

國立臺灣大學工學院機械工程學系



碩士論文

Department of Mechanical Engineering

College of Engineering

National Taiwan University

Master's Thesis

應用時空深度學習模型建立

中尺度紊流熱傳系統數值模擬之替代模型

Building Surrogate Model of Numerical Simulation for

Heat Transfer System via

Spatio-temporal Deep Learning Modeling

莊皓宇

Chuang, Hao-Yu

指導教授：楊鏡堂 博士

共同指導教授：呂明璋 博士

Advisor: Yang, Jing-Tang, Ph. D.

Co-advisor: Lu, Ming-Chang, Ph. D.

中華民國一十四年七月

July 2025



摘要

本研究主旨在應用深度學習技術加速電池熱管理系統最佳化設計流程。透過建立圖像資料集，設計並訓練神經網路，建立可以替代傳統數值模擬方法的溫度場、速度場分佈預測模型。此替代模型以低於 2% 之均方誤差，預測任意入風口條件對物理場之影響，耗時僅需數值模擬 0.1% 以下。

大型電池儲能系統需要熱管理系統維持穩定的工作溫度，避免效率下降與潛在運維風險。傳統上以實驗與數值模擬為驗證熱管理系統設計成效的主要方法。然而，針對大型儲能系統，上述二方法往往曠日廢時，甚至經濟上不可行。本研究應用神經網路模型於數值模擬設計流程，縮短設計驗證耗時。首先，自動化數值模擬蒐集擬穩態資料後，測試以單層全連接層預測不同入風口風速下電池最高溫與最大溫差之變化。結果顯示，少量的資料造成神經網路過擬合問題嚴重，易於因起始條件改變、邊界條件超出訓練資料範圍而失效，推論結果違反物理法則。

為解決資料量不足問題，本研究以暫態模式重建資料集，並基於 ConvLSTM 建構可捕捉時空特徵的深度學習模型。訓練後的模型經質性、量性及長時距誤差傳播分析，證得與傳統數值模擬相當的預測準確度，均方誤差在各測試資料中最高不超過 2%，而二者運算速度差 4300 倍以上，在 17 秒內推論出需時 20 小時以上的數值模擬結果。此時間差打破設計迭代與實時監控的數值模擬時間瓶頸，未來應用於熱點分析、設計驗證、自動化熱管理調控等場景，皆具極高的價值。

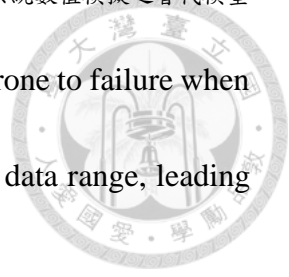
關鍵字：貨櫃型電池儲能系統 熱管理策略 深度學習 替代模型 時空序列分析



Abstract

This study applies deep learning techniques to accelerate the optimization design process for battery thermal management systems. By establishing image datasets and designing neural networks, prediction model for temperature and velocity field distributions was developed, serving as substitutes for traditional numerical simulation methods. The surrogate model predicts the effects of various inlet air conditions on physical fields with a root mean square error below 2%, while requiring less than 0.1% of the computational time needed for numerical simulations.

Large-scale battery energy storage systems depend on thermal management systems to maintain stable operating temperatures, preventing efficiency losses and potential operational hazards. Traditional validation of thermal management system designs relies primarily on experimental testing and numerical simulation. However, for large-scale energy storage systems, these approaches are often prohibitively time-consuming and economically impractical. This study integrates neural network models into numerical simulation design workflows to reduce design verification time. Initially, automated numerical simulations collected quasi-steady-state data to test single-layer fully connected networks for predicting maximum battery temperature and temperature differential variations under different inlet air velocities. Results revealed that limited



datasets caused severe overfitting in neural networks, making them prone to failure when initial conditions changed or boundary conditions exceeded training data range, leading to physically unrealistic inference results.

To overcome data limitations, this study reconstructed the dataset using transient simulations and developed a ConvLSTM-based deep learning model capable of capturing spatiotemporal characteristics. Following comprehensive qualitative, quantitative, and long-term error propagation analyses, the trained model demonstrated prediction accuracy equivalent to traditional numerical simulations. Mean square errors remained below 2% across all test datasets, while achieving computational speeds over 4,300 times faster than conventional methods, generating results equivalent to 20-hour numerical simulations within 17 seconds. This substantial time reduction eliminates numerical simulation bottlenecks that constrain design iteration and real-time monitoring capabilities. Future applications in thermal hotspot analysis, design validation, and automated thermal management control represent significant opportunities for practical implementation.

Keywords: container-type battery energy storage system, thermal management strategy, deep learning, surrogate model, spatio-temporal series analysis

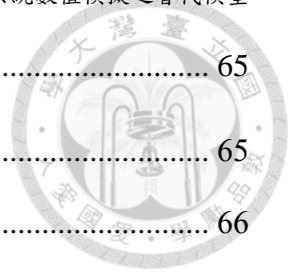


目次

摘要	i
Abstract.....	ii
目次	iv
圖次	vii
表次	ix
符號表	x
第一章 前言	1
1-1. 研究背景	1
1-2. 研究動機	1
第二章 文獻回顧	3
2-1. 電池儲能系統與電池發熱議題	3
2-2. 電池熱管理系統	5
2-3. 深度學習模型	7
2-3.1. 深度學習之基礎	8
2-3.2. 問題界定	9
2-3.3. 時空序列分析	10
2-3.4. 數值模擬輔助與替代模型	14
第三章 研究方法	17
3-1. 數值模擬	17
3-1.1. 物理模型	17
3-1.2. 統御方程式	22



3-1.3. 邊界條件與數值模擬設定.....	23
3-1.4. 獨立性驗證與網格切分設定.....	24
3-1.5. 資料集建立策略.....	26
3-2. 神經網路模型.....	29
3-2.1. 簡易 ANN 模型.....	29
3-2.2. 深度學習模型.....	31
3-2.3. 損失函數設計與訓練方法.....	37
3-2.4. 模型評估.....	38
第四章 結果與討論.....	40
4-1. 數值模擬結果.....	40
4-1.1. 擬穩態資料集.....	41
4-1.2. 暫態資料集.....	41
4-2. 單層人工神經網路.....	43
4-2.1. 訓練、測試誤差.....	43
4-2.2. 逆向工程與泛化能力討論.....	45
4-2.3. 小結.....	47
4-3. ConvLSTM 深度網路.....	48
4-3.1. 訓練、測試誤差.....	48
4-3.2. 預測結果可視化與誤差分析.....	49
4-4. 結論.....	57
第五章 結論與未來展望.....	58
5-1. 結論.....	58
5-2. 未來展望.....	59
參考文獻.....	60



附錄	65
近牆面網格加密對流場模擬結果之影響	65
殘差連結對模型訓練之影響	66
損失函數遮罩對模型預測結果之影響	67
輸入前處理方式對模型預測結果之影響	69
神經網路訓練之隨機性	71
甘特圖	72



圖次

圖 2-1 文獻回顧架構圖	3
圖 2-2 電池放電過程中受不同奈米流體冷卻影響之最高溫與溫差 (Tousi <i>et al.</i> , 2021).....	6
圖 2-3 DL 相關論文發表趨勢 (Herrmann & Kollmannsberger, 2024).....	8
圖 2-4 人工神經網路示意圖	8
圖 2-5 基礎 RNN 架構示意圖	11
圖 2-6 ConvLSTM 用於降雨即時預報 (重製圖, Shi <i>et al.</i> , 2015)	13
圖 2-7 深度學習求解器以遠低於直接數值模擬的精度求得相似解 (Kochkov <i>et al.</i> , 2021).....	16
圖 3-1 研究方法架構圖	17
圖 3-2 台達電子儲能貨櫃模組 (a)上視圖, (b)前視圖 (Delta Co., Ltd., n.d.)	18
圖 3-3 電池儲能貨櫃物理模型配置 (a)前視圖, (b)立體圖	19
圖 3-4 層壓式鋰離子電池結構與熱傳導係數差異 (重製圖, Chen <i>et al.</i> , 2005)....	21
圖 3-6 (a)前、後二平面示意圖, 二平面分別設於前後兩排電池中心處, (b)所蒐集資料示意圖, 此為前平面於特定步階之溫度分佈	28
圖 3-7 ReLU 函數	30
圖 3-8 經前處理後資料可視化結果	32
圖 3-9 LSTM 單元層示意圖	33
圖 3-10 CNN 之特徵提取方式 (Dumoulin & Visin, 2016).....	34
圖 3-11 模型輸入輸出示意圖	35

