

Aachen, 15. Dezember 2019
T. Müller - Tel. 0241-8028211

Seminararbeit

für Herrn

Sebastian Hofmann

Matrikelnummer: 3148938

Thema: Feature Selection zur Relevanzbewertung von Modellparametern für die Messunsicherheitsbestimmung bei komplexen Messprozessen

In nahezu jedem Unternehmen werden Messungen vorgenommen, um Aussagen über die Qualität von Produkten oder Prozessen treffen zu können. Doch bei jeder Messung können Abweichungen zum wahren Wert der Messgröße auftreten. Die daraus resultierende Unsicherheit der Messwerte kann zum Treffen von fehlerhaften Aussagen oder Entscheidungen führen. Bei unbekannter Messunsicherheit können so fehlerfreie Bauteile als Defekt (α -Fehler) oder defekte Bauteile als in Ordnung (β -Fehler) gekennzeichnet werden. Um dieses Risiko quantifizieren zu können, wird durch Normen und Richtlinien die Bestimmung der Messunsicherheit gefordert. Die Bestimmung der Messunsicherheit für verschiedene Messprozesse ist jedoch beliebig komplex.

In dieser Arbeit wird die Modellbildung komplexer Messprozesse als elementarer Bestandteil für die Bestimmung der Messunsicherheit näher betrachtet. Dazu wird zuerst die Messunsicherheit allgemein definiert und vereinfachte Verfahren zur Bestimmung der Messunsicherheit vorgestellt. Dabei wird explizit auf die Measurement System Analysis (MSA), VDA Band 5 und die ISO 22514-7 eingegangen. Da die vereinfachten Verfahren für komplexe Messprozesse keine validen Ergebnisse liefern, wird im Anschluss daran eine für diese Prozesse geeignete Methode vorgestellt, der Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement. Grundlage für dieses Verfahren bildet die Modellierung der Messgröße. Hierzu wird in der Arbeit die analytische Modellbildung, sowie die experimentelle und eine Mischform aus diesen beiden, die analytisch-experimentelle Modellbildung analysiert und bewertet. Da Verfahrensunabhängig der Modellierungsaufwand proportional von der Anzahl der zu betrachtenden Einflussfaktoren abhängt, ist das Hauptziel der Arbeit die Entwicklung eines Verfahrens zur Relevanzbewertung von Einflussfaktoren in der Modellbildung zur Messunsicherheitsbestimmung. Hier werden die zwei Arten von Feature Selection Methoden, die Filtermethode und Wrapper, erläutert. Es werden zwei verschiedene Verfahren miteinander verglichen und bewertet. Das Ergebnis der Arbeit ist ein anhand eines Beispieldatensatzes validierten Verfahrens zur Relevanzbewertung.

Im Einzelnen sind die folgenden Teilaufgaben zu lösen:

- Literaturrecherche zur Relevanzbewertung
- Entwicklung eines Verfahrens zur Relevanzbewertung von Einflussfaktoren zur Modellierung von komplexen Messprozessen
- Implementierung des Verfahrens in der Statistiksoftware R
- Validierung des entwickelten Verfahrens
- Dokumentation der Arbeit

I Inhaltsverzeichnis

I	Inhaltsverzeichnis	iii
II	Abbildungsverzeichnis	v
III	Tabellenverzeichnis	vii
1	Einleitung	1
2	Relevanzbewertung für die experimentelle Modellbildung.....	5
2.1	Verfahren zur Bestimmung der Messunsicherheit	5
2.1.1	Vereinfachte Verfahren (MSA, VDA 5, ISO 22514-7)	5
2.1.2	Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement.....	8
2.2	Verfahren zur Modellbildung für die Messunsicherheitsbestimmung komplexer Messprozesse	9
2.3	Verfahren zur Relevanzbewertung von Einflussfaktoren in der Modellbildung zur Messunsicherheitsbestimmung.....	10
2.4	Fazit.....	12
3	Entwicklung eines Verfahrens zur Relevanzbewertung in der Modellbildung für Messunsicherheit.....	14
3.1	Implementieren einer Filtermethode zur Relevanzbewertung.....	14
3.2	Implementieren einer Wrappermethode zur Relevanzbewertung.....	15
4	Validierung.....	17
4.1	Validierung der Filtermethode.....	18
4.2	Validierung der Wrappermethode	22
4.3	Fazit.....	23
5	Zusammenfassung und Ausblick	24
IV	Literaturverzeichnis	25
V	Anhang	27

II Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1 Einfluss der Messunsicherheit auf die Risikoklassifizierung des Prüfprozesses nach ISO 14253-1	1
Abbildung 1-2 Verdeutlichung des Fehlers 1. und 2. Art (dargestellt an der oberen Spezifikationsgrenze) [WEB19]	1
Abbildung 2-1 Wichtige Einflüsse auf die Unsicherheit von Messergebnissen nach [VDA10, S. 26]	6
Abbildung 2-2 Ablauf für die Beurteilung der Eignung von Prüfprozessen nach [VDA10, S. 41]	7
Abbildung 2-3 Funktionsweise des Kalman-Filter [WEB19b].....	11
Abbildung 2-4 Backward, Forward und Stepwise Selection [RUEP06, S. 73].....	12
Abbildung 4-1 Dünnwandiger Thermoplast zur Validierung des entwickelten Verfahrens.....	17
Abbildung 4-2 Plot der Korrelationsmatrix der verwendeten Messdaten	19
Abbildung 4-3 Output des Bezugsmodells	21
Abbildung 4-4 Output des Filtermodells.....	21
Abbildung 4-5 Output des Wrappermodells.....	22

III Tabellenverzeichnis

Tabelle 4.1 Verwendete Messdaten zur Validierung..... 18

1 Einleitung

Bei jeder Messung können Abweichungen zum wahren Wert der Messgröße auftreten. Wenn die daraus entstandenen Messdaten ausgewertet werden, können in Abhängigkeit der Unsicherheit der Messwerte fehlerhafte Aussagen oder Entscheidungen getroffen werden. Deshalb wird zu einem Messergebnis ein Vertrauensintervall bestimmt, das den wahren Wert dieser Messgröße mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit beinhaltet. Dies entspricht der Messunsicherheit, welche den Wertebereich, in dem der wahre Wert der Messgröße liegt, eingrenzt. Ist diese Messunsicherheit allerdings hoch und ein produziertes Merkmal liegt nah an der jeweiligen Spezifikationsgrenze, so kann keine sichere Entscheidung getroffen werden, ob das Merkmal die Spezifikation erfüllt oder nicht (siehe Abbildung 1-1). [MUEL19, S. 124]

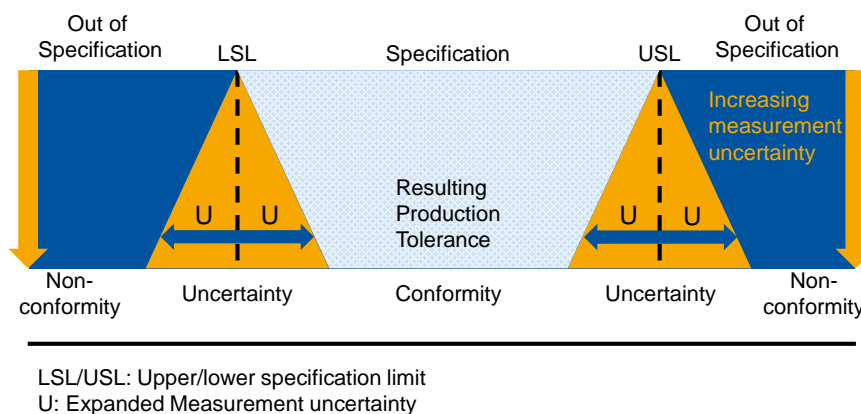


Abbildung 1-1 Einfluss der Messunsicherheit auf die Risikoklassifizierung des Prüfprozesses nach ISO 14253-1

Dadurch können Teile, die eine Spezifikation erfüllen, aussortiert werden, was einem α -Fehler gleichkommt, oder Teile, die außerhalb der Spezifikationsgrenzen liegen, verwendet werden; dies nennt man β -Fehler (siehe Abbildung 1-2).

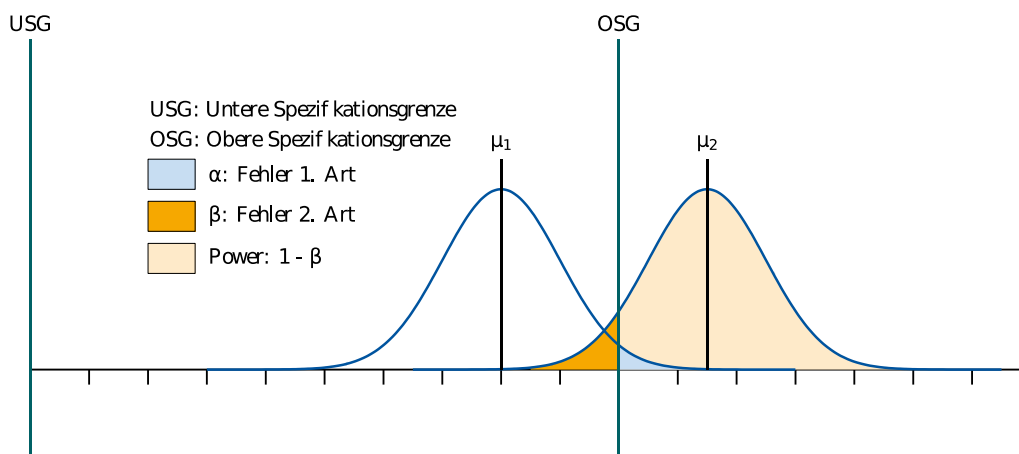


Abbildung 1-2 Verdeutlichung des Fehlers 1. und 2. Art (dargestellt an der oberen Spezifikationsgrenze) [WEB19]

Aus beiden Fehlern können in Abhängigkeit von Produktions- und Fehlerkosten große wirtschaftliche Verluste resultieren. Dementsprechend sind Messwerte ohne Angabe der Messunsicherheit wertlos, da das Risiko von Fehlentscheidungen weder bestimmt noch kontrolliert werden kann. Deshalb existieren im Produktionsumfeld zahlreiche Normen und Richtlinien, um Fehlentscheidungen zu vermeiden. [MUEL19, S. 124]

Die Messunsicherheit ist bei einer Vielzahl einfacher Messprozesse mit den vereinfachten Richtlinien VDA 5 oder der ISO22514-7 bestimmbar. Die Messunsicherheitsbestimmung bei komplexen Messprozessen stellt jedoch eine Herausforderung dar, da dort definitionsgemäß kein standardisiertes metrologisches Modell anwendbar ist. [MUKOM, S. 2] Zudem können u. a. folgende Indikatoren auf einen komplexen Messprozess hindeuten: eine inhomogene Messunsicherheit über dem Parameterraum, eine Vielzahl an Einflussfaktoren oder auch ein nicht-lineares mathematisches Modell. [VDI19]

