GEFÖRDERT VOM

Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Schlussbericht

Verbund: 05M2020 - OptProDat

Zuwendungsempfänger:	Technische Universität Dresden
Projektleitung:	Prof. Dr. Andreas Fischer
E-Mail:	andreas.fischer@tu-dresden.de
Förderkennzeichen:	05M20ODA
Förderzeitraum:	01.04.2020 - 30.11.2023
Zuwendung:	283.476,00 €
Projektträger:	Projektträger DESY
Zusätzlicher Kontakt:	Nico.Strasdat@tu-dresden.de
Zusätzlicher Name:	Nico Strasdat

Genutzte Großgeräte:	**Labor**	**Gerät**	**Experiment**

Diplomarbeiten:	0
Dissertationen:	1
Habilitationen:	0
Referierte Publikationen:	0
Andere Veröffentlichungen:	0
Patente:	0
Bachelorarbeiten:	0
Masterarbeiten:	2
Staatsexamen:	0

Dieser Bericht wurde beim Projektträger über einen individuellen Online-Zugang vom Projektleiter eingereicht und am 30.05.2024 14:00 für eine Veröffentlichung freigegeben.

Schlussbericht

Zuwendungsempfänger:	Technische Universität Dresden
Projektleitung:	Prof. Andreas Fischer
Verbund:	05M2020 – OptProDat Optimierung von Produktionsprozessen durch automatisierte Modellierung auf der Basis von Prozessdaten
Thema:	05M20ODA – Teilvorhaben 1 Datengetriebene Generierung von Modellen und Sensitivitätsanalyse für Produktionsprozesse

Zusammenfassung

Im Rahmen des Projekts wurden Ansätze für die datengetriebene Generierung von Modellen entwickelt und untersucht, die den Zusammenhang zwischen (überwiegend automatisch erfassten) Prozessgrößen und einem vom Anwender festgelegten Qualitätsmaß erfassen sollten.

Die vom Praxispartner während der Produktion erfassten Prozessdaten lagen in Form von strukturierten Textdateien vor und konnten mit Hilfe von angepassten Datenpipelines für die weitere Datenverarbeitung nutzbar gemacht und mit den zugehörigen Qualitätsdaten verknüpft werden. Es wurden Versuche unternommen, die gegebene Datenmenge mit Methoden des unüberwachten Lernens zu behandeln und Strukturen automatisiert zu erfassen. Aufgrund der unzureichenden Datenlage musste dieser Ansatz jedoch verworfen und durch eine direktere Modellierungsstrategie ersetzt werden. So wurden letztlich durch einige prozessspezifische Datentransformationen für jeden erfassten Datensatz eine Menge von Kenngrößen extrahiert, die die Grundlage für die anschließende Modellbildung und -interpretation bildeten. Um die problemspezifischen Gegebenheiten adäquat zu berücksichtigen, wurden bekannte Modellierungsmethoden theoretisch verallgemeinert, teilweise erweitert und angepasst praktisch implementiert.

So lagen zum Beispiel in der Zielgröße des Modells (gemessene Anzahl von Teilen mit unzureichender Güte je Prozessablauf) jeweils ganze Zahlen vor, die in einem festen Bereich variieren können, sodass eine einfache Modellierung als Klassifikations- oder Kleinste-Quadrate-Problem unbefriedigend ist. Für die konkrete Anwendung wurde daher z.B. die Idee von Support Vector Machines (bzw. Kernel Machines) genutzt und für die Nutzung mit einem Poisson-Fehlerterm erweitert. Die resultierenden Trainingsprobleme wurden theoretisch hergeleitet und praktisch mit einem speziell angepassten Newton-Verfahren behandelt.

Die verwendeten Modellierungsansätze konnten für eine Sensitivitätsanalyse nutzbar gemacht werden, die einerseits eine effiziente Implementierung von ableitungsbasierten Hyperparameter-Optimierungsmethoden ermöglicht und andererseits eine Modellinterpretation erleichtert. Die Kombination dieser beiden Vorteile bildete die Grundlage für die automatisierte Identifikation von Prozessgrößen, die einen wesentlichen Einfluss auf die Produktqualität haben. Im Speziellen wurde ein Ablauf implementiert, in dem eine Vielzahl von Modellen mit unterschiedlichen Eingabedaten (d.h. zufällig ausgewählten Prozess-Kenngrößen) generiert wurden. Durch eine systematische und anwendungsspezifische Bewertung der erzeugten Modelle wurde insgesamt für jede einzelne Kenngröße eine geschätzte Wichtigkeit

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

(für die Erreichung einer besseren Modellgüte) und eine Einflusstendenz (bezogen auf die zu modellierende Prozessqualität) ermittelt. Letztere Größen (geschätzte Wichtigkeit und Einflusstendenz) konnten dann von den Projektpartnern zur praktischen Modellinterpretation und -bewertung genutzt werden.

Neben den im Rahmen des Projekts hauptsächlich zu entwickelnden Modellierungsmethoden wurde auch eine Reihe weiterer Ergebnisse erzielt, die die Arbeit von Projekt- und Anwendungspartnern erleichtern. Durch die automatisierte Aufbereitung der vorliegenden Daten war die einfache Visualisierung der Prozessdaten (auf unterschiedlichen Skalen) und deren Zusammenhänge zu den Qualitätsdaten möglich. Auch konnten einige Fehler in der Datenerfassung (z.B. falsch strukturierte Dateien) und -verfolgung (z.B. doppelt erfasste Prozesse) sowie grobe Ausreißer (z.B. degenerierte Prozessführungen) identifiziert und diskutiert werden. Dadurch war eine Rücksprache mit den Projektpartnern möglich, um die Modellbildung weiter zu verbessern. Außerdem wurde der zeitliche Prozessablauf und der Anlagenstatus visualisiert, wodurch der Anlagenbetreiber zusätzliche Einsichten erhalten könnte.

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

Bericht

1 Aufgabenstellung und Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Das grundlegende Ziel des Projekts war es, eine überwiegend **datengetriebene Modellierung** eines Zusammenhangs zwischen Prozessdaten und der zugehörigen erzielten Produktgüte (Ausschussquote) zu erreichen. Erzeugte Modelle sollten zur **Verbesserung der Produktionsprozesse** genutzt werden. Dies könnte zum Beispiel durch eine modellgeführte Anpassung der Prozessparameter zur **Stabilisierung** oder kosteneffizienteren Durchführung des Prozesses geschehen. Ebenfalls ist durch eine zeitnahe modellgestützte **Bewertung des laufenden Prozesses** eine frühzeitige **Fehlererkennung** und damit ein rechtzeitiger Abbruch möglich, der unnötige Kosten vermeiden kann. Darüber hinaus können Informationen aus erzeugten Modellen extrahiert werden, die die Notwendigkeit von Wartungsarbeiten erkennen lassen und somit dazu beitragen, Ausfallzeiten zu minimieren.