圖 3-12 特徵縮放路徑示意圖	36
圖 4-1 結果與討論架構圖	40
圖 4-2 電池組最高溫度與平均溫度隨時間變化圖 (a)兩案例最高電池溫度趨勢， (b)兩案例平均電池溫度趨勢	42
圖 4-3 單層神經網路訓練曲線	43
圖 4-4 五入風口位置與其編號	46
圖 4-5 第一入風口風速對 T_{max} 模型預測結果作圖	47
圖 4-6 ConvLSTM 模型訓練曲線	48
圖 4-7 預測結果與數值模擬結果對照圖	53
圖 4-8 不同序列時距的預測結果	50
圖 4-9 長時距(500 步階)預測結果	56
圖 A-1 (a)機櫃速度場前視圖，紅框處放大得下二圖，(b)近牆面網格加密(左)與未 加密(右)之局部流場分佈	66
圖 A-2 殘差連結對訓練穩定性影響對照圖	67
圖 A-3 損失函數遮罩前後模型預測比較	68
圖 A-4 輸入條件前處理示意圖	69
圖 A-5 不同輸入前處理方法模型預測比較	70
圖 A-6 模型重複訓練之表現差異比較	71



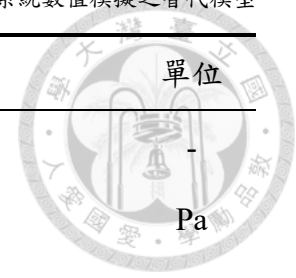
表次

表 3-1 台達電子 DBSHV50S 型鋰離子電池規格參數.....	20
表 3-2 電池模型之數值模擬相關參數.....	21
表 3-3 數值模擬邊界條件.....	24
表 3-4 數值模擬其他相關設定.....	24
表 3-5 網格獨立性驗證結果.....	25
表 3-6 時間步階獨立性驗證結果.....	25
表 3-7 淺層模型超參數設定.....	29
表 3-8 深度模型超參數設定.....	37
表 4-1 擬穩態資料集分佈狀況.....	41
表 4-2 T_{\max} 模型測試結果.....	44
表 4-3 T_{\min} 模型測試結果.....	44
表 4-4 ANN 模型逆向推論最佳入口風速組合.....	45
表 4-5 ANN 模型對極端輸入之預測結果.....	47



符號表

拉丁字母	說明	單位
B	神經網路模型輸出層之偏差	-
b	神經網路模型隱藏層之偏差	-
c	神經網路模型輸出層之權重	-
C_p	比熱容	J/kg·K
$C\text{-rate}$	充放電速度	A/Ah
e	內能	J/kg
E_{abs}	絕對誤差	-
\vec{F}	系統所受外力	N
f_t	ConvLSTM 模型的遺忘門(forget gate)	-
\vec{g}	重力加速度	m ² /s
G	紊流動能生成項	kg/m·s ³
h	比焓	J/kg
h_i	深度網路模型第 i 個隱藏層之輸出	-
\hat{h}_i	深度網路模型第 i 個隱藏層之輸出對應之基準真值	-
i	ConvLSTM 模型的輸入門(input gate)	-
\vec{j}	擴散通量	kg/m ² ·s
k	紊流動能	m ² /s ²
k_{eff}	等效熱傳導係數	W/m·K
k_x	電池 X 軸方向之熱傳導係數	W/m·K
L	序列時距	step
M	馬赫數	-



拉丁字母	說明	單位
o_t	ConvLSTM 模型的輸出門(output gate)	-
p	靜壓力	Pa
Re	雷諾數	-
S_h	外加熱源	W/m ³
T	溫度	K
t	時間	s
\vec{v}	流體速度	m/s
\hat{y}	對應模型輸出 y 的基準真值	-
Y_k	紊流動能逸散項	kg/m·s ³
Y_ω	紊流比耗散率逸散項	1/m·s
w	神經網路模型隱藏層之權重	-
z	Z 分數	-

希臘字母	說明	單位
σ	啟動函數	-
σ_x	資料 x 之標準差	-
σ_k	紊流動能普朗特常數	-
σ_ω	紊流比耗散率普朗特常數	-
θ	神經網路模型可學習參數	-
μ	氣體動力黏滯係數	kg/m·s
μ_t	紊流黏滯係數	kg/m·s
ρ	流體密度	kg/m ³
ω	紊流比耗散率	1/s
$\bar{\tau}$	壓力張量	Pa

希臘字母	說明	單位
Γ_k	紊流動能有效擴散係數	kg/m·s
Γ_ω	紊流比耗散率有效擴散係數	kg/m·s
字母縮寫	說明	
AD	自動微分(automatic differentiation)	
AE	自編碼器(autoencoders)	
AI	人工智慧(artificial intelligence)	
ANN	人工神經網路(artificial neural network)	
BESS	電池儲能系統(battery energy storage system)	
BTMS	電池熱管理系統(battery thermal management system)	
CNN	卷積神經網路(convolutional neural network)	
DBSCAN	density-based spatial clustering of applications with noise	
DL	深度學習(deep learning)	
DNN	深度神經網路(deep neural network)	
FB	液流電池(flow battery)	
GAN	生成對抗網路(generative adversarial networks)	
GNN	圖神經網路(graph neural network)	
GraphCNN	圖卷積神經網路(graph convolutional neural networks)	
GRU	gated recurrent unit	
IEA	國際能源署(International Energy Agency)	
IEEE	電機電子工程師學會(Institute of Electrical and Electronics Engineers)	
KNN	K 近鄰演算法(K-nearest neighbors)	
LLM	大型語言模型(large language model)	



字母縮寫	說明
LSTM	長短期記憶(long short-term memory)
ML	機器學習(machine learning)
MLP	多層感知器(multilayer perceptron)
RANS	雷諾平均納維－斯托克斯方程(Reynolds-averaged Navier-Stokes equations)
RBM	受限玻茲曼機(restricted Boltzmann machines)
ReLU	整流線性單位(rectified linear unit)
RNN	循環神經網路(recurrent neural network)
SOC	電量(state of charge)
SST	shear-stress transport
SVM	支持向量機(Support Vector Machines)



第一章 前言

1-1. 研究背景

在全球致力於降低碳排放與應對日益增長的電力需求的背景下，能源轉型已成為各國關注的焦點。根據國際能源署 (International Energy Agency, IEA) 的估計，2024 年至 2026 年間，受數位化、智慧化及電氣化趨勢的推動，全球電力需求將以每年 3.4 % 的速度增長 (IEA, 2024)。儘管再生能源快速擴張，化石燃料在全球發電量中的占比仍然顯著，導致碳排放持續增加。IEA 強調，若無加速變革，2050 年化石燃料仍將占能源組合的一半以上。因此，為實現淨零排放目標，亟需在技術、經濟和全球合作方面加速轉型。

因應全球能源轉型的需求，再生能源技術的進展備受矚目。同時，電池儲能系統 (battery energy storage system, BESS) 以其高能量密度與快速響應特性，成為再生能源整合至電網的關鍵技術。然而，電池儲能系統的大規模應用也帶來了電池溫度管理的挑戰。鋰離子電池作為電池儲能系統的主要應用蓄電池種類之一，在充放電過程中會電化學反應產生大量熱能，若無有效的電池熱管理系統 (battery thermal management system, BTMS)，可能導致熱失控 (thermal runaway)，危及系統安全及性能。在全球暖化造成的災難與經濟損失逐年攀升的今日，為加速邁向淨零碳排的願景，電池儲能技術與熱管理技術的進展備受期待。