Der „Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement“ (GUM) ist der metrologische Standard zur Bestimmung der Messunsicherheit. Dieser Leitfaden ist universell anwendbar und liefert valide Aussagen über die tatsächliche Messunsicherheit, da alle Unsicherheitskomponenten betrachtet werden. Aufgrund der Allgemeingültigkeit ist dieses Verfahren für die Messunsicherheitsbestimmung komplexer Messprozesse zu wählen. Der Aufwand zur Durchführung ist jedoch sehr hoch und benötigt ein hohes Maß an Expertenwissen. [MUEL19, S. 124] Für eine Anwendung des GUM-Verfahrens ist es notwendig, die Modellgleichung aufzustellen. Die Modellgleichung beschreibt den funktionalen Zusammenhang zwischen verschiedenen Einflussfaktoren und der Messgröße selbst. Die Modellbildung kann mittels eines rein analytischen, eines rein experimentellen oder eines gemischt analytisch-experimentellen Ansatzes erfolgen. Es gibt mehrere Vorgehensweisen, um ein analytisches Modell zu bilden. Es können physikalische Zusammenhänge mathematisch modelliert werden, das physikalische Messprinzip als Grundlage genommen und das mathematische Modell iterativ erstellt werden. Als Näherung wird in einigen Fällen auch ein lineares Modell genutzt. Die funktionalen Zusammenhänge werden bei einer experimentellen Modellbildung über Versuche ermittelt. Für die Planung von Versuchen gibt es verschiedene Möglichkeiten. Eine sehr verbreitete ist die *Statistische Versuchsplanung* – Design of Experiments (DoE). Die *Statistische Versuchsplanung* ist eine Methode zur effizienten Planung und Auswertung von Versuchsreihen [SIEB10, S. 20]. Unabhängig von der Auswahl des spezifischen Versuchsplans ist der Aufwand stark korreliert mit der Anzahl der Einflussfaktoren. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit untersucht, wie mithilfe einer Relevanzbewertung auf Basis der Feature Selection der Aufwand reduziert werden kann. [MUEL19, S. 125]

Die Untersuchung beginnt mit der Vorstellung einer Auswahl von Verfahren zur Bestimmung der Messunsicherheit; insbesondere liegt das Augenmerk auf den vereinfachten Verfahren – MSA, VDA 5 und ISO 22514-7 – sowie auf dem GUM, als allgemeingültiges Verfahren. Im Anschluss werden Verfahren zur Modellbildung für die Messunsicherheitsbestimmung komplexer Messprozesse erläutert. Dazu gehören die analytische und die experimentelle Modellbildung sowie eine Mischform der beiden vorgenannten, die analytisch-experimentelle Modell-

bildung. Im folgenden Abschnitt werden Verfahren zur Relevanzbewertung von Einflussfaktoren in der Modellbildung zur Messunsicherheitsbestimmung dargestellt. Die vorgestellten Verfahren sind die Filtermethode und Wrapper. Im nächsten Kapitel werden die verschiedenen Vorgehensweisen in der Programmiersprache R implementiert. Im Anschluss findet die Validierung der implementierten Verfahren statt, und es wird ein Fazit gezogen. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung, in der die prägnantesten Resultate zusammengefasst werden, sowie einem Ausblick.

2 Relevanzbewertung für die experimentelle Modellbildung

2.1 Verfahren zur Bestimmung der Messunsicherheit

Jede Messung ist inhärent unsicherheitsbehaftet, weswegen das Vertrauen auf Messergebnisse Risiken birgt; zur Quantifizierung dieser Risiken werden mit verschiedenen Verfahren Messunsicherheiten ermittelt [MUEL19, S. 124]. Diese Verfahren werden im Folgenden vorgestellt.

2.1.1 Vereinfachte Verfahren (MSA, VDA 5, ISO 22514-7)

Vereinfachte Verfahren sind ein Mittel zur Bestimmung der Messunsicherheit, welche sich dadurch auszeichnen, dass sie ein vorgegebenes Modell verwenden. Dadurch sind sie im Vergleich zu komplexeren Verfahren mit weniger notwendigem Expertenwissen durchzuführen und weniger zeitaufwendig. Für eine Vielzahl von Prüfprozessen liefern sie valide Ergebnisse bei der Bestimmung der Messunsicherheit. Beispiele sind unter anderem die „Measurement System Analysis“ (MSA), der VDA Band 5 und die ISO 22514-7. [MUEL19, S. 124]

MSA

Die MSA ist eine Evaluation eines Messprozesses, die typischerweise ein speziell zu Evaluationszwecken entwickelten Versuchsplan beinhaltet und darauf ausgerichtet ist, Ursachen für Schwankungen im Messprozess aufzudecken und anhand von Kennzahlen die Güte eines Messprozesses zu bewerten. Bei der MSA wird als erstes überprüft ob die systematische Messabweichung ausreichend klein ist. Wenn das der Fall ist, wird der Gage-Repeatability-and-Reproducibility-Wert (%GR&R) mit dem vorgegebenen Grenzwert verglichen und ausgewertet. Dieser Wert wird bestimmt, indem dieselbe Messung unter identischen Bedingungen und vom selben Messgerät wiederholt und indem die Messung unter verschiedenen Bedingungen und unterschiedlichen Messgeräten durchgeführt wird [VANW08, S. 468]. Der %GR&R-Wert liefert bei Überschreitung der Grenzen des Vertrauensintervalls jedoch keine Information über die Ursache. Um weitere Informationen über die Ursache zu erhalten, müssen Zwischenergebnisse betrachtet und gegebenenfalls noch weitere Untersuchungen vorgenommen werden. [DIET11, S. 31]

VDA Band 5

Die VDA Band 5 soll die Vorgehensweise zur Bestimmung der erweiterten Messunsicherheit, hauptsächlich den GUM, vereinfachen, schematisieren und damit praktikabler machen. Dazu müssen Einflussgrößen vorgegeben und aufgelistet werden. Diese Einflussparameter lassen sich unterscheiden in diejenigen, die per Definition das Messsystem beschreiben, und diejenigen, die den gesamten Messprozess betreffen (siehe Abbildung 2-1).

Messunsicherheit

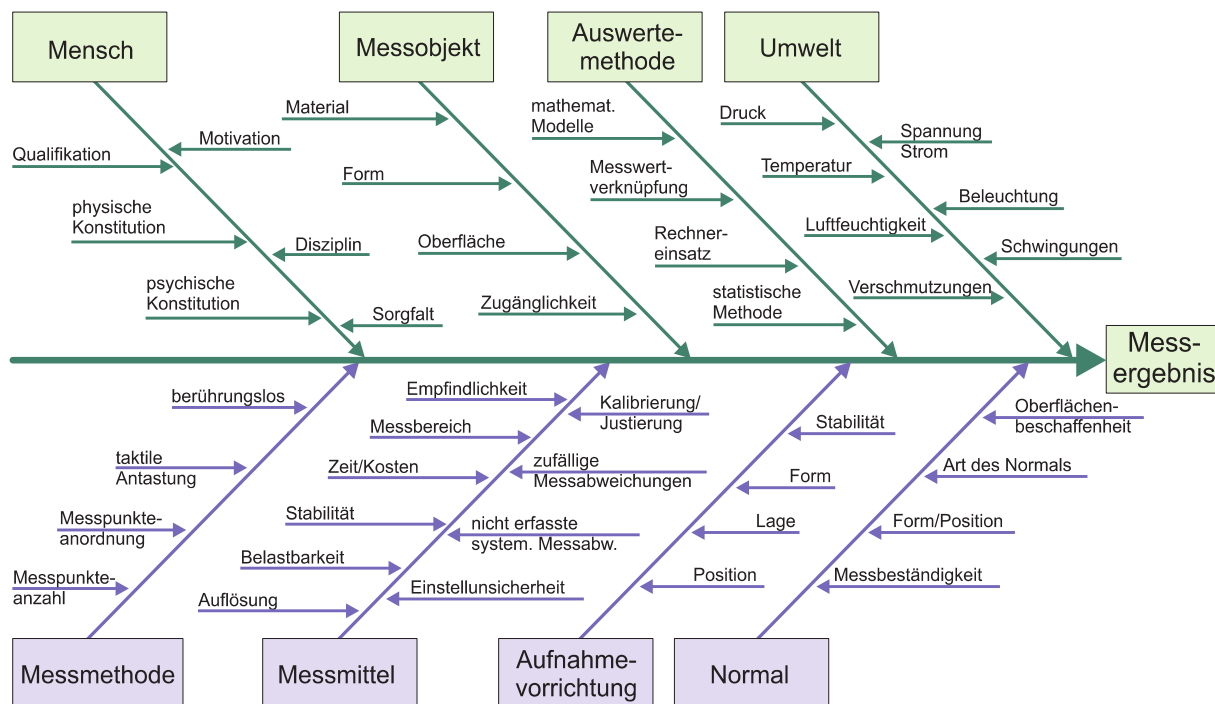


Abbildung 2-1 Wichtige Einflüsse auf die Unsicherheit von Messergebnissen nach [VDA10, S. 26]

Danach werden die Unsicherheitskomponenten benannt, und es wird festgelegt, mit welcher Ermittlungsmethode die jeweilige Standardunsicherheit bestimmt werden soll. Die Beurteilung mittels eines Versuchs wird Methode A genannt, die theoretische Abschätzung wird bei Methode B verwendet. Beispiele dafür sind unter anderem Angaben des Herstellers, Daten von Kalibrierscheinen und Zertifikaten oder auch Messwerte auf der Basis von weniger als $n = 10$ Messungen. Im Anschluss wird sie mit der Toleranz, die in Formel 1 definiert wird, verglichen sowie ein Eignungskennwert bestimmt.

$$U_{RE} = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{RE}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{12}} \cdot RE \tag{1}$$

$U_{RE} = \text{Toleranz}$

$RE = \text{Auflösung}$

Zuletzt werden die Standardunsicherheitskomponenten des Messsystems bestimmt und damit die prinzipielle Eignung des Messsystems nachgewiesen. Wird das System für geeignet befunden, dann wird die erweiterte Messunsicherheit bzw. der Eignungskennwert für den Messprozess bestimmt (siehe Abbildung 2-2). Dieser dient der Feststellung, ob der Messprozess für die Messaufgabe prinzipiell geeignet ist. [DIET17, S. 219-222]