Als Ausgangspunkt für die Modellierung dienten die beim Anwendungspartner während der laufenden Produktion erfassten Prozessgrößen und die nachverfolgbar dokumentierten Daten der Qualitätskontrolle. Die Prozessdaten lagen in Form von Zeitreihen in **strukturierten Textdateien** vor. Da jeder Prozess in Teilprozessen auf mehreren Maschinen abläuft, wurden die Daten auch in mehreren Teilen mit unterschiedlichen Formaten bereitgestellt. Die erfassten Qualitätsdaten und Informationen über Wartungsereignisse lagen in Form von Exceltabellen vor. Die Datenmenge sollte im Verlauf des Projektes kontinuierlich erweitert werden.

Die durch den Anwendungspartner bereitgestellten Daten sollten zunächst in eine für die Modellbildung **nutzbare Form** überführt werden. Dazu gehören insbesondere das fehlertolerante bzw. -korrigierende Einlesen der Rohdaten und die Nachverfolgung entsprechender Qualitätsmessungen, um geeignete **Datensätze** (also Paare von Ein- und Ausgabedaten für das Modell) zu erzeugen und für die weitere Verwendung passend abzuspeichern. Anschließend sollten geeignete Methoden zur Aufbereitung und Extraktion von **charakteristischen Kenngrößen** aus den erfassten Zeitreihen angewendet werden, wobei insbesondere die Laufzeit der Verfahren und die Qualität der erzeugten Kenngrößen evaluiert werden sollte.

Auf Grundlage der so erzeugten Datensätze sollten verschiedene Ansätze zur **Modellbildung** hinsichtlich unterschiedlicher Kriterien (u.a. praktischer Rechenaufwand, erzielte Modellgüte, Möglichkeiten der Interpretierbarkeit bzw. detaillierter Analyse) verglichen werden. Da das Verhalten der meisten Modelle von einer Reihe von **Parametern** abhängt, sollte auch deren Einfluss und geeignete Wahl genauer untersucht werden. Zur Vorbereitung der **effizienteren Anwendung** und **Interpretierbarkeit** sollten die verwendeten Daten und die erzeugten Modelle außerdem reduziert werden. Zur Bewertung der erzielten Modellierungsergebnisse waren **anwendungsspezifische Gütemaße** zu konstruieren, die auch effizient ausgewertet werden können und ausschlaggebend für gezielte **Modellverbesserungen** sind. Im Laufe des Projekts sollten aus den erzeugten Modellen durch Anwendung von Sensitivitätsanalysen relevante Aussagen (z.B. über den Einfluss einzelner Prozessgrößen) extrahiert werden. Letztlich waren im Projekt Modellierungsansätze zu identifizieren, die praktisch realisierbar sind und (im Rahmen der gegebenen Möglichkeiten) hinreichend genaue Aussagen über den modellierten Zusammenhang ermöglichen.

Da der Produktionsprozess hinreichend komplex ist und einige Kenngrößen, die den Prozess wesentlich beeinflussen können, naturgemäß nicht erfasst werden (bzw. nicht erfasst werden können), kann nicht erwartet werden, dass die erzeugten Modelle einen exakten Zusammenhang widergeben.

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

2 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Das Problem der geeigneten Steuerung von Prozessen ist in Forschung und Anwendung wohl bekannt. Insbesondere im Gebiet des „Advanced Process Control“ (APC) werden dazu Methoden entwickelt. Ein wichtiger Vertreter dafür ist das sogenannte „Multivariable Model Predictive Control“ (MPC). Dabei werden Modelle verwendet, die den Zusammenhang zwischen Steuer- und Zielgrößen beschreiben, um komplexe Prozesse prädiktiv (d.h. vorausschauend) zu steuern.

Die häufig verfolgten Ansätze basieren auf einer möglichst genauen Modellierung der Zusammenhänge zwischen den Steuergrößen und den Zielgrößen. Falls möglich wird dabei auf konkrete **physikalisch-technische Modelle** [Ric1993] zurückgegriffen. Dabei ist eine detaillierte Kenntnis der physikalischen Zusammenhänge zwischen den Daten notwendig. Auf der anderen Seite werden angepasste **multivariate Regressionsmodelle** (z.B. lineare Modelle oder künstliche Neuronale Netze) verwendet, die eine bestimmte Struktur der Eingabedaten voraussetzen [QiB2003; Law2009].

In letzter Zeit werden immer häufiger Methoden vorgeschlagen, die auf „**Deep Learning**“ basieren. Die entwickelten Methoden versuchen dabei mit Hilfe von komplexen neuronalen Netzen (DNNs), die relevanten Eigenschaften der Eingabedaten indirekt beim Anpassen des Modells mitzubestimmen. Einen aktuellen Überblick über Probleme und Methoden in dem Bereich gibt der Artikel [WMZ2018]. Ein wesentlicher Nachteil dieses Ansatzes ist die **hohe Komplexität** der erzeugten Modelle. Damit verbunden sind hohe Rechenzeiten und eine mangelnde Interpretierbarkeit. Vor allem bei der Nutzung dieser Modelle zur Optimierung von Prozessen ist das ein wesentliches Hindernis. Unter den Begriff des Deep Learning fallen aber auch **variationelle Autoencoder für Zeitreihendaten**, die im Rahmen des Projekts zur Extraktion von relevanten Merkmalen untersucht werden sollten.

Ein wichtiges Problem bei der Erzeugung von datengetriebenen Modellen ist die Extraktion von wesentlichen Merkmalen aus den Daten. Die Vorgehensweise ist dabei abhängig vom verfolgten Modellierungsansatz. So werden zum Beispiel bei **Support Vector Machines** (SVMs) häufig manuell und in Abhängigkeit der konkreten Datenstruktur Featuremaps konstruiert, die diese Aufgabe übernehmen. Diese Vorgehensweise ist sehr zeitaufwendig und benötigt eine genaue Kenntnis der Datenstruktur. Ein Vorteil in der Herangehensweise liegt darin, dass das Verhalten der erzeugten Modelle in Abhängigkeit der Eingabedaten relativ leicht mit Hilfe einer Sensitivitätsanalyse untersucht werden kann. Außerdem ist es möglich mit geeigneten Ansätzen (z.B. **Hyperparameter-Optimierung** oder Reduced-Set SVMs) relevante Datensätze und zugehörige Eingabegrößen zu identifizieren. Methoden dieser Art wurden in der Vergangenheit vom Verbundpartner TUD entwickelt und in Industrieprojekten angewendet, siehe etwa [FLL2015].