1-2. 研究動機

隨著全球能源結構的轉型，再生能源的使用比例逐年提高。然而，太陽能與風能等再生能源因發電量具高波動性，為電網的穩定性帶來挑戰。為了平衡供需，電池儲能系統成為解決方案的核心技術。不僅能在供電過剩時儲存能量，於需求高峰時釋放電力，還可作為備用電力源以應對突發事件。然而，儲能系統的運行中，因電池充放電過程中產生的熱量累積，往往造成潛在的熱管理問題，成為其進一步普



及應用的技術瓶頸。

鋰離子電池因其高能量密度、低自放電率和高充放電效率，廣泛應用於各式儲能系統。然而，鋰離子電池在充放電過程中會產生顯著的熱量，若無適當的熱管理系統，可能導致溫度過高而引發熱失控，造成火災或爆炸等安全事故(Henke & Hailu, 2020)。此外，溫度過高或過低也會影響鋰離子電池的性能與壽命，縮短其生命週期，增加維護成本(Liu *et al.*, 2014; Al-Zareer *et al.*, 2019; Jaguemont *et al.*, 2016)。電池組之間溫差過大亦可能導致容量不平衡，降低整體系統的效率(IEEE, 2012)。因此，設計有效的熱管理系統，對於電池儲能系統的安全性與經濟性尤為重要。

在熱管理技術的發展過程中，數值模擬方法扮演了重要角色。然而，此傳統方法往往需要昂貴的計算資源，也難以達成處理多樣化的應用場景或參數優化等目標。儘管如此，數值模擬方法相較實體實驗與原型(prototype)製造，仍屬更為經濟而高效的方法，今日仍為熱管理系統研究使用之主要工具之一(Al-Zareer *et al.*, 2019)。

近年來，深度學習(deep learning, DL)技術隨著軟、硬體的技術演進，在自然語言處理領域一鳴驚人，也同時在包含科學計算等的其他領域嶄露頭角。相較數值模擬方法，深度學習模型可以在統御數學模型、控制系統參數等關鍵因子皆屬未知的前提下，仍建立有效模型並精準進行預測(Kumar *et al.*, 2023)。同時，此類模型往往可以大幅加速以數值模擬方法進行的設計週期，甚至達成設計的自動化。然而，包含熱管理系統設計在內的科學計算領域，通常並非大數據導向，訓練深度網路及部署應用時仍面臨相當大的挑戰(Faroughi *et al.*, 2024)。

本研究針對鋰離子電池儲能系統之熱管理策略設計問題，建立資料集與深度學習模型，藉以替代傳統數值模擬方法，加速預測不同邊界條件下的電池溫度分佈。透過測試不同的模型架構與資料蒐集策略，建立適用於電池儲能系統之深度學習應用方法，推進電池儲能系統技術的發展。



第二章 文獻回顧

本研究導入深度學習技術，建立傳統數值模擬方法之替代模型，以更高效率預測不同電池熱管理系統設計下的電池狀態。文獻回顧章節將先行介紹常見的電池儲能系統種類，以及電池工作溫度與其運作效能、安全性之關聯。接著，彙整常見的電池熱管理系統種類，各自優、劣勢及適用情境，以及相關近年研究趨勢。最後，本文將拆解、分析目標問題的屬性，並依此回顧相關領域，如時空相依性處理、數值模擬輔助模型等的深度學習研究，從中選用合適的模型架構作為本研究參考之基礎。此章節之架構圖如圖 2-1。

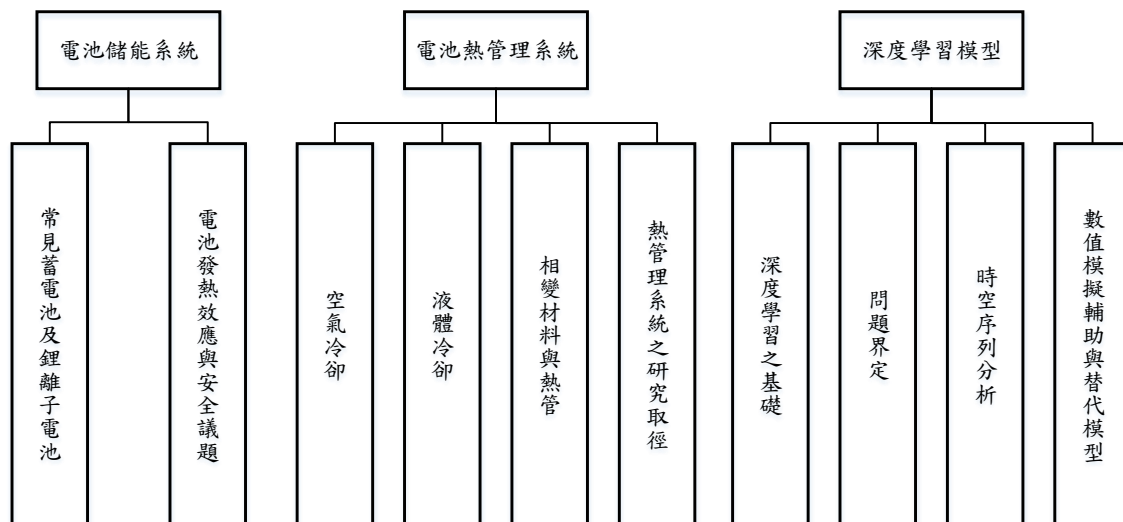


圖 2-1 文獻回顧架構圖

2-1. 電池儲能系統與電池發熱議題

電池儲能系統乃儲能系統中最廣泛被使用的其中一種形式。低維護成本、高能源轉換效率、建置容易，以及遠高於其他電能儲能方式的能量密度(10 kWh/kg 至 13 kWh/kg; Nadeem *et al.*, 2019)，令電池儲能系統相較其他儲能系統具不可撼動之優勢。McKinsey & Company (2023)分析指出，2022 年 BESS 投資額達 50 億美元，且預期此金額將在 2030 年增加至 1200 至 1500 億美元。



大型電池儲能設施運作時，必須有良好的熱管理系統，用以提升效率並避免危害。本節將就常見電池種類、電池發熱效應，以及過去之熱管理技術做簡要的統整與文獻回顧。

常見蓄電池及鋰離子電池

電池儲能系統常用電池包含鉛酸電池、鈉硫電池、鎳基電池、鋰離子電池，以及液流電池(flow battery, FB)等種類 (Kampouris *et al.*, 2020)，各有其優勢及應用領域。其中，鋰離子電池相較其他種類蓄電池，具有高能量密度、低質量密度、無記憶效應(memory effect)問題，自放電率低等優勢，高放電率的特性亦使之勝任需要短時間內供給大量電力的任務(Al-Zareer *et al.*, 2018)，因而廣泛應用於車用電池及儲能系統等處。本研究所採用模型即以鋰離子電池排列、堆疊而成之電池儲能系統。

電池發熱效應與安全議題

大型電池儲能系統於運作時，對應電池之充、放電過程，將產生大量熱能，並提升電池溫度。同時，電池之性能及壽命與其工作溫度息息相關。特別是如鋰離子電池的高電壓電池，若無適當之熱管理策略，過高的電池溫度甚至可能引發熱失控風險(Henke & Hailu, 2020)。鋰離子電池之最佳工作溫度介於 15 °C 至 40 °C 之間 (Zhang *et al.*, 2022)，過低將降低電化學反應速率而影響電池功率及蓄電量(Chen, 2013)，過高則可能造成電池內部短路、輸出電壓降低，以及加速電池老化反應(ageing effect)等問題 (Liu *et al.*, 2014; Al-Zareer *et al.*, 2019)。倘若鋰離子電池溫度超過 60 °C，電池內部的電解液隔膜(separator)便可能融化，導致電池短路而溫度驟升，造成熱失控現象(Qin *et al.*, 2021)。因此，絕大多數的儲能系統皆須配以合適的電池熱管理系統，確保使用安全及效能。

溫度過低同樣會阻礙電池正常運作。Jagemont *et al.* (2016)在其研究中指出，鋰離子電池在 0 °C 以下的低溫時會發生顯著的電量與功率損失，且會造成電池降