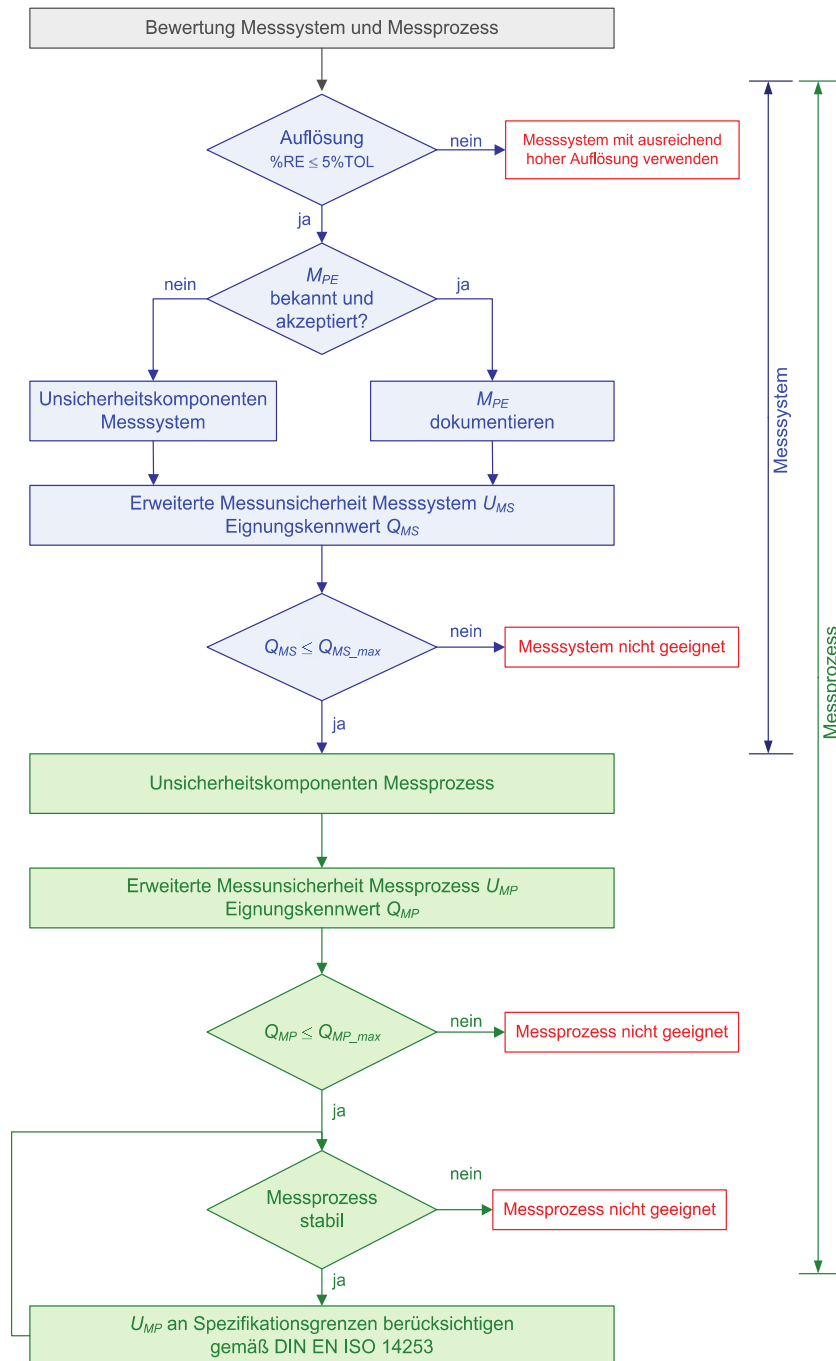


Abbildung 2-2 Ablauf für die Beurteilung der Eignung von Prüfprozessen nach [VDA10, S. 41]

ISO 22514-7

Die ISO 22514-7 weist die gleiche Vorgehensweise wie der VDA Band 5 auf, ist allerdings international standardisiert. Alle Einflussfaktoren werden in zwei Kategorien eingeteilt: die Einflüsse, die in direktem Zusammenhang mit dem Messprozess stehen, und alle anderen Einflüsse [DIET14, S. 354-356]. Es wird eine vereinfachte, zweistufige Berechnung von Fähigkeitsindizes mit Unterscheidung in Messmittel und Messprozess durchgeführt. Danach wird auch hier die Auflösung unter Einbeziehung der Toleranz überprüft (siehe Formel 1).

Zwischenfazit

Die verschiedenen Richtlinien sind mit einem geringeren Umsetzungsaufwand verbunden und setzen nur wenig Expertenwissen voraus. Außerdem sind sie auf viele Messprozesse anwendbar. Jedoch sind diese Verfahren für komplexe Messprozesse in ihrer Validität stark eingeschränkt und deshalb nicht geeignet. Dies begründet sich darin, dass bei komplexen Messprozessen nicht in jedem Fall ein linearer Zusammenhang vorausgesetzt werden kann und die Einschränkung der zu betrachtenden Einflussgrößen nicht immer sinnvoll ist. Betrachtet man dementsprechend komplexe Messprozesse, so sind andere Verfahren zu nutzen.

2.1.2 Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement

Der GUM beinhaltet allgemeine Regeln für Bewertung und Ausdruck der Messunsicherheit. Da er keine Einschränkungen hinsichtlich der zu betrachtenden Einflüsse oder der Modellgleichung macht, ist er auch für komplexe Messprozesse anwendbar [BICH06, S. 162]. Das Ziel dieser Richtlinie liegt darin, einen allgemeinen Leitfaden zur Bestimmung der Messunsicherheit darzustellen. Zuerst werden die Kenntnisse über den Messprozess und die beteiligten (Eingangs-)Größen zusammengetragen. Im Anschluss wird die Messung modelliert. Dabei muss die Beschreibung der Auswertung der idealen Messung erfolgen, sowie die Ergänzung der vorher identifizierten Einflüsse und Korrektur. Auf Basis des Modells werden die Größen mittels einer von zwei Methoden, die Methode A und B aus Kapitel 2.1.1 VDA Band 5, bestimmt. Im nächsten Schritt wird das vollständige Messergebnis berechnet und angegeben. Über die partiellen Ableitungen des vom GUM geforderten Modells der Messung und der Gaußschen Fehlerfortpflanzung (siehe Formel 2) wird die kombinierte Messunsicherheit bestimmt.

$$u_y = \sqrt{\left(\frac{dy}{dx_1} \cdot u_1\right)^2 + \left(\frac{dy}{dx_2} \cdot u_2\right)^2 + \dots} \quad (2)$$

$u_y =$ Unsicherheit des Ergebnisses

$x_{1-n} =$ voneinander unabhängige Eingangsgrößen

$u_{1-n} =$ Unsicherheiten der Mittelwerte von x_{1-n}

Zuletzt muss das Unsicherheits-Budget ausgewertet werden. [SOMM04, S. 5-9]

Zwischenfazit

Aufgrund der Vorgehensweise und der Komplexität der Teilschritte ist der GUM ein valides und anerkanntes Verfahren zur Messunsicherheitsbestimmung beliebiger Messprozesse und liefert auch im Umgang mit komplexen Messprozessen belastbare Ergebnisse. Die Ergebnisse, die beim GUM-Verfahren berechnet werden, sind bei korrekter Durchführung verlässlich. Die Dokumentationen ermöglichen das Verständnis der Berechnungen sowie ihre Anpassungen. Der GUM liefert selbst keine Vorgabe oder Hilfestellung zur Bildung des Modells, setzt

jedoch ein solches voraus sowie umfassendes Fachwissen des Anwenders. Häufig ist die Berechnung aufgrund der vielen Einflussfaktoren sehr zeitintensiv und somit für viele Unternehmen wirtschaftlich nicht vertretbar. Da der GUM für komplexe Messprozesse geeignet ist, wird er in dieser Arbeit weiter als Grundlage betrachtet, aber es erfolgt eine kritische Auseinandersetzung mit der Modellbildung, insbesondere mit den zu betrachtenden Einflussfaktoren.

2.2 Verfahren zur Modellbildung für die Messunsicherheitsbestimmung komplexer Messprozesse

Die Bildung eines Modells ist für die Durchführung des GUM-Verfahrens eine Voraussetzung. Im Folgenden werden verschiedene Arten der Modellbildung vorgestellt.

Analytische Modellbildung

Das Ziel von analytischer Modellbildung ist es, ein Modell auf Grundlage von fundierten wissenschaftlichen Theorien, die das Verhalten des realen Systems erklären, zu erstellen. Sie modellieren physikalische Modelle mathematisch oder legen das physikalische Messprinzip zugrunde und erstellen das mathematische Modell iterativ. Ein Beispiel dafür ist die in der Messunsicherheitsbestimmung verbreitete Signalflossanalyse nach Sommer [SOMM06, S. 204]. Die Modellbildung wird hier in fünf Schritten durchgeführt. Als erstes werden eine Beschreibung der Messung durchgeführt sowie alle verfügbaren Größen und das Messverfahren betrachtet. Danach wird die Messung analysiert, in ihre Bestandteile aufgeteilt und eine Ursache-Wirkung-Beziehung für die ideale (ungestörte) Messung aufgestellt. Im Anschluss wird die Ursache-Wirkung-Beziehung noch für die reale (gestörte) Messung erstellt. Dadurch können die voneinander abhängigen Eingangsgrößen identifiziert und resultierende Korrelationen einbezogen werden. Im letzten Schritt wird das mathematische Ursache-Wirkung-Verhältnis im Hinblick auf die explizite Ableitung der Modellgleichung umgekehrt. [SOMM06, S. 204]

Aufgrund der erhöhten Komplexität kann die Nutzung eines linearen Modells als Näherung in Betracht gezogen werden. Hierbei sind manche Zusammenhänge jedoch nur bedingt abbildbar. Der Modellierungsaufwand ist bei dieser Variante geringer, allerdings wird dadurch die Modellgüte gesenkt. [MUEL19, S. 125-126]

Experimentelle Modellbildung

Das Ziel der experimentellen Modellbildung ist es, ein Modell mithilfe des über Experimente festgestellten, funktionalen Zusammenhangs, zu erstellen. Dies geschieht zum Beispiel auf Basis eines statistischen Versuchsplans. Die Versuchsergebnisse werden dann über parametrische oder nicht-parametrische Modellbildungsverfahren ausgewertet, und es wird ein Modell erstellt. Die parametrischen Modelle benötigen eine begrenzte Anzahl an Parametern, die einen direkten, physikalisch interpretierbaren Zusammenhang mit dem Prozess besitzen. Diese können mithilfe von Parameterschätzmethoden effektiv aus Messdaten ermittelt werden. Bei nichtparametrischen Modellen ist eine hohe Anzahl von Kennwerten wie Gewichtsfolgen oder die Wiener-Reihe nötig, und sie zeichnen sich durch ihren numerischen Charakter aus. [AYOU97, S. 15] Diese Modelle werden hauptsächlich verwendet, wenn eine analytische Formulierung der funktionalen Zusammenhänge nicht möglich ist. [MUEL, S. 126]

Analytisch-experimentelle Modellbildung

Diese Form der Modellbildung wird als „Grey-Box-Modellierung“ bezeichnet. Auf Basis der physikalischen Zusammenhänge werden die Teilmodelle mathematisch modelliert. Zusammenhänge die nicht auf diese Weise modelliert wurden, werden durch gezielte Experimente ermittelt. [MUEL19, S. 126] Ein Beispiel für einen solchen Modellierungsalgorithmus ist die symbolische Regression, welche Ergebnisse aus Experimenten modelliert und zusätzlich auch Erfahrungswissen über Teilmodelle analytisch berücksichtigen kann [MUEL19, S. 50-53].