Auf der anderen Seite gibt es eine Reihe von Modellierungsansätzen, die aufgrund ihrer Struktur besonders für eine **Interpretation** geeignet sind. Dazu gehören insbesondere lineare Modelle und Methoden, die auf Entscheidungsbäumen beruhen. Erstere sind durch die inhärente Nichtlinearität von Zusammenhängen in der Praxis nur sehr bedingt verwendbar, wobei die Erweiterung bestimmter Ideen, wie z.B. von verallgemeinerten linearen Modellen (GLMs), eine wichtige Rolle im Projekt (im Zusammenhang mit SVMs) gespielt haben. Für baumbasierte Regressionsmethoden sind einerseits performante Implementierungen (u.a. **XGBoost**) und andererseits Methoden zur Generierung von interpretierbaren Zusammenhängen, wie z.B. **SHAP** (SHapley Additive exPlanations), vorhanden und für praktische Anwendungen nutzbar. Hierbei ist meist eine hinreichend gute aber schwierige Wahl von Parametern notwendig, um sinnvolle Modelle zu erzeugen.

Mit Blick auf die praktische Seite der datengetriebenen Modellierung ist festzustellen, dass die Daten nur in textbasierten Dateien vorlagen und für die direkte Nutzung in vorgefertigten **Machine-Learning-Frameworks** eine Übertragung in **Datenbanken** oder **Datapipelines** notwendig ist.

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

Referenzen

[Ric1993] Richalet, J (1993), "Industrial applications of model based predictive control", *Automatica* 29 (5), 1251-1274.

[QiB2003] Qin, SJ and Badgwell, TA (2003), "A survey of industrial model predictive control technology", *Control Engineering Practice* 11 (7), 733-764.

[Law2009] Ławryńczuk, M (2009), "Neural Networks in Model Predictive Control", *Intelligent Systems for Knowledge Management*. Springer, Heidelberg, pp. 31-63.

[WMZ2018] Wang, J, Ma, Y, Zhang, L, Gao, RX, and Wu, D (2018), "Deep learning for smart manufacturing: Methods and applications", *Journal of Manufacturing Systems* 48 (C), 144-156.

[LWM2018] Li, J, Cheng, K, Wang, S, Morstatter, F, Trevino, RP, Tang, J, and Liu, H (2018), “Feature selection: A data perspective”, *ACM Computing Surveys (CSUR)*, 50 (6), 94:1-94:45.

[FLL2015] Fischer, A, Langensiepen, G, Luig, K, Strasdat, N, and Thies, T, (2015) “Efficient optimization of hyper-parameters for least-squares support vector regression”, *Optimization Methods and Software* 30 (6), 1095-1108.

3 Planung und Ablauf des Vorhabens sowie Kooperation mit Dritten

Das Projekt wurde in drei Arbeitspakete unterteilt und entsprechend durchgeführt:

- AP1: Datengewinnung und -import
- AP2: Modellbildung
- AP3: Modellverbesserung und Ergebnisbewertung

Die wesentliche Arbeitslast bei der Durchführung Projekt trugen die geförderten TUD und FEP, wobei sie durch den (assoziierten) Anwendungspartner unterstützt wurden (siehe Tabelle 1).

Einrichtung	Status	Kooperation
Technische Universität Dresden (TUD), Institut für Numerische Mathematik, Professur für Numerik der Optimierung	Universität, Koordinator	Anforderungsspezifikation in AP1 Diskussion Ergebnisse AP2 mit FEP Abstimmung Vorgehen in AP3 mit FEP
Fraunhofer-Institut für Organische Elektronik, Elektronenstrahl- und Plasmatechnik (FEP)	Forschungs-einrichtung	Koordination (Zu)Arbeiten in AP1 Iterative Beratung von TUD in AP2 Iterative Unterstützung von TUD in AP3
Siegert Thinfilm Technology GmbH (S-TFT)	Industrie (assoziiert)	Zuarbeit in AP1 (Bereitstellung der Daten) Unterstützung in AP3

Tabelle 1: Verbundpartner und Kooperation

Die Einordnung des Teilvorhabens sowie die Arbeitsteilung zwischen den Projektpartnern und die inhaltliche Abfolge der wichtigsten Arbeiten ist in Abbildung 2 dargestellt.

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

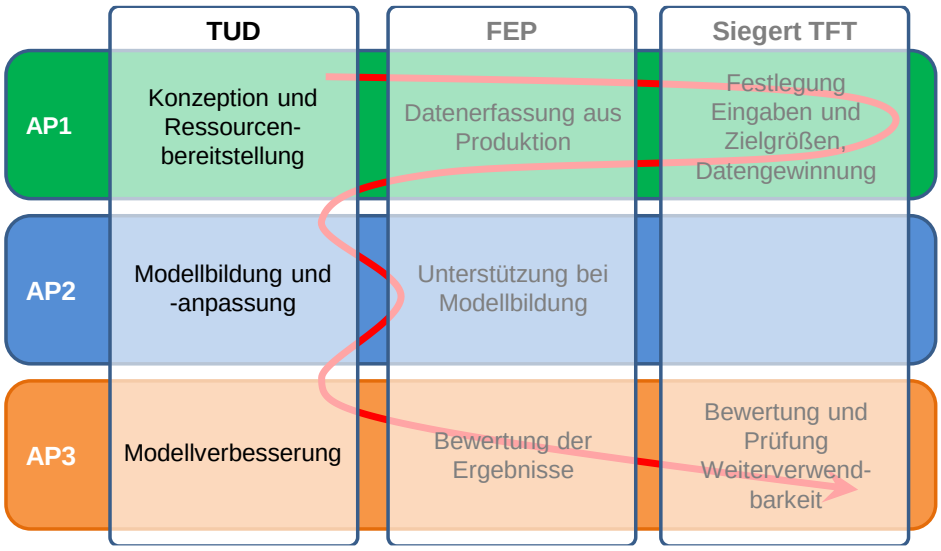

Abbildung 1: Arbeitsteilung der Projektpartner in den Arbeitspaketen, die rote Pfeillinie symbolisiert die inhaltliche Abfolge der wichtigsten Arbeiten zwischen den Projektpartnern

Der Zuwendungsempfänger ist in allen Arbeitspaketen hauptverantwortlich oder mitarbeitend tätig.