解(degradation)及加速老化等效應。在低溫環境下，電池亦須熱管理系統確保其正常運作。

除了控制電池溫度於合適範圍，熱管理系統同時須用於降低電池間的溫差。電機電子工程師學會(Institute of Electrical and Electronics Engineers, IEEE)於 2012 年的報告《Guide for the Ventilation and Thermal Management of Batteries for Stationary Applications》中指出，儲能系統中的電池組溫差若超過 5 °C，其供電效能將受顯著影響，甚至有電池組失效、電池局部降解等風險。

2-2. 電池熱管理系統

根據需求與應用情境，電池熱管理系統有相當多樣的型態。以冷卻媒介/方法進行區分，電池熱管理系統大致可分為以下幾類：空氣冷卻、液體冷卻、相變材料(phase change material, PCM)冷卻及熱管(heat pipe)等。以下將就各技術的優、劣勢，以及近年發展進行回顧。

空氣冷卻

以空氣為冷卻流體之電池熱管理系統，由於設計單純、維護容易、成本低廉等特質，足以滿足多數情境需求，因而成為最主要的應用種類(Abdelkareem *et al*, 2022)。空氣冷卻通常可進一步被區分為主動(active)冷卻及被動(passive)冷卻兩種，前者以額外能源驅動空調/加熱器系統以調整空氣溫度，通常可以達到數百瓦的散熱功率，主動氣體冷卻則可達到約一千瓦(Olabi *et al*, 2022)。

定置型電池儲能系統多數放熱功率密度不高，應用合適的控制策略可維持電池於安全範圍運作。因此，本研究設計將以氣冷為散熱方式之基礎進行討論。

液體冷卻

液體冷卻相較空氣，通常具有更高的熱傳導係數以及熱容量，且佔用體積較小，故常應用於高電池輸出功率及空間受限的情境(如電動車; Lai *et al*, 2019)。然而，

液冷系統之重量、設計複雜度及高建置成本為其固有缺陷(Lv *et al.*, 2019)，在輸出功率較低的系統中不受青睞。

與氣冷相同的被動、主動區別外，液體冷卻另可分為直接冷卻及間接冷卻。前者之電池通常以浸泡於冷卻液的方式直接與冷卻液接觸，而後者則在管道中流通，不直接與電池表面接觸。間接冷卻通常較少安全疑慮，也是最常選用的液冷應用方式(Olabi *et al.*, 2022)。

在單純的液體冷卻之上，近年更有研究者提出在水或乙二醇中加入 ZnO、Al₂O₃、TiO₂ 或 CuO 等奈米顆粒，增加冷卻液的熱傳導係數(Kumar *et al.*, 2020)。Tousi *et al.* (2021)的研究顯示，在合適的冷卻液條件下，此方法可以協助降低電池之最高溫度與溫差(圖 2-2)。

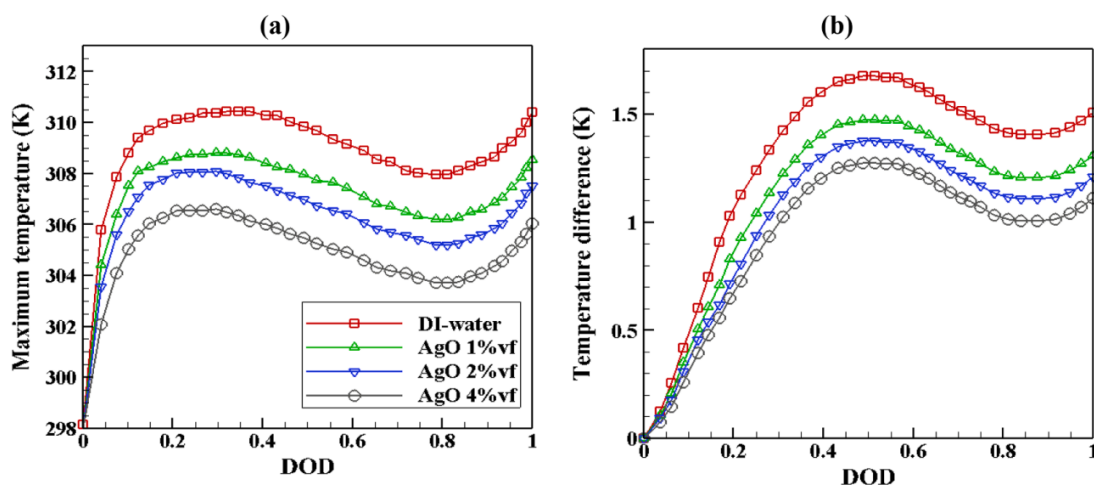


圖 2-2 電池放電過程中受不同奈米流體冷卻影響之最高溫與溫差 (Tousi *et al.*, 2021)

相變材料與熱管

以相變材料為基礎之熱管理系統，透過熔點或沸點落於電池工作溫度區間的材料相變時吸收潛熱以散熱，屬被動式冷卻。電力系統使用之相變材料散熱系統多屬固-液態相變材料，因其體積變化較小而結構更穩定 (Olabi *et al.*, 2022)。熱管則屬特殊的相變熱管理系統，利用冷卻流體於蒸發區吸熱汽化，再自動移動至冷凝

區放熱凝結，可形成不需維護、不需額外供能，且具長生命週期的溫度調控系統 (Behi *et al.*,2020)。Olabi *et al.* (2022)的文章中亦提及，無論是一般相變材料或熱管系統，於高功率散熱需求的應用中通常會搭以主動式的液冷或氣冷，作增強、輔佐散熱之用。

熱管理系統之研究取徑

電池熱管理系統的設計與改良之核心在於建立準確的電池系統模型，並以之評估、測試電池在不同設計下的狀態(Kumar *et al.*, 2023)。Kumar *et al.*的文章中總結了常見的電池模型，包含電化學模型、等效電路模型與資料驅動(data driven)模型。資料驅動模型包含人工神經網路(artificial neural network, ANN)、深度神經網路(deep neural network, DNN)、支持向量機(support vector machines, SVM)等方法，相較其他傳統方法，基於可以在未知於統御數學模型、過於複雜的控制系統參數等要素之前提下仍建立有效模型，在近年為研究領域飽受重視的取徑。下文將針對資料驅動方法，特別是深度學習的建模方法進行說明與相關文獻的回顧。

2-3. 深度學習模型

在理想狀況下，對於任何連續性的輸入、輸出關係，人工神經網路皆能自行找出對應的近似函式(Kurt *et al.*, 1989)。近年隨相關軟、硬體之技術進展，複雜的人工神經網路得以被訓練(train)並進行推論(inference)，深度學習於科學運算領域的應用大幅拓展。2017 年以降，以人工智慧(artificial intelligence, AI)、機器學習(machine learning, ML)、人工神經網路或深度學習為主題之研究急速增加(圖 2-3)，足見學界對此強大工具的高度關注。

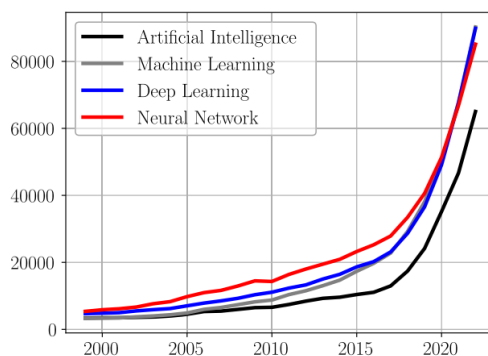


圖 2-3 DL 相關論文發表趨勢 (Herrmann & Kollmannsberger, 2024)

科學計算領域受惠於深度學習技術帶來高效運算的可能性之時，亦面臨許多待解決的挑戰。舉例而言，深度模型往往需要大量的數據以有效地進行訓練，然而多數科學領域並非由大數據驅動，多數情況下亦不可能針對邊界、初始條件與環境變因建立完整的資料集，若以單純的多層感知器(Multilayer Perceptron, MLP)建構模型，往往可有限的加速運算而無力更進一步進行預測(Faroughi *et al.*, 2024)。本段落將以深度學習為主軸，介紹與本研究題目相關之模型和技術。

2-3.1. 深度學習之基礎

人工神經網路乃擬合任意連續性函式之技術(Hornik *et al.*, 1989)，即以 $y = f_{learned}(x; \theta)$ 近似目標函數 $\hat{y} = f(x)$ 。透過更新可學習參數 θ ，人工神經網路即可自行「學習」 $f_{learned}$ 之表述方式。

