

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	7
1.6	Notwendige Eigenschaften	8
1.6.1	Ursache und Wirkung	9
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	11
1.8	Die drei Hauptteile dieses Buches	11
1.8.1	Kapitelübersicht	12
1.8.2	Problemfelder und Fragen zum Thema maschinelles Lernen	15
	Literatur	16
2	Methoden des maschinellen Lernens	19
2.1	Verschiedene Methoden	19
2.2	Freiheitsgrade und Trainingsphase	21
2.3	Themen zur Gestaltung eines adaptiven Systems	22
2.4	Künstliche neuronale Netze	25
2.5	Weiterentwickelte künstliche neuronale Netze	26
2.6	Stützvektormethoden	29
2.7	Dimensionsreduktion	32
2.8	Modularisierte künstliche neuronale Netze	32
2.9	Kombinierte künstliche neuronale Netze	33
	Literatur	35

3	Anforderungen zur Gestaltung eines adaptiven Systems	39
3.1	Gestaltung neuer Verfahren	39
3.2	Konzeptionelle Anforderungen	41
3.3	Trennung von Trainings- und Arbeitseinheit	43
3.3.1	Trainingsphase	44
3.3.2	Arbeitsphase	46
	Literatur	46
4	Ein Klassifizierungsverfahren im Überblick	49
4.1	Arbeitsteilung und Modularisierung	49
4.2	Realisierungsaspekte	52
4.3	Anforderungen an die Trainings- und Arbeitseinheit	52
4.4	Organisationsstruktur	53
	Literatur	56
5	Messtechnik und maschinelles Lernen	57
5.1	Automatische Messsysteme	57
5.2	Messfehler	58
5.2.1	Fehlerursachen	59
5.2.2	Erfassung von Messdaten	61
5.2.3	Messsystem mit Störquellen	61
5.2.4	Statische Messfehler	64
5.2.5	Dynamische Messfehler	65
5.3	Quantitative Erfassung der Messfehler	67
5.3.1	Auswirkung der verschiedenen Arten von Messfehlern	67
5.3.2	Wahrscheinlichkeit und Varianz	69
5.3.3	Umfang und Verteilung der Messwerte	72
5.4	Messfehler bei verschiedenen Aufgaben	74
5.5	Limitierte Onlineanpassung	75
5.6	Messsignalüberwachung	76
	Literatur	76
6	Metrik für multidimensionale Daten	79
6.1	Abstandsmaße	80
6.1.1	Datenpunkte im Merkmalsraum	80
6.1.2	Nächste Nachbarpunkte	81
6.1.3	Distanzmetriken	82
6.1.4	Geometrie n-dimensionaler Räume	84
6.1.5	Metrische Eigenschaften	86
6.1.6	Abstandsmessung und Anzahl der Dimensionen	87
6.1.7	Kontrasterhöhung und Rauschen	88
6.2	Berechnungsaufwand und Speicherplatzbedarf	90
6.3	Vergleich der Metriken	92

6.4	Metrik für das Nächste-Nachbarn-Verfahren	93
6.4.1	Metrik für multidimensionale Daten beim NN-Verfahren . . .	95
6.4.2	Zahlenbereich des Punkterraums.	97
	Literatur.	99
7	Glättung einer Mannigfaltigkeit	101
7.1	Indizierung und Ordnung der Trainingsdaten	102
7.2	Besonderheiten bei spektralen Methoden	103
7.3	Vorgaben zur Glättung	104
7.4	Krümmung und Komplexität	104
7.5	Füllwertmethode	106
7.5.1	Einprägen der maximal zulässigen Krümmung.	106
7.5.2	Anzahl der nächsten Nachbarpunkte	108
7.5.3	Feinstruktur des Modells	110
7.6	Bereiche der nächsten Nachbarschaft der Datenpunkte.	111
7.6.1	Verbinden von Datenmengen	111
7.6.2	Verbindung zu einer Mannigfaltigkeit	112
7.6.3	Mono- und Multiklassenverarbeitung	113
7.6.4	Rücktransformation und Transformationsmatrix.	114
7.6.5	Überlappende Bereiche	115
7.6.6	Zugehörigkeitswert	116
	Literatur.	117
8	Distanz- und Ähnlichkeitsmaße.	119
8.1	Zugehörigkeitsgrad und Ähnlichkeitsmessung	119
8.1.1	Skalenniveau	120
8.1.2	Voraussetzungen zur Nutzung von Ähnlichkeitsmaßen.	120
8.1.3	Speicherung der Charakteristika	121
8.1.4	Definition von Ähnlichkeit.	121
8.2	Rezeptiver Bereich.	122
8.2.1	Kontur einer Mannigfaltigkeit	123
8.2.2	Fester Grenzwert der Zugehörigkeit	125
8.2.3	Variabler Grenzwert der Zugehörigkeit.	127
8.2.4	Zugehörigkeitsgrad	128
8.3	Aggregation der Charakteristika	130
8.4	Richtungskosinus und Richtungskomponenten	132
8.5	Richtungsmaße.	132
8.5.1	Richtungskosinus im euklidischen Raum	132
8.5.2	Richtungskomponenten im L^1 -Raum.	133
8.5.3	Richtungsänderung im L^1 -Raum	134