4 Verwendung der Zuwendung (wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises, z. B. Investitionen, Personalmittel)

Die Zuwendungen wurden ausschließlich für Personalmittel verwendet. Die ursprünglich geplanten Dienstreisen wurden aufgrund der Corona-Pandemie nicht durchgeführt und durch Video-Konferenzen ersetzt.

5 Erzielte Ergebnisse mit Gegenüberstellung der vereinbarten Ziele

Die im Verbundprojekt geplanten Aktivitäten wurden auf der Basis von Arbeitspaketen mit zugehörigen Arbeitsschritten und Zielen realisiert. Die jeweiligen Ziele eines Arbeitspakets mit Beteiligung von Teilvorhaben 1 und die dabei erreichten Ergebnisse werden in der folgenden Übersicht kurz zusammengefasst.

AP 1.1: Datengewinnung und –import: Vorbereitung und Konzeption
Recherche über Methoden zur datengetriebenen Modellierung, die für den betrachteten Anwendungsfall geeignet sind; praktische Untersuchung von Verfahren und Software zur automatischen Aufbereitung von Daten mit der gegebenen Struktur
Es existieren zahlreiche Methoden und Frameworks, die eine datengetriebene Modellbildung aus einer gegebenen (ausreichend aufbereiteten) Datenmenge ermöglichen. Aus unterschiedlichen Gründen sind diese nicht unmittelbar anwendbar und benötigen jeweils genaue Vorbereitungen der Daten bzw. Anpassungen der Methodik. Eine (gänzlich) automatische Aufbereitung der Daten wurde relativ früh im Projektverlauf verworfen, da dafür eine homogenere Datenstruktur notwendig gewesen wäre. Durch die spätere Implementierung von anwendungsspezifischen Aufbereitungsabläufen konnte jedoch automatisiert eine Struktur erreicht werden, die für die weitere Modellbildung geeignet ist. Insbesondere können für die aufbereiteten Daten vorhandene Open-Source-Programmpakete zur Extraktion von Kenngrößen aus Zeitreihen (wie z.B. tsfresh oder tsfel) und Programmbibliotheken zur Modellbildung (wie scikit-learn oder Tensorflow) angewendet werden.

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

AP 1.5: Datengewinnung und –import: Ressourcenbereitstellung
Einrichtung von Hardware und Software zur Datenverarbeitung und -speicherung; Bereitstellung geeigneter Schnittstellen zum Datenaustausch zwischen den Partnern
Auf der vorhandenen Rechentechnik wurden auf Basis von Conda-Umgebungen die notwendigen Software-Pakete und Bibliotheken eingerichtet, die für die Datenverarbeitung und Modellbildung notwendig sind. Dabei war das Ziel, die Umgebungen reproduzierbar zu gestalten, sodass im Projektverlauf auch spontan auf leistungsfähigere Hardware zurückgegriffen werden konnte. Der Daten- und Ergebnisaustausch erfolgte auf den internen Cloud-Umgebungen der Projektpartner.

AP 2.1: Modellbildung: Datenaufbereitung
Entwicklung von Methoden zur Aufbereitung der erfassten heterogenen Daten und zur Extraktion charakteristischer Eigenschaften; Implementierung der Verfahren bzw. Anpassung/Kombination verfügbarer Softwarelösungen; Anwendung der Verfahren auf die gegebenen Daten und Evaluierung der Ergebnisse hinsichtlich Güte und Laufzeit
Die vorhandenen Datenquellen wurden hinsichtlich ihrer Struktur und Zusammenhänge analysiert. Dabei wurden die erwarteten Dateiformate als gemeinsame Schnittstelle für den Datenaustausch definiert. Außerdem wurde ein Verfahren entwickelt, das unterschiedliche Datenquellen zusammenfügt, um die Prozessdaten mit den zugehörigen Qualitätsmaßen in Verbindung zu bringen und damit Datensätze zu generieren, die für die spätere Modellbildung essentiell sind. Im Zuge der Aufbereitung wurden Methoden implementiert, die einfache Fehler (z.B. unerwartete Strukturen oder Erfassungsfehler) erkennen und soweit wie möglich korrigiert, um eine möglichst große Menge an Daten nutzbar zu machen. Außerdem wurden bestimmte Prozessgrößen manuell aufbereitet (z.B. wurden Werte von Zählern durch deren Differenz ersetzt, um die Anzahl der Ereignisse pro Zeitschritt direkt zu repräsentieren). Zur Extraktion von charakteristischen Merkmalen wurden Versuche mit variationellen Autoencodern durchgeführt. Da die Prozessdaten in Zeitreihen vorlagen und je nach Prozessgröße eine andere Charakteristik (z.B. Datentyp und Fehlerverteilung) vorliegt, war die einfache Anwendung dieses Ansatzes nicht erfolgreich. Außerdem zeigte sich, dass die Laufzeit zum Training von Autoencodern in dem konkreten Anwendungsfall nicht praktikabel ist. Entsprechend trainierte Modelle konnten keine hinreichend gute Anpassung an die Daten erreichen, sodass vertrauenswürdigen Ergebnisse nicht erwartet werden konnten. Erste Versuche zur Modellbildung mit den so extrahierten Merkmalen zeigten keinen Erfolg. Neben unterschiedlichen Charakteristiken einzelner Prozessdaten wurden auch unterschiedlich lange Zeitreihen in den Datensätzen festgestellt. Damit eine gezieltere Modellbildung ermöglicht wird, wurden die Daten zunächst auf ein gemeinsames Zeitfenster (d.h. auf den effektiven Prozess) eingeschränkt. Diese Einschränkung sollte im Projektverlauf abgeschwächt werden, was leider aufgrund der Datenqualität nicht gelang. Aus den so aufbereiteten Daten wurden letztlich charakteristische Kenngrößen (Mittelwerte, Standardabweichungen, Quantile, etc.) extrahiert, die die Grundlage der Modellgenerierung bildeten. Die Auswahl der zu extrahierenden Kenngrößen wurde auch über den Projektverlauf hinweg (u.a. motiviert durch die Erkenntnisse aus der Modellbewertung) weiter ergänzt (siehe auch AP 3.3 unten).