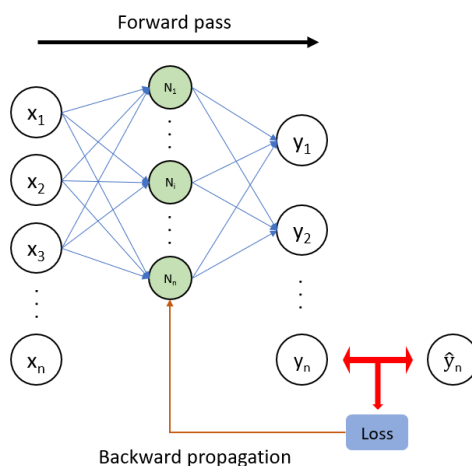


圖 2-4 人工神經網路示意圖



基礎之全連接層及其訓練方式如上圖 2- 4 所示。每個輸入 x_i 將經過所有神經細胞 (cell) 的非線性映射，並以這些細胞的輸出通過線性組合獲得 y_i 。每個細胞所進行之操作可由下式(2- 1)表示：

$$y_i = \sigma\left(\sum_{j=0}^n w_j^i x_j + b_i\right) \quad (2- 1)$$

其中 w 、 b 即模型可學習之參數：權重(weight)與偏差(bias)； σ 則是非線性啟動函數(activation function)，用於賦予模型擬合目標函數的能力。

模型所計算得之輸出 y 將會與給定的基準真值(ground truth) \hat{y} 計算相對誤差(loss)，並藉由自動微分(automatic differentiation, AD)進行反向傳播(backward propagation)更新模型參數。由此，人工神經網路得以給予的資料自動學習輸入輸出間的關係。

倘若在模型中堆疊多層隱藏層(即上圖 2- 4 中綠色細胞層)，此模型便可稱作深度神經網路，其訓練過程便是深度學習。深度網路給予模型更高的學習彈性，並在過去研究中證實較拓展隱藏層廣度可得到更好的模型表現(Mhaskar *et al.*, 2017)，故在多數複雜問題中皆傾向採用具有一定深度的模型。

2-3.2. 問題界定

隨著深度學習相關研究的進展，各式模型不斷更迭，往往針對一個問題類別，便可找到數個甚至數十個模型架構候選。針對目標問題本身的理解，以及對應應該參照之指標，則成為應用成功與否之關鍵。

本研究之目標為建立一大型電池儲能貨櫃系統數值模擬之替代模型，並進行溫度場預測，以及參數最佳化之逆向工程。此主題可進一步解析出以下數個特質：

1. 本問題為連續性(continuous)的迴歸(regression)問題，其輸入與輸出皆為連續之數值。

2. 氣冷之電池儲能系統具有流體速度高、溫度變化緩慢之特點。訓練完成之模型需要對一紊流為主之暫態熱傳系統進行長時距之預測。
3. 若將預測範圍設定為數值模擬計算域整體，則本問題亦具備高度空間連續性，而流體運動與熱傳本質上亦由空間連續方程所驅動。

綜上所述，本研究對象為具多維特徵的時空(spatio-temporal)序列分析問題。下文將先針對時空序列問題及對應的深度學習模型做討論，再加入相關物理條件所帶來的限制與相應技術進行回顧。

2-3.3. 時空序列分析

時空序列即同時具備時間相依性及空間相依性的資料，資料集中的數據不獨立於鄰近位置或鄰近步階之數據，具有自相關性(autocorrelation)。為捕捉並善用此資料特性，傳統機器學習領域已有許多技術被提出，支持向量機、隨機森林(random forest)、K 近鄰演算法(K-nearest neighbors, KNN)、決策樹(decision trees)、DBSCAN (density-based spatial clustering of applications with noise)等為最常應用於時空分析的幾種演算法(Ahmed & Raihan, 2024)。同時，針對時間連續性、空間連續性，以及二者結合之問題，深度學習領域亦有相應的數個演算法被提出，以下參考 Ahmed & Raihan 之文章，分項簡述各技術概要與應用方式。

空間連續性：CNN、GNN

卷積神經網路(convolutional neural network, CNN)以帶有共享之可學習參數的卷積核(kernel)掃掠帶有結構性網格特徵(如圖片或空間分布資料)之輸入，並提取高抽象維度的特徵地圖(feature map)。CNN 的架構使其相較 MLP 更有效的萃取空間相依的特徵，因此最常應用於圖像辨識，而在處理迴歸預測任務中的空間相依特質時亦表現出色。

圖神經網路(graph neural network, GNN)及其衍生的圖卷積神經網路(graph convolutional neural networks, GraphCNN)可視為 CNN 更一般化的形式，其處理對

象不僅限於網格形式的輸入，而是任意自定義的，由節點(node)與邊(edge)構成的圖(graph)。相較 CNN，GraphCNN 可以更彈性的處理較不結構化的空間連續資料，甚至非空間性質的相依性也可藉由妥善的圖定義而以 GraphCNN 處理。如其命名提示的，GraphCNN 同樣應用了卷積操作，但其卷積操作的應用對象便非網格化的輸入，而是自定義的圖。

時間連續性：RNN、transformers

基礎的循環神經網路(recurrent neural network, RNN)將每個隱藏層(hidden layer)的輸出以特殊的記憶細胞(memory cell)儲存，並用於計算後續序列之輸出(如圖 2-5)。藉此，RNN 得以先前輸出決定後續輸出，捕捉時間連續性。實務上，通常會選用 RNN 的其中一個變種：長短期記憶(Long Short-Term Memory, LSTM)或 Gated Recurrent Unit (GRU)，抑或直接採用 transformers 作為基礎架構進行拓展及客製化。LSTM 在 RNN 的記憶能力之上，增添了令模型自行選擇是否存取或遺忘記憶的機制；GRU 則是基於 LSTM 的機制進行略為簡化之變種。本研究應用之 LSTM 架構將於 3.2.2 另行詳述。

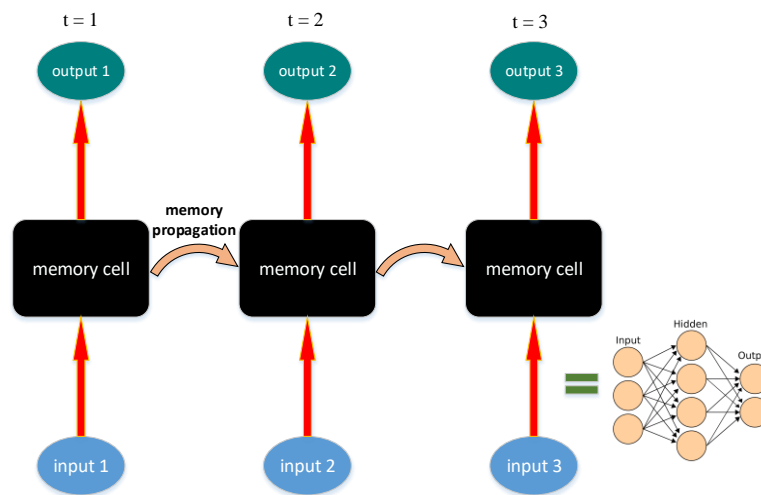


圖 2-5 基礎 RNN 架構示意圖

Transformers 最初意圖解決 RNN 在序列處理任務上的侷限性，而建立了自注

意力(self-attention)機制。針對相同的連續性序列問題，RNN 需要依序處理每個時刻的輸入，而 self-attention 機制同時處理整個序列，而在需要同時針對前後資料進行類推的任務(如文字生成)有更好的表現，且能夠有效的平行化(parallelize)；同時，對同樣的任務，transformers 相較 RNNs 可能需要更多記憶體與運算資源，故通常適用於資源充足，且目標處理序列較長的任務。

非監督式學習與生成式模型

數個非監督式學習技術常在時空序列分析任務中扮演輔佐或主要角色。在標註資料稀少或難以取得的情況下，非監督式學習，即以無標註正確答案之資料進行學習的模型，可協助進行集群分類(clustering)、異常檢測(anomaly detection)、資料降維、特徵萃取等功能。常用於時空問題之模型架構有自編碼器(autoencoders, AE)、受限玻茲曼機(Restricted Boltzmann Machines, RBM)，以及生成對抗網路(Generative Adversarial Networks, GAN)。