8.6	Dominanz der größten Koeffizienten	135
8.6.1	Vermeidung störender Komponenten	136
8.6.2	Gütekriterien für Ähnlichkeitsmaße	136
8.7	Verschiedene Darstellungsarten der Eingangsdaten im Merkmalsraum	137
8.8	Dominante Komponenten und Bereichsgrenzen einer Mannigfaltigkeit	138
8.8.1	Ähnlichkeitsprüfung	140
8.8.2	Mehrstufiger Zugehörigkeitstest	140
	Literatur	141
9	Wavelet-Transformation	143
9.1	Allgemeine Definition	144
9.1.1	Distanzerhaltung	144
9.1.2	Genutzte Eigenschaft der Wavelet-Transformation	145
9.1.3	Wavelet-, Fourier- und andere Transformationen	146
9.2	Wavelet-Funktionen	147
9.3	Haar-Wavelet	148
9.4	Perfekte Lokalität	148
9.5	Auswahl von Wavelet-Koeffizienten	149
9.6	Multiklassenmannigfaltigkeit	150
9.7	Bildung eines Eingangsvektors	150
	Literatur	153
10	Nächste-Nachbarn-Verfahren und Dimensionsreduktion	155
10.1	Nächste-Nachbarn-Verfahren	156
10.1.1	Dimensionsreduktion	157
10.1.2	Favorisiertes Verfahren zur Dimensionsreduktion	160
10.2	Voraussetzungen und Vorteile der Dimensionsreduktion	160
10.3	Anwendung spektraler Methoden	163
10.3.1	Innere Dimensionalität	164
10.3.2	Abfolge der Datenpunktpositionen auf der Referenzskala . . .	165
10.4	Verschiedene Methoden	165
10.4.1	Varianten und Erweiterungen	166
10.4.2	Die Basismethoden	166
10.4.3	Grundsätzliche Arbeitsweise	169
10.4.4	Auftretende Probleme	173
10.5	Aufgabenbezogene Einsatzbedingungen	175
10.6	Vermeidung numerischer Instabilität	177
10.7	Spektrale Methoden zur Dimensionsreduktion	178
10.7.1	Schritt 1: Bestimmung der nächsten Nachbarpunkte	180
10.7.2	Schritt 2: Bestimmung der Rekonstruktionsgewichte	181

