

Einsatz maschineller Lernalgorithmen zur  
mikromagnetischen Materialcharakterisierung

Dissertation  
zur Erlangung des Grades  
des Doktors der Ingenieurwissenschaften  
der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät  
der Universität des Saarlandes

von  
Sargon Youssef, M.Sc.

Saarbrücken  
2021

**Tag des Kolloquiums:** 17. Dezember 2021

**Dekan:** Prof. Dr. Jörn Eric Walter

**Berichterstatter:** Prof. Dr. Andreas Schütze  
Prof. Dr.-Ing. Dirk Bähre

**Akad. Mitglied:** Dr.-Ing. Dominik Britz

**Vorsitz:** Prof. Dr.-Ing. Georg Frey

# Zusammenfassung

Seit Mitte der 80er Jahre werden am Fraunhofer-Institut für Zerstörungsfreie Prüfverfahren IZFP Methoden zur magnetischen Charakterisierung mechanischer Zielgrößen entwickelt. Eine Herausforderung ist dabei stets die Überlagerung verschiedener Einflussfaktoren, die zu Mehrdeutigkeiten in der Ausprägung der magnetischen Merkmale führt. Eine umfassende Referenzierung dieser Einflüsse ist häufig aus werkstoffphysikalischen oder wirtschaftlichen Gründen nicht möglich, wodurch das Potential zur Vorhersage dieser mechanischen Zielgrößen oft nicht voll ausgeschöpft wird. Durch eine anwendungsspezifische Experimentplanung in Kombination mit einer multivariaten Betrachtung der verfügbaren Messinformation können diese Vorhersagen signifikant verbessert werden. Die steigende Popularität maschineller Lernalgorithmen hat dabei den Zugang dieser multivariater Analysemethoden in die Breite der Ingenieurwissenschaften ermöglicht. Dadurch ergibt sich zwangsläufig der Bedarf nach einem methodischen Ansatz zur Datenauswertung, da die vielen Freiheitsgrade in der Experimentplanung und die Auswahl der verfügbaren maschinellen Lernalgorithmen einen wesentlichen Einfluss auf die Vorhersage der Zielgrößen haben.

In dieser Arbeit wird ein methodischer Ansatz zur Analyse mehrdimensionaler Merkmalsräume zur Materialcharakterisierung an dem im Rahmen dieser Arbeit eingesetzten 3MA-X8-System vorgestellt und anhand von praxisnahen Anwendungen zur mikromagnetischen Materialcharakterisierung evaluiert.



# Abstract

Since the middle of the 80s, Fraunhofer Institute for Nondestructive Testing IZFP develops methods for the magnetic characterization of mechanical properties. A challenge in this context is always the superimposition of various influencing factors, which leads to ambiguities in the expression of the magnetic features. A comprehensive referencing of these influences is often not possible due to physical or economic reasons, which leads to the fact that the potential for the prediction of these mechanical properties is often not fully exploited. By using application-specific design of experiments in combination with a multivariate analysis of the available measurement information, these predictions can be improved significantly. In this context, the increasing popularity of machine learning algorithms has enabled the access of these multivariate analysis methods into a wide field across all engineering disciplines. Thereby, the need for a methodological approach for data evaluation arises inevitably, due to the large number of degrees of freedom in the design of experiments and the choice of the available machine learning algorithms, which have a significant impact on the prediction of the targets.

In this work, a methodological approach to the analysis of multidimensional feature spaces for materials characterization is presented on the 3MA-X8 system used in this work and evaluated by means of practical applications for micromagnetic materials characterization.



# Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. rer. nat. Andreas Schütze bedanken, der es mir ermöglicht hat, die vorliegende Arbeit als externer Doktorand am Lehrstuhl für Messtechnik zu schreiben und mir stets mit seiner Expertise sowie den vielen fachlichen und persönlichen Impulsen und Diskussionen zur Seite stand.

Ich möchte mich sehr bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Dirk Bähre für die Übernahme des Zweitgutachtens bedanken.

Ganz besonders danken möchte ich auch der Wegbegleiterin und den Wegbegleitern Nikhitha Rallabandi, Amir Youssef, Cyril Zimmer, Kevin Schmitz, Simon Herter, Sascha Thieltges, Zeeshan Khan Suri, Mohammed Elzatma, Björn Schaaf, Arno Müller, Lukas Lauck und Maurice Vincon, die ich unter anderem in ihren Projekt- bzw. Abschlussarbeiten betreuen und begleiten durfte, sowie Sergey Pushkarev, Martin Schuppmann, Philipp Stopp und Hendrik Theado für die Zeit in unseren gemeinsamen Projekten. Diese Unterstützung und die vielen wertvollen Anregungen und Diskussionen haben maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Gleiches gilt für externe Wegbegleiter wie Gerald Schneibel, Sven Lutter, Dr. rer. nat. Olaf Stawicki, Patrick Zenner, Christian Eichheimer, für die unfassbar wichtigen Impulse und Anregungen in unseren gemeinsamen Projekten. Ich möchte mich beim Fraunhofer-Institut für Zerstörungsfreie Prüfverfahren IZFP für die Möglichkeit bedanken, engagierten Mitarbeitenden mit Verantwortungsbewusstsein den zum Forschen notwendigen Raum zur Entfaltung zu bieten. Vielen Dank Melanie Kopp, Dr.-Ing. Madalina Rabung, Christopher Stumm, Fabian Weber, Michael Becker, Dr.-Ing. Sarah Fischer, Katharina Bollmann, Guisepppe Di Gregorio, Dirk Henn, Sabine Poitdevin-Burbes, Sabine Komes, Christine Hegerfeld-Sauber, Christoph Weingard, Patrick Jäckel, Jörg Schuchhardt, Christoph Weingard, Christoph Weber, Dr.-Ing. Meisam Amiri, Miriam Weikert-Müller, Rosie Bettinger, Martin Kurras, Wolfgang Schäfer, Dr. rer. nat. Lothar Schäfer und viele mehr für die stets offenen Türen und Ohren. Vielen Dank Dr.-Ing. Klaus Zielasko und Oliver Sandmeyer für die redaktionelle Korrektur dieser Arbeit.

Abschließend danke ich von Herzen meiner Mutter, meinem Vater, meiner Schwester, meinem Bruder und dem Rest meiner lieben Familie für die Unterstützung und die Geduld. Sie alle haben mir zu jeder Zeit den Rücken gestärkt und mich stets ermuntert, nie aufzugeben.





## Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis .....	A
Abbildungsverzeichnis .....	B
1 Einleitung.....	1
2 Ausgangssituation und Motivation .....	3
3 Zielsetzung und Konzept .....	9
4 Grundlagen .....	11
4.1 Magnetische Materialcharakterisierung.....	11
4.2 Maschinelles Lernen.....	22
5 Methodik zur Analyse mehrdimensionaler Merkmalsräume unter Einsatz maschineller Lernalgorithmen am Beispiel der zerstörungsfreien Materialcharakterisierung .....	57
5.1 Eingangsmerkmalsraum .....	58
5.2 Datenaufnahme und Datenbasis .....	59
5.3 Merkmalsvorverarbeitung.....	60
5.4 Modellbildung (Klassifikation, Regression).....	61
5.5 Modellbewertung .....	61
5.6 Polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums .....	61
5.7 Ablaufdiagramm .....	62
6 Materialidentifikation und Liftoffbestimmung.....	65
6.1 Einführung .....	65
6.2 Experiment.....	65
6.3 Liftoffbestimmung .....	67
6.4 Materialidentifikation .....	74
6.5 Zusammenfassung und Diskussion.....	80
7 Materialidentifikation und Spannungsbestimmung.....	85
7.1 Einführung .....	85
7.2 Experiment.....	85
7.3 Spannungsbestimmung .....	88
7.4 Materialidentifikation .....	95
7.5 Zusammenfassung und Diskussion.....	99
8 Mikromagnetische Detektion von Hardspots in Grobblechen.....	101
8.1 Einführung .....	101
8.2 Experiment.....	102
8.3 Hardspotdetektion.....	103
8.4 Vergleich zum bisherigen Stand der Technik.....	105
8.5 Einsatz unüberwachter maschineller Lernalgorithmen zur Hardspotdetektion.....	115
8.6 Datensynthese .....	117

8.7	Zusammenfassung und Diskussion.....	120
9	Verfahrenserweiterung 2MO .....	125
9.1	Einführung .....	125
9.2	Experiment.....	126
9.3	Kraftbestimmung mit dem 2MO-System .....	128
9.4	Zusammenfassung und Diskussion.....	131
10	Zusammenfassung .....	133
11	Ausblick.....	137
12	Epilog.....	141
13	Literatur .....	143

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Subjektiv identifizierte Merkmale der bisherigen Merkmalsextraktion des 3MA-X8-Verfahrens .....	18
Tabelle 2: Teilübersicht der in scikit-learn verfügbaren Algorithmen zur Dimensionsreduktion, Klassifikation und Regression .....	25
Tabelle 3: $R^2$ und RMSE für Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen Merkmalsraum für ML-R (links), SV-R (Mitte links), MLP-R (Mitte rechts) und für ML-R des automatisiert extrahierten Merkmalsraum (rechts) .....	51

# Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Magnetische Hysterese mit Neukurve (gestrichelte Linie) und relevante magnetische Merkmale (Koerzitivfeldstärke $H_C$ , magnetische Remanenzflussdichte $B_R$ und magnetische Sättigungsflussdichte $B_S$ ) .....	11
Abbildung 2: Magnetische Hysterese eines mechanisch weichen (grün) und eines mechanisch harten Werkstoffs (links) und exemplarische Korrelation zwischen der Koerzitivfeldstärke $H_C$ und der mechanischen Härte (rechts) .....	13
Abbildung 3: 3MA-X8-Prüfkopf schematisch (links) und real in verschiedenen Bauformen (rechts).....	15
Abbildung 4: Magnetisierungsspannung $V_{mag}$ (links) und Magnetisierungsstrom $I_{mag}$ (rechts) [24].....	16
Abbildung 5: Zeitlicher Verlauf von Realteil (links) und Imaginärteil (rechts) der Impedanz $Z$ der Spule [24].....	17
Abbildung 6: Werkstoffabhängigkeit der Impedanz $Z$ nach Real- und Imaginärteil (links) und der qualitativen Überlagerungspermeabilität $dZ$ über $V_{mag}$ (rechts) 19	
Abbildung 7: Univariate Betrachtung von zwei Merkmalen.....	22
Abbildung 8: Multivariate Betrachtung von zwei Merkmalen (links keine eindeutige Trennung der Zustände, rechts eindeutige Trennung der Zustände).....	23
Abbildung 9: Rotation (links) und Projektion der Daten auf Merkmal 1' (rechts) .....	24
Abbildung 10: Beispiel einer Konfusionsmatrix mit korrekt (grün) und falsch (rot) klassifizierten Messungen .....	28
Abbildung 11: Vergleich gruppen- und intervallbasierte Datenaufnahme.....	30
Abbildung 12: Grobblechsegment mit drei nach der Entfernung der Zunderschicht induktiv eingebrachten Hardspots (links) und schematische Darstellung der Messung (rechts) .....	32
Abbildung 13: 21-dimensionaler 3MA-X8-Merkmalraum an zwei Grobblechsegmenten (links und rechts) mit jeweils drei künstlich eingebrachten Hardspots .....	33
Abbildung 14: Sekundärmerkmalsraum nach der Extraktion von 21 Hauptkomponenten für das zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendeten Grobblechsegment.....	34
Abbildung 15: Sekundärmerkmalsraum nach der Extraktion von fünf Hauptkomponenten für das zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendete Grobblechsegment .....	38
Abbildung 16: Hardspot-IC an dem zum Trainieren verwendeten Grobblechsegment nach Extraktion von einer (oben links), drei (oben rechts), fünf (unten links) und 21 (unten rechts) unabhängigen Merkmalen mittels ICA. ....	38
Abbildung 17: Hardspot-IC an dem zum Validieren verwendeten Grobblechsegment nach Extraktion von einer (oben links), drei (oben rechts), fünf (unten links) und 21 (unten rechts) unabhängigen Merkmalen.....	39

Abbildung 18: Sekundärmerkmalsraum nach der Extraktion von 21 unabhängigen Merkmalen für das zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendete Grobblechsegment.....	40
Abbildung 19: Sekundärmerkmalsraum nach der Extraktion von fünf unabhängigen Merkmalen für das zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendete Grobblechsegment.....	40
Abbildung 20: Transformierte kanonische Variable (links) und Klassifikationsergebnis (rechts).....	44
Abbildung 21: Eingespannte Probe mit aufgesetztem 3MA-X8-Sensor (links) und ML-R Abbildung der Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalsraums (rechts).....	46
Abbildung 22: $R^2$ (links) und RMSE (rechts) der Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalsraum für SV-R bei Variation von C.....	47
Abbildung 23: $R^2$ (links) und RMSE (rechts) der Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen Merkmalsraum für MLP-R unter Variation des Hyperparameter Alpha im Hidden Layer.....	48
Abbildung 24: : $R^2$ (links) und RMSE (rechts) der Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen Merkmalsraum für SV-R unter Variation des Hyperparameters Alpha.....	49
Abbildung 25: Vergleich der multivariaten linearen Regression (links) und der Kernel-Ridge-Regression mit radialer Basisfunktion als Kernel (rechts) auf Basis des automatisiert extrahierten Merkmalsraum .....	50
Abbildung 26: Fehler der Trainingsdaten (blau) und der Testdaten (rot) zum ermittelten Modell über der Komplexität des Gesamtsystems.....	53
Abbildung 27: Unterangepasstes (links) und überangepasstes (rechts) System .....	54
Abbildung 28: Schematisches Ablaufdiagramm der Methodik .....	63
Abbildung 29: Aufteilung des Datensatzes nach Liftoff (links) und Materialkategorie (rechts).....	66
Abbildung 30: $R^2$ (links) und RMSE (rechts) für Trainings- und Testdaten.....	68
Abbildung 31: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (links RMSE, rechts $R^2$ ).....	69
Abbildung 32: Ergebnis der LDA (links) und der MLR (rechts).....	70
Abbildung 33: $R^2$ und RMSE für Trainings- und Testdaten in Abhängigkeit der Anzahl der Stützstellen.....	71
Abbildung 34: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (links $R^2$ , rechts RMSE) .....	71
Abbildung 35: Ergebnis der LDA (links) und der MLR (rechts).....	72
Abbildung 36: Erste und zweite kanonische Variable als Ergebnis der linearen Diskriminanzanalyse (oben links fünf Folds, rechts zwei Folds) auf Basis des 2047-dimensionalen Merkmalsraum mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten und Konfusionsmatrizen für die Testdaten mit jeweils einer Fehlklassifizierung (unten links fünf Folds, rechts zwei Folds) .....	75

---

Abbildung 37: Erste und zweite kanonische Variable als Ergebnis der linearen Diskriminanzanalyse nach polynomieller Erweiterung des 2047-dimensionalen Merkmalsraums mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links fünf Folds, rechts zwei Folds).....	76
Abbildung 38: Konfusionsmatrizen der Testdaten nach stratifizierter Aufteilung (links fünf Folds, rechts zwei Folds).....	77
Abbildung 39: Erste und zweite kanonische Variable als Ergebnis der linearen Diskriminanzanalyse auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links fünf Folds, rechts zwei Folds) .....	78
Abbildung 40: Erste und zweite kanonische Variable als Ergebnis der linearen Diskriminanzanalyse nach polynomieller Erweiterung des 21-dimensionalen Merkmalsraums mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links fünf Folds, rechts zwei Folds).....	79
Abbildung 41: Korrekt klassifizierte Materialzustände über Grad des Polynoms zur Erweiterung des Merkmalsraums.....	79
Abbildung 42: Vergleich der Vorhersagequalität nach Applizierung der Methodik (oben links), nach Hinzunahme von Hintergrundwissen (oben rechts) und der Kernel-Ridge-Regression als Alternative zur Methodik (unten) .....	82
Abbildung 43: Rohrsegmente aus 22NiMoCr3-7 (links) und 20MnMoNi5-5 (rechts) [68].....	86
Abbildung 44: Experimenteller Aufbau .....	86
Abbildung 45: Spannungs-Dehnungs-Kurve für 22NiMoCr3-7 (links) und 20MnMoNi5-5 (rechts).....	87
Abbildung 46: An Probendurchmesser adaptierter 3MA-X8-Sensor.....	88
Abbildung 47: $R^2$ (links) und RMSE (rechts) in Abhängigkeit der Anzahl der Stützstellen .....	90
Abbildung 48: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (oben links $R^2$ , oben rechts RMSE), Ergebnis der MLR nach polynomieller Erweiterung mit Polynomgrad drei (unten) .....	91
Abbildung 49: $R^2$ (links) und RMSE (rechts) in Abhängigkeit der Anzahl der Stützstellen .....	92
Abbildung 50: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (links $R^2$ , rechts RMSE) .....	93
Abbildung 51: Ergebnis der MLR vor (links) und nach polynomieller Erweiterung mit Polynomgrad elf (rechts).....	94
Abbildung 52: Erste und zweite kanonische Variable auf Basis des 1747-dimensionalen Merkmalsraums mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links fünf Folds, rechts zwei Folds).....	96
Abbildung 53: Konfusionsmatrizen nach stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (oben zwei Folds, unten fünf Folds).....	97

Abbildung 54: Erste und zweite kanonische Variable auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums nach stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links) und der Konfusionsmatrix (rechts).....	98
Abbildung 55: Erste und zweite kanonische Variable auf Basis des 21-dimensionalen nach polynomieller Erweiterung des Merkmalsraums mit Polynomgrad zwei (links) und Einfluss des Polynomgrades auf die Vorhersagequalität (rechts) .....	99
Abbildung 56: Flächenscan (500 mm x 300 mm, x-/y-Schrittweite 2 mm) und Darstellung der 21 3MA-X8-Merkmale eines Grobblechsegmentes mit drei künstlich eingebrachten Hardspots .....	103
Abbildung 57: Histogramme (oben) für Trainings- und Testdaten des zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendeten Grobblechsegmentes sowie das entsprechende Klassifikationsergebnis der LDA (unten) .....	105
Abbildung 58: Multivariate Bewertung (links Grundmaterial in grün, Hardspot in rot), Ergebnisdarstellung an einem Grobblechsegment ohne Hardspot (Mitte und rechts) aufgenommen mit dem achtkanaligen 3MA-X8-Prüfwagen .....	107
Abbildung 59: Multivariate Bewertung (links), Ergebnisdarstellung an einem Grobblechsegment mit einem der Trainingsdatenbank „bekanntem“ Hardspot (Mitte und rechts).....	108
Abbildung 60: Multivariate Bewertung (links), Ergebnisdarstellung an einem Grobblechsegment mit einem der Trainingsdatenbank „unbekanntem“ Merkmalsraumausprägung (Mitte und rechts).....	108
Abbildung 61: Multivariate Bewertung (links), Ergebnisdarstellung an einem Grobblechsegment mit einem der Trainingsdatenbank nachtrainierten Hardspot (Mitte und rechts).....	109
Abbildung 62: Hardspot-Klassifikation auf Basis der bisher verwendeten vier Merkmale $D_{Zmax}$ , $D_{Zmean}$ , $D_{Zr}$ und $V_{cdz}$ und des bisher eingesetzten Hardspot-Klassifikators mit eintrainiertem Randbereich.....	110
Abbildung 63: Hardspot-Klassifikation auf Basis der bisher verwendeten vier Merkmale $D_{Zmax}$ , $D_{Zmean}$ , $D_{Zr}$ und $V_{cdz}$ und des bisher eingesetzten Hardspot-Klassifikators ohne eintrainierten Randbereich .....	110
Abbildung 64: Grobblechsegment mit sechs induktiv eingebrachten Hardspots und anschließender Entfernung des Zunders durch Sandstrahlen der Oberfläche (21-dimensionaler 3MA-X8-Merkmalsraum als Flächenbild).....	111
Abbildung 65: Grobblechsegment mit acht induktiv eingebrachten Hardspots und anschließender Entfernung des Zunders durch Sandstrahlen der Oberfläche.....	112
Abbildung 66: Klassifikationsergebnis für das zum Trainieren verwendete Grobblechsegment (oben links) und Histogramm (oben rechts) und dem zum Validieren verwendeten Grobblechsegment (unten links) und Histogramm (unten rechts).....	113
Abbildung 67: Klassifikationsergebnis und Histogramm nach Tausch des zum Trainieren (oben) und Validieren (unten) verwendeten Grobblechsegmentes .....	113

---

Abbildung 68: Klassifikationsergebnis durch vorgeschaltete ICA anstelle des 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalsraums (links Grobblechsegment zum Trainieren, rechts Grobblechsegment zum Validieren) .....	116
Abbildung 69: Vorgehen bei der Datensynthese von Hardspots an einem Grobblechsegment ohne echten Hardspot.....	118
Abbildung 70: Ermittlung des magnetischen Fingerabdrucks (oben) und Applizierung auf Zwillingssprobe (unten).....	119
Abbildung 71: Grobblechsegment mit echten und synthetisierten Hardspots .....	119
Abbildung 72: Temperaturprofil $T_{nom}$ und gemessene Temperatur $T_{act}$ in der Klimakammer (oben links), ein Merkmal ohne signifikante Temperaturabhängigkeit (oben rechts), ein Merkmal mit Temperaturabhängigkeit ohne Mehrdeutigkeiten (unten links), ein Merkmal mit Temperaturabhängigkeit und Mehrdeutigkeiten (unten rechts) .....	122
Abbildung 73: Temperaturabhängigkeit von $DZ_{max}$ (links) und $Z_{mean}$ (rechts) ohne Kompensation (oben) und mit Kompensation (unten).....	123
Abbildung 74: Kombination von NF- und HF-Sensoren (links schematisch, rechts als Modellzeichnung in einem Prüfkopf) .....	125
Abbildung 75: Vierkantstahlproben (links), schematische Darstellung des Vierpunktbiegeversuchs (rechts).....	126
Abbildung 76: Vier-Punkt-Biegeversuchsaufbau.....	127
Abbildung 77: $R^2$ (links) und RMSE (rechts) in Abhängigkeit der Anzahl der Stützstellen .....	128
Abbildung 78: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (oben links RMSE, oben rechts $R^2$ ) und Ergebnis der MLR nach polynomieller Erweiterung mit Polynomgrad zwei (unten).....	129
Abbildung 79: Vergleich 21-dimensionaler 3MA-X8-Merkmalsraum (oben links) und 24-dimensionaler Merkmalsraum auf Basis der Luftspule (oben rechts) und dem 45-dimensionalen 2MO-Merkmalsraum .....	130
Abbildung 80: Erste und zweite kanonische Variable der Vermessung eines Referenzprobensatzes, links auf Basis des 41-dimensionalen Merkmalsraums, rechts auf Basis der verfügbaren Rohdaten.....	137
Abbildung 81: M <sup>3</sup> Infekt-Analyser (links Diagnosefenster, rechts Analysefenster).....	138



# 1 Einleitung

Der Einsatz maschineller Lernalgorithmen entwickelt sich zunehmend zu einer Querschnittsdisziplin in vielen Bereichen der Wissenschaft und Technik. Ob in der Medizintechnik bei der diagnostischen Unterstützung [1] [2] [3] [4], bei der Erkennung von Straßen und Straßenschildern im Bereich des autonomen Fahrens bis hin zu Anwendungen der Materialwissenschaften, wie beispielsweise die automatisierte Erkennung und Bewertung von Mikrostrukturen anhand von Schlifffbildern [5], in vielen wissenschaftlich-technologischen Disziplinen spielt der Einsatz maschineller Lernalgorithmen eine zentrale Rolle [6].

Auch am Fraunhofer-Institut für Zerstörungsfreie Prüfverfahren haben maschinelle Lernalgorithmen breiten Einzug gefunden. Ob bei der segmentierten Objekterkennung mittels Thermographie [7], bei der Plausibilitätsbewertung von Ultraschalllaufzeitsignalen zur Vorspannkraftbestimmung in Schrauben [8] oder bei der auf dem magnetischen Verhalten basierende Charakterisierung ferromagnetischer Werkstoffeigenschaften [9], überall tragen maschinelle Lernalgorithmen entscheidend zur Lösung der Aufgabenstellung bei.

Aufgrund der Vielfalt verfügbarer maschineller Lernalgorithmen mit unterschiedlichen Zielsetzungen und den damit verbundenen Freiheitsgraden kann es zu Fehleinschätzungen beim Verhältnis von Komplexität der einzusetzenden maschinellen Lernalgorithmen und dem Beitrag zur Lösung der eigentlichen Aufgabenstellung kommen. Es kann diskutiert werden, inwieweit die Erklärbarkeit der Modelle gewährleistet sein sollte und ob die Vorhersagen maschineller Lernalgorithmen für den Menschen interpretierbar sein müssen [10]. Spätestens dann, wenn das Modell aber unplausible Ergebnisse liefert, kann es hilfreich sein, zu verstehen, warum die Ergebnisse entsprechend aussehen, um mögliche Lücken im Experiment und der Datenstruktur zu identifizieren und damit die Modelle weiter zu generalisieren. Dass Modelle die Trainingsdaten mit steigender Modellkomplexität besser abbilden, bedeutet nämlich nicht zwangsläufig, dass sich diese Performance auf die spätere Anwendung übertragen lassen [11]. Eine Validierung an unbekanntem Daten (Testdaten) ist daher zur Bewertung der ermittelten Modelle erforderlich. In der Praxis werden Messungen häufig im Anschluss an die Datenaufnahme anwendungsspezifisch in Trainings- und Testdaten aufgeteilt. Oft können dabei jedoch nicht alle möglichen Zustandsvariationen aufgrund der vielen Freiheitsgrade im Experiment berücksichtigt werden, so dass die verfügbaren Trainings- und Testdaten nicht selten nur einen Teil der möglichen Zustandsvariationen abbilden. Aus diesem Grund ist es

wichtig, möglichst generalisierte Modelle zur Lösung der Aufgabenstellungen zu ermitteln und Strategien zu entwickeln, wie dem Modell unbekannt Daten bewertet werden, die aufgrund von im Experiment nicht berücksichtigten, aber signifikanten Zustandsvariationen entstanden sind. Mit steigender Komplexität der Modelle steigen daher auch die Anforderungen an das Experiment selbst, da eine Modelloptimierung bezüglich der verfügbaren Trainings- und Testdaten auch mit einer reduzierten Generalisierbarkeit verbunden sein kann.

Mit steigender Modellkomplexität steigt außerdem der Aufwand bei der Parametrierung der eingesetzten maschinellen Lernalgorithmen [12]. Über so genannte Hyperparameter, also Stellschrauben der Modelle, kann die Vorhersagequalität der beim Training verwendeten Daten (Trainingsdaten) maßgeblich beeinflusst werden. Neben dem verhältnismäßig hohen Aufwand besteht durch den Einsatz von Hyperparametern zusätzlich die Gefahr der „versteckten Überanpassung“. Damit ist gemeint, dass die Optimierung der Hyperparameter mit Blick auf die Trainings- und Testdaten dazu führt, dass prinzipiell die Möglichkeit besteht, dass auch hier kein generalisiertes Verhalten wiedergespiegelt wird, sondern im Wesentlichen das Verhalten der Trainings- und Testdaten [13]. Aus diesem Grund macht es unter Umständen Sinn, im Anschluss an die Hyperparametrierung zusätzliche dem Modell beim Training nicht berücksichtigte Testdaten, so genannte Validierdaten, in die Bewertung mit einzubeziehen. Kommt es anschließend nochmal zu einer Optimierung des Modells, da die Validierdaten nicht korrekt abgebildet werden, lässt sich diskutieren, ob eine anschließende Bewertung der gleichen Validierdaten zulässig ist oder erneut ein unbekannter Validierdatensatz erforderlich ist. Diese Aspekte zeigen den Bedarf einer systematischen Methodik, die mit vertretbarem Aufwand zuverlässige, generalisierte und erklärbare Vorhersagen für die Materialcharakterisierung liefert.

## 2 Ausgangssituation und Motivation

Im Hinblick auf die Materialcharakterisierung kommt den magnetischen Verfahren eine wachsende Bedeutung zu [14] [15] [16] [17]. Diese Verfahren bedienen sich der gegenseitigen Abhängigkeit der magnetischen und mechanischen Eigenschaften ferromagnetischer Materialien als Folge analoger Wechselwirkungsprozesse zwischen Mikrostruktur und Blochwänden (bei Ummagnetisierung) sowie Mikrostruktur und Versetzungen (bei Verformung) [18] [19] [20] [21]. Änderungen in der Mikrostruktur (z.B. Härte, Zugfestigkeit und Streckgrenze), aber auch Last- und Eigenspannungen zeigen sich in Änderungen von Merkmalen der magnetischen Hysteresekurve (z.B. Koerzitivfeldstärke, Remanenz und Permeabilität). Hierdurch können über die Charakterisierung des magnetischen Werkstoffverhaltens Rückschlüsse auf sonst nur zerstörend bestimmbare mechanische Eigenschaften gezogen werden.

Die direkte Bestimmung der magnetischen Hysteresekurve ist jedoch wirtschaftlich und praktikabel oft nicht möglich. Einerseits ist die statische Einstellung der magnetischen Feldstärke mit anschließender Messung der Flussdichte sehr zeitaufwändig, andererseits schränkt die Notwendigkeit, wohldefiniert geformte Proben entnehmen zu müssen, um die Flussdichte über eine probenumfassende Spule messen zu können, den Anwendungsbereich im Hinblick auf charakterisierbare Geometrien stark ein [18] [22]. Aus diesen Gründen sind alternative Methoden erforderlich, um das magnetische Verhalten von Werkstoffen in geringer Messzeit und ohne besondere Anforderungen an die Probengeometrie zu bestimmen.

Vor diesem Hintergrund werden am Fraunhofer-Institut für Zerstörungsfreie Prüfverfahren IZFP seit Mitte der 80er Jahre Methoden zur magnetischen Charakterisierung mechanischer Kenngrößen entwickelt und eingesetzt. Das im Rahmen dieser Arbeit eingesetzte 3MA-X8-System nutzt Effekte in der magnetischen Hysterese zur Charakterisierung ferromagnetischer Werkstoffe und adressiert diese Aufgabe mit einfacher Sensor- und Geräte-Hardware sowie der Verlagerung der gesamten Signal- und Datenverarbeitung auf die Software-Seite. Dahinter steht das Ziel, eine robuste sowie reproduzierbare und kostengünstig zu fertige Geräte- und Sensorbauweise zu ermöglichen und dabei dennoch fast die gleiche Vielfalt an Messinformation zu erhalten, wie es mit bisherigen, teureren und weitaus komplexeren Sensortechniken (z.B. 3MA-II-System, MikroMach [23]) möglich ist. Durch Speisung eines Elektromagneten mit zwei überlagerten Sinusspannungen unterschiedlicher Amplitude und

Frequenzen können drei unabhängige Charakterisierungsmethoden lediglich unter Verwendung eines Elektromagneten als Sensorelement umgesetzt werden. Aus der so genannten Wirbelstromimpedanz- und Überlagerungspermeabilitätsanalyse sowie der Oberwellenanalyse des Magnetisierungsstromes werden insgesamt 21 Merkmale extrahiert, die einen für den Materialzustand des Untersuchungsobjekts charakteristischen und aussagekräftigen "Fingerabdruck" bilden [24] [25]. Die extrahierten Merkmale werden nach der Datenaufnahme mit Blick auf die Aufgabenstellung bewertet. In der Regel geht es beim Einsatz dieser Charakterisierungsverfahren darum, über die extrahierten magnetischen Merkmale auf mechanische Kennwerte (die so genannten Zielgröße) zu schließen.

Im ersten Schritt wird das Skalenniveau der Zielgrößen bestimmt, da sich hieraus häufig die grundlegende Frage zur Lösung der Aufgabenstellung ableitet, nämlich ob es sich um ein Klassifikations- oder Regressionsproblem handelt. So genannte „quantisierbare“ Zielgrößen sind häufig intervall- oder verhältnisskaliert (z.B. Härte in Einheit HV10) und werden mit Hilfe eines Regressionsmodells vorhergesagt, „qualitative“ Zielgrößen beispielsweise definierte Materialzustände wie „Hart“ oder „Weich“, sind häufig nominal- oder ordinalskaliert [26]. Beim Einsatz der 3MA-Technologie kommt ein mehrdimensionaler euklidischer Abstandsklassifikator zur Klassifikation, beispielsweise unterschiedlicher Materialzustände, zum Einsatz [27] [28], Regressionsprobleme wie die Bestimmung der mechanischen Härte eines Werkstoffs werden mit Hilfe einer multivariaten (auch multiple oder mehrfache) linearen Regressionsanalyse gelöst [29] [30]. Das angestrebte Ziel der ermittelten Klassifikations- bzw. Regressionsmodelle sollte eine generalisierte, reproduzierbare und ausreichend genaue Vorhersage der Zielgröße sein. Vereinfacht ausgedrückt kann ein Modell dann als geeignet bezeichnet werden, wenn es die Trainings- und Testdaten gleichermaßen ausreichend gut zur Lösung der Aufgabenstellung abbildet.

Die Bewertung der Modelle erfolgt in zwei Schritten. Im ersten Schritt wird untersucht, ob sich die Trainingsdaten mit der zur Lösung der Aufgabenstellung erforderlichen Genauigkeit vorhersagen lassen. Ist dies nicht der Fall, sollte die Komplexität des verwendeten Modells sukzessive erhöht werden, bis sich die Zielgrößen in den Trainingsdaten ausreichend gut vorhersagen lassen. Ist dieser Zustand erreicht, kann davon ausgegangen werden, dass die Kombination aus Information im Merkmalsraum und dem eingesetzten Modell eine zur Lösung ausreichende Komplexität (zumindest für die Abbildung der Trainingsdaten) besitzt. Mit steigender Komplexität steigt aber auch die Gefahr, dass die Modelle nicht die gesuchte Struktur der Aufgabenstellung, sondern lediglich die Struktur der Trainingsdaten ermitteln [11].

Im zweiten Schritt wird daher überprüft, wie die ermittelten Modelle auf im Training nicht verwendete Testdaten reagieren. Da für die Bewertung der Testdaten die Zielgröße bekannt sein muss, besteht die Herausforderung darin, die verfügbare und referenzierte Datenbasis in geeigneter Form in Trainings- und Testdaten aufzuteilen, um möglichst repräsentative Daten für die Modellermittlung und gleichzeitig ausreichend Daten zur Validierung des Modells zur Verfügung zu haben. Um repräsentative Daten aufzunehmen, ist es daher zwingend erforderlich, die Experimentplanung mit Blick auf für die Aufgabenstellung relevante Einflussfaktoren zu gestalten. Stellt sich nun bei der Validierung der Testdaten heraus, dass die Vorhersagequalität im Vergleich zu den Trainingsdaten sehr viel schlechter ist, liegt vermutlich eine Überanpassung des Modells auf die Trainingsdaten vor. Dies kann zwei Gründe haben, entweder ist die Komplexität des Modells so hoch, dass das Verhalten der Trainingsdaten „auswendig gelernt“ wurde und das Modell nicht in der Lage ist, im Rahmen der erlaubten Messungenauigkeit abweichende Daten korrekt zu interpretieren [11] [26] [31] oder die Datenbasis ist nicht repräsentativ. Das bedeutet, nicht alle Zustandsvariationen sind in ausreichender Form in den Trainingsdaten vertreten. Aus diesem Grund ist es einerseits ratsam, die Komplexität des Modells nur so hoch zu wählen, wie es die Aufgabenstellung erfordert, und andererseits ist es im Rahmen der Experimentplanung wichtig, die zu erwartenden Zustandsvariationen und Störeinflüsse mit signifikantem Einfluss auf die Messsignale (Umgebungstemperatur, Chargenschwankungen, Inhomogenitäten in der Mikrostruktur, Eigenspannungen, etc.) zu berücksichtigen. Eine vollständig repräsentative Datenbasis ist jedoch häufig nicht möglich, da die Probenherstellung und -referenzierung sowie die Berücksichtigung aller signifikanter Einflussfaktoren auf die Messergebnisse (z.B. Proben temperatur) häufig sehr zeit- und kostenintensiv sind.

Die erste Stellschraube ist wie bereits beschrieben, die Komplexität der eingesetzten Modelle bzw. der eingesetzten maschinellen Lernalgorithmen. Es geht dabei um die Frage, welche Abhängigkeiten zwischen den aus den Messsignalen extrahierten Merkmalen und den erforderlichen Zielgrößen von den Modellen abgebildet werden können. Lineare Algorithmen wie die multivariate lineare Regression [26] haben den Vorteil, dass sie oft einfach anzuwenden sind und sich besonders gut eignen, lineare Zusammenhänge zwischen Merkmalen und Zielgrößen abzubilden. Bei einer ausreichend hohen Anzahl an Stützstellen kann damit zwar der Einfluss von Nichtlinearitäten bis zu einem gewissen Grad kompensiert werden, die Behandlung stark nichtlinearer Zusammenhänge stößt ab einem gewissen Punkt aber an Grenzen. Hängen die Merkmale beispielsweise von der Quadratwurzel der Zielgröße ab, könnte

eine Regression, die diesen Zusammenhang nichtlinear abbilden kann, zu besseren Ergebnissen bei der Vorhersage der Zielgröße führen als ein rein lineares Modell.

Die bisher verwendeten Algorithmen zur Klassifikation und Regression beim Einsatz der 3MA-Technik wurden in der Vergangenheit sehr aufwendig in LabVIEW [32] programmiert. Dies gelang vor allem deshalb, weil sich die Algorithmen mit dem grafischen System von LabVIEW und den dort verfügbaren Funktionsblöcken mit verhältnismäßig geringem Aufwand programmiertechnisch implementieren ließen. Man hat jedoch erkannt, dass sowohl die multivariate lineare Regression als auch die Auswahl einzelner Merkmale zur Abstandsklassifikation von der Komplexität her unter Umständen nicht ausreichen, zuverlässige Aussagen mit ausreichender Genauigkeit im Hinblick auf die Materialcharakterisierung in einem vertretbaren, experimentellen Rahmen zu treffen. Durch die Verbreitung frei zugänglicher Bibliotheken wie scikit-learn [33] können über Python maschinelle Lernalgorithmen unterschiedlichster Komplexität mit sehr geringem Aufwand in die bisherige Auswertinfrastruktur eingebunden werden. Der wesentliche Vorteil dieser Vorgehensweise dabei ist, dass sich anwendungsnah komplexe Probleme lösen lassen, ohne die hierfür notwendigen Algorithmen selbst aufwendig programmieren zu müssen. Im Rahmen der in dieser Arbeit verwendeten Bibliothek scikit-learn existiert bereits eine sehr große Auswahl an maschinellen Lernalgorithmen unterschiedlichster Komplexität, über die sich die Vorhersagequalität im gesamten System beeinflussen ließe. Allein zur Lösung von Regressionsproblemen existieren neben der bisher eingesetzten multivariaten linearen Regression weitere Regressionsalgorithmen wie beispielsweise die Support-Vector-Regression [34], die Kernel-Ridge-Regression [35] bis hin zu Regressionsalgorithmen auf der Basis von neuronalen Netzen wie der Multilayer-Perceptron-Regression [36]. Neben den vielen Möglichkeiten mit unterschiedlichen, an die Aufgabenstellung gekoppelten Stärken und Schwächen gibt es in vielen maschinellen Lernalgorithmen „Stellschrauben“, so genannte Hyperparameter, die ebenfalls einen signifikanten Einfluss auf die Vorhersagequalität haben. Zum einen stellt die Optimierung dieser Hyperparameter einen Mehraufwand dar, hinzu kommt, dass durch die Erhöhung der Modellkomplexität die Anforderungen an das Experiment zur Validierung des Systems steigen, um Überanpassungen im System zu vermeiden [11].

Neben der Komplexität der eingesetzten Modelle gibt es noch eine zweite Stellschraube, mit der die Vorhersagequalität beeinflusst werden kann, nämlich die Komplexität des extrahierten Merkmalsraums. Es konnte bereits aufgezeigt werden, dass ein automatisiert extrahierter 226-dimensionaler Merkmalsraum im Vergleich zum bisher verfügbaren 21-dimensionalen 3MA-

X8-Merkmalraum signifikant bessere Vorhersagen, beispielsweise bei der werkstoffunabhängigen Bestimmung von Lastspannungen, liefert [37]. Dabei ist nicht die Dimension des Merkmalsraums entscheidend, sondern viel mehr wie stark und in welcher Form (z.B. linear) die Information im Merkmalsraum mit der gewünschten Zielgröße korreliert ist. Hier stellt sich die Frage, wie Mehrdeutigkeiten und redundante Informationen in den Merkmalen, bedingt durch überlagerte Einflüsse auf das mikromagnetische Verhalten [38] [39], behandelt werden können und ob der Informationsgehalt des Merkmalsraums prinzipiell in einer geringeren Anzahl von Merkmalen repräsentiert werden kann. Ein Grund, weshalb die Dimension der Merkmalsräume idealerweise minimiert werden sollte, findet sich im „Fluch der Dimensionalität“ [28] [40]. Dieser beschreibt den nichtlinearen Anstieg im Volumen des Merkmalsraums bei Erhöhung der Dimensionalität. Wenn der eindimensionale Raum der reellen Zahlen zwischen 0 und 1 durch 100 Beobachtungen ausreichend abgedeckt ist, würden  $10^{20}$  Beobachtungen benötigt, um eine ähnliche Abdeckung in einem zehndimensionalen Raum zu erreichen. In Kombination mit der Tatsache, dass die Experimente zur Materialcharakterisierung aufgrund der vielen parasitären Einflussfaktoren häufig nicht vollständig repräsentativ sind, führen diese Anforderungen zu der Fragestellung, inwieweit es möglich ist, die wesentliche Information eines mehrdimensionalen Merkmalsraums komprimiert und segmentiert in einem Sekundärmerkmalsraum abzubilden, um auch die Anzahl der erforderlichen Beobachtungen so gering wie möglich zu halten. Stellt man sich vor, dass die extrahierten Merkmale ihren Ursprung in den gemessenen und vorverarbeiteten Rohsignalen haben, bringt das die Frage auf, wie sinnvoll es überhaupt noch ist, Merkmale aus Sensordaten auf Basis physikalischer Zusammenhänge zu extrahieren. Es ist naheliegend, anzunehmen, dass ein interpretierbarer Merkmalsraum auf Basis werkstoffphysikalischer Hintergründe in Kombination mit einfachen und intuitiv nachvollziehbaren maschinellen Lernalgorithmen einen wesentlichen Beitrag zur Generalisierbarkeit und Erklärbarkeit der ermittelten Modelle liefern kann. Man kann die Datenverarbeitung aber so gestalten, dass die Struktur der Rohdaten durch den Einsatz maschineller Lernalgorithmen werkstoffphysikalisch interpretierbar abgebildet wird. Die Modellierung kann direkt anhand der verfügbaren Rohsignale oder einem daraus abgeleiteten Sekundärmerkmalsraum erfolgen. Insbesondere für die hardwarenahe Merkmalsextraktion ist dies interessant, da sich so genannte „Multiply and Accumulate“-Operationen in Architekturen, wie sie in integrierten Schaltkreisen (z.B. FPGA, engl. Field Programmable Gate Array) vertreten sind, einfacher umsetzen lassen, als Schleifen-Operationen, die häufig bei der bisherigen Merkmalsextraktion verwendet wurden.

Allein diese beiden Stellschrauben, die Komplexität des Merkmalsraums und der eingesetzten maschinellen Lernalgorithmen, zeigen auf, welche vielfältigen Möglichkeiten bei der Behandlung von Aufgabenstellungen, sowohl allgemein als auch vor dem Hintergrund dieser Arbeit im Bereich der Materialcharakterisierung, existieren.

Die Motivation dieser Arbeit liegt im Bedarf eines systematischen Vorgehens zur Erstellung zuverlässiger, reproduzierbarer und erklärbarer Vorhersagemodelle, die es in einem standardisierten Vorgehen ermöglichen, auch nichtlineare Zusammenhänge zwischen Merkmalsraum und Zielgröße behandeln zu können. Die Anforderung ist, eine zur Lösung der Problemstellung ausreichend gute Vorhersagequalität mit der hierfür erforderlichen Komplexität mit möglichst geringem Aufwand im Hinblick auf die Experimentplanung und das Trainieren und Validieren maschineller Lernalgorithmen zu erhalten.



### 3 Zielsetzung und Konzept

Das übergeordnete Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung einer systematischen Methodik zur multivariaten Analyse mehrdimensionaler Merkmalsräume für die zerstörungsfreie Materialcharakterisierung unter Einsatz maschineller Lernalgorithmen. Die Demonstration erfolgt im Rahmen dieser Arbeit am Beispiel der mikromagnetischen Materialcharakterisierung unter Einsatz des 3MA-X8-Systems. Die Methodik soll so gestaltet sein, dass auch nichtlineare Zusammenhänge zwischen dem Eingangsmerkmalsraum und den Zielgrößen zuverlässig mit bedarfsorientierter Komplexität vorhergesagt werden. Dabei sollen zur Lösung der Aufgabenstellung ausreichend gute Ergebnisse mit dem Fokus einer ausgewogenen Vorhersagequalität zwischen Trainings- und Testdaten erzielt werden. Die Methodik sollte abstrakt gestaltet sein, so dass prinzipiell beliebig dimensionierte Merkmalsräume zur Materialcharakterisierung behandelt werden könnten. Darüber hinaus sollte sie flexibel sein, um Raum für die Einbindung von Expertenwissen zu geben und daraus optimierte Modelle zu erstellen.

Das Konzept der Methodik basiert auf dem Einsatz eines Abstandsklassifikators und der multivariaten linearen Regression, jedoch mit dem Unterschied, dass die Modellerstellung nicht wie bisher auf Basis des verfügbaren Eingangsmerkmalsraum erfolgt, sondern der Informationsgehalt im Merkmalsraum mit Blick auf die Zielgröße durch den Einsatz eines überwachten Dimensionsreduktionsalgorithmus auf einen transformierten Sekundärmerkmalsraum abgebildet wird. Aus diesem Sekundärmerkmalsraum erfolgt die Modellbildung zur Klassifikation bzw. Regression. Die Komplexität des Gesamtsystems (also die Komplexität von Merkmalsraum und Klassifikations- bzw. Regressionsmodell) wird dadurch gesteuert, dass versucht wird, den Eingangsmerkmalsraum durch eine polynomielle Merkmalsraumerweiterung linearisiert auf die Zielgröße abzubilden. Eine ähnliche Funktion ist unter dem Namen „Polynomial\_Features“ in scikit-learn implementiert [33].



## 4 Grundlagen

### 4.1 Magnetische Materialcharakterisierung

#### 4.1.1 Magnetische Hysterese

Während sich die magnetischen Momente diamagnetischer Materialien nach Anlegen eines externen Magnetfeldes entgegengesetzt ihrer Erregung ausrichten, richten sich die magnetischen Momente para- und ferromagnetischer Materialien entlang der Richtung des äußeren Magnetfeldes aus. Bei paramagnetischen Materialien sind die benachbarten magnetischen Momente voneinander isoliert, was dazu führt, dass deren Ausrichtung nach Entfernen des externen Magnetfeldes wieder in sich zusammenbricht. Bei ferromagnetischen Materialien bilden sich aufgrund der Kopplung der magnetischen Momente einzelner Teilchen Bereiche, die so genannten Weisschen Bezirke oder magnetische Domänen, in denen sich die magnetischen Momente parallel ausrichten. Vor Anlegen eines externen Magnetfeldes ist die Orientierung dieser Bereiche zufällig, nach außen ist das ferromagnetische Material unmagnetisch. Durch Anlegen einer externen Magnetisierung richten sich die magnetischen Momente der Weisschen Bezirke in Richtung der Magnetisierung aus und bleiben auch nach Entfernen der Magnetisierung ausgerichtet. Dies führt dazu, dass ferromagnetische Materialien einen Teil ihrer Magnetisierung beibehalten.

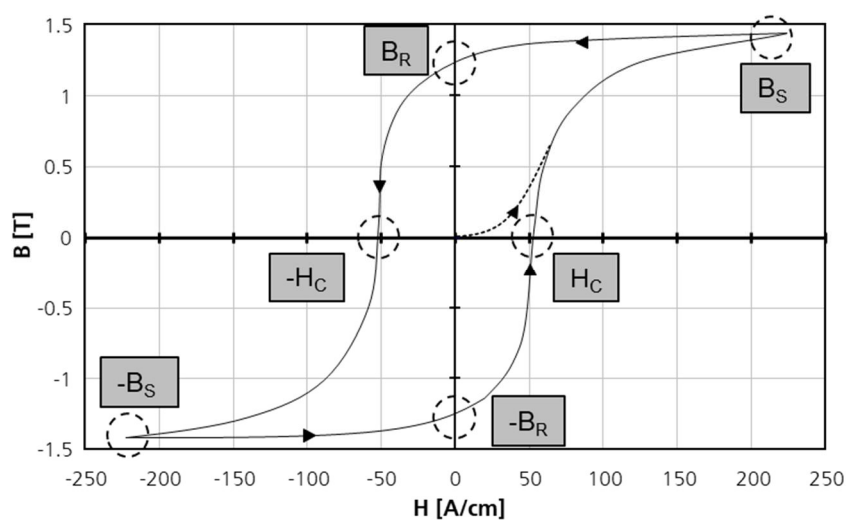


Abbildung 1: Magnetische Hysterese mit Neukurve (gestrichelte Linie) und relevanten magnetischen Merkmalen (Koerzitivfeldstärke  $H_C$ , magnetische Remanenzflussdichte  $B_R$  und magnetische Sättigungsflussdichte  $B_S$ )

Die gemessene Flussdichte  $B$  eines ferromagnetischen, unmagnetisierten Materials folgt, in Abhängigkeit der angelegten magnetischen Feldstärke  $H$ , der Neukurve (siehe gestrichelte Kurve in Abbildung 1) und erreicht bei ausreichend hoher Aussteuerung den Sättigungsbereich ( $B_S$  in Abbildung 1). Wird die angelegte Feldstärke  $H$  reduziert, zeigt sich bei ferromagnetischen Materialien, dass sich der beim erstmaligen Aufmagnetisieren beobachtete Zusammenhang zwischen Feldstärke und Flussdichte verändert hat. Dies hat zur Folge, dass eine Restmagnetisierung (vgl.  $B_R$  in Abbildung 1 nach Erreichen der Sättigungsflussdichte  $B_S$ ) bei abgeschalteter äußerer Magnetisierung im Material erhalten bleibt. Um diese Remanenzflussdichte auf Null zu reduzieren, muss die Feldstärke  $H$  mit umgekehrter Polarität bis zur Koerzitivfeldstärke ( $-H_C$  in Abbildung 1) angelegt werden. Wird der Betrag von  $H$  weiter erhöht, wird erneut ein Sättigungsbereich ( $-B_S$  in Abbildung 1) erreicht. Sinkt  $|H|$  dann auf Null, stellt sich die Remanenzflussdichte umgekehrter Polarität ein ( $-B_R$  in Abbildung 1). Umpolung und Erhöhung der Feldstärke  $H$  bis zur Koerzitivfeldstärke ( $H_C$  in Abbildung 1) bringt  $B$  zunächst auf Null und steigert  $B$  bei weiterer Aussteuerung der Feldstärke  $H$ , bis erneut der positive Sättigungsbereich erreicht wird. Dieser Zusammenhang zwischen  $B$  und  $H$  wird als magnetische Hysteresekurve bezeichnet. Bis zur Entmagnetisierung wird ohne externes Magnetfeld die Remanenz  $B_R$  im Material vorhanden sein und bei Anlegen einer Feldstärke  $H$  wird sich die Flussdichte  $B$  entlang der so genannten magnetischen Hysteresekurve einstellen [18] [19] [20] [21].

#### 4.1.2 Korrelation magnetischer und mechanischer Kenngrößen

Das in 4.1.1 beschriebene magnetische Verhalten und die Analogie zwischen magnetischen und mechanischen Kenngrößen bilden die Basis für die mikromagnetische Materialcharakterisierung. Dabei wird ausgenutzt, dass das magnetische Verhalten und somit die Form der magnetischen Hysterese ferromagnetischer Materialien, wie in Abbildung 2 links dargestellt, als Folge analoger Wechselwirkungsprozesse von der Mikrostruktur und dem Spannungszustand ferromagnetischer Materialien abhängt.

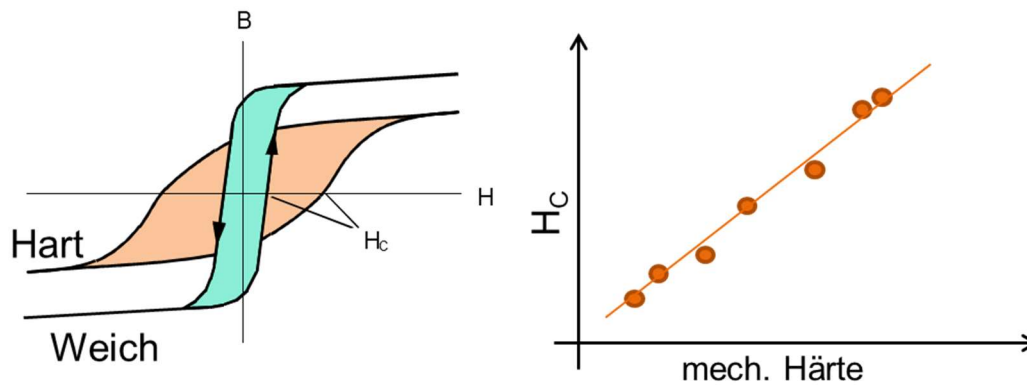


Abbildung 2: Magnetische Hysterese eines mechanisch weichen (grün) und eines mechanisch harten Werkstoffs (links) und exemplarische Korrelation zwischen der Koerzitivfeldstärke  $H_c$  und der mechanischen Härte (rechts)

Zur Quantifizierung der Hystereseform können signifikante Merkmale wie beispielsweise die Koerzitivfeldstärke  $H_c$  extrahiert und mit mechanischen Zielgrößen korreliert werden. Dadurch lassen sich mechanische Kenngrößen wie Zugfestigkeit, Streckgrenze, Härte, aber auch mechanische Last- und Eigenspannungen zerstörungsfrei vorhersagen. In Abbildung 2 ist rechts exemplarisch die Korrelation zwischen der Koerzitivfeldstärke  $H_c$  und der mechanischen Härte eines homogen gehärteten Werkstoffs dargestellt [18] [19] [20] [21].

#### 4.1.3 Mikromagnetische Materialcharakterisierung mechanischer Kenngrößen

In der Praxis ist die Aufnahme der magnetischen Hysteresekurve mit gewissen Aufwänden und Einschränkungen verbunden, da beispielsweise Proben einfacher, länglicher Form erforderlich sind, an denen die Flussdichte  $B$  über eine probenumfassende Spule bei in kleinen Schritten statisch variiertes Feldstärke  $H$  gemessen wird [18]. Daraus resultiert einerseits die Einschränkung auf zylinderförmige Bauteile, andererseits führt die Notwendigkeit, die Feldstärke schrittweise variieren zu müssen, um anschließend die Flussdichte zu messen, dazu, dass die Aufnahme einer vollständigen Hysteresekurve einen sehr zeitaufwändigen Vorgang darstellt. Auch eine praxisübliche, nur quasi statische Messung bei kontinuierlicher, aber sehr langsamer Ummagnetisierung ( $f \ll 1$  Hz) erfordert lange Messzeiten.

Mit dem Ziel, die beschriebenen Aufwände und Einschränkungen der HystereseMessung zu reduzieren, wurden unterschiedliche Messsysteme entwickelt. Diese bewerten die elektrische Leitfähigkeit und magnetische Permeabilität basierend auf Wirbelstrom- und/oder Ummagnetisierungseffekten im Material, können anwendungsspezifisch an eine Vielzahl von Bauteilgeometrien angepasst und sowohl im Kontaktbetrieb als auch kontaktlos eingesetzt

werden. Neben der Beeinflussung durch den Werkstoff wirken sich in der Praxis häufig weitere Faktoren auf den magnetischen Kreis aus. Temperaturbedingte Variationen der elektrischen Leitfähigkeit und magnetischen Permeabilität des Materials, Last- und Eigenspannungen, magnetische Restfelder, Mehrphasenwerkstoffe und Gradienten im Material beeinflussen die elektrische Leitfähigkeit und magnetische Permeabilität des gesamten magnetischen Kreises. Handhabungsbedingte Variationen in der Sensorabhebung, also Ankopplungsschwankungen, haben aufgrund der geringen Permeabilität der Luft einen viel höheren Einfluss auf den magnetischen Kreis als vom Materialzustand abhängige praxistypische Permeabilitätsunterschiede im Material.

#### 4.1.4 3MA-X8-Verfahren

Das am Fraunhofer IZFP entwickelte 3MA-X8-Verfahren kombiniert die Information dreier Messmethoden unterschiedlicher Eindringtiefe und Sensitivität. Dabei wird bereits in der Messtechnik ein multivariater Ansatz verfolgt. Ähnlich wie das jahrzehntelang im Einsatz befindliche 3MA-II-Prüfsystem, nutzt das 3MA-X8-Verfahren Effekte in der magnetischen Hysterese zur Charakterisierung von ferromagnetischen Werkstoffen und extrahiert hieraus werkstoffspezifische Merkmale mit dem Ziel einer zuverlässigen Charakterisierung des Werkstoffzustandes auch im Hinblick auf in der Anwendung vorherrschende überlagerte Störeinflüsse (z.B. Restmagnetfelder, Last- und Eigenspannungen, etc.). Die wesentlichen Unterschiede beider Verfahren liegen in der geräte- und sensortechnischen Umsetzung. Beim 3MA-II-Verfahren werden ein Elektromagnet zur Anregung eines niederfrequenten Wechselfeldes, eine Hallsonde zur Erfassung der magnetischen Tangentialfeldstärke, Wirbelstromsendespulen sowie Wirbelstrom- und Barkhausenrauschempfangsspulen eingesetzt. Das 3MA-X8-Verfahren verwendet im Vergleich lediglich einen Elektromagneten (siehe Abbildung 3 links schematisch, rechts in unterschiedlicher Ausführung). Dieser erzeugt ein magnetisches Feld, dessen Wechselwirkung mit dem Messobjekt ausgewertet wird. Messtechnisch handelt es sich um einen Spannungsteiler, mit dem die Spannung über dem Elektromagneten und einem niederohmigen Strommesswiderstand gemessen wird.

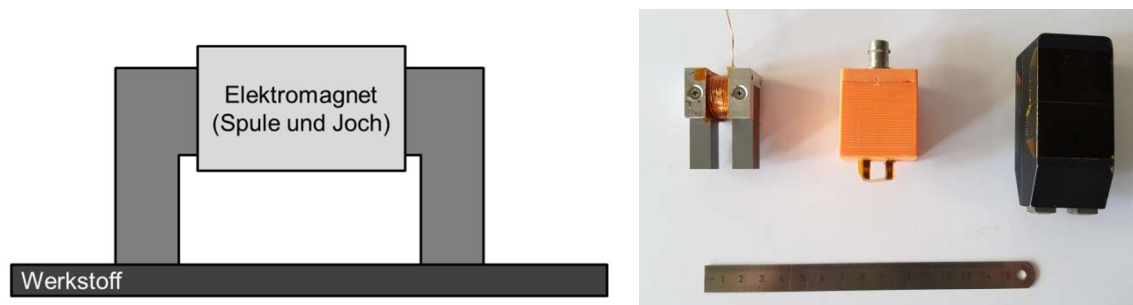


Abbildung 3: 3MA-X8-Prüfkopf schematisch (links) und real in verschiedenen Bauformen (rechts)

Betrieben wird der Elektromagnet dabei mit zwei überlagerten sinusförmigen Spannungen unterschiedlicher Frequenz, einem höherfrequenten Anteil  $f_{ec}$  von 500 Hz bis 5000 Hz zur Erzeugung von Wirbelströmen im Werkstoff sowie einen niederfrequenten Anteil  $f_{mag}$  zwischen 10 Hz und 200 Hz zur Magnetisierung (englisch magnetization) des Werkstoffs. Das Verhältnis der beiden Frequenzen  $f_{ec}/f_{mag}$  liegt häufig im Bereich zwischen 25 und 50. Eine kohärente Demodulation [41] auf den höherfrequenten Anteil transformiert die gemessenen Wechselspannungs- und -stromsignale in Spannungs- und Stromphasoren, anschließend wird die Impedanz des magnetischen Kreises durch Division über das „ohmsche Gesetz der Wechselstromtechnik“ berechnet [42].