自編碼器利用編碼器(encoder)與解碼器(decoder)架構將輸入對應至低維的抽象表示，再由此表示重建出原始輸入，藉此協助建立時空資料的壓縮與意義萃取，以利後續資料應用。受限玻茲曼機同樣為非監督式學習，可自高維度資料中學習機率分佈，再由此分佈進行特徵萃取、降維，甚至直接生成新資料以用於預測、異常檢測或資料填補。

生成對抗網路則由兩個網路的交互學習以訓練。對抗雙方——生成器(generator)與辨認器(discriminator)——分別模仿既有資料產生虛構資料，以及嘗試分辨資料為原始資料或虛構資料。隨著兩個網路的進步，生成器最終便可能生成難以與原始資料區別的虛構資料，此生成器便可接續進行資料填補等任務。

各模型架構及變種之應用文獻回顧

上述數個模型架構在近年與時空序列分析相關研究中被各自延伸、調整，於科



學運算領域大放異彩。

以 LSTM 為基礎所建構之模型中，Shi *et al.* (2015) 將原始 LSTM 中的矩陣乘積以卷積操作取代，提出 ConvLSTM 架構，同時捕捉時間與空間維度之資訊交互影響的動態，在 Moving-MNIST 資料集中有良好表現，也成功利用雷達回波圖進行降雨量之預測，如圖 2-6。Fan *et al.* (2020) 以結合 MLP、LSTM 之模型接於 K-L 轉換 (Karhunen-Loève Transform) 之後，提出 KL-MLP-LSTM 模型架構，預估熱處理過程中的溫度分佈變化。Wang *et al.* (2022) 基於原始 ConvLSTM 進行改善，提出創新的「之字形(zigzag)記憶流」架構，讓模型中不同層級的記憶有效的溝通，以此建立的 PredRNN 模型在原始論文測試之資料集與其他 3 種資料集任務中達到了 state-of-the-art。

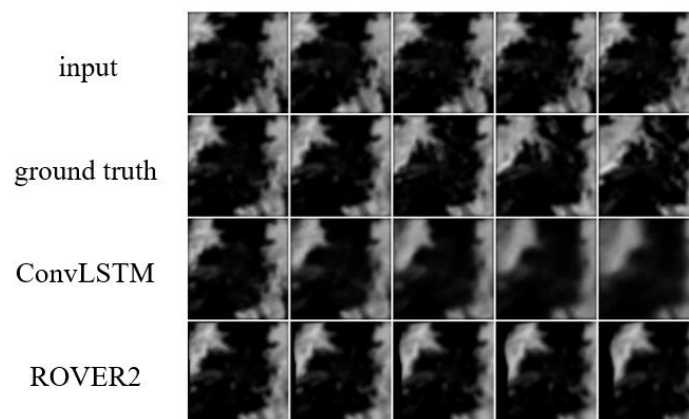


圖 2-6 ConvLSTM 用於降雨即時預報 (重製圖，Shi *et al.*, 2015)

以 transformer 為基礎的研究亦在近年陸續被發表。Yu *et al.* (2020) 以 TGConv，一個以 transformer 為基礎的 GraphCNN 應用架構，以及與之獨立，用於處理空間維度的 transformer 共同協作，提出 STAR (Spatio-Temporal grAph tRansformer) 模型預測真實世界中路人的行徑軌跡。Li *et al.* (2022) 為解決 3D CNN 由於接受區 (receptive field) 設計而易於傾向局部性特徵，而視覺 transformers 相反的可以捕捉廣域資訊卻容易忽略小尺度的空間關聯性問題，而融合二者優勢，提出

UniFormer 模型架構，在模型準確度與訓練難度間取得了優異的平衡。

有鑒於深度學習對時空序列分析的效能顯著，相關主題之研究隨時日不斷增加。然而，針對特定領域如流體力學，又或是特定任務如紊流場溫度預測，最適切之模型架構通常未有定論，甚或應用實例尚零星而分析不全面，難以借鑒，遑論套用。以下將針對目前在數值模擬，特別是流體及熱傳分析之深度學習應用之研究進行回顧與討論。

2-3.4. 數值模擬輔助與替代模型

神經網路作為普遍函數擬合技術的性質，使其應用範圍極為廣泛。任何可以被形塑為函數關係的問題，都可能可以利用神經網路得到解方。因此，即使限於計算力學領域，深度學習之應用仍相當多元。Herrmann & Kollmannsberger (2024)的文章中將常見的研究取徑分為以下幾類：

1. 模擬替代(simulation substitution)：訓練一個神經網路以找出對應數值模擬之輸入、輸出間的關係函式。完成訓練之神經網路將可用於高抽象層次分析、預測、逆推輸入參數等目的，節省以數值模擬方法達成同樣目的所需之耗時。
2. 模擬輔助(simulation enhancement)：以神經網路輔佐或取代數值模擬過程中的部分步驟，如資料前後處理、網格生成、物理替代模型、多尺度運算及最佳化等。
3. 神經網路離散方法：以神經網路替代有限元素法、有限差分法等傳統離散方法。
4. 生成式模型：如 2-3.3 所述，生成式模型主要用於創造類似於原始資料的新資料，目前主要用於彌補監督式學習資料量稀缺問題，或用以輔佐開發新設計，在設計者提供之限制下探索可能的設計方案。

5. 強化學習：針對原始統御方程式並無有效、完整定義的問題，或是任務目標無法明確定義的情況，強化學習提供有效訓練模型的基礎，使深度學習得以用於傳統方法難以解決的困境。

本研究目的為探討電池熱管理系統之進風口條件與電池溫度分佈之關係，故不深入研究針對數值模擬本身的局部優化，將採取模擬替代之途徑，以下亦將僅就模擬替代、模擬輔助為主軸的流體、熱傳領域文獻進行回顧。

以深度學習建立數值模擬替代模型的方法主要有二：(1)直接建立初始條件與結果間的端對端(end-to-end)模型，(2)以類似傳統數值模擬的離散方法，訓練在每個步階對下個步階的輸出進行預測的迭代器或操作子。兩種方法互有優劣，前者容易因資料量過少導致模型過擬合(overfit)，也通常較難捕捉案例背後的物理性質；後者由於在推論階段將由模型本身自行迭代出最終結果，預測準確度的要求相當高，以避免嚴重的誤差傳播問題。若使用較複雜的模型，運算量也將推升訓練及推論的成本。

Yousif *et al.* (2022) 考量傳統上製造紊流入口條件的 recycling method 與 Spalart method 耗費運算資源極高的問題，設計了一個多尺度，次像素的卷積自編碼器(Multiscale convolutional-subpixel auto-encoder)取代此模擬步驟。Kochkov *et al.* (2021) 試圖在高精度模型耗費龐大運算資源，以及相反的簡單端對端訓練導致泛化失效問題間取得平衡，開發經學習求解器(learned solver)方法，能夠在粗網格下正確求出高精度的 PDE 解(圖 2- 7)，示例圖中三列分別為 DNS(圖中 DS)在高精度(2024x2024)及低精度(64x64)網格下，以及經學習求解器(LI)於低精度下的渦度可視化結果。Ebbs-Picken *et al.* (2023) 針對穩態，層流的共軛熱傳問題，提出 DeepEDH 模型，利用帶有卷積層的編碼-解碼器架構，在數值模擬替代模型任務中取得優於一般泛用模型的表現。

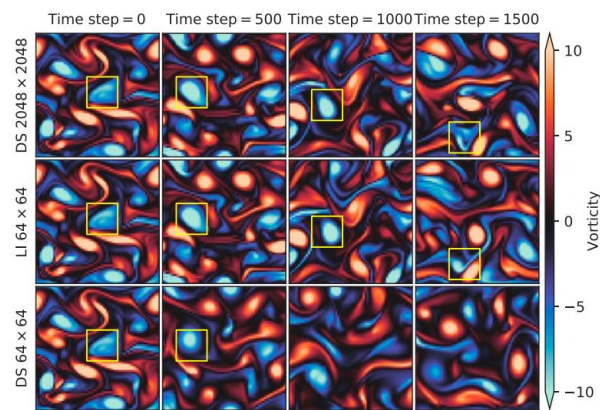


圖 2-7 深度學習求解器以遠低於直接數值模擬的精度求得相似解 (Kochkov *et al*, 2021)