10.7.3	Schritt 3: Optimierung I, Normalisierung	182
10.7.4	Invarianz gegenüber Rotationen und Reskalierungen	183
10.7.5	Schritt 4: Optimierung II, Eigenwertanalyse	185
10.7.6	Schritt 5: Rekonstruktion im niedrigdimensionalen Raum	188
	Literatur	191
11	Modellbildung	197
11.1	Modellkomplexität	197
11.2	Bedingungen und Phasen der Modellerstellung	198
11.3	Der Bias-Varianz-Konflikt	199
11.4	Auswirkungen bei der Modellbildung	200
11.4.1	Strukturierung eines Modells	201
11.4.2	Bias-Varianz-Analyse	204
11.4.3	Einstellung der Modellkomplexität	205
11.5	Test eines Modells	205
11.5.1	Validierung	206
11.5.2	Kreuzvalidierung	207
11.5.3	Testablauf und Laufzeitkalkulation	207
11.6	Komplexe Modelle	208
11.7	Gruppenbildung	209
	Literatur	211
12	Datenvorverarbeitung	213
12.1	Anforderungen an die Datenvorverarbeitung	214
12.1.1	Generalisierung um ein Ensemble von Erwartungswerten	216
12.1.2	Ermittlung der Messunsicherheit	219
12.2	Eindimensionale Datensätze	220
12.2.1	Begriffe, Verteilung, Testverfahren	220
12.2.2	Zuordnung, Signifikanzniveau und Varianz der Messdaten	222
12.3	Multidimensionale Datensätze	223
12.3.1	Reduzierung auf eine univariate Verteilung	223
12.3.2	Fehlereinflüsse und Struktur einer Mannigfaltigkeit	224
12.3.3	Manhattan-Distanz	225
12.3.4	Ordnen und Glätten der Daten	227
12.4	Schwellenwert zur Erkennung von Ausreißern	229
12.4.1	Ausreißertest	229
12.4.2	Bestimmung des Medians	230
12.4.3	Anweisungsliste zur Datenaufbereitung	230
12.4.4	Messwerte und multidimensionaler Median	234
12.4.5	Ausreißer entfernen	234
12.4.6	Doppel- oder nahezu gleiche Werte (Ties) entfernen	236
12.4.7	Maximale Distanz zwischen den Datenpunkten	237

12.4.8	Lücken und Sprünge in einer Distanzliste ergänzen	237
12.4.9	Kennwerte des aufbereiteten Trainingsdatensatzes	238
12.5	Rezeptiven Bereich definieren	239
12.5.1	Anwendung des Verfahrens auf einen größeren Datensatz . . .	240
12.5.2	Rezeptiver Bereich	241
12.6	Eindimensionale Referenzskala für alle Trainingsdatenpunkte	246
	Literatur.	248
13	Merkmalsraum	251
13.1	Vorbereitung eines Trainingsdatensatzes	251
13.2	Transformation von Gruppendaten	252
	Literatur.	255
14	Assoziationsraum	257
14.1	Optimierung eines Trainingsdatensatzes	257
14.1.1	Darstellung eines Merkmals mit Messwerten	259
14.1.2	Darstellung in Form von Wavelet-Koeffizienten	259
14.1.3	Darstellung in Form von Fourier-Koeffizienten.	261
14.1.4	Darstellung in Form von Eigenwerten	261
14.2	Ermittlung von Rekonstruktionsgewichten	263
14.2.1	Rekonstruktionsgewichte in der Trainingsphase	263
14.2.2	Rekonstruktionsgewichte in der Arbeitsphase	263
14.2.3	Einstellung der Modellkomplexität durch Ausblendung	264
14.2.4	Einstellung der Modellkomplexität durch Mittelung	265
14.3	Rezeptive Bereiche zuordnen.	265
14.3.1	Einzelne rezeptive Bereiche von Gruppen	266
14.3.2	Komplexer rezeptiver Bereich mehrerer Gruppen	268
14.3.3	Skalierung und Anpassung	268
14.3.4	Skalierung und Anpassung mit transformierten Daten	271
14.3.5	Skalierung und Anpassung direkter oder normierter Messwerte	271
14.3.6	Skalierung und Anpassung komplexer Eingangsdaten	272
14.4	Abbildungsfehler	272
14.4.1	Rekonstruktionsfehler im Assoziationsraum	272
14.4.2	Rekonstruktionsfehler im Darstellungsraum	273
14.4.3	Abbildungsgenauigkeit dimensionsreduzierter Daten	275
	Literatur.	277
15	Darstellungsraum	279
15.1	Generalisierung im Darstellungsraum	280
15.1.1	Abbildungsgenauigkeit und Darstellung	281
15.1.2	Anpassung an die Form der Ausgangsfunktion	283