Zwischenfazit

Der Nachteil von analytischen Modellen liegt darin, dass bei wachsender Komplexität das notwendige Maß an Expertenwissen größer wird und damit der Aufwand steigt. Außerdem können unstetige oder nicht-lineare Prozesse, die in komplexer Weise miteinander verknüpft und rückgekoppelt sind, nicht mit einer geschlossenen Theorie oder adäquater Beschreibung in einer analytischen Form dargestellt werden. [AYOU97, S. 15] Bei den experimentellen Modellen wird vor allem durch die Modellierungs- und Programmieretechnik, durch die Korrektheits- und Genauigkeitsanforderungen, sowie durch die gewünschte Ausführungsgeschwindigkeit eine hohe Komplexität erreicht. Bei allen Modellbildungsverfahren ist zu beachten, dass der Aufwand mit der Anzahl der zu betrachteten Faktoren steigt. Deshalb ist es notwendig, dass nur relevante Einflussfaktoren betrachtet werden, um so, falls möglich, die Anzahl der Faktoren zu senken. Dies geschieht mittels einer Relevanzbewertung.

2.3 Verfahren zur Relevanzbewertung von Einflussfaktoren in der Modellbildung zur Messunsicherheitsbestimmung

Einflussfaktoren wirken sich unterschiedlich stark auf die Messgröße und das Messergebnis aus. Um diese Auswirkung zu quantifizieren, wird eine Relevanzbewertung der Einflussfaktoren durchgeführt, die Feature Selection. Es gibt zwei Arten von Feature Selection Methoden, nämlich Filter- und Wrappermethoden. [YU03, S. 1]

Filtermethoden

Das Ziel der Filtermethode ist es, durch Nichtbetrachtung von Einflussfaktoren mit geringer Relevanz die Anzahl der Merkmale zu reduzieren [BECK09, S. 1711]. Sie sind modellunabhängig und werden als Vorverarbeitungsschritt zur Modellauswahl und zum Lernen eingesetzt [RADI04, S. 1]. Bei dieser Methode wird für jeden Lernalgorithmus, der verwendet werden soll, ein Funktionsumfang gewählt. Dies geschieht parallel zur Erlernung eines Konzepts aus einem Trainingsdatensatz. [DAS01, S. 2] Zur Bestimmung des Filtermodells können verschiedene Algorithmen zur Merkmalsauswahl in zwei Gruppen eingeteilt werden: die Merkmalsgewichtungsalgorithmen und die Teilmenge-Suchalgorithmen. Die Einteilung basiert darauf, ob die Algorithmen die Merkmale einzeln oder zu Teilmengen zusammengefasst auswerten. Durch diese Vorgehensweise sind Filter meist ohne großen Aufwand zu implementieren und haben eine kürzere Rechenzeit. Die Qualität der Ergebnisse ist jedoch abhängig von der Anzahl der betrachteten Merkmale, da bei starker Reduzierung die Verzerrung der Klassifikatoren nicht

berücksichtigt wird. [ICML03-111, S. 1-2] Ein Beispiel für Filtermodelle ist unter anderem der Kalman-Filter (siehe Abbildung 2-3). Der Kalman-Filter ist rekursiv, linear und digital. Er wurde zunächst für die Navigation entwickelt, da er Parameter aus verrauschten Daten extrahieren und komplexe Systeme modellieren kann. [BROW86, S. 1]

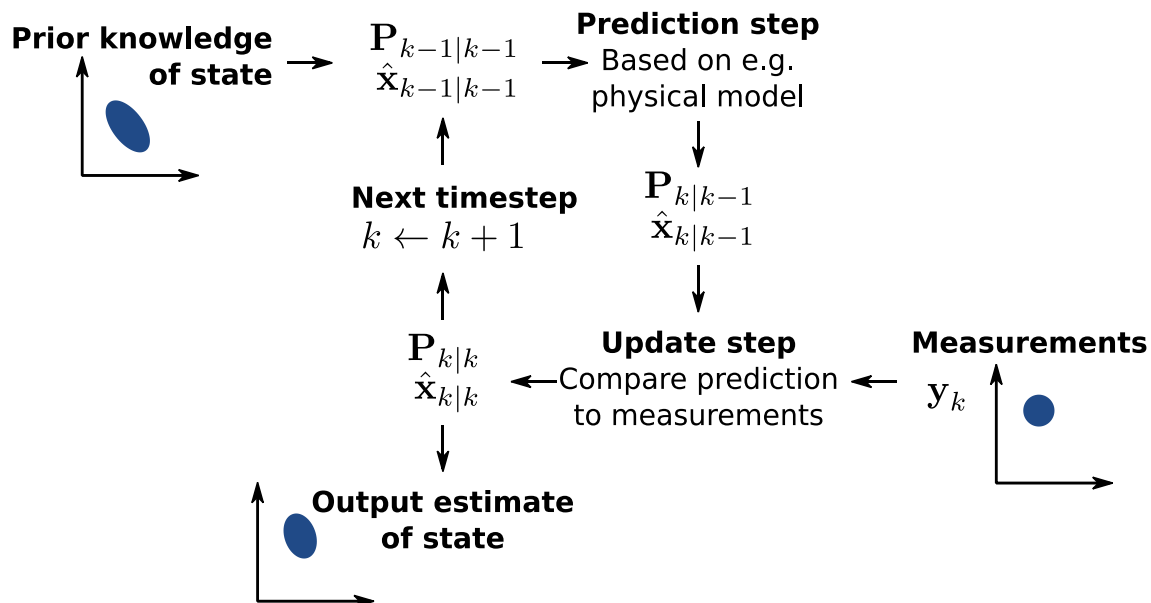


Abbildung 2-3 Funktionsweise des Kalman-Filter [WEB19b]

Wrappermethoden

Das Ziel der Wrapper ist es, die Selektierung während des Optimierungsverfahrens durchzuführen [BECK09, S. 1711]. Wrapper benötigen im Gegensatz zu den Filtern einen vordefinierten Lernalgorithmus, um zu bewerten und zu bestimmen, welche Merkmale verwendet werden. Sie berechnen, abhängig vom Lernalgorithmus, für jedes Merkmal, das hinzugefügt oder entfernt werden soll, die Genauigkeit des Ergebnisses. Diese Genauigkeit wird durch Kreuzvalidierung am Trainingsset geschätzt. Bei der Forward Selection wird die Genauigkeit des Hinzufügens jedes nicht ausgewählten Merkmals zur Merkmalsuntermenge geschätzt und das beste Merkmal ausgewählt, das nach diesem Kriterium hinzugefügt werden soll. Diese Verfahren enden typischerweise, wenn die geschätzte Genauigkeit beim Hinzufügen eines Merkmals geringer ist als die geschätzte Genauigkeit des bereits gewählten Merkmalsatzes. Weitere Beispiele sind die Backward Selection sowie die Stepwise Selection (siehe Abbildung 2-4). [DAS01, S. 2].

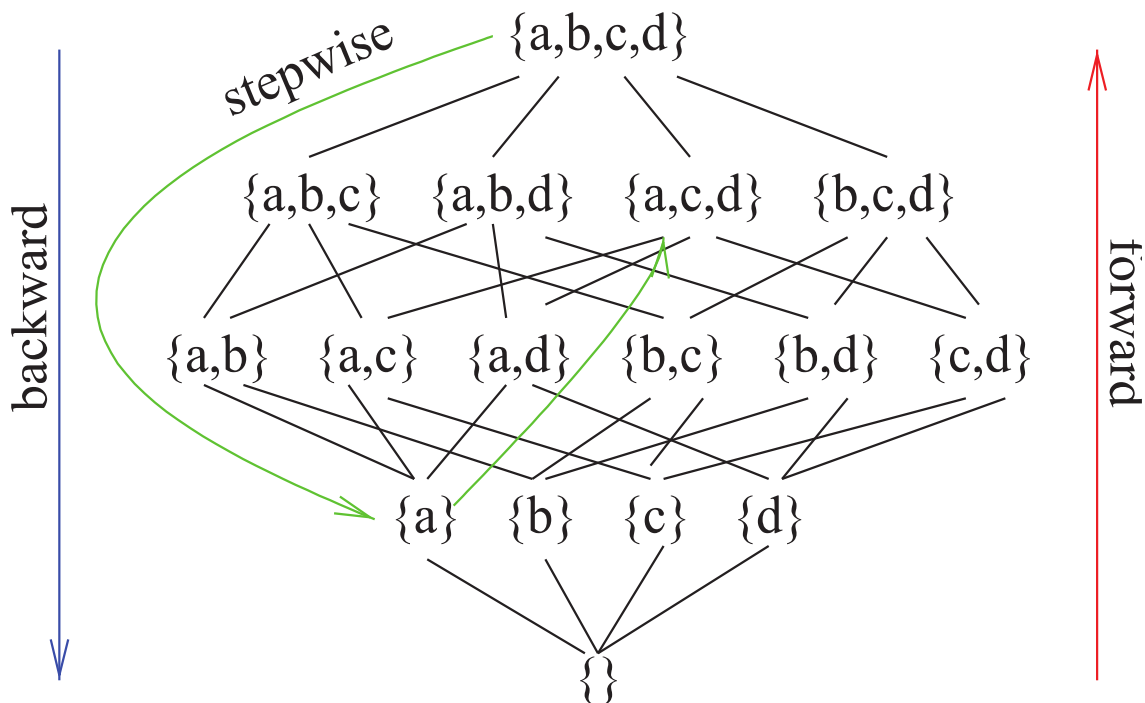


Abbildung 2-4 Backward, Forward und Stepwise Selection [RUEP06, S. 73]

Bei jeder neuen Teilmenge von Merkmalen muss die Wrappermethode eine Hypothese (oder einen Klassifikator) lernen. Allerdings ist sie sehr rechenintensiv, da sie den Klassifikator mehrmals ausführen und am Ende einen Kreuzvalidierungsschritt durchführen muss, um die Wahl des Modells zu bestätigen. [ICML03-111, S. 1]

Zwischenfazit

Die Filter sind modellunabhängig und vergleichen die Einflussparameter untereinander, um somit das bestmögliche Modell zu erstellen. Sie liefern schneller Ergebnisse und sind aufgrund der rechnerischen Effizienz vor allem bei einer großen Anzahl von Merkmalen den Wrappern vorzuziehen. Hingegen verwenden Wrapper einen vorgegebenen Lernalgorithmus, um darauf basierend Parameter hinzuzufügen oder zu entfernen. Sie finden Funktionen, die besser geeignet sind, was zu einer verbesserten Lernleistung führt. Dies ist allerdings mit höherem Rechenaufwand als bei den Filtermodellen verbunden.

