstliche Neuronale Netze und Dimensionsreduktionsverfahren	375
Anhang E:	Multiskalenanalyse	379
Anhang F:	Architekturen	387
Anhang G:	Komplexität	403
Anhang H:	Darstellung der Klassifizierungsergebnisse	407
Anhang I:	Anwendungen	409
Anhang J:	Spektroskopie	415
Anhang K:	Klassifizierungsbeispiele	421
Glossar		437
Hinweise		445
Stichwortverzeichnis		449