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

AP 2.2: Modellbildung: Modellanpassung
Verwendung geeigneter datengetriebener Methoden zur Erzeugung von Modellen auf Basis der gegebenen Prozessdaten; Bewertung der generierten Modelle anhand von gängigen Gütekriterien wie Trainings- und Testfehler; erste Bewertung der Modelle hinsichtlich der Möglichkeit und Effizienz einer Sensitivitätsanalyse
Es wurden unterschiedliche Ansätze zur datengetriebenen Modellbildung verfolgt und nach deren Praktikabilität und Performance bewertet. Nachdem die initial zur Verfügung gestellte Datenmenge aufbereitet wurde, konnte festgestellt werden, dass die tatsächliche Anzahl der Datensätze relativ gering war und somit Methoden bevorzugt werden sollten, die besonders dateneffizient sind. Gleichermaßen sollten die erzeugten Modelle eine Interpretierbarkeit und Reproduzierbarkeit gewährleisten. Lineare Modelle, die diese beiden letzten Eigenschaften natürlicherweise haben, sind aufgrund der zu erwartenden nichtlinearen Zusammenhänge in den Daten nicht geeignet und wurden nur als einfache Referenz herangezogen. Modelle, die auf künstlichen neuronalen Netzen basieren, werden typischerweise mit randomisierten Methoden trainiert, sodass die Reproduzierbarkeit nur bedingt gegeben ist. Da das Ergebnis des Trainings bei diesen Ansätzen weder eindeutig noch deterministisch ist, birgt eine Interpretation der generierten Modelle eine gewisse Unsicherheit. Ähnliches gilt für viele Ansätze, die auf baumbasierten Modellen (Regressionsbäume oder -wälder bzw. Boosted Trees) basieren. Neben diesem Problem konnte man in dem betrachteten Anwendungsfall auch eine starke Abhängigkeit von der Wahl bestimmter Parameter (z.B. Verzweigungsstrategie, Baumtiefe und -anzahl) feststellen, sodass es insgesamt schwierig ist, Unter- und Überanpassung zu vermeiden. Die an Anforderungen, die an die Modelle gestellt werden, konnten praktisch durch unterschiedliche Formulierungen von Support Vector Machines (SVMs) in gewissen Grenzen erfüllt werden. Daher wurden diese Ansätze im Verlauf des Projektes genauer untersucht. Als Herausforderungen bei der Umsetzung wurden die Parameterwahl und die Gewichtung der Merkmale der Eingabedaten identifiziert.

AP 2.3: Modellbildung: Bewertung der Modellgüte
Entwicklung von problemspezifischen Gütekriterien zur Bewertung von gegebenen Modellen; Bewertung der erzeugten Modelle hinsichtlich der vorgeschlagenen Gütemaße; Bestimmung der Parameter, die die Güte der erzeugten Modelle wesentlich beeinflussen; Interpretation/Analyse des Zusammenhangs zwischen Eingabedaten und Zielgrößen
Auch für die Bewertung der Modellgüte ist die relativ kleine Anzahl an Datenpaaren problematisch, da typische Validierungsmethoden auf einer (eventuell mehrfachen) Aufteilung der Gesamtdatenmenge beruhen. Im gegebenen Anwendungsfall konnte außerdem festgestellt werden, dass einfache Kreuzvalidierungsfahren keine vertrauenswürdigen Ergebnisse liefern, da Daten, die in geringem zeitlichem Abstand aufgenommen wurden, eine starke systematische Ähnlichkeit aufweisen. Somit mussten die Datensätze zur Bewertung so aufgeteilt werden, dass ähnliche Daten jeweils nur für das Training oder die Validierung verwendet werden. Eine natürliche Aufteilung der Datenmenge ist durch die (manuell erfassten) Wartungsintervalle gegeben, womit eine angepasste Kreuzvalidierung implementiert werden konnte, die die Daten blockweise berücksichtigt. Zur Validierung der erzeugten Modelle wurde neben dem üblichen Kleinste-Quadrate-Fehler auch ein Fehlermaß (Likelihood) verwendet, das auf einer Poisson-Verteilung der Ausgabedaten basiert

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

und somit theoretischer besser zur Anwendung passt, da die Zielgröße des Modells eine (diskrete) Ausfallhäufigkeit ist.

Weiterhin wurde das speziell konstruierte Gütemaß in zuvor entwickelte Methoden zur Hyperparameter-Optimierung für SVMs integriert. Sofern nur wenige Hyperparameter in der Optimierung behandelt werden, kann davon ausgegangen werden, dass die (durch die Optimierung erzielte) geschätzte Modellgüte hinreichend aussagekräftig ist. Das so kombinierte Trainings- und Validierungsverfahren ermöglicht insbesondere eine signifikante Reduktion der Gesamtlaufzeit.

AP 2.4: Modellbildung: Daten- und Modellreduktion

Verwendung von geeigneten Methoden zur Reduktion von Modellen unter (näherungsweiser) Erhaltung der Modellgüte; ggf. Anpassung/Rekombination der verwendeten Verfahren zur Reduktion der erzeugten Modelle; Reduktion der erzeugten Modelle mit dem Ziel der verbesserten Interpretationsfähigkeit

Zur Vereinfachung der Modellbildung wurden zunächst von den Projektpartnern die erfassten Prozessgrößen nach deren erwarteten Einfluss auf die Zielgröße gruppiert. Somit konnten zum Beispiel Teile der Daten weggelassen werden, die offensichtlich keinen Einfluss auf die Modellbildung haben sollen. Im späteren Verlauf des Projekts wurde diese Vorabreduktion wieder aufgehoben, weil mit dem erweiterten Modellbildungsansatz die Datenreduktion anhand von erwarteter Merkmalswichtigkeit automatisch erfolgen sollte.

Um dies zu realisieren, wurde ein Verfahren implementiert, das die Wichtigkeit einzelner Merkmale durch wiederholte Modellbildung für unterschiedliche Gruppen von Eingabedaten schätzt. Dazu wurden für jeden Trainings- und Validierungsdurchlauf (mittels SVMs mit optimierten Hyperparametern) eine Menge von Merkmalen zufällig ausgewählt (Sampling) und die Modelle wurden hinsichtlich ihrer Performance (d.h. Validierungsgüte bzw. relative Fehlerreduktion) und dem Einfluss einzelner Merkmale ausgewertet. Die pro Merkmal und Sampling-Durchlauf ermittelten Ergebnisse wurden anschließend aggregiert, übersichtlich zusammengefasst und interpretierbar für die Auswertung durch die Projektpartner aufbereitet.

