



## MASCHINELLES LERNEN MIT EXPERTENWISSEN

- 1 *Workflow für die Entwicklung von Greybox-Ersatzmodellen aus Daten und Expertenwissen; das adaptive Sampling ermöglicht eine effiziente Datengewinnung.*
- 2 *Zweidimensionaler Parameterraum eines Spielzeugbeispiels mit einem wohldefinierten zulässigen Bereich (grün); anhand dieses Beispiels lässt sich die Effizienz des adaptiven Samplings zur Vorhersage von Betriebsfenstern demonstrieren.*
- 3 *Die sequentielle Erschließung des Parameter-raums aus Abb. 2 führt zu zulässigen (grün) und unzulässigen (rot) Simulationsergebnissen und einer entsprechenden Modellvorhersage für das Betriebsfenster (blau), die sich mit jeder Iteration verbessert.*
- 4 *Visualisierung des vorhergesagten Betriebsfensters einer chemischen Anlage*

Maschinelle Lernverfahren erlauben es, Muster und Gesetzmäßigkeiten aus Daten abzuleiten. Die dabei entstehenden Modelle verallgemeinern die in den Daten enthaltene Information, um dadurch unbekannte Ergebnisse vorherzusagen. Eine solche Modellbildung kann allein auf Grundlage der Datenstatistik erfolgen. Von entscheidendem Vorteil ist es jedoch, den Kontext der Daten zu berücksichtigen und domänenspezifisches Expertenwissen einfließen zu lassen. Auf diese Weise werden auch Zusammenhänge miteinbezogen, die sich gar nicht oder nur unzureichend in der Statistik widerspiegeln. In verschiedenen Forschungsprojekten und in Kooperation mit Industriepartnern entwickeln wir Methoden, um maschinelle Lernverfahren durch Domänenkenntnisse zu verbessern. Ein wichtiges Anwendungsgebiet ist die chemische Verfahrenstechnik.

### Greybox-Ansatz als hybrides Gesamtmodell

In der industriellen Praxis werden Daten oft aus Simulationen gewonnen, da diese kostengünstiger sind als Experimente und frei von Messunsicherheiten. Für die Lösung von Optimierungsproblemen benötigt man in der Regel jedoch sehr viele Daten. Ersatzmodelle, die sich schneller auswerten lassen als die ursprüngliche Simulation, bringen also einen Geschwindigkeitsvorteil. Die verwendeten Simulationen basieren auf physikalischen Gesetzen – Expertenwissen, das also bereits explizit vorliegt. Die Herausforderung besteht darin, es auf geeignete Weise in ein maschinelles Lernverfahren zu integrieren. In diesem auch als »Greybox« bezeichneten Ansatz werden wissensbasierte Modelle mit datengetriebenen Modellen zu einem hybriden Gesamtmodell verbunden.

### Exploration von Betriebsfenstern in der chemischen Verfahrenstechnik

Entscheidend ist eine effiziente Datengewinnung. Nicht-dynamische Simulationen chemischer Anlagen lassen sich nur für solche Prozessparameter auswerten, für die sich die Anlage stationär betreiben lässt. In einem Projekt mit der BASF SE entwickeln wir gemeinsam eine Methode, um diese stationären Betriebsfenster mithilfe von maschinellen Lernverfahren zu bestimmen. Mit einem adaptiven Sampling erschließen wir den Parameterraum auf möglichst effiziente Weise sequentiell, wobei ein Kompromiss zwischen dem Simulationsaufwand und dem dadurch zu erwartenden Informationsgewinn gefunden werden muss. Das Wissen über das Betriebsfenster vereinfacht wiederum eine mögliche Optimierung von Parametern, da der zu durchsuchende Parameterraum eingeschränkt werden kann.