2.4 Fazit

Vereinfachte Verfahren zur Berechnung der Messunsicherheit sind bereits auf viele Messprozesse anwendbar. Jedoch setzen diese häufig lineare Modelle voraus. Dies führt dazu, dass kein hohes Maß an Expertenwissen vorausgesetzt wird, sorgt aber auch dafür, dass komplexe Messprozesse nicht valide abgebildet werden können. In diesen Fällen ist der GUM zu verwenden. Dieser bietet den Vorteil, dass er auch für komplexe Messprozesse valide Ergebnisse liefert. Des Weiteren sind die berechneten Ergebnisse bei korrekter Durchführung verlässlich. Ein Nachteil des GUM besteht allerdings darin, dass er ein Modell sowie erhebliches Expertenwissen voraussetzt. Auch ist durch eine große Anzahl an Einflussfaktoren häufig die Berechnung sehr zeitintensiv. In der Modellbildung wird unterschieden zwischen analytischer,

experimenteller und analytisch-experimenteller Modellbildung. Bei der analytischen Modellbildung steigt das notwendige Maß an Expertenwissen und der damit verbundene Aufwand mit der wachsenden Komplexität. Des Weiteren sind auch nicht alle Messprozesse in analytischer Form darstellbar. Bei der experimentellen Modellbildung ist wenig Erfahrungswissen notwendig, deshalb wird in dieser Arbeit diese Variante bevorzugt. Jedoch steigt bei einer Vielzahl von Einflussfaktoren der Aufwand erheblich. Um die Komplexität und den zeitlichen Aufwand zu senken, soll die Anzahl der Einflussfaktoren mittels einer Relevanzbewertung gesenkt werden. Dazu existieren bereits Filter- und Wrappermethoden. Filter sind bei großer Anzahl von Merkmalen den Wrappern vorzuziehen, da sie schneller Ergebnisse liefern. Die Wrapper finden jedoch genauere Funktionen, was zu einer verbesserten Lernleistung führt. Aufgrund der Vor- und Nachteile beider Methoden werden in dieser Arbeit beide Möglichkeiten implementiert.

3 Entwicklung eines Verfahrens zur Relevanzbewertung in der Modellbildung für Messunsicherheit

Zur Bestimmung der Messunsicherheit von komplexen Messprozessen ist der GUM geeignet. Dieser setzt ein Modell voraus, gibt jedoch keine Hilfestellung, wie dieses zu bilden ist. Die Bildung eines Modells ist mit einem zeitlichen Aufwand verbunden, der proportional mit der Anzahl der Einflussfaktoren steigt. Um diesen Aufwand und die Komplexität zu senken, soll die Menge der zu betrachtenden Einflussfaktoren auf die relevantesten reduziert werden, ohne dass die Modellgüte stark negativ beeinflusst wird. Dafür gibt es zwei unterschiedliche Vorgehensweisen. Eine ist die Filtermethode, bei der die Einflussfaktoren miteinander verglichen werden, um diejenigen mit einer geringen Relevanz auszusortieren. Ebenso ist diese Methode modellunabhängig. Die Alternative dazu sind die Wrapper. Hier wird ein bereits existierender Lernalgorithmus auf die unterschiedlichen Einflussfaktoren angewendet, und so die entsprechende Relevanz der Merkmale festzustellen. Zu diesen Methoden wird jeweils im Anschluss eine Programmiermöglichkeit in R vorgestellt.

3.1 Implementieren einer Filtermethode zur Relevanzbewertung

Um eine Filtermethode umzusetzen, gibt es verschiedene Kombinationen von Funktionen. In dieser Arbeit werden, wie für Filter üblich, zuerst die Korrelationen zwischen den Einflussfaktoren ermittelt und diese anschließend zusätzlich visuell dargestellt. Dadurch kann der Nutzer nachvollziehen, in welcher Beziehung die Einflussparameter zueinander stehen. Es wird kein Modell vorausgesetzt, sondern nur der Datensatz benötigt. Die Korrelation beschreibt die Beziehung zwischen zwei oder mehreren Merkmalen. Dabei muss diese nicht kausal, sondern kann auch durchaus stochastischer Natur sein. Mit der standardmäßig in R enthaltenen Funktion `cor()`, werden die in einer Matrix oder einem Datensatz enthaltenen Korrelationen festgestellt. Dies geschieht nach der Pearson Korrelation (siehe Formel 3), bei der als Maß für die Quantifizierung, die lineare Abhängigkeit zwischen zwei kontinuierlichen Variablen X und Y verwendet wird.

$$p_{X,Y} = \frac{cov(X,Y)}{\sigma_X \sigma_Y} \quad (3)$$

$p_{X,Y}$ = Pearson Korrelation

$cov(X,Y)$ = Kovarianz von X und Y

σ_X = Standardabweichung von X

σ_Y = Standardabweichung von Y

Es wird eine Korrelationsmatrix erstellt, in der sich Zahlenwerte zwischen -1 und 1 befinden. Diese können durch Kombination der `cor`-Funktion mit der in der `corrplot`-Bibliothek enthaltenen Funktion `corrplot()` visuell in einer grafischen Korrelationsmatrix dargestellt werden. In der

Matrix werden die Ergebnisse als Zahlenwerte angezeigt, jedoch sind auch Formen wie Kreise oder Quadrate möglich. Durch eine beigefügte Farbskala oder durch eine Größenveränderung der Formen sind auch die etwaigen Korrelationswerte ablesbar. Mit der in der caret-Bibliothek enthaltenen Funktion `findCorrelation()`, können die in der `cor`-Funktion festgestellten Korrelationen mit Namen ausgegeben werden. Dieser Output gibt an, auf welche Einflussfaktoren verzichtet werden kann, da sie für die Modellbildung nicht relevant sind, da ihre Korrelation mit anderen Einflussfaktoren so hoch ist, dass diese die aussortierten mit abbilden können. Danach wird die in der `FSelector`-Bibliothek enthaltene, quantitative Methode, `information.gain()` benutzt. Dieser Algorithmus findet Gewichte von diskreten Attributen, die auf ihrer Korrelation mit kontinuierlichen Klassenattributen basieren (siehe Formel 4).

$$Gain = H(Class) + H(Attribute) - H(Class, Attribute) \quad (4)$$

$H(Class)$ = Entropie der Klasse

$H(Attribute)$ = Entropie des Attributs

$H(Class, Attribute)$ = Entropie der Klasse und des Attributs

Es wird die Entropie, welche das Maß der Verunreinigung in einem Knoten angibt, berechnet. Sie wird verwendet, um den Informationsgewinn zu berechnen. Der Information Gain gibt also an, wieviel Entropie entfernt werden konnte. Je höher der Gain ist, desto mehr Entropie konnte entfernt werden; damit kann das Entfernen der Einflussparameter validiert werden. Bei diesem Verfahren wird die Multikollinearität, auch wenn sie vorhanden ist, nicht entfernt. Multikollinearität nennt man das starke Korrelieren von mindestens zwei Merkmalen.

3.2 Implementieren einer Wrappermethode zur Relevanzbewertung

Die Wrappermethode wurde in dieser Arbeit mittels der `stepAIC`-Funktion umgesetzt. Sie ist Teil der `MASS`-Bibliothek und benötigt ein vorgegebenes Modell. AIC steht für Akaike Information Criteria. AIC bewertet die Balance zwischen hoher Anpassungsgüte und geringer Modellkomplexität. Sie ist eine der am häufigsten verwendeten Suchmethoden zur Merkmalsauswahl. Diese Methode setzt sich nicht als Ziel, die Modellleistung zu verbessern, sondern das Model zu vereinfachen, ohne dass die Leistung stark beeinträchtigt wird. AIC quantifiziert die Menge des Informationsverlusts aufgrund der vorgenommenen Vereinfachung (siehe Formel 5).

$$AIC = 2[-\log L(\beta, \sigma^2, y) + (p + 1)] \quad (5)$$

AIC = Akaike Information Criteria

$\log L(\beta, \sigma^2, y)$ = Log-Likelihood Funktion

p = Maß für die Modellkomplexität

Relevanzbewertung

Wenn zwei Modelle zur Auswahl stehen, wird also das mit dem niedrigeren AIC-Wert bevorzugt. Damit dient AIC als Mittel zur Modellauswahl, ist jedoch nur ein relatives Maß unter mehreren Modellen. Es ist ähnlich angepasst wie das R^2 , da auch hier eine Bestrafung für das Hinzufügen weiterer Variablen zum Modell erfolgt. Der Absolutwert des AIC hat keine Bedeutung, sondern dient nur zum Vergleichen der Änderung bei der Hinzunahme einer weiteren Variablen. Die stepAIC-Funktion fordert, dass die übergebenen Daten keine Nullzeilen enthalten. Die Funktion erhält zusätzlich den Parameter der Feature-Selection-Technik, die angewendet werden soll. Die Auswahl besteht zwischen der Backward Elimination, Forward Selection oder der Bidirectional Elimination. Bei der Backward Elimination werden alle Prädikatoren mit einbezogen, und in jedem nachfolgenden Schritt wird immer wieder derjenige mit dem höchsten p-Wert entfernt. So kann nach wenigen Iterationen ein endgültiger Satz von Merkmalen, die ausreichend signifikant sind, um das Ergebnis mit der gewünschten Genauigkeit vorherzusagen, bestimmt werden. In der Forward Selection wird in jeder Iteration ein Merkmal hinzugefügt, das die Gesamtpassung des Modells erhöht. Bereits hinzugefügte Merkmale werden nicht gelöscht. Die Bidirectional Elimination vereint die Backward Elimination und die Forward Selection. Es werden also sowohl Parameter hinzugefügt als auch gelöscht um die Gesamtpassung so hoch wie möglich zu treiben. Im letzten Schritt der stepAIC-Funktion wird der optimale Satz von Merkmalen produziert. Des Weiteren entfernt stepAIC auch die Multikollinearität, sofern diese in dem Modell vorhanden ist.