AP 3.3: Modellverbesserung und Ergebnisbewertung: Modellverbesserung

Entwicklung von Strategien zur Verbesserung der Modelle hinsichtlich der berechneten Güte unter den gegebenen praktischen Einschränkungen (z.B. Laufzeit und Vorhersagegenauigkeit); Untersuchung von Methoden zur Optimierung der Güte von Modellen bei deren Erzeugung; der in den APs 3.1 und 3.2 entwickelten Bewertungen zur gezielten Steuerung des Modellierungsprozesses

Durch die Bewertung der Ergebnisse (aus prozesstechnischer und physikalischer Sicht), die durch die Projektpartner vorgenommen wurde, konnten Verfeinerungen bei der Datenaufbereitung und der Modellbildung implementiert werden.

Wie schon unter AP 2.1 berichtet, war eine erweiterte manuelle Aufbereitung der Daten (insbesondere der zeitliche Zuschnitt auf den effektiven Prozess und die Bearbeitung einzelner Prozessgrößen) notwendig, um die Modellbildung zu verbessern. Außerdem wurden neben den einfachen Kenngrößen (wie Mittelwerte und Quantile) auch ausgewählte Fit-Ansätze für den zeitlichen Verlauf von Prozessgrößen angewendet, deren Parameter den Prozess besser charakterisieren sollten und als mögliche Merkmale zur Modellbildung genutzt wurden.

Ebenso wurden Ideen entwickelt, weitere Kenngrößen des Prozesses zu ermitteln und der Modellbildung zuzuführen. Unter anderem konnten die Metadaten (insbesondere die Zeitstempel) der Prozessdaten verwendet werden, um den Prozessablauf (inklusive Teilprozessdauer und Warte- oder

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

Leerlaufzeiten) zu rekonstruieren und die Anlagehistorie (insbesondere die Vorläuferprozesse) zu identifizieren. Die Ergänzung der so zusätzlich generierten Kenngrößen erzielte leider keine signifikante Verbesserung der Modelle.

Andererseits sollten auch weitere Datenquellen wie z.B. die Substratqualität und eine verfeinerte Erfassung der Produktqualitätsmaße in der Endmessung zur Verbesserung der Modelle genutzt werden. Diese Ansätze konnten aber aus unterschiedlichen Gründen nicht durch den Anwendungspartner umgesetzt werden.

Neben den Anpassungen, die hauptsächlich die Datenquellen betreffen, wurde auch der Modellierungsansatz modifiziert. Am Anfang des Projekts basierte die Modellbildung auf Least-Squares SVMs, die theoretisch eine Normalverteilung der Zielgröße (bzw. der erreichten Modellierungsfehler) voraussetzen, aber praktisch sehr einfach handhabbar sind. Da die Normalverteilungsannahme aufgrund der diskreten Zielgröße (Fehleranzahl je Charge mit starker Häufung bei Null) naturgemäß verletzt ist, wurden die Modelle angepasst. Dazu wurden beim Ansatz von SVMs (oder allgemeiner: Kernel Machines) die Verlustfunktionen durch einen Maximum-Likelihood-Ansatz ersetzt. Somit ergab sich gewissermaßen eine Verallgemeinerung von GLMs (hinsichtlich der Nichtlinearität), für die eine effiziente Trainingsmethode auf Basis des Newton-Verfahrens entwickelt wurde. Für den konkreten Anwendungsfall wurde anschließend eine Poisson-Verteilung der Zielgröße angenommen. Numerische Instabilitäten beim Trainingsprozess, die zunächst zu Problemen bei der Modellaggregation führten, wurden mithilfe einer Ersetzung des Mittelwerts durch den Median weitestgehend behoben.

AP 3.4: Modellverbesserung und Ergebnisbewertung: Prüfung der Ansätze bzgl. Weiterverwendung

Bewertung der generierten Modelle hinsichtlich der geplanten Weiterverwendung; Prüfung der Übertragbarkeit des Ansatzes auf ähnliche Probleme

Die Weiterverwendung der entwickelten Methoden zur Datenaufbereitung und Modellbildung sowie deren Übertragung auf ähnliche Anwendungsprobleme wurde vorbereitet. Die Anpassung der Ansätze für andere Probleme ist durchaus möglich, sofern der Teil der manuellen Datenaufbereitung jeweils problemspezifisch umgesetzt wird.

Für die Projektpartner werden die implementierten Methoden (insbesondere die angepasste Datenaufbereitung, die einfache Datenanalyse mit Ausreißererkennung, die Visualisierung von Prozessgrößen und deren Abhängigkeiten sowie die Modellbildung, -aggregation und -auswertung) zugänglich gemacht.

6 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Alle durchgeführten Arbeiten waren zur Erreichung der vereinbarten Ziele notwendig und erfolgten im angemessenen Rahmen.

Die geplanten Personalansätze wurden im Wesentlichen eingehalten, wobei bei einzelnen Arbeitspaketen keine strikte Trennung der Arbeitsschritte erfolgte, damit die Projektziele insgesamt besser verfolgt werden konnten. So wurden z.B. inhaltliche Punkte, die ursprünglich in den APs 2.2 (Modellanpassung) und 2.3 (Bewertung der Modellgüte) geplant waren, auch in AP 3.3 (Modellverbesserung) weiterverfolgt.

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

7 Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die angeeigneten bzw. erweiterten Kompetenzen in der Datenaufbereitung, Datenanalyse, Modellbildung und -interpretation bei den Projektpartnern bilden eine sehr gute Grundlage für weitere Kooperationen in Industrieprojekten.

Viele der speziell für die Datenstrukturen des Anwendungspartners implementierten Methoden zur Datenerfassung, -aufbereitung und -visualisierung sowie die einfache Fehlererkennung kann für die interne Analyse der Produktionsprozesse weiterverwendet werden. Mit gewissen Einschränkungen sind die Verfahren auch vom Verbundpartner weiter nutzbar.

Die grundlegenden mathematischen Erweiterungen der Modellbildung (insbesondere die entwickelten Kernel Machines mit Maximum-Likelihood-Ansatz) und die anpassten Methoden für das Training und die Hyperparameter-Optimierung sind in allgemeiner Form für gewisse Anwendungen des maschinellen Lernens interessant und sollen als solche veröffentlicht werden. Dazu gehören sowohl die theoretischen Grundlagen als auch die im Rahmen des Projekts entstandenen Implementierungen der Modelle.

In ähnlicher Weise soll der Sampling-Ansatz zur Identifikation von (für die datengetriebene Modellbildung) relevanten Eingabegrößen in allgemeinerer Form der Öffentlichkeit zugänglich gemacht werden, um eine Weiternutzung zu vereinfachen.