Vorteile dieses Verfahrens sind eine hohe Messgeschwindigkeit bei minimalistischer Sensorausführung, was den wirtschaftlichen Einsatz mehrkanaliger Sensorarrays ermöglicht [37] [24] [25].

Im Rahmen des 3MA-X8-Verfahrens werden 21 werkstoffzustandspezifische Merkmale aus drei Messmethoden extrahiert. Die verwendeten Messmethoden kommen quasi zeitsynchron zum Einsatz und werden im Folgenden beschrieben.

#### 4.1.4.1 Oberwellenanalyse des Magnetisierungsstroms

Der Magnetisierungsstrom  $I_{mag}$  zeigt bei sinusförmiger Spannungseinprägung Verzerrungen vom idealen Sinus (vgl. Abbildung 4 links und rechts) bedingt durch Nichtlinearität und Hysterese der Magnetisierungskurve des Werkstoffs.

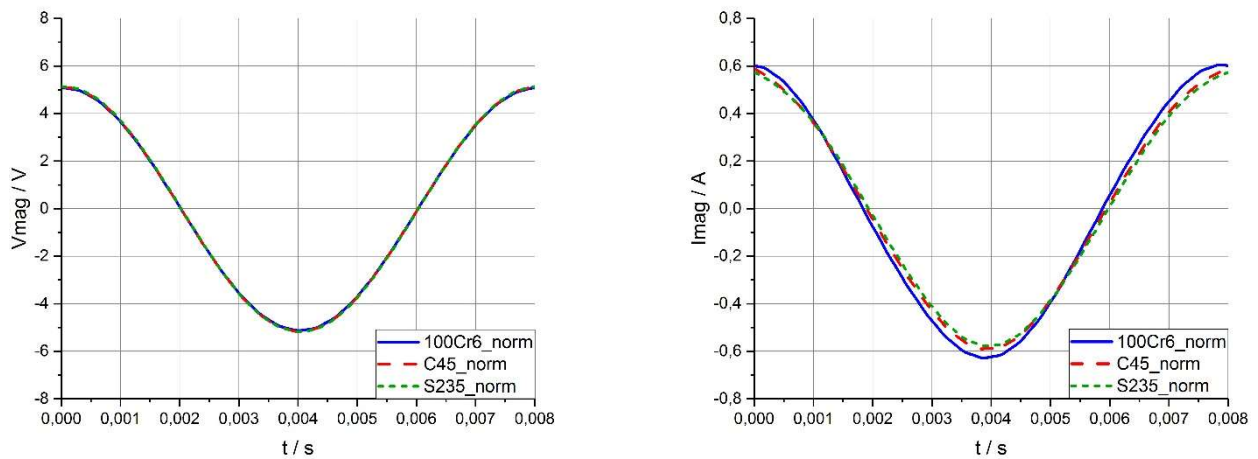


Abbildung 4: Magnetisierungsspannung  $V_{mag}$  (links) und Magnetisierungsstrom  $I_{mag}$  (rechts) [24]

Diese insbesondere bei hartmagnetischen Werkstoffen kaum zu erkennenden Verzerrungen zeigen sich deutlich im Frequenzspektrum und können mit Hilfe einer Fourier-Transformation [43] extrahiert und visualisiert bzw. quantifiziert werden [24] [25].

#### 4.1.4.2 Wirbelstromimpedanzanalyse

Die im 3MA-X8-Verfahren eingesetzte Wirbelstromimpedanzanalyse basiert auf zwei Effekten, welche die Impedanz  $Z$  der Spule am Kern beeinflussen; magnetische Wechselfelder führen in rein elektrisch leitfähigen Werkstoffen (z.B. Aluminium) zu Wirbelströmen, während in ferromagnetischen, nicht elektrisch leitfähigen Werkstoffen (z.B. Ferrite) die im Elektromagneten erzeugte Wechselflussdichte  $B$  beeinflusst wird. Bei leitfähigen und ferromagnetischen Werkstoffen (z.B. Baustahl) kommt es zu einer Überlagerung der beiden Effekte.

Die Wirbelstromimpedanzanalyse bestimmt die Impedanz  $Z$  der Magnetisierungsspule bei der Frequenz  $f_{ec}$ . Der niederfrequente Magnetisierungsanteil  $f_{mag}$  führt dazu, dass zusätzlich die Hysterese des Werkstoffs durchlaufen wird. Dabei verändert sich die Permeabilität  $\mu$  des Werkstoffs, was zu einer zeitlichen Veränderung der Spulenimpedanz  $Z$  führt. Die Impedanz der Spule, die durch das Gesamtsystem aus Kern und Probe beeinflusst wird, wird als komplexer Zeiger ausgedrückt, der sich während der Magnetisierung verändert (vgl. Abbildung 5, zeitlicher Verlauf von Realteil links und Imaginärteil rechts der Impedanz  $Z$  für die drei normalisierten Werkstoffe 100Cr6, S235, C45).



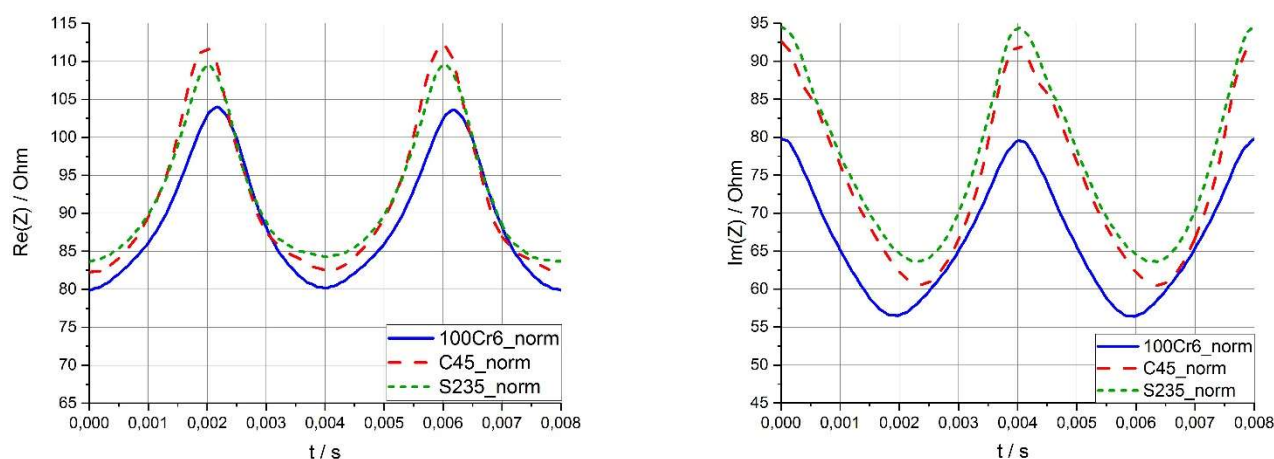


Abbildung 5: Zeitlicher Verlauf von Realteil (links) und Imaginärteil (rechts) der Impedanz  $Z$  der Spule [24]

Trägt man die Kurven aus Abbildung 5 gegeneinander auf, erhält man die in Abbildung 6 links dargestellte Schleifenform [24] [25].

#### 4.1.4.3 Überlagerungspermeabilitätsanalyse

In [22] wird die Überlagerungspermeabilität  $\mu_{\Delta}$  über den Differenzenquotienten in Gleichung 1 bestimmt, während der Hysterese zyklische Feldstärkeveränderungen kleiner Amplitude überlagert werden. Zur Darstellung der Überlagerungspermeabilität  $\mu_{\Delta}$  wird diese als Funktion der Feldstärke  $H$  aufgetragen. Diese Vorgehensweise ist häufig aufgrund der hohen Messzeit und der Notwendigkeit einer proben umfassenden Spule zur Ermittlung der magnetischen Hysterese für den praktischen Einsatz nicht geeignet.

$$\mu_{\Delta} = \frac{\Delta B}{\Delta H} \quad \text{Gleichung 1}$$

Mit Hilfe des 3MA-X8-Verfahrens können jedoch der Überlagerungspermeabilität  $\mu_{\Delta}$  qualitative ähnliche Informationen unter Praxisbedingungen (z.B. kurze Messzeit, Prüfkopf in Aufsatztechnik, etc.) ermittelt werden. Anstatt die Hysterese wie in [18] beschrieben durch schrittweise Erhöhung der Feldstärke statisch zu durchlaufen, wird beim 3MA-X8-Verfahren eine sinusförmige Spannung  $V_{\text{mag}}$  zur Magnetisierung des Werkstoffs an dem Elektromagneten angelegt. Die nach [22] bei der Bestimmung von der Überlagerungspermeabilität  $\mu_{\Delta}$  eingesetzten zyklischen Feldstärkeänderungen kleiner Amplitude werden beim 3MA-X8-Verfahren realisiert, indem der Magnetisierungsspannung  $V_{\text{mag}}$  eine sinusförmige Anregung mit höherer Frequenz überlagert wird.

Auch wenn es verschiedene Möglichkeiten der Bewertung von Variationen der Permeabilität auf Basis der Kurven in Abbildung 5 gibt, wird im 3MA-X8-Verfahren die Veränderung des Imaginärteils  $\text{Im}(Z)$  über der Magnetisierungsspannung  $V_{\text{mag}}$  ausgewertet (vgl. Abbildung 6 rechts). Hierfür wird das Minimum des Imaginärteils (vgl. Abbildung 5 rechts) eliminiert, indem nach Gleichung 2 das Minimum  $\text{Im}(Z)_{\text{min}}$  subtrahiert wird [24] [25].

$$dZ = \text{Im}(Z) - \text{Im}(Z)_{\text{min}} \quad \text{Gleichung 2}$$

#### 4.1.5 21-dimensionaler 3MA-X8-Merkmalraum

Insgesamt werden aus den drei Messmethoden 21 subjektiv identifizierte mikromagnetische Merkmale extrahiert (siehe Tabelle 1) [24] [25]. Die Extraktionsvorschriften der Merkmale werden nachfolgend beschrieben.

Tabelle 1: Subjektiv identifizierte Merkmale der bisherigen Merkmalsextraktion des 3MA-X8-Verfahrens

Oberwellen	Wirbelstromimpedanz	Überlagerungspermeabilität
$V_{\text{amp}}$	$Z_{\text{max}}$	$DZ_{\text{max}}$
$I_{\text{amp}}$	$Z_{\text{mean}}$	$DZ_{\text{mean}}$
$A_3$	$Z_{\text{min}}$	$DZ_r$
$P_3$	$Phiz_{\text{max}}$	$DV_{75}$
$K$	$Phiz_{\text{mean}}$	$DV_{50}$
	$Phiz_{\text{min}}$	$DV_{25}$
	$W_{3z}$	$VC_{dz}$
	$W_{10z}$	$Rem$

##### 4.1.5.1 Oberwellenanalyse des Magnetisierungsstroms

Die im Rahmen dieser Messmethode subjektiv identifizierten und extrahierten Merkmale beschreiben die Oberwellen des Magnetisierungsstroms. Die Merkmale lauten im Einzelnen: Die Amplitude des Spannung- und Stromsignals im Zeitbereich ( $V_{\text{amp}}$ ,  $I_{\text{amp}}$ ), die Amplitude der dritten Oberwelle ( $A_3$ ) im Frequenzbereich, die Phase ( $P_3$ ) der dritten Oberwelle bezogen auf die Grundwelle im Frequenzbereich und der nach Gleichung 3 berechnete Klirrfaktor ( $K$ ), wobei hier zusätzlich  $A_0$ , die Amplitude der Grundwelle, rechnerisch eingeht. Harmonische höherer Ordnung werden aufgrund meist geringer Amplituden nicht berücksichtigt [24] [25].

$$K = \sqrt{\frac{A_3^2}{A_0^2}} \quad \text{Gleichung 3}$$

Die Amplitude der Magnetisierungsspannung  $V_{\text{mag}}$  zeigt aufgrund der spannungsgesteuerten Anregung des Elektromagneten in der Regel keine signifikanten Messeffekte, wird in der Praxis jedoch als kanalspezifischer Einstellparameter zum Abgleich von Sensorarrays verwendet.

#### 4.1.5.2 Wirbelstromimpedanzanalyse

Abbildung 6 zeigt links die Impedanz  $Z$  in der Impedanzebene für drei normalisierte Werkstoffe (100Cr6, S235, C45). Aus diesen Kurvenverläufen werden zur Wirbelstromimpedanzanalyse signifikante Merkmale identifiziert und quantifiziert, exemplarisch sind die Merkmale  $Z_{\text{min}}$  und  $\text{Phi\_}Z_{\text{min}}$  markiert. Bei der Wirbelstromimpedanzanalyse werden neben Betrag und Phase im Minimum ( $Z_{\text{min}}$ ,  $\text{Phi\_}Z_{\text{min}}$ ) und im Maximum ( $Z_{\text{max}}$ ,  $\text{Phi\_}Z_{\text{max}}$ ) der Impedanz  $Z$  auch der Schwerpunkt der Impedanzschleife ( $Z_{\text{mean}}$ ,  $\text{Phi\_}Z_{\text{mean}}$ ) sowie die Kurvenaufweitungen 3 % ( $W_{3Z}$ ) und 10 % ( $W_{10Z}$ ) unterhalb des Betragsmaximums extrahiert (vgl. Abbildung 6 links) [24] [25].

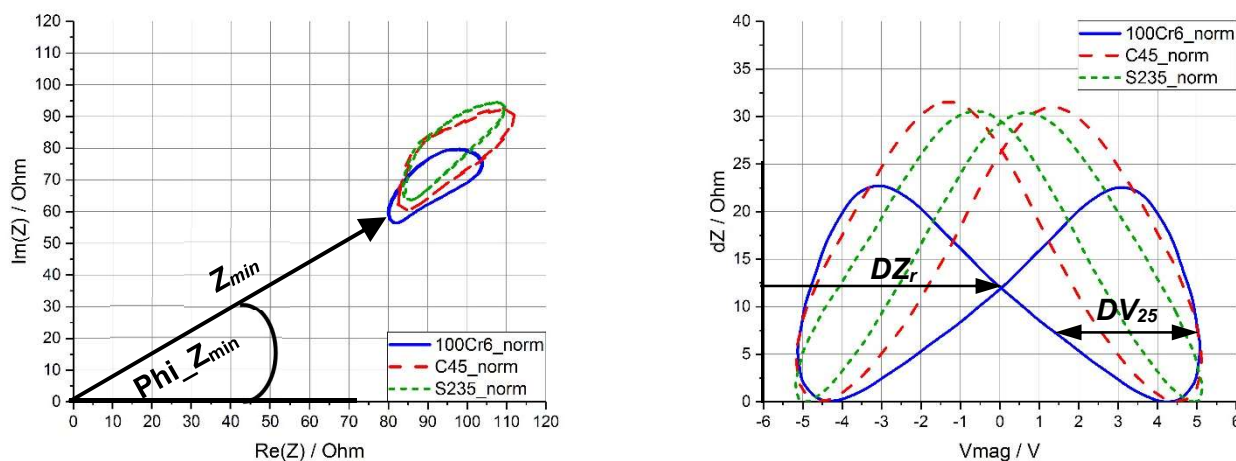


Abbildung 6: Werkstoffabhängigkeit der Impedanz  $Z$  nach Real- und Imaginärteil (links) und der qualitativen Überlagerungspermeabilität  $dZ$  über  $V_{\text{mag}}$  (rechts)

#### 4.1.5.3 Überlagerungspermeabilitätsanalyse

Abbildung 6 zeigt rechts die qualitative Überlagerungspermeabilität für drei normalisierte Werkstoffe (100Cr6, S235, C45) mit zwei exemplarischen Merkmalen. Wie auch in 4.1.5.2 wurden in den Kurvenverläufen signifikante Punkte identifiziert und quantifiziert. Die aus der Überlagerungspermeabilität extrahierten Merkmale sind der Schnittpunkt mit der Ordinate ( $dZ_r$ ), die Kurvenaufweitungen bei 25 % ( $dV_{25}$ ), 50 % ( $dV_{50}$ ) und 75 % ( $dV_{75}$ ) des Maximums von  $dZ$ , das Maximum von  $dZ$  ( $dZ_{\text{max}}$ ), der Schwerpunkt ( $dZ_{\text{mean}}$ ), das Merkmal  $\text{Rem}$  bestimmt die Asymmetrie der Kurve und kann als ein Maß für den Restmagnetisierungszustand des

Werkstoffs interpretiert werden. Hierbei wird der Mittelwert der beiden Spannungen  $V_{C_{\max 1}}$  und  $V_{C_{\max 2}}$  ermittelt, bei denen  $dZ$  die beiden Maxima aufweist und auf die Amplitude  $V_{\text{amp}}$  der Magnetisierungsspannung  $V_{\text{mag}}$  normiert (vgl. Gleichung 4).

$$\text{Rem} = \frac{V_{C_{\max 1}} + V_{C_{\max 2}}}{2 V_{\text{amp}}} \quad \text{Gleichung 4}$$

Die Extraktion dieser Merkmale basiert überwiegend auf subjektiven Unterschieden in den Messkurven. Hier besteht jedoch die Möglichkeit, dass geringe, aber signifikante Messeffekte übersehen werden, weshalb eine systematische und automatisierte Merkmalsextraktion untersucht wurde [24] [25].

#### 4.1.6 Weitere 3MA-X8-Merkmalräume

##### 4.1.6.1 Automatisierte Merkmalsextraktion

Im Folgenden wird eine automatisierte Merkmalsextraktion zur Merkmalsraumoptimierung vorgestellt. Im Wesentlichen werden dabei die verfügbaren Signale (Spannung, Strom, Realteil, Imaginärteil) automatisiert durch eine mehrdimensionale Kurvendiskussion und einer Fourier-Transformation ausgewertet [24] [25] [44].

Kurvendiskussion:

Einige der bisher extrahierten Merkmale können auch durch Kurvendiskussion extrahiert werden. Als Beispiel dient das Merkmal  $DZ_r$ , welches den Funktionswert von  $dZ$  an der Stelle  $V_{\text{mag}} = 0$  angibt. Dieses Prinzip wird bei der mehrdimensionalen Kurvendiskussion ausgenutzt, indem die charakteristischen Punkte (Nulldurchgänge, Minima, Maxima) in einzelnen Zeitsignalen ermittelt und die Funktionswerte der übrigen Zeitsignale an dieser Stelle bestimmt werden [24] [25].

Fourier-Transformation:

Eine weitere Möglichkeit, Merkmale aus Zeitsignalen zu extrahieren, bietet die Fourier-Transformation [45] [43]. Hiermit können periodische Signalverläufe in ihre Frequenzanteile zerlegt werden. Diese Art der Merkmalsextraktion wurde bisher zur Ermittlung der Merkmale  $A_3$  und  $P_3$  aus dem Magnetisierungsstrom  $I_{\text{mag}}$  verwendet. Hierbei zeigen ausschließlich Amplitude und Phase der dritten Oberwelle signifikante Abhängigkeiten vom Werkstoffzustand. Höhere werkstoffabhängige Oberwellen können extrahiert werden, indem  $I_c$

anstelle von  $I_{mag}$  auf Oberwellen untersucht wird, da durch den überlagerten, höherfrequenten Anteil von  $I_c$  ein breitbandigeres Frequenzspektrum untersucht wird. Die Fourier-Transformation wird im Rahmen der automatisierten Merkmalsextraktion zusätzlich auf die übrigen Zeitsignale wie Real- und Imaginärteil der Impedanz angewendet, um weitere werkstoffrelevante Merkmale zu extrahieren [24] [25].

#### 4.1.6.2 *Verwendung der Rohdaten*

Die bisher vorgestellten Methoden der Merkmalsextraktion wurden mit dem Ziel eingesetzt, charakteristische und signifikante Merkmale in den Signalverläufen der Rohdaten zu quantifizieren. Eine weitere Möglichkeit der Merkmalsextraktion ist die Verwendung der gesamten verfügbaren Information, nämlich die Betrachtung jeder einzelnen Stützstelle in den Zeitverläufen der Rohdaten (Strom, Spannung, Real- und Imaginärteil) als eigenes Merkmal. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die Anzahl der Stützstellen beim 3MA-X8-System von der Magnetisierungsfrequenz abhängt. Ursächlich hierfür ist die Tatsache, dass die Digitalisierung mit einer festen Abtastrate pro Magnetisierungsperiode erfolgt. Bei einer Digitalisierungsrate von 100 kHz und einer Magnetisierungsfrequenz von 100 Hz entstehen so 1000 Datenpunkte pro Periode, multipliziert mit den vier Kurvenverläufen der Rohdaten ergibt sich ein 4000-dimensionaler Merkmalsraum, während beim in 4.1.5 vorgestellten Merkmalsraum 21 Merkmale und beim in 4.1.6.1 vorgestellten Merkmalsraum 226 Merkmale pro Periode extrahiert werden.

## 4.2 Maschinelles Lernen

Während bei der univariaten Bewertung von mehrdimensionalen Merkmalsräumen lediglich die Information in den Merkmalen bewertet wird, hat die multivariate Analyse das Ziel, auch Informationen und Zusammenhänge zwischen den Merkmalen zu berücksichtigen.

Das Prinzip der maschinellen Lernalgorithmen soll nachfolgend an einem schematischen Beispiel veranschaulicht werden. Abbildung 7 zeigt die Ausprägung von zwei Merkmalen, die über die Anzahl der Messungen (in der Praxis häufig die Zeit) aufgetragen sind. Gemessen wurden zwei verschiedene Zustände (Target 1, Target 2), die sich in der Amplitude der Merkmale abbilden. Zwar zeigen die Merkmale im Mittel Abhängigkeiten von den gemessenen Zuständen, eine Bewertung jeder einzelnen Messung führt jedoch aufgrund der Streuung in den Merkmalen im Vergleich zum mittleren Abstand von Target 1 und Target 2 (Signal-Rausch-Abstand) dazu, dass nicht alle Messungen eindeutig einem Zustand zugeordnet werden können (vgl. Rahmen in Abbildung 7).

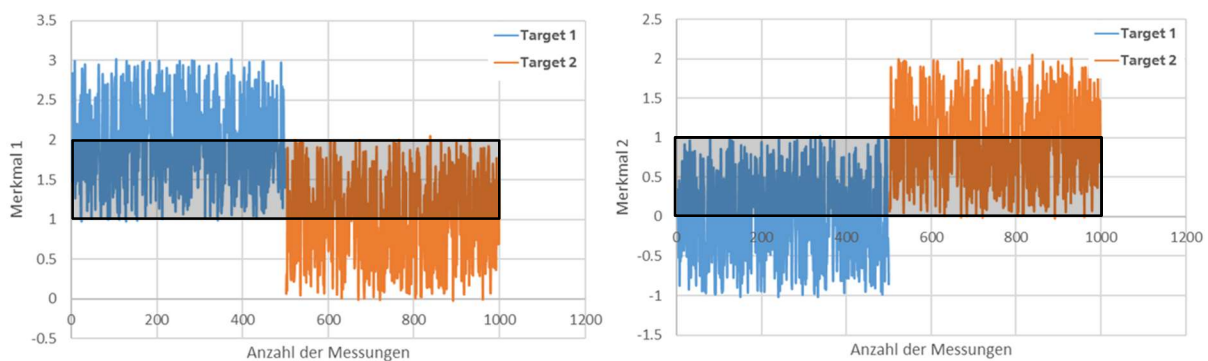


Abbildung 7: Univariate Betrachtung von zwei Merkmalen

Eine intuitive Möglichkeit der multivariaten Bewertung ist eine gemeinsame Betrachtung dieser beiden Merkmale. Diese können zum Beispiel gegeneinander aufgetragen werden, um Informationen zwischen den Merkmalen aufzudecken. Sofern die Daten nicht normal- oder gleichverteilt sind (vgl. Abbildung 8 links), können Zusammenhänge zwischen den Merkmalen „aufgedeckt“ werden. Dadurch ist es bei multivariater Betrachtung möglich, die beiden Zustände trotz Mehrdeutigkeiten innerhalb der einzelnen Merkmalen linear eindeutig voneinander zu trennen (vgl. Trennlinie in Abbildung 8 rechts). Diese multivariate Betrachtung eignet sich jedoch nicht, hochdimensionale Merkmalsräume zu analysieren, weil sehr viele Merkmale gegeneinander aufgetragen und verglichen werden müssten. An dieser Stelle setzen

Dimensionsreduktionsalgorithmen an. Diese haben das Ziel, möglichst viel Information eines mehrdimensionalen Merkmalsraums in einem reduzierten Sekundärmerkmalsraum abzubilden.

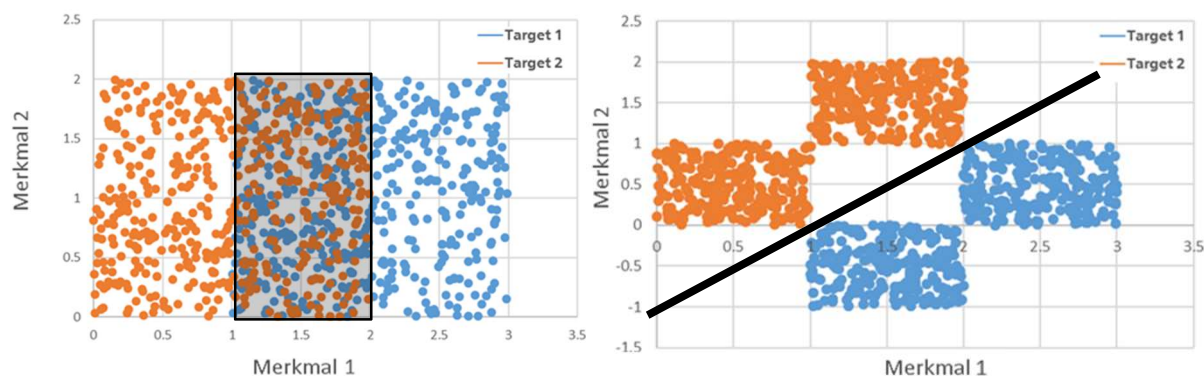


Abbildung 8: Multivariate Betrachtung von zwei Merkmalen (links keine eindeutige Trennung der Zustände, rechts eindeutige Trennung der Zustände)

Das folgende Vorgehen soll eine Grundidee der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Dimensionsreduktionsalgorithmen veranschaulichen. Eine Möglichkeit, die Zustände in Abbildung 8 rechts in einem eindeutigen Merkmal statt in zwei mehrdeutigen Merkmalen abzubilden besteht darin, das Koordinatensystem so zu rotieren, dass die Trenngerade die „neue“ Ordinate (Merkmal 2') darstellt; die Abszisse (Merkmal 1') liegt orthogonal dazu. Nun werden die Daten in dem „neuen“ Koordinatensystem auf Merkmal 1' projiziert (vgl. Abbildung 9 links). Der Informationsgehalt zum Trennen der beiden Klassen wurde von zwei auf eine Dimension reduziert (vgl. Abbildung 9 rechts).

Unterschieden wird zwischen unüberwachten und überwachten maschinellen Lernverfahren. Beide haben das Ziel, den Informationsgehalt in einem mehrdimensionalen Merkmalsraum in einer reduzierten Dimension abzubilden. Überwachte Algorithmen versuchen den Informationsgehalt eines Merkmalsraums über einen referenzierten Trainingsdatensatz mit optimiertem Bezug zu den Zielgrößen abzubilden. Unüberwachte Verfahren versuchen Muster in und zwischen den Merkmalen zu finden, die vom statistischen Rauschen abweichen [46] [47] [26] [31] [48].

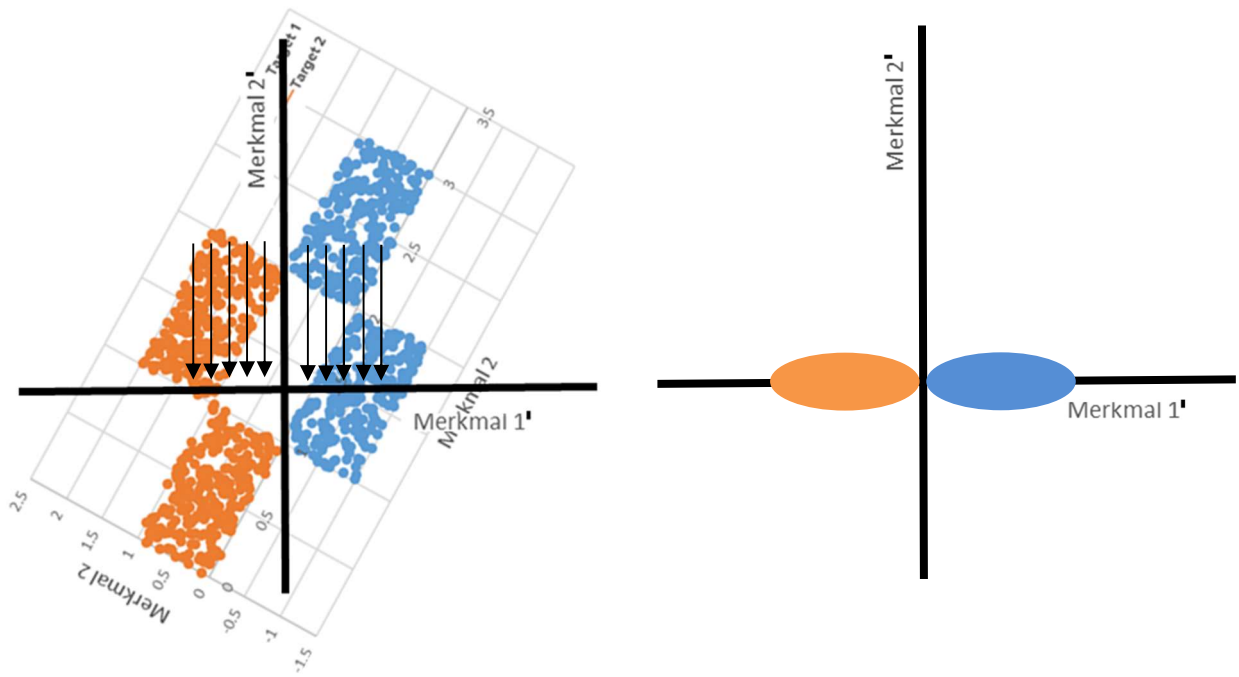


Abbildung 9: Rotation (links) und Projektion der Daten auf Merkmal 1' (rechts)

Die Quelle der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten maschinellen Lernalgorithmen ist die freie Software-Bibliothek scikit-learn [33], und die Algorithmen wurden sofern nicht explizit angegeben in der voreingestellten Parametrierung der Bibliothek verwendet. Die Auswahl an unüberwachten und überwachten maschinellen Lernalgorithmen zur Dimensionsreduktion, Klassifikation oder Regression ist dort bereits sehr groß. Tabelle 2 zeigt einen Teil der in scikit-learn verfügbaren Algorithmen [33].

All diese Algorithmen haben ihre anwendungsspezifischen Vor- und Nachteile. Dabei ist zu beachten, dass komplexe Modelle häufig sog. Hyperparameter besitzen, die aufwendig parametrisiert und entsprechend validiert werden müssen. Speziell das Verhältnis von Leistungsfähigkeit und Aufwand der Hyperparametrierung sind von besonderem Interesse. Lineare Modelle wie die lineare Diskriminanzanalyse oder die multivariate lineare Regression benötigen keine Hyperparametrierung und können mit verhältnismäßig geringem Aufwand trainiert und validiert werden. Diese Algorithmen eignen sich insbesondere dafür, lineare



Zusammenhänge im Merkmalsraum abzubilden. Stark nichtlineare Abhängigkeiten zwischen Merkmalen und Zielgröße können durch den Einsatz komplexerer Modelle abgebildet werden.

Tabelle 2: Teilübersicht der in scikit-learn verfügbaren Algorithmen zur Dimensionsreduktion, Klassifikation und Regression

<b>Dimensionsreduktion</b>	<b>Klassifikation</b>	<b>Regression</b>
Principal Component Analysis (PCA)	Linear Discriminant Analysis (LDA)	Multivariate Linear Regression (MLR)
Independent Component Analysis (ICA)	Nearest Neighbor Classifier (NNC)	Nearest Neighbor Regression (NNR)
Linear Discriminant Analysis (LDA)	Nearest Centroid Classifier (NCC)	Multivariate Ridge Regression (MRR)
Kernel-PCA (KPCA)	Naive Bayes Classifier (NBC)	Kernel Ridge Regression (KRR)
Factor-Analysis (FA)	Decision Tree Classifier (DTC)	Decision Tree Regression (DTR)
Non-Negative-Matrix-Factorization (NMF)	Random Forest Classifier (RFC)	Random Forest Regression (RFR)
Unsupervised Nearest Neighbor (UNN)	Stochastic Gradient Classifier (SGC)	Stochastic Gradient Regression (SGR)
Singular Value Decomposition (SVD)	Support Vector Classifier (SVC)	Support Vector Regression (SVR)
Restricted Boltzmann Machine (RBM)	Multilayer Perceptron Classifier (MLPC)	Multilayer Perceptron Regression (MLPR)

#### 4.2.1 Messunsicherheitsbetrachtung

Beim Einsatz der maschinellen Lernalgorithmen, beispielsweise in der mikromagnetischen Materialcharakterisierung, ist es wichtig, eine realistische Einschätzung über die Messunsicherheit zu haben, um die Grenzen der Vorhersagequalität abschätzen zu können. Hierzu zählt jedoch nicht nur die Messunsicherheit des Messsystems. Vielmehr geht es hier um die Messunsicherheit bezogen auf die gesamte Aufgabenstellung. Ein Beispiel soll dies veranschaulichen. Auch wenn die 3MA-X8-Messtechnik lokale Härteunterschiede von +/- 10 HV10 auflösen könnte, kann die Messunsicherheit in der Praxis deutlich höher sein. Hat beispielsweise das zur Referenzierung der Härte eingesetzte Verfahren, wie beispielsweise die Vickers-Härte [49], eine Auflösung von +/- 20 HV10, kann auch nur diese Auflösung trainiert werden. Hinzu kommt die Streuung innerhalb eines Werkstoffs, beispielsweise durch Inhomogenitäten in der Mikrostruktur oder des mechanischen Spannungszustandes, die sich zwar magnetisch (in der Permeabilität), aber nicht mechanisch (in der Härte) unterscheiden können.

Bei dem im Rahmen dieser Arbeit verwendeten 3MA-X8-System hängt die Messunsicherheit signaltechnisch vom nutzbaren Signal/Rausch-Abstand der Zustände in den Merkmalen ab. Zudem gibt es weitere Messunsicherheitskomponente, nämlich die Parametrierung des Systems und den Unsicherheiten im Experiment. Beispielsweise hat der Abstand zwischen dem 3MA-X8-Sensor und der Oberfläche des zu vermessenden Objektes aufgrund der geringen Permeabilität in Luft ( $\mu_{\text{Luft}} \approx 1$ ) einen viel höheren Einfluss auf den magnetischen Kreis als

Unterschiede in der Mikrostruktur eines ferromagnetischen Werkstoffes, in denen die Permeabilitäten mehrere Zehnerpotenzen über der in Luft [18], aber untereinander in ähnlicher Größenordnung liegen. Veranschaulicht führt dies dazu, dass mit steigendem Abstand zwischen Sensor und Messobjekt die geringen Permeabilitätsunterschiede in der Mikrostruktur von dem Einfluss der Sensorabhebung dominiert werden, bis irgendwann keine signifikante Information aus dem Messobjekt erfasst und letztlich der magnetische Kreis des Sensors in Luft gemessen wird. Diese vielen Freiheitsgrade mit Einfluss auf die Streuung des Messsystems führen zu der Bewertung, dass die Messgenauigkeit des 3MA-X8-Systems nicht absolut, sondern nur anwendungsspezifisch, beispielsweise in Form einer POD-Analyse (englisch Probability Of Detection), angegeben wird [50]. In der Praxis erfolgt in seltenen Fällen eine POD-Analyse, es wird vielmehr versucht, eine kundenseitige Vorgabe im Hinblick auf die Messgenauigkeit zu erfüllen. Daran gekoppelt ist die Messunsicherheit durch ein unvollständiges Experiment während der Trainingsphase des Systems und der Messunsicherheit der Referenzen. Während die Unsicherheit der Referenzen in der Regel recherchiert und entsprechend berücksichtigt werden kann, ist die unvollständige Zustandsvariation in den Experimenten, sei es aus wirtschaftlichen Gründen oder aus Gründen der Unwissenheit, ein Punkt, der nicht unbeachtet bleiben darf. Die Gefahr ist dabei, dass unbekannte Zustandsvariationen zu Mehrdeutigkeiten in den Merkmalen führen, die Fehlklassifikationen zur Folge haben. Zum einen sind Strategien erforderlich, wie man diese unbekanntenen Zustandsvariationen messtechnisch erfassen kann. Zum anderen sollten Systeme regelmäßig anhand neu aufgenommener und referenzierter Daten nachvalidiert werden, um die Modelle entsprechend nachtrainieren zu können. Es ist daher anzunehmen, dass es auch in Zukunft, trotz der vielen Möglichkeiten, maschinelle Lernalgorithmen zur automatisierten Datenauswertung zu verwenden, zwingend erforderlich bleiben wird, dass Experimentplanung und Datenauswertung nicht voneinander entkoppelt erfolgen.

#### 4.2.2 Klassifikation, Regression und Dimensionsreduktion

In diesem Kapitel werden die im Rahmen dieser Arbeit eingesetzten maschinellen Lernalgorithmen beschrieben und zur Veranschaulichung an Beispielen demonstriert.

##### 4.2.2.1 Nächste-Nachbarn-Klassifikator

Der „Nächste-Nachbarn-Klassifikator“ [30] ordnet Objekte entsprechend der kleinsten Distanz bekannter Klassen zu. Hierzu wird im ersten Schritt über ein geeignetes Distanzmaß der mehrdimensionale Abstand vom eingegangenen Messwert zu allen in der Datenbank

referenzierten Einträgen bestimmt. Insbesondere bei überlappenden Klassengrenzen oder Ausreißern in den Merkmalsausprägungen kann es sinnvoll sein, nicht nur den Abstand vom eingegangenen Messwert zum nächsten Nachbarn zu ermitteln, sondern die Abstände zu den  $k$  ( $> 1$ ) nächsten Nachbarn in die Klassifikation miteinzubeziehen. Dadurch reduziert sich der Einfluss von Ausreißern in den Messdaten. Wird zusätzlich um den eingegangenen Messwert ein mehrdimensionaler Suchradius definiert, kann dies ausgenutzt werden, um zu überprüfen, ob sich innerhalb dieses Bereichs überhaupt ausreichend viele Daten in Abhängigkeit von  $k$  befinden, um eine Klassifikation durchzuführen. Damit soll beispielsweise verhindert werden, dass ein Messwert klassifiziert wird, obwohl dieser einen derart großen Abstand zu allen bekannten Klassen hat, dass die Klassifikation eher zufällig erfolgt. Dies ist beispielsweise dann der Fall, wenn vom Modell unbekannte Zustandsvariationen gemessen werden [27].

Häufig eingesetzte Distanzfunktionen sind die Euklidische Distanz [51] und die Mahalanobis-Distanz [52]. Gleichung 5 zeigt die Berechnung der Euklidischen Distanz  $d_{\text{Euklid}}$  zwischen zwei Vektoren  $\vec{p}$  und  $\vec{q}$ . Zur Bestimmung der Distanz sollten Vektoren bzw. Merkmale unterschiedlicher Skalierung zuvor auf einen einheitlichen Wertebereich normiert werden, beispielsweise durch Division der Merkmalsausprägungen und deren Standardabweichung.

$$d_{\text{Euklid}}(\vec{p}, \vec{q}) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (p_i - q_i)^2} \quad \text{Gleichung 5}$$

Eine vorherige Normierung ist bei der Bestimmung der Mahalanobis-Distanz  $d_{\text{Mahala}}$  nicht erforderlich, da diese bei der Berechnung der Distanz die Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}$  zwischen den Vektoren berücksichtigt.

$$d_{\text{Mahala}}(\vec{p}, \vec{q}) = \sqrt{(\vec{p} - \vec{q})^T \mathbf{S} (\vec{p} - \vec{q})} \quad \text{Gleichung 6}$$

Bei Klassifikationsproblemen sind die Klassenzugehörigkeiten in den Trainings- und Testdaten bekannt. Eine Bewertung der Modellgüte ist ausschließlich an einem referenzierten Datensatz möglich, da ohne Kenntnis der zu klassifizierenden Zielgröße nicht bewertet werden kann, ob die Klassifizierung korrekt war. Zur Bewertung von Klassifikationsmodellen eignet sich die so genannte Konfusionsmatrix (vgl. Abbildung 10). Diese zeigt anschaulich, wie viele Messwerte korrekt (grün) und falsch (rot) klassifiziert wurden. Neben der Fehlklassifikation kann auch abgelesen werden, welcher Klasse der eingegangene Messwert zugeordnet wurde.

		Referenz				
		1	2	3	4	5
Vorhersage	1	8	2			
	2	2	7	1		
	3		1	9		1
	4				8	2
	5				2	7

Abbildung 10: Beispiel einer Konfusionsmatrix mit korrekt (grün) und falsch (rot) klassifizierten Messungen

Das Beispiel in Abbildung 10 lässt sich dahingehend interpretieren, dass von zehn Messungen pro Klasse, Klasse 1 acht, Klasse 2 sieben, Klasse 3 neun, Klasse 4 acht und Klasse 5 sieben Mal korrekt klassifiziert wurden. Zwei Mal wurde Klasse 1 fälschlicherweise als Klasse 2 vorhergesagt, zwei Mal wurde Klasse 2 fälschlicherweise als Klasse 1 und einmal als Klasse 3 vorhergesagt, Klasse 3 wurde fälschlicherweise einmal als Klasse 2 vorhergesagt, Klasse 4 wurde zwei Mal fälschlicherweise als Klasse 5 vorhergesagt und Klasse 5 wurde zwei Mal fälschlicherweise als Klasse 4 und einmal als Klasse 3 vorhergesagt. Die Konfusionsmatrix kann sowohl auf die Trainings- als auch auf die Testdaten angewendet werden.

Die Unterteilung des Datensatzes in Trainings- und Testdaten kann auf unterschiedliche Art und Weise erfolgen. Bei der weit verbreiteten K-Fold Cross-Validation wird der gesamte Datensatz in K Datensätze aufgeteilt. Wird die Größe von K gleich der Anzahl der unterschiedlichen Klassen gewählt und wurden die Messungen einer Klasse hintereinander durchgeführt, kann dies dazu führen, dass ganze Klassen im Training nicht berücksichtigt werden. In diesem Fall ist es sinnvoll, die Reihenfolge der Messdaten zu randomisieren. Danach werden die ersten  $K - 1$  Datensätze zum Training verwendet, der letzte dient als Testdatensatz zum Validieren. Anschließend wird die Vorhersagequalität für den Trainings- und Testdatensatz (Modellgüte) ermittelt. Als nächstes wird jeweils ein anderer Datensatz zur Validierung verwendet und die Modellgüte ermittelt, bis alle Datensätze einmal als Testdaten verwendet worden sind. Die Gesamtmodellgüte wird nun über den Mittelwert der einzelnen Modellgüten berechnet. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Daten bei Klassifikationsproblemen stratifiziert und randomisiert aufgeteilt [33]. Mit einer stratifizierten Aufteilung wird für jede Klasse ein fester Prozentsatz der Daten aus dem Datensatz zum Trainieren und zum Validieren der Modelle verwendet.

#### 4.2.2.2 Multivariate lineare Regression

Die multivariate (auch multiple oder mehrfache) lineare Regression [29] ist ein Verfahren aus der Regressionsanalyse, in dem versucht wird, eine abhängige Variable  $\vec{y}$  (Zielgröße) durch eine Linearkombination von unabhängigen Variablen  $\mathbf{X}$  (Merkmalsraum) und einer additiven Störgröße  $\vec{\varepsilon}$  (Messunsicherheit) zu erklären (vgl. Gleichung 7).

$$\vec{y} = \mathbf{X}\vec{\beta} + \vec{\varepsilon} \quad \text{Gleichung 7}$$

Ziel der multivariaten linearen Regressionsanalyse ist es die Regressionsparametermatrix  $\vec{\beta}$  so zu schätzen, dass der Störgrößenvektor bzw. die euklidische Norm über die Methode der kleinsten Fehlerquadrate minimiert wird [26].

Während es bei der Klassifikation im Sinne der Aufgabenstellung zulässig ist, die Aufteilung der Trainings- und Testdaten randomisiert durchzuführen, entspricht dieses Vorgehen nicht dem Ziel der Regressionsanalyse. Da es bei Regressionsproblemen praktisch unendlich viele Klassen gibt (es werden Zwischenwerte approximiert, jeder Zwischenwert würde eine Klasse darstellen), ist es erforderlich, ganze Intervalle bei kontinuierlich aufgenommenen Daten oder Gruppen bei diskreten Stützstellen aus den Trainingsdaten zu entfernen, um die Reaktion des Modells auf diese Testdaten zu überprüfen. Abbildung 11 zeigt schematisch den Unterschied zwischen diskret und kontinuierlich aufgenommenen 3MA-X8-Messungen am Beispiel der Spannungsbestimmung eines ferromagnetischen Werkstoffs (S235) in verschiedenen Zugversuchen und wie diese sinnvoll in Trainings- und Testdaten aufgeteilt werden können. Links wurden verschiedene Stützstellen angefahren und beim Halten der Spannung (in % der Streckgrenze  $R_e$ ) gemessen, rechts erfolgte die Messung während der Belastung (in MPa).

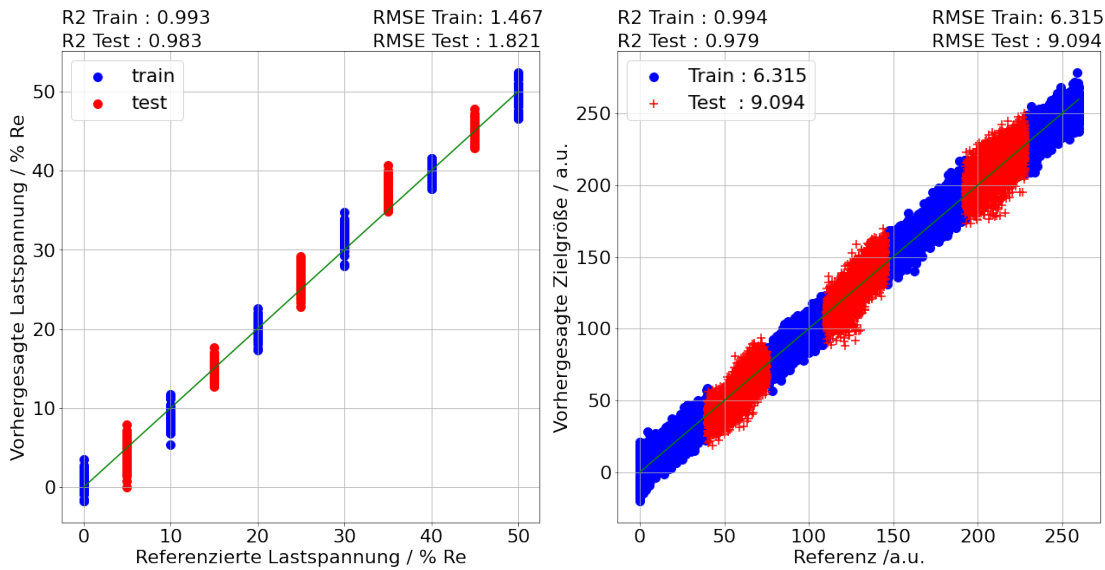


Abbildung 11: Vergleich gruppen- und intervallbasierte Datenaufnahme

Diese gruppen- bzw. intervallbasierte Bewertung entspricht dem eigentlichen Ziel der Regressionsanalyse, nämlich dass die Modelle beliebige Zwischenwerte berechnen können (in diesen beiden Beispielen wurde jede zweite Stützstelle bzw. jedes zweite Intervall zum Validieren des Modells verwendet). Bei der Ermittlung der Modelle sollte aber auch berücksichtigt werden, dass mit steigender Anzahl diskreter Stützstellen auch der Aufwand zur Datenaufnahme wächst, weshalb erneut auf die Wichtigkeit der Experimentplanung hingewiesen wird.

Zur Bewertung von Regressionsmodellen werden das Bestimmtheitsmaß  $R^2$  zur Beurteilung der Anpassungsgüte und die Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung RMSE (engl. Root Mean Square Error) als Maß der Streuung des Modells herangezogen. Ein Modell mit einem  $R^2$  von eins und einem RMSE von null würde bedeuten, die vorhergesagten Trainings- und Testdaten liegen ohne Abweichung exakt auf der vom Modell ermittelten Funktionsgeraden.

#### 4.2.2.3 Hauptkomponentenanalyse

Die Hauptkomponentenanalyse (engl. Principal Component Analysis, PCA) [53] ist eine unüberwachte Dimensionsreduktionstechnik. Diese hat das Ziel, Redundanzen zwischen den Merkmalen eines mehrdimensionalen Merkmalsraums zu reduzieren und entsprechend dem Beitrag zur totalen Varianz des Eingangsmerkmalsraums geordnet in einem linear unabhängigen Sekundärmerkmalsraum abzubilden.

Wird ein Vektor (analog zum Merkmalsraum)  $\vec{x}$  bestehend aus  $p$  Zufallsvariablen betrachtet, so wird im ersten Schritt eine lineare Funktion  $\vec{\alpha}_1' \vec{x}$  von  $\vec{x}$  gesucht, die die Varianz der Elemente von  $\vec{x}$  maximiert. Hierbei beschreibt  $\vec{\alpha}_1$  einen Vektor von  $p$  Konstanten  $\alpha_{11}, \alpha_{12}, \dots, \alpha_{1p}$ , der transponierte Vektor wird mit ' angegeben. Somit kann die Funktion  $\vec{\alpha}_1' \vec{x}$  wie in Gleichung 8 formuliert werden.

$$\vec{\alpha}_1' \vec{x} = \alpha_{11}x_1 + \alpha_{12}x_2 + \dots + \alpha_{1p}x_p = \sum_{j=1}^p \alpha_{1j}x_j \quad \text{Gleichung 8}$$

Im nächsten Schritt wird eine Funktion  $\vec{\alpha}_2' \vec{x}$ , die keine Korrelation zu  $\vec{\alpha}_1' \vec{x}$  aufweist, berechnet. Hierbei wird wieder darauf geachtet, dass die Varianz der Elemente maximal ist. Diese Abfolge wird  $k$ -fach wiederholt, sodass im  $k$ -ten Schritt eine lineare Funktion  $\vec{\alpha}_k' \vec{x}$  mit maximaler Varianz gefunden wird, die eine minimale Korrelation zu den vorherigen Funktionen  $\vec{\alpha}_1' \vec{x}, \vec{\alpha}_2' \vec{x}, \dots, \vec{\alpha}_{k-1}' \vec{x}$  zeigt. Jede dieser linearen Funktionen beschreibt eine Hauptkomponente, es können nach diesem Schema bis zu  $p$  Hauptkomponenten bestimmt werden.

Eine mathematisch effiziente Weise, die Hauptkomponenten der Verteilung des Vektors  $\vec{x}$  zu bestimmen, ist die Betrachtung der Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}$ . Es gilt, dass durch die Eigenvektoren  $\vec{\alpha}_k$  der Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}$ , die  $k$  Hauptkomponenten  $z_k$  (engl. Principal Component), mit  $k = 1, 2, \dots, p$ , durch Gleichung 9 berechnet werden.

$$z_k = \vec{\alpha}_k' \vec{x} \quad \text{Gleichung 9}$$

Anzumerken ist dabei, dass die Eigenvektoren  $\vec{\alpha}_k$  zugehörig zu den jeweilig  $k$  größten Eigenwerten sind. Daraus ergibt sich für die Varianz von  $z_k$  der Zusammenhang in Gleichung 10.

$$\text{var}(z_k) = \lambda_k \quad \text{Gleichung 10}$$

Es gilt somit, dass der Vektor  $\vec{\alpha}_1$  den Term  $\text{var}[\vec{\alpha}_1' \vec{x}] = \vec{\alpha}_1' \mathbf{S} \vec{\alpha}_1$  maximiert. Da für endliche  $\vec{\alpha}_1$  kein Maximum erreicht werden kann, muss eine Normalisierungsbedingung eingeführt werden, siehe Gleichung 11.

$$\vec{\alpha}_k' \vec{\alpha}_k = 1 \quad \text{Gleichung 11}$$

Die Normalisierungsbedingung gibt vor, dass die Summe der Quadrate von  $\vec{\alpha}_1$  gleich eins sein müssen. Um  $\vec{\alpha}_1' \mathbf{S} \vec{\alpha}_1$  unter der Bedingung (siehe Gleichung 4) zu maximieren, wird sich dem

Verfahren der Lagrange-Multiplikatoren bedient. Es gilt somit den nachstehenden Ausdruck, in Gleichung 12, zu maximieren.

$$\vec{\alpha}'_1 \mathbf{S} \vec{\alpha}_1 - \lambda (\vec{\alpha}'_1 \vec{\alpha}_1 - 1) \quad \text{Gleichung 12}$$

Hierbei steht  $\lambda$  für den Lagrange-Multiplikator. Wird der Ausdruck, in Gleichung 12, nach  $\vec{\alpha}_1$  differenziert, so ergeben sich die Gleichungen 13 und 14.

$$\mathbf{S} \vec{\alpha}_1 - \lambda \vec{\alpha}_1 = 0 \quad \text{Gleichung 13}$$

$$(\mathbf{S} - \lambda \mathbf{I}_p) \vec{\alpha}_1 = 0 \quad \text{Gleichung 14}$$

In Gleichung 15 ist  $\mathbf{I}_p$  die  $(p \times p)$  Einheitsmatrix. Folglich ist  $\lambda$  ein Eigenwert der Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}$  und  $\vec{\alpha}_1$  ist der zugehörige Eigenvektor. Um zu beurteilen, durch welchen der  $p$  Eigenvektoren der Term  $\vec{\alpha}'_1 \vec{x}$  die maximale Varianz enthält, wird Gleichung 15 maximiert.

$$\vec{\alpha}'_1 \mathbf{S} \vec{\alpha}_1 = \vec{\alpha}'_1 \lambda \vec{\alpha}_1 = \lambda \vec{\alpha}'_1 \vec{\alpha}_1 = \lambda \quad \text{Gleichung 15}$$

Folglich muss  $\lambda$  den größtmöglichen Wert annehmen. Somit ist  $\vec{\alpha}_1$  der Eigenvektor, der zum maximalen Eigenwert der Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}$  gehört und es gilt  $\text{var}(\vec{\alpha}'_1 \vec{x}) = \vec{\alpha}'_1 \mathbf{S} \vec{\alpha}_1 = \lambda_1$ . Somit kann die  $k$ -te Hauptkomponente von  $\vec{x}$  als  $\vec{\alpha}'_k \vec{x}$  berechnet werden, wobei  $\text{var}(\vec{\alpha}'_k \vec{x}) = \vec{\lambda}_k$  gilt.  $\vec{\lambda}_k$  ist der  $k$ -größte Eigenwert der Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}$  und  $\vec{\alpha}_k$  bildet den zugehörigen Eigenvektor [53].

Das folgende Experiment dient der Veranschaulichung der Hauptkomponentenanalyse. Das in Abbildung 12 links gezeigte Grobblechsegment wurde mit einem 3MA-X8-System und einem 3MA-X8-Sensor (Typ 9030) unter Einsatz eines XY-Manipulators mit einem mäanderförmigen Raster von  $2 \times 2 \text{ mm}^2$  (siehe Abbildung 12 rechts) vermessen. Der Sensor war bei der Messung mit einer Abhebung von 1 mm in Walzrichtung ausgerichtet und wurde bis zur halben Sensorfläche über den linken und rechten bzw. den oberen und unteren Blechrand bewegt.

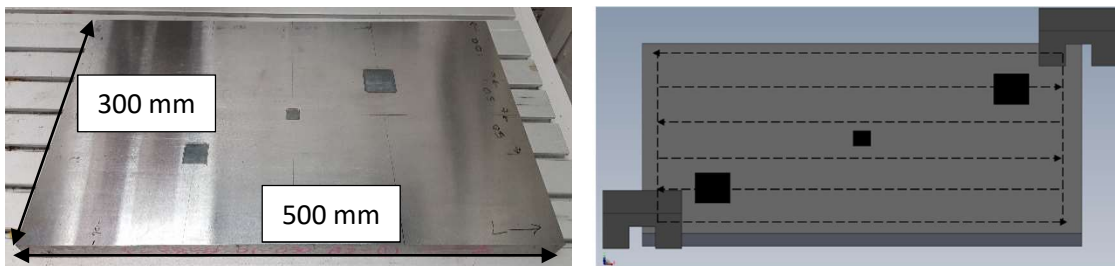


Abbildung 12: Grobblechsegment mit drei nach der Entfernung der Zunderschicht induktiv eingebrachten Hardspots (links) und schematische Darstellung der Messung (rechts)



Das 3MA-X8-System wurde dabei mit folgender Parametrierung betrieben:

- Magnetisierungsamplitude  $A_{\text{mag}} = 6 \text{ V}$
- Magnetisierungsfrequenz  $f_{\text{mag}} = 125 \text{ Hz}$
- Überlagerungspermeabilitätsamplitude  $A_{\text{ecip}} = 3 \text{ V}$
- Überlagerungspermeabilitätsfrequenz  $f_{\text{ecip}} = 3125 \text{ Hz}$

Zu dem in Abbildung 12 gezeigten Grobblechsegment existiert eine Zwillingsprobe, ebenfalls mit drei künstlich eingebrachten Hardspots. Abbildung 13 zeigt links und rechts die mit dem 3MA-X8-System aufgenommenen 21 Merkmale an diesen beiden Grobblechsegmenten. Durch überlagerte Störeinflüsse (z.B. remanente Magnetfelder, Randeffekte, etc.) kommt es zu Mehrdeutigkeiten in den Merkmalen, so dass die drei Hardspots univariat nicht erfasst werden können. Beispielsweise sind die Kontrastunterschiede im linken und rechten Randbereich der Grobblechsegmente vergleichbar mit denen der drei künstlich eingebrachten Hardspots. Auf den Daten des Grobblechsegments links wurde ein PCA-Modell trainiert, anschließend wurde die ermittelte Transformationsvorschrift auf beide Grobblechsegmente appliziert.