4 Validierung

Zur Validierung des entwickelten Vorgehens, wird dieses auf einen Beispieldatensatz angewendet und das Ergebnis mittel Bestimmung der Modellgüte sowie einer Experteneinschätzung bewertet. Der Beispieldatensatz bezieht sich auf ein Spritzgussverfahren mittels dessen ein dünnwandiger Thermoplast vermessen wurde. Der Thermoplast ist in Abbildung 4-1 dargestellt.

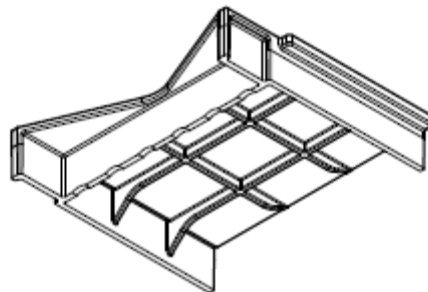


Abbildung 4-1 Dünnwandiger Thermoplast zur Validierung des entwickelten Verfahrens

Zur Erstellung der notwendigen Datengrundlage wurde in einem vorangegangenen Forschungsprojekt ein statistischer Versuchsplan mit 600 Versuchen durchgeführt. Das Modell wurde basierend auf dem entstandenen Datensatz (auszugsweise dargestellt in Tabelle 4.1) mit einem verallgemeinerten linearen Regressionslernalgorithmus erstellt. Um das Modell zu validieren, wurden im Vorfeld eine prädiktive Validierung und ein Ereignis-Validierungstest eingesetzt. Ein zweiseitiger t-Test auf einem Signifikanzniveau von $\alpha=5\%$ liefert die Gleichheit zwischen prognostiziertem und tatsächlichem Mittelwert. Der Event Validation Test liefert eine 90-100% korrekte Klassifizierung.

$$\begin{aligned}
 L1_i = & 32,775 - 0,0067 \text{ WkztempGerät1} + 0,0021 \text{ ZylHeizZone4} \\
 & + 0,0030 \text{ ZylHeizZone5} - 0,0084 \text{ ZylHeizZone6} \\
 & - 0,0754 \text{ EinspritzZeit} + 0,0133 \text{ Zykluszeit} - 0,0733 \text{ Dosierzeit} \\
 & - 0,2178 \text{ MassePolster} + 8,0911 \text{ UmschaltPunkt} \\
 & + 0,0767 \text{ SchneckePMax} + 0,0008 \text{ UmschaltSpritzdr} \\
 & - 0,0003 \text{ MaxSpritzdruck} - 0,0003 \text{ SchneckeMax}
 \end{aligned}$$

Modellgleichung mit Parametern aus Tabelle 4.1

Aufgrund der identischen Werte in den Spalten WkztempGerät1 und WkztempGerät2, ist für die Modellbildungsfunktion die Spalte WkztempGerät2 nicht auswertbar und wird somit nicht mit in der Modellgleichung angegeben.

Tabelle 4.1 Verwendete Messdaten zur Validierung

WkzTempGerät1	WkzTempGerät2	ZylHeizZone4	ZylHeizZone5	ZylHeizZone6	Einspritzzeit	Zykluszeit	Dosierzeit	MassePolster	UmschaltPunkt	SchneckeMax	UmschaltSpritzdr	MaxSpritzdruck	SchneckeMax	L1
90	90	190	195	199	1,22	24,61	4,01	2,681	5,096	1,19	959	959	956	72,301
90	90	190	195	200	1,22	24,61	4,07	2,69	5,096	1,2	956	956	956	72,305
90	90	190	195	199	1,22	24,62	4,05	2,666	5,096	1,19	959	959	959	72,305
90	90	190	195	199	1,22	24,62	4	2,769	5,096	1,2	956	959	959	72,297
90	90	190	195	199	1,22	24,62	3,98	2,751	5,096	1,17	950	953	953	72,288
90	90	190	195	199	1,22	24,62	3,95	2,76	5,096	1,1	953	956	953	72,303
90	90	190	194	199	1,22	24,62	4,02	2,74	5,096	1,08	947	950	950	72,305
90	90	190	194	199	1,22	24,62	4	2,74	5,096	1,07	953	953	950	72,306
90	90	190	194	199	1,22	24,62	4	2,704	5,096	1,08	947	950	950	72,305
90	90	189	194	199	1,22	24,61	3,94	2,751	5,096	1,21	953	953	956	72,306

4.1 Validierung der Filtermethode

Um die Filtermethode validieren zu können, muss als erstes der Beispieldatensatz (siehe Tabelle 4.1) in R geladen werden. Dazu wird die standardmäßig in R enthaltene, `read.csv`-Funktion verwendet. Damit kann die CSV mit den Beispieldaten, unter Angabe des Feldtrennzeichens, dem Dezimaltrennzeichen und der Information über das Vorhandensein von Überschriften, geladen werden. Das gespeicherte data frame wird dann an die `cor`-Funktion übergeben. In der ausgegebenen Matrix steht dann in jeder Zeile der nach der Pearson Korrelation berechnete Wert für die miteinander verglichenen Einflussparameter. Danach wird die `corrplot`-Bibliothek importiert, um die Nutzung der `corrplot`-Funktion zu ermöglichen. Diese Funktion bekommt die vorher berechnete Korrelationsmatrix als Übergabeparameter übergeben. Außerdem wird mit dem Parameter „method“ die Art und Weise der Darstellung der Korrelationswerte gewählt. Mit dem Parameter „type“ kann man anpassen ob der Plot die komplette Matrix

anzeigen soll oder nur die untere/obere Dreiecksmatrix. Eine vollständige Dokumentation des Codes ist im Anhang dargestellt (siehe A.1).

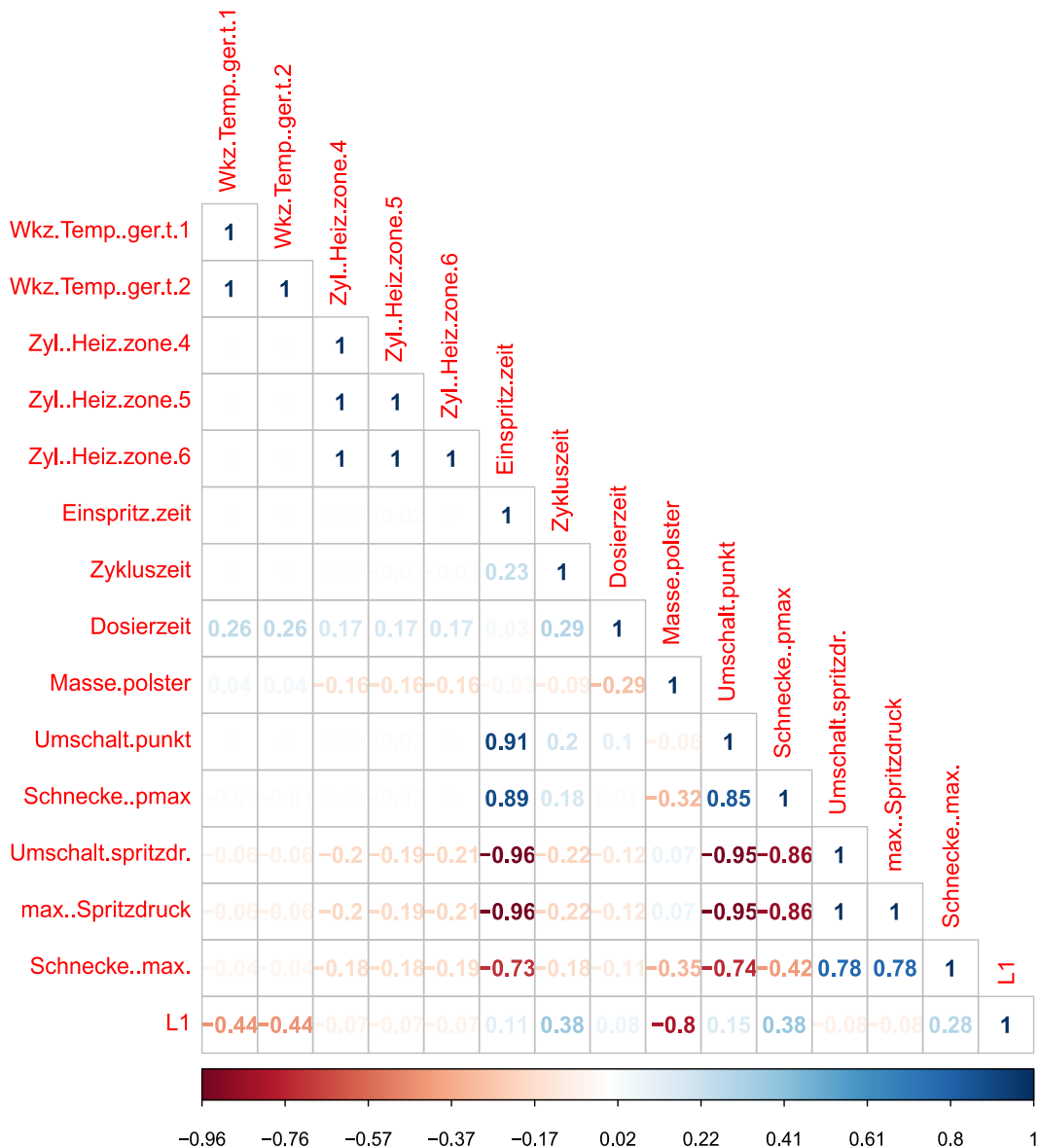


Abbildung 4-2 Plot der Korrelationsmatrix der verwendeten Messdaten

Wie in Abbildung 4-2 zu sehen, wird die untere Dreiecksmatrix angezeigt und die Korrelationswerte als Zahlen. Es ist zu erkennen, dass die Parameter mit sich selbst einen Korrelationskoeffizienten von 1 haben. Dies ist zu erwarten, da die Merkmale einen vollständig positiven linearen Zusammenhang mit sich selbst aufweisen. Einige Merkmale weisen aber zusätzlich auch noch einen hohen Korrelationskoeffizienten zu anderen Merkmalen auf. So lässt sich ein solcher Zusammenhang zwischen den folgenden Gruppen:

- Werkzeug Temperatur von Gerät 1 und 2
- Heizzonen 4, 5 und 6
- Max. Spritzdruck und Umschalt-spritzdruck

erkennen. Sie haben nicht nur einen Korrelationskoeffizienten von 1 zueinander, sondern weisen im Bezug zu anderen Merkmalen dieselben Korrelationswerte auf. Sie haben also den gleichen linearen Zusammenhang anderen Merkmalen gegenüber und können so als redundant angesehen werden. Im Anschluss daran wird die caret-Bibliothek importiert und die darin enthaltene findCorrelation-Funktion verwendet, um die aus der visualisierten Matrix gewonnenen Erkenntnisse zu verarbeiten. Dazu werden die Korrelationsmatrix sowie die paarweise absolute Korrelationsgrenze übergeben. Um den Output besser verstehen zu können wird noch das Argument „names“ auf „TRUE“ gesetzt damit, die Namen der Parameter angezeigt werden. Um ein möglichst genaues Ergebnis zu erzielen ist die Korrelationsgrenze in dieser Arbeit auf 0,9 gesetzt worden. Dies hat zur Folge, dass alle Parameter mit einem Korrelationskoeffizienten der betraglich größer als 0,9 ist, als redundant angesehen werden. Trotz dieser hohen Grenze konnte der Algorithmus 6 Merkmale finden, die einen höheren Korrelationskoeffizienten mit einem anderen Merkmal aufweisen und somit als redundant betrachtet werden. In den letzten Schritten wird die FSelector-Bibliothek importiert und die information.gain-Funktion auf den Datensatz angewendet. Dabei nimmt der Gain für die Heizzone den Wert 0 an und ist der niedrigste im Datensatz. Den höchsten Gain hat der Parameter Masse. Polster mit rund 0,85. Zuletzt werden alle gewonnenen Informationen kombiniert, um sich untereinander zu validieren und zu vervollständigen. Durch alleinige Betrachtung der Korrelation können folgende Parameter:

- Werkzeug Temperatur von Gerät 2
- Heizzone 4
- Heizzone 5
- Max. Spritzdruck
- Umschalt-punkt
- Umschalt-Spritzdruck

entfernt werden. Bezieht man jetzt noch die Informationen über den Gain mit ein, kann auch Heizzone 6 entfernt werden, da ihr Gain 0 beträgt und damit keine Informationen über die Klasse liefert und somit als nicht relevant betrachtet werden. Außerdem sind unter den verbleibenden Merkmalen viele mit einem hohem Gain. Nach Rücksprache mit einem Experten, kann für die Modellbildung Linearität angenommen werden, deshalb wird ein lineares Modell mit den verbleibenden Merkmalen erstellt. Der Standardfehler ist mit 0,05585 um etwa 0,02087 Punkte höher als der des Bezugsmodells, bei dem alle Parameter beachtet wurden. Lediglich die Anzahl der Freiheitsgrade ist um 4 erhöht und es gibt Unterschiede im hunderdstel für das Minimum, sowie im tausendstel Bereich für den Median und das Maximum. (Vergleich Abbildung 4-3 und Abbildung 4-4)

```

Call:
lm(formula = Leins ~ wkzTempGeraetEins + wkzTempGeraetZwei +
  ZylHeizzoneVier + ZylHeizzoneFuenf + ZylHeizzoneSechs + Einspritzzeit
  Zykluszeit + Dosierzeit + MassePolster + UmschaltPunkt +
  schneckePMax + UmschaltSpritzdr + MaxSpritzdruck + schneckeMax,
  data = dat)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.102536 -0.018467  0.001543  0.022702  0.195400

Coefficients: (1 not defined because of singularities)
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  32.7747983  15.0198846   2.182 0.029499 *
wkzTempGeraetEins -0.0066726  0.0001638 -40.734 < 2e-16 ***
wkzTempGeraetZwei      NA           NA      NA      NA
ZylHeizzoneVier    0.0020883  0.0027442   0.761 0.446977
ZylHeizzoneFuenf  0.0029744  0.0026785   1.110 0.267249
ZylHeizzoneSechs -0.0084130  0.0022947  -3.666 0.000269 ***
Einspritzzeit    -0.0753558  0.0123431  -6.105 1.87e-09 ***
Zykluszeit       0.0132655  0.0002368  56.030 < 2e-16 ***
Dosierzeit       -0.0733517  0.0050640 -14.485 < 2e-16 ***
MassePolster     -0.2178644  0.0027048 -80.547 < 2e-16 ***
UmschaltPunkt    8.0911324  2.8951897   2.795 0.005365 **
schneckePMax     0.0767004  0.0035664  21.506 < 2e-16 ***
UmschaltSpritzdr 0.0008414  0.0012671   0.664 0.506942
MaxSpritzdruck   -0.0003119  0.0012672  -0.246 0.805642
schneckeMax      -0.0003435  0.0000311 -11.044 < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.03498 on 586 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9806,    Adjusted R-squared:  0.9802

```

Abbildung 4-3 Output des Bezugsmodells

```

Call:
lm(formula = Leins ~ wkzTempGeraetEins + Einspritzzeit + zykluszeit +
  Dosierzeit + MassePolster + schneckePMax + schneckeMax, data = dat)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.143059 -0.037194  0.008166  0.039617  0.193013

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  7.347e+01  5.422e-02 1355.077 <2e-16 ***
wkzTempGeraetEins -6.995e-03  1.789e-04  -39.100 <2e-16 ***
Einspritzzeit    -7.448e-02  7.517e-03  -9.908 <2e-16 ***
Zykluszeit       1.371e-02  3.755e-04  36.517 <2e-16 ***
Dosierzeit      -8.082e-02  7.831e-03 -10.320 <2e-16 ***
MassePolster    -1.965e-01  4.112e-03 -47.772 <2e-16 ***
schneckePMax     6.075e-02  4.378e-03  13.876 <2e-16 ***
schneckeMax     -1.105e-05  3.255e-05  -0.340  0.734
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.05585 on 592 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.95,    Adjusted R-squared:  0.9494

```

Abbildung 4-4 Output des Filtermodells

Nach Berechnung des root-mean-square error (RMSE) für dieses Modell und für eines bei dem alle Parameter betrachtet werden, liegt die Abweichung bei lediglich 1,1394%, somit ist die Güte des Modells mit den verbleibenden 7 Merkmalen noch ausreichend hoch. Diese Ergebnisse wurden auch mit Experten diskutiert, die die Relevanz der ausgewählten Parameter bestätigen konnten.

4.2 Validierung der Wrappermethode

Auch beim Validieren der Wrappermethode wurde als erstes der Beispieldatensatz (siehe Tabelle 4.1) in R geladen. Die stepAIC-Funktion erwartet ein Objekt in Form eines Modells, dafür wird die lm-Funktion, die standardmäßig in R enthalten ist, verwendet. Diese Funktion bekommt eine Gleichung und den Datensatz übergeben und erstellt ein lineares Modell unter der Berücksichtigung aller Parameter. Dieses Modell wird dann in der stepAIC-Funktion zusammen mit dem „direction“ Argument übergeben. Für die Stepwise Selection wird die Bidirectional Elimination verwendet. Das bedeutet das bei jedem durchlaufenen Schritt sowohl Parameter hinzugefügt, als auch entfernt werden können. Es wird dabei immer der AIC neu berechnet und wenn dieser einen geringeren Wert als das vorher gebildete Modell aufweist wird das alte Modell durch das neu gebildete ersetzt. Auch dieser Code befindet sich im Anhang (siehe A.2). Für den Beispieldatensatz werden 3 Merkmale auf diese Art und Weise aus dem Modell entfernt. Die entfernten Parameter lauten:

- Werkzeug Temperatur von Gerät 2
- Heizzone 4
- Max. Spritzdruck.

Der Standardfehler beim Wrapper beträgt 0,03494 ist damit um etwa 0,00004 Punkte niedriger als beim Bezugsmodell. Die Anzahl der Freiheitsgrade ist um 2 erhöht und es gibt Unterschiede im tausendstel Bereich für das Minimum, den Median und das Maximum. (Vergleich Abbildung 4-3 und Abbildung 4-5)

```
Call:
lm(formula = Leins ~ wkzTempGeraetEins + ZylHeizZoneFuenf + ZylHeizZoneSechs
    Einspritzzeit + Zykluszeit + Dosierzeit + MassePolster +
    UmschaltPunkt + SchneckePMax + UmschaltSpritzdr + schneckeMax,
    data = dat)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.101386 -0.018425  0.001571  0.022875  0.197099

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  34.4904163  14.7628510   2.336 0.019811 *
wkzTempGeraetEins -0.0066908  0.0001619 -41.325 < 2e-16 ***
ZylHeizZoneFuenf  0.0042389  0.0020927   2.026 0.043256 *
ZylHeizZoneSechs -0.0076565  0.0020723  -3.695 0.000241 ***
Einspritzzeit   -0.0767216  0.0121808  -6.299 5.89e-10 ***
Zykluszeit      0.0132776  0.0002360  56.262 < 2e-16 ***
Dosierzeit     -0.0735714  0.0050183 -14.661 < 2e-16 ***
MassePolster   -0.2176589  0.0026855 -81.051 < 2e-16 ***
UmschaltPunkt   7.7577955  2.8449382   2.727 0.006584 **
SchneckePMax    0.0769933  0.0035432  21.730 < 2e-16 ***
UmschaltSpritzdr 0.0005149  0.0001419   3.629 0.000310 ***
SchneckeMax    -0.0003445  0.0000310 -11.113 < 2e-16 ***
---
signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.03494 on 588 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9806,    Adjusted R-squared:  0.9802
```

Abbildung 4-5 Output des Wrappermodells

Beim Vergleich des RMSE des Ausgangsmodells mit dem vom Wrapper gebildeten Modells, tritt eine Abweichung von nur 0,0012% auf. Diese Abweichung ist ausreichend gering um die Modellgüte zu erhalten.