8 Während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordenen Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Bei der geplanten Literaturrecherche über für den Anwendungsfall verwendbare Ansätze wurden Software-Frameworks identifiziert, die z.B. zur effizienten Datenverarbeitung und der Extraktion von Kenngrößen aus Zeitreihen genutzt werden konnte. Bezüglich des geplanten Vorhabens der datengetriebenen Modellgenerierung und der praktischen Interpretation der Ergebnisse sind keine für das Projekt wesentliche Fortschritte bekannt geworden.

9 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse

9.1 Referierte Publikationen (z. B. in Fachzeitschriften oder -büchern und referierte Konferenzproceedings)

- keine

9.2 Andere Veröffentlichungen (z. B. Konferenzbeiträge wie Vorträge und Poster, unreferierte Proceedings, Conference Notes)

- Aktive Teilnahme und Erfahrungsaustausch beim „Stammtisch vorausschauende Wartung“ der Smart Systems Hub GmbH

9.3 Abschlussarbeiten (Bachelor, Master, Diplom, Staatsexamen, Promotion, Habilitation)

- Dissertation „Duality, Derivative-Based Training Methods and Hyperparameter Optimization for Support Vector Machines“ von Nico Strasdat, 10/2023
- Masterarbeit „Genetischer Algorithmus und Boruta zur Featureselection in Regressionssettings“ von Julian Stein, 08/2023
- Masterarbeit „Eine Anwendung von Variational Autoencodern auf Zeitreihendaten“ von Jannis Eichenberg, 11/2021

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

Kurzbericht

- öffentlich -

Zuwendungsempfänger:	Technische Universität Dresden
Projektleitung:	Prof. Dr. Andreas Fischer
Verbund:	05M2020 – OptProDat Optimierung von Produktionsprozessen durch automatisierte Modellierung auf der Basis von Prozessdaten
Thema:	05M20ODA – Teilvorhaben 1 Datengetriebene Generierung von Modellen und Sensitivitätsanalyse für Produktionsprozesse

1. Ziel und Inhalt des Projektes

Das Ziel des Verbundprojektes ist es, eine Methode für die Erzeugung von Modellen zu entwickeln, die den Zusammenhang zwischen den Prozessdaten (Steuerungs- und Messgrößen) eines industriellen Produktionsprozesses und den Eigenschaften des Produktes (Produkt-Messgrößen, Zielgrößen) abbilden. Dabei sollen möglichst wenige Informationen über die konkrete Struktur und die physikalische Interpretation oder technische Bedeutung der Daten vorausgesetzt werden, um eine allgemeine Herangehensweise an die Problemstellung zu entwickeln.

Die erzeugten Modelle sollen den Zusammenhang zwischen den heterogenen Steuer- und Messgrößen (Eingabedaten) und den Zielgrößen möglichst genau wiedergeben. Dies ist insbesondere für die Vorhersage von Wartungsintervallen wichtig. Außerdem sollen die Modelle eine Sensitivitätsanalyse zulassen, mit deren Hilfe Rückschlüsse auf den Einfluss der Steuerungsgrößen gezogen werden können. Mit diesem Ansatz soll es ermöglicht werden, den Produktionsprozess vorausschauend zu optimieren.

2. Ablauf und Ergebnisse des Vorhabens

Das Projekt wurde in drei Arbeitspakete unterteilt und entsprechend durchgeführt:

- AP1: Datengewinnung und -import
- AP2: Modellbildung
- AP3: Modellverbesserung und Ergebnisbewertung

Die wesentliche Arbeitslast bei der Durchführung Projekt trugen die geförderten TUD und FEP, wobei sie durch den (assoziierten) Anwendungspartner unterstützt wurden (siehe Tabelle 1).

Einrichtung	Status
Technische Universität Dresden (TUD), Institut für Numerische Mathematik, Professur für Numerik der Optimierung	Universität, Koordinator
Fraunhofer-Institut für Organische Elektronik, Elektronenstrahl- und Plasmatechnik (FEP)	Forschungseinrichtung
Siegert Thinfilm Technology GmbH (S-TFT)	Industrie (assoziiert)

Tabelle 1: Verbundpartner und Kooperation

Im Rahmen des ersten Arbeitspakets wurden die für die Modellbildung notwendigen vorbereitenden Maßnahmen durchgeführt. Es wurden verfügbare Programme und Software-Bibliotheken hinsichtlich ihrer Nutzbarkeit für die betrachtete Anwendung untersucht und gemeinsame Schnittstellen für einen praktikablen Datenaustausch geschaffen.

Im zweiten Arbeitspaket, das den Hauptaufwand des Projekts umfasste, mussten zunächst die aus der Praxis gegebenen Daten für eine effektive Modellbildung vorbereitet werden. Dazu wurden Abläufe implementiert, um die vom Anwender erfassten und zur Verfügung gestellten Prozessdaten automatisiert aufzubereiten. Zusätzlich wurden Methoden entwickelt, um eine Zuordnung der unabhängig erfassten Wartungs- und Qualitätsdaten zu den Prozessdaten herzustellen und um einfache Fehler in der Struktur der Daten zu erkennen und zu behandeln. Außerdem wurden unterschiedliche Ansätze zur Extraktion von charakteristischen Kenngrößen aus den Prozessdaten (heterogene Zeitreihen) untersucht. Aufgrund der relativ geringen Anzahl an erfassten Datensätzen mussten die Eingabedaten problemspezifisch aufbereitet werden, um sie homogener zu machen und somit deren Aussagekraft zu verbessern.
Zur datengetriebenen Erzeugung von Modellen wurden unterschiedliche Ansätze untersucht und hinsichtlich ihrer Vorhersagegenauigkeit und Interpretierbarkeit bewertet. Als besonders geeignet stellten sich (speziell angepasste) Support Vector Machines (SVMs) heraus, die dateneffizient arbeiten, reproduzierbare Modell liefern, eine relativ robuste Hyper-parameteroptimierung zulassen und eine Sensitivitätsanalyse ermöglichen, sodass auch die Interpretierbarkeit gewährleistet werden kann.
Für die Bewertung der erzeugten Modelle war es notwendig, ein Gütemaß zu entwickeln, das durch die konkrete Anwendung motiviert ist. Dazu wurden durch Wartungsintervalle definierte Partitionen der Datensätze betrachtet und zugehörige Fehlermaße entsprechend ausgewertet. Neben dem üblichen Kleinste-Quadrate-Fehler wurde auch die Likelihood-Funktion bzgl. einer Poisson-Verteilung verwendet, die die diskrete Natur der Zielwerte der Modelle (Anzahl der Fehler bei der Produktion) besser beachtet.
Die effiziente Modellbildung wurde ebenfalls durch eine Reduktion der Modellansätze erreicht. Das heißt, einzelne Teilmodelle wurden jeweils auf einer eingeschränkten Auswahl an möglichen Kenngrößen gebildet und mittels des zuvor definierten Gütemaßes bewertet. Damit konnte jeder Kenngröße sowohl eine geschätzte Wichtigkeit (aus der mittleren Modellgüte) als auch ein tendenzieller Einfluss auf die Zielgröße (durch eine Sensitivitätsanalyse) zugeordnet werden. Die so erhaltenen Resultate bildeten die Grundlage für die Diskussion der Ergebnisse aus praktischer Sicht durch die Projektpartner.