15.2	Klassifizierung	285
15.3	Ermittlung des Zugehörigkeitsgrades	285
15.3.1	Erkennung von Ausreißern bei einer Sensorfusion	287
15.3.2	Zuordnungsgrad klassifizierter Messdaten	288
15.4	Visualisierung der Messdaten	291
	Literatur	292
16	Diversitäre Messmethoden	293
16.1	Hybride Messstrukturen	294
16.2	Interpreteranweisungen zur Gestaltung der Auswertung	295
16.3	Verwaltung der Klassifizierungsergebnisse	295
16.4	Adaptives System zur Klassifizierung	295
16.5	Anwendungen	297
	Literatur	297
17	Simulation und Test	299
17.1	Codierung	300
17.1.1	Pseudocode des Moduls Trainingsphase	300
17.1.2	Pseudocode des Moduls Arbeitsphase	300
17.2	Simulation	300
17.2.1	Trainingsphase mit synthetischen Daten	302
17.2.2	Störeinflüsse	307
17.2.3	Hohe Rauschpegel	308
17.2.4	Ungleiche Anzahl der nächsten Nachbarn in Trainings- und Arbeitsphase	309
17.2.5	Abweichungen und Fehlertoleranzen	311
17.3	Interne Validierung	313
17.4	Externe Validierung	313
	Literatur	314
18	Hardware und Realisierung	315
18.1	Bausteine und Steuerungsstrukturen	315
18.2	Realisierung	317
18.2.1	Angabe von Rechenaufwand und Speicherplatzbedarf	318
18.2.2	Arbeitsteilung und Modularisierung bei Anwendungen	318
18.2.3	Aufwand in der Trainingsphase	318
18.2.4	Rechenkapazität und Software	331
18.2.5	Aufwand in der Arbeitsphase	331
18.2.6	Arbeitsphase bei voller Dimensionalität	333
18.2.7	Arbeitsphase bei reduzierter Dimensionalität	333
18.2.8	Klassifizierung	335
18.2.9	Fusion von Sensorsignalen	336
18.2.10	Realisierung mit Einzelplatzrechner	337

18.3	Arbeitsteilung und Entwicklungsumgebung	339
18.3.1	Kommunikation zwischen Lern- und Arbeitseinheit	340
18.3.2	Grafische Bedienoberfläche	341
18.3.3	Trainings- und Arbeitsdatensatz	341
18.3.4	Trainingsphase	341
18.3.5	Schritte in der Arbeitsphase	341
18.3.6	Speicherprogrammierbare Steuerungen	342
18.3.7	Realisierung mit Mikrocontroller	344
18.3.8	Realisierung mit komplexen Bausteinen	347
18.3.9	Realisierungsaspekte	348
	Literatur	351
19	Datenanalyse	353
19.1	Grafik zur Darstellung von Klassifizierungsergebnissen	353
19.2	Bedeutung der Abkürzungen bei der ROC-Analyse	353
19.3	Monoklassenklassifizierung	355
19.4	Multiklassenklassifizierung	355
19.5	Erstellung und Anwendung von ROC-Kurven	356
19.6	Auswertung und Darstellung	357
19.6.1	Mono- und Multiklassen im Darstellungsraum	358
19.6.2	Multiklassenklassifizierung zur Auswertung von Zuständen	358
	Literatur	359
20	Einsatzgebiete	361
20.1	Verschiedene Einsatzgebiete	362
20.2	Eigenständige Systeme	362
20.3	Gestaffelte Prozedur bei der Suche nach Zugehörigkeiten	362
20.4	Verbundsysteme	364
	Literatur	364
21	Zusammenfassung der Ergebnisse	365
21.1	Anwendererfahrungen bei der Klassifizierung von Spektren	365
21.2	Ergebnisse und Vergleich	366
21.2.1	Künstliches neuronales Netz	367
21.2.2	Stütz-Vektor-Methode	367
21.2.3	Multivariate adaptive Einbettung	367
21.3	Erreichte Funktionalität	370
21.4	Beiträge zu aktuellen Entwicklungen	371
21.5	Vorteile	373
21.6	Ergebnisse	373
21.7	Zukünftige Entwicklungen	375
21.8	Abschließende Bemerkungen	376
	Literatur	377

Anhang A: Datensatztabellen	379
Anhang B: Untersuchungsergebnisse	383
Anhang C: Mathematische Zusammenhänge	391
Anhang D: Übersicht Künstliche Neuronale Netze und Dimensionsreduktionsverfahren	399
Anhang E: Multiskalenanalyse	403
Anhang F: Architekturen	411
Anhang G: Komplexität	429
Anhang H: Darstellung der Klassifizierungsergebnisse	433
Anhang I: Anwendungen	435
Anhang J: Spektroskopie	441
Anhang K: Klassifizierungsbeispiele	447
Anhang L: Glossar	463
Anhang M: Hinweise	471
Stichwortverzeichnis	475