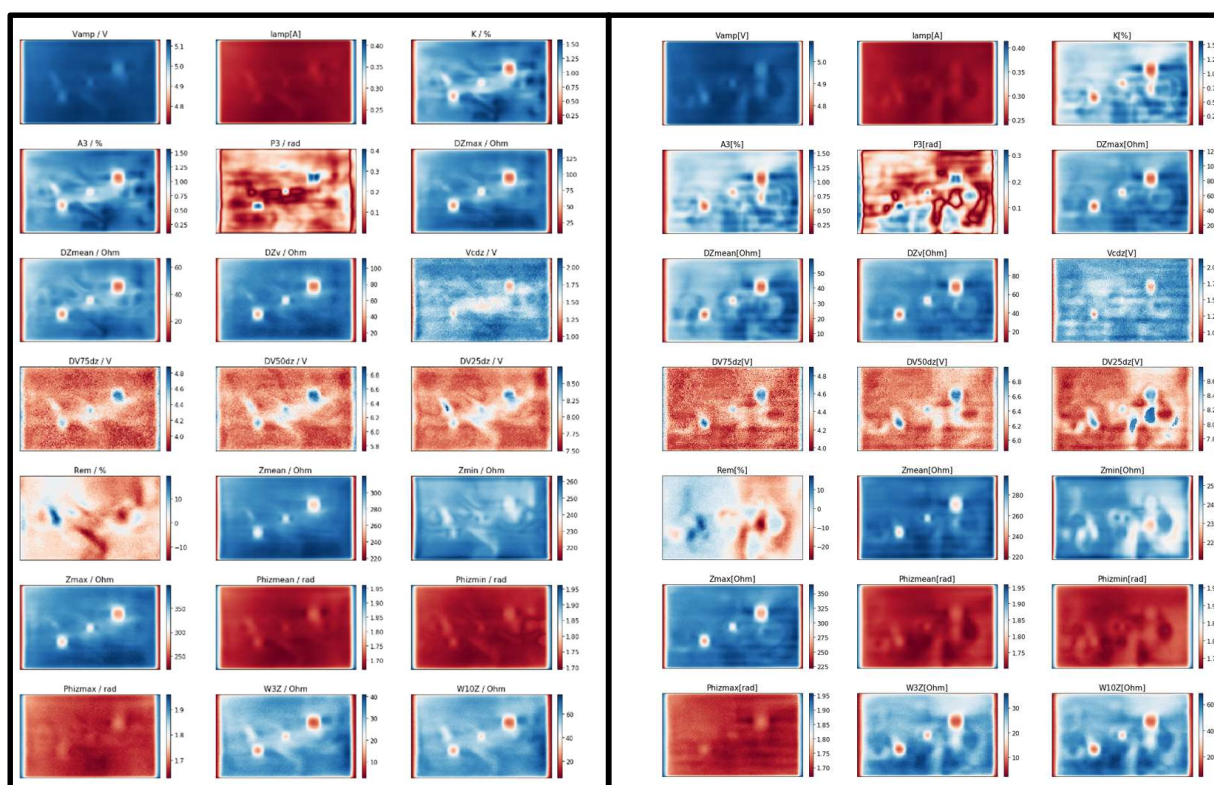


Abbildung 13: 21-dimensionaler 3MA-X8-Merkmalraum an zwei Grobblechsegmenten (links und rechts) mit jeweils drei künstlich eingebrachten Hardspots

Durch Einsatz der PCA [33] [54] wurde ein 21-dimensionaler Sekundärmerkmalsraum erzeugt. In welcher Reihenfolge die Hauptkomponenten extrahiert werden, hängt von ihrem Beitrag zur erklärten Varianz ab. Vereinfacht ausgedrückt steckt die meiste Information des 3MA-X8-Merkmalraum in der ersten Hauptkomponente, mit fallender Ordnung der Hauptkomponente verringert sich auch der Beitrag zur erklärten Varianz. Dies führt in der Praxis dazu, dass Hauptkomponenten höherer Ordnung oft ohne signifikanten Informationsverlust im weiteren Verlauf ignoriert werden können. Zudem erfüllen die Merkmale in diesem Sekundärmerkmalsraum das Kriterium der linearen Unabhängigkeit.

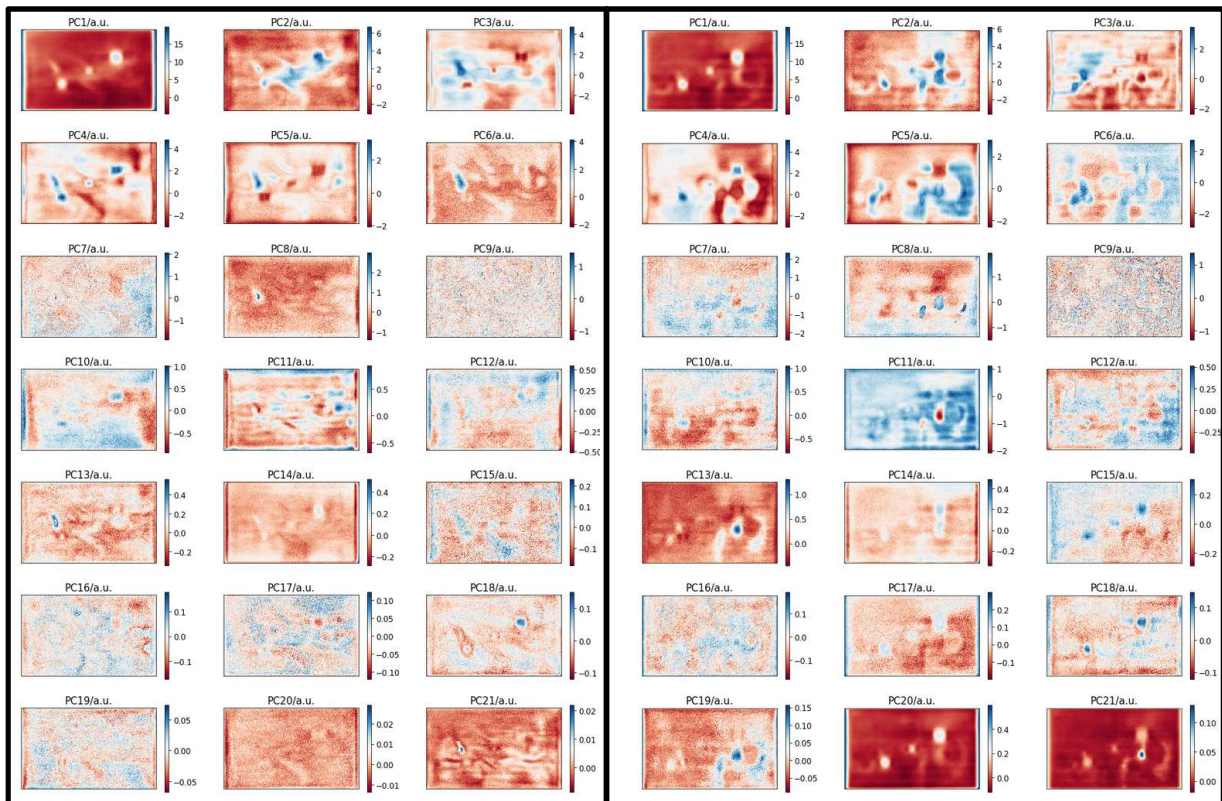


Abbildung 14: Sekundärmerkmalsraum nach der Extraktion von 21 Hauptkomponenten für das zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendeten Grobblechsegment

Abbildung 14 zeigt das Ergebnis der Hauptkomponentenanalyse mit 21 extrahierten Sekundärmerkmalen. Zwar zeigen einige Sekundärmerkmale Korrelationen zu den künstlich eingebrachten Hardspots, in keinem dieser Sekundärmerkmale bilden sich die Hardspots aber eindeutig ab. Beispielsweise werden die Randeffekte in der ersten Hauptkomponente sowohl in den zum Training, als auch in den zur Validierung verwendeten Daten mit höherer Amplitude bzw. Intensität abgebildet, als die Hardspots. In den beiden letzten Hauptkomponenten bilden sich Hardspots und weitere Einflussfaktoren lediglich in dem zum Validieren verwendeten Grobblechsegment ab. Dies ist ein Zeichen dafür, dass die Verteilung der Daten in höheren

Hauptkomponenten ungleich ist und Unterschiede in beiden Grobblechsegmenten dazu führen, dass diese Hauptkomponenten lediglich die Varianz des zum Training verwendeten Grobblechsegmentes abbilden und leichte Abweichung in den Messdaten überbewerten.

#### 4.2.2.4 Unabhängigkeitsanalyse

Die Unabhängigkeitsanalyse (engl. Independent Component Analysis ICA) hat als Ziel, eine lineare Darstellung nicht gaußverteilter Daten zu finden, sodass die Komponenten statistisch unabhängig sind. Motiviert ist die Entwicklung der ICA durch das berühmte Cocktail Party Problem [55].

Angenommen zwei Personen unterhalten sich, während zwei unterschiedlich im Raum positionierte Mikrofone gleichzeitig das Gespräch der beiden Personen aufzeichnen. Die beiden Mikrofone nehmen zwei Signale  $x_1(t)$  und  $x_2(t)$  auf, die jeweils die Stimmen der beiden Personen, Sprecher 1 mit  $s_1(t)$  und Sprecher 2 mit  $s_2(t)$ , überlagert abbilden. Die Signale  $x_1(t)$  und  $x_2(t)$  können durch  $s_1(t)$  und  $s_2(t)$  mit den gewichteten Faktoren  $a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22}$  wie Gleichungen 16 und 17 ausgedrückt werden.

$$x_1(t) = a_{11}s_1 + a_{12}s_2 \quad \text{Gleichung 16}$$

$$x_2(t) = a_{21}s_1 + a_{22}s_2 \quad \text{Gleichung 17}$$

Ausgehend von den aufgenommen Signalen  $x_1(t)$  und  $x_2(t)$  gilt es nun, die beiden Ursprungssignale  $s_1(t)$  und  $s_2(t)$  zu bestimmen. Zur Lösung der Aufgabenstellung müssen die Faktoren  $a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22}$  berechnet werden.

Die Unabhängigkeitsanalyse nutzt ein auf statistisch latenten Variablen beruhendes Modell. Unter der Annahme, dass  $n$  lineare Überlagerungen  $x_1, \dots, x_n$  von  $n$  unabhängigen Komponenten aufgezeichnet werden, so gilt für alle  $j$  Gleichung 18.

$$x_j = a_{j1}s_1 + a_{j2}s_2 + \dots + a_{jn}s_n \quad \text{Gleichung 18}$$

Im Unterschied zu obiger Problembeschreibung ist die Zeitabhängigkeit in dem Ausdruck verschwunden, da die Annahme getroffen wird, dass jede Überlagerung  $x_j$  und jede unabhängige Komponente  $s_k$  eine Zufallsvariable darstellen. Des Weiteren kann die Annahme getroffen werden, dass sowohl alle Variablen  $x_j$  als auch  $s_k$  einen Mittelwert von Null aufweisen. Falls diese Annahme nicht zutrifft, ist es notwendig, die aufgenommen Variablen

$x_j$  durch Subtraktion des Mittelwertes in einen mittelwertfreien Zustand zu überführen. Im Allgemeinen wird eine Vektor-Matrix-Schreibweise genutzt, um die weiteren Schritte der ICA zu beschreiben. Die Elemente des Zufallsvektors  $\vec{x}$  sind die überlagerten Signale  $x_1, \dots, x_n$ . Analog zu dieser Definition gilt für den Zufallsvektor  $\vec{s}$ , dass dieser die unabhängigen Komponenten  $s_1, \dots, s_n$  zusammenfasst. Die Matrix  $\mathbf{A}$  fasst die gewichteten Faktoren  $a_{ij}$  zusammen. Die Vektoren werden als Spaltenvektoren aufgefasst, sodass die Transponierung der Vektoren zu Zeilenvektoren führt. Das Modell kann somit folgendermaßen, wie in Gleichung 19, beschrieben werden.

$$\vec{x} = \mathbf{A}\vec{s} \quad \text{Gleichung 19}$$

Im Grunde wird durch dieses ICA-Modell, Gleichung 19, beschrieben, wie die überlagerten Signale auf Basis der unabhängigen Komponenten  $s_i$  generiert werden. Anhand dieses Modells kann die Problemstellung der ICA folgendermaßen zusammengefasst werden:

Es gilt die Matrix  $\mathbf{A}$  und die unabhängigen Komponenten  $\vec{s}$  anhand der beobachteten Zufallsvektoren  $\vec{x}$  zu bestimmen. Für die Komponenten  $s_i$  ist anzunehmen, dass diese statistisch unabhängig und nicht gaußverteilt sind. Des Weiteren wird die Annahme getroffen, dass die Matrix  $\mathbf{A}$ , welche im weiteren auch als Mixing Matrix bezeichnet wird, quadratisch ist. Um das ICA-Problem zu lösen, wird die Mixing Matrix bestimmt. Anschließend können die unabhängigen Komponenten  $s_i$  durch Gleichung 20 berechnet werden. Dabei ist  $\mathbf{W}$  die Inverse der Mixing Matrix.

$$\vec{s} = \mathbf{W}\vec{x} \quad \text{Gleichung 20}$$

Für die Berechnung der Mixing Matrix wird vereinfacht davon ausgegangen, dass alle unabhängigen Komponenten dieselbe Verteilung haben. Darüber hinaus wird Gleichung 21 folgendermaßen umgeschrieben:

$$y = \vec{w}'\vec{x} = \sum_i w_i x_i \quad \text{Gleichung 21}$$

In dieser Darstellung gilt es den Vektor  $\vec{w}$  zu berechnen, wobei der Vektor  $\vec{w}$  eine Zeile der inversen Mixing Matrix angibt. Prinzipiell ist es nicht möglich, eine exakte Kalkulation von  $\vec{w}$  durchzuführen, da keine Informationen über die Mixing Matrix  $\mathbf{A}$  vorliegen. Um dennoch eine Approximation von  $\vec{w}$  zu realisieren wird der zentrale Grenzwertsatz genutzt. Bevor die Approximation erklärt wird, soll zuvor die folgende Variable, Gleichung 22, eingeführt werden:

$$\vec{z} = \mathbf{A}'\vec{w}$$

Gleichung 22

Somit ergibt sich die nachstehende Gleichung 23:

$$y = \vec{w}'\vec{x} = \vec{w}'\mathbf{A}\vec{s} = \vec{z}'\vec{s}$$

Gleichung 23

Die Variable  $y$  ist somit eine Linearkombination von  $s_i$ , wobei die gewichteten Faktoren durch  $z_i$  beschrieben sind. Nach dem zentralen Grenzwertsatz gilt, dass die Summe von mehr als einer unabhängigen Variablen zu einer Gaußverteilung tendiert. Hieraus resultiert der Schluss, dass  $\vec{z}'\vec{s}$  mehr einer Gaußverteilung ähnelt als eine der unabhängigen Variablen  $s_i$ . In der Folge wird die sog. Non-Gaussianity maximiert, wenn  $\vec{z}'\vec{s}$  gleich einer der unabhängigen Variablen  $s_i$  ist. Aufgrund der Annahme, dass alle unabhängigen Komponenten der gleichen Verteilung folgen, ist nur ein Element von  $\vec{z}$  ungleich Null. Unter „Non-Gaussianity“ wird verstanden, dass keine Gaußverteilung vorliegt. Somit ist gezeigt, dass für  $\vec{w}$  ein Vektor berechnet werden kann, der die Non-Gaussianity von  $\vec{w}'\vec{x}$  maximiert. Als Kenngröße für die Non-Gaussianity können verschiedene statistische Größen implementiert werden, wie beispielsweise die Kurtosis, Negentropy, Mutual Information oder das im Rahmen dieser Arbeit eingesetzte Newton-Fixpunkt-Verfahren der FastICA [56].

Nachfolgend ein Beispiel zur Veranschaulichung der ICA. Die Daten aus Abbildung 13 werden nun mit einer ICA transformiert. Die von der ICA ermittelten Sekundärmerkmale erfüllen, im Gegensatz zur linearen Unabhängigkeit bei der PCA, je nach Implementierung unterschiedliche Kriterien der statistischen Unabhängigkeit. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die in scikit-learn implementierte FastICA [33] verwendet.

Bei der Anwendung der ICA gilt es zu beachten, dass aus ihr Mehrdeutigkeiten resultieren. Es ist daher nicht möglich, die erklärten Varianzen der unabhängigen Komponenten wie bei der PCA zu bestimmen und dadurch eine Rangordnung der Unabhängigkeitskomponenten zu erhalten. Die Rangordnung der extrahierten Unabhängigkeitskomponenten ist zufällig.

Bei der PCA wurde die Dimension des Sekundärmerkmalsraum pauschal auf die Dimension des Eingangsmerkmalsraums gesetzt. Dies ist gerechtfertigt, weil die Dimension des Sekundärmerkmalsraums keinen Einfluss auf die Sekundärmerkmale an sich hat, da die Hauptkomponenten entsprechend ihres Beitrags zur erklärten Varianz geordnet sind. Für die ersten fünf Hauptkomponenten spielt es also keine Rolle, ob insgesamt 21 (vgl. Abbildung 14) oder nur fünf Hauptkomponenten extrahiert werden – die Gestalt der durch die PCA

extrahierten Hauptkomponenten ist identisch (vgl. Abbildung 15 mit den ersten fünf Hauptkomponenten aus Abbildung 14).

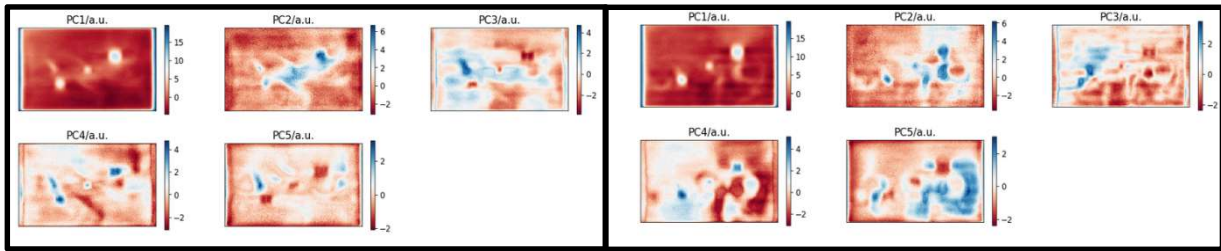


Abbildung 15: Sekundärmerkmalsraum nach der Extraktion von fünf Hauptkomponenten für das zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendete Grobblechsegment

Beim Einsatz der ICA ist es hingegen wichtig, sich mit der Fragestellung zu beschäftigen, welche Dimension der Sekundärmerkmalsraum haben soll. Vereinfacht ausgedrückt „zwingt“ man nämlich die ICA mit der Anzahl der zu extrahierenden Komponenten genauso viele statische Unabhängigkeitsmerkmale im Eingangsmerkmalsraum zu finden, wie man vorgibt. Das bedeutet auch, mit steigender Anzahl der extrahierten Komponenten können Messeffekte, sofern statistisch unabhängig in den Messdaten abgebildet, immer weiter segmentiert werden. Abbildung 16 zeigt den Vergleich des Hardspot-korrelierten Sekundärmerkmals nach der Extraktion von einem (oben links), drei (oben rechts), fünf (unten links) und 21 (unten rechts) unabhängigen Komponenten an dem in 4.2.2.3 vorgestellten Trainingsblech.

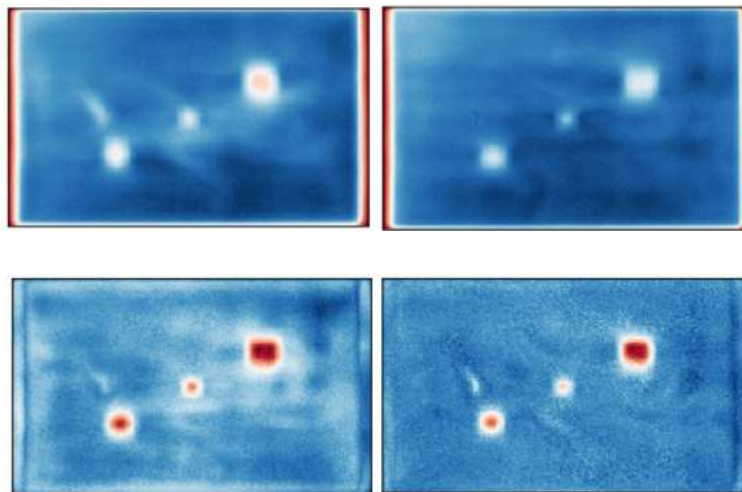


Abbildung 16: Hardspot-IC an dem zum Trainieren verwendeten Grobblechsegment nach Extraktion von einer (oben links), drei (oben rechts), fünf (unten links) und 21 (unten rechts) unabhängigen Merkmalen mittels ICA.

Es ist deutlich, dass sich die Hardspots mit steigender Anzahl extrahierter Unabhängigkeitsmerkmale immer deutlicher von allen anderen Messeffekten trennen, so dass

es nach multivariater Vorverarbeitung des Eingangsmerkmalsraums möglich ist, ab fünf extrahierten Unabhängigkeitskomponenten über einfache Schwellwerte die Hardspots automatisiert zu klassifizieren (vgl. Randeffekte bei der Extraktion von einem und drei Unabhängigkeitskomponenten). Die daraus folgende Hypothese, die Anzahl der extrahierten unabhängigen Merkmale zu maximieren, um die bestmögliche Segmentierung des gesuchten Messeffekts (z.B. den Hardspots) zu erreichen, scheitert daran, dass die Empfindlichkeit der Sekundärmerkmale auf nicht eintrainierte Variationen im Material mit der Anzahl extrahierter Komponenten steigt. Abbildung 17 zeigt die Validierung der in Abbildung 16 ermittelten Transformationsvorschrift an dem in 4.2.2.3 vorgestellten Zwillingsblech. Beispielsweise zeigt sich, dass die Validierung an den Transformationsvorschriften mit fünf (unten links) und 21 extrahierten Unabhängigkeitskomponenten (unten rechts) die Hardspots an der Zwillingsprobe sehr deutlich abgebildet werden. Das Ergebnis der Validierung mit 21 Sekundärmerkmalen zeigt aber auch, dass weitere Messeffekte abgebildet sind. Neben dem Randeffekt auf der linken und rechten Seite sind auch Einflüsse unterhalb des oberen rechten Hardspots zu erkennen, die sich nicht auf den Hardspot zurückführen lassen.

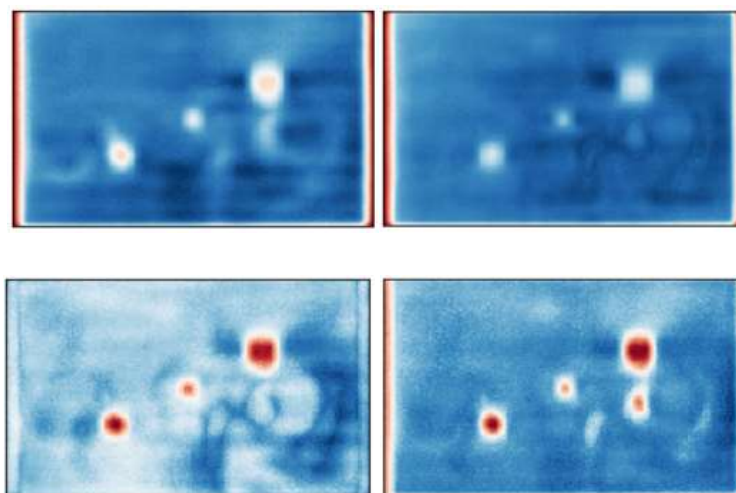


Abbildung 17: Hardspot-IC an dem zum Validieren verwendeten Grobblechsegment nach Extraktion von einer (oben links), drei (oben rechts), fünf (unten links) und 21 (unten rechts) unabhängigen Merkmalen

Abbildung 18 verdeutlicht das: Links ist der transformierte Sekundärmerkmalsraum der Trainingsplatte dargestellt, rechts der transformierte Sekundärmerkmalsraum der Validierplatte. Während in praktisch allen unabhängigen Komponenten Mehrdeutigkeiten auftreten (z.B. Hardspots, Randeffekte, etc.) ist der Vergleich zu Abbildung 19 mit fünf extrahierten Sekundärmerkmalen von der Charakteristik her vergleichbar (Hardspots eindeutig in IC3, Randeffekte in IC4, etc.). Das Verhalten kann analog zur Überempfindlichkeit, die in

4.2.2.3 beim Einsatz der PCA in höheren Hauptkomponenten zu beobachten ist, gedeutet werden. Werden zu viele Unabhängigkeitskomponenten extrahiert, bilden diese überwiegend die in der Trainingsplatte enthaltenen Strukturen ab und scheitern bei der Validierung unbekannter Daten, beispielsweise durch fertigungsbedingte Unterschiede in den Grobblechsegmenten.

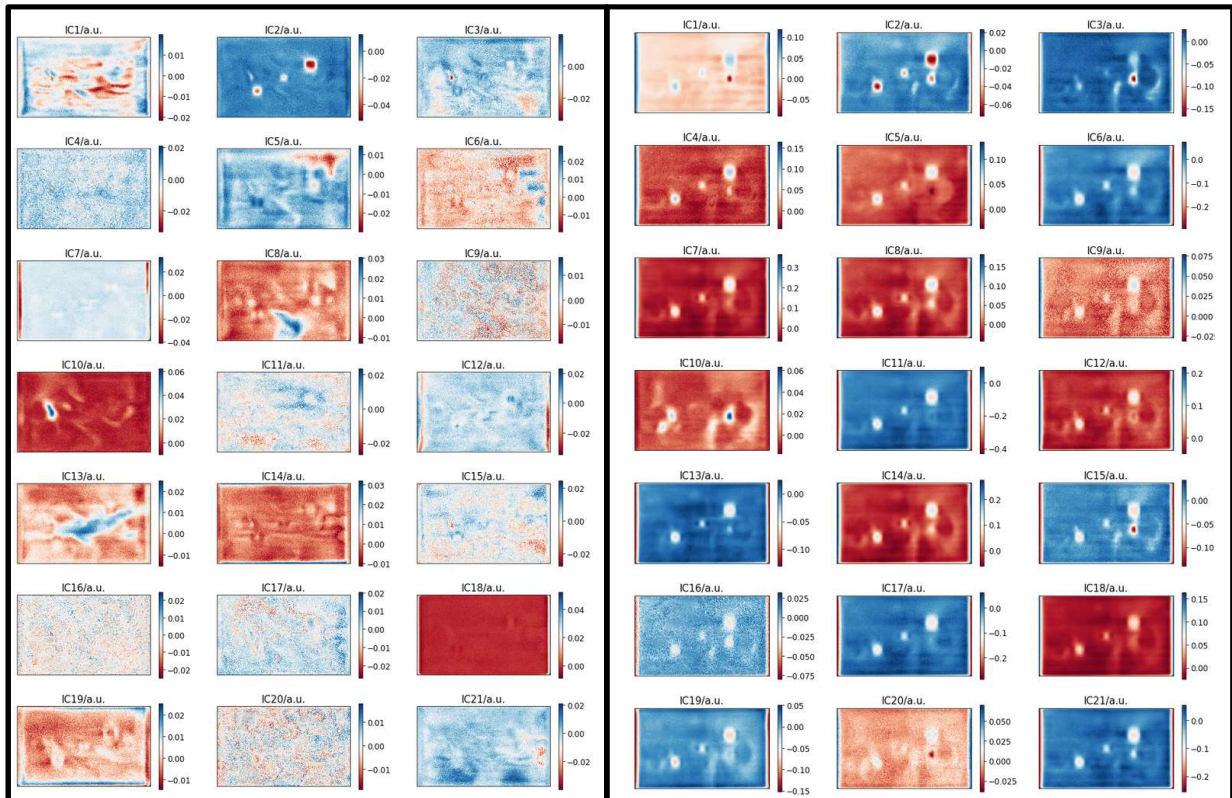


Abbildung 18: Sekundärmerkmalsraum nach der Extraktion von 21 unabhängigen Merkmalen für das zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendete Grobblechsegment

Aus diesem Grund sollte die Anzahl zu extrahierender unabhängiger Merkmale bei der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten FastICA immer im Hinblick auf die Validierung erfolgen. Zu empfehlen ist das Vorgehen, die Anzahl an unabhängigen Komponenten so lange zu erhöhen, bis sich der gesuchte Messeffekt (z.B. der Hardspot) eindeutig abbildet.

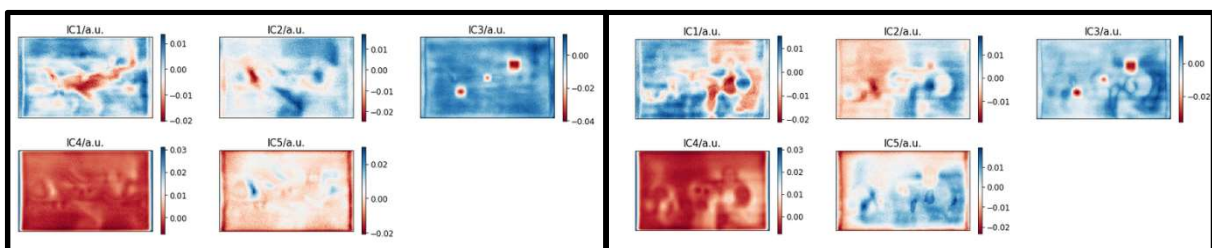


Abbildung 19: Sekundärmerkmalsraum nach der Extraktion von fünf unabhängigen Merkmalen für das zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendete Grobblechsegment



Mit geeigneter Parametrierung und Vorgehensweise kann die ICA somit verwendet werden, um hochdimensionale Merkmalsräume entsprechend physikalischer Einflussfaktoren zu segmentieren.

#### 4.2.2.5 Lineare Diskriminanzanalyse

Die lineare Diskriminanzanalyse (engl. Linear Discriminant Analysis, kurz LDA) [26] zählt zu den überwachten maschinellen Lernalgorithmen zur Dimensionsreduktion und Klassifizierung verschiedener Zielgrößen. Es wird eine Hyperebene gesucht, auf die projiziert, die Varianz innerhalb der Klassen minimiert und der Abstand zwischen den Klassenmittelwerten maximiert wird. Durch die orthogonale Transformation weist die LDA Ähnlichkeiten zur bereits beschriebenen PCA auf. Auf die Hyperebene projiziert, können die Daten in einem reduzierten Sekundärmerkmalsraum (die so genannten kanonischen Variablen) abgebildet werden. Über einen Schwellwert beim Zwei-Klassen-Problem bzw. über eine Abstandsklassifikation durch ein Distanzmaß beim Mehr-Klassen-Problem können die Zielgrößen klassifiziert werden.

Die Lösung der LDA geht auf R. Fisher [57] zurück. Die Grundidee ist, dass ein mehrdimensionaler Merkmalsraum die Daten in einen reduzierten Merkmalsraum (engl. Subspace) projiziert, in dem die Klassen linear separierbar sind (vgl. Abbildung 9).

Im ersten Schritt der LDA werden die Mittelwerte der  $p$  Datenpunkte, mit  $x_1, \dots, x_p \in \mathbb{R}^m$ , berechnet. Folglich können die beiden Klassenmittelwerte nach den Gleichungen 24 und 25 berechnet werden.

$$\vec{x}_A = \frac{1}{N_A} \sum_{x \in A} \vec{x} \quad \text{Gleichung 24}$$

$$\vec{x}_B = \frac{1}{N_B} \sum_{x \in B} \vec{x} \quad \text{Gleichung 25}$$

In Gleichung 24 und 25 geben  $N_A$  bzw.  $N_B$  die Anzahl der Elemente in der jeweiligen Klassen an. Anschließend ist es mit den Gleichung 26 und 27 möglich, die positiv-semidefiniten Streumatrizen  $\mathbf{S}_A$  bzw.  $\mathbf{S}_B$  zu berechnen. In den Gleichungen 26 und 27 gibt  $\vec{x}$  den Gesamtmittelwert an.

$$\mathbf{S}_A = \sum_{x \in A} (\vec{x} - \vec{x}_A)(\vec{x} - \vec{x}_A)' \quad \text{Gleichung 26}$$

$$\mathbf{S}_B = \sum_{x \in B} (\vec{x} - \vec{x}_B)(\vec{x} - \vec{x}_B)' \quad \text{Gleichung 27}$$

Die Matrizen  $\mathbf{S}_A$  und  $\mathbf{S}_B$  können als ein Maß für die Variabilität der entsprechenden Klasse interpretiert werden. Ziel ist es, eine Hyperebene, definiert durch den Vektor  $\vec{\Phi}$ , zu finden und die Daten auf diese zu projizieren. Dabei muss die Hyperebene die Eigenschaft erfüllen, dass die Varianzen der Klasse nach der Projektion minimal sind. Diese Bedingung lässt sich mathematisch durch Gleichung 28 beschreiben.

$$\min_{\vec{\Phi}} (\vec{\Phi}' \mathbf{S}_A \vec{\Phi} + \vec{\Phi}' \mathbf{S}_B \vec{\Phi}) = \min_{\vec{\Phi}} \vec{\Phi}' (\mathbf{S}_A + \mathbf{S}_B) \vec{\Phi} = \min_{\vec{\Phi}} \vec{\Phi}' \mathbf{S} \vec{\Phi} \quad \text{Gleichung 28}$$

Hierbei ist  $\mathbf{S}$  definiert als  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_A + \mathbf{S}_B$ . Darüber hinaus ist es möglich, die Streumatrix der beiden Klassen nach folgender Gleichung 29 zu berechnen:

$$\mathbf{S}_{AB} = (\vec{x}_A - \vec{x}_B)(\vec{x}_A - \vec{x}_B)' \quad \text{Gleichung 29}$$

Um schließlich die Hyperebene zu finden, die die Distanz der Klassenmittelwerte maximiert, während die Varianz in den jeweiligen Klassen minimiert wird, muss Gleichung 23 gelöst werden.

$$\max_{\vec{\Phi}} L(\vec{\Phi}) = \max_{\vec{\Phi}} \frac{\vec{\Phi}' \mathbf{S}_{AB} \vec{\Phi}}{\vec{\Phi}' \mathbf{S} \vec{\Phi}} \quad \text{Gleichung 30}$$

Gleichung 30 (Fisher's Criterion  $\max_{\vec{\Phi}} L(\vec{\Phi})$ ) kann beliebig viele Lösungen haben, da für eine

Lösung  $\vec{\Phi}^*$  alle Lösungen  $c * \vec{\Phi}^*$  gleichbedeutend sind. Damit dieses Problem gelöst werden kann, wird die Bedingung eingeführt, dass für den Nenner in Gleichung 30 folgende Gleichung 31 gelten muss.

$$\vec{\Phi}' \mathbf{S} \vec{\Phi} = 1 \quad \text{Gleichung 31}$$

Somit wird aus Gleichung 30 der nachfolgende vereinfachte Term, siehe Gleichung 32.

$$\max_{\vec{\Phi}} \vec{\Phi}' \mathbf{S}_{AB} \vec{\Phi} \quad \text{Gleichung 32}$$

Für diesen Ausdruck (Gleichung 33), kann eine Lagrange Funktion nach Gleichung 34 definiert werden.

$$\mathcal{L}_{\text{LDA}}(\vec{x}, \lambda) = \vec{\Phi}' \mathbf{S}_{AB} \vec{\Phi} - \lambda(\vec{\Phi}' \mathbf{S} \vec{\Phi} - 1) \quad \text{Gleichung 33}$$

In Gleichung 34 bezeichnet  $\lambda$  den Lagrange-Multiplikator für die Randbedingung in Gleichung 32. Da die Streumatrix zwischen den beiden Klassen  $\mathbf{S}_{AB}$  positiv-semidefinit ist, kann das Problem als konvex betrachtet werden, wodurch das globale Minimum wie in Gleichung 34 berechnet werden kann.

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{\text{LDA}}(\vec{x}, \lambda)}{\partial \vec{x}} = 0 \leftrightarrow \mathbf{S}_{AB} \vec{\Phi} - \lambda \mathbf{S} \vec{\Phi} = 0 \quad \text{Gleichung 34}$$

Zuletzt wird die gesuchte Hyperebene  $\vec{\Phi}$  als Eigenvektor mit dem kleinsten Eigenwert des zugehörigen Eigenwertsystems (Gleichung 35) gefunden.

$$\mathbf{S}_{AB} \vec{\Phi} = \lambda \mathbf{S} \vec{\Phi} \quad \text{Gleichung 35}$$

In der soeben betrachteten Herleitung der linearen Diskriminanzanalyse wurden ausschließlich Daten aus zwei Klassen  $A$  bzw.  $B$  betrachtet. Für Multiklassen-Probleme kann diese Formulierung der LDA um die zusätzlichen Klassen erweitert werden, sodass  $\mathbf{S}$  wie in Gleichung 36 dargestellt geschrieben werden kann.

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \dots + \mathbf{S}_n \quad \text{Gleichung 36}$$

Die klasseninterne Streumatrix wird somit folgendermaßen, siehe Gleichung 37, berechnet:

$$\mathbf{S}_{1,\dots,n} = \sum_{i=1}^n p_i (\vec{x}_i - \vec{x})(\vec{x}_i - \vec{x})' \quad \text{Gleichung 37}$$

Dabei gibt  $p_i$  die Anzahl der Daten in der  $i$ -ten Klasse an. Die Variable  $\vec{x}_i$  gibt den jeweiligen klasseninternen Mittelwert und  $\vec{x}$  den Gesamtmittelwert an. Für  $\vec{x}$  gilt Gleichung 38:

$$\vec{x} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^n p_i \vec{x}_i \quad \text{Gleichung 38}$$

Das Eigenwertproblem kann somit folgendermaßen für ein Multiklassenproblem generalisiert werden, siehe Gleichung 39:

$$S_{1,\dots,n}\vec{\Phi} = \lambda S\vec{\Phi}$$

Gleichung 39

Des Weiteren kann die LDA nicht ausschließlich genutzt werden, um eine Hyperebene mit bestmöglicher Separierbarkeit zu finden, sondern dieser Algorithmus kann auch als Klassifikator eingesetzt werden. Nachdem die Transformationsvorschrift für die Hyperebene  $\vec{\Phi}$  gefunden ist, kann die Klassifikation im transformierten Raum anhand eines Distanzmaßes erfolgen. So kann die Klassenzugehörigkeit eines neuen Datenpunktes  $\vec{z}$ , wie folgt ermittelt werden (Gleichung 33):

$$class(\vec{z}) = \arg \min_n \{d(\vec{z}\vec{\Phi}, \vec{x}_n\vec{\Phi})\}$$

Gleichung 40

Zur Klassifikation werden die Schwerpunkte der Klassen  $\vec{x}_n$  benötigt. Im ersten Schritt werden also die Schwerpunkte aller Klassen in den neuen, durch  $\vec{\Phi}$  definierten Unterraum projiziert. Der neu einzuordnende Datenpunkt wird also der Klasse zugeordnet, deren Schwerpunkt im durch  $\vec{\Phi}$  definierten Unterraum diesem am nächsten liegt. Dabei wird das jeweilige Distanzmaß  $d$  als Bewertungsgröße des Abstandes genutzt. Im Rahmen dieser Arbeit wird die LDA [58] mit anschließender Bewertung der Mahalanobis-Distanz zur Klassifikation eingesetzt.

Zur Veranschaulichung soll die Dimensionsreduktion und Klassifikation durch die LDA mit dem in Abbildung 13 gezeigten Datensatz zur Detektion der lokalen Inhomogenitäten durchgeführt werden. Zur Modellerstellung wurden 20 % des Datensatzes randomisiert als Trainingsdaten verwendet.

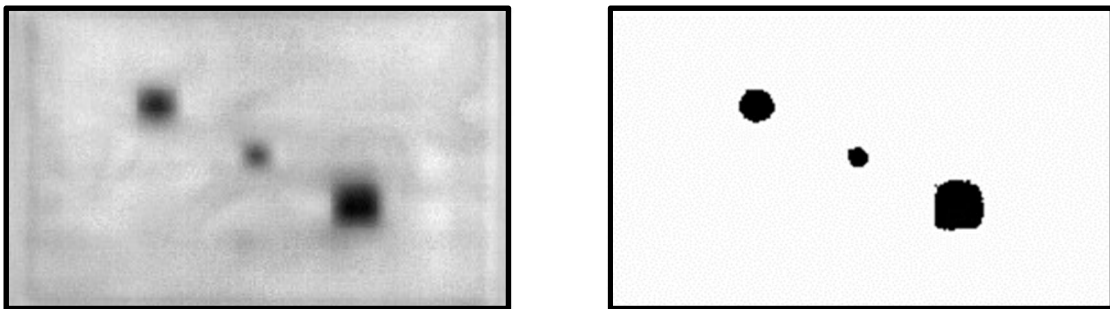


Abbildung 20: Transformierte kanonische Variable (links) und Klassifikationsergebnis (rechts)

Abbildung 20 zeigt links den aus Abbildung 13 auf eine kanonische Variable reduzierten Sekundärmerkmalsraum, auf dessen Basis die Klassifikation durch Bewertung der Mahalanobis-Distanz (rechts) erfolgt.

### 4.2.3 Systemkomplexität

Die Vorhersagequalität einer Klassifikation oder Regression hängt im Wesentlichen von der messtechnischen Empfindlichkeit und den eingesetzten Modellen ab. Durch die Merkmalsextraktion wird versucht, die messtechnische Empfindlichkeit quantifiziert abzubilden, während die Modelle aus den verfügbaren Merkmalen die entsprechende reduzierte Dimension bzw. Zielgröße ermitteln sollen. Wird eine Zielgröße während der Trainings- und Validierphase nicht in ausreichender Qualität vorhergesagt, hat das im Wesentlichen einen Grund: Das Gesamtsystem, also die Kombination aus Merkmalsraum und Modell, bietet nicht die notwendige Komplexität, um die Aufgabenstellung zufriedenstellend zu lösen. Mit diesen beiden Stellschrauben kann die Komplexität des Gesamtsystems gesteuert werden. Nachfolgend wird am Beispiel der Regressionsanalyse aufgezeigt, welchen Einfluss die Komplexität von Merkmalsraum und eingesetztem Modell auf die Vorhersagequalität hat. Es gilt, die Komplexität der Modelle an die Aufgabenstellung zu knüpfen, da bei Modellen hoher Komplexität die Gefahr besteht, dass in nicht repräsentativen oder dünn besetzten Trainingsdaten Strukturen entdeckt werden, die (insbesondere bei unvollständigen Experimenten) dazu führen können, dass dem Modell nicht ausreichend bekannte Zustandsvariationen falsch bewertet werden. Da Modelle mit zu geringer Komplexität die Zusammenhänge sehr vereinfacht und unvollständig abbilden, kann zudem davon ausgegangen werden, dass diese eine generalisiertere (wenn auch unter Umständen nicht ausreichend gute) Vorhersage liefern. Umgekehrt wird es plausibler: Wurde ein Modell ermittelt, das auf Basis der linearen Regression ausreichend gute Ergebnisse liefert, dann sollten Erhöhungen der Modellkomplexität mit Bedacht durchgeführt werden, da Unterschiede durch die Varianz der Trainingsdaten oder durch unvollständige Experimente bei zu hoher Modellkomplexität überwertet werden könnten [11].

Zur Veranschaulichung wurde ein Experiment durchgeführt, in dem zylinderförmige Proben dreier Werkstoffe (100Cr6, C45, S235) in eine Zugmaschine eingespannt und mit elf unterschiedlichen Zugspannungen von 0 bis 50 % ihrer Streckgrenze  $R_e$  mit einer Schrittweite von 5 %  $R_e$  belastet wurden. In den Haltezeiten der Belastung wurden die Proben mit einem 3MA-X8-Sensor vermessen (siehe Abbildung 21 links) [37].

Die Stützstellen der Spannungszustände 0 %, 10 %, 20 %, 30 %, 40 % und 50 %  $R_e$  wurden zum Trainieren, die Spannungszustände 5 %, 15 %, 25 %, 35 % und 45 %  $R_e$  zum Validieren der multivariaten linearen Regression verwendet.

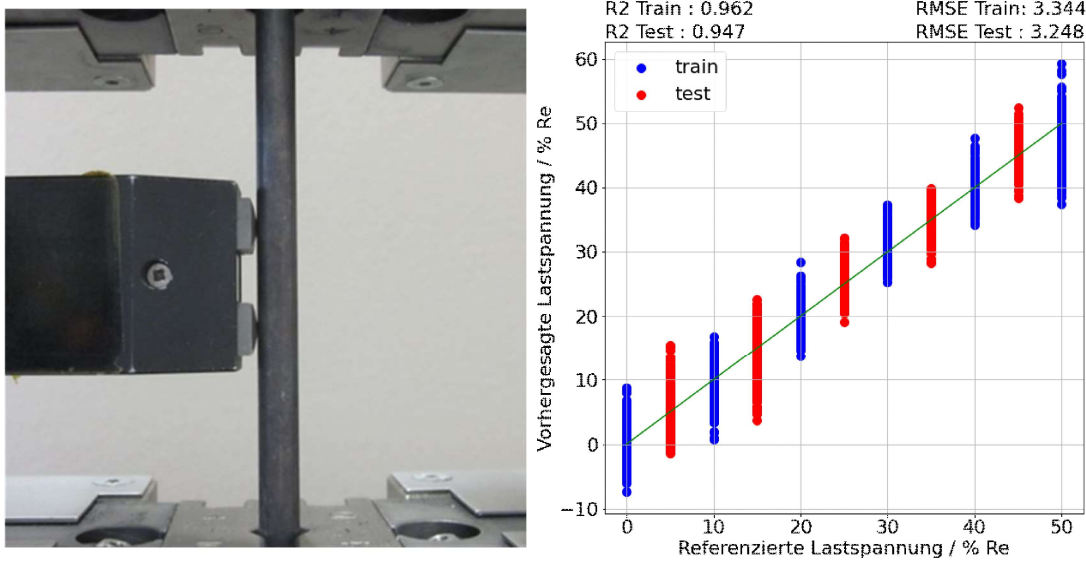


Abbildung 21: Eingespannte Probe mit aufgesetztem 3MA-X8-Sensor (links) und ML-R Abbildung der Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalraums (rechts)

Die Vorhersagequalität der Trainingsdaten auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums liegt bei  $R^2_{\text{Train}} = 0,962$  und  $\text{RMSE}_{\text{Train}} = 3,34 \% R_e$ , die Vorhersagequalität der Testdaten bei  $R^2_{\text{Test}} = 0,947$  und  $\text{RMSE}_{\text{Test}} = 3,25 \% R_e$  (siehe Abbildung 21 rechts). Die Trainings- und Testdaten bilden sich in ähnlicher Qualität ab, wobei die Testdaten bei 5 % und 15 % qualitativ höhere Streuungen aufweisen. Interessant ist auch der qualitative Vergleich mit Abbildung 11 links mit einem Werkstoff (S235) in der Datenbank. Dieser zeigt auf, dass sich die Vorhersagequalität des Gesamtsystems bei drei Werkstoffen in einem Modell signifikant verschlechtert. Dies kann dahingehend interpretiert werden, dass die veränderte und überlagerte Zustandsvariation durch die drei Werkstoffe dazu führt, dass die Komplexität des Gesamtsystems nicht ausreichend hoch ist, diese Einflüsse entsprechend gut abzubilden.

Um einen Einblick in den Aufwand der Hyperparametrierung zu erhalten, wurden drei weitere Regressionsalgorithmen mit zu optimierenden Hyperparametern ausgewählt und mit dem Ergebnis der multivariaten linearen Regression verglichen. Sowohl die Multi-Layer-Perceptron-Regression (MLP-R) [59] (`sklearn.neural_network.MLPRegressor` aus [33]), als auch die Support-Vector-Regression (SV-R) [60] (`sklearn.svm.SVR` aus [33]) und die Kernel-Ridge-Regression besitzen Hyperparameter, deren Einstellung einen signifikanten Einfluss auf die Vorhersagequalität der Modelle hat. Da diese Algorithmen im weiteren Verlauf dieser Arbeit keine Rolle mehr spielen, wird auf eine detaillierte Beschreibung verzichtet. Im Grunde ermitteln diese Algorithmen ebenfalls Modelle, die Ermittlung erfolgt jedoch nach anderen Kriterien. Das Ziel dieses Experimentes ist dabei nicht, ein im Vergleich zur multivariaten

linearen Regression besseres Modell zu ermitteln. Es soll vielmehr aufgezeigt werden, ob und mit welchem Aufwand bei Optimierung eines Hyperparameters eine vergleichbare Vorhersagequalität erreicht werden kann. Hierzu werden die Regressionsalgorithmen im linearen Modus betrieben (lineare Kernel-Funktion, lineare Aktivierungsfunktionen) [37].

#### 4.2.3.1 Support-Vector-Regression

Der zu variierende Hyperparameter ist der Hyperparameter  $C$ , mit dem gesteuert werden kann, wie scharf die Klassengrenzen voneinander getrennt werden (Breite des Margins) [61] [60]. Abbildung 22 zeigt die Abhängigkeit von  $R^2$  und RMSE für Trainings- und Testdaten bei Variation von  $C$  im Bereich von  $10^{-6}$  bis  $10^2$ .

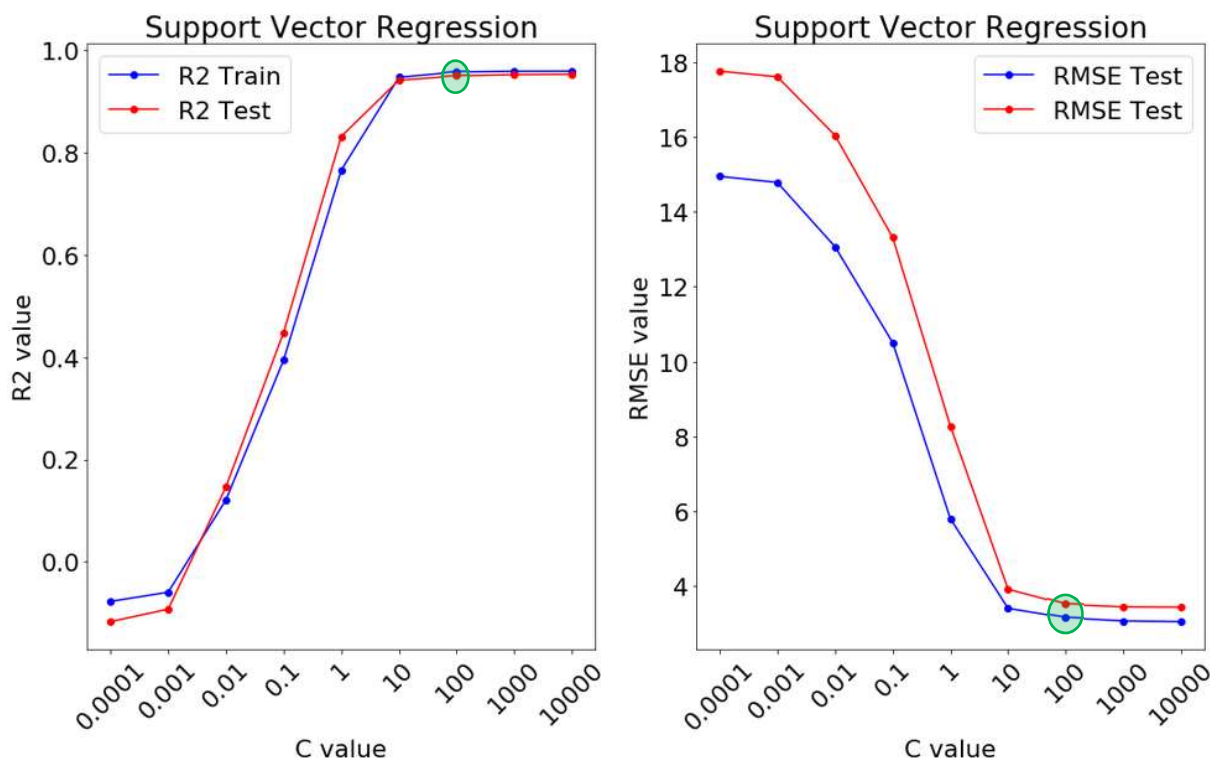


Abbildung 22:  $R^2$  (links) und RMSE (rechts) der Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalraum für SV-R bei Variation von  $C$

Das Modell erreicht von  $10^{-6}$  aus seine beste Performance (grüner Kreis) von  $R^2_{\text{Train}} = 0,9593$  und einem  $\text{RMSE} = 3,45\% R_e$  bei den Trainingsdaten und  $R^2_{\text{Test}} = 0,9528$  und einem  $\text{RMSE} = 3,07\% R_e$  bei den Testdaten ab einer Parametrierung von  $C = 100$ , höhere Werte führen zu keiner signifikanten Verbesserung mehr. Im Vergleich mit der multivariaten linearen Regression zeigt sich, dass das Modell die Trainingsdaten mit höherer Genauigkeit abbildet, die Testdaten werden vergleichbar abgebildet. Obwohl der Wertebereich von  $R^2$  zwischen 0

und 1 liegt, zeigt  $R^2$  bei der Parametrierung von  $C$  auch Werte kleiner 0. Dies ist mathematisch unplausibel, ist jedoch das Resultat einer ungeeigneten Parametrierung der Modelle. [33] [37].

#### 4.2.3.2 Multilayer-Perceptron-Regression

In diesem Experiment werden alle Hyperparameter entsprechend den Standardeinstellungen vorgegeben, geändert wird die Aktivierungsfunktion (Linear), die Anzahl der Neuronen im Hidden Layer (1), variiert wird der Hyperparameter Alpha = von  $10^{-5} - 10^4$ , der ein Maß für die L2-Regularisierung des Modells ist [36].

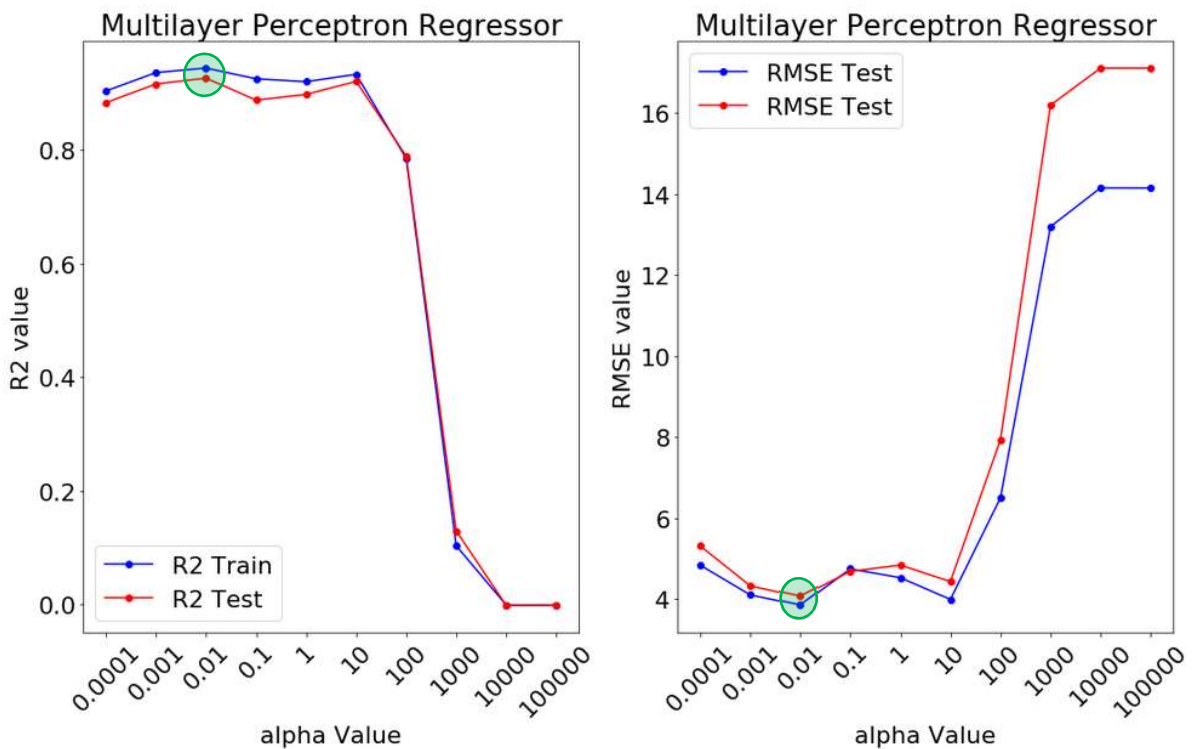


Abbildung 23:  $R^2$  (links) und RMSE (rechts) der Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen Merkmalsraum für MLP-R unter Variation des Hyperparameter Alpha im Hidden Layer

Das Modell erreicht seine beste Vorhersagequalität mit  $R^2_{\text{Train}} = 0,9$  und einem  $\text{RMSE} = 5,71\% R_e$  für die Trainingsdaten, die Testdaten werden mit  $R^2 = 0,805$  und einem  $\text{RMSE} = 5,86\% R_e$  bei  $\text{Alpha} = 0,01$  vorhergesagt (vgl. Abbildung 23). Im Vergleich mit der multivariaten linearen Regression zeigt sich, dass das Modell sowohl die Trainings- als auch die Testdaten in ähnlicher Qualität abbildet [37].

#### 4.2.3.3 Kernel-Ridge-Regression

Eine interessante Alternative zur multivariaten linearen Regression ist die Kernel-Ridge-Regression [35]. Das Ziel der Ridge-Regression ist es, den Einfluss der Multikollinearität



zwischen den Merkmalen zu reduzieren. Dieser führt vereinfacht ausgedrückt dazu, dass über eine L1-Regularisierung [35] Merkmale mit verhältnismäßig geringem Beitrag zur Zielgröße nicht in die Modellbildung einbezogen werden. Dadurch wird eine höhere Generalisierbarkeit des Modells für die Testdaten auf Kosten der Trainingsdaten erreicht.

In diesem Experiment werden alle Hyperparameter entsprechend den Standardeinstellungen vorgegeben, geändert wird die Kernelfunktion (Poly), Grad des Polynoms (drei), variiert wird der Hyperparameter Alpha = von 0,01 – 100. Das Modell erreicht seine beste Vorhersagequalität mit  $R^2_{\text{Train}} = 0,9813$  und einem  $\text{RMSE} = 2,34\% R_e$  für die Trainingsdaten, die Testdaten werden mit  $R^2_{\text{Test}} = 0,9775$  und einem  $\text{RMSE} = 2,12\% R_e$  bei Alpha = 0,5 (vgl. Abbildung 24). Im Vergleich mit der multivariaten linearen Regression zeigt sich, dass das Modell sowohl die Trainings-, als auch die Testdaten in besserer Qualität abbildet [37].