Durch die stetige Rückkopplung der Partner konnten im Rahmen des dritten Arbeitspakets Modellverbesserungen vorgenommen werden und die Ansätze weiter für deren praktische Anwendung vorbereitet werden. Dabei wurden insbesondere die Methoden zur Datenaufbereitung weiter verfeinert, um die Eingabedaten für das Modell zu verbessern und weitere Kenngrößen nutzbar zu machen. Außerdem wurde das für die Bewertung der Modellgüte eingeführte Gütemaß (die Poisson-Likelihood-Funktion) auch auf den Modellierungsansatz übertragen und die Modellbildung entsprechend angepasst.

3. Darstellung der wesentlichen Ergebnisse und deren konkreter Nutzen sowie ggf. die Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen

Die beim Anwendungspartner S-TFT in Form von Textdateien vorliegenden Daten wurden für das Projekt weitestgehend automatisiert aufbereitet und mit den zugehörigen Qualitätsdaten und den Daten über Wartungsereignisse verknüpft. Zur korrekten Erfassung der Zusammenhänge und der an den Prozess (bestehend aus mehreren Teilprozessen) angepassten Aufbereitung der Prozessdaten waren regelmäßige Absprachen mit dem Anwendungspartner und dem FEP notwendig. Die entworfenen Routinen zur

Datenaufbereitung, zur einfachen Fehlererkennung innerhalb der Datensätze und zur Visualisierung von bestimmten Zusammenhängen und Prozessabläufen wurden in enger Absprache mit den Projektpartnern entwickelt.
Sowohl der Verbundpartner als auch der Anwendungspartner kann die Visualisierung der Daten aus den Teilprozessen zur Analyse und Fehlererkennung weiternutzen. Eine Übertragung der Prozeduren zur Datenverarbeitung auf andere Anlagen- bzw. Prozessstrukturen kann mit wenig Aufwand realisiert werden.

In einer Reihe von Experimenten wurde eine datengetriebene Erzeugung von variationellen Autoencodern mit den gegeben Prozessdaten (in Form von mehreren Zeitreihen) durchgeführt und evaluiert. Dabei stellte sich heraus, dass die konkreten Daten scheinbar nicht für eine derartige Modellbildung geeignet sind. Als Gründe dafür wurden insbesondere die relativ geringe Anzahl an Datensätzen (wenige Tausend), die auffällige Ähnlichkeit der Daten in zeitlichen Blöcken (zwischen Wartungsereignissen) und die nicht-normalverteilten Fehler in den Messwerten identifiziert.

Im Rahmen des Projektes konnte der betrachtete Anwendungsfall (definiert durch die beim Anwendungspartner erfassten Prozess-, Wartungs- und Qualitätsdaten) so aufbereitet werden, dass eine überwiegend datengetriebene Modellbildung ermöglicht wurde. Die bei der Datenaufbereitung gesammelte Erfahrung kann von den Verbundpartnern leicht für weitere Kooperationen in Projekten mit ähnlichen Problemstellungen übertragen werden.

Die für das konkrete Anwendungsproblem angepassten Methoden des maschinellen Lernens wurden in sehr allgemeiner Form entwickelt und sind somit auch für eine Vielzahl von Klassifikations- und Regressionsproblemen in anderen Anwendungsgebieten nutzbar.
Dazu gehört einerseits die Verallgemeinerung von Support Vector Machines (bzw. Kernel Machines) durch Verlustfunktionen, die durch einen Maximum-Likelihood-Ansatz motiviert sind. Insbesondere kann der entwickelte Modellierungsansatz zur Schätzung von Poisson-verteilten Zielgrößen für diverse Anwendungen geeignet sein. Es wird daher angestrebt, die theoretische Herleitung des Modells und der Verfahren zur effizienten Lösung der auftretenden Trainingsprobleme sowie deren Implementierung für eine einfache Nachnutzung zu veröffentlichen. Besonders die Sensitivitätsanalyse der erzeugten Modelle und die angepasste Hyperparameteroptimierung kann für viele Probleme hilfreich sein.
Andererseits wurde im Projekt auch eine Herangehensweise entwickelt, die eine Schätzung der Wichtigkeit von Eingabegrößen für die Modellbildung ermöglicht. Der grundsätzliche Ansatz beruht dabei auf einem Sampling der Eingabegrößen, der Bildung von Modellen auf dem gewählten Ausschnitt der Datenmenge und der Approximation der resultierenden Modellgüte durch die Validierung, die in einen Hyperparameteroptimierungsansatz integriert ist. Durch eine geeignete Aggregation der Resultate ergibt sich für jede Eingabegröße jeweils ein Maß für deren Einfluss auf die Modellgüte und auf die Zielgröße. Es besteht das Ziel, die ausführliche Theorie zu diesem Ansatz und die implementierte Softwarebibliothek zu veröffentlichen.

Mit dem entwickelten Ansatz zur Modellbildung und -interpretation konnten aus den gegebenen Daten wertvolle Hinweise und Informationen extrahiert werden. Die notwendige Implementierung von Routinen zur Datenverarbeitung half, um Erkenntnisse über die Struktur der Prozessdaten und -abläufe zu gewinnen, die die Projektpartner in der weiteren Arbeit unterstützen und auf bestimmte Instabilitäten in der Prozessführung hinweisen.
Die gewonnenen Modellierungsergebnisse wurden durch direkte Absprachen unter den Partnern aufbereitet, sodass eine interpretierbare Herausarbeitung der Zusammenhänge zwischen den Prozessdaten und dem Qualitätsmaß möglich wurde und somit Ansätze zur Optimierung des Produktionsprozesses entwickelt werden konnten.