4.3 Fazit

Bei der Filtermethode wird die Korrelation zwischen den Parametern und der Gain bestimmt. Dies erfolgt ausschließlich durch Betrachtung der in dem Datensatz vorhandenen Parameter, es ist kein Modell notwendig. Die Korrelationsgrenze kann vom Nutzer festgelegt werden und somit an die jeweiligen Anforderungen an die Modellgüte im Anwendungsfall angepasst werden. Die Kombination der Erkenntnisse sowie die Erstellung des neuen Modells muss der Nutzer selbst übernehmen. Der Wrapper bezieht sich auf den AIC-Wert und sortiert auf ihm basierend die Einflussparameter aus. Er erstellt für jeden Schritt ein neues Modell, so ist auch nach dem letzten Schritt das Modell bereits erstellt und wird zurückgegeben. Bei der Durchführung am Beispieldatensatz wurden 3 Modelle erzeugt, deshalb dauerten die Berechnungen in der Wrappermethode länger als bei der Filtermethode. Dafür ist die Modellgüte der Wrapper höher als die der Filtermethode. Das Minimum, der Median und das Maximum sind bei dem Wrapper näher am Modell, bei dem alle Merkmale berücksichtigt werden, als bei dem Filter. Beim Standardfehler sieht es genauso aus, der Wrapper ist näher am Ursprungsmodell als der Filter. Der Nachteil des Wrappers mit der stepAIC-Funktion liegt an der Notwendigkeit eines vordefinierten Lernmodells. Wenn der vordefinierte Lernalgorithmus eine für die Stepwise Selection geeignete Klasse darstellt und die Anzahl der Einflussfaktoren nicht viel zu hoch ist, hat der Wrapper eindeutig Vorteile gegenüber dem Filter. Liegt jedoch kein geeigneter Lernalgorithmus vor, oder ist die Anzahl der zu überprüfenden Parameter zu hoch, kommt der Filter schneller zu einem Ergebnis als der Wrapper. Setzt man dann beim Filter die Korrelationsgrenze hoch genug und kombiniert die gewonnenen Informationen sinnvoll, kann auch das durch den Filter erstellte Modell eine hohe Modellgüte besitzen.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Die Feature Selection zur Relevanzbewertung von Modellparametern für die Messunsicherheitsbestimmung bei komplexen Messprozessen dient der Minderung der Komplexität in der Modellbildung. Diese ist notwendig, um die Messunsicherheit von komplexen Messprozessen zu bestimmen. Um dieses Vorhaben umzusetzen, wurden zuerst Begriffe wie die Messunsicherheit erklärt. Im Anschluss wurde auf Verfahren zur Bestimmung der Messunsicherheit eingegangen, sowie deren Vor- und Nachteile dargelegt. Zur Anwendung bei komplexen Messprozessen blieb letztendlich nur der GUM übrig. Dieser setzt jedoch ein Modell voraus, weshalb im Anschluss Verfahren zur Modellbildung für die Messunsicherheit bei komplexen Messprozessen vorgestellt wurden. Da die Komplexität der Modellbildung sowohl bei analytischen als auch bei der experimentellen Modellbildung abhängig von der Anzahl der betrachteten Einflussfaktoren ist, wurden im Anschluss mögliche Verfahren zur Relevanzbewertung der Merkmale auf Grundlage der Feature Selection erläutert. Da sowohl die Filtermethode als auch die Wrappermethode Vor- und Nachteile aufweisen sind beide Methoden implementiert und an einem Beispieldatensatz validiert worden. Da für das Beispiel Linearität angenommen werden konnte, hatte die Wrappermethode im Vergleich zur Filtermethode das bessere Ergebnis. Letztendlich ist die Wahl der Methode aber abhängig von der Anzahl der zu überprüfenden Merkmale sowie der angestrebten Genauigkeit des Modells, da Wrapper zwar genauere Ergebnisse als die Filter liefern, dafür aber mehr Zeit und Rechenaufwand beanspruchen.

Zukünftig soll überprüft werden, ob diese Methodik auch für nicht-lineare Anwendungsfälle valide Ergebnisse liefert, da in dieser Arbeit beim Beispieldatensatz Linearität angenommen werden konnte. Auch gilt es das Verhalten der Methodik mit unterschiedlichen Modellbildungsalgorithmen zu analysieren, um eventuell die Modellgüte zu erhöhen oder die Rechenzeit zu mindern. Es soll ebenfalls untersucht werden ob die Filtermethode im Bezug auf Genauigkeit verbessert werden kann. Eine Idee dafür ist die Beschaffung weiterer Informationen über den Datensatz, sofern möglich. Die Betrachtung von Korrelation und Gain soll also um weitere Informationen ergänzt werden. Für die Wrapper gilt es die Durchführbarkeit mit unterschiedlichen Ausgangsmodellen zu überprüfen sowie den Einfluss der Komplexität dieses Modells und der Anzahl der zu überprüfenden Merkmale auf die Rechenzeit. Auch soll der Einfluss der Verfahren auf die Modellgüte bestimmt werden. Außerdem soll überprüft werden inwiefern eine Kombination der Verfahren möglich ist, da über die Filtermethode das für die Wrappermethode bisher benötigte Modell bestimmt werden könnte. Auch sollen die für die Methoden verwendeten Funktionen in R, durch Alternative Funktionen aus anderen Bibliotheken ersetzt und verglichen werden, um eventuelle Unterschiede in der Performance sowie bei den übergebenen Parametern und dessen Auswirkung auf das Ergebnis feststellen zu können.

IV Literaturverzeichnis

- [MUEL19a] Müller, T.; Voigtmann, C.; Schmitt, R.: Messunsicherheitsbestimmung komplexer Prüfprozesse. In: ZWF. 114. Jg., 2019, Nr. 3, S. 124-127
- [MUEL19b] Müller, T.; Schmitt, R.: Eine Alternative zu klassischen Methoden. Messunsicherheitsbestimmung komplexer Messprozesse mittels Machine Learning In: QZ. 64. Jg., 2019, S. 50-53
- [VDI19] VDI 2600 Teil 2 (Oktober 2019). Prüfprozessmanagement. Ermittlung der Messunsicherheit komplexer Prüfprozesse
- [SIEB10] Siebertz, K.; van Bebber, D.; Hochkirchen, T.: *Statistische versuchsplanung*. Springer Berlin Heidelberg, 2010
- [VANW08] van Wieringen, W.; de Mast, J.: Measurement System Analysis for Binary Data. In: *Technometrics*. Vol. 50, Nr. 4
- [DIET11] Dietrich, E.: Vergleich von MSA und VDA Band 5. Wo liegen die Unterschiede? In: QZ. 56. Jg., 2011, S. 30-34
- [DIET17] Dietrich, E.; Schulze, A.: Eignungsnachweis von Prüfprozessen. 5. Aufl. München: Hanser, 2017, S. 219-222
- [VDA10] VDA-Verband der Automobilindustrie, V. D. A.: Band 5: Prüfprozesseignung VDA, 2010
- [DIET14] Dietrich, E.: Capability of measurement processes based on ISO/FDIs 22514-7 and VDA 5. In: *Key Engineering Materials*. Vol. 613. Trans Tech Publications Ltd, 2014
- [BICH06] Bich, W.; Cox, M.; Harris, P.: Evolution of the 'Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement'. In: *Metrologia* 43.4, 2006
- [SOMM04] Sommer, K.; Siebert, B.: Praxisgerechtes Bestimmen der Messunsicherheit nach GUM. In: Weichert, N. (Hrsg.): *Messtechnik und Messdatenerfassung*. München: R. Oldenbourg, 2000, S. 52-65
- [SOMM06] Sommer, K.; Siebert, B.: Systematic approach to the modelling of measurements for uncertainty evaluation. In: *Metrologia* 43.4, 2006
- [AYOU97] Ayoubi, M.: Das dynamische Perzeptronmodell zur experimentellen Modellbildung nichtlinearer Prozesse. Diss. Technische Hochschule Darmstadt, 1996
- [YU03] YU, L.; Liu, H.: Feature Selection for High-Dimensional Data: A Fast Correlation-Based Filter Solution. Diss. Arizona State University Tempe, 2003

- [RUEP06] Rüping, S.: Learning Interpretable Models. 2006
- [BROW86] Brown, S.: The Kalman filter in analytical chemistry. In: *Analytica Chimica Acta* 181, 1986, S. 1-26
- [BECK09] Becker, N.; et al.: penalizedSVM: a R-package for feature selection SVM classification. In: *Bioinformatics* 25.13, 2009, S. 1711-1712
- [RADI04] Radivojac, P.; et al: Feature selection filters based on the permutation test. In: *European conference on machine learning*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2004
- [DAS01] Das, S.: Filters, wrappers and a boosting-based hybrid for feature selection. In: *icml*. Vol. 1, 2001
- [WEB19a] Med Uni Graz: Wahrheitsgehalt von Hypothesen und Fehler 1. und 2. Art
URL: <https://user.medunigraz.at/helmut.hinghofer-szalkay/Fehler.htm>
[Stand: 21.11.2019], eigene Bearbeitung
- [WEB19b] Wikipedia: Basic concept of Kalman filtering
URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Kalman_filter
[Stand: 07.12.2019]

V Anhang

A.1. Code der Filtermethode

```
library(corrplot)

library(FSelector)

library(caret)

d.bsp<-read.csv("C:/Users/matse/Desktop/InProzessparameter_0 Ouput.csv" ,sep=";",
dec=",", header=TRUE)

cor(d.bsp)

corrplot(cor(d.bsp),method="number",is.corr=TRUE,type="lower")

information.gain(d.bsp, unit="log")

correlationMatrix<-cor(d.bsp)

highlyCorrelated<-findCorrelation(correlationMatrix,names=TRUE, cutoff = 0.9)

dat <- read.csv2(file("C:/Users/matse/Desktop/InProzessparameter_2 Output.csv"), sep = ";",
dec = ",")

MultiLinearReg=lm(Leins ~ WkzTempGeraetEins + WkzTempGeraetZwei + ZylHeizZoneVier
+ ZylHeizZoneFuenf
+ ZylHeizZoneSechs+ EinspritzZeit + Zykluszeit + Dosierzeit
+ MassePolster + UmschaltPunkt + SchneckePMax
+ UmschaltSpritzdr + MaxSpritzdruck + SchneckeMax, data=dat)

MultiLinearReg2=lm(Leins ~ WkzTempGeraetEins + EinspritzZeit + Zykluszeit + Dosierzeit
+ MassePolster + SchneckePMax
+ SchneckeMax, data=dat)

summary(MultiLinearReg)

summary(MultiLinearReg2)

prediction = predict(MultiLinearReg,data=dat)

prediction2 = predict(MultiLinearReg2,data=dat)

RMSE <- sqrt(mean((dat$Leins - prediction)^2))

RMSE2 <- sqrt(mean((dat$Leins - prediction2)^2))
```

A.2. Code der Wrappermethode

```
library(MASS)

dat <- read.csv2(file("C:/Users/matse/Desktop/InProzessparameter_2 Output.csv"), sep = ";",
dec = ",")

d.bsp<-read.csv("C:/Users/matse/Desktop/InProzessparameter_0           Out-
put.csv",sep=";",dec=" ",header=TRUE)

MultiLinearReg=lm(Leins ~ WkzTempGeraetEins + WkzTempGeraetZwei + ZylHeizZoneVier
+ ZylHeizZoneFuenf
      + ZylHeizZoneSechs+ EinspritzZeit + Zykluszeit + Dosierzeit
      + MassePolster + UmschaltPunkt + SchneckePMax
      + UmschaltSpritzdr + MaxSpritzdruck + SchneckeMax, data=dat)

best<-stepAIC(MultiLinearReg,direction="both",steps = 1000000)

summary(best)

prediction = predict(MultiLinearReg,data=dat)
prediction2 = predict(best,data=dat)

RMSE <- sqrt(mean((dat$Leins - prediction)^2))
RMSE2 <- sqrt(mean((dat$Leins - prediction2)^2))
```