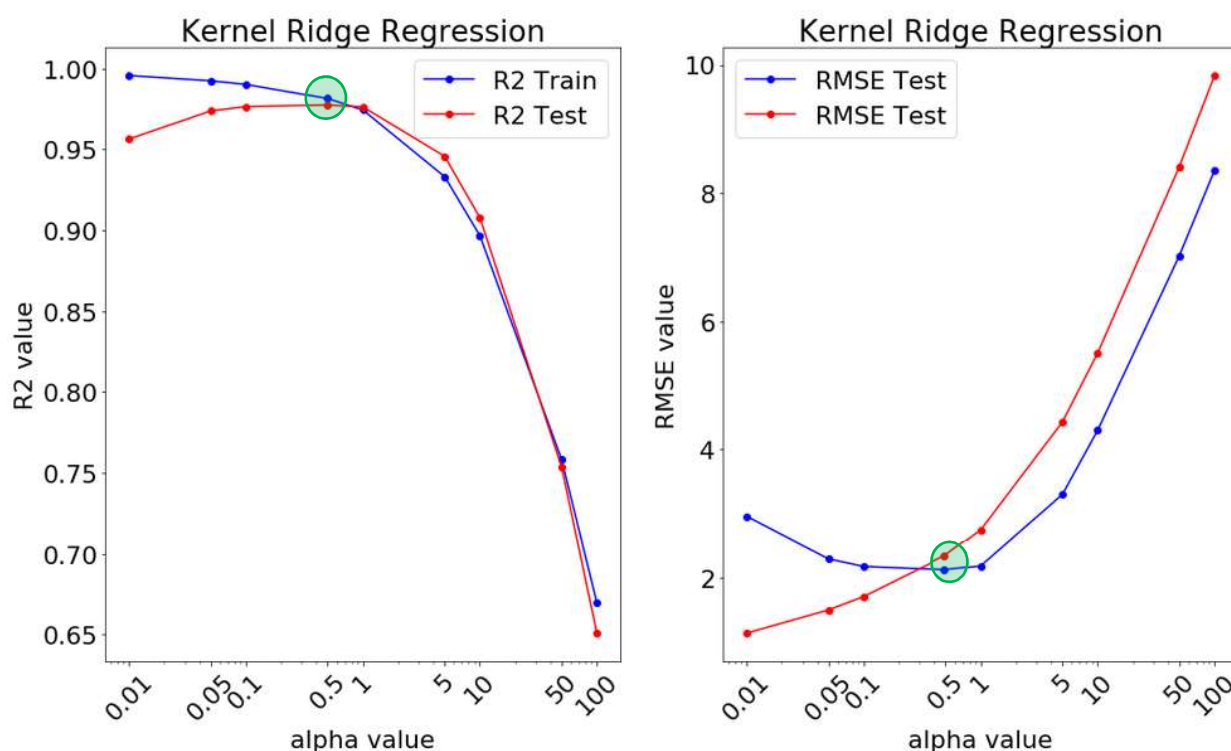


Abbildung 24: : R<sup>2</sup> (links) und RMSE (rechts) der Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen Merkmalsraum für SV-R unter Variation des Hyperparameters Alpha

#### 4.2.3.4 Automatisiert extrahierter Merkmalsraum

Im Vergleich zur Komplexität der eingesetzten Modelle, wird das Experiment wiederholt, statt des 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalsraums wird der 226-dimensionale, automatisiert extrahierte Merkmalsraum verwendet. Dadurch soll aufgezeigt werden, welchen Einfluss die

Komplexität des Merkmalsraums im Vergleich zur Komplexität der Modelle im Hinblick auf die Vorhersagequalität hat.

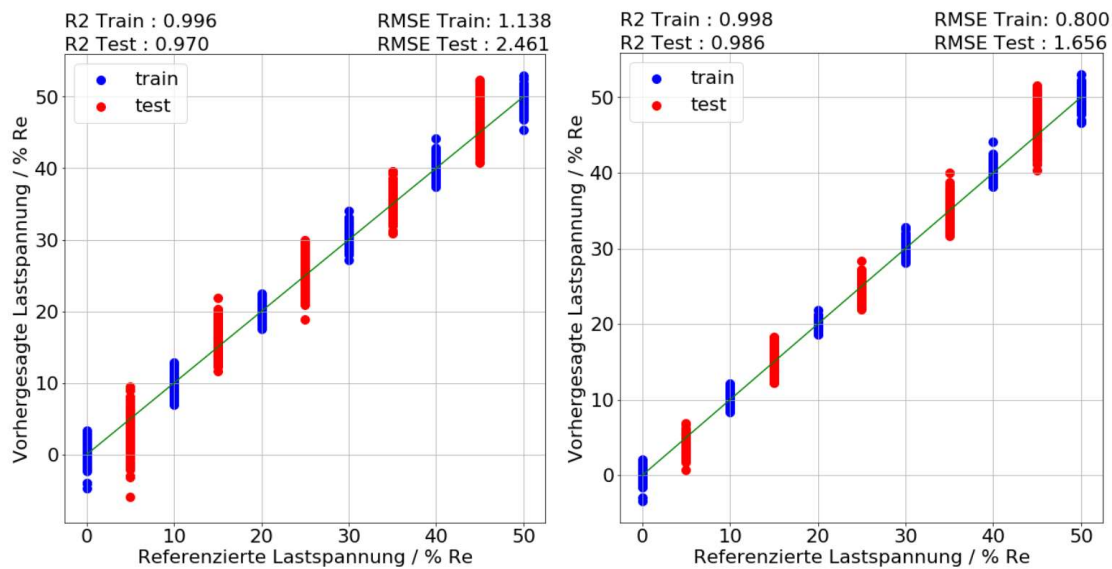


Abbildung 25: Vergleich der multivariaten linearen Regression (links) und der Kernel-Ridge-Regression mit radialer Basisfunktion als Kernel (rechts) auf Basis des automatisch extrahierten Merkmalsraum

Abbildung 25 zeigt links den Einfluss des gewählten Merkmalsraum auf die Vorhersagequalität der ermittelten Modelle. Im Vergleich zu den Ergebnissen mit dem 21-dimensionalen Merkmalsraum ist das Ergebnis der multivariaten linearen Regression auf Basis des erweiterten Merkmalsraum signifikant besser und das ohne Aufwände in der Hyperparametrierung. Dies bestätigt sich auch in der Betrachtung von  $R^2$  und RMSE für die Trainings- und Testdaten.  $R^2_{\text{Train}}$  verbessert sich auf 0,996 und  $\text{RMSE}_{\text{Train}}$  auf 1,14 %  $R_e$ .  $R^2_{\text{Test}}$  verbessert sich auf 0,97 und  $\text{RMSE}_{\text{Test}}$  auf 2,46 %  $R_e$  [37].

In Abbildung 25 rechts hat sich die Vorhersage durch den Einsatz der gaußschen radialen Basisfunktion [62] als nichtlinearer Kernel nochmal signifikant verbessert. Hierfür mussten jedoch schon zwei Hyperparameter ( $\text{Alpha} = 0,1$ ,  $C = 0,00005$ ) optimiert werden.

Tabelle 3:  $R^2$  und RMSE für Trainings- und Testdaten des 21-dimensionalen Merkmalsraum für ML-R (links), SV-R (Mitte links), MLP-R (Mitte rechts) und für ML-R des automatisiert extrahierten Merkmalsraum (rechts)

	MLR 21-dim	Lin-SVR 21-dim	Lin-MLPR 21-dim	Poly-KRR 21-dim	MLR 226-dim	RBF-KRR 226-dim
$R^2$ (Train)	0,962	0,959	0,90	0,981	0,996	0,997
$R^2$ (Test)	0,947	0,953	0,805	0,978	0,971	0,986
RMSE (Train) in % $R_c$	3,34	3,45	5,71	2,34	1,14	0,93
RMSE (Test) in % $R_c$	3,25	3,07	5,86	2,12	2,42	1,65

Tabelle 3 zeigt  $R^2$  und RMSE der Trainings- und Testdaten mit den in diesem Abschnitt verwendeten Modellen im Überblick.

Die schlechteste Vorhersagequalität wird mit der Multilayer-Perceptron-Regression und linearer Aktivierungsfunktion auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraum erreicht. Die Support-Vector-Regression und die multivariate lineare Regression zeigen vergleichbare Vorhersagen, sowohl für die Trainings- als auch für die Testdaten. Eine signifikante Verbesserung wird durch den Einsatz der Kernel-Ridge-Regression mit polynomieller Kernelfunktion erreicht. Eine ähnlich gute Vorhersage wird auch beim Einsatz der multivariaten linearen Regression für den automatisiert extrahierten Merkmalsraum für die Testdaten erreicht, die Trainingsdaten bilden sich deutlich besser ab. Die beste Vorhersagequalität wird durch die Kernel-Ridge-Regression mit gaußscher radialer Basisfunktion als Kernel [62] und dem 226-dimensionalen Merkmalsraum erzielt, wobei in diesem Fall schon zwei Hyperparameter optimiert werden mussten. Alpha stellt wieder den Term zur L2-Regularisierung, über den Hyperparameter C kann die Breite des Margins gesteuert werden. Der Aufwand zur Hyperparametrierung steigt exponentiell mit der Anzahl der Hyperparameter. Mit steigender Anzahl an Hyperparameter steigt auch die Gefahr für eine „versteckte Überanpassung“, die jedoch nicht durch eine Aufteilung in Trainings- und Testdaten erkannt wird, da die Hyperparametrierung mit Blick auf die Testdaten erfolgt. Vor diesem Hintergrund werden zusätzliche Testdaten benötigt, so genannte Validierdaten, die nach Abschluss der Hyperparametrierung validiert werden. Werden die Validierdaten nun nicht mit ausreichender Genauigkeit vorhergesagt, kann diskutiert werden, ob eine anschließende Bewertung der gleichen Validierdaten zulässig ist oder erneut ein unbekannter Validierdatensatz erforderlich ist. Da die Referenzierung zum Training und zur Validierung der Daten je nach Aufgabenstellung mit enormen Aufwänden verbunden ist, sollte die

Notwendigkeit eines dritten Datensatzes durch die Begrenzung der Anzahl der zu variierenden Hyperparameter möglichst vermieden werden. Aus eigenen Vorarbeiten und Erfahrungswerten ist bekannt, dass, mit Bezug auf die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Kombination aus 3MA-X8-Datenbasis und verwendeter Modelle, die Optimierung eines Hyperparameters keine Anzeichen für eine „versteckte Überanpassung“ geliefert hat.

Es kann zusammengefasst werden, dass bei derart hohem Aufwand für die Optimierung von Hyperparametern und der damit verbundenen Notwendigkeit eines dritten Validierdatensatzes eher eine Optimierung des Merkmalsraums, verbunden mit dem Einsatz linearer Modelle, in Erwägung gezogen werden sollte. Die multivariate lineare Regression kann beispielsweise weitestgehend ohne A-Priori-Wissen eingesetzt werden, die Berechnung ist sehr schnell und mit einem geeigneten Merkmalsraum werden sehr gute Vorhersagen erreicht. Die Einfachheit linearer Polynome erleichtert darüber hinaus die werkstoffphysikalische Interpretation der Modelle [37].

#### *4.2.3.5 Einfluss der Systemkomplexität auf die Vorhersagequalität der Trainings- und Testdaten*

Es wurde bereits erwähnt, dass die Komplexität des Gesamtsystems (also die Kombination aus Merkmalsraum und eingesetzten Modellen) einen entscheidenden Einfluss auf die Vorhersagequalität und Generalisierbarkeit hat. Zur Veranschaulichung zeigt Abbildung 26 den Fehler  $\varepsilon$  der Trainingsdaten (blau) und der Testdaten (rot) über der Komplexität des Gesamtsystems. Ein valides Gesamtsystem zeichnet sich dadurch aus, dass die Zielgrößen in ausreichender Genauigkeit vorhergesagt werden und der Unterschied der Vorhersage von den Trainings- und Testdaten nahe dem Minimum ist (grüner Bereich). Bilden sich die Trainingsdaten nicht mit ausreichender Genauigkeit ab (gelber Bereich), so ist die Komplexität des Gesamtsystems, also der Kombination aus Merkmalsraum und ausgewähltem Modell nicht geeignet, das Gesamtsystem ist unterangepasst. Werden die Trainingsdaten mit signifikant höherer Genauigkeit abgebildet als die Testdaten (roter Bereich), so kann das mehrere Gründe haben. Beispielsweise könnten leichte Messwertvariationen in den Trainings- und Testdaten unterschiedlich bewertet werden, so dass die Vorhersage der Testdaten zwar ein signifikant höheres, aber annähernd konstantes Streuband aufweist. Die zweite Möglichkeit ist, dass die Testdaten ein Verhalten abbilden, das nicht oder nicht ausreichend in den Trainingsdaten vertreten war. Dies kann bei der Vorhersage der Testdaten entweder Ausreißer oder ein über alle Stützstellen ungleichmäßig verteiltes Streuband zur Folge haben.

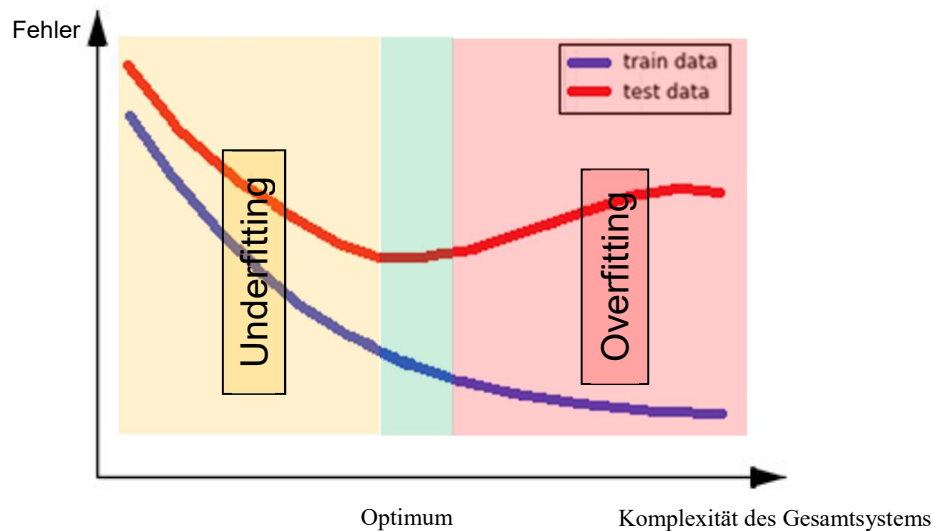


Abbildung 26: Fehler der Trainingsdaten (blau) und der Testdaten (rot) zum ermittelten Modell über der Komplexität des Gesamtsystems

Diese Möglichkeit ist deshalb von besonderer Relevanz, weil in der Praxis der (mikromagnetischen) Materialcharakterisierung häufig nicht alle Einflussfaktoren bekannt sind. Hinzu kommt, dass selbst unter Kenntnis aller Einflussfaktoren, diese nicht immer in den Trainingsdaten berücksichtigt werden können, sei es, weil die repräsentative Zustandsvariation aus technisch-wirtschaftlichen Gründen nicht möglich ist oder aber der Aufwand bei der Datenaufnahme unverhältnismäßig hoch ist. Dabei ist die Vorhersagequalität der Testdaten nur insoweit ein Maß für die Generalisierbarkeit des Gesamtsystems, wie auch die Testdaten die mögliche Zustandsvariation abbilden. Zeigt sich also, dass in der Praxis die Temperatur der Zugprobe einen Einfluss auf die Messdaten hat, so sollte die in der Praxis auftretende Temperaturvariation auch in den Daten repräsentiert sein. Von Interesse ist dabei nur der Zustandsvariationsbereich, der auch in der Praxis vorkommen kann. Beispielsweise sind in einem Labor keine Temperaturvariationen von 200 K zu erwarten, weshalb auch die Temperatur der Zugprobe nicht in diesem Bereich variiert werden muss. Temperaturschwankungen von 30 K können jedoch je nach Aufgabenstellung zu mikromagnetisch messbaren Unterschieden führen, weshalb die Abdeckung dieses Bereiches durchaus sinnvoll sein kann. Es ist daher besonders wichtig, die Validierstrategie bereits vor der Datenaufnahme zu kennen, um diese anschließend im Experiment berücksichtigen zu können. Vor dem Hintergrund ist es darüber hinaus sinnvoll, die Systeme regelmäßig mit neu aufgenommenen Testdaten nachzuvalidieren und unter Umständen nachzutrainieren.

Die nachfolgenden Abbildungen zeigen schematisch, wie sich die Trainings- und Testdaten in der Praxis am Beispiel der Regressionsanalyse abbilden können. Die hier gezeigte Trainings-

und Testdatencharakteristik kann jedoch mit denselben Erkenntnissen direkt auf die Klassifikation übertragen werden. Angenommen die Aufgabenstellung erfordert eine Vorhersage der Lastspannung von weniger als 50 MPa, dann gilt dieses Kriterium bei qualitativer Betrachtung der Trainingsdaten in der Regressionsanalyse in Abbildung 27 links als nicht erfüllt. Die Testdaten bilden sich in vergleichbarer Qualität ab, das Modell ist aber nicht in der Lage, mögliche Korrelationen zwischen den Merkmalen und der Zielgröße in ausreichender Genauigkeit abzubilden. Mögliche Gründe können sein, dass der Messeffekt des Messsystems nicht ausreichend hoch ist, um signifikante und eindeutige Korrelationen zwischen Merkmalen und Zielgröße zu finden, oder dass ein nicht geeignetes Modell bzw. eine nicht geeignete Modellparametrierung verwendet wird.

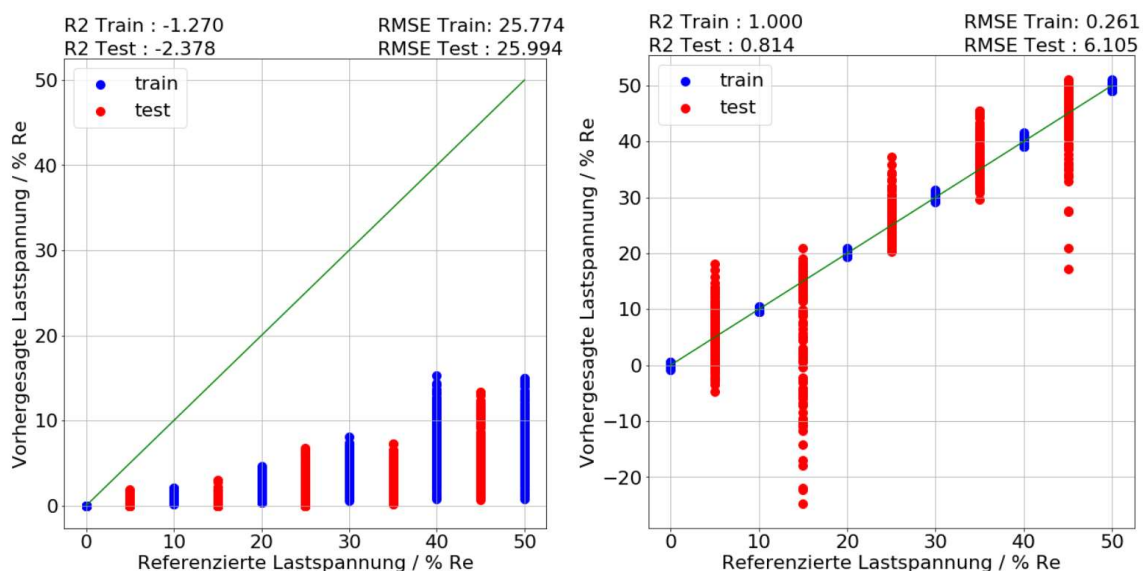


Abbildung 27: Unterangepasstes (links) und überangepasstes (rechts) System

Bilden sich die Trainingsdaten ausreichend gut im Modell ab, gilt es zu überprüfen, wie gut mit diesem Modell im Training nicht verwendete Testdaten vorhergesagt werden. Werden die Trainingsdaten mit signifikant höherer Genauigkeit abgebildet als die Testdaten (Abbildung 27 rechts), bildet das System anhand der Testdaten ein Verhalten ab, das nicht in den Trainingsdaten vertreten war. Meist liegt entweder ein unvollständiges Experiment vor, das bedeutet, die Zustandsvariationen in den Trainingsdaten ist nicht ausreichend repräsentativ oder die Komplexität des Gesamtsystems ist so hoch, dass rauschbedingte Unterschiede in den Testdaten nicht generalisiert bewertet werden.

Es zeigt sich, dass die Komplexität des Gesamtsystems einen entscheidenden Einfluss auf die Vorhersagequalität der Trainings- und Testdaten hat. Es empfiehlt sich daher die Komplexität

des Gesamtsystems an die Aufgabenstellung anzupassen. Im Hinblick auf die Aufwände zur Hyperparametrierung sollte bei einem unterangepassten Gesamtsystem im ersten Schritt untersucht werden, ob der Informationsgehalt des Merkmalsraums durch verbesserte Merkmalsextraktion und -vorverarbeitung erhöht werden kann, um mit möglichst einfachen und interpretierbaren Modellen ohne aufwändige Hyperparametrierung ausreichend gute Vorhersagen zu treffen. Erst im zweiten Schritt sollte die Modellkomplexität bedarfsorientiert schrittweise bis zur erforderlichen Genauigkeit der Trainings- und Testdaten erhöht werden.





## 5 Methodik zur Analyse mehrdimensionaler Merkmalsräume unter Einsatz maschineller Lernalgorithmen am Beispiel der zerstörungsfreien Materialcharakterisierung

Basierend auf den Erkenntnissen aus Kapitel 1 - 4 wird in diesem Kapitel ein systematisches und methodisches Vorgehen zur multivariaten Analyse mehrdimensionaler Merkmalsräume vorgestellt. Im Vordergrund der Methodik steht die Idee, den Eingangsmerkmalsraum durch Merkmale zu erweitern, die den Zusammenhang zwischen Merkmalsraum und Zielgröße linearisiert abbilden. Theoretisch könnte der Merkmalsraum auf Basis jeder beliebigen Funktion (idealerweise dem funktionalen Zusammenhang zwischen Merkmalsraum und Zielgröße, der jedoch in der Regel gesucht ist) erweitert werden. Dieser Ansatz wird bereits in der Gasmestechnik verfolgt [63] [64] [65]. Zum einen werden zur Optimierung der Auflösung der Analog-Digital-Konverter die stark nichtlinearen Sensordatenverläufe hardwareseitig linearisiert. Zum andern können mit bereits linearisierten Daten in Kombination mit einfach applizierbaren, meist linearer maschineller Lernalgorithmen wie der Hauptkomponenten- und Diskriminanzanalyse zuverlässige und erklärbare Modelle erstellt und validiert werden. Aus eigenen Voruntersuchungen ist bekannt, dass bereits einfache Transformationen, wie das Quadrat des mikromagnetischen 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalsraums, zu einer signifikanten Verbesserung der Linearität einzelner Merkmale führen kann. Je nach Dimensionalität des Eingangsmerkmalsraums oder dem Grad der polynomiellen Erweiterung sind sehr hochdimensionale Merkmalsräume zu verarbeiten, die im Anschluss durch eine lineare Diskriminanzanalyse reduziert und über die Bewertung der Mahalanobis-Distanz zur Klassifikation bzw. der multivariaten linearen Regressionsanalyse zur Regression herangezogen werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Methodik zwar am Beispiel der mikromagnetischen Materialcharakterisierung unter Einsatz des 3MA-X8-Systems demonstriert, bietet aber auch die Möglichkeit einer direkten Übertragung auf mehrdimensionale Merkmalsräume, unabhängig vom eingesetzten Messverfahren bis hin zur Fusion unterschiedlicher Datenquellen. Vor Anwendung der Methodik steht jedoch die Identifikation der

Problemstellung inklusive einer zuverlässigen Planung des Experimentes im Vordergrund. Dabei sind insbesondere verfahrensabhängige Aspekte zu betrachten:

- Ist das Messverfahren zur Lösung der Aufgabenstellung prinzipiell geeignet?
- Welche Zustandsvariationen können zur Lösung dieser Aufgabenstellung relevant sein?
- Können diese Zustandsvariationen zur Erstellung der Datenbasis bereitgestellt werden?

Im Anschluss an diese verfahrensspezifische Komponente steht das verfahrensunabhängige methodische Vorgehen im Vordergrund. Wichtige Aspekte sind dabei die Datenaufnahme und verfügbare Datenbasis, der verfügbare Eingangsmerkmalsraum, die Merkmalsvorverarbeitung, die iterative Modellerstellung und -validierung durch die modelloptimierende, polynomielle Merkmalsraumerweiterung.

## 5.1 Eingangsmerkmalsraum

Im Stand der Technik wurde der 21-dimensionale 3MA-X8-Merkmalsraum vorgestellt. Die Merkmale wurden dabei auf Basis subjektiver Unterschiede in den Messsignalen extrahiert. Im Vergleich zum automatisiert extrahierten 226-dimensionalen Merkmalsraum zeigt sich, dass allein der Merkmalsraum einen signifikanten Einfluss auf die Vorhersagequalität der Modelle zur Klassifikation bzw. Interpolation haben kann (vgl. Abbildung 21 und Abbildung 25 rechts). Neben diesen beiden Merkmalsräumen können auch die einzelnen Samples der direkt gemessenen und vorverarbeiteten Rohsignale als hochdimensionaler Merkmalsraum interpretiert werden. Da die Anzahl der Samples beim 3MA-X8-System von der Magnetisierungsfrequenz abhängt, ist die Größe des Merkmalsraums nicht konstant, was insbesondere bei Variation der Magnetisierungsfrequenz berücksichtigt werden sollte.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methodik sieht im Hinblick auf den maximal verfügbaren Messinformationsgehalt vor, alle verfügbaren Merkmale als Eingangsmerkmalsraum zu verwenden. Dies ist auch für Prüfsysteme im Bestand relevant, da ihre Messgenauigkeit und -reproduzierbarkeit nachträglich durch den Einsatz der Methodik optimiert werden kann, obwohl lediglich (hier im Falle von 3MA-X8) der 21-dimensionale Merkmalsraum zu Verfügung steht.

## 5.2 Datenaufnahme und Datenbasis

Einerseits ist es erforderlich, dass die Datenbasis die Problemstellung im Hinblick auf die relevante Zustandsvariation ausreichend repräsentiert, andererseits sollte der Aufwand zur Datenaufnahme hinsichtlich wirtschaftlicher Aspekte minimiert werden. Vor diesem Hintergrund orientiert sich das Vorgehen zur Datenaufnahme an der Fragestellung, ob es sich um ein Klassifikations- oder ein Interpolationsproblem handelt.

Zur Klassifikation wird im Rahmen dieser Arbeit davon ausgegangen, dass die Zustandsvariation der unterschiedlichen Klassen im Experiment ausreichend repräsentiert ist. Es wird außerdem vorausgesetzt, dass keine weiteren unbekanntenen Gruppen klassifiziert werden müssen. Unter dieser Voraussetzung ist es notwendig, alle Klassen in die Datenbasis aufzunehmen. Anschließend wird der Datensatz in Trainings- und Testdaten aufgeteilt. Zur Vermeidung unbalancierter Trainingsdaten als Folge unterschiedlich vieler Messdaten in den einzelnen Klassen erfolgt die Aufteilung stratifiziert, es werden aus allen Klassen prozentual gleich viele Trainings- und Testdaten verwendet (`sklearn.model_selection.StratifiedKFold` in [33]). Um den Einfluss der Größe des Trainingsdatensatzes einschätzen zu können, wird der Datensatz einmal in zwei und einmal in fünf Teile (so genannte Folds) aufgeteilt, je ein Teil bzw. Fold wird anschließend als Testdatensatz verwendet.

Bei Interpolationsproblemen gibt es zwei mögliche Szenarien, die in der Praxis vorkommen können. Entweder werden die Daten an diskreten Stützstellen der Zustandsvariation aufgenommen oder die Daten werden während der Zustandsvariation aufgenommen (vgl. Abbildung 11).

Die Datenaufnahme an diskreten Stützstellen erfolgt im Rahmen der Methodik in der ersten Iteration an drei Stützstellen. Dabei ist zu beachten, dass zwei Stützstellen die Interpolationsgrenzen darstellen und die dritte Stützstelle zwischen die Interpolationsgrenzen gesetzt wird. Auf Basis dieser drei Stützstellen wird ein multivariates lineares Regressionsmodell trainiert und mit mindestens zwei weiteren neu aufgenommenen Stützstellen zwischen der ersten und zweiten sowie zwischen der zweiten und dritten Trainingsstützstelle mit Blick auf  $R^2$  und RMSE validiert. Anschließend werden die Testdaten dem Trainingsdatensatz hinzugefügt, das Regressionsmodell aktualisiert, um anschließend weitere Stützstellen zwischen den vorhandenen aufzunehmen und zur Validierung zu verwenden. Dieses Vorgehen wird so lange wiederholt, bis keine signifikante Verbesserung der Vorhersagequalität durch Aufnahme neuer Daten und Ergänzung der Trainingsdaten erfolgt.

Die Kriterien, wo genau die Validierstützstellen zwischen den Trainingsstützstellen liegen sollten, ist für den methodischen Ablauf nicht relevant, der experimentelle Aufwand kann aber unter Berücksichtigung von Expertenwissen reduziert werden. Liegt beispielsweise ein nichtlinearer Verlauf der Merkmale über der Zielgröße vor, kann dies dahingehend berücksichtigt werden, dass die Anzahl der Stützstellen im Bereich signifikanter Nichtlinearitäten erhöht werden kann und dadurch die Vorhersagequalität linearer Modelle wie der multivariaten linearen Regression verbessert werden kann.

Die zweite Möglichkeit ist, dass die Datenbasis während der Zustandsvariation aufgenommen wird. Im Gegensatz zur Datenbasis in diskreter Form stellt sich dabei nicht die Frage, wie im Hinblick auf die Wirtschaftlichkeit mit möglichst wenigen Stützstellen ein stabiles Modell trainiert wird. Liegt die Datenbasis in kontinuierlicher Form vor, entfällt prinzipiell die Notwendigkeit, die Modelle im Hinblick auf dem Verhalten zwischen den Stützstellen zu bewerten. Eine naheliegende Strategie wäre daher, den gesamten Datensatz ähnlich wie bei der Klassifikation randomisiert in Trainings- und Testdaten aufzuteilen. Dieses Vorgehen ist vor dem Hintergrund der Dimensionsreduktion nicht geeignet, da die LDA als überwachtes Verfahren diskrete Zielgrößen erwartet. Zu diesem Zweck wird der kontinuierlich aufgenommene Datensatz iterativ segmentiert und den einzelnen Segmenten diskrete Zustände zugewiesen. Analog zum Vorgehen mit diskreten Stützstellen wird nun der Datensatz im ersten Schritt in fünf Teile segmentiert, wobei das erste, dritte und fünfte Segment zum Trainieren und das zweite und vierte Segment zum Validieren des Modells verwendet wird. Anschließend wird die Anzahl der Segmente so lange erhöht, bis keine signifikante Verbesserung der Vorhersagequalität eines multivariaten linearen Regressionsmodell erreicht wird.

Es gibt auch gemischte Aufgabenstellungen, die beispielsweise sowohl eine Klassifikation als auch eine Regression zum Ziel haben. Erfahrungsgemäß sind die Ansprüche an die Datenbasis für Regressionsprobleme in der mikromagnetischen Materialcharakterisierung höher, weshalb sich im Falle gemischter Aufgabenstellungen die Datenaufnahme an der Regression orientieren sollte.

### 5.3 Merkmalsvorverarbeitung

Zur Vorverarbeitung werden die Merkmale im ersten Schritt skaliert. Hierfür stehen in [33] diverse Skalierungsmöglichkeiten zur Verfügung. In der Praxis hat sich die Skalierung auf die Standardabweichung der Merkmale empirisch bewährt, da diese sich im Gegensatz zur

Skalierung auf Minimum und/oder Maximum robuster gegenüber Ausreißern in den Messdaten zeigt. Es ist wichtig zu beachten, dass auch die Skalierungsvorschrift nur auf Basis der Trainingsdaten ermittelt und auf Trainings- und Testdaten angewendet wird. Im Anschluss wird die Dimension des Eingangsmerkmalsraum unter Einsatz der LDA reduziert. Hierfür wird auf Basis der Trainingsdaten ein Modell ermittelt und auf die Trainings- und Testdaten appliziert. Die dadurch entstandenen Sekundärmerkmale (die so genannten kanonischen Variablen) dienen nachfolgend der Modellbildung und -validierung.

#### 5.4 Modellbildung (Klassifikation, Regression)

Im nächsten Schritt erfolgt die Modellbildung zur Klassifikation bzw. Regression.

Zur Klassifikation wird im Rahmen der Methodik die bereits in der Dimensionsreduktion verwendete LDA unter Bewertung der Mahalanobis-Distanz sowohl für die Trainings-, als auch für die Testdaten verwendet.

Zur Regression wird ein multivariates lineares Modell ermittelt und auf die Trainings- und Testdaten appliziert.

#### 5.5 Modellbewertung

Die Bewertung zur Klassifikation erfolgt auf Basis der korrekt klassifizierten Zustände im Verhältnis zu allen klassifizierten Zuständen, die Bewertung der Regression durch  $R^2$  und RMSE.

#### 5.6 Polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums

Ein wesentlicher Schritt der Methodik ist die iterative polynomielle Erweiterung des Eingangsmerkmalsraum. Ziel ist dabei der systematische Versuch, nichtlineare Zusammenhänge zwischen Merkmalsraum und Zielgrößen zu linearisieren. Dabei stellt der Eingangsmerkmalsraum die Basis dar und wird im ersten Schritt um das Quadrat ( $i = 2$ ) der Merkmale erweitert. Nun wird der gesamte Ablauf von der Skalierung, Dimensionsreduktion bis hin zur Modellbildung und -validierung wiederholt. Hat sich die Vorhersagequalität signifikant verbessert, wird  $i$  so lange erhöht, bis entweder keine signifikante Verbesserung der

Abbildung der Trainingsdaten erreicht wird oder die Vorhersagequalität der Trainings- und Testdaten divergiert. Die Dimensionalität des erweiterten Merkmalsraum wächst linear mit  $i$ , es gilt:

$$\text{Dimension}(\mathbf{M}_{\text{erweitert}}) = i \cdot \text{Dimension}(\mathbf{M}_{\text{Eingang}}) \quad \text{Gleichung 41}$$

Nach  $i = 3$  ist beispielsweise der 21-dimensionale Eingangsmerkmalraum zu einem 63-dimensionalen Merkmalsraum erweitert worden ( $\mathbf{M}_{\text{erweitert}} = [\mathbf{M}_{\text{Eingang}}, \mathbf{M}_{\text{Eingang}}^2, \mathbf{M}_{\text{Eingang}}^3]$ ). Der Polynomgrad kann dabei als Hyperparameter interpretiert werden. Genau genommen müsste der Hyperparameter  $i$  anhand eines dritten Testdatensatzes validiert werden. Wie in 4.2.3 beschrieben, ist die Referenzierung mit enormen Aufwänden verbunden. Aus eigenen Vorarbeiten und Erfahrungswerten ist bekannt, dass für die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Datenbasis in Kombination mit den eingesetzten linearen Modellen keine Anzeichen für eine „versteckte Überanpassung“ vorgelegen haben, weshalb im Rahmen der Methodik auf einen dritten so genannten Validierdatensatz verzichtet wird.

## 5.7 Ablaufdiagramm

Mit den unter 5.1 - 5.6 vorgestellten Modulen kann die Methodik in Form eines Ablaufdiagramms veranschaulicht werden (vgl. Abbildung 28). Die beiden ersten Schritte sind verfahrensspezifische Komponenten der Methodik, da einerseits der verfügbare Eingangsmerkmalraum sowie Datenaufnahme und Datenbasis von der Problemstellung und vor dem Hintergrund der Materialcharakterisierung demnach von den eingesetzten Messverfahren abhängen. Die restlichen Schritte der Methodik können unabhängig vom Messverfahren angewendet werden und stellen somit verfahrensunabhängige Komponenten dar.

Die Schleife zwischen der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung und der Bewertung der Modellgüte kann prinzipiell auch schon bei der Datenaufnahme beginnen. Dabei ist zu beachten, dass die Anzahl der erforderlichen Stützstellen als zusätzlicher Hyperparameter betrachtet werden muss, der in derselben Iteration wie die polynomielle Merkmalsraumerweiterung optimiert wird. Dadurch steigt die Wahrscheinlichkeit einer versteckten Überanpassung mit Blick auf die Hyperparametrierung, was die Notwendigkeit eines dritten Validierdatensatzes zur Folge hat.

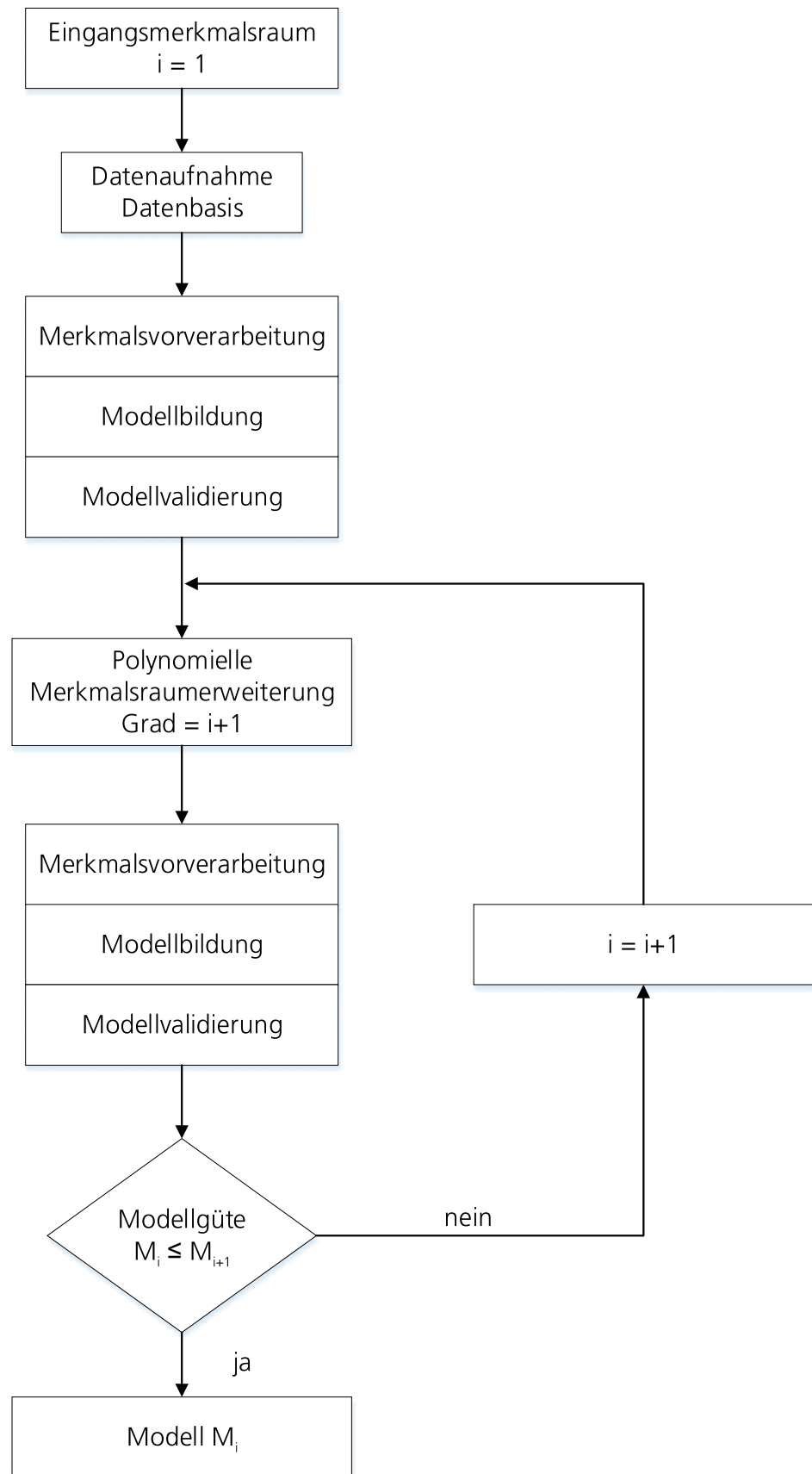


Abbildung 28: Schematisches Ablaufdiagramm der Methodik





## 6 Materialidentifikation und Liftoffbestimmung

### 6.1 Einführung

In der Praxis trifft man auf Anwendungsfälle, in denen der Abstand zwischen dem 3MA-X8-Sensor und dem Messobjekt variiert. Zum Beispiel werden zur Hardspotdetektion an Grobblechen 3MA-X8-Sensoren mit einer keramischen Verschleißsohle mit einer Dicke von 2 mm eingesetzt, die Messung erfolgt im direkten Kontakt dieser Sohle mit dem Grobblech. Dennoch kann es aufgrund von Unebenheiten in der Oberfläche zu Abstandsvariationen kommen, die sich überlagert in den Messinformationen abbilden. Der Einfluss dieser Unebenheiten wird zwar durch eine kardanische Aufhängung des Sensors reduziert, Abstandsvariationen bis zu einem Millimeter sind jedoch aufgrund der Unebenheitsprofile möglich. Hinzu kommt, dass es bei den eingesetzten Verschleißsohlen durch den direkten Kontakt mit der Oberfläche des Messobjektes zu Abtragungen kommt, die den effektiven Sensorabstand mit der Zeit reduzieren. Nach einem Abtrag von zwei Millimetern ist der Sensor im direkten Kontakt mit dem Grobblech, eine Beschädigung des Sensors und/oder der Oberfläche des Grobblechs ist die Folge. In Kombination mit den Unebenheiten in der Oberfläche kann der Sensorabstand dadurch insgesamt um bis zu drei Millimeter variieren. Neben der sich daraus ergebenden Aufgabe, die Grobbleche unabhängig vom Sensorabstand (im Folgenden als Liftoff bezeichnet) zu charakterisieren, kann die Datenbasis auch dahingehend genutzt werden, den Liftoff zu Monitoring- und Wartungszwecken zu bestimmen.

### 6.2 Experiment

Im Rahmen einer Studie wurden fünf Grobblechsegmente mit variierender Sensorabhebung von Null (direkter Kontakt zwischen Sensor und Grobblech) bis drei Millimetern mit einem 3MA-X8-System vermessen. Über die Grobblechsegmente existieren keine weiteren Informationen wie beispielsweise chemische Zusammensetzung, Mikrostruktur, mechanische Spannungen, magnetische Restfelder.

Das übergeordnete Ziel war dabei einerseits die Identifikation des Materialzustands unabhängig vom variierenden Sensorabstand (Klassifizierung), andererseits die Bestimmung des Sensorabstands (Interpolation) unabhängig vom Materialzustand. Durch 0,1 mm dicke Distanzplatten kann der Abstand zwischen Sensor und Grobblechsegment zuverlässig in dieser

Schrittweite variiert und referenziert werden. Die Sensorabhebung an fünf von 0 bis 4 nummerierten Blechen wurde von 0 mm (Sensor im direkten Kontakt mit der Probe) bis 3 mm variiert. Auf dem ersten Millimeter wurde die kleinste mögliche Schrittweite von 0,1 mm gewählt, danach wurde die Schrittweite auf 0,2 mm erhöht, um die Aufwände im Experiment zu reduzieren. Von insgesamt 52500 Messdaten repräsentieren je 4,8 % der Daten die Liftoffvariation über alle Materialzustände und je 20 % für die Materialvariation über alle Sensorabhebungen verwendet (vgl. Abbildung 29).

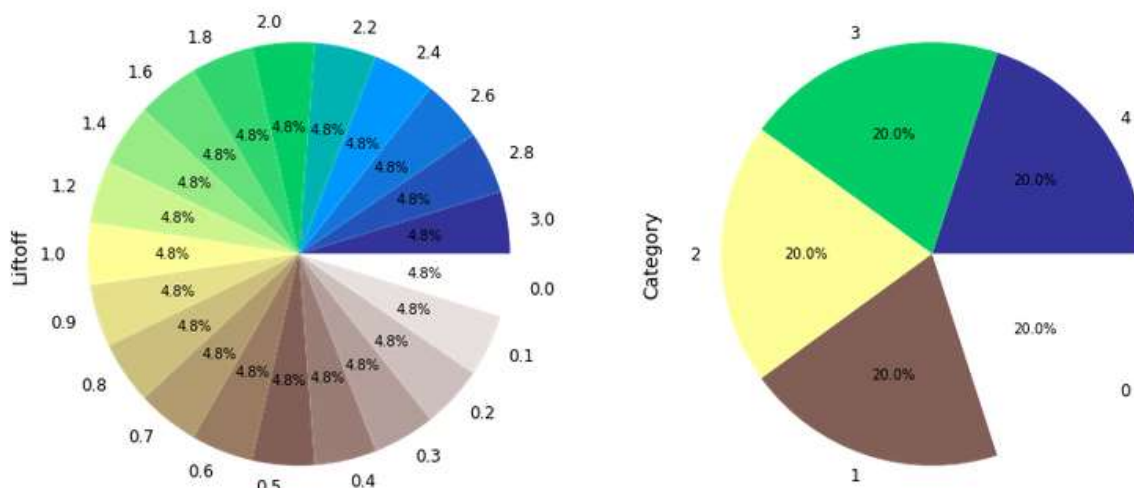


Abbildung 29: Aufteilung des Datensatzes nach Liftoff (links) und Materialkategorie (rechts)

Die vorliegende Datenbasis wurde also nicht entsprechend der Methodik aufgenommen, da die Methodik zum Zeitpunkt der Datenaufnahme noch nicht ermittelt war und eine möglichst große und repräsentative Datenbasis als sinnvoll bewertet wurde. Durch Anwendung der Methodik kann aber gezeigt werden, in wie weit der experimentelle Aufwand ohne signifikanten Einfluss auf die Vorhersagequalität hätte reduziert werden können. Die konkrete Fragestellung lautet, wie viele Stützstellen an den fünf Grobblechsegmenten mindestens notwendig sind, um sowohl eine zuverlässige Bestimmung des Materialzustands als auch der Sensorabhebung zu erreichen.

Zur Aufnahme der Daten wurden die Grobblechsegmente von Hand mit einem 3MA-X8-Sensor (Typ 9030) vermessen.

Das 3MA-X8-System wurde dabei mit folgender Parametrierung betrieben:

- Magnetisierungsamplitude  $A_{\text{mag}} = 6 \text{ V}$
- Magnetisierungsfrequenz  $f_{\text{mag}} = 50 \text{ Hz}$

- Überlagerungspermeabilitätsamplitude  $A_{\text{ecip}} = 3 \text{ V}$
- Überlagerungspermeabilitätsfrequenz  $f_{\text{ecip}} = 1250 \text{ Hz}$

### 6.3 Liftoffbestimmung

Bei der methodischen Analyse zur Bestimmung der Sensorabhebung werden die Daten gruppenbasiert aufgenommen und anschließend auch gruppenbasiert in Trainings- und Testdaten aufgeteilt. Die einzelnen Stützstellen zur Sensorabhebung stellen dabei die Gruppen dar. Es soll entsprechend der Methodik aufgezeigt werden, welche minimale Datenbasis als Teilmenge des gesamten Datensatzes ausreicht, um ein zuverlässiges Regressionsmodell zur Bestimmung der Sensorabhebung zu trainieren.

#### 6.3.1 Eingangsmerkmalsraum

Der für diese Aufgabenstellung verfügbare 2047-dimensionale Merkmalsraum setzt sich zusammen aus dem 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalsraum, dem 226-dimensionalen erweiterten Merkmalsraum sowie jeweils 300 Samples (Samplingrate 15 kHz / Magnetisierungsfrequenz 50 Hz) für Spannung, Strom, Real- und Imaginärteil sowie Betrag und Phase (insgesamt 1800 Rohdatensamples).

#### 6.3.2 Datenaufnahme und Datenbasis, Merkmalsvorverarbeitung, Modellbildung, Modellvalidierung

Die Methodik sieht ein Regressionsmodell mit drei Stützstellen vor. Dabei ist zu beachten, dass zwei Stützstellen die Grenzbereiche der Zielgrößen darstellen und eine Stützstelle aus dem Zwischenbereich ausgewählt wird. Auf dieser Trainingsdatenbasis wird die Skalierungsvorschrift ermittelt („scaler.fit“) und auf die Trainingsdaten appliziert („scaler.transform“). Danach wird der 2047-dimensionale Merkmalsraum mit drei Stützstellen durch den Einsatz der LDA auf zwei kanonische Variablen reduziert. Mit diesen kanonischen Variablen wird anschließend ein multivariates lineares Regressionsmodell trainiert, zur Bewertung der Trainingsdaten werden  $R^2$  und RMSE bewertet.

Im zweiten Schritt wird jeweils eine referenzierte Messung zwischen der ersten und mittleren sowie der mittleren und letzten Stützstelle aufgenommen. Auf diese Testdaten werden die

ermittelten Transformationsvorschriften appliziert („scaler.transform“, „LDA.transform“, „MLR.predict“), analog zum Vorgehen bei den Trainingsdaten werden anschließend  $R^2$  und RMSE bewertet.

Im dritten Schritt werden diese referenzierten Daten der Trainingsdatenbasis zur Erstellung eines neuen Regressionsmodells hinzugefügt. Das Vorgehen referenzierte Daten zwischen den Stützstellen aufzunehmen, zu bewerten und zur Trainingsdatenbasis hinzuzufügen wird nun so lange wiederholt, bis sich die Vorhersagequalität neu aufgenommenen Testdaten nicht mehr signifikant verbessert oder sich die Vorhersagequalität der Trainings- und Testdaten signifikant voneinander unterscheidet.

Abbildung 30 zeigt links  $R^2$  und rechts RMSE sowohl für Trainings- als auch für Testdaten. Es ist zu erkennen, dass ab neun Stützstellen keine signifikante Verbesserung sowohl für  $R^2$  als auch für RMSE stattfindet. Diese Einschätzung erfolgt im Rahmen dieser Arbeit nach subjektiven Kriterien und zwar vor dem Hintergrund, dass die Anzahl der Stützstellen sowie der Fehler von Trainings- und Testdaten minimal ist.

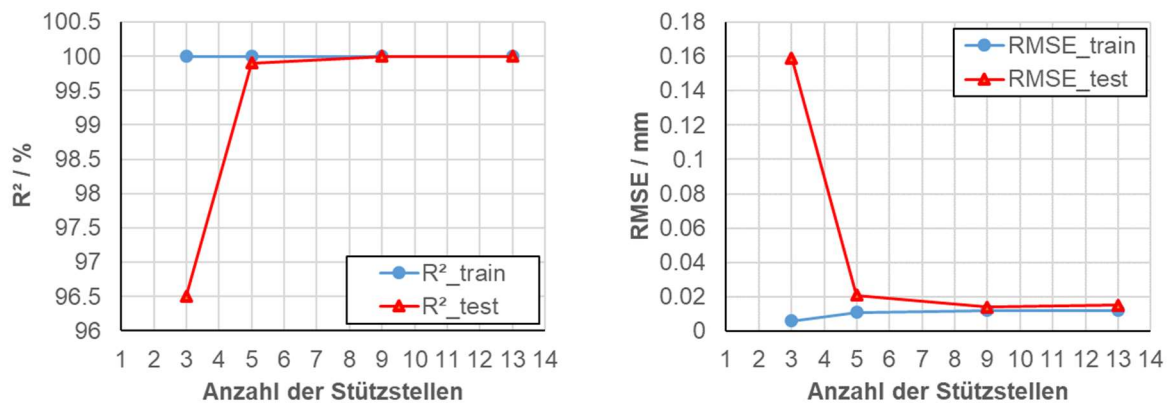


Abbildung 30:  $R^2$  (links) und RMSE (rechts) für Trainings- und Testdaten

In der Praxis sollten sich diese Kriterien an der Problemstellung und der erforderlichen Genauigkeit orientieren. Beispielsweise können bereits fünf Stützstellen ausreichend genaue Vorhersagen liefern, wenn eine Genauigkeit von  $RMSE < 0,05$  mm erforderlich ist. Damit reduziert sich der Aufwand bei der Datenaufnahme deutlich.

### 6.3.3 Polynomielle Merkmalsraumerweiterung, Merkmalsvorverarbeitung, Modellbildung, Modellvalidierung

In diesem Schritt der Methodik wird geprüft, ob die Vorhersagequalität durch polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums verbessert werden kann. Mit jeder polynomiellen Erweiterung wird das Regressionsmodell unter Einsatz der vorgeschalteten Skalierung und LDA neu trainiert und validiert.

In Abbildung 31 zeigt sich, dass die polynomielle Erweiterung keinen Einfluss auf  $R^2$  hat. Zusätzlich zeigt sich bei Betrachtung des RMSE, dass sich zwar die Trainingsdaten besser vorhersagen lassen, die Differenz zwischen  $RMSE_{\text{Test}}$  und  $RMSE_{\text{Train}}$  steigt aber und erhöht sich mit steigendem Polynomgrad. Die Werte für  $R^2$  und RMSE werden auf drei Nachkommastellen gerundet dargestellt.

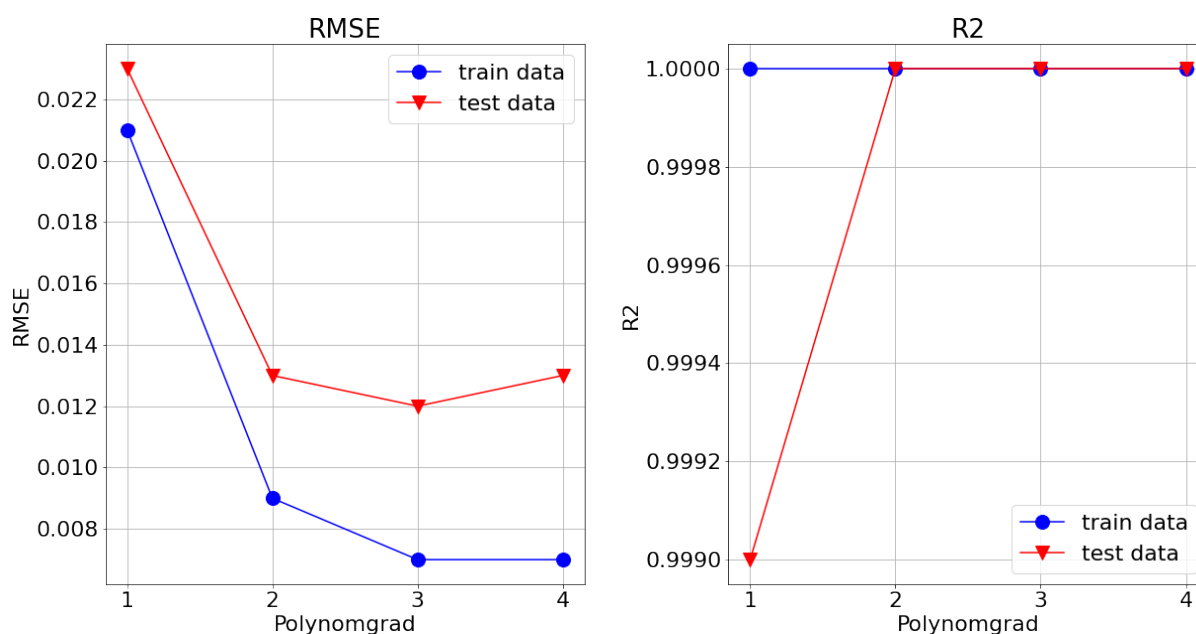


Abbildung 31: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (links RMSE, rechts  $R^2$ )

Die steigende RMSE-Differenz führt zur abschließenden Bewertung, dass die polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums zu keiner signifikanten und zuverlässigen Verbesserung der Vorhersagequalität der MLR führt.

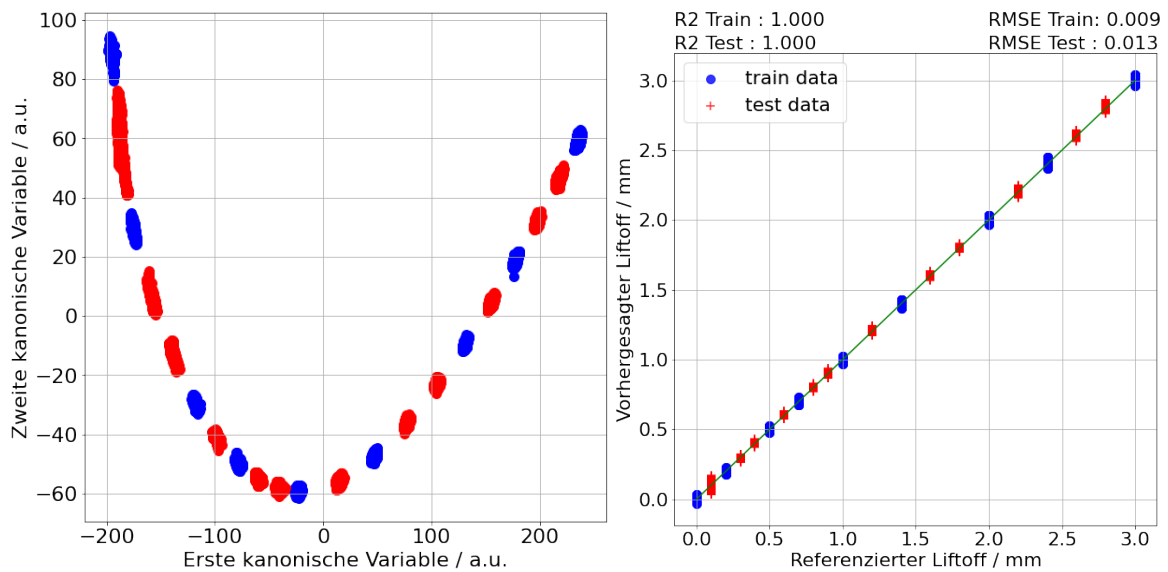


Abbildung 32: Ergebnis der LDA (links) und der MLR (rechts)

Abbildung 32 zeigt links die erste kanonische Variable auf der x-Achse und die zweite kanonische Variable auf der y-Achse und rechts das Ergebnis der MLR auf Basis von neun Stützstellen und daraus resultierend acht kanonischen Variablen, sowohl für die Trainingsdaten (blau) als auch für die Testdaten (rot). Die Trainingsdaten werden mit einem  $R_{\text{Train}}^2 = 1$  und einem  $\text{RMSE}_{\text{Train}} = 0,009$  mm, die Testdaten mit einem  $R_{\text{Test}}^2 = 1$  und einem  $\text{RMSE}_{\text{Test}} = 0,013$  mm vorhergesagt (auf drei Nachkommastellen gerundet).

#### 6.3.4 Vergleich zum bisherigen Stand der Technik

Ziel dieses Abschnitts ist es, die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methodik mit den Ergebnissen des in Kapitel 4 vorgestellten Stand der Technik zu vergleichen. Es handelt sich dabei um dieselbe Messreihe, die auch bei der methodischen Auswertung verwendet wurde. Die ermittelte Anzahl der Stützstellen und die Aufteilung in Trainings- und Testdaten wird dem methodischen Vorgehen und der Datenbasis aus 6.3.2 und 6.3.3 entnommen, da hierfür in der Vergangenheit kein standardisiertes Vorgehen existierte, sondern die Experimentplanung im Wesentlichen personenabhängig war. Der Unterschied zum methodischen Vorgehen ist, dass die MLR ohne vorgeschaltete Skalierung und LDA ausschließlich auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums trainiert und validiert wurde.

Abbildung 33 zeigt links  $R^2$  und rechts RMSE sowohl für Trainings- als auch für Testdaten. Auch auf dieser Datenbasis verbessert sich die Vorhersagequalität bis neun Stützstellen signifikant, der Betrag der Differenz zwischen  $\text{RMSE}_{\text{test}} = 0,088$  mm und  $\text{RMSE}_{\text{train}} =$

0,096 mm beträgt 0,008 mm. Das Minimum dieser Differenz liegt für 13 Stützstellen bei 0,005 mm, der experimentelle Mehraufwand, aber auch die Tatsache, dass ab fünf Stützstellen die Testdaten besser vorhergesagt werden, als die Trainingsdaten, deutet darauf hin, dass sich die Vorhersage im Hinblick auf eine repräsentative Datenbasis in der Nähe eines Optimums befindet.

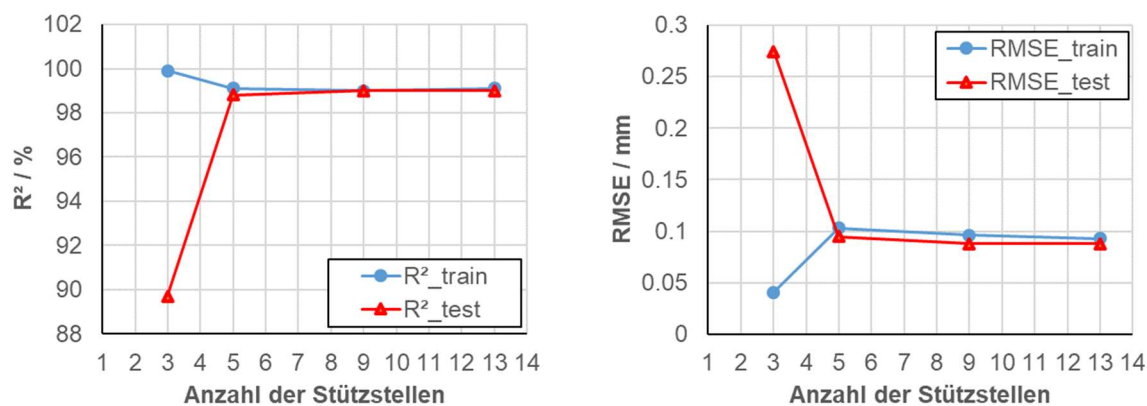


Abbildung 33:  $R^2$  und RMSE für Trainings- und Testdaten in Abhängigkeit der Anzahl der Stützstellen

### 6.3.5 Optimierung der Liftoffbestimmung

In diesem Kapitel soll untersucht werden, in wie weit die Vorhersagequalität der multivariaten linearen Regression auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums durch das methodische Vorgehen verbessert werden kann.