儘管在流體、熱傳模擬之替代、加速任務上，已有一眾深度學習模型與方法被提出，針對紊流暫態系統，特別是具複雜結構的中尺度系統，無論資料集建立或模型訓練皆遠比穩態、層流、小尺度系統更為困難，其深度學習應用目前仍極少被討論，亦無完整的方法論被提出。本研究即意圖填補此研究領域的缺失，提出可應用於非穩態、非層流的案例之深度學習應用方法。



第三章 研究方法

本研究旨在建立可應用於中尺度紊流熱傳系統之深度學習替代模型 (surrogate model)，進行時空連續性之預測。以數值模擬為基礎，本研究建立電池儲能貨櫃氣冷系統之物理模型，並以商用軟體 ANSYS Fluent 進行雷諾平均納維-斯托克斯方程(Reynolds-averaged Navier-Stokes equations, RANS)數值模擬，蒐集不同入風口風速對流場分佈及溫度分佈之對應資料。接著，以此資料集訓練 ConvLSTM 模型，根據案例特性進行模型調整，並以相關指標確認此模型之有效性。下圖 3-1 展示本章節架構。

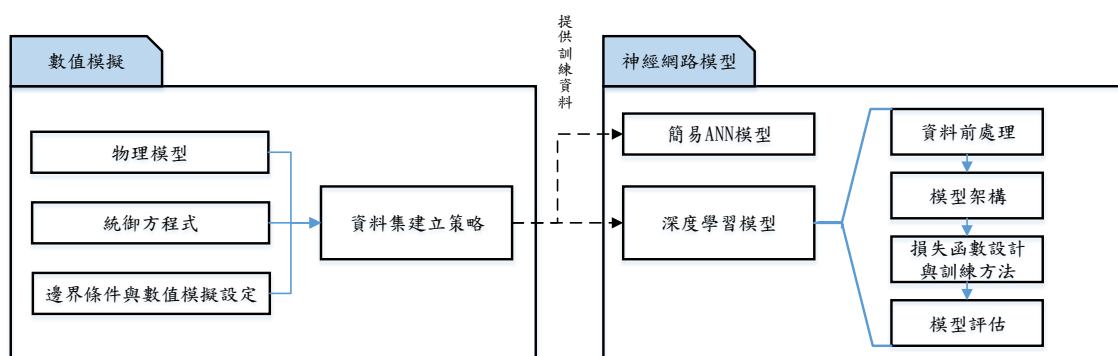


圖 3-1 研究方法架構圖

3-1. 數值模擬

本研究用於訓練及檢驗機器學習模型效果之資料皆來自數值模擬，使用的物理模型、模擬方法與參數設置等，將於本節分項詳述。

3-1.1. 物理模型

本研究參考黃新棫(2023)、Lin *et al.* (2023)及陳怡妏(2022)的研究，以台達電子公司定置型電池儲能貨櫃作為設計參照，其上視圖、前視圖如圖 3- 2，L1 可隨機櫃數量擴充而增長。此模型經內部構造簡化，僅保留貨櫃外殼、冷卻氣體進出口、以及電池排列組成之電池機櫃，作為本研究儲能貨櫃物理模型。10 組電池機櫃對

稱分佈於儲能貨櫃兩側，每個機櫃由 16 個電池模組垂直堆疊排列而成。參考 Zhang *et al.* (2014) 的研究成果，以具非等向熱傳係數之均質長方體作為台達電子 DBSHV50S 型鋰離子電池之物理模型，此模型與 Chen *et al.* (2018) 之實驗結果對照，電池溫度預測誤差低於 2%。由於原儲能貨櫃系統對中央平面呈完全對稱，為提升數值模擬計算效率，本研究設定機櫃中央對稱面為法向通量為零之平面，以半個儲能貨櫃，共 5 組電池機櫃，各自對應 5 個獨立控制之出入風口，作為模擬採用的物理模型。模型之配置如下圖 3-3，單一長方體代表一顆電池。

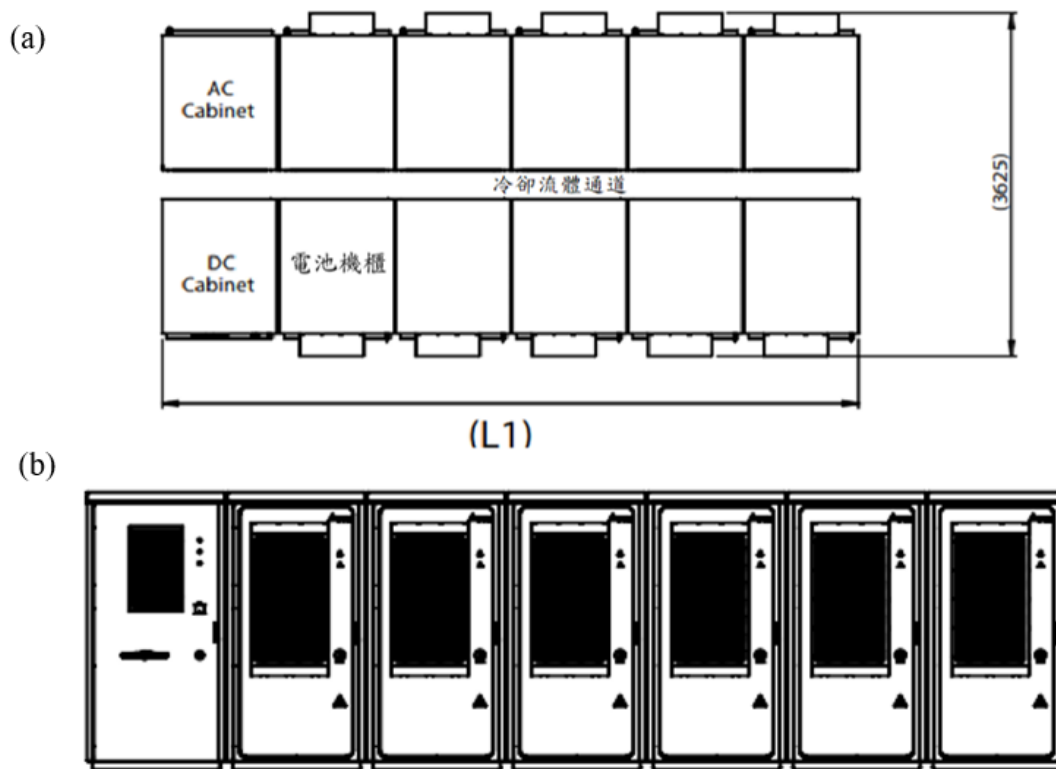


圖 3-2 台達電子儲能貨櫃模組 (a)上視圖，(b)前視圖 (Delta Co., Ltd., n.d.)