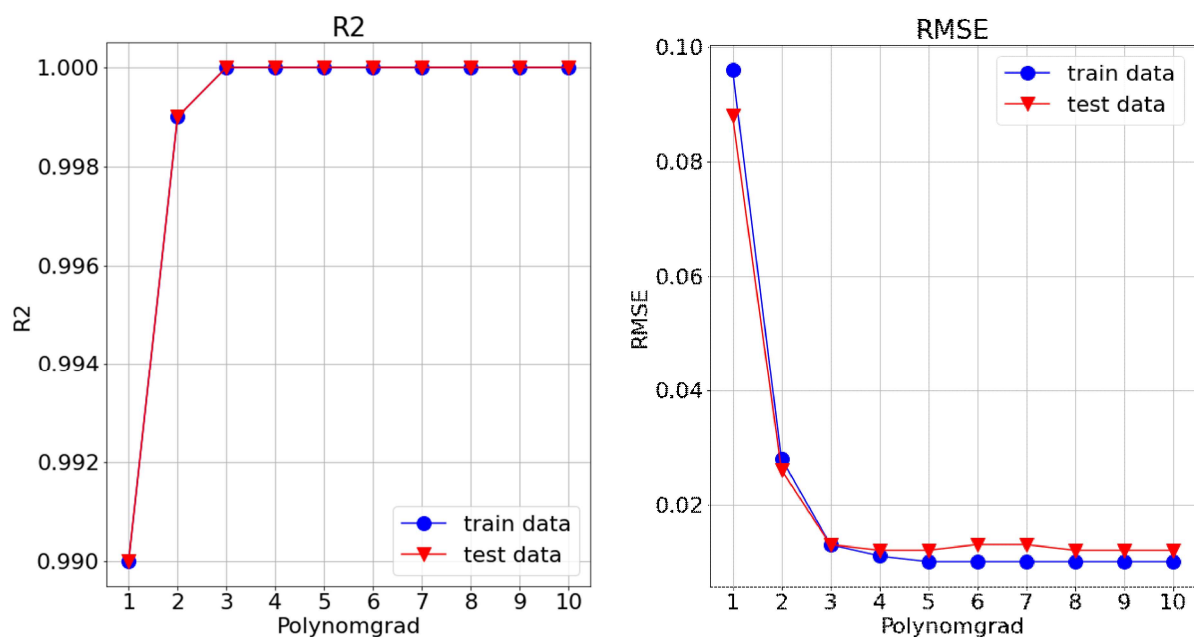


Abbildung 34: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (links  $R^2$ , rechts RMSE)

Dabei dienen die Trainingsdaten zur Ermittlung der Skalierungs- und Dimensionsreduktionsvorschrift und zum anschließenden Training der MLR. Im Anschluss wird der Merkmalsraum so lange polynomiell erweitert, bis sich die Vorhersagequalität der MLR nicht mehr signifikant verbessert. Abbildung 34 zeigt die Verbesserung von  $R^2$  und RMSE sowohl für die Trainings- als auch für die Testdaten.

Während durch die polynomielle Merkmalsraumerweiterung auf Basis des 2047-dimensionalen Merkmalsraums eine leichte Verbesserung der Vorhersagequalität erreicht wurde, hat sich das Ergebnis der MLR in Kombination mit vorgeschalteter Datenskalierung und LDA (vgl. Abbildung 35 links) sowie polynomieller Merkmalsraumerweiterung auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraum mit Polynomgrad vier mit einem  $RMSE_{train} = 0,011$  mm und einem  $RMSE_{test} = 0,012$  mm sogar minimal verbessert (vgl. Abbildung 35 rechts).

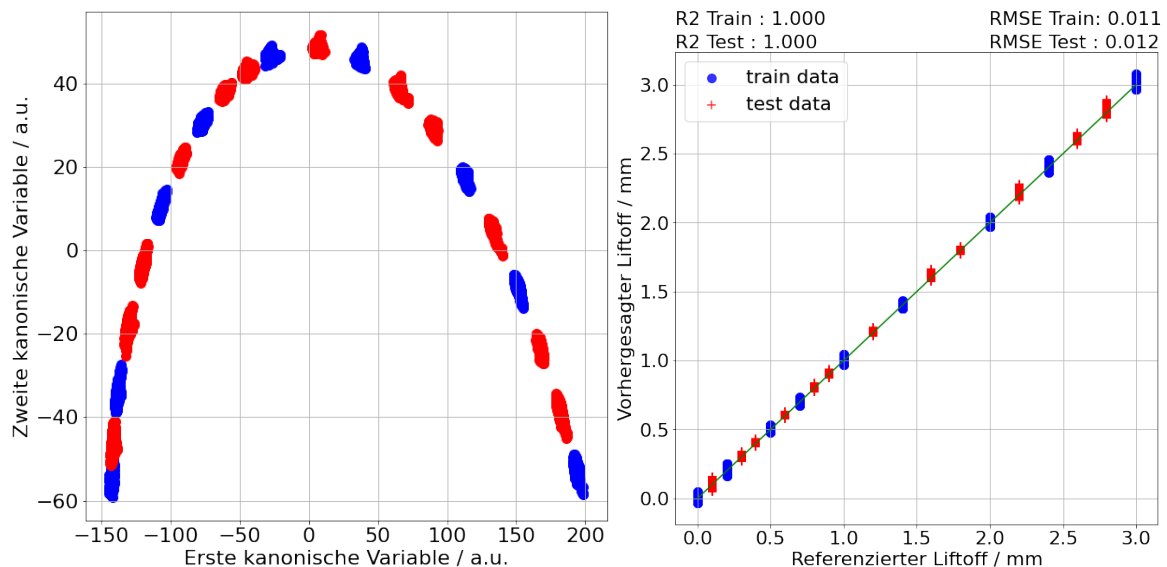


Abbildung 35: Ergebnis der LDA (links) und der MLR (rechts)

### 6.3.6 Fazit

In Abschnitt 6.3 wurde aufgezeigt, wie das in Kapitel 5 entwickelte methodische Vorgehen deutlich bessere Vorhersagen der Sensorabhebung erlaubt, als dies mit dem bisherigen Stand der Technik möglich war. Diese Verbesserung ist zum einen auf den erhöhten Informationsgehalt im optimiert extrahierten Eingangsmerkmalsraum zurückzuführen, die deutlich verbesserte Vorhersage auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums zeigt aber zum anderen, dass die polynomielle Merkmalsraumerweiterung die dort enthaltenen Informationen linearisiert abbildet und in Kombination mit der linearen Diskriminanzanalyse sogar bessere Vorhersagen, als in Kombination mit dem 2047-dimensionalen Merkmalsraum



liefert. Insbesondere die Divergenz in der Vorhersage der Trainings- und Testdaten deutet im Falle des 2047-dimensionalen Eingangsmerkmalsraum auf eine Überanpassung durch die weitaus höhere Dimension nach der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung hin. Durch den Einsatz vorgeschalteter Merkmalsselektionsalgorithmen könnte die Vorhersage der Modelle, insbesondere in Kombination mit dem hochdimensionalen optimierten Eingangsmerkmalsraum, weiter erhöht werden.

Die Tatsache, dass die Anzahl der Stützstellen variabel in Abhängigkeit der erforderlichen Vorhersagegenauigkeit aufgenommen wird, führt dazu, dass der Aufwand der Messungen bei Regressionsproblemen minimiert wird. Dabei gilt es zu beachten, dass während der Stützstellenaufnahme ausschließlich die multivariate lineare Regression ohne polynomielle Merkmalsraumerweiterung eingesetzt wird. Dadurch wird die Anzahl der Stützstellen ausschließlich auf die lineare Vorhersagequalität reduziert, in der Annahme, dass vorhandene Nichtlinearitäten im Rahmen der nachfolgenden polynomiellen Merkmalsraumerweiterung linearisiert abgebildet werden.

## 6.4 Materialidentifikation

### 6.4.1 Eingangsmerkmalsraum, Datenaufnahme und Datenbasis, Merkmalsvorverarbeitung, Modellbildung, Modellvalidierung

Die Modellbildung zur Materialidentifikation erfolgt auf der selben Datenbasis, die auch zur Regression der Liftoffbestimmung zur Verfügung stand. Zur methodischen Analyse zur Materialidentifikation wird der 2047-dimensionale Datensatz an neun Stützstellen aus 6.3 im ersten Schritt stratifiziert, einmal in fünf und in zwei Folds aufgeteilt, um zu bewerten, ob die Vorhersagequalität von der Größe des Trainingsdatensatzes abhängt. Um die Anzahl der Konfusionsmatrizen zu reduzieren, werden die Daten der Trainings- und Testfolds in je einer Konfusionsmatrix aufsummiert dargestellt. Die Anzahl der Datenpunkte in den Konfusionsmatrizen entspricht also nicht der Anzahl durchgeführter Messungen, sondern zeigt den Fall, dass alle Trainings- und Testfolds aufsummiert sind.

Wie in 6.3 wird der Datensatz unter Einsatz des „Standardscalers“ skaliert. Die Skalierungsvorschrift wurde auf Basis der Trainingsdaten ermittelt und sowohl auf Trainings- als auch auf Testdaten appliziert. Anschließend wurde der 2047-dimensionale Merkmalsraum durch den Einsatz der LDA auf Basis der Trainingsdaten und den fünf Materialzuständen auf vier kanonische Variablen reduziert. Die ermittelte Transformationsvorschrift wurde anschließend auf die Testdaten appliziert.

Abbildung 36 zeigt die Projektion der Trainings- und Testdaten in die erste kanonische Variable auf der x-Achse und in die zweite kanonische Variable auf der y-Achse. Durch die Bewertung der Mahalanobis-Distanz kann die Klassenzugehörigkeit der Trainings- und Testdaten vorhergesagt werden.

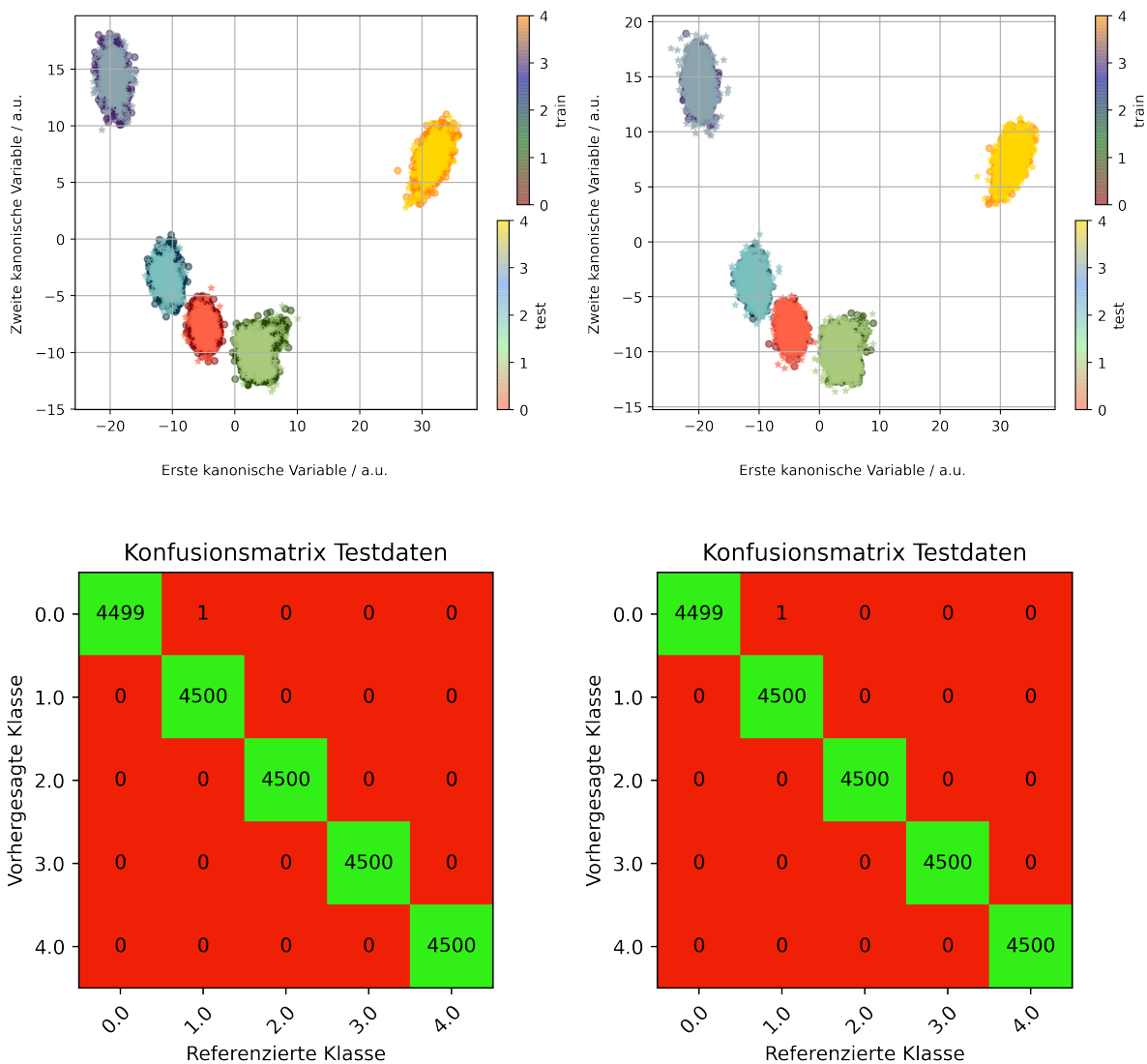


Abbildung 36: Erste und zweite kanonische Variable als Ergebnis der linearen Diskriminanzanalyse (oben links fünf Folds, rechts zwei Folds) auf Basis des 2047-dimensionalen Merkmalsraum mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten und Konfusionsmatrizen für die Testdaten mit jeweils einer Fehlklassifizierung (unten links fünf Folds, rechts zwei Folds)

Die Vorhersage der Klassenzugehörigkeit der Trainings- und Testdatensätze beider Folds ergibt, dass alle Trainingsdaten korrekt vorhergesagt wurden. Bei der Vorhersage der Testdaten zeigt sich für beide Folds jeweils eine Fehlklassifizierung, ein Datenpunkt der Klasse 0 wird als Klasse 1 vorhergesagt (vgl. Abbildung 36 links fünf Folds, rechts zwei Folds aufsummiert dargestellt).

## 6.4.2 Polynomielle Merkmalsraumerweiterung, Merkmalsvorverarbeitung, Modellbildung, Modellvalidierung

Durch polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums (Polynomgrad zwei) und anschließender LDA sind deutlich höhere Abstände zwischen den Klassen im Verhältnis zur Innergruppenvarianz auf der ersten und zweiten kanonischen Variable zu beobachten (vgl. rote Abstände zwischen der grünen und roten Klasse in Abbildung 36 oben und Abbildung 37).

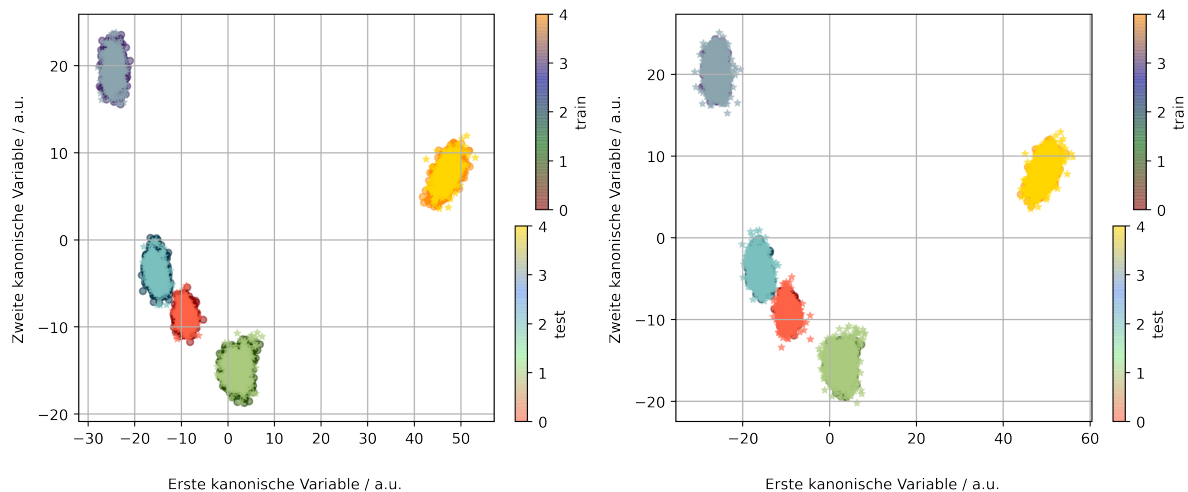


Abbildung 37: Erste und zweite kanonische Variable als Ergebnis der linearen Diskriminanzanalyse nach polynomieller Erweiterung des 2047-dimensionalen Merkmalsraums mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links fünf Folds, rechts zwei Folds)

Effektiv verbessert sich dadurch die Vorhersagequalität zur Klassifikation des Materialzustands dahingehend, dass die eine Fehlklassifikation im Eingangsmerkmalsraum durch die polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums verschwindet.

## 6.4.3 Vergleich zum bisherigen Stand der Technik

Ziel dieses Abschnitts ist es, die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methodik mit den Ergebnissen des in Kapitel 4 vorgestellten Stands der Technik zu vergleichen. Es handelt sich dabei um dieselbe Messreihe, die auch in 6.4.2 verwendet wurde, mit dem Unterschied, dass diese Auswertung ausschließlich anhand des 21-dimensionalen Merkmalsraums ohne vorgeschaltete LDA durchgeführt wurde. Zur Klassifikation des Materialzustands erfolgte die Aufteilung in Trainings- und Testdaten, wie im Falle der Regression zuvor, auch stratifiziert unter Einsatz des „Stratified K-Folds cross validator“ aus [33] in fünf und zwei Folds, um zu

bewerten, in wie weit die Größe des Trainingsdatensatzes im Verhältnis zum Testdatensatz einen Einfluss auf die Vorhersagequalität des Klassifikationsmodell hat.

Es soll außerdem aufgezeigt werden, ob auch allein auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums die Vorhersagequalität unter Einsatz der entwickelten Methodik signifikant verbessert werden kann, indem der verfügbare Merkmalsraum polynomiell erweitert wird.

Abbildung 38 zeigt das Ergebnis der Klassifikation basierend auf dem 21-dimensionalen Merkmalsraum und dem Nächste-Nachbar-Klassifikator ohne vorgeschaltete Dimensionsreduktion für die Testdaten. Der Datensatz wurde links stratifiziert in zwei und rechts in fünf Folds aufgeteilt. Dargestellt sind die aufsummierten Einzelkonfusionsmatrizen der jeweiligen Testfolds.

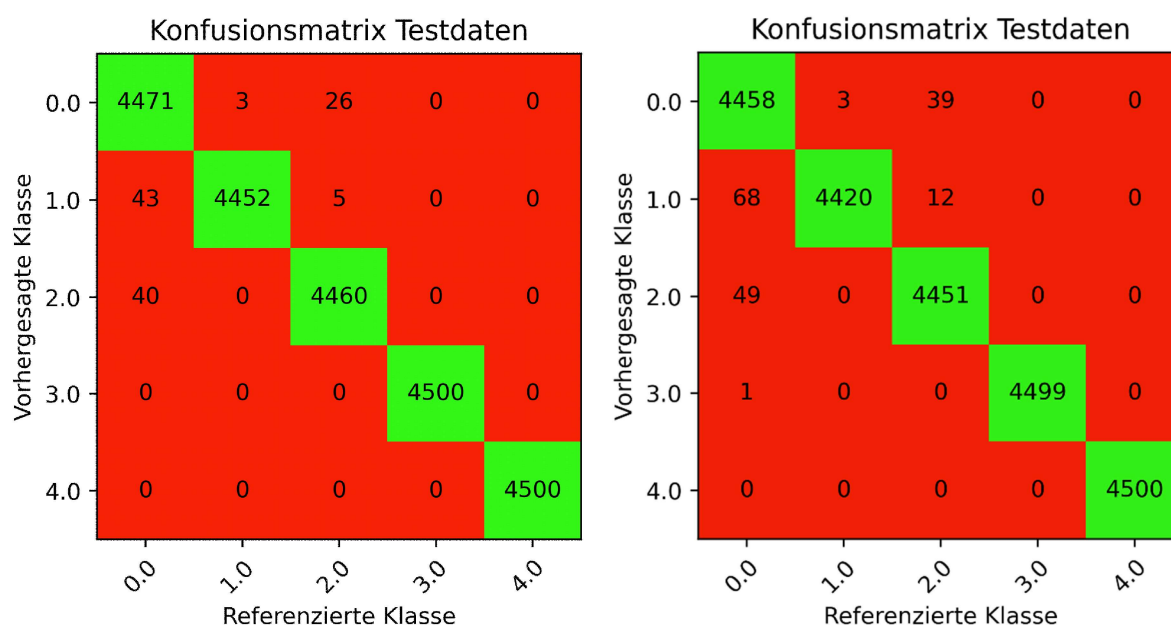


Abbildung 38: Konfusionsmatrizen der Testdaten nach stratifizierter Aufteilung (links fünf Folds, rechts zwei Folds)

Im Vergleich zur Methodik auf Basis des 2047-dimensionalen Merkmalsraum ohne eine einzelne Fehlklassifizierung, ist die Zahl falsch klassifizierter Materialzustände somit unter Einsatz des 21-dimensionalen Merkmalsraum deutlich höher. Hinzu kommt, dass die Anzahl der Folds, im Gegensatz zum Einsatz der methodischen Analyse, einen geringen Einfluss auf die Vorhersagequalität hat. Über alle Folds aufsummiert, ergeben sich insgesamt für fünf Folds 117 und für zwei Folds 172 Fehlklassifizierungen. Umgekehrt bedeutet das, 99,4 % bzw. 99,2 % der Daten wurden für fünf bzw. zwei Folds korrekt klassifiziert.

#### 6.4.4 Optimierung der Materialidentifikation auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraum

Die vorgestellte Methodik kann auch zur Optimierung von Anwendungen verwendet werden, in denen nur die Daten des 21-dimensionalen Merkmalsraums zur Verfügung stehen. Anstatt den „Nächste-Nachbar-Klassifikator“ direkt auf die 21 Merkmale anzuwenden, wird der Merkmalsraum vorab mit Hilfe der linearen Diskriminanzanalyse überwacht reduziert. Als Zielgröße wird dabei der Materialzustand von 0 - 4 verwendet.

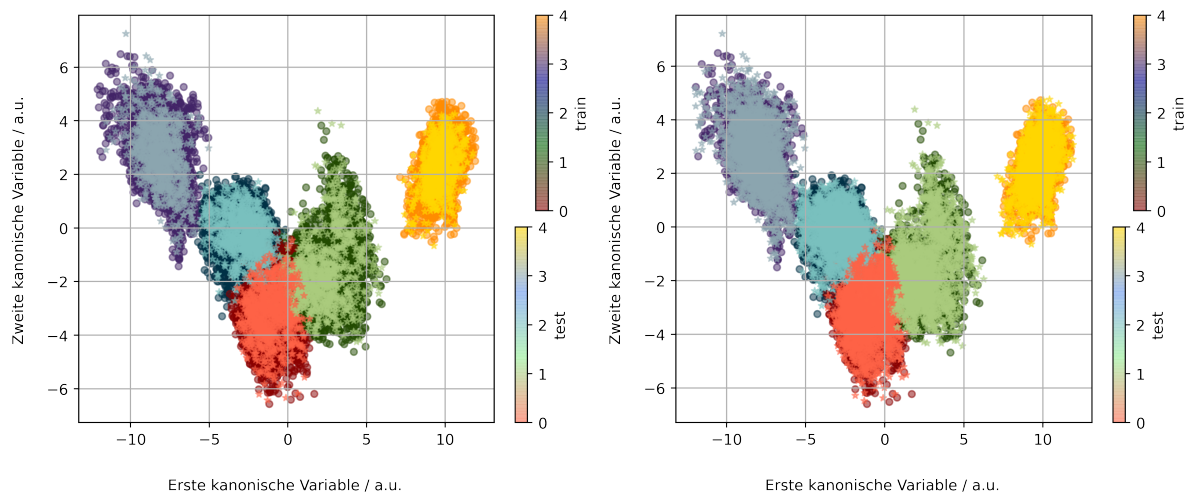


Abbildung 39: Erste und zweite kanonische Variable als Ergebnis der linearen Diskriminanzanalyse auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links fünf Folds, rechts zwei Folds)

Abbildung 39 zeigt auf der x-Achse die erste und auf der y-Achse die zweite kanonische Variable nach der überwachten Dimensionsreduktion durch die lineare Diskriminanzanalyse. In dieser Darstellung wurden links die ersten vier Folds zum Trainieren und das letzte Fold zum Validieren der linearen Diskriminanzanalyse verwendet, rechts zeigt das Ergebnis nach Aufteilung in zwei Folds, wobei das erste Fold zum Trainieren und das zweite Fold zum Validieren der LDA verwendet wurde. Durch polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums kann die Vorhersagequalität der Klassifikation des Materialzustands signifikant erhöht werden. Im Vergleich mit Abbildung 39 sind die Klassen in Abbildung 40 nach polynomieller Erweiterung mit Polynomgrad zwei qualitativ signifikant besser separierbar.

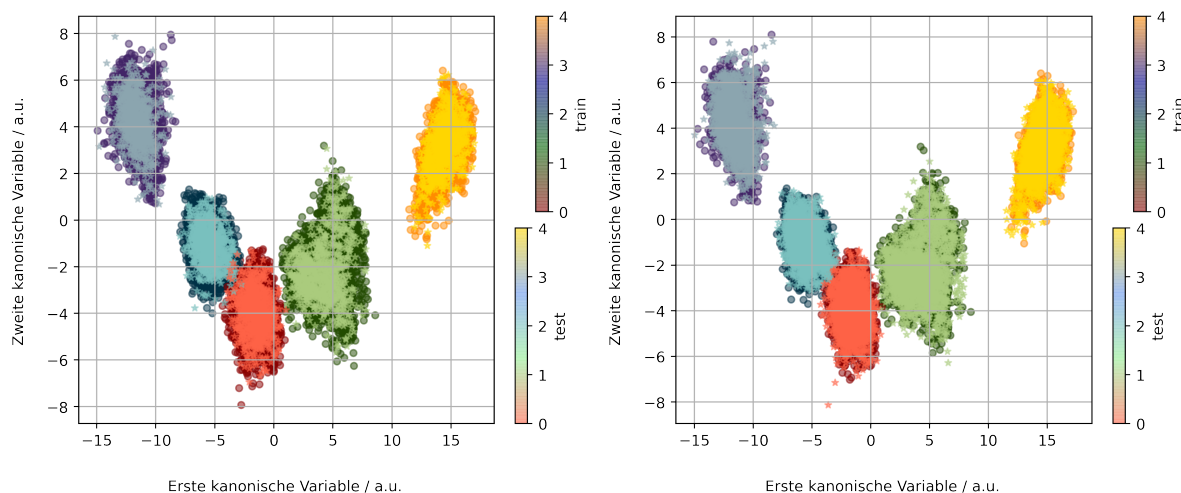


Abbildung 40: Erste und zweite kanonische Variable als Ergebnis der linearen Diskriminanzanalyse nach polynomieller Erweiterung des 21-dimensionalen Merkmalsraums mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links fünf Folds, rechts zwei Folds)

Abbildung 41 zeigt die Verbesserung der Vorhersagequalität durch die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methodik in Abhängigkeit des Polynomgrades der Merkmalsraumerweiterung. Auf der x-Achse ist dabei der Grad des Polynoms aufgetragen, die y-Achse zeigt die Zahl der korrekt klassifizierten Materialzustände im Verhältnis zu allen Datenpunkten in Prozent. Aufgetragen ist dabei der Mittelwert der korrekt klassifizierten Daten nach stratifizierter Aufteilung in fünf (links) und zwei (rechts) Folds.

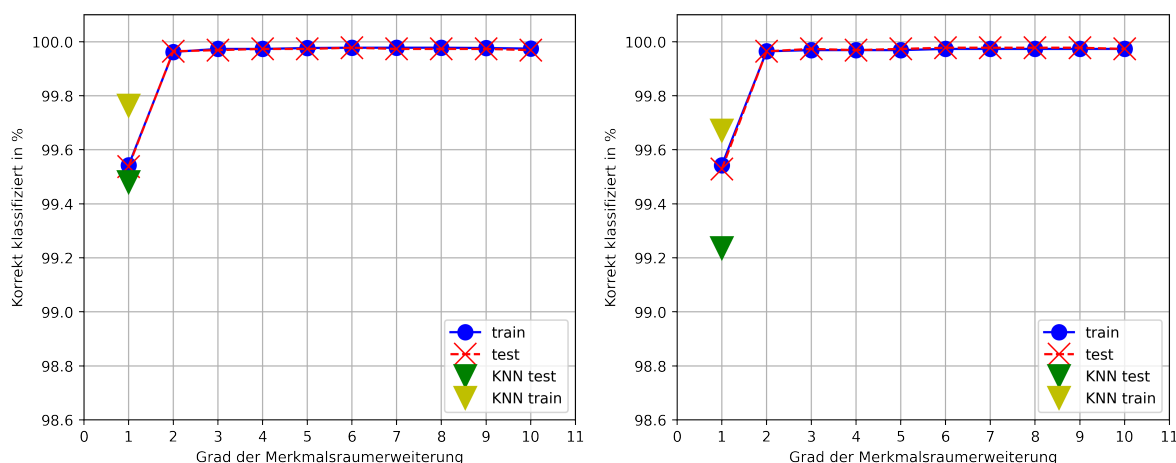


Abbildung 41: Korrekt klassifizierte Materialzustände über Grad des Polynoms zur Erweiterung des Merkmalsraums

Verglichen mit dem Vorgehen, die Klassifikation auf Basis eines KNN und den 21 Merkmalen durchzuführen, reduziert die vorgeschaltete lineare Diskriminanzanalyse einerseits die

Unterschiede in der Vorhersage der Trainings- und Testdaten. Zusätzlich führt die Methodik nach der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung zu einer deutlichen Verbesserung der Vorhersage der Testdaten. Die größte Verbesserung zeigt sich nach Erweiterung auf Polynomgrad zwei des Merkmalsraums, spätestens nach dem Polynomgrad drei ist keine weitere Verbesserung mehr zu beobachten.

#### 6.4.5 Fazit

In Abschnitt 6.4 wurde aufgezeigt, wie das in Kapitel 5 entwickelte methodische Vorgehen die ohnehin schon mit über 99 % korrekt klassifizierten Materialien im bisherigen Stand der Technik auf über 99,999 % verbessert hat und zwar sowohl für den optimiert extrahierten 2047-dimensionalen als auch für den 21-dimensionalen Eingangsmerkmalsraum. Wie bereits in 6.3, ist diese Verbesserung einerseits auf den erhöhten Informationsgehalt im optimiert extrahierten Eingangsmerkmalsraum zurückzuführen, beim Einsatz des 21-dimensionalen Merkmalsraums zeigt sich aber erneut die Stärke der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung, da für beide Merkmalsräume nahezu 100 % der Daten korrekt klassifiziert wurden.

### 6.5 Zusammenfassung und Diskussion

Es zeigt sich, dass die entwickelte Methodik die Vorhersagequalität statistischer Modelle zur Klassifikation verschiedener Materialzustände und Bestimmung der Sensorabhebung im Vergleich zum bisherigen Vorgehen signifikant verbessert.

Einen wesentlichen Einfluss hat dabei auch die Wahl der Merkmalsräume, die signifikanten Einfluss auf die Vorhersagequalität der Modelle hat. Während die Methodik zur Klassifikation auf Basis des 2047-dimensionalen, polynomiell erweiterten Merkmalsraums deutlich bessere Ergebnisse im Hinblick auf korrekt klassifizierte Materialzustände zeigt als unter Einsatz des 21-dimensionalen Merkmalsraums mit polynomieller Erweiterung, verhält es sich bei der Methodik zur Regression umgekehrt. Die polynomielle Erweiterung in Kombination mit einem verhältnismäßig kleinen, aber repräsentativen Merkmalsraum, der aber auf Basis subjektiver Erfahrungen extrahiert wurde, führt dabei zu minimal besseren Ergebnissen als unter Einsatz des 2047-dimensionalen Merkmalsraums. Im Umgang mit hochdimensionalen Merkmalsräumen und unselektierten Merkmalen zeigt sich eine mögliche Schwäche der Methodik, bestmögliche Ergebnisse zu erzielen. Trotz der vorgeschalteten, überwachten Dimensionsreduktion mit der LDA, scheinen Merkmale im 2047-dimensionalen



Merkmalsraum das Ergebnis zu beeinflussen. Eine Gegenmaßnahme könnte sein, den 2047-dimensionalen Merkmalsraum durch den Einsatz von unüberwachten Dimensionsreduktionsalgorithmen in Kombination mit Algorithmen zur Merkmalsselektion mehrstufig zu reduzieren (siehe „sklearn.feature\_selection“ in [33]). Darüber hinaus könnte der Merkmalsraum durch den Einsatz der PCA vor oder nach der polynomiellen Erweiterung auf wenige linear unabhängige Sekundärmerkmale reduziert werden, um zu ermitteln, in wie weit das Ergebnis durch selektive Auswahl von Hauptkomponenten optimiert werden kann. Hinzu kommt, dass die Modellbildung beim Einsatz von alltagsüblichen Bürorechnern (hier eingesetzt wurde ein Rechner mit Intel® Core™ i5-8265U CPU @1,6 GHz und 8 GB RAM) mit 2047 Merkmalen mehr Zeit und Speicher in Anspruch nimmt und ab Polynomgrad vier die Berechnungen aufgrund eines „Memory Errors“ des Arbeitsspeichers abgebrochen werden.

Die sukzessive Erhöhung der Stützstellen zur Reduzierung des experimentellen Aufwands im Hinblick auf die Datenaufnahme bietet dem Anwender außerdem Raum, Expertenwissen in das Experiment einfließen zu lassen, das ebenfalls signifikanten Einfluss auf die Vorhersagequalität hat. Aus Abbildung 31 wurde beispielsweise abgeleitet, dass die polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums nicht zielführend war, da sich die Trainingsdaten zwar verbessert vorhersagen ließen, diese verbesserte Vorhersage jedoch nicht auf die Testdaten übertragen werden konnte.

Abbildung 42 zeigt oben links das Ergebnis der Regression auf Basis des 2047-dimensionalen polynomiell erweiterten Merkmalsraums mit Polynomgrad drei und insgesamt 6165 Merkmalen. In dieser Darstellung sieht man den möglichen Grund für die Unterschiede in der Vorhersage der Trainings- und Testdaten, nämlich die im Vergleich zu den übrigen Testdaten ungenaue Vorhersage bei 0,1 mm. Unter Berücksichtigung physikalisch fundierter Hintergrundinformationen kann das Regressionsergebnis durch Hinzunahme einer einzelnen Stützstelle auf Basis des 2047-dimensionalen Merkmalsraum nochmals verbessert werden. Abbildung 42 zeigt oben rechts die Verbesserung der Vorhersagequalität der Testdaten, indem zusätzlich die Gruppe 0,1 mm zum Training verwendet wird. Hintergrund ist Kenntnis über den Einfluss der Sensordistanz auf das magnetische Feld und somit auf die Merkmale im 3MA-X8-System, das magnetische Feld nimmt mit dem Quadrat des Abstandes ab. Diese Kenntnis kann im Experiment berücksichtigt werden, indem beispielsweise aufgrund des nichtlinearen Feldverlaufs die Stützstellendichte für kleine Sensorabhebungen größer sein sollte als für höhere Sensorabhebungen.

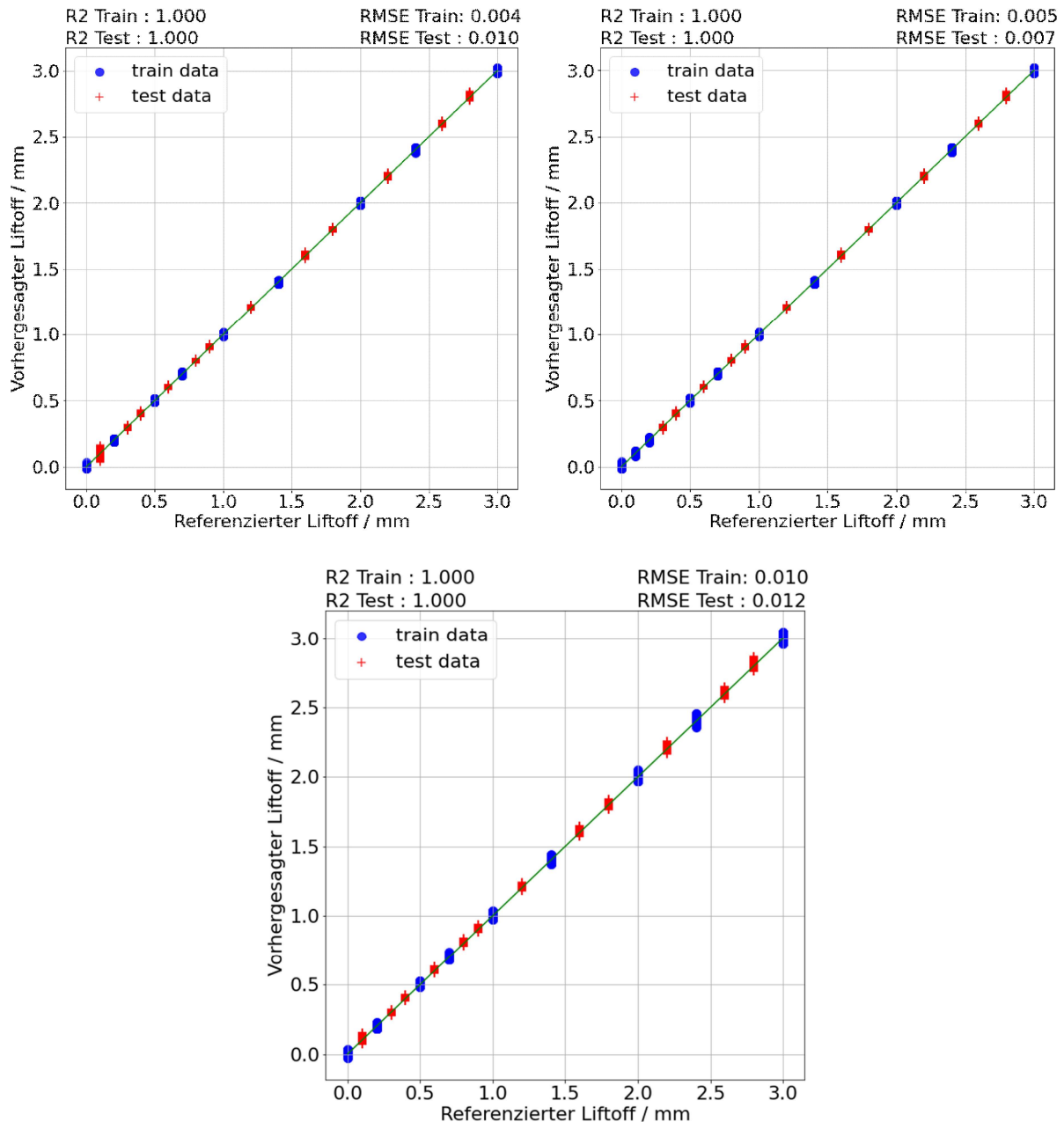


Abbildung 42: Vergleich der Vorhersagequalität nach Applizierung der Methodik (oben links), nach Hinzunahme von Hintergrundwissen (oben rechts) und der Kernel-Ridge-Regression als Alternative zur Methodik (unten)

Als Alternative zur polynomiellen Erweiterung des Merkmalsraums kann die Kernel-Ridge-Regression eingesetzt werden [35]. Diese kombiniert den Ansatz der multivariaten linearen Regression mit zwei weiteren Funktionalitäten. Die erste Funktionalität ist der Einsatz von Kernel-Funktionen. Dadurch können, ähnlich wie bei der polynomiellen Erweiterung des Merkmalsraums, nichtlineare Zusammenhänge im Merkmalsraum linearisiert werden. Die zweite Funktionalität ist die implizite Merkmalsselektion der Ridge-Regression, die durch eine L2-Regularisierung Merkmale aus der Modellbildung entfernt, die nur einen verhältnismäßig

geringen Beitrag auf die Vorhersagequalität haben, wodurch die Testdaten besser abgebildet werden. Das Modell in Abbildung 42 unten wurde mit einer Kernel-Ridge-Regression mit Polynomgrad drei trainiert, die Ergebnisse sind vergleichbar mit den Modellen auf Basis der polynomiellen Erweiterung des Merkmalsraums. Interessant ist auch die Beobachtung des Modellverhaltens bei der Vorhersage des ersten Liftoffs, der vermutlich durch den Anteil der Ridge-Regression verbessert abgebildet wird. Diese und weitere Optimierungsmöglichkeiten erfordern jedoch eine komplexere Methodik, sollten jedoch vor dem Hintergrund der bereits sehr guten Ergebnisse im Vergleich zum Vorgehen im Stand der Technik lediglich bedarfsorientiert in Erwägung gezogen werden.



## 7 Materialidentifikation und Spannungsbestimmung

### 7.1 Einführung

Betriebsbedingt kommt es, beispielsweise aufgrund von Druckvariationen, zu Wechsellasten, die in Druckbehälter- und Rohrleitungsstählen in Kernkraftwerken zu Veränderungen in der Mikrostruktur des Werkstoffs führen. Zur Abschätzung der Restlebensdauer ist eine zuverlässige Aussage über den Werkstoff- und Spannungszustand erforderlich [66] [67]. Im Rahmen mehrerer Forschungsvorhaben der Reaktorsicherheitsforschung des BMWi wurde in den vergangenen Jahrzehnten aufgezeigt, dass der Einsatz mikromagnetischer Messverfahren aufgrund von Korrelationen im mechanischen und magnetischen Verhalten erlaubt, zuverlässige Aussagen über den Werkstoff- und Spannungszustand zu treffen. Eine Herausforderung besteht dabei in der Überlagerung von Spannungs- und Mikrostruktureinflüssen im Werkstoff, die sich auch überlagert im magnetischen Verhalten abbildet [38]. Dadurch kommt es zu Mehrdeutigkeiten in den Merkmalen der magnetischen Hysterese und dadurch auch in der Messinformation des 3MA-X8-Systems. Aus Vorarbeiten [24] ist bekannt, dass die Merkmale des 21-dimensionalen Merkmalsraum auch mit Hilfe maschineller Lernalgorithmen häufig keine ausreichend zuverlässige Aussage über den Spannungszustand beim Einsatz unterschiedlicher Werkstoffe erlauben.

### 7.2 Experiment

Im Rahmen eines vom BMWi geförderten Forschungsvorhaben (Förderkennzeichen 1501564 [68]) Vorhabens sollte untersucht werden, wie sich der Einfluss der Mehrdeutigkeiten im 3MA-X8-Merkmalraum zur Bestimmung des Werkstoff- und Spannungszustands reduzieren lässt. Hierfür standen Rohrsegmente aus zwei verschiedenen Werkstoffen (vgl. Abbildung 43) zur Verfügung.



22NiMoCr3-7

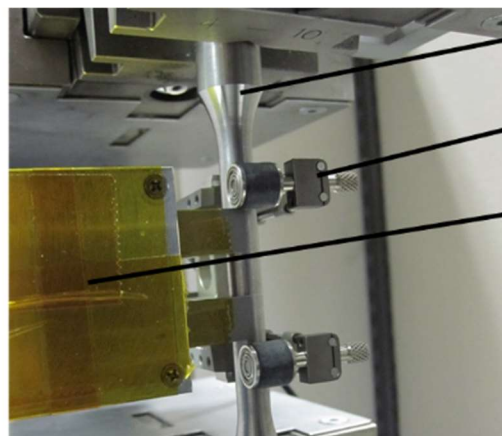
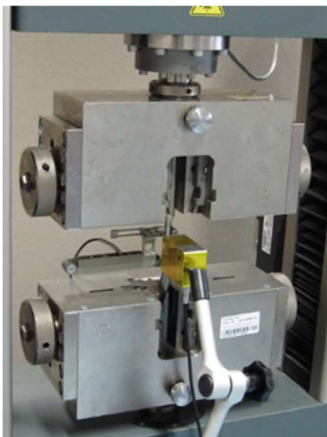


20MnMoNi5-5

Abbildung 43: Rohrsegmente aus 22NiMoCr3-7 (links) und 20MnMoNi5-5 (rechts) [68]

Die Werkstoffreste 22NiMoCr3-7 (links) waren Teil des Reaktordruckbehälters von Biblis C, welcher nicht in Betrieb ging [68]. Der Werkstoff 20MnMoNi5-5 (rechts) entstammt einer Hauptkühlmitteleitung aus dem Kraftwerk Müllheim-Kärlich [68].

Im ersten Schritt wurde eine Probengeometrie festgelegt, die es im späteren Verlauf ermöglicht 3MA-X8 Messungen durchzuführen, während die Probe in einer Zugmaschine sowohl im plastischen als auch im elastischen Bereich gedehnt wird (vgl. Abbildung 44). Dadurch sollen zwei in der Praxis vorkommende Szenarien nachgestellt werden: Druckvariationen, die die Mikrostruktur des entsprechenden Werkstoffs durch plastische Verformung dauerhaft verändern und Druckvariationen, die keinen bleibenden Einfluss auf die Mikrostruktur haben. Das übergeordnete Ziel ist dabei, eine möglichst repräsentative Datenbasis zur Ermittlung der Spannung und der vorkommenden Werkstoffvariationen zu erhalten.



Probe

Extensometer

3MA-X8-Prüfkopf

Abbildung 44: Experimenteller Aufbau

Im Anschluss wurden Proben mit der festgelegten Probengeometrie aus den verfügbaren Segmenten entnommen und spannungsarmgeglüht, um den Einfluss möglicher Eigenspannungen im Material auf die Messinformation des 3MA-X8-Systems zu reduzieren. Eigenspannungen bilden sich, ähnlich wie Lastspannungen, ebenfalls in der magnetischen Hysterese ab [38]. Es kann deshalb angenommen werden, dass sich Eigenspannungen ebenfalls auf die Messsignale des 3MA-X8 auswirken und dadurch die Spannungsreferenzen im Zugversuch verfälschen können.

Da im Betrieb Plastifizierungen aufgrund der vorherrschenden Wechsellasten nicht ausgeschlossen werden können, soll dies im Experiment durch Variation des Plastifizierungszustands berücksichtigt werden. Im Vorfeld der Plastifizierung der Proben wurden zur Charakterisierung der mechanischen Kenngrößen (z.B. Streckgrenze) beider Werkstoffe zusätzlich zerstörende Zugversuche an jeweils fünf Zugproben durchgeführt. Die Ermittlung der Spannungs-Dehnungskurve (vgl. Abbildung 45) und die spätere Plastifizierung erfolgten unter Einsatz einer servohydraulischen Prüfmaschine (Firma Instron, Typ 8802) mit einer maximalen axialen Kraft von 100 kN, einer Abzugsgeschwindigkeit von 0,015 mm/s unter Raumtemperatur und mit Hilfe eines Extensometers zur Aufzeichnung der Dehnung.

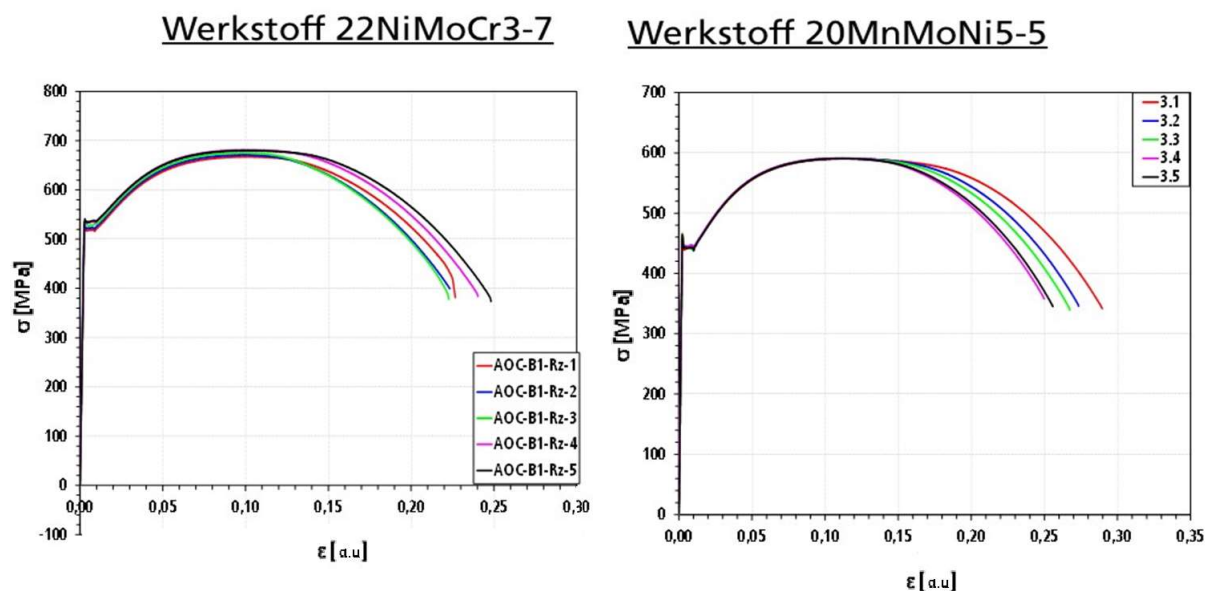


Abbildung 45: Spannungs-Dehnungs-Kurve für 22NiMoCr3-7 (links) und 20MnMoNi5-5 (rechts)

Im Anschluss wurden jeweils drei Proben der beiden Werkstoffe auf 0,8 %, 2 % und 4 % gedehnt und dadurch plastifiziert. Danach wurden die Proben in die Zugmaschine eingespannt und elastisch gedehnt. Da sich erste Plastifizierungseffekte erfahrungsgemäß bereits vor

Erreichen der Streckgrenze in den mikromagnetischen Messsignalen abbilden, wurden die Proben zur Vermeidung überlagerter Mikrostruktureffekte lediglich bis zur halben Streckgrenze gedehnt.

Die Datenaufnahme mit dem 3MA-X8-System erfolgte während der elastischen Dehnung, die Spannung liegt also im Gegensatz zur Sensorabhebung in Abschnitt 6.3 nicht diskret, sondern kontinuierlich vor.



Abbildung 46: An Probendurchmesser adaptierter 3MA-X8-Sensor

Zur Optimierung der Ankopplung wurden die Pole des eingesetzten 3MA-X8-Sensors (Typ 9030) an den Durchmesser der Zugprobe adaptiert (vgl. Abbildung 46).

Das 3MA-X8-System wurde dabei mit folgender Parametrierung betrieben:

- Magnetisierungsamplitude  $A_{\text{mag}} = 3,5 \text{ V}$
- Magnetisierungsfrequenz  $f_{\text{mag}} = 100 \text{ Hz}$
- Überlagerungspermeabilitätsamplitude  $A_{\text{ecip}} = 1,5 \text{ V}$
- Überlagerungspermeabilitätsfrequenz  $f_{\text{ecip}} = 4000 \text{ Hz}$

### 7.3 Spannungsbestimmung

Bei der methodischen Analyse zur Bestimmung der mechanischen Lastspannung erfolgt die Datenaufnahme während der Zustandsvariation, also der Belastung der Probe durch die Zugmaschine. Dies führt im Gegensatz zur Anwendung in Kapitel 7 dazu, dass die Daten nicht



an diskreten Stützstellen sondern in kontinuierlicher Form vorliegen. Im Rahmen dieses Anwendungsbeispiels ist es deshalb im Vergleich zu 7.4 nicht notwendig, den Fokus auf die Aufwandsminimierung während der Datenaufnahme zu legen. Zusätzlich erwartet die im Verlauf der Methodik eingesetzte LDA diskrete Zielgrößen. Aus diesem Grund wird der aufgenommene Datensatz diskretisiert. Aus Sicht der Anwender stellt sich an dieser Stelle die Frage, wie viele Diskretisierungssegmente mindestens erforderlich sind, um ein zuverlässiges Regressionsmodell zu trainieren.

### 7.3.1 Eingangsmerkmalraum

Der für diese Aufgabenstellung verfügbare 1747-dimensionale Merkmalsraum setzt sich zusammen aus dem 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalraum, dem 226-dimensionalen erweiterten Merkmalsraum sowie jeweils 375 Samples (Samplingrate 37,5 kHz, Magnetisierungsfrequenz 100 Hz) für Spannung, Strom, Real- und Imaginärteil.

### 7.3.2 Datenaufnahme und Datenbasis, Merkmalsvorverarbeitung, Modellbildung, Modellvalidierung

Die Trainings- und Testdatenbasis wird entsprechend der Methodik erzeugt. Hierzu wird der kontinuierlich aufgenommene Datensatz iterativ segmentiert und den einzelnen Segmenten diskrete Zustände zugewiesen. Analog zum Vorgehen mit diskreten Stützstellen, wird nun der Datensatz im ersten Schritt in fünf Teile segmentiert, wobei das erste, dritte und fünfte Segment zum Trainieren und das zweite und vierte Segment zum Validieren des Modells verwendet werden. Anschließend wird die Anzahl der Segmente so lange erhöht, bis keine signifikante Verbesserung der Vorhersagequalität des multivariaten Regressionsmodells erfolgt. Zur Bewertung der Modelle werden  $R^2$  und RMSE verwendet. Vor dem Trainieren erfolgt die Merkmalsvorverarbeitung wie in 6.3.2 durch Skalierung der Merkmale und anschließend erzeugte kanonische Variablen.

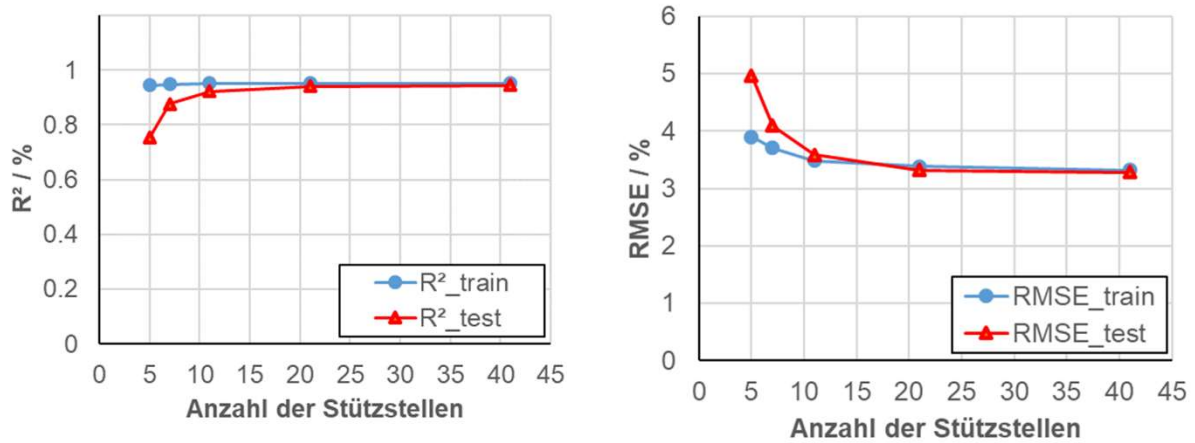


Abbildung 47:  $R^2$  (links) und RMSE (rechts) in Abhängigkeit der Anzahl der Stützstellen

Abbildung 47 zeigt links  $R^2$  und rechts RMSE sowohl für Trainings- als auch für Testdaten bei Segmentierung in fünf, sieben, elf, 21 und 41 Segmente. Es ist zu erkennen, dass sich die Vorhersagequalität für die Trainings- und Testdaten im Hinblick auf  $R^2$  und RMSE ab 21 Segmenten nicht mehr signifikant verbessert, da der Unterschied dieser Kenngrößen zu 41 Segmenten subjektiv betrachtet sehr gering ist. In der Folge werden daher die 21 ungeraden Stützstellen zum Trainieren und die übrigen 20 geraden Stützstellen zum Validieren der Regressionsmodelle verwendet.

### 7.3.3 Polynomielle Merkmalsraumerweiterung, Merkmalsvorverarbeitung, Modellbildung, Modellvalidierung

Entsprechend der Methodik wird nun geprüft, ob die Vorhersagequalität des Regressionsmodells durch polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums verbessert werden kann. Dabei wird mit jeder polynomiellen Erweiterung das Regressionsmodell unter Einsatz der vorgeschalteten Skalierung und LDA neu trainiert und validiert.

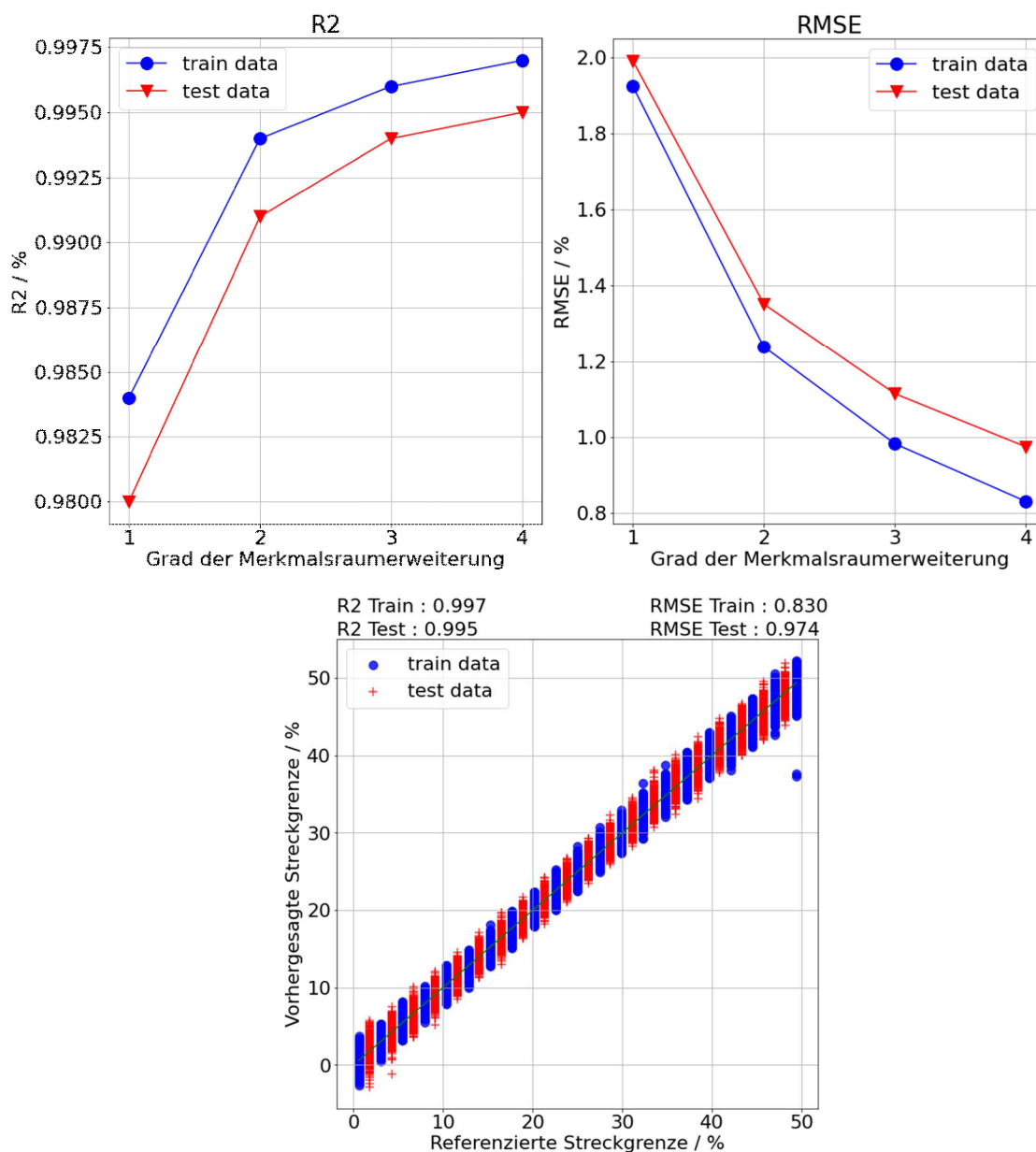


Abbildung 48: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (oben links  $R^2$ , oben rechts RMSE), Ergebnis der MLR nach polynomieller Erweiterung mit Polynomgrad drei (unten)

In Abbildung 48 zeigt sich oben, dass die polynomielle Erweiterung zu einer Verbesserung der Vorhersage der Trainings- und der Testdaten führt. Es zeigt sich aber auch, dass die Differenz des RMSE zwischen den Trainings- und Testdaten größer wird (rechts), während sich die Differenz bei Betrachtung von  $R^2$  nicht signifikant ändert (links). Abbildung 48 zeigt unten das Ergebnis der MLR auf Basis von 21 Segmenten und daraus resultierend 40 kanonischen Variablen sowohl für die Trainingsdaten (blau) als auch für die Testdaten (rot), abgebildet nach Erweiterung des Merkmalsraum auf Polynomgrad vier. Die Trainingsdaten werden inklusive dem Ausreißer bei 50 % der referenzierten Streckgrenze mit einem  $R_{\text{Train}}^2 = 0,997$  % und einem

$RMSE_{\text{Train}} = 0,83 \% R_e$  vorhergesagt, die Testdaten werden mit einem  $R_{\text{Test}}^2 = 0,995 \%$  und einem  $RMSE_{\text{Test}} = 0,974 \% R_e$  vorhergesagt.

### 7.3.4 Vergleich zum eigenen Stand der Technik

Ziel dieses Kapitels ist es, die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methodik mit den Ergebnissen des in Kapitel 4 vorgestellten Stands der Technik zu vergleichen. Es handelt sich dabei um dieselbe Messreihe, die auch bei der methodischen Auswertung verwendet wurde. Die ermittelte Anzahl der Stützstellen und die Aufteilung in Trainings- und Testdaten wird dem methodischen Vorgehen aus 7.3.2 entnommen, da hierfür in der Vergangenheit kein standardisiertes Vorgehen existierte, sondern die Experimentplanung im Wesentlichen personenabhängig war. Der Unterschied zum methodischen Vorgehen ist, dass die MLR ohne vorgeschaltete Skalierung und LDA ausschließlich auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums trainiert und validiert wurde.

Abbildung 49 zeigt links  $R^2$  und rechts RMSE sowohl für Trainings- als auch für Testdaten. Auch auf dieser Datenbasis verbessert sich die Vorhersagequalität bis 21 Segmenten signifikant, der Unterschied zu 41 Segmenten ist dabei jedoch nicht zu vernachlässigen. Steigt die Anzahl der Segmente weiter als 41, gibt es keine wesentlichen Veränderungen bei der Vorhersagequalität, sowohl die Absolutwerte von  $R^2$  und RMSE als auch die Differenz zwischen den Trainings- und Testdaten bleiben annähernd konstant.

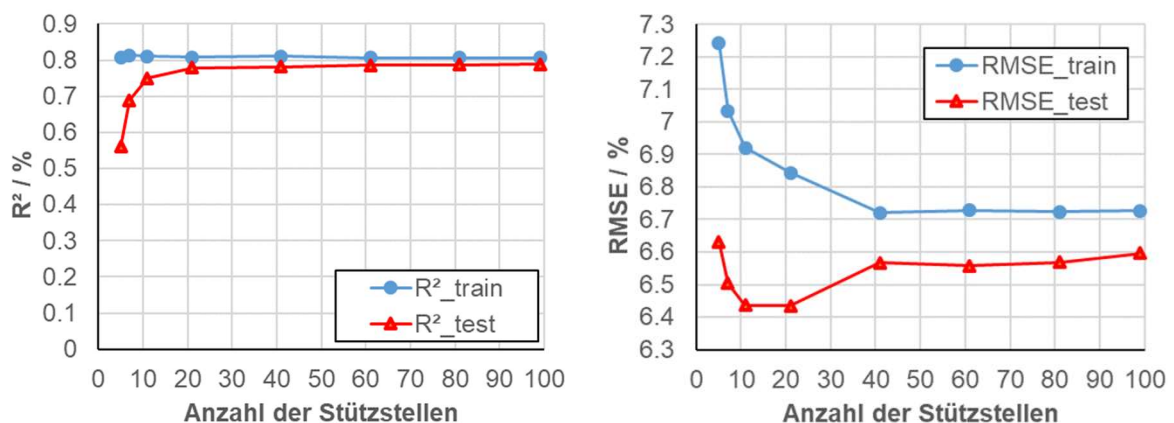


Abbildung 49:  $R^2$  (links) und RMSE (rechts) in Abhängigkeit der Anzahl der Stützstellen

Die Vorhersagequalität ist jedoch deutlich schlechter als in Abbildung 47 unter Verwendung der Methodik und des optimiert-extrahierten Merkmalsraums. Zwar verbessert sich die

Vorhersage insbesondere in der Differenz zwischen den Trainings- und Testdaten nochmal unter Verwendung von 41 Stützstellen zum Trainieren, der experimentelle Aufwand für die Datenaufnahme erhöht sich aber nahezu um den Faktor zwei. Zum direkten Vergleich mit den Ergebnissen aus 7.3.3 werden in diesem Abschnitt die gleichen Trainings- und Testdaten (21 Stützstellen zum Trainieren und 20 Stützstellen zum Validieren) verwendet.

### 7.3.5 Optimierung der Spannungsbestimmung

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, in wie weit die Vorhersagequalität der MLR auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraum, durch das methodische Vorgehen verbessert werden kann.

Die Trainingsdaten werden zur Ermittlung der Vorschriften zur Skalierung und Dimensionsreduktion und zum anschließenden Training der MLR verwendet. Im Anschluss wird der Merkmalsraum so lange polynomiell erweitert, bis sich die Vorhersagequalität für Trainings- und Testdaten der MLR nicht mehr signifikant verbessert. In Abbildung 50 zeigt sich die Verbesserung von  $R^2$  und RMSE sowohl für die Trainings- als auch für die Testdaten. Der asymptotische Verlauf der Kurven zeigt, dass es bereits ab Polynomgrad elf zu keiner signifikanten Verbesserung der Vorhersagequalität kommt.

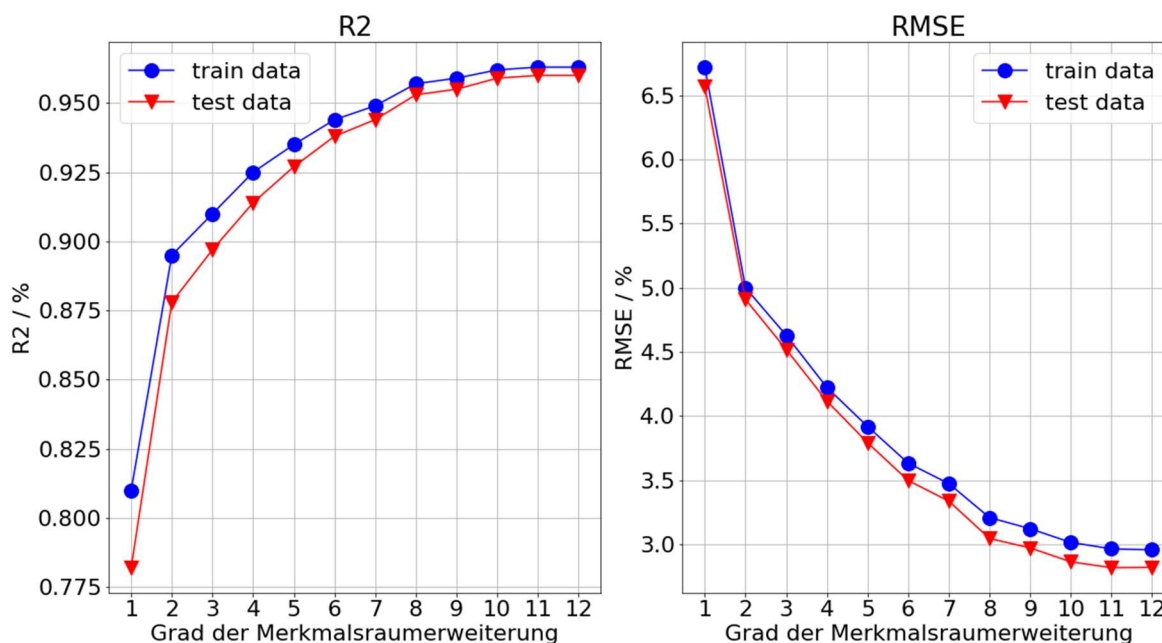


Abbildung 50: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (links  $R^2$ , rechts RMSE)

Ähnlich wie in 6.3.5 kann die Vorhersagequalität durch polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums signifikant verbessert werden. Die polynomielle Merkmalsraumerweiterung in 6.3.5 hat aber dazu geführt, dass es letztlich keine Rolle gespielt hat, ob der 21-dimensionale oder der optimiert-extrahierte Eingangsmerkmalsraum verwendet wurde. Im Hinblick auf die Vorhersagequalität waren die Ergebnisse in vergleichbarer Größenordnung. Für diesen Anwendungsfall zeigt sich in Abbildung 51 (links 21-dimensionaler Merkmalsraum, rechts nach polynomieller Erweiterung bis Polynomgrad elf), dass sich die Vorhersagequalität deutlich von der in 7.3.3 (vgl. Abbildung 48) unterscheidet. Mit etwa 3 % ist der RMSE mehr als dreimal so schlecht. Interessant ist auch die Beobachtung, dass in diesem Abschnitt die Testdaten leicht verbessert abgebildet werden, als die Trainingsdaten.

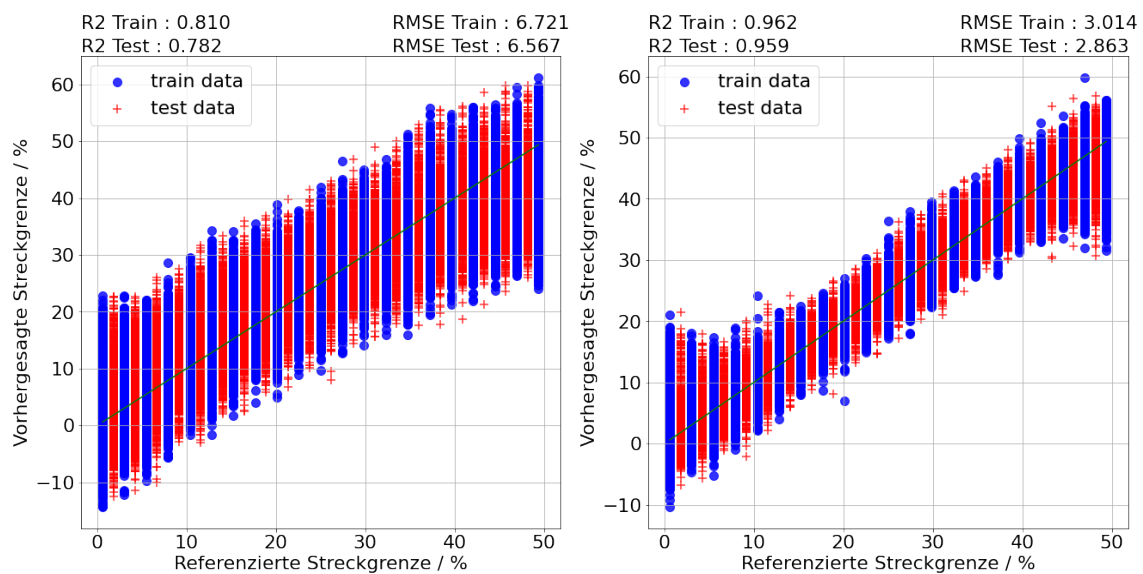


Abbildung 51: Ergebnis der MLR vor (links) und nach polynomieller Erweiterung mit Polynomgrad elf (rechts)

### 7.3.6 Fazit

In Abschnitt 7.3 wurde aufgezeigt, wie das in Kapitel 5 entwickelte methodische Vorgehen die Spannungsvorhersage besser abbildet, als dies mit dem bisherigen Stand der Technik möglich war. Im Gegensatz zu 6.3 führt die Verbesserung aber nicht dazu, dass die Ergebnisse der unterschiedlichen Merkmalsräume vergleichbar sind. Die Ergebnisse auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraum sind deutlich schlechter als unter Einsatz des optimiert-extrahierten Merkmalsraum. Während in 6.3 die Vermutung naheliegt, dass die Wahl des Merkmalsraums durch die polynomielle Merkmalsraumerweiterung keine Rolle spielt, zeigt sich in 7.3 die Stärke des optimiert-extrahierten Merkmalsraum.

Wie auch in 6.3. kann die Anzahl der Stützstellen variabel in Abhängigkeit der erforderlichen Vorhersagegenauigkeit aufgenommen werden. Dadurch kann der Aufwand der Messungen bei Regressionsproblemen minimiert wird. Dabei gilt aber zu beachten, dass während der Stützstellenaufnahme ausschließlich die multivariate lineare Regression ohne polynomielle Merkmalsraumerweiterung eingesetzt wird und dadurch die Anzahl der Stützstellen ausschließlich auf dieser Basis bestimmt wird.

## 7.4 Materialidentifikation

### 7.4.1 Eingangsmerkmalsraum, Datenaufnahme und Datenbasis, Merkmalsvorverarbeitung, Modellbildung, Modellvalidierung

Im Gegensatz zur Anwendung in Kapitel 6 unterscheidet sich in diesem Kapitel die Datenbasis der Regression von der Datenbasis der Materialidentifikation. Dort lag der Fokus auf der Reduzierung des experimentellen Aufwandes durch Ermittlung einer minimalen Anzahl an Stützstellen. Anschließend wurde diese Datenbasis zur Materialidentifikation verwendet, da genau diese Datenbasis zur Lösung beider Problemstellungen zur Verfügung steht. Bei kontinuierlich aufgenommenen Daten liegt der Fokus nicht auf einer Minimierung der Stützstellen zur Reduzierung des experimentellen Aufwandes, sondern auf der Tatsache, ein im Hinblick auf die Vorhersagequalität zuverlässiges und stabiles Modell abzuleiten, das nicht signifikant von der Anzahl der eingeteilten Segmente abhängt. Zur Materialidentifikation könnte zwar auch die gleiche Datenbasis verwendet werden, die zur Regression verwendet wurde, diese würde das Experiment nicht repräsentativ abbilden. Die Modellbildung würde in diesem Fall nur an einer Teilmenge der verfügbaren Datenbasis durchgeführt werden. Aus diesem Grund erfolgt die stratifizierte Aufteilung in Trainings- und Testdaten für diese Anwendung im Gegensatz zu 7.3 auf der Datenbasis mit der gesamten Spannungsvariation. Die Skalierungsvorschrift wird unter Einsatz des Standardscalers auf Basis der Trainingsdaten ermittelt und auf Trainings- und Testdaten angewendet. Anschließend wurde der 1747-dimensionale Eingangsmerkmalsraum auf fünf kanonische Variablen reduziert. Hierzu wurde auf Basis der skalierten Trainingsdaten ein Modell ermittelt und auf Trainings- und Testdaten appliziert.

In Abbildung 52 ist die erste kanonische Variable auf der x-Achse und die zweite kanonische Variable auf der y-Achse sowohl für die Trainings- als auch für die Testdaten projiziert (exemplarisch das dritte von fünf Folds links und das erste von zwei Folds rechts). Durch die

Bewertung der Mahalanobis-Distanz werden sowohl die Trainings- als auch die Testdaten für alle Folds zu 100 % korrekt vorhergesagt.

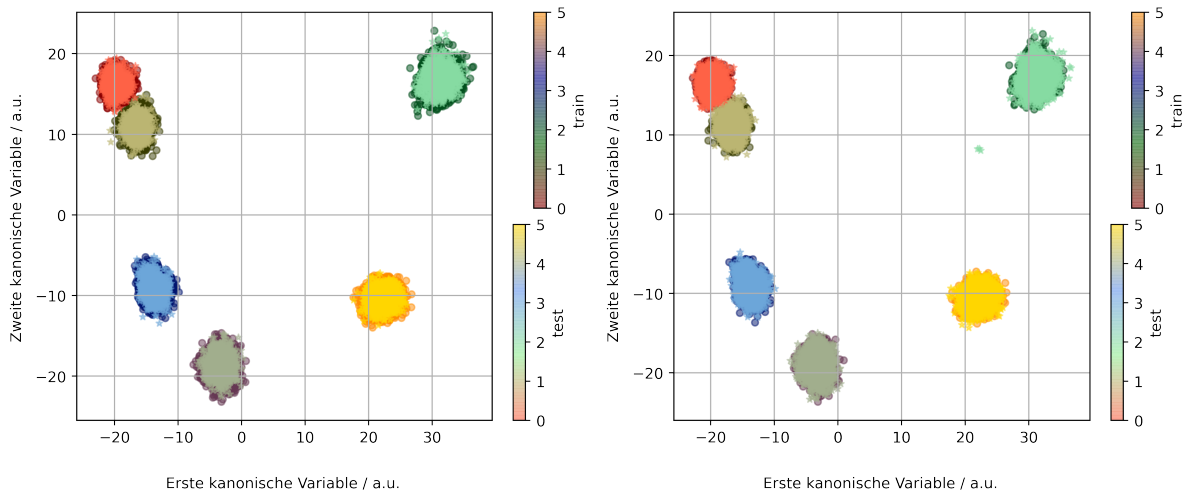


Abbildung 52: Erste und zweite kanonische Variable auf Basis des 1747-dimensionalen Merkmalsraums mit stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links fünf Folds, rechts zwei Folds)

Da bereits alle Materialzustände korrekt vorhergesagt werden, ist eine polynomielle Erweiterung des Merkmalsraum nicht erforderlich.

#### 7.4.2 Vergleich zum eigenen Stand der Technik

Ziel dieses Kapitels ist es, die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methodik mit den Ergebnissen des in Kapitel 4 vorgestellten Stand der Technik zu vergleichen. Es handelt sich auch in diesem Anwendungsfall inkl. der Aufteilung in Trainings- und Testdaten in zwei und fünf Folds um dieselbe Messreihe aus 7.4.1, wobei auch hier nur der 21-dimensionale Merkmalsraum ohne vorgeschaltete LDA ausgewertet wird.

Die Klassifizierungsergebnisse auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraum zeigen in Abbildung 53 eine nahezu ideale Vorhersage des Materialzustands. Der Datensatz wurde links stratifiziert in zwei und rechts in fünf Folds aufgeteilt. Dargestellt sind die aufsummierten Einzelkonfusionsmatrizen der jeweiligen Testfolds. Auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraum werden sieben Datenpunkte für fünf Folds bzw. drei Datenpunkte für zwei Folds falsch klassifiziert. Umgekehrt bedeutet das 99,98 % bzw. 99,99 % der Daten wurden für fünf bzw. zwei Folds korrekt klassifiziert.



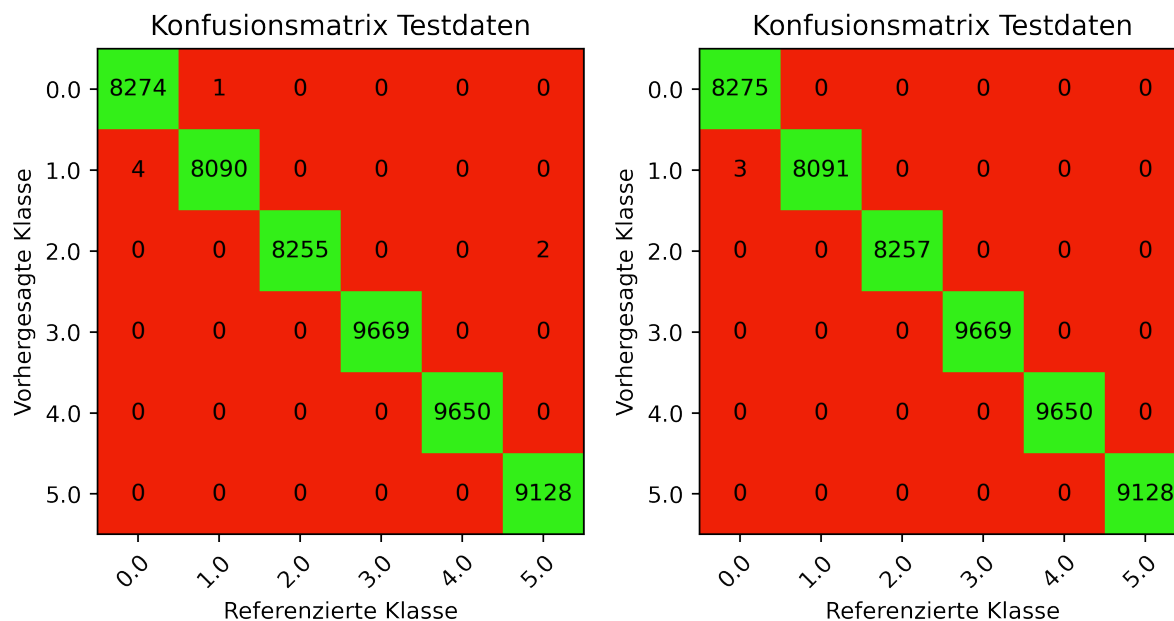


Abbildung 53: Konfusionsmatrizen nach stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (oben zwei Folds, unten fünf Folds)

#### 7.4.3 Optimierung der Materialidentifikation auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums

Mit dem in 7.4.2 erzielten Klassifikationsergebnis ist eine polynomielle Erweiterung des Merkmalsraum nicht erforderlich. Dennoch wird im Folgenden aufgezeigt, welche Vorhersagequalität durch Anwendung der Methodik auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraum erreicht wird.

Abbildung 54 zeigt links die Projektion des 21-dimensionalen Merkmalsraums sowohl für die Trainings- als auch für die Testdaten in die erste kanonische Variable auf der x-Achse und in die zweite kanonische Variable auf der y-Achse. Die Datenbasis wurde in zwei Folds aufgeteilt, dargestellt ist das Ergebnis des ersten Folds. Die Anzahl falsch klassifizierter Materialzustände auf Basis der Mahalanobis-Distanz ist im Vergleich zu 7.4.1 und 7.4.2 signifikant höher (vgl. Abbildung 54 rechts), mit insgesamt 435 Fehlklassifizierungen werden lediglich 99.17 % der Testdaten korrekt vorhergesagt.

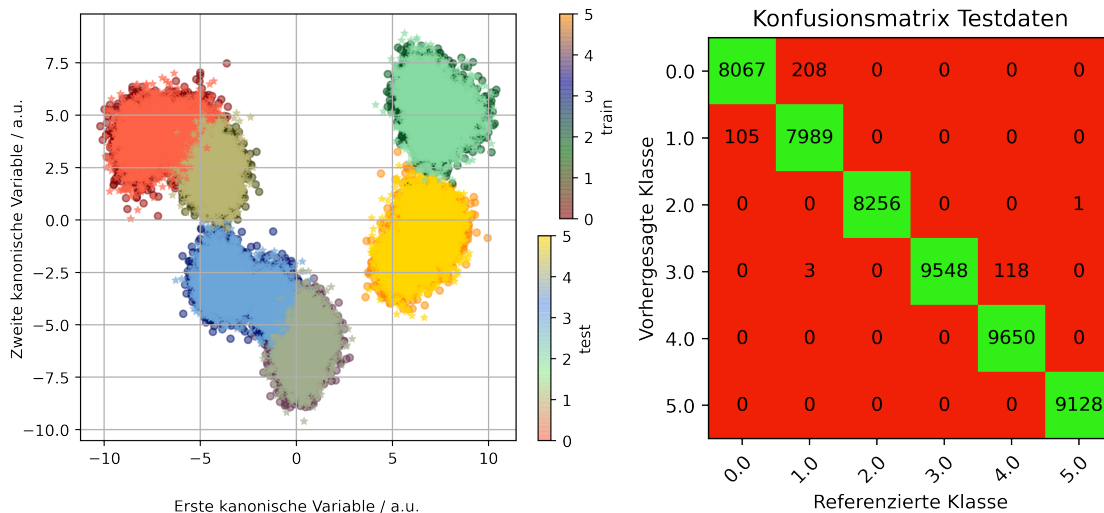


Abbildung 54: Erste und zweite kanonische Variable auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums nach stratifizierter Aufteilung in Trainings- und Testdaten (links) und der Konfusionsmatrix (rechts)

Durch polynomielle Erweiterung des 21-dimensionalen Merkmalsraums wird die Vorhersagequalität durch die LDA ab Polynomgrad zwei bei einer stratifizierten Aufteilung in zwei Folds (vgl. Abbildung 55 links) beim ersten Fold auf insgesamt eine Fehlklassifizierung reduziert, im zweiten Fold gibt es keine Fehlklassifizierung. Mit steigendem Polynomgrad gibt es keine weiteren signifikanten Verbesserungen der Vorhersagequalität (vgl. Abbildung 55 rechts). Während die Vorhersagequalität in der ersten Iteration der Methodik signifikant schlechter ist als die Vorhersagequalität auf Basis des Nächste-Nachbar-Klassifikator ohne vorgeschaltete LDA, ist das Ergebnis ab der polynomiellen Erweiterung zweiten Grades nahe dem optimalen Klassifikationsergebnis.

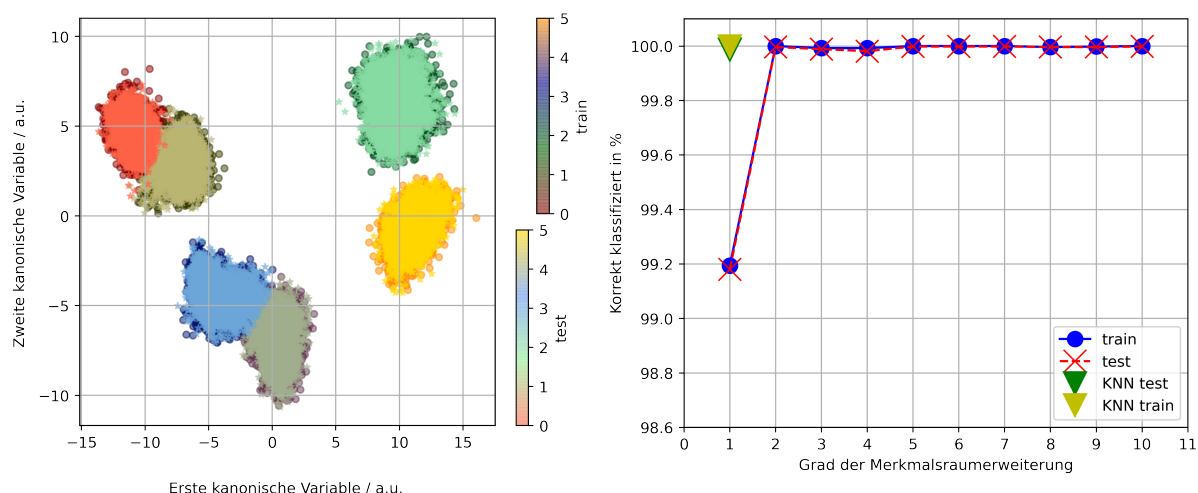


Abbildung 55: Erste und zweite kanonische Variable auf Basis des 21-dimensionalen nach polynomieller Erweiterung des Merkmalsraums mit Polynomgrad zwei (links) und Einfluss des Polynomgrades auf die Vorhersagequalität (rechts)

#### 7.4.4 Fazit

In Abschnitt 7.4 wurde aufgezeigt, wie das in Kapitel 5 entwickelte methodische Vorgehen die ohnehin schon mit lediglich sieben bzw. drei falsch klassifizierten Datenpunkte im bisherigen Stand der Technik auf 100 % verbessert hat und zwar sowohl für den optimiert extrahierten 2047-dimensionalen als auch für den 21-dimensionalen Eingangsmerkmalsraum. Insbesondere die Tatsache, dass das Ergebnis auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraums ohne polynomielle Merkmalsraumerweiterung, aber mit Einsatz der LDA, deutlich schlechtere Ergebnisse liefert, als ohne die vorgeschaltete überwachte Dimensionsreduktion im eigenen Stand der Technik, zeigt, wie wichtig die Betrachtung beider Faktoren, des Merkmalsraums und der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung ist.

### 7.5 Zusammenfassung und Diskussion

Es zeigt sich, dass die entwickelte Methodik die Vorhersagequalität statistischer Modelle zur Klassifikation verschiedener Materialzustände und Bestimmung der mechanischen Zugspannung im Vergleich zum bisherigen Vorgehen signifikant verbessert.

Wie auch in Abschnitt 6.3 und 6.4 zeigt sich, dass der Informationsgehalt in den Merkmalsräumen einen entscheidenden Einfluss auf die Vorhersagequalität der statistischen Modelle hat. Bei der Materialidentifikation zeigt sich, dass die polynomielle Erweiterung des

21-dimensionalen Merkmalsraums vergleichbare Ergebnisse liefert, wie der Einsatz des 1747-dimensionalen Merkmalsraums. Im Gegensatz zu 6.3 verbessert die polynomielle Merkmalsraumerweiterung das Regressionsergebnis zwar signifikant, die Vorhersagequalität unter Einsatz des 1747-dimensionalen Merkmalsraums ist im direkten Vergleich jedoch deutlich besser. Es zeigt sich aber auch die Stärke des Nächste-Nachbar-Klassifikators im Vergleich mit der linearen Dimensionsreduktion und anschließender Vorhersage durch die LDA. Während der KNN auf Basis des 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalraums nahezu keine Fehlklassifikation hat, ist die Vorhersagequalität in der ersten Iteration der Methodik deutlich schlechter, da der relevante Informationsgehalt bei der linearen Projektion durch die LDA gesunken ist. Durch die polynomielle Erweiterung wird der Merkmalsraum linearisiert, der relevante Informationsgehalt steigt, die Vorhersagequalität verbessert sich und ist vergleichbar mit der direkten Anwendung des Nächste-Nachbar-Klassifikator.

## 8 Mikromagnetische Detektion von Hardspots in Grobblechen

### 8.1 Einführung

Grobbleche unterliegen als Ausgangsmaterial für Gaspipelines hohen Qualitätsansprüchen. Im September 2013 musste eine Pipeline im Kaschagan-Feld am Kaspischen Meer in Kasachstan aufgrund von Gasleckagen weniger als 14 Tage nach der erstmaligen Inbetriebnahme wieder vom Netz genommen werden. Neben den Umweltschäden durch die Leckage belief sich der geschätzte wirtschaftliche Schaden durch den vollständigen Austausch der Pipeline und den Produktionsausfall für diesen einzelnen Schadensfall auf etwa 4 Milliarden US-Dollar. Nach intensiven Untersuchungen durch drei unabhängige internationale materialwissenschaftliche Institute (Technical Welding Institute in England, Center of Materials Development in Italien und Institut Francais de la Corrosion in Frankreich) konnte die Ursache bestimmt werden. Grund für den Ausfall war spannungsrisseinduziertes Materialversagen als Folge von lokalen Aufhärtungen (engl. Hardspots) im Ausgangsmaterial der Pipeline, dem Grobblech, welche nachweislich die Lebensdauer im Betrieb reduzieren [69].

Neben dem beschriebenen Schadensbild im Betrieb können durch Hardspots auch Risse beim Verrohren entstehen, die in der Regel vor der Auslieferung der fertigen Rohre detektiert werden, aber zu sehr hohen Ausschussmengen führen. Durch beide Situationen resultiert ein sehr hoher wirtschaftlicher Gesamtschaden, der durch rechtzeitige Detektion von Hardspots bereits im Ausgangsmaterial vermeidbar ist. Eine konventionelle Härteprüfung wie beispielsweise die Leeb-Härteprüfung [70] scheidet aufgrund der kundenseitig spezifizierten, minimal zu detektierenden Fehlergröße (Durchmesser 10 mm) im Verhältnis zu den sehr großflächigen Blechen (12000 x 5000 mm<sup>2</sup>) aus [71].

In der Folge waren die Stahlhersteller gegenüber den Pipelinebetreibern in der Pflicht, ihre Prozesskette dahingehend zu optimieren, Bleche vor der Auslieferung auf Hardspots zu untersuchen und betroffene Bleche nicht auszuliefern. Die Anforderung ist dabei, dass die Hardspots mit einer Aufhärtung von 30 HV10 ab einem Durchmesser von 10 mm unter allen im industriellen Umfeld auftretenden Störeinflüssen mit ausreichendem Signal-Rausch-Verhältnis detektiert werden [71].

Ein verbreiteter Lösungsweg ist der Einsatz mikromagnetischer zerstörungsfreier Prüfverfahren, wie beispielsweise das von der Firma Rohmann entwickelte und erfolgreich im Einsatz befindliche Elotest-PL500 [72] oder das in Abschnitt 4.1.4 beschriebene 3MA-X8-System.

## 8.2 Experiment

Das Experiment und die Datenstruktur der hier beschriebenen Aufgabenstellung unterscheidet sich von den Anwendungen in Kapitel 7 und Kapitel 8. Während die Daten in den vorangegangenen Kapiteln voll referenziert waren, also die entsprechenden Zielgrößen zu jedem Messwert bekannt waren, gestaltet sich die zuverlässige Referenzierung bei der Hardspotdetektion schwieriger. Die Störgrößenvariation, angefangen von magnetischen Restfeldern durch den Transport mit Magnetkränen, über Variationen in der Sensorabhebung durch Unebenheiten in der Oberfläche bis hin zu Variationen in der Zunderschicht für wechselnde Stahlsorten, beeinflusst das mikromagnetische Verhalten und somit die Messinformation signifikant. Da bei der Hardspotdetektion jedoch lediglich der Härtezustand von Interesse ist, kann dies bei der Referenzierung berücksichtigt werden. Die Datenbasis wird ausschließlich in „Hart“- und „Weich“-Zustände eingeteilt. Als Referenzierungsmethode wird aufgrund der Möglichkeit zur mobilen und schnellen Anwendung das so genannte Leeb-Rückprallverfahren eingesetzt. Dabei wird ein Objekt, der so genannte Schlagkörper (z.B. eine Kugel) mit definiertem Gewicht und an die Oberflächenrauheit angepasster Größe aus definierter Höhe auf das Messobjekt fallen gelassen und über die Höhe des Rückpralls auf die Oberflächenhärte des Messobjekts geschlossen [70].

Insgesamt ergibt sich ein Szenario, in dem die Variationsvielfalt die bisher gestellten Ansprüche an ein repräsentatives Experiment dahingehend erschwert, dass es nicht wie bisher möglich ist, die Ermittlung des Zusammenhangs zwischen mikromagnetischen und mechanischen Eigenschaften repräsentativ im Vorfeld zu bestimmen. Stattdessen wird eine Trainingsstrategie unter Einsatz der in Kapitel 5 vorgestellten Methodik entwickelt und appliziert, die zuverlässige Vorhersagen der Härteinhomogenitäten mit möglichst wenigen und möglicherweise für das Experiment nicht repräsentativen Trainingsdaten liefert. Dies wird in der Trainingsstrategie berücksichtigt, indem die eingesetzten Klassifikationsmodelle „Hart“- und „Weich“-Zustände klassifizieren. Da von einer unvollständigen Datenbasis ausgegangen wird, ist zusätzlich die Erkennung unbekannter mikromagnetischer Signaturen aufgrund von in der Trainingsdatenbank nicht berücksichtigten Materialzuständen erforderlich. Diese unbekannt

Zustände werden anschließend referenziert und zur Aktualisierung des Klassifizierungsmodells verwendet.

Das 3MA-X8-System wurde dabei mit folgender Parametrierung betrieben:

- Magnetisierungsamplitude  $A_{\text{mag}} = 6 \text{ V}$
- Magnetisierungsfrequenz  $f_{\text{mag}} = 125 \text{ Hz}$
- Überlagerungspermeabilitätsamplitude  $A_{\text{ecip}} = 3 \text{ V}$
- Überlagerungspermeabilitätsfrequenz  $f_{\text{ecip}} = 3125 \text{ Hz}$

## 8.3 Hardspotdetektion

### 8.3.1 Eingangsmerkmalsraum

In Abbildung 56 sind die für diese Aufgabenstellung verfügbaren 21 Merkmale in Form eines Flächenbildes dargestellt. Neben den drei künstlich eingebrachten Hardspots sind weitere signifikante Einflüsse in den Merkmalen überlagert abgebildet. Beispielsweise bilden sich die Randeffekte in einigen Merkmalen sogar deutlicher ab, als die Hardspots selbst.

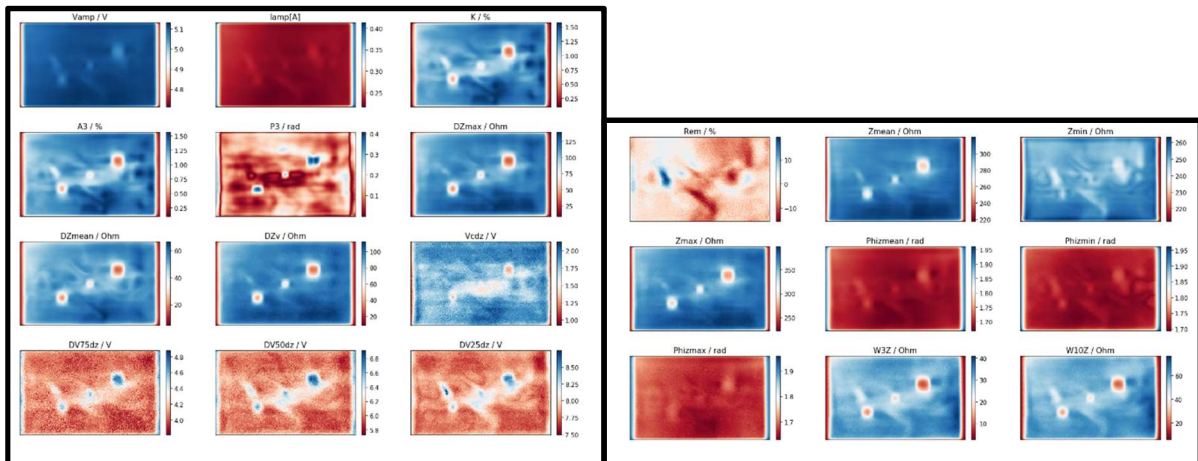


Abbildung 56: Flächenscan (500 mm x 300 mm, x-/y-Schrittweite 2 mm) und Darstellung der 21 3MA-X8-Merkmale eines Grobblechsegmentes mit drei künstlich eingebrachten Hardspots

### 8.3.2 Datenaufnahme und Datenbasis, Merkmalsvorverarbeitung, Modellbildung, Modellvalidierung

Die kundenseitige Vorgabe ist, dass von den drei künstlich eingebrachten Hardspots in Abbildung 12 rechts (schwarz) der mittlere Hardspot als Trainingsdatenbasis für den Zustand „Hart“ und maximal 15 % des Basismaterials (grau) als Trainingsdaten für den Zustand „Weich“ verwendet werden. Um die gesamte Variation des Basismaterials zu erfassen, werden insgesamt ca. 10 % der verfügbaren Daten randomisiert als Trainingsdaten verwendet. Die Validierung erfolgt zum einen an den nicht zum Training verwendeten Daten dieses Grobblechsegmentes. Zum anderen dienen auch die Messungen an einer „Zwillingsprobe“ (ein weiteres Grobblechsegment aus dem gleichen Basismaterial mit ebenfalls drei künstlich eingebrachten Hardspots) zur Validierung des Modells. Das Ziel ist dabei ein Modell, mit dem es möglich ist, Hardspots zuverlässig zu detektieren und dem Modell unbekannte Materialzustände als „Unbekannt“ zu identifizieren.

Hierfür wird der verfügbare Merkmalsraum unter Einsatz der LDA auf eine kanonische Variable reduziert, über die Mahalanobis-Distanz wird die Klassenzugehörigkeit bestimmt. Auf eine polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums wird aufgrund der ohnehin schon dünnen Datenbasis und der damit verbundenen Gefahr der Überanpassung (Overfitting) verzichtet. Zusätzlich wird ein Suchintervall festgelegt, um Projektionen der LDA außerhalb des Suchradius als unbekannte Zustände zu klassifizieren. Dies ist insbesondere deshalb wichtig, weil der Nächste-Nachbar-Klassifikator auch Messwerte klassifiziert, die sich weit außerhalb der Cluster der einzelnen Klassen befinden und dabei davon auszugehen ist, dass es sich um eine unplausible Messung als Folge unbekannter Primärmerkmalsausprägungen handelt. Ist beispielsweise die magnetische Signatur der Hardspots unbekannt, können dadurch Hardspots unbekannter magnetischer Signatur entdeckt und anschließend im System nachreferenziert werden [14]. Abbildung 57 zeigt oben links das Histogramm für die kanonische Variable der Trainings- (schwarze Linie) und Testdaten (graue Balken) aus dem zum Training verwendeten Grobblechsegment. Rechts wurde zum Validieren die kanonische Variable der Zwillingsprobe in einem Histogramm dargestellt. Als Suchintervall hat sich empirisch der halbe Abstand zwischen den beiden Klassen bzw. der beiden Maxima im Histogramm als geeignet gezeigt. Aufgrund der ohnehin schon geringen Datenbasis und der Tatsache, dass das Verhältnis von „Weich“- und „Hart“-Zuständen sehr unbalanciert ist, gilt der mit diesem Vorgehen empirisch ermittelte Suchradius als grober Richtwert.



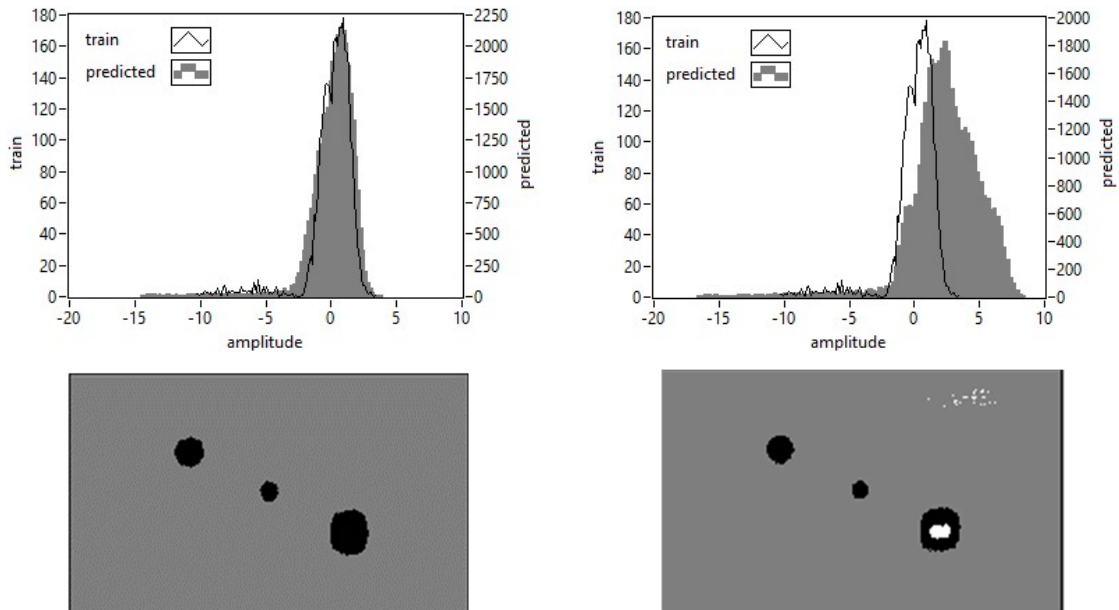


Abbildung 57: Histogramme (oben) für Trainings- und Testdaten des zum Trainieren (links) und Validieren (rechts) verwendeten Grobblechsegments sowie das entsprechende Klassifikationsergebnis der LDA (unten)

Abbildung 57 zeigt unten das Klassifizierungsergebnis für die Daten in den darüber liegenden Histogrammen (links das zum Training verwendete Grobblechsegment, rechts die Zwillingsprobe). Der Materialzustand „Weich“ ist in grau dargestellt, die Hardspots sind schwarz eingefärbt und unbekannte Zustände werden weiß markiert. Die Trainingsdaten stammen aus der Messung oben links. In dem zum Trainieren verwendeten Grobblechsegment werden alle drei Hardspots erkannt. Ähnlich verhält es sich mit der Zwillingsprobe, auch dort werden alle drei Hardspots erkannt, im nicht aufgehärteten, so genannten Basismaterial und in den Hardspots selbst gibt es jedoch vereinzelt weiße Bereiche, die vom Modell als „Unbekannt“ klassifiziert werden. Die unbekannt Materialzustände können in der Folge nun im Hinblick auf den Härtezustand referenziert und zur Aktualisierung des Modells verwendet werden.

#### 8.4 Vergleich zum bisherigen Stand der Technik

Der bisher eingesetzte Klassifikator wurde in der Vergangenheit mit Blick auf die Herausforderungen im Stahlwerk entwickelt. Wie bisher, muss auch dieser Klassifikator Hardspots detektieren und unbekannte Merkmalsausprägungen als Folge von Variationen im magnetischen Kreis erfassen können. Der Hardspot-Klassifikator bestimmt die mehrdimensionale euklidische Distanz auf Basis des 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalraums.

#### 8.4.1 Bisher eingesetzter Hardspot-Klassifikator

Der aktuelle Messwert wird vom Hardspot-Klassifikator einer Klasse zugeordnet, wenn mindestens 80 % der  $k$  Nachbarn dieser Klasse zugeordnet werden. Der Wert von  $k$  variiert empirisch je nach Anwendung zwischen 5 und 20. Werden weniger als 80 % von  $k$  einer Klasse zugeordnet, so wird der Bediener des Prüfsystems informiert und zu einer mobilen Härteprüfung zur Plausibilisierung des Klassifizierungsergebnisses aufgefordert. Die Klasse „Unbekannt“ wird detektiert, wenn der aktuelle Messwert außerhalb der bekannten Merkmalsausprägungen liegt. Zu diesem Zweck wird ein Suchradius um den aktuellen Messwert definiert, um zu prüfen, ob ausreichend Datenpunkte in der Nähe des aktuellen Messwertes vorhanden sind. Sind nicht ausreichend viele Datenpunkte vorhanden, kann der Bediener des Prüfsystems die Trainingsdatenbank durch Referenzierung des Härtezustands erweitern, womit in der Folge weitere Ausprägungen dieser Zustandsvariation vom System bewertet werden können. Der Suchradius sollte in etwa dem Streuradius der OK bzw. NOK Zustände entsprechen. Ist der Suchradius kleiner, steigt die Wahrscheinlichkeit, dass bereits bekannte Zustände als „Unbekannt“ klassifiziert werden. Ist der Suchradius größer, steigt die Wahrscheinlichkeit, dass unbekannte Zustände einer bekannten Klasse zugeordnet werden. Es existieren also insgesamt drei Klassen, „Hart“ und „Weich“ und eine dritte Klasse „Unbekannt“.

Im Gegensatz zum Vorgehen in Kapitel 6 und Kapitel 7 wird jedoch nur ein Teil des 21-dimensionalen Merkmalsraums verwendet. Grund hierfür ist, dass die Berechnung einer 21-dimensionalen Distanz sehr rechenintensiv ist und ab einer gewissen Anzahl von Merkmalen und Einträgen in der Trainingsdatenbank dazu führt, dass die Messdaten nicht mehr in Echtzeit aufgenommen und ausgewertet werden können. Die Merkmalsauswahl ist im Prinzip beliebig, in den bisherigen Umsetzungen dieses Systems haben sich die vier Merkmale  $D_{Zmax}$ ,  $D_{Zmean}$ ,  $D_{Zr}$  und  $V_{cdz}$  im Einsatz als Initialmerkmale etabliert.

Durch Vorgabe einer anwendungsspezifischen quantitativen Schwelle (z.B. 250 HV10) erfolgt die Klassifizierung des Materialzustandes (OK = Härtewert im spezifizierten Bereich / NOK = Härtewert über dem spezifizierten Bereich / ERROR = Materialzustand unbekannt) für den Benutzer in Form einer kundenseitig spezifizierten, dreifarbigen Ampel. Zunächst wird das achtkanalige Sensorarray mit Hilfe des Prüfwagens auf mehreren Stellen des Grobblechs mit einem Härtewert unterhalb des spezifizierten Bereichs positioniert und als „OK“ trainiert. Optional kann das Prüfsystem auf mehreren Stellen mit einem Härtewert oberhalb des spezifizierten Bereichs positioniert werden und dieser Zustand als „NOK“ in die Datenbank

trainiert werden. Wird der Prüfwagen nach dem Trainieren der Datenbank über das Blech bewegt, wird die aktuell gemessene Position des Grobblechs in Echtzeit bewertet.

Abbildung 58 zeigt links die aktuellen Messwerte aller acht Sensoren (exemplarisch für die beiden Merkmale  $D_{Zmax}$ ,  $D_{Zmean}$ , in der Praxis kommen noch die Merkmale  $D_{Zr}$  und  $V_{cdz}$  zur Auswertung hinzu) mit dem entsprechenden Suchradius für die acht Kanäle des Prüfwagens in blau und die beim Training aufgenommenen Daten für das weiche Basismaterial in grün sowie für die eintrainierten Hardspots in rot. Da sich die Messwerte aller acht Sensoren im grünen Cluster befinden (links), erhält der Bediener die Rückmeldung „OK“ (Mitte), und das Flächenbild zeigt ausschließlich weich klassifiziertes Grundmaterial in grün (rechts).

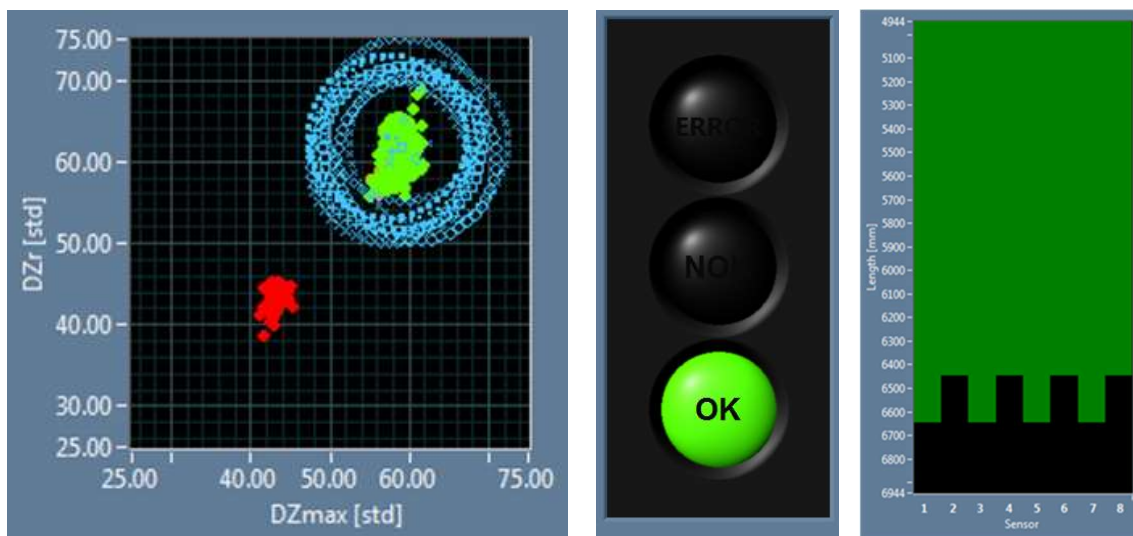


Abbildung 58: Multivariate Bewertung (links Grundmaterial in grün, Hardspot in rot), Ergebnisdarstellung an einem Grobblechsegment ohne Hardspot (Mitte und rechts) aufgenommen mit dem achtkanaligen 3MA-X8-Prüfwagen

Abbildung 59 zeigt den (aufgrund eines Hardspots) im roten Cluster lokalisierten Messwert von Sensor 2 (links). Der Bediener wird über den Hardspot mit der Meldung „NOK“ informiert (Mitte), und im Flächenbild wird die von Sensor 2 gemessene Inhomogenität in orange dargestellt (rechts).

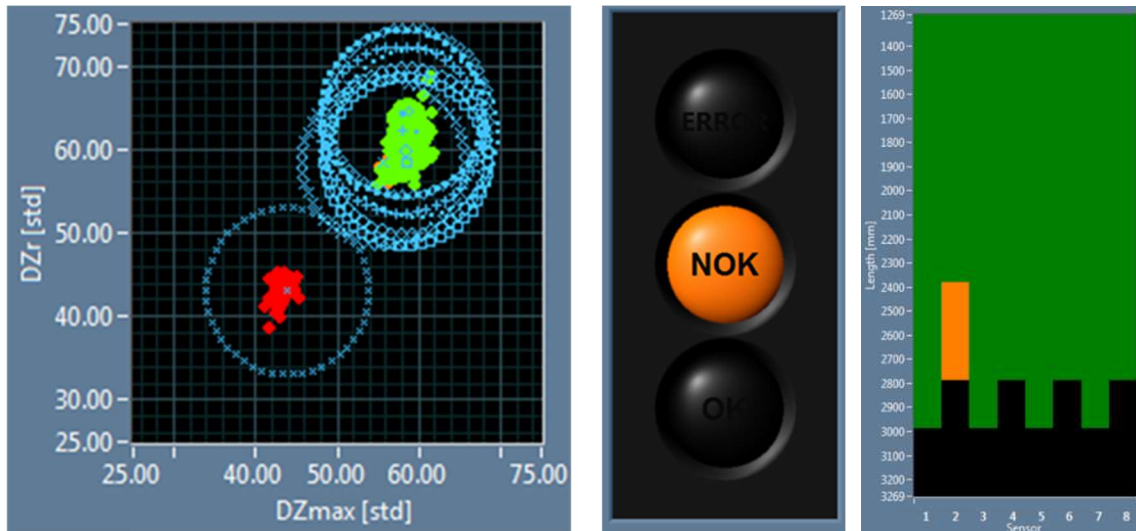


Abbildung 59: Multivariate Bewertung (links), Ergebnisdarstellung an einem Grobblechsegment mit einem der Trainingsdatenbank „bekannten“ Hardspot (Mitte und rechts)

Abbildung 60 zeigt, dass der Messwert von Sensor 2 über das rote Cluster gewandert ist, in unmittelbarer Umgebung (definiert durch den Suchradius) befinden sich keine Daten aus der Trainingsdatenbank (links). Zwar ist der Messwert näher am roten, als am grünen Cluster, dies muss jedoch aufgrund der beschriebenen Mehrdeutigkeiten nicht zwangsläufig bedeuten, dass der Messwert auch dieser Klasse entspricht. Der Bediener wird mit der Meldung „Error“ informiert, dass die Merkmalsausprägung des Messwertes von Sensor 2 einen der Trainingsdatenbank unbekannten Zustand angenommen hat (Mitte). Im Flächenbild wird die von Sensor 2 gemessene Inhomogenität in rot dargestellt (rechts).

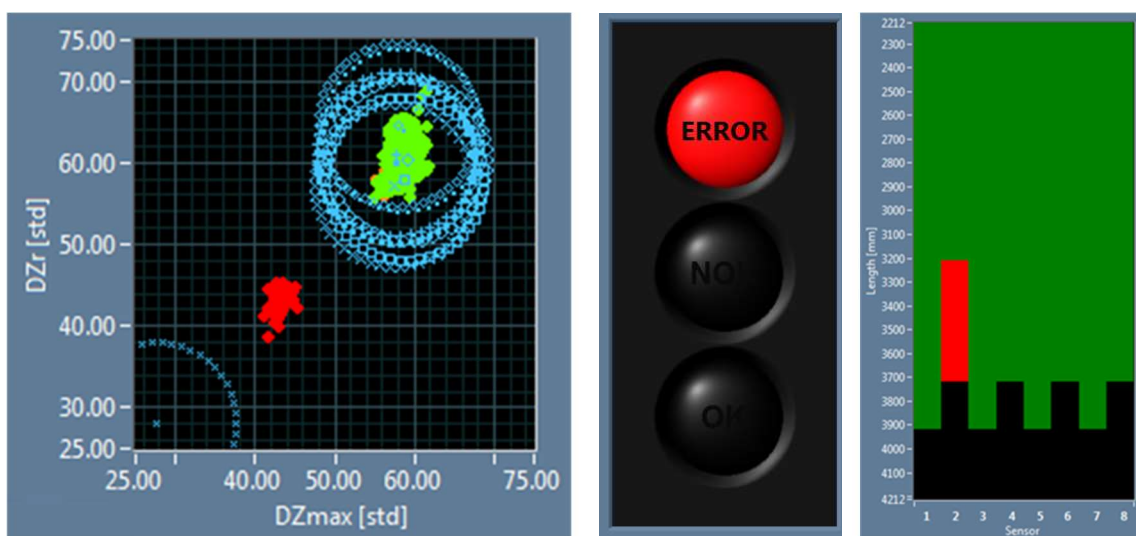


Abbildung 60: Multivariate Bewertung (links), Ergebnisdarstellung an einem Grobblechsegment mit einem der Trainingsdatenbank „unbekanntem“ Merkmalsraumausprägung (Mitte und rechts)

In Abbildung 61 wurde der unbekannte Zustand mit Hilfe einer mobilen Härteprüfung als Hardspot referenziert, der eine signifikant höhere Härte aufwies als die in der Trainingsdatenbank enthaltenen Hardspots. Die Aktualisierung der Trainingsdatenbank führt dazu, dass dieser Hardspot im weiteren Verlauf als „NOK“ klassifiziert wird.

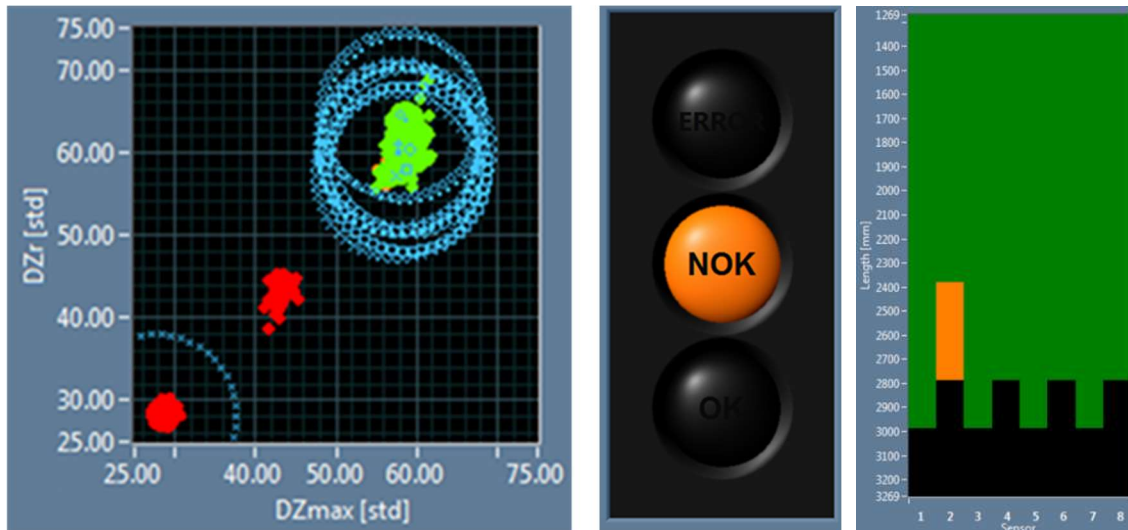


Abbildung 61: Multivariate Bewertung (links), Ergebnisdarstellung an einem Grobblechsegment mit einem der Trainingsdatenbank nachtrainierten Hardspot (Mitte und rechts)

Dieses Vorgehen erlaubt sowohl die Erkennung lokaler Härteinhomogenitäten als auch die flexible Erweiterung der Trainingsdatenbank, so dass es nicht erforderlich ist, die Vielzahl an möglichen Zustandsvariationen des gesamten Zustandsraums im Vorfeld einzustellen, zu messen und zu referenzieren [14].

#### 8.4.2 Einfluss der Trainingsdatenbasis

Die Klassifikation auf der in Abschnitt 8.3 gezeigten Datenbasis ist in Abbildung 62 sowohl für die Trainingsplatte mit Hardspots (links) als auch für die Zwillingprobe (rechts) dargestellt. Durch die mit eintrainierten Randbereiche und die dadurch entstandenen Mehrdeutigkeiten in den Merkmalsausprägungen ist keine zuverlässige Klassifikation der Hardspots möglich.

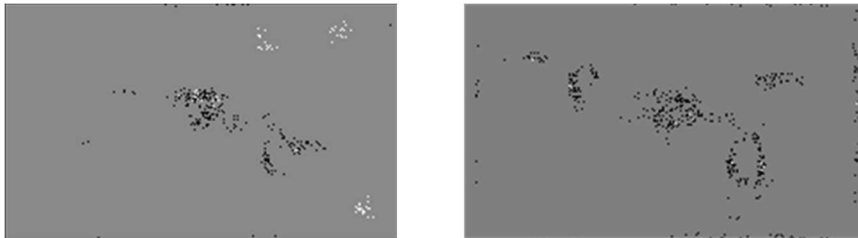


Abbildung 62: Hardspot-Klassifikation auf Basis der bisher verwendeten vier Merkmale  $D_{Zmax}$ ,  $D_{Zmean}$ ,  $D_{Zr}$  und  $V_{c_{dz}}$  und des bisher eingesetzten Hardspot-Klassifikators mit eintrainiertem Randbereich

Werden die Randbereiche aus der Trainingsdatenbasis entfernt, zeigt sich in Abbildung 63, dass die Klassifikation der Hardspots brauchbare Ergebnisse liefert. Neben den Randbereichen, die nun als „Unbekannt“ bzw. „Hart“ klassifiziert werden, werden Teile der größeren Hardspots als „Unbekannt“ klassifiziert.



Abbildung 63: Hardspot-Klassifikation auf Basis der bisher verwendeten vier Merkmale  $D_{Zmax}$ ,  $D_{Zmean}$ ,  $D_{Zr}$  und  $V_{c_{dz}}$  und des bisher eingesetzten Hardspot-Klassifikators ohne eintrainierten Randbereich

Da die Randbereiche bisher nicht von Interesse waren, wurde diese Einschränkung kundenseitig toleriert.

### 8.4.3 Sandgestrahlte Grobbleche

Die Hardspotdetektion muss auch vor dem Hintergrund variierender Prozesse im Stahlwerk zuverlässig funktionieren. Ein Beispiel hierfür ist Behandlung der Oberflächen der Grobbleche. Die bisherigen Untersuchungen wurden an polierten Grobblechsegmenten durchgeführt, einige Kunden verwenden Druckstrahlen mit festem Strahlmittel (umgangssprachlich Sandstrahlen) zur Entfernung der Zunderhaut.

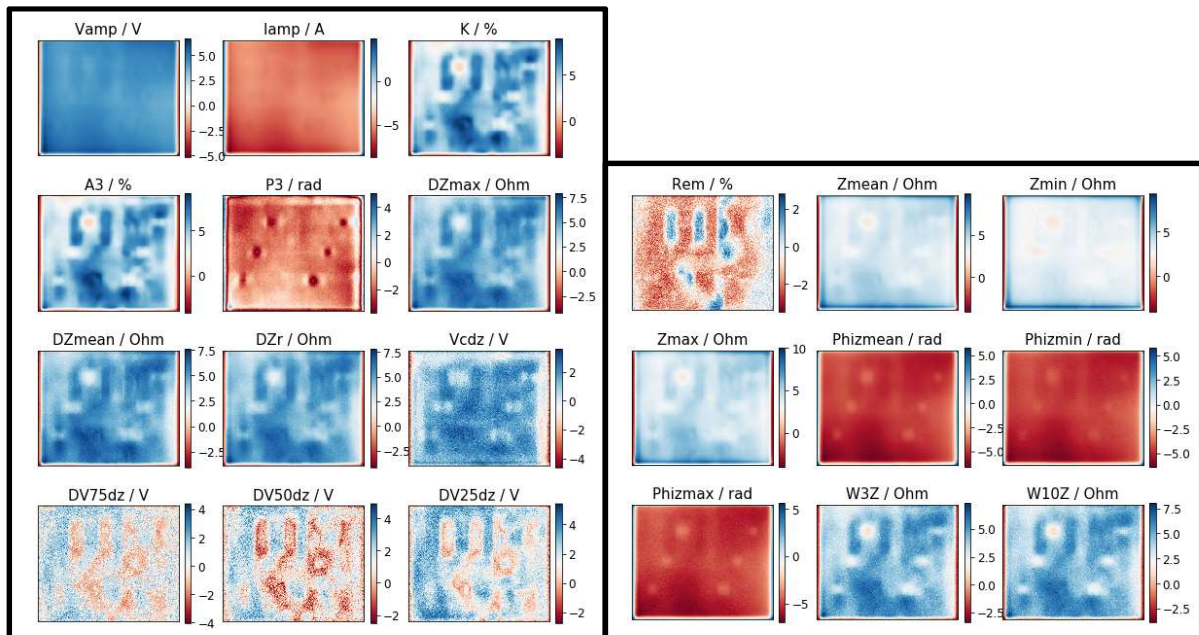


Abbildung 64: Grobblechsegment mit sechs induktiv eingebrachten Hardspots und anschließender Entfernung des Zunders durch Sandstrahlen der Oberfläche (21-dimensionaler 3MA-X8-Merkmalraum als Flächenbild)

Das in Abbildung 64 vermessene Grobblechsegment weist insgesamt sechs künstlich eingebrachte Hardspots auf, das Grobblechsegment in Abbildung 65 insgesamt acht. Im Gegensatz zu dem Experiment aus 8.2 und der Datenbasis aus 8.3 handelt es sich dabei um zwei Grobblechsegmente, bei denen der Zunder durch Sandstrahlen der Oberfläche statt durch Polieren entfernt wurde. Dieser Wechsel der Oberflächenbehandlung bringt hohe oberflächennahe Druckspannungen in das Grobblechsegment ein [73]. Da das magnetische Verhalten ferromagnetischer Werkstoffe auch vom Spannungszustand abhängt, bilden sich diese überlagerten Druckspannungen auch in den 3MA-X8-Merkmalen aus.

Die Hardspots in Abbildung 65 und Abbildung 64 sind in den einzelnen Merkmalen durch die überlagerten Druckspannungen deutlich schlechter zu erkennen als im direkten Vergleich mit den polierten Oberflächen in Abbildung 56. Die kundenseitige Vorgabe ist, dass eines der Bleche zum Trainieren und das andere zum Validieren verwendet wird. Einer der künstlich

eingebrauchten Hardspots dient als Trainingsdatenbasis für den Zustand „Hart“ und maximal 15 % des Basismaterials soll als Trainingsdatenbasis für den Zustand „Weich“ verwendet werden. Das Vorgehen für Training und Validierung ist analog zu Abschnitt 8.2. Um die gesamte Variation des Basismaterials zu erfassen, werden auch hier 10 % der verfügbaren Daten randomisiert als Trainingsdaten verwendet.

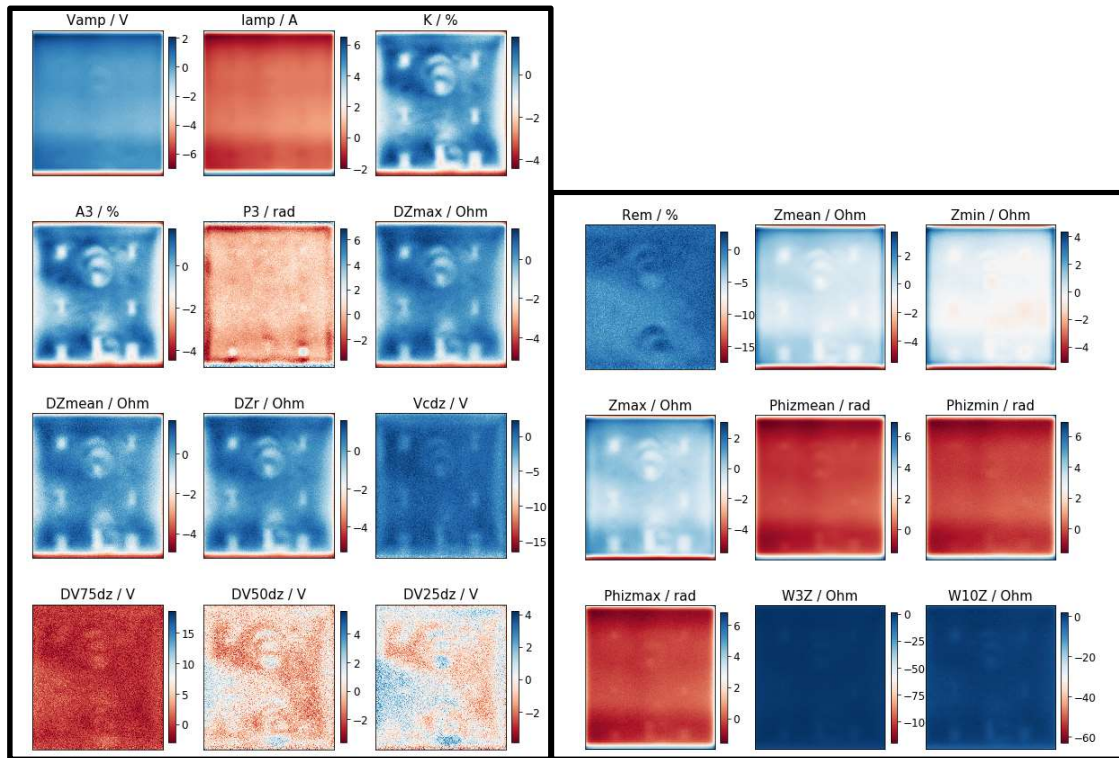


Abbildung 65: Grobblechsegment mit acht induktiv eingebrachten Hardspots und anschließender Entfernung des Zunders durch Sandstrahlen der Oberfläche

Das Ziel ist auch hier ein Modell, das die Hardspots zuverlässig detektiert und dem Modell unbekannte Materialzustände als „Unbekannt“ identifiziert.

Abbildung 66 zeigt oben links das Klassifikationsergebnis für das zum Trainieren verwendete Grobblechsegment aus Abbildung 64 und oben rechts das entsprechende Histogramm für die Trainings- und Validierdaten dieses Grobblechsegments. Unten wurde das Klassifikationsmodell an dem Grobblechsegment aus Abbildung 65 validiert. Rechts sind erneut die entsprechenden Histogramme für die Trainings- und Validierdaten abgebildet. In Abbildung 67 wurde die Trainings- und Validierbleche vertauscht.



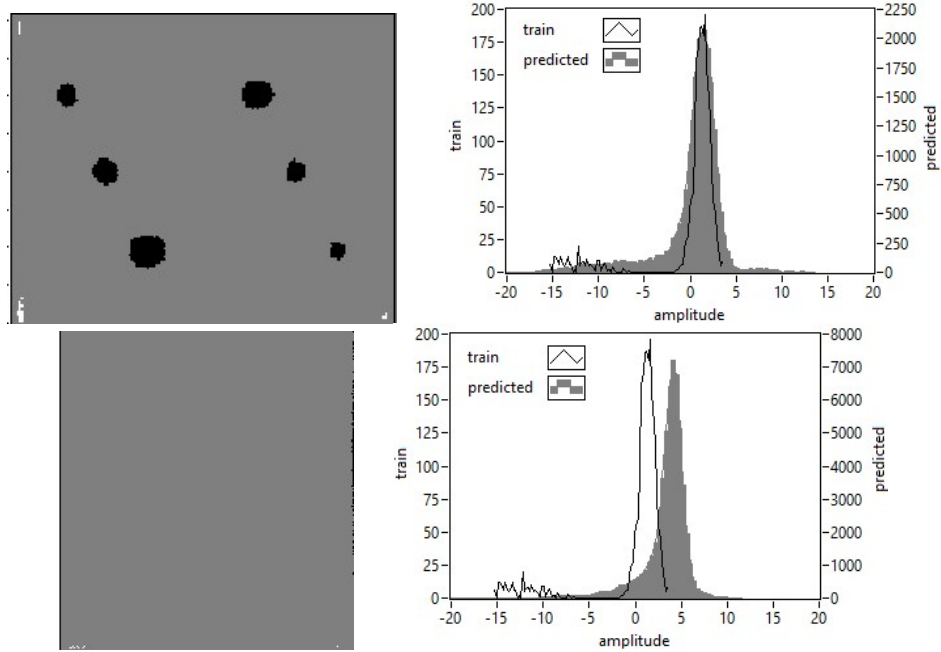


Abbildung 66: Klassifikationsergebnis für das zum Trainieren verwendete Grobblechsegment (oben links) und Histogramm (oben rechts) und dem zum Validieren verwendeten Grobblechsegment (unten links) und Histogramm (unten rechts)

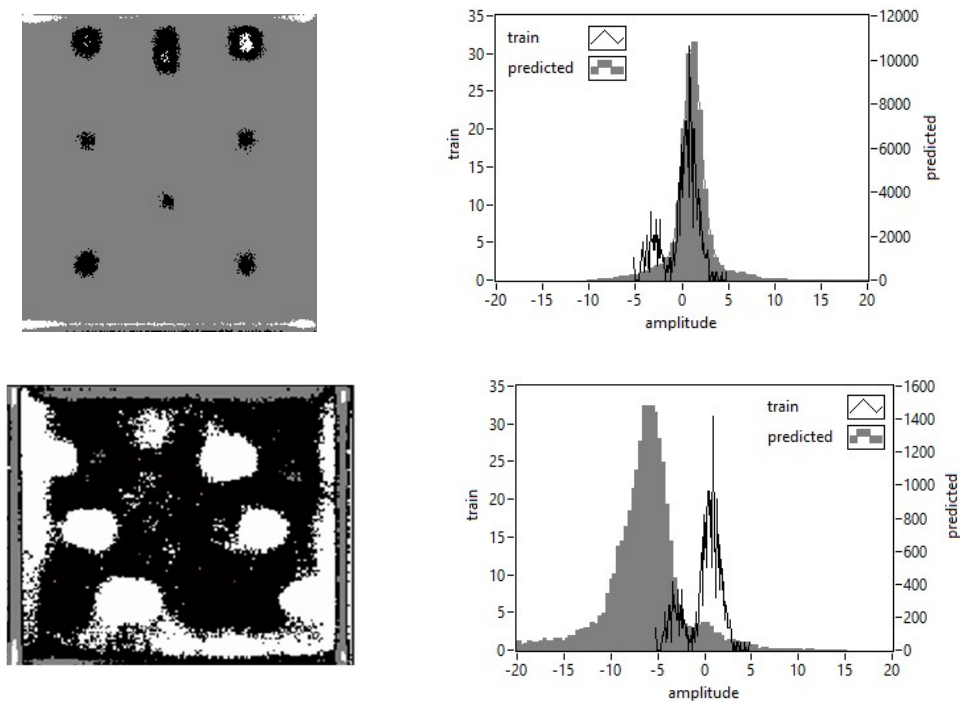


Abbildung 67: Klassifikationsergebnis und Histogramm nach Tausch des zum Trainieren (oben) und Validieren (unten) verwendeten Grobblechsegments

Während keiner der Hardspots bei der Validierung in Abbildung 66 erkannt wurde, bildet das Modell in Abbildung 67 zwar die Hardspots ab, die Anzahl an „Unbekannt“-Zuständen und auch Fehlklassifizierungen des Basismaterials (ein Großteil des Basismaterials wird als „Hart“ klassifiziert) ist jedoch im Vergleich mit der Datenbasis aus 8.3 sehr hoch.

Der Vergleich von Abbildung 66 und Abbildung 67 zeigt, wie elementar wichtig eine für die Problemstellung ausreichend repräsentative Datenbasis sowie die Verteilung der Daten ist. In beiden Abbildungen gibt es eine Verschiebung der Daten im Histogramm. Im einen Fall (Abbildung 66) kommt es dazu, dass Einträge im Histogramm nach rechts in Richtung des Basismaterials verschoben sind und dadurch die Hardspots als Basismaterial erkannt werden. Im anderen Fall (Abbildung 67) kommt es zu einer Verschiebung der Einträge im Histogramm nach links in Richtung der Hardspots, was dazu führt, dass das Basismaterial überwiegend als Hardspot und die Hardspots als unbekannte Einträge klassifiziert werden.

## 8.5 Einsatz unüberwachter maschineller Lernalgorithmen zur Hardspotdetektion

Die Adaption der Methodik zur Hardspotdetektion eignet sich zwar zur Bewertung polierter Oberflächen, die kundenseitigen Anforderungen im Hinblick an die Trainings- und Validierdaten konnten jedoch für sandgestrahlte Grobbleche nicht erfüllt werden. Zwar konnten die Hardspots in den zum Training verwendeten Grobblechsegmenten nachgewiesen werden, eine Übertragung auf das jeweils nicht zum Training verwendete Grobblechsegment ist jedoch aufgrund der hohen Anzahl an Fehlklassifizierungen nicht zu empfehlen. Ein Schwachpunkt in dem Vorgehen ist die unter Umständen zu geringe und nicht ausreichende Datenbasis aufgrund der Notwendigkeit referenzierter Daten. Anzustreben wäre also ein Vorgehen ohne bzw. mit möglichst wenigen und trotzdem ausreichend referenzierten Daten.

Im Gegensatz zu den bisher eingesetzten überwachten Lernalgorithmen, deren Hauptaufgabe es ist, ein an die vorhandenen Referenzen der Trainingsdatenbasis optimiertes Modell zu ermitteln, extrahieren und visualisieren unüberwachte maschinelle Lernalgorithmen Zusammenhänge in der unreferenzierten Datenbasis, die in den Eingangsmerkmalen nicht zu erkennen sind. Im Wesentlichen geht es dabei um die Behandlung von Redundanzen und Mehrdeutigkeiten im Merkmalsraum.

Um dennoch eine zuverlässige Detektion von Aufhärtungen an sandgestrahlten Grobblechen zu erhalten, wird der segmentierende Charakter der in Abschnitt 4.2.2.4 vorgestellten Unabhängigkeitsanalyse ausgenutzt. In diesem Beispiel soll der magnetische Fingerabdruck der Hardspots an dem zum Trainieren verwendeten Grobblechsegment ermittelt und auf die Validierplatte appliziert werden. Wie bereits beschrieben, wird dabei die Anzahl der zu extrahierenden Unabhängigkeitskomponenten, ausgehend von eins, so lange erhöht, bis sich die lokalen Aufhärtungen möglichst univariat in einem Merkmal abbilden. Das weitere Vorgehen entspricht nun exakt der in 8.3.2 beschriebenen Vorgehensweise auf der Trainingsdatenbasis aus 8.4.3 (Abbildung 67 unten).

Abbildung 68 zeigt links das Ergebnis für das zum Trainieren verwendete Grobblechsegment, rechts das Grobblechsegment, dass zum Validieren verwendet wurde. Im Vergleich zum Vorgehen in Abbildung 67 zeigt sich, dass die vorgeschaltete ICA einen 16-dimensionalen Sekundärmerkmalsraum erzeugt, in dem es durch den Einsatz der LDA und den verfügbaren Trainingsdaten gelingt, die Hardspots für beide Grobblechsegmente zuverlässig vorherzusagen. Neben als „Unbekannt“ klassifizierten Zuständen gibt es vereinzelt auch fehlerhafte

Hardspotanzeigen, die sich jedoch unterhalb der geforderten Auflösungsgrenze von 10 mm befinden. Das zum Validieren verwendete Grobblechsegment zeigt zudem einige Fehlklassifizierungen im Randbereich an.

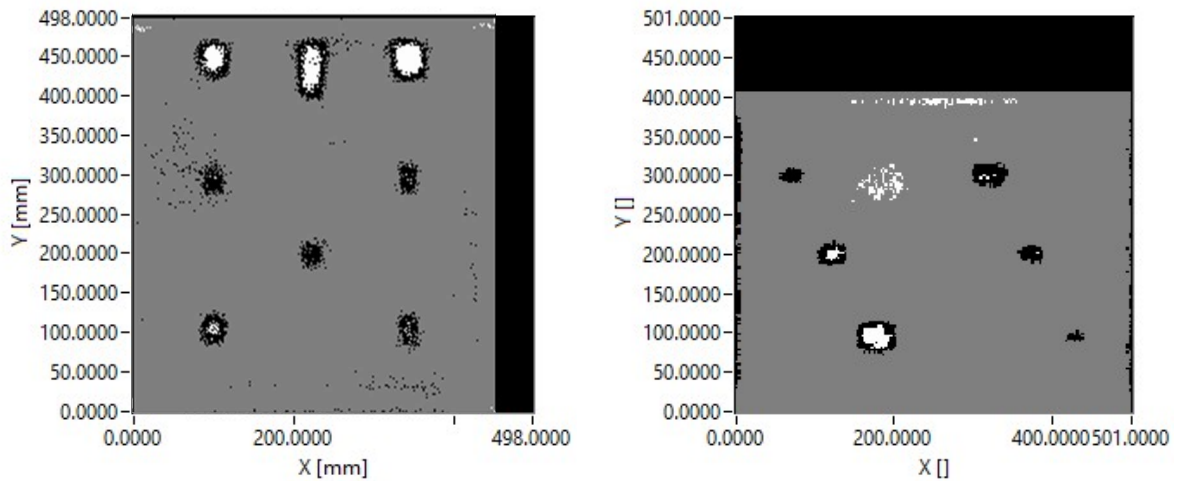


Abbildung 68: Klassifikationsergebnis durch vorgeschaltete ICA anstelle des 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalraums (links Grobblechsegment zum Trainieren, rechts Grobblechsegment zum Validieren)

Dieses Vorgehen zeigt erneut auf, wie wichtig der Informationsgehalt und seine Repräsentation im Merkmalsraum ist. In beiden Fällen, sowohl in Abbildung 67 als auch in Abbildung 68, liegt die gleiche Datenbasis zugrunde, durch die ICA wurde lediglich eine andere Art der Darstellung der Information gefunden. Dadurch ist es möglich, die Vorhersagequalität, verglichen mit dem Ergebnis in Abbildung 67, insbesondere für die Abbildung der Testdaten, signifikant zu verbessern.

## 8.6 Datensynthese

Die Herausforderung bei der Detektion von Hardspots in Grobblechen liegt nicht darin, diese Aufhärtungen an einzelnen Blechsegmenten zu detektieren. Das Problem ist vielmehr, dass die Trainingsdatenbasis zur Lösung dieses Zwei-Klassen-Problems sehr unbalanciert ist, da zwar eine enorm große Datenbasis für den „Weich“-Zustand existiert (die auch referenziert werden muss), aber nur eine sehr geringe und statistisch nicht repräsentative Menge an „Hart“-Zuständen vorhanden ist. Die Problematik geht noch deutlich weiter: In der Praxis haben sich aus Sicht der Stahlhersteller aufwendige Techniken wie Laser- oder Induktionshärten zur Erstellung von Testfehlern etabliert, die zwar zu Hardspots mit dem geforderten mechanischen Härteunterschied führen. Die mechanische Härte ist jedoch im Hinblick auf die Mikrostruktur und somit dem magnetischen Verhalten nicht eindeutig, vereinfacht ausgedrückt, verschiedene Werkstoffe mit unterschiedlicher magnetischer Signatur können die gleiche Härte aufweisen. Der Grund für diesen Umstand liegt nach eigener Erfahrung vermutlich darin, dass die Mechanismen der Hardspotbildung nicht ausreichend verstanden sind, um die lokalen Aufhärtungen in der erforderlichen Größe reproduzierbar bereitzustellen. Dies führt zur nächsten Problematik, nämlich dass die Hardspots lediglich in Form, Fläche und der zulässigen Härtedifferenz definiert sind [71]. Über die Tiefe der Aufhärtung wird keine Aussage getroffen, was jedoch im Hinblick auf die Parametrierung und der damit verbundenen Messempfindlichkeit des 3MA-X8-Systems relevant ist. Verdeutlicht werden soll das an dem Umstand, dass die elektromagnetischen Verfahren eine frequenzabhängige Wechselwirkungstiefe als Folge des Skineffekts aufweisen und beim Einsatz des 3MA-X8-Verfahrens die Eindringtiefe je nach Magnetisierungsfrequenz und Material auf ca. 0,5 mm – 2 mm geschätzt wird. Diese unvollständige Spezifikation der Hardspots führt auch dazu, dass speziell sehr oberflächennahe Fehler unterhalb der Eindringtiefe durch den integralen Charakter im Betrieb „übersehen“ werden.

Sollte ein „echter“ Hardspot im Prozess entdeckt werden, kann zwar der magnetische Fingerabdruck des Hardspots ermittelt werden, eine statistisch repräsentative Datenmenge „dieses“ Hardspots existiert aber noch nicht.

Im Folgenden soll eine Möglichkeit zur Datensynthese vorgestellt werden, mit der es möglich ist, dem 3MA-X8-System künstliche Hardspots „vorzutäuschen“, und zwar rein datenseitig und nicht als physischer Hardspot im Grobblech. Das Vorgehen soll an den verfügbaren laserinduzierten Hardspots demonstriert werden, es ist jedoch davon auszugehen, dass sich das Prinzip auf jeden beliebigen Hardspot bzw. weiter gedacht, auf jeden magnetischen Einfluss

mit bekanntem magnetischen Fingerabdruck anwenden lässt. Die Grundidee hinter dem Vorgehen ist, dass durch den magnetischen Fingerabdruck ein univariates Sekundärmerkmal existiert, das die Hardspots abbildet (vgl. Abbildung 17) und diese sich durch Manipulation dieses Sekundärmerkmals mit anschließender Rücktransformation im Eingangsmerkmalsraum abbilden.

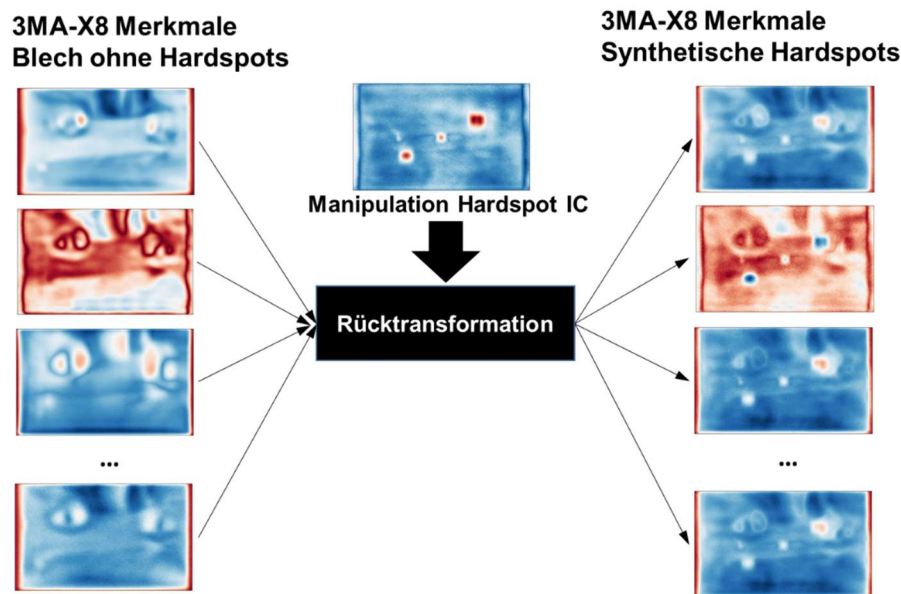


Abbildung 69: Vorgehen bei der Datensynthese von Hardspots an einem Grobblechsegment ohne echten Hardspot

Abbildung 69 zeigt das schematische Vorgehen bei der Datensynthese. An einem Grobblechsegment mit Hardspot wird die entsprechende ICA-Komponente ermittelt. Durch Applizierung der Transformationsvorschrift an einem Grobblechsegment ohne Hardspots kann der magnetische Fingerabdruck manipuliert (zur Veranschaulichung der Manipulation wurde das Hardspot-IC einfach ersetzt) und durch Rücktransformation in den Eingangsmerkmalsraum synthetisiert werden.

Wie in 8.5 vorgeschlagen sollte die Anzahl extrahierter ICA-Komponenten so gering wie möglich gehalten werden. Abbildung 70 zeigt die Ermittlung des magnetischen Fingerabdrucks der Hardspots durch den Einsatz der FastICA und der Extraktion von vier Sekundärmerkmalen (oben) sowie der Applizierung der ermittelten Transformationsvorschrift auf die Zwillingprobe (Mitte). Zur Demonstration der Datensynthese wird der Flächenscan des Hardspot-IC der Zwillingprobe horizontal in zwei Teile geteilt, der untere Teil wird durch den oberen Flächenscan ersetzt.

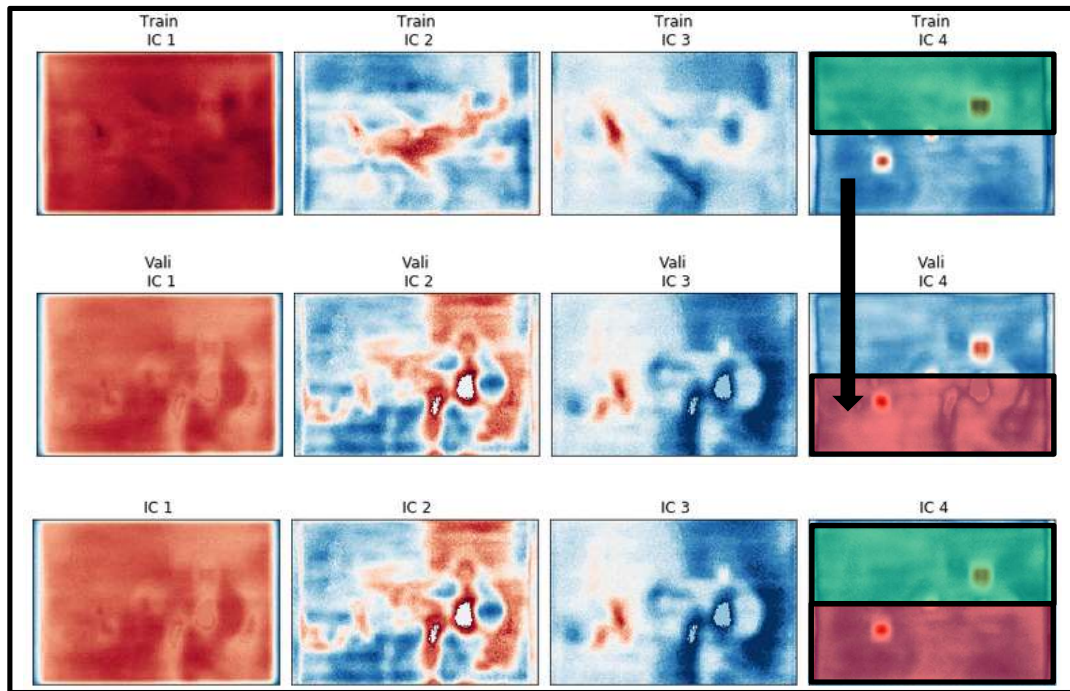


Abbildung 70: Ermittlung des magnetischen Fingerabdrucks (oben) und Applizierung auf Zwillingsprobe (unten)

Mit Ausnahme des scharfen Übergangs, an dem die beiden Flächenscans zusammengeführt wurden, bilden sich die Messwerte in Abbildung 71 qualitativ ähnlich ab, was die prinzipielle Eignung dieser Vorgehensweise zur Datenaugmentierung aufzeigt, die in der Zukunft fundiert untersucht werden muss.

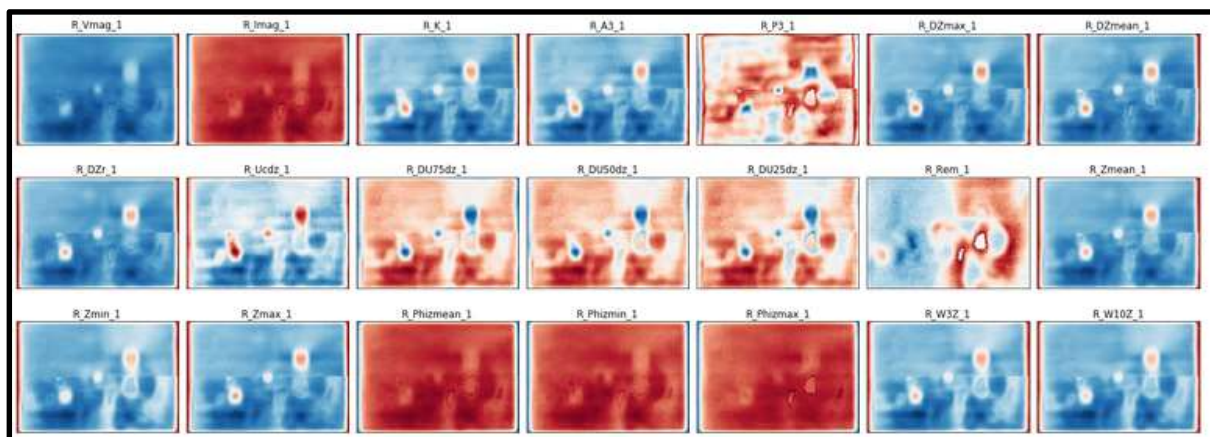


Abbildung 71: Grobblechsegment mit echten und synthetisierten Hardspots

## 8.7 Zusammenfassung und Diskussion

Im Rahmen dieses Kapitels wurde die Aufgabenstellung der Hardspotdetektion an Grobblechen beschrieben. Eine Herausforderung ist dabei die stets geringe referenzierte Datenbasis, was ein Umdenken in der Anwendung der Methodik erfordert. Beispielsweise kann es sein, dass aufgrund der statistisch nicht repräsentativen Datenbasis Materialzustände gemessen werden, die dem Modell unbekannt sind und dabei die Gefahr von Fehlklassifikationen existiert und Hardspots nicht erkannt werden. Aus diesem Grund wird zusätzlich zur Klassifikation des Basismaterials und der Hardspots eine dritte Klasse zur Erkennung unbekannter Materialzustände definiert. Die Grundidee hinter diesem Vorgehen ist, dass es in der Praxis trotz der im Vorfeld nicht verfügbaren repräsentativen Datenbasis möglich ist, unbekannte Zustände zu referenzieren und so mit der Zeit eine möglichst repräsentative und referenzierte Datenbasis zu erhalten. Die Dauer bis zum Erhalt dieser Datenbasis ist unter anderem stark vom Prozess im jeweiligen Stahlwerk und der damit verbundenen Materialvariation im Grobblech abhängig. Zusätzlich wird wegen der geringen Datenbasis und dem „Fluch der Dimensionalität“ auf die polynomielle Erweiterung des Merkmalsraums verzichtet. Es konnte gezeigt werden, dass die Vorhersagequalität der Modelle unter Anwendung der modifizierten Methodik signifikant verbessert wird. Es konnten aber auch Grenzen der Methodik aufgezeigt werden. Während diese an polierten Blechoberflächen zuverlässige Ergebnisse liefert, zeigt sich, dass das trainierte Modell nicht an sandgestrahlten Grobblechsegmenten mit im Hinblick auf den Bearbeitungsprozess gleich behandelten Grobblechsegmenten validiert werden konnte.

Ein vielversprechender Lösungsansatz ist der Einsatz unüberwachter maschineller Lernalgorithmen wie die Unabhängigkeitsanalyse. Diese zeigt beeindruckende Ergebnisse in der Segmentierung magnetischer Einflussfaktoren. Durch die multivariate Vorverarbeitung des Merkmalsraums ist es anschließend möglich, die Hardspots auf Basis der linearen Diskriminanzanalyse zu klassifizieren.

Die Ergebnisse in diesem Kapitel sind so zu bewerten, dass sich das System prinzipiell zur Lösung der Hardspotdetektion eignet. Aufgrund der nicht repräsentativen Datenlage wird es in der Zukunft jedoch essentiell sein, das System in der Praxis fortwährend zu validieren und ggf. zu optimieren. Auch sollte erwähnt werden, dass die bisherigen Untersuchungen ausschließlich an künstlich eingebrachten Hardspots durch Induktiv- oder Laserhärten mit polierter oder sandgestrahlter Oberfläche durchgeführt wurden. Zum einen sind diese Testfehler mikromagnetisch nicht repräsentativ, da sich der „magnetische Fingerabdruck“ des Testfehlers aus der Erfahrung heraus mit Sicherheit von den in der Praxis aufgetretenen Hardspots



unterscheidet (vermutet werden kohlenstoff- oder thermomechanisch-induzierte Hardspots). Zum anderen ist der Aufwand, Oberflächen in der Produktion zu polieren, nicht vertretbar und wird deshalb von den Stahlherstellern abgelehnt. Je nach Prozess im Stahlwerk sind die Grobbleche entweder mit einer Zunderschicht von weniger als 0,5 mm versehen oder die Zunderschicht wird durch Sandstrahlen entfernt. Der Hintergrund der zur Verfügung gestellten polierten Grobbleche ist nicht zweifelsfrei bekannt, die Rückmeldung aus diversen Stahlwerken lässt aber vermuten, dass der Grund in der reproduzierbaren Erstellung von Testfehlern liegt. Da die genauen Mechanismen, die zur kritischen Hardspotbildung führen bisher, laut Aussagen der Stahlhersteller, weitestgehend unbekannt sind, ist, beispielsweise in der DIN 4863, ein Hardspot lediglich in seiner Form, Fläche und der zulässigen Härtedifferenz definiert [71]. In welcher Art dieser Testfehler zu erzeugen ist oder wie tief dieser sein darf, ist nicht festgelegt. Dies ist deshalb relevant, da einerseits die Parametrierung Einfluss auf die Messempfindlichkeit der „echten“ Hardspots haben könnte und andererseits die elektromagnetischen Verfahren eine frequenzabhängige Wechselwirkungstiefe als Folge des Skineffektes aufweisen. Beim Einsatz des 3MA-X8-Verfahrens wird die Eindringtiefe je nach Magnetisierungsfrequenz im Bereich von ca. 0,5 mm – 2 mm geschätzt.

Diskutiert werden derzeit außerdem Möglichkeiten zur aktiven Kompensation von Störgrößen wie beispielsweise der Temperatur oder der Sensorabhebung. Durch Verwendung eines Temperatursensors kann beispielsweise der Temperatureinfluss aus einzelnen Merkmalen kompensiert werden. Um das Prinzip zu verdeutlichen, wurde ein Grobblechsegment mit künstlich eingebrachtem Hardspot in eine Klimakammer gebracht und die Temperatur in der Kammer von  $-20\text{ °C}$  bis  $+80\text{ °C}$  und anschließend von  $+80\text{ °C}$  bis  $-20\text{ °C}$  in Schritten von 20 K mit einer Haltezeit von 2 h variiert und gleichzeitig mit zwei 3MA-X8-Sensoren vermessen. Sensor 1 war auf dem Hardspot und Sensor 2 auf dem weichen Basismaterial positioniert. Abbildung 72 zeigt oben links das Temperaturprofil  $T_{\text{nom}}$  und die aktuell gemessene Temperatur  $T_{\text{act}}$  über der Anzahl der aufgenommenen Messwerte. Der Einfluss der Blechtemperatur lässt sich in drei Gruppen einteilen. Oben rechts ist ein 3MA-X8-Merkmal abgebildet, das keine Temperaturabhängigkeit zeigt. Unten links ist ein 3MA-X8-Merkmal abgebildet, das zwar eine signifikante Temperaturabhängigkeit aufweist, jedoch sind keine Mehrdeutigkeiten bei der Bewertung des Materialzustandes vorhanden. Unten rechts ist ein 3MA-X8-Merkmal abgebildet, das sowohl eine signifikante Temperaturabhängigkeit als auch dadurch hervorgerufene Mehrdeutigkeiten aufweist. Ohne explizite Temperaturinformation ist bei Betrachtung des Merkmals  $Z_{\text{mean}}$  alleine keine eindeutige Klassifizierung des Hardspots möglich. Beispielsweise kann ein Wert von 475 Ohm für das Merkmal  $Z_{\text{mean}}$  entweder das

weiche Basismaterial bei einer Temperatur von ca.  $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$  oder aber einen Hardspot bei ca.  $55\text{ }^{\circ}\text{C}$  abbilden.

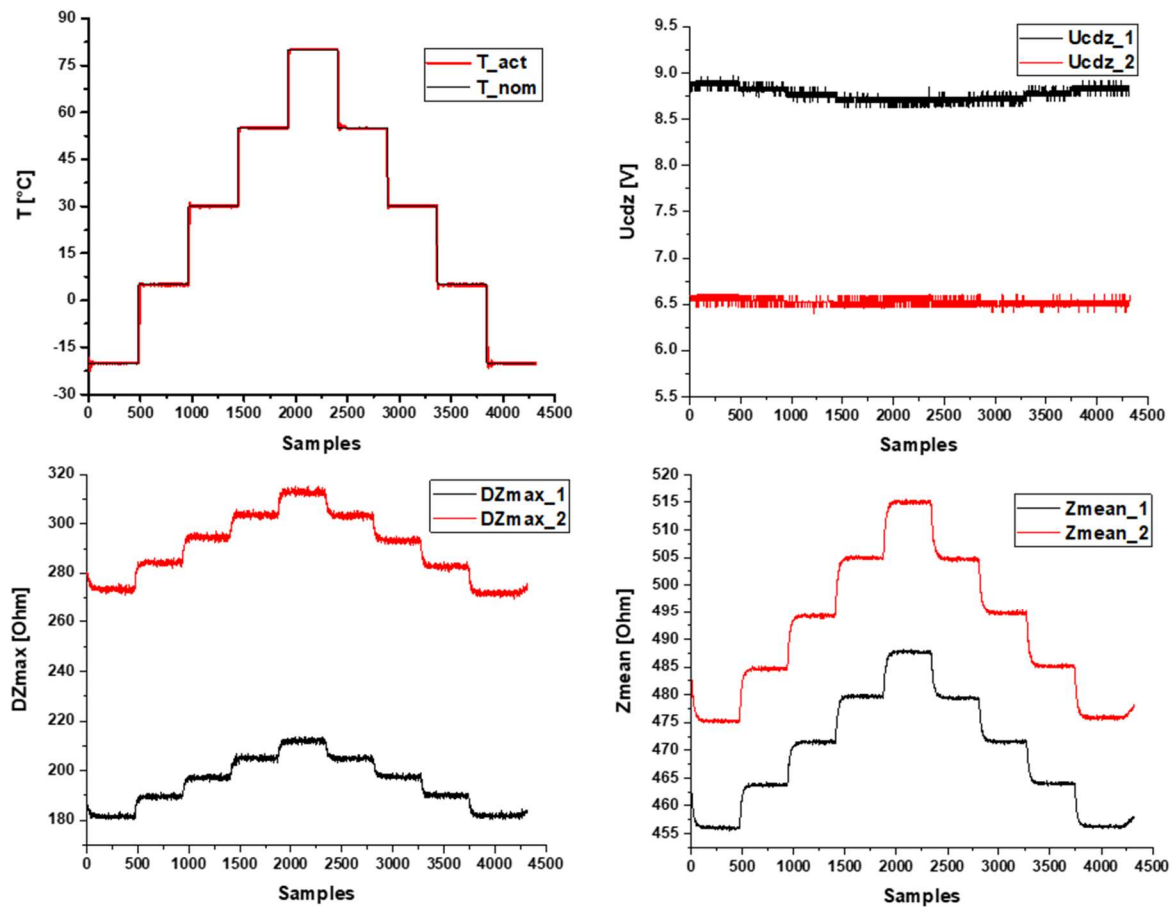


Abbildung 72: Temperaturprofil  $T_{nom}$  und gemessene Temperatur  $T_{act}$  in der Klimakammer (oben links), ein Merkmal ohne signifikante Temperaturabhängigkeit (oben rechts), ein Merkmal mit Temperaturabhängigkeit ohne Mehrdeutigkeiten (unten links), ein Merkmal mit Temperaturabhängigkeit und Mehrdeutigkeiten (unten rechts)

Durch aktive Messung der Blechtemperatur mit einem in der Sensorzeile integrierten Temperatursensor kann der Einfluss der Blechtemperatur auf einzelne 3MA-X8-Merkmale um einen zuvor spezifizierten Temperaturarbeitspunkt (z.B.  $5\text{ }^{\circ}\text{C}$  in Abbildung 73 unten) kompensiert werden. Hierbei wird in praxisgerechter Näherung angenommen, dass die Temperatur einen vorwiegend linearen Einfluss auf die Messwerte besitzt.

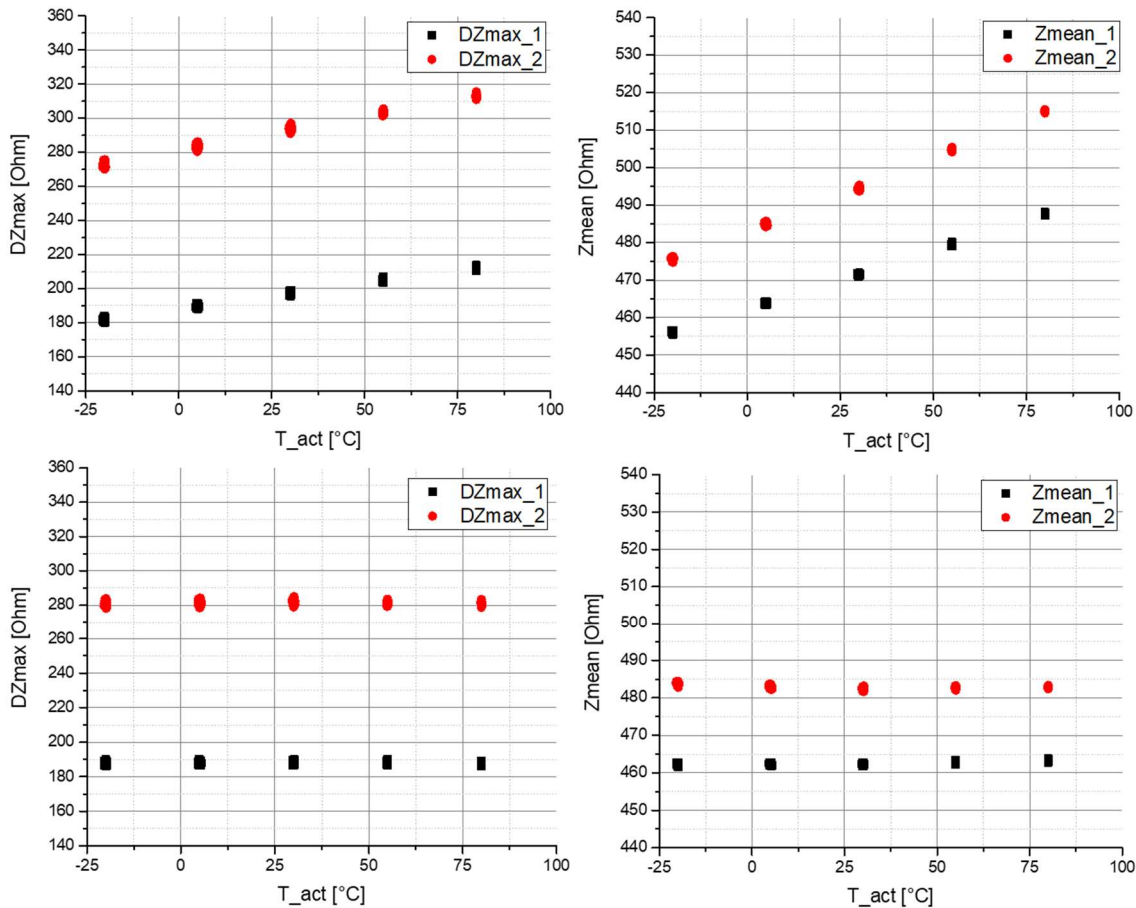


Abbildung 73: Temperaturabhängigkeit von DZmax (links) und Zmean (rechts) ohne Kompensation (oben) und mit Kompensation (unten)

Auf alle Merkmale verallgemeinert, kann eine temperaturabhängige Variable  $X8_{Temp}$  durch einen Offset  $X8_{Offset}$  addiert mit dem Produkt der aktuellen Temperatur  $T_{act}$  und einer Konstanten  $m$  (vgl. Gleichung 42) berechnet werden.

$$X8_{Temp} = m \cdot T_{act} + X8_{Offset} \quad \text{Gleichung 42}$$

Mit Hilfe des gemessenen Merkmals, dem Produkt  $T_{act}$  und  $m$  sowie einem vorab definierten Temperaturarbeitspunkt  $T_0$  kann der lineare Einfluss der Temperatur auf die Merkmale signifikant reduziert werden (vgl. Gleichung 43).

$$X8_{comp} = X8_{Temp} - m \cdot (T_{act} - T_0) \quad \text{Gleichung 43}$$

Zur Erzeugung von Abbildung 73 wurde je ein univariates lineares Regressionsmodell für die Merkmale  $DZ_{max}$  und  $Z_{mean}$  in Abhängigkeit der Temperatur nach Gleichung 42 bestimmt (oben) und anschließend durch Gleichung 44 vom Temperatureinfluss bereinigt. Durch diese

Kompensation bewirkt die Blechtemperatur geringere Mehrdeutigkeiten im Merkmalsraum, die der Klassifikator kompensieren muss.

Ähnlich verhält es sich mit der Sensorabhebung. Die elektrooptische Entfernungsmessung [74] eignet sich zwar prinzipiell zur Bestimmung der Sensorabhebung, da in der Praxis jedoch mehrkanalige Sensorarrays zum Einsatz kommen werden, bedeutet dies, jeder 3MA-X8-Prüfkopf benötigt einen eigenen Abstandssensor (tatsächlich würde ein Abstandssensor aufgrund der Anzahl geometrischer Freiheitsgrade des 3MA-X8-Prüfkopfs nicht ausreichen). Alternativ kann die Sensorabhebung durch einen „virtuellen“ Lifthoff-Sensor aus den aufgenommenen Sensordaten ermittelt und, wie bereits beim Einsatz des Temperatursensors, kompensiert werden.

In wie weit sich diese Kompensationsmaßnahmen auf die Vorhersagequalität des Gesamtsystems auswirken, kann zum aktuellen Zeitpunkt aufgrund der ohnehin schon geringen Datenlage nicht fundiert bewertet werden.

## 9 Verfahrenserweiterung 2MO

### 9.1 Einführung

Aufgrund des hochpermeablen Elektromagneten werden beim 3MA-X8-System in der Regel Wirbelstromfrequenzen bis maximal 5 kHz eingesetzt. Dadurch liegt die Eindringtiefe je nach Parametrierung und Material im Bereich von ca. 0,5 mm – 2 mm. Über diese Eindringtiefe wird die Messinformation integral abgebildet, was vereinfacht ausgedrückt dazu führt, dass oberflächennahe Effekte unterhalb der Eindringtiefe nicht optimal aufgelöst werden können. Eine Möglichkeit das System mit höheren Frequenzen zu betreiben und optimierte Tiefenauflösung zu erreichen, ist der klassische Einsatz von Luftspulen ohne hochpermeablen Kern, wodurch überwiegend sehr oberflächennahe Effekte aufgelöst werden.

Durch den modularen Aufbau in der Datenaufnahme bietet das 3MA-X8-System die Möglichkeit, verschiedene Spulenkonzepete kombiniert zu betreiben. Durch die Kombination eines niederfrequent angesteuerten Elektromagneten (NF-Sensor) und einer höherfrequent angesteuerten Luftspule (HF-Sensor) ist es möglich, Informationen aus unterschiedlichen Wechselwirkungstiefen gemeinsam zu betrachten und dadurch sowohl oberflächennahe, aber auch darunterliegende Effekte aufzulösen.

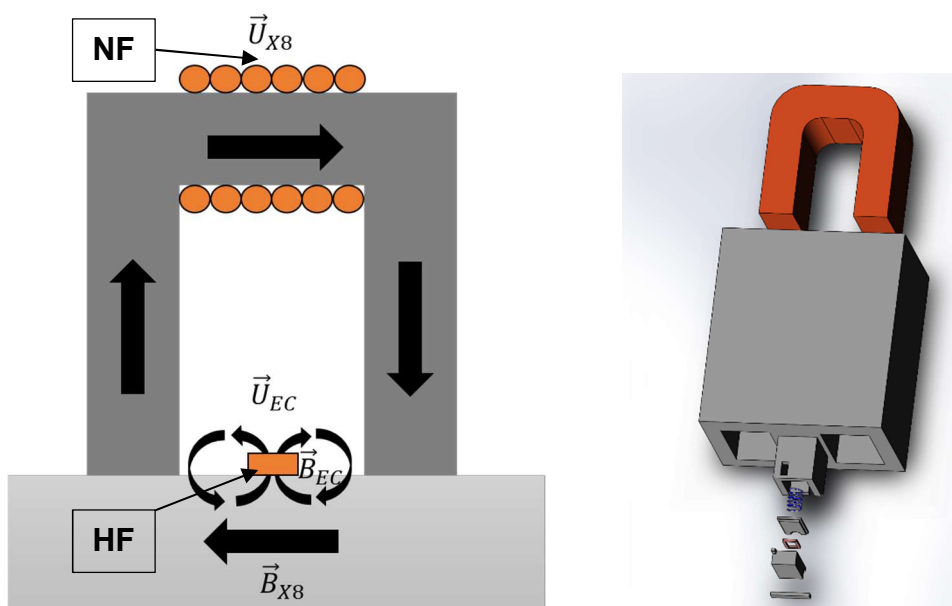


Abbildung 74: Kombination von NF- und HF-Sensoren (links schematisch, rechts als Modellzeichnung in einem Prüfkopf)

Im Gegensatz zur überlagerten spannungsgesteuerten Anregung beim NF-Konzept (vgl. Kapitel 4.1.4) wird die Luftspule nur mit einer sinusförmigen Spannung betrieben. Zur Ummagnetisierung wird beim HF-Konzept die niederfrequente Magnetisierung des Elektromagneten verwendet. Die Signale für NF- und HF-Konzept weisen sehr hohe Ähnlichkeiten zueinander auf, lediglich ist die HF-Wirbelstromfrequenz etwa um den Faktor 10 höher. Durch diese Synergie wird aus beiden Verfahren der identische 21-dimensionale 3MA-X8-Merkmalraum extrahiert, um die Vorteile beider Sensorkonzepte kombiniert in einem multimodalen Messsystem, dem so genannten „MicroMagnetic Observer“ (kurz 2MO), zu betreiben.

## 9.2 Experiment

Zur Erprobung wurde eine Versuchsreihe mit Vierpunkt-Biegeversuchen durchgeführt, in denen Vierkantstahlproben belastet und mit dem 2MO-System charakterisiert werden. Es handelt sich dabei um insgesamt neun Proben (vgl. Abbildung 75 links) aus drei verschiedenen Stahlsorten (C45, S235JR, S355J2).

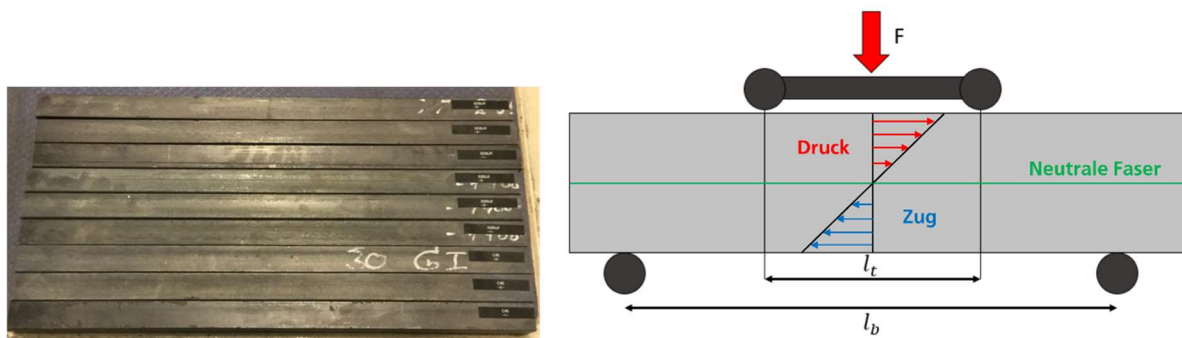
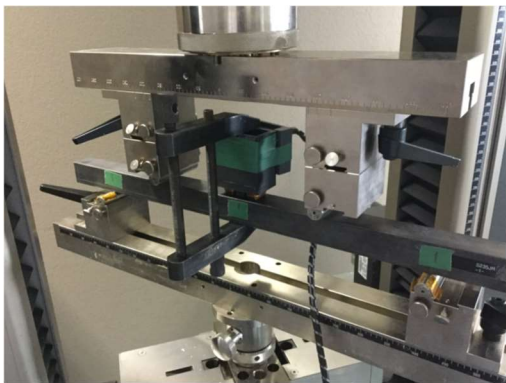


Abbildung 75: Vierkantstahlproben (links), schematische Darstellung des Vierpunktbiegeversuchs (rechts)

Abbildung 75 zeigt rechts schematisch den Vierpunkt-Biegeversuch. Zwei Stempel mit dem Abstand  $l_t$  drücken von oben mit einer definierten Kraft  $F$  auf die Probe, auf der Unterseite halten zwei weitere Stempel mit dem Abstand  $l_b$  dagegen, an den Kontaktflächen oben und unten kommt es zu einer Kraft  $F_1 = F_2 = \frac{F}{2}$ . Dadurch entsteht zwischen den beiden oberen Stempeln bei elastischer Belastung der Probe ( $\sigma_{Zug} < R_{eH}$ ) ein nahezu homogener

Spannungsverlauf in der Oberfläche, der linear in die Tiefe abnimmt. In der so genannten neutralen Faser wechselt die Druckspannung (rot) zur Zugspannung (blau).

Der Stempelabstand ( $l_t = 200\text{mm}$ ,  $l_b = 400\text{mm}$ ) wurde so gewählt, dass der 2MO-Sensor im Bereich der homogenen Spannung angekoppelt werden kann. Abbildung 76 zeigt links den Versuchsaufbau.



Kraft	Spannung	Streckgrenze		
		C45	S235JR	S355J2
0 kN	0 MPa	0%	0%	0%
2 kN	22.22 MPa	5%	10%	6%
4 kN	44.44 MPa	10%	20%	13%
6 kN	66.67 MPa	16%	30%	19%
8 kN	88.89 MPa	21%	40%	26%
10 kN	111.11 MPa	26%	49%	32%

Abbildung 76: Vier-Punkt-Biegeversuchsaufbau

Die Belastungsgrenzen orientieren sich an dem Werkstoff mit der geringsten Streckgrenze, hier dem Werkstoff S235JR. Um Plastifizierungseffekte zu vermeiden, werden die Proben nur bis zur halben Streckgrenze des Werkstoffs S235JR belastet. Die Belastungsstufen im Zugversuch in Kraft, Spannung und mit prozentualer Angabe der Belastung auf die eigene Streckgrenze sind in Abbildung 76 rechts dargestellt. Im Folgenden wird die Kraft als Zielgröße verwendet, im Bereich der Druckspannungen ist die Kraft mit einem negativen Vorzeichen gekennzeichnet.

Das 2MO-System wurde dabei mit folgender Parametrierung betrieben:

- Magnetisierungsamplitude  $A_{\text{mag}} = 4\text{ V}$
- Magnetisierungsfrequenz  $f_{\text{mag}} = 100\text{ Hz}$
- Überlagerungspermeabilitätsamplitude  $A_{\text{ecip}} = 1\text{ V}$
- Überlagerungspermeabilitätsfrequenz  $f_{\text{ecip}} = 4\text{ kHz}$
- Wirbelstromamplitude  $A_{\text{EC}} = 5\text{ V}$
- Wirbelstromfrequenz  $f_{\text{EC}} = 50\text{ kHz}$

## 9.3 Kraftbestimmung mit dem 2MO-System

### 9.3.1 Eingangsmerkmalsraum

Der für diese Aufgabenstellung verfügbare 45-dimensionale 2MO-Merkmalraum setzt sich zusammen aus dem 21-dimensionalen NF-Merkmalraum und dem 21-dimensionalen HF-Merkmalraum. Zusätzlich wird die HF-Induktivität  $L_{EC}$  berechnet, daraus werden drei weitere Merkmale extrahiert, die Induktivität im Loopschwerpunkt, Loopmaximum und Loopminimum.

### 9.3.2 Datenaufnahme

Die Methodik sieht erneut ein Regressionsmodell mit drei Stützstellen und Erhöhung der Anzahl der Stützstellen vor, bis keine signifikante Verbesserung der Vorhersagequalität auf Basis des Eingangsmerkmalsraums zu erwarten ist. Abbildung 77 zeigt links  $R^2$  und rechts RMSE für die Trainings- und Testdaten.

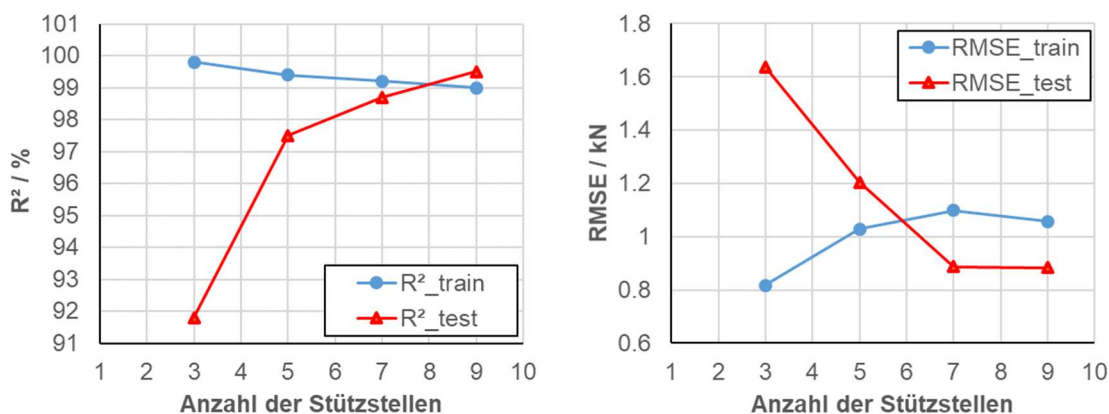


Abbildung 77:  $R^2$  (links) und RMSE (rechts) in Abhängigkeit der Anzahl der Stützstellen

Die Vorhersagequalität der Testdaten verbessert sich bis neun Stützstellen signifikant, während sich die Vorhersagequalität der Trainingsdaten verschlechtert. Der RMSE der Testdaten verbessert sich von 1,56 kN auf 0,58 kN,  $R^2$  der Testdaten verbessert sich von 0,918 auf 0,995. Der RMSE der Trainingsdaten verschlechtert sich von 0,278 kN auf 0,55 kN,  $R^2$  der Trainingsdaten verschlechtert sich von 0,998 auf 0,99. Dies ist akzeptabel, da ein Modell genau dann ausreichend gut parametrisiert ist, wenn die Vorhersagequalität von Trainings- und



Testdaten ähnlich ist. Hinzu kommt, dass die absolute Verbesserung der Testdaten größer ist als die Verschlechterung der Trainingsdaten.

### 9.3.3 Polynomielle Merkmalsraumerweiterung

In diesem Schritt der Methodik wird geprüft, in wie weit die Vorhersagequalität des Regressionsmodells durch polynomielle Erweiterung des Eingangsmerkmalsraums auf der Datenbasis aus 9.3.2 verbessert werden kann. In Abbildung 78 zeigt sich, dass die polynomielle Erweiterung auf Grad zwei zu einer signifikanten Verbesserung der Vorhersagequalität im Hinblick auf  $R^2$  und RMSE führt, eine weitere Erhöhung des Polynomgrades führt zu einer deutlichen Verschlechterung der Vorhersage für die Trainings- und Testdaten.

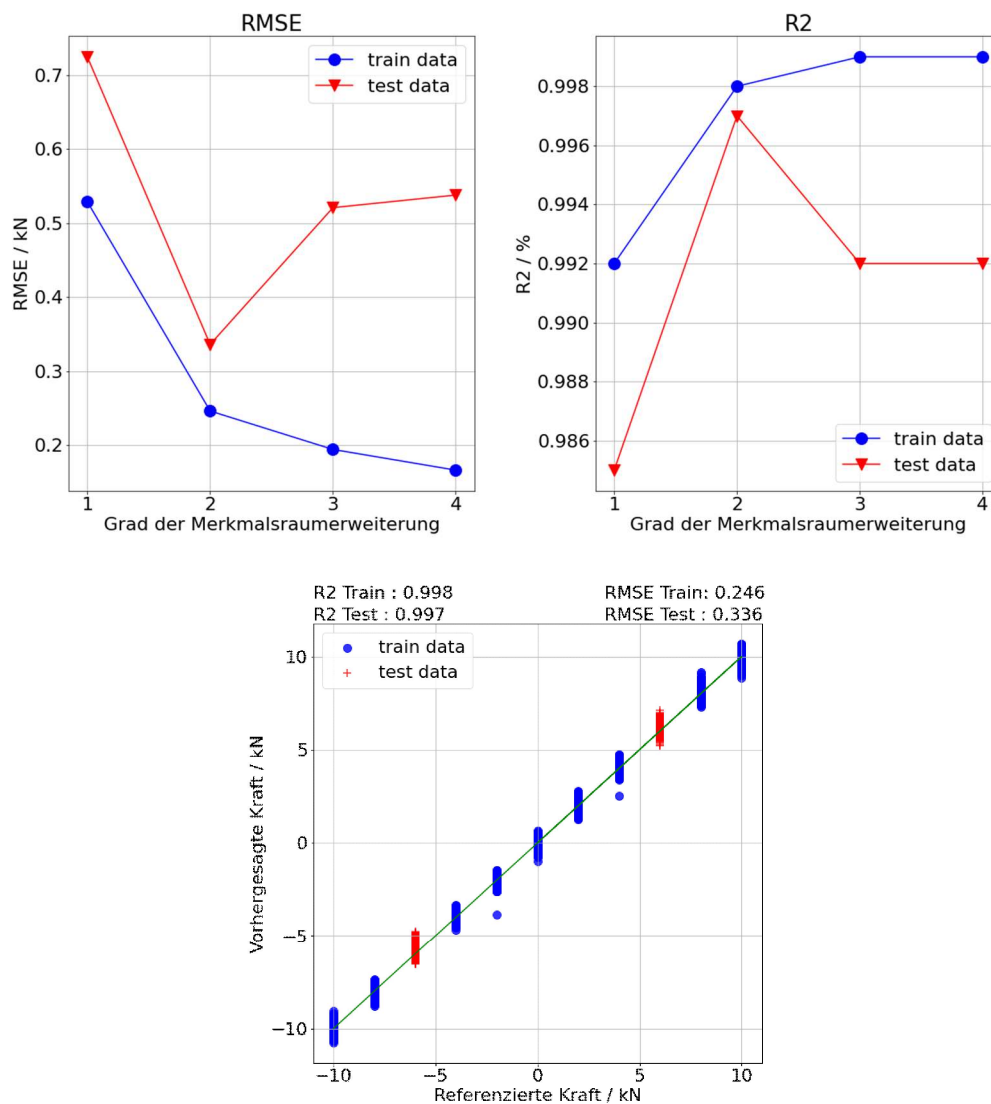


Abbildung 78: Einfluss der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung (oben links RMSE, oben rechts  $R^2$ ) und Ergebnis der MLR nach polynomieller Erweiterung mit Polynomgrad zwei (unten)

### 9.3.4 Vergleich zum bisherigen Stand der Technik

Abbildung 79 zeigt links die Vorhersagequalität des Regressionsmodells auf Basis des 21-dimensionalen 3MA-X8-NF-Merkmalraums sowie rechts das Ergebnis unter Verwendung des 24-dimensionalen auf Basis extrahierten HF-Merkmalraums. Die Trainingsdaten werden oben links mit einem  $R^2$  von 0,97 und einem  $RMSE_{\text{Train}}$  von 1,042 kN, die Testdaten werden mit einem  $R^2$  von 0,973 und einem  $RMSE_{\text{Test}}$  von 0,99 kN vorhergesagt. Oben rechts werden die Trainingsdaten mit einem  $R^2$  von 0,981 und einem  $RMSE$  von 0,829 kN, die Testdaten werden ebenfalls mit einem  $R^2$  von 0,973 und einem  $RMSE$  von 0,983 kN vorhergesagt.

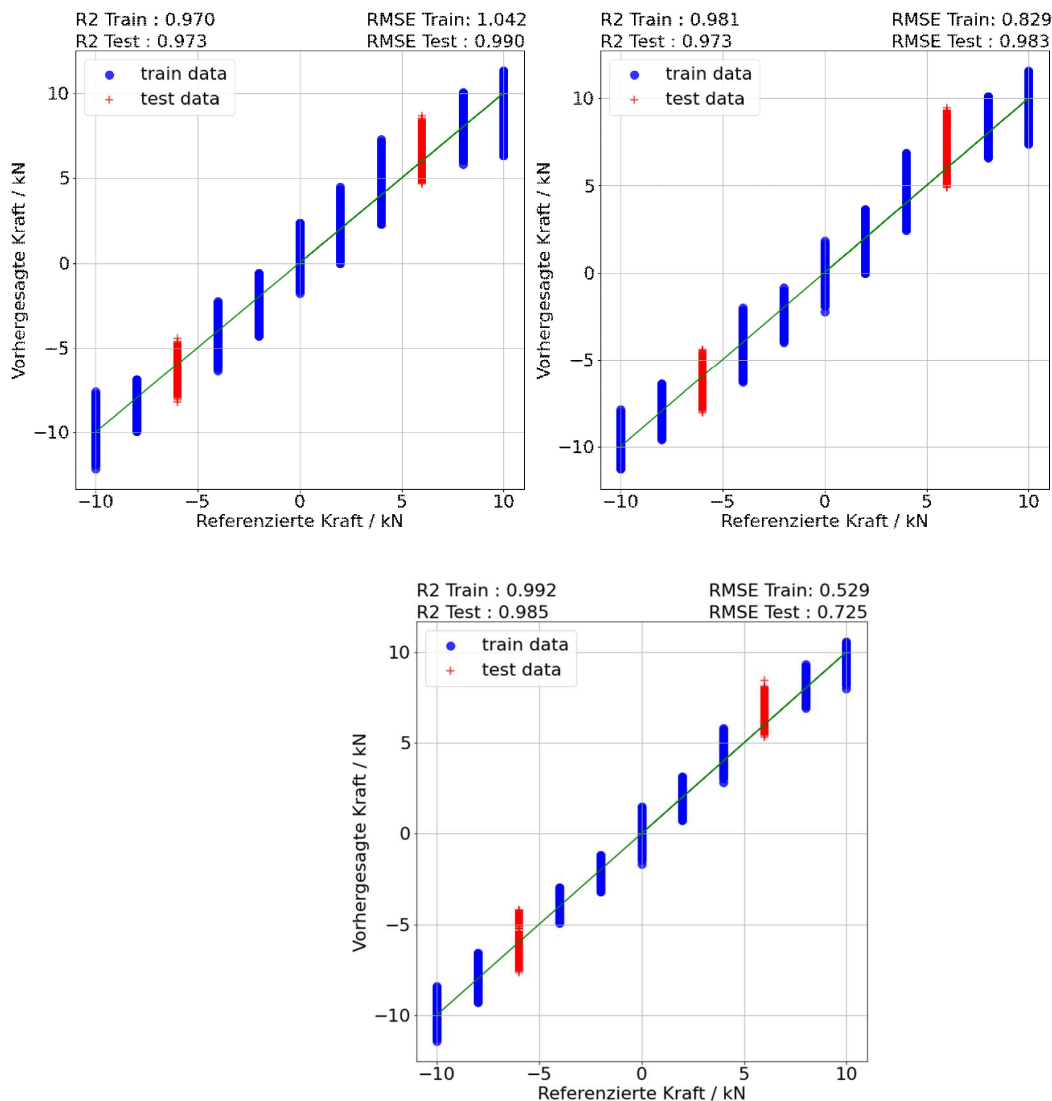


Abbildung 79: Vergleich 21-dimensionaler 3MA-X8-Merkmalraum (oben links) und 24-dimensionaler Merkmalsraum auf Basis der Luftspule (oben rechts) und dem 45-dimensionalen 2MO-Merkmalraum

In Abbildung 79 unten zeigt sich, dass allein die Kombination beider Merkmalsräume ohne polynomielle Merkmalsraumerweiterung deutlich bessere Vorhersagen erlaubt, als unter

Verwendung der einzelnen 21- bzw. 24-dimensionalen Merkmalsräume. Die Trainingsdaten werden mit einem  $R^2$  von 0,992 und einem  $RMSE_{\text{Train}}$  von 0,529 kN vorhergesagt, die Testdaten werden mit einem  $R^2$  von 0,985 und einem  $RMSE_{\text{Test}}$  von 0,725 kN vorhergesagt.

## 9.4 Zusammenfassung und Diskussion

Im Gegensatz zu den bisherigen Anwendungen, die alle ausschließlich mit dem 3MA-X8-System aufgenommen wurde, konnte aufgezeigt werden, dass sich die Methodik auch an Sensordaten aus unterschiedlichen Quellen (hier 3MA-X8 und einer zusätzlichen Luftspule) anwenden lässt. Einerseits konnte beobachtet werden, dass sich die im Vierpunkt-Biegeversuch applizierten Lastkräfte mit der höherfrequent betriebenen Luftspule besser abbilden als mit dem niederfrequenten 3MA-X8-System. Abbildung 79 zeigt jedoch, dass insbesondere die Kombination beider Datenquellen deutlich bessere Ergebnisse liefert, als die einzelnen Verfahren für sich betrachtet. In Kombination mit der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung kommt es zu einer signifikanten Verbesserung der Vorhersagequalität des Regressionsmodell. Wichtig ist dabei, zu erwähnen, dass die beiden eingesetzten Sensorprinzipien aufgrund der Unterschiede in der Größe sowie in der Parametrierung nur bei homogenen Materialien oder Materialeinflüssen (z.B. Lastspannung) im Hinblick auf das zu vermessende Volumen direkt miteinander vergleichbar sind. Auch auf die Minimierung der Stützstellen zum Trainieren des Regressionsmodells wurde verzichtet, da das übergeordnete Ziel dieses Kapitels die Demonstration des verfahrensunabhängigen Charakters der Methodik war. In diesem Anwendungsbeispiel wurde für beide Verfahren synchronisiert und im gleichen Datenformat aufgenommen. Das ist aus eigener Erfahrung als Ausnahme zu betrachten und ist mehr der Tatsache geschuldet, dass beide Verfahren am Fraunhofer IZFP entwickelt wurden. Vor dem Hintergrund Daten aus unterschiedlichen Datenquellen zu kombinieren, erschweren zwei Faktoren häufig die Fusion von Sensordaten aus unterschiedlichen Quellen. Zum einen liefern unterschiedliche Sensoren die Daten häufig mit unterschiedlichen Datenraten, was dazu führt, dass die Anzahl der Messungen für die einzelnen Verfahren unterschiedlich ist. Eine multivariate Betrachtung ist jedoch nur dann möglich, wenn die Anzahl der Messungen gleich und aufeinander synchronisiert ist. Ein weiterer Aspekt ist, dass die Sensoren die Daten häufig in einem eigenen Format liefern. Aus diesen Gründen ist die Definition eines einheitlichen Datenformats verfahrenübergreifend zwingend erforderlich.



## 10 Zusammenfassung

Durch die Korrelation mechanischer und magnetischer Werkstoffeigenschaften erlauben mikromagnetische Messmethoden die zerstörungsfreie Charakterisierung des Zustands ferromagnetischer Werkstoffe. In dem am Fraunhofer IZFP entwickelten 3MA-X8-System werden drei mikromagnetische Analysemethoden mit unterschiedlicher Sensitivität und Eindringtiefe kombiniert, um charakteristische Unterschiede in den Signalverläufen quantifiziert in einem 21-dimensionalen 3MA-X8-Merkmalraum abzubilden. Dem Messsystem überlagerte Einflussfaktoren führen häufig zu Mehrdeutigkeiten in den Merkmalen, weshalb eine univariate Betrachtung der einzelnen Merkmale, beispielsweise über eine einfache Schwellwertbetrachtung, in der Praxis häufig keine zuverlässigen Aussagen im Hinblick auf den Materialzustand erlaubt. Über eine multivariate Betrachtung der Merkmale kann der Einfluss dieser Mehrdeutigkeiten reduziert werden. Mit einem mehrdimensionalen euklidischen Abstandsklassifikator bzw. einer multivariaten linearen Regression werden Modelle zur Vorhersage nominal-, ordinal- oder intervallskalierter Zielgrößen trainiert und validiert. Die dahinterliegende Algorithmik wurden größtenteils eigenständig in bestehende Softwareinfrastrukturen umgesetzt und implementiert. Diese Modelle erfüllen im Allgemeinen spezielle Aufgaben wie die Erkennung unterschiedlicher Materialzustände, lokaler Aufhärtungen in Grobblechen, die Vorhersage mechanischer Lastspannung oder die Bestimmung der Sensorabhebung zum Messobjekt. Ein methodisches Vorgehen existierte bisher nicht.

Durch die steigende Popularität der maschinellen Lernalgorithmen stieg in den vergangenen Jahren auch der Zugang dieser Methoden für die Ingenieurwissenschaften. Dadurch entfällt die Notwendigkeit, die Algorithmik hinter den Modellen selbst zu entwickeln. Es kann stattdessen auf existierende Algorithmen in Bibliotheken zurückgegriffen werden, die direkt in bestehende Softwareinfrastrukturen implementiert werden können. In der Praxis gestaltet sich die Auswahl geeigneter Algorithmen jedoch aufgrund der Variationsvielfalt als Herausforderung. Soll beispielsweise ein Regressionsmodell trainiert und validiert werden, so stellt sich allein in der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten scikit-learn-Bibliothek die Frage, ob eine multivariate lineare Regression, eine Kernel-Ridge-Regression oder eine Support-Vector-Regression, bis hin zu neuronalen Netzen, wie der Multilayer-Perceptron-Regression (um nur einige Vertreter zu nennen), zum Lösen der Problemstellung eingesetzt werden soll. Zudem besitzen viele Algorithmen so genannte Hyperparameter, mit denen die Vorhersagequalität signifikant

beeinflusst werden kann. Dadurch ist es im Gegensatz zur multivariaten linearen Regression möglich, nichtlineare Zusammenhänge in den Merkmalen zur Ermittlung der gesuchten Zielgröße mit höherer Genauigkeit abzubilden. Zum einen stellt die Hyperparametrierung einen nicht vernachlässigbaren Aufwand beim Trainieren und Validieren der Modelle dar, zum anderen sollte insbesondere beachtet werden, dass die werkstoffphysikalische Interpretation der Vorhersagen mit zunehmender Komplexität erschwert wird.

Das Modell ist jedoch nur ein Faktor, der die Komplexität des Gesamtsystems beeinflusst. Es hat sich gezeigt, dass die Vorhersagequalität durch optimierte Merkmalsextraktion signifikant verbessert werden kann. Je nach Anwendung wurden im Rahmen dieser Arbeit unterschiedliche Merkmalsräume zur Materialcharakterisierung eingesetzt. Hintergrund war, dass ursprünglich beim Einsatz des 3MA-X8-Systems ein 21-dimensionaler, auf Basis subjektiver Unterschiede in den Kurvenverläufen extrahierter Merkmalsraum verwendet wurde. Im Verlauf dieser Arbeit wurde die Merkmalsextraktion zudem um einen 226-dimensionalen, automatisiert extrahierten Merkmalsraum bzw. der Verwendung der gesamten Rohdatenbasis als Merkmalsraum zur Charakterisierung des Materialzustandes erweitert.

Das übergeordnete Ziel dieser Arbeit war die Erarbeitung einer Methodik zur mikromagnetischen Materialcharakterisierung mit der es möglich ist, mehrdimensionale Merkmalsräume systematisch zu analysieren und daraus Modelle zur Klassifikation oder Regression abzuleiten. Der Grundgedanke hinter der Methodik ist, mit möglichst einfachen und intuitiv nachvollziehbaren Algorithmen, wie der multivariaten linearen Regression oder dem „Nächste-Nachbar-Klassifikator“, quasioptimale Ergebnisse durch eine polynomielle Erweiterung des Eingangsmerkmalsraums zu erhalten. Dieses Vorgehen ähnelt im weitesten Sinne der Grundidee nichtlinearer Modelle, mit dem Unterschied, dass die Komplexitätserhöhung durch die Merkmalsextraktion und nicht durch die eingesetzten Modelle erfolgt, mit dem Versuch, nichtlineare Zusammenhänge zwischen Merkmalen und Zielgrößen zu linearisieren. Die mit dem Polynomgrad linear steigende Dimension der Merkmalsräume wird mit Hilfe einer linearen Diskriminanzanalyse auf wenige für die Zielgröße signifikante Sekundärmerkmale reduziert, die anschließend zur Klassifikation bzw. Regression mikromagnetischer Materialzustände verwendet werden. Im Gegensatz zu komplexeren Algorithmen kann bei der Modellbildung auf die aufwändige Hyperparametrierung verzichtet werden. Es gilt zu erwähnen, dass Modelle mit optimierten Hyperparametern häufig zusätzlich an einem dritten, nicht bei der Hyperparametrierung beteiligten Datensatz validiert werden, um sicherzustellen, dass die gewählten Einstellungen nicht die beiden anderen Datensätze

überangepasst abbilden. Auf dieses Vorgehen wurde im Rahmen dieser Arbeit aufgrund der fehlenden Hyperparameter verzichtet. Zwar könnte die Wahl des Polynomgrades als Hyperparameter aufgefasst werden, da auch dieser die Komplexität des Gesamtsystems beeinflusst, dieses Risiko wird aufgrund empirischer Beobachtungen jedoch als vernachlässigbar eingeschätzt.

Die Methodik ist dabei nicht auf eine feste Merkmalsraumdimension beschränkt. Sie verwendet alle verfügbaren Merkmale als Eingangsmerkmalsraum. Da in allen vorgestellten Anwendungen auch der ursprünglich extrahierte 21-dimensionale 3MA-X8-Merkmalsraum zur Verfügung stand, konnte das Ergebnis des methodischen Vorgehens mit dem Ergebnis des bisherigen Stands der Technik (Abstandsklassifikation bzw. multivariate lineare Regression) verglichen werden. Dabei führte allein die Zwischenschaltung der polynomiellen Merkmalsraumerweiterung in Kombination mit der linearen Diskriminanzanalyse auf Basis des 21-dimensionalen Merkmalsraum bereits zu signifikant verbesserten Vorhersagen. Durch die Verwendung aller verfügbaren Eingangsmerkmale konnte gezeigt werden, dass die Methodik die bisher erreichten Ergebnisse signifikant verbessert hat.

Des Weiteren hatte die Methodik das Ziel, die Aufwände hinsichtlich der Datenaufnahme zu minimieren. Während es bei Klassifikationsproblemen häufig ausreicht, die verfügbaren Materialzustände in den relevanten Zustandsvariationen zu vermessen, ist dies bei Regressionsproblemen in der Form nicht möglich. Ziel der Regression ist nämlich die Vorhersage beliebiger Zwischenwerte auf Basis von Stützstellen bzw. Intervallen, die zum Trainieren des Regressionsmodell verwendet werden. Dabei stellt sich im Hinblick auf die Experimentplanung die Frage, wie viele Stützstellen bzw. Intervalle mindestens notwendig sind, um ein zuverlässiges Regressionsmodell zu trainieren. Diese Frage konnte dadurch beantwortet werden, dass im ersten Schritt ein Modell auf drei Stützstellen trainiert wird und Zwischenstellen zur Validierung aufgenommen werden. Anschließend werden die zur Validierung eingesetzten Daten dem Trainingsdatensatz hinzugefügt, daraus wird erneut ein Modell trainiert und neu aufgenommene Zwischenwerte dienen erneut der Validierung. Dieses Vorgehen wird so lange wiederholt, bis sich die Vorhersagequalität der Trainings- und Testdaten nicht mehr signifikant ändert.

Doch die Methodik hat auch Schwächen. Ein Punkt ist das Vorgehen bei der Datenaufnahme zur Regressionsanalyse. Insbesondere bei nichtlinearen Abschnitten zeigt sich nämlich, dass es sinnvoll sein kann, die Stützstellen im Bereich der Nichtlinearitäten zu erhöhen. Es konnte auch gezeigt werden, dass die Methodik die Ergebnisse des bisherigen Stands der Technik bei der

Detektion lokaler Inhomogenitäten (engl. Hardspot) signifikant verbessert, die kundenseitigen Anforderungen in sandgestrahlten Oberflächen jedoch auch dadurch nicht erfüllt werden. Diese Bleche bilden durch die Oberflächenbehandlung induzierte Druckspannungen überlagert in den Merkmalen ab. Dies führt dazu, dass die lokalen Inhomogenitäten nicht eindeutig detektiert werden. Im Gegensatz zu den bisher eingesetzten überwachten Lernalgorithmen (multivariate lineare Regression, lineare Diskriminanzanalyse), deren Ziel die optimale Abbildung der Merkmale auf die Zielgröße war, konnte durch die Unabhängigkeitsanalyse, als Vertreter der unüberwachten maschinellen Lernalgorithmen, der magnetische Fingerabdruck der Hardspots ermittelt und zuverlässig zur Detektion verwendet werden.

Diese Punkte sind aber vor dem Hintergrund der einfachen Handhabung der Methodik in Kombination mit den signifikanten Verbesserungen in der Vorhersagequalität der Modelle vertretbar.

Nicht berücksichtigt wurde im Rahmen dieser Arbeit der Einfluss selektierter Merkmale aus den verfügbaren Merkmalsräumen. In [44] konnte beispielsweise aufgezeigt werden, dass die Vorhersagequalität statistischer Modelle durch vorgeschaltete unüberwachte sowie überwachte Merkmalsselektionsalgorithmen deutlich verbessert werden kann.



## 11 Ausblick

Durch die Flexibilität im Hinblick auf die Dimension des Eingangsmerkmalsraums kann die Methodik verfahrensunabhängig für beliebige Merkmalsräume eingesetzt werden. Auch der Einsatz von Merkmalsräumen aus unterschiedlichen Messverfahren ist damit möglich. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Möglichkeit zur Datenfusion am Beispiel des 2MO-Systems demonstriert. Analoges gilt für das lange Jahre im Einsatz befindliche 3MA-II System. Hier konnte in eigenen Vorarbeiten bereits das Potenzial zur Verbesserung der Vorhersage sowohl auf Basis des etablierten 41-dimensionalen Eingangsmerkmalsraums [23] [30], aber auch auf Basis einer automatisierten Merkmalsextraktion aus den verfügbaren Rohsignalen, ähnlich wie in dieser Arbeit beschrieben, aufgezeigt werden. Dadurch konnte die Vorhersagequalität im Vergleich zum eigenen Stand der Technik deutlich verbessert werden. Beispielsweise zeigt Abbildung 80 die Auswertung einer 3MA-II Messreihe an einem am Fraunhofer IZFP verfügbaren Referenzprobensatz bestehend aus acht Proben unterschiedlicher Härte (vgl. S1 – S8). Die Dimension der Eingangsmerkmalsräume wurde durch den Einsatz der linearen Diskriminanzanalyse auf zwei kanonische Variablen reduziert. Abbildung 80 zeigt links die erste und zweite kanonische Variable auf Basis des Eingangsmerkmalsraums aus dem aktuellen Stand der Technik und rechts die kanonischen Variablen auf Basis der Rohsignale als Eingangsmerkmalsraum. Die Abstände zwischen den Klassen rechts haben sich im Vergleich zu links deutlich vergrößert.

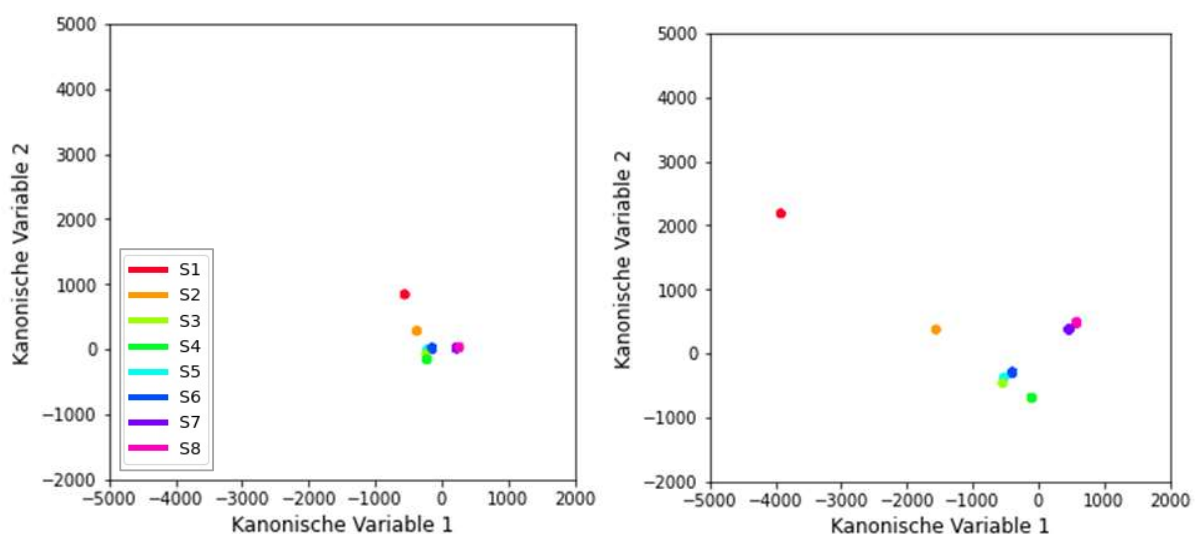


Abbildung 80: Erste und zweite kanonische Variable der Vermessung eines Referenzprobensatzes, links auf Basis des 41-dimensionalen Merkmalsraums, rechts auf Basis der verfügbaren Rohdaten

Wird das Verständnis auch über den mikromagnetischen Anwendungsbereich hinweg abstrahiert, eignen sich die gezeigten Ansätze zur Lösung vielfältiger Problemstellungen wie beispielsweise der Erkennung von ankopplungsbedingten Fehlmessungen bei der Ultraschalllaufzeitmessung [8].

Die Methodik ist derart abstrakt einsetzbar, dass sie mittlerweile sogar für Fragestellungen verwendet wird, die weit über den Anwendungsbereich der am Fraunhofer IZFP eingesetzten Möglichkeiten zur zerstörungsfreien Materialcharakterisierung hinausgeht, da das methodische Vorgehen prinzipiell auf jede beliebige Sensormodalität abstrahiert werden kann. Ein Beispiel dafür ist die Rolle des Fraunhofer IZFP im Fraunhofer-Cluster Projekt „M<sup>3</sup>Infekt“ mit dem die Fraunhofer Gesellschaft auf die seit 2020 herrschenden COVID-19 Pandemie reagiert hat. Das übergeordnete Ziel ist dabei ein dezentrales Monitoringsystem mit dem COVID-19 Infektionen anhand von insgesamt sieben Sensormodalitäten, die von Partnern anderer Fraunhofer Institute geliefert werden, zu erkennen. Abbildung 81 zeigt links das Diagnosefenster des so genannten M<sup>3</sup>Infekt-Analyzers [75]. In diesem sollen auf Basis der Ergebnisse im Analysefenster rechts Krankheitsverläufe wie beispielsweise eine COVID-19 Infektion auf Basis der verfügbaren Sensorsignale frühzeitig erkannt werden können. Die Ampeldarstellung links wurde auch bei der Hardspotdetektion verwendet (vgl. Abbildung 58 - Abbildung 60).



Abbildung 81: M<sup>3</sup>Infekt-Analyser (links Diagnosefenster, rechts Analysefenster)

Ein ähnliche Rolle hat das Fraunhofer IZFP in dem von der EU geförderten Verbundprojekt El-Peacetolero [76]. In diesem Projekt werden Daten aus unterschiedlichen Sensormodalitäten zur Bestimmung von Alterungsphänomen in Kabeln im Bereich der Reaktorsicherheitsforschung mit Blick auf die Merkmalsextraktion und Modellbildung ausgewertet. Eine wesentliche Herausforderung beim Einsatz solcher Aufgabenstellungen ist dabei die zum Ende von Abschnitt 9.4 beschriebene Notwendigkeit eines einheitlichen Datenformats und der

Datensynchronisierung, da die unterschiedlichen Sensoren unterschiedlich viele Messwerte pro Zeiteinheit liefern. Als Basis des Datenformats hat sich in dieser frühen Phase aufgrund der Einfachheit das im 3MA-X8 verwendete Datenformat etabliert, wonach Merkmale unabhängig ihrer Quelle als Spalten- und die entsprechenden Messwerte als Zeileneinträge behandelt werden. Darstellungen in Form eines Flächenbildes werden in Anlehnung an Kapitel 8 und den ausgewerteten Flächenscans um zwei zusätzliche Spalten erweitert, die die jeweilige x- und y-Koordinate im Bild angeben.

Ein weiterer Aspekt ist der Begriff der Erklärbarkeit maschineller Lernalgorithmen (engl. Explainable Artificial Intelligence, kurz XAI) [77]. Dabei geht es vereinfacht ausgedrückt um die Fragestellung, wie Modelle Ergebnisse aus den Eingangsmerkmalen ableiten. Insbesondere komplexe und nichtlineare Algorithmen, wie beispielsweise künstliche neuronale Netze, können oft, ohne den Aspekt der XAI zu betrachten, aufgrund der fehlenden Introspektion lediglich als „Black-Box“-Modelle betrachtet werden. Im Gegensatz dazu stehen die im methodischen Ansatz eingesetzten Algorithmen, bei denen es sich überwiegend um deterministische und lineare Modelle handelt. Die Vorhersage der Zielgrößen erfolgt daher transparent („Glass-Box“) auf Basis von Polynomen, die sich aus Linearkombinationen der Merkmale im Eingangsmerkmalsraum abbilden lassen. Durch geeignete Merkmalsraumerweiterungen können dadurch prinzipiell beliebig nichtlineare Problemstellungen mit linearen Methoden gelöst werden, ohne an Transparenz zu verlieren. Dabei stellt die im Rahmen dieser Arbeit eingesetzte polynomielle Merkmalsraumerweiterung nur den ersten Schritt in diese Richtung dar. Eigene aktuell laufende Forschungsaktivitäten zeigen bereits das Potenzial beim Einsatz trigonometrischer Funktionen und Exponentialfunktionen zur Merkmalsraumerweiterung auf.



## 12 Epilog

Eine versteckte Motivation dieser Arbeit war der Versuch, den Sinn für Abstraktionen zu schärfen. Damit bewaffnet, spielt es letztlich keine Rolle, ob Daten aus 3MA-X8-, Wirbelstrom-Ultraschall- oder sonstigen Techniken der Materialcharakterisierung verfahrensunabhängig für sich alleine oder multimodal analysiert werden, die Entnahme der anwendungsrelevanten Nutzinformation steht im Vordergrund. Diese Abstraktion kann über den Anwendungsbereich der Materialcharakterisierung erweitert werden. Es spielt nämlich ebenfalls keine Rolle, ob es sich bei der Aufgabenstellung um die Fehlerprüfung anstelle der Materialcharakterisierung handelt, ob es sich um MRT-Aufnahmen oder um symptomatische und psychologische Patientendaten zur Diagnose im Medizinbereich handelt. Mit einem Mehrkanal-EEG ausgestattet, erscheinen beeindruckend anmutende Lösungen, wie das Steuern einer Flugdrohne mit „Gedankenkraft“, plötzlich so einfach. Man legt eine EEG-Haube an, wendet die Methodik zur Datenaufnahme und Modellbildung an, zeigen die aufgenommenen Daten ausreichend Korrelationen zu Gedankenstrukturen, können diese in Befehle zur Drohnensteuerung umgesetzt werden. Auf gesellschaftliche Problemstellungen übertragen, könnten Informationen, auf die wir Zugriff haben dürfen, als Systemantworten (Merkmalsraum) auf Systemfragen (Rohdaten) interpretiert werden, die gestellt wurden, übergeordnete Fragen der Welt (Zielgrößen) zu beantworten. Dabei können entweder immer kompliziertere und nicht immer einfach nachvollziehbare Erklärungen (Modelle) gefunden werden, die auf Basis unvollständiger oder fehlerhafter Systemantworten die übergeordnete Fragestellung beantworten sollen (Training), um ein generalisiertes Systemverhalten (Validierung) und daraus resultierend Maßnahmen (Bewertung) abzuleiten. Dabei ist es elementar wichtig, die Informationen und die Quellen kritisch zu prüfen. Denn mit den richtigen Systemantworten (Merkmalsraumerweiterung) können einfache Modelle erklärbare Antworten auf übergeordnete Fragestellungen geben, die durch sukzessive Erweiterung der Systemkomplexität nachvollziehbar optimiert werden können (Methodik). Unabhängig davon ist es essentiell wichtig, die Systemantworten in der Gesamtheit (multivariat) und mit der angemessenen Gewichtung (Dimensionsreduktion) zu betrachten, insbesondere dann, wenn sehr viele Fragen gestellt wurden. Denn je nach Komplexität des Gesamtsystems ist es durchaus möglich, dass unterschiedliche Modelle die gleichen Systemantworten entsprechend der eigenen Erwartung erklären (Overfitting). Eine gemeinsame Betrachtung aller verfügbaren Systemantworten erklärt uns die Welt. Der Fantasie sind dabei keine Grenzen gesetzt, ...

... eines sollte aber nach dem Lesen dieser Arbeit klar sein. Dies ist nur die Systemantwort eines einzigen Merkmals auf Fragen, die es sich täglich in einem stetig wachsenden, derzeit fast acht Milliarden Dimensionen umfassenden Merkmalsraum stellt.

## 13 Literatur

### Literatur

- [1] K. Bhavsar, J. Singla, Y. Al-Otaibi, O.-Y. Song, Y. Zikria und A. Bashir, „Medical Diagnosis Using Machine Learning: A Statistical Review“, *Computers, Materials & Continua*, S. 107–125, 2021, doi: 10.32604/cmc.2021.014604.
- [2] M. Fatima und M. Pasha, „Survey of Machine Learning Algorithms for Disease Diagnostic“, *Journal of Intelligent Learning Systems and Applications*, S. 1–16, 2017, doi: 10.4236/jilsa.2017.91001.
- [3] N. Lavrac, B. Zupan, I. Kononenko, M. Kukar und E. Keravnou, „Intelligent Data Analysis for Medical Diagnosis: Using Machine Learning and Temporal Abstraction“, *AI Commun*, S. 191–218, 1998, doi: 10.5555/1216122.1216128.
- [4] S. Grigorescu, B. Trasnea, T. Cocias und G. Macesanu, „A survey of deep learning techniques for autonomous driving“, *J. Field Robotics*, Nr. 3, S. 362–386, 2020, doi: 10.1002/rob.21918.
- [5] M. Müller, D. Britz, L. Ulrich, T. Staudt und F. Mücklich, „Classification of Bainitic Structures Using Textural Parameters and Machine Learning Techniques“, *Metals*, S. 630, 2020, doi: 10.3390/met10050630.
- [6] T. Ayodele, „Machine Learning Overview“ in *New Advances in Machine Learning*, Yagang Zhang, Hg., IntechOpen, 2010, doi: 10.5772/9374.
- [7] D. Müller, A. Ehlen und B. Valeske, „Convolutional Neural Networks for Semantic Segmentation as a Tool for Multiclass Face Analysis in Thermal Infrared“, *Journal of Nondestructive Evaluation*, Nr. 1, S. 9, 2021, doi: 10.1007/s10921-020-00740-y.
- [8] S. Herter, S. Youssef, M. Becker und S. Fischer, „Machine Learning Based Preprocessing to Ensure Validity of Cross-Correlated Ultrasound Signals for Time-of-Flight Measurements“, *Journal of Nondestructive Evaluation*, 2021, doi: 10.1007/s10921-020-00745-7.
- [9] K. Szielasko, B. Wolter, R. Tschuncky und S. Youssef, „Micromagnetic materials characterization using machine learning“, 2019, doi: 10.1515/TEME-2019-0099.
- [10] R. Roscher, B. Bohn, M. F. Duarte und J. Garcke, „Explainable Machine Learning for Scientific Insights and Discoveries“, *IEEE Access*, S. 42200–42216, 2020, doi: 10.1109/ACCESS.2020.2976199.

- [11] X. Ying, „An Overview of Overfitting and its Solutions“, *J. Phys.: Conf. Ser.*, S. 22022, 2019, doi: 10.1088/1742-6596/1168/2/022022.
- [12] Z. Cai, Y. Long und L. Shao, „Classification complexity assessment for hyper-parameter optimization“, *Pattern Recognition Letters*, S. 396–403, 2019, doi: 10.1016/j.patrec.2019.05.021.
- [13] L. Prechelt, „Early Stopping — But When?“ in *Lecture Notes in Computer Science, Neural Networks: Tricks of the Trade*, G. Montavon, G. B. Orr und K.-R. Müller, Hg., Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012, S. 53–67, doi: 10.1007/978-3-642-35289-8\_5.
- [14] S. Youssef, M. Amiri, A. Youssef, S. Pushkarev, D. Molenda und H. Bachmann, „Mikromagnetische Detektion von Hardspots an Grobblechen“ in *DGZfP-Jahrestagung 2018 - Zerstörungsfreie Materialprüfung*, 2018, Di.2.B.2.
- [15] K. Szielasko, S. Youssef, B. Wolter, M. Schuppmann, C. Rodner, C. Weingard, H. Kopp, M. Elzatma, I. Mironenko und I. Kiselmann, „High-Speed-3MA zur mikromagnetischen Werkstoffcharakterisierung in schnellen Produktionsprozessen“ in *DGZfP-Jahrestagung 2014. ZfP in Forschung, Entwicklung und Anwendung (2014)*, Berlin, 2014, MO.3.A.4, 9 Seiten.
- [16] G. Schneibel, *Development of an Eddy Current based Inspection Technique for the Detection of Hard Spots on Heavy Plates*, 2016. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.ndt.net/article/wcndt2016/papers/th1h1.pdf>
- [17] M. Borsutzki, „Prozeßintegrierte Ermittlung der Streckgrenze und der Tiefziehkenngößen  $r_m$  und  $D_r$  an kaltgewalztem, feuerverzinktem Feinblech“, Universität des Saarlandes, Saarbrücken, 1998. [Online]. Verfügbar unter: [https://books.google.de/books/about/Proze%C3%9Fintegrierte\\_Ermittlung\\_der\\_Streck.html?id=ounNzQEACAAJ&redir\\_esc=y](https://books.google.de/books/about/Proze%C3%9Fintegrierte_Ermittlung_der_Streck.html?id=ounNzQEACAAJ&redir_esc=y)
- [18] E. Kneller, *Ferromagnetismus: Mit einem Beitrag Quantentheorie und Elektronentheorie des Ferromagnetismus*. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [19] R. M. Bozorth, *Ferromagnetism*. IEEE Press, 2015. [Online]. Verfügbar unter: <https://books.google.de/books?id=2cpOzQEACAAJ>
- [20] B. D. Cullity und C. D. Graham, *Introduction to Magnetic Materials*. Wiley, 2009.
- [21] A. Seeger, Hg., *Moderne Probleme der Metallphysik. Band 1: Fehlstellen, Plastizität, Strahlenschädigung und Elektronentheorie*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1965.
- [22] *DIN 1324-2:1988-05, Elektromagnetisches Feld; Materialgrößen*, Berlin.



- 
- [23] K. Szielasko, „Entwicklung messtechnischer Module zur mehrparametrischen elektromagnetischen Werkstoffcharakterisierung und -prüfung“. Dissertation, Saarbrücken, Universität, Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät, Dissertation, 2009. [Online]. Verfügbar unter:  
[http://fhgonline.fhg.de/bibliotheken/izfp/Diss\\_Szielasko\\_2009.pdf](http://fhgonline.fhg.de/bibliotheken/izfp/Diss_Szielasko_2009.pdf)
- [24] S. Youssef, C. Zimmer, K. Szielasko und A. Schütze, „Bewertung subjektiver und automatisierter Merkmalsextraktion periodischer Zeitsignale am Beispiel des 3MA-X8-Verfahrens“, *tm - Technisches Messen*, Nr. 5, S. 267–277, 2019, doi: 10.1515/teme-2018-0074.
- [25] C. Zimmer, „Implementieren maschineller Lernalgorithmen zur mikromagnetischen Materialcharakterisierung“. Masterarbeit, Hochschule für Technik und Wirtschaft des Saarlandes, Saarbrücken (htw saar), Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Studiengang Master Elektrotechnik Informationstechnik, 2018.
- [26] K. Backhaus, B. Erichson, W. Plinke und R. Weiber, *Multivariate Analysemethoden: Eine anwendungsorientierte Einführung*, 14. Aufl. Berlin, Heidelberg: Springer Gabler, 2016. [Online]. Verfügbar unter: <http://www.springer.com/>
- [27] G. Gutin, A. Yeo und A. Zverovich, „Traveling salesman should not be greedy: domination analysis of greedy-type heuristics for the TSP“, *Discrete Applied Mathematics*, 1-3, S. 81–86, 2002, doi: 10.1016/S0166-218X(01)00195-0.
- [28] K. Beyer, J. Goldstein, R. Ramakrishnan und U. Shaft, *When Is “Nearest Neighbor” Meaningful?* Springer Berlin Heidelberg, 1999.
- [29] L. Fahrmeir, T. Kneib und S. Lang, *Regression: Modelle, Methoden und Anwendungen*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2007. [Online]. Verfügbar unter: <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:1111-200708029289>
- [30] R. Tschuncky, „Sensor- und geräteunabhängige Kalibrierung elektromagnetischer zerstörungsfreier Prüfverfahren zur praxisorientierten Werkstoffcharakterisierung“. Dissertation, Universität des Saarlandes, Saarbrücken, 2011. [Online]. Verfügbar unter:  
[http://publica.fraunhofer.de/eprints/urn\\_nbn\\_de\\_bsz\\_291-scidok-41800.pdf](http://publica.fraunhofer.de/eprints/urn_nbn_de_bsz_291-scidok-41800.pdf)
- [31] A. C. Müller und S. Guido, *Einführung in Machine Learning mit Python: Praxiswissen Data Science*, 1. Aufl. Heidelberg: O'Reilly, 2017.
- [32] C. Elliott, V. Vijayakumar, W. Zink und R. Hansen, „National Instruments LabVIEW: A Programming Environment for Laboratory Automation and Measurement“, *JALA: Journal of the Association for Laboratory Automation*, Nr. 1, S. 17–24, 2007, doi: 10.1016/j.jala.2006.07.012.

- [33] F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort, Michel, Vincent, Thirion, Bertrand, O. Grisel, M. Blondel, P. Prettenhofer, R. Weiss, V. Dubourg, J. Vanderplas, A. Passos, D. Cournapeau, M. Brucher, M. Perrot und E. Duchesnay, „Scikit-learn: Machine Learning in Python“, *Journal of Machine Learning Research*, Nr. 85, S. 2825–2830, 2011.
- [34] M. Awad und R. Khanna, Hg., *Efficient Learning Machines: Theories, Concepts, and Applications for Engineers and System Designers*. Berkeley, CA: Apress, 2015.
- [35] V. Vovk, „Kernel Ridge Regression“ in *Empirical Inference: Festschrift in Honor of Vladimir N. Vapnik*, B. Schölkopf, Z. Luo und V. Vovk, Hg., Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013, S. 105–116, doi: 10.1007/978-3-642-41136-6\_11.
- [36] J. Mielniczuk und J. Tyrcha, „Consistency of multilayer perceptron regression estimators“, *Neural Networks*, Nr. 7, S. 1019–1022, 1993, doi: 10.1016/S0893-6080(09)80011-7.
- [37] S. Youssef, C. Zimmer, K. Szielasko, Z. K. Suri und A. Schütze, Hg., *4.3.2 Vergleich subjektiver und automatisierter Merkmalsextraktion sowie Einsatz maschineller Lernalgorithmen zur mikromagnetischen Materialcharakterisierung*, 2019. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.ama-science.org/proceedings/details/3418>
- [38] I. Altpeter, R. Becker, G. Dobmann, R. Kern, W. Theiner und A. Yashan, „Robust solutions of inverse problems in electromagnetic non-destructive evaluation“, *Inverse Problems*, Nr. 6, S. 1907–1921, 2002, doi: 10.1088/0266-5611/18/6/328.
- [39] I. Altpeter, *Spannungsmessung und Zementitgehaltsbestimmung in Eisenwerkstoffen mittels dynamischer magnetischer und magnetoelastischer Messgrößen*. Saarbrücken, 1990.
- [40] J. Grus, *Data Science from Scratch: First principles with Python*. O'Reilly UK Ltd, 2019. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.oreilly.com/library/view/data-science-from/9781492041122/>
- [41] K.-D. Kammeyer und M. Bossert, Hg., *Nachrichtenübertragung*, 5. Aufl. Wiesbaden: Vieweg + Teubner, 2011.
- [42] W. Mathis, *Theorie nichtlinearer Netzwerke*. Berlin: Springer, 1987. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.springer.com/de/book/9783540183655>
- [43] O. Föllinger und M. Kluwe, *Laplace-, Fourier- und z-Transformationen*, 8. Aufl. Heidelberg: Hüthig, 2003.
- [44] T. Schneider, N. Helwig und A. Schütze, „Automatic feature extraction and selection for classification of cyclical time series data“, *tm - Technisches Messen*, Nr. 3, 2017, doi: 10.1515/teme-2016-0072.

- 
- [45] R. Brigola, *Fourier-Analysis und Distributionen: Eine Einführung mit Anwendungen*. Hamburg: tredition, 2013.
- [46] L. Fahrmeir, C. Heumann, R. Künstler, I. Pigeot und G. Tutz, *Statistik: Der Weg zur Datenanalyse*, 8. Aufl. Berlin, Heidelberg: Springer Spektrum, 2016.
- [47] G. Hinton, T. J. Sejnowski und T. A. Poggio, *Unsupervised Learning: Foundations of Neural Computation*. Cambridge: MIT Press, 1999. [Online]. Verfügbar unter: <https://ebookcentral.proquest.com/lib/gbv/detail.action?docID=5340019>
- [48] A. C. Rencher und W. F. Christensen, *Methods of multivariate analysis*, 3. Aufl. Hoboken, N.J.: Wiley, 2012. [Online]. Verfügbar unter: <http://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&scope=site&db=nlebk&db=nlabk&AN=472234>
- [49] *DIN EN ISO 6507-1:2018-07, Metallische Werkstoffe - Härteprüfung nach Vickers - Teil 1: Prüfverfahren (ISO\_6507-1:2018); Deutsche Fassung EN\_ISO\_6507-1:2018*, Berlin.
- [50] P. Wehling, R. A. LaBudde, S. L. Brunelle und M. T. Nelson, „Probability of Detection (POD) as a Statistical Model for the Validation of Qualitative Methods“, *Journal of AOAC INTERNATIONAL*, Jg. 94, Nr. 1, S. 335–347, 2011, doi: 10.1093/jaoac/94.1.335.
- [51] H. Anton, *Elementary linear algebra*, 7. Aufl. New York: Wiley, 1994. [Online]. Verfügbar unter: <http://www.loc.gov/catdir/enhancements/fy0607/93028546-d.html>
- [52] R. de Maesschalck, D. Jouan-Rimbaud und D. L. Massart, „The Mahalanobis distance“, 2000, doi: 10.1016/S0169-7439(99)00047-7.
- [53] I. T. Jolliffe, *Principal Component Analysis*. New York, NY: Springer-Verlag New York Inc, 2002. [Online]. Verfügbar unter: <http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10047693>
- [54] A. M. Bartkowiak und R. Zimroz, „Probabilistic Principal Components and Mixtures, How This Works“ in *Lecture Notes in Computer Science, Computer Information Systems and Industrial Management*, K. Saeed und W. Homenda, Hg., Cham: Springer International Publishing, 2015, S. 24–35, doi: 10.1007/978-3-319-24369-6\_2.
- [55] H. Slatky, *Algorithmen zur richtungsselektiven Verarbeitung von Schallsignalen: Die Realisierung eines binauralen Cocktail-Party-Processor-Systems*. Zugl.: Bochum, Univ., Diss. : 1993. Düsseldorf: VDI-Verl., 1994.
- [56] A. Hyvärinen, J. Karhunen, E. Oja und S. Haykin, *Independent Component Analysis*. New York, USA: John Wiley & Sons, Inc, 2001.

- [57] R. Fisher, „The use of multiple measurements in taxonomic problems“, *Annals of Eugenics*, Jg. 7, Nr. 2, S. 179–188, 1936, doi: 10.1111/j.1469-1809.1936.tb02137.x.
- [58] P. Xanthopoulos, P. M. Pardalos und T. B. Trafalis, *Robust Data Mining*. New York, NY: Springer New York, 2013.
- [59] S. S. Haykin, *Neural networks: A comprehensive foundation*, 2. Aufl. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 1999.
- [60] C.-C. Chang und C.-J. Lin, „LIBSVM“, 2011, doi: 10.1145/1961189.1961199.
- [61] B. E. Boser, I. M. Guyon und V. N. Vapnik, „A training algorithm for optimal margin classifiers“, 1992.
- [62] M. D. Buhmann, *Radial basis functions: Theory and implementations*. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2003. [Online]. Verfügbar unter: <http://www.loc.gov/catdir/samples/cam033/2002034983.html>
- [63] T. Baur, A. Schütze und T. Sauerwald, „Optimierung des temperaturzyklischen Betriebs von Halbleitersensoren“, *tm - Technisches Messen*, Jg. 82, Nr. 4, S. 187–195, 2015, doi: 10.1515/teme-2014-0007.
- [64] C. Schultealbert, T. Baur, A. Schütze, S. Böttcher und T. Sauerwald, „A novel approach towards calibrated measurement of trace gases using metal oxide semiconductor sensors“, *Sensors and Actuators B: Chemical*, Jg. 239, S. 390–396, 2017, doi: 10.1016/j.snb.2016.08.002.
- [65] C. Schultealbert, T. Baur, A. Schütze und T. Sauerwald, „Facile Quantification and Identification Techniques for Reducing Gases over a Wide Concentration Range Using a MOS Sensor in Temperature-Cycled Operation“ (eng), *Sensors (Basel, Switzerland)*, Jg. 18, Nr. 3, 2018, doi: 10.3390/s18030744.
- [66] M. Valsan, D. H. Sastry, K. B. s. Rao und S. L. Mannan, „Effect of strain rate on the high-temperature low-cycle fatigue properties of a nimonic PE-16 superalloy“, *MMTA*, Nr. 1, S. 159–171, 1994, doi: 10.1007/BF02646684.
- [67] G. Chai, P. Liu, N. Zhou und J. Frodigh, „Low and High Cycle Fatigue Behavior of Nickel-base Alloy at High Temperatures“, *Procedia Engineering*, S. 671–676, 2013, doi: 10.1016/j.proeng.2013.03.313.
- [68] S. Youssef, C. Zimmer, M. Kopp, K. Szielasko, M. Farajian, C. Eichheimer und M. Luke, „Trennung von Spannungs- und Gefügeeinflüssen in der zerstörungsfreien mikromagnetischen Werkstoffcharakterisierung zur Bewertung der Anlagensicherheit, StressLess Phase II: 200108-TW“ 200108-TW, 2020. [Online]. Verfügbar unter: <http://bibliothek.izfp.fhg.de/Berichte/2020/200108-TW.pdf>.

- 
- [69] D. P. Fairchild, B. D. Newbury, T. D. Anderson und N. S. Thirumalai, „Local Hard Zones in Sour Service Steels“ in *ASME 2019 38th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering*, Glasgow, Scotland, UK, 06092019, doi: 10.1115/OMAE2019-96593.
- [70] *DIN EN ISO 16859-1:2016-02, Metallische Werkstoffe - Härteprüfung nach Leeb - Teil 1: Prüfverfahren (ISO 16859-1:2015); Deutsche Fassung EN ISO 16859-1:2015*, Berlin.
- [71] *DIN 4863:2018-12, Zerstörungsfreie Prüfung - Prüfung von Hardspots an Blechen*, Berlin.
- [72] Rohmann GmbH, *ELOTESTPL500: Wirbelstrom Prüfgeräte und -Systeme*.
- [73] J. Walker, D. J. Thomas und Y. Gao, „Effects of shot peening and pre-strain on the fatigue life of dual phase Martensitic and Bainitic steels“, *Journal of Manufacturing Processes*, Jg. 26, S. 419–424, 2017, doi: 10.1016/j.jmapro.2017.03.010.
- [74] R. Joeckel, M. Stober und W. Huep, *Elektronische Entfernungs- und Richtungsmessung und ihre Integration in aktuelle Positionierungsverfahren*, 5. Aufl. Heidelberg: Wichmann, 2008.
- [75] Fraunhofer IZFP, *M3Infekt*. [Online]. Verfügbar unter: [https://www.izfp.fraunhofer.de/de/technologien/Forschungsleistungen\\_COVID-19/M3Infekt.html](https://www.izfp.fraunhofer.de/de/technologien/Forschungsleistungen_COVID-19/M3Infekt.html) (Zugriff am: 25. Juli 2021).
- [76] Fraunhofer IZFP, *El-Peacetolero*. [Online]. Verfügbar unter: [https://www.izfp.fraunhofer.de/de/technologien/vorhaben/El\\_Peacetolero.html](https://www.izfp.fraunhofer.de/de/technologien/vorhaben/El_Peacetolero.html) (Zugriff am: 25. Juli 2021).
- [77] A. Holzinger, „Explainable AI (ex-AI)“, *Informatik Spektrum*, Jg. 41, Nr. 2, S. 138–143, 2018, doi: 10.1007/s00287-018-1102-5.