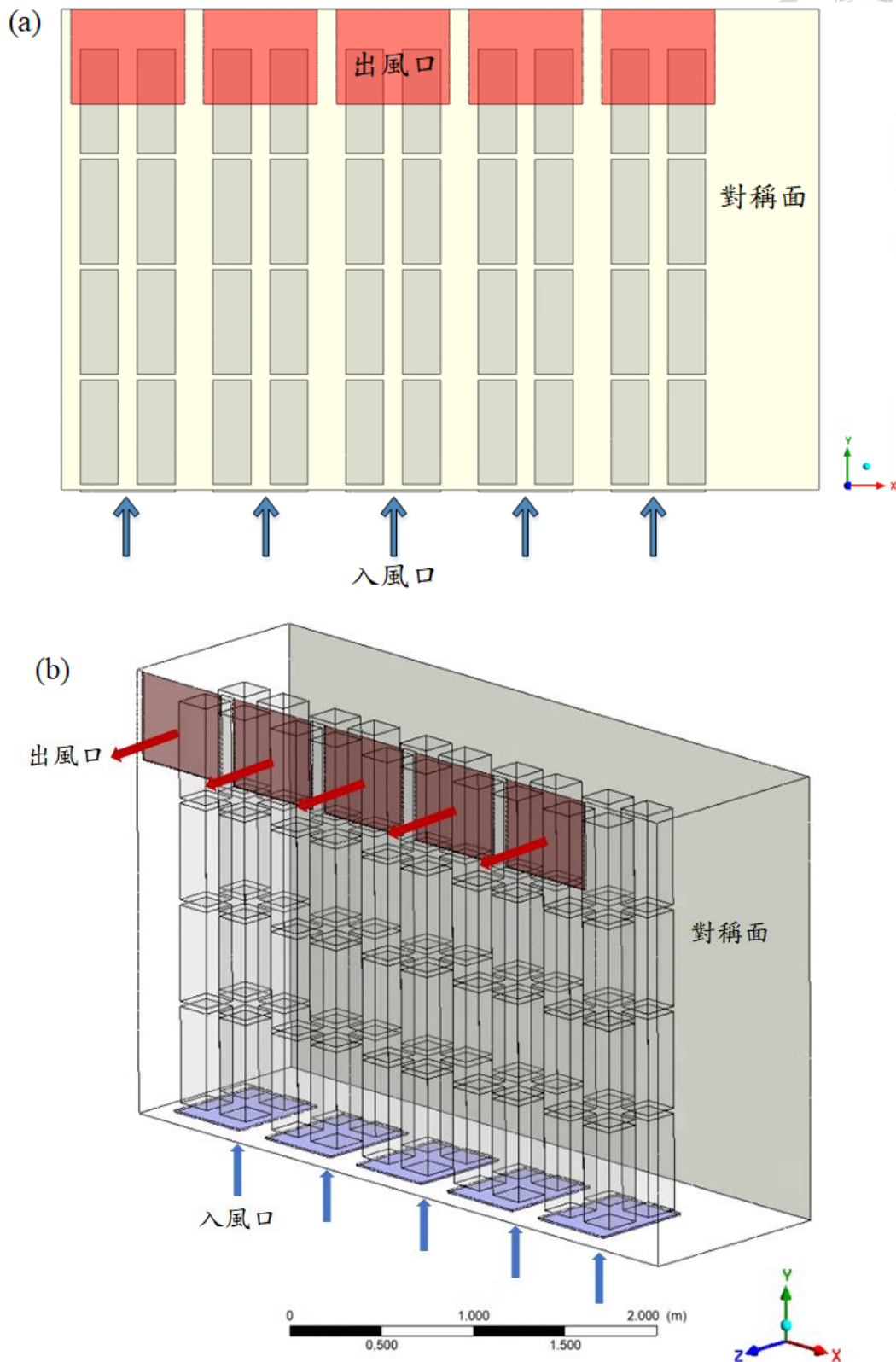


圖 3-3 電池儲能貨櫃物理模型配置 (a)前視圖，(b)立體圖

台達電子 DBSHV50S 型鋰離子電池之規格見表 3-1，本研究之電池發熱模型之參數則列於下表 3-2。電池的層壓堆疊構造及內部材料比熱與熱傳導係數差異，導致其堆疊方向(y 軸方向)熱傳導係數遠低於其徑向(x、z 軸方向)，如圖 3-4。Zhang *et al.* (2014)的研究中量測了電池之各方向之熱傳速度，以此建立將電池簡化為具非等向均質材料之模型，並計算各方向之等效熱傳導係數(thermal conductivity)，本研究即採用此熱傳導係數與比熱容(C_p)作為模型參數。電池之發熱率則以 Liu *et al.* (2014)在電池老化熱可忽略及固定放電速率兩個假設下推導出之式(3-1)計算。本研究設定電池工作電量為 50%，放電速率為 2，電池內電阻為 0.65 毫歐姆，代入式(3-1)後，計算得電池單位體積發熱量為 3955.6 W/m³。

$$\dot{Q} = I^2 R_{internal} - I \left(T \frac{\partial U_{OVC}}{\partial T} \right) \quad (3-1)$$

表 3-1 台達電子 DBSHV50S 型鋰離子電池規格參數

電池參數名稱	數值 (單位)
標稱電壓	51.8 (V)
標稱容量	60 (Ah)
尺寸	199 x 187 x 537 (mm ³)
重量	24 (kg)
工作電量(state of charge, SOC)	10 % ~ 90 %
放電速率(C-rate)	最大 4 C (200 A)



表 3-2 電池模型之數值模擬相關參數

電池參數名稱	數值 (單位)
尺寸	200 x 200 x 550 (mm ³)
電池總數	80
x 軸與 z 軸向熱傳導係數 (k_x, k_z)	21 (W/m·K)
y 軸向熱傳導係數 (k_y)	0.48 (W/m·K)
比熱容	1243 (J/kg·K)
放電速率	2
工作電量	50%
單位體積發熱率	3955.6 (W/m ³)

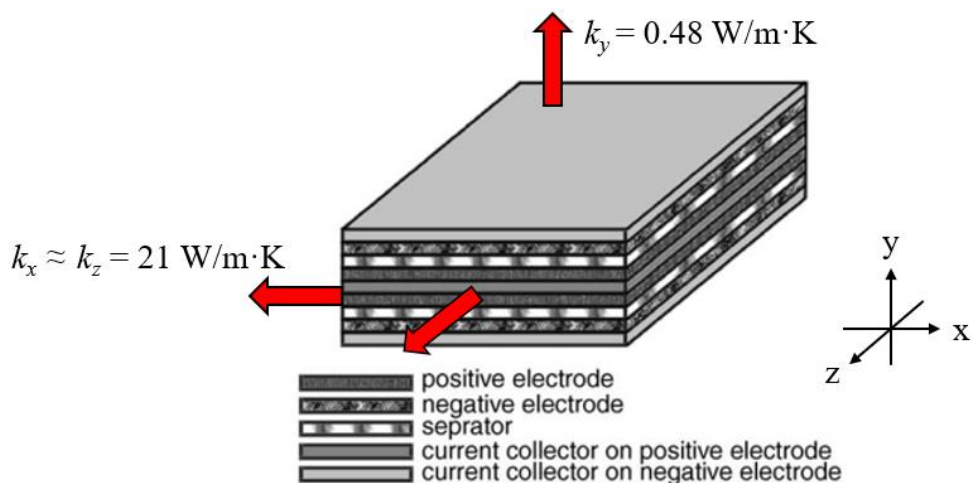


圖 3-4 層壓式鋰離子電池結構與熱傳導係數差異 (重製圖, Chen *et al.*, 2005)



3-1.2. 統御方程式

以入風口總流量 $5 \text{ m}^3/\text{s}$ 為例，流體主要通道寬 0.1 m ，通道中流速最高達 10 m/s 以上，計算得雷諾數達 6443 以上。以此速度在 $25 \text{ }^\circ\text{C}$ 下計算得之馬赫數為 0.0289 。本研究案例為具高雷諾數、低馬赫數的空氣流場，並考量流體與固體熱傳，因此假設為不可壓縮之紊流場，密度為 $\rho = 1.23 \text{ kg/m}^3$ ，黏滯係數 $\mu = 1.79 \times 10^5 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 。此系統將使用三維暫態之雷諾平均納維爾-史托克方程式模型，統御方程式有連續方程式、動量方程式與能量方程式三者，如下列式(3-2) - (3-4) (Kim *et al.*, 2019; Forgez *et al.*, 2010; Thomas *et al.*, 2003)。

- 連續方程式

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3-2)$$

- 動量方程式

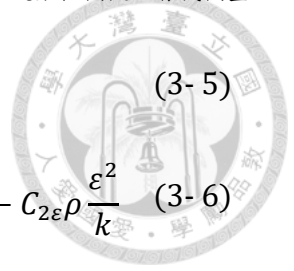
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3-3)$$

- 能量方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right) + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \left(h + \frac{v^2}{2} \right) \right) \\ = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + \bar{\tau}_{eff} \cdot \vec{v}) + S_h \end{aligned} \quad (3-4)$$

以上方程式中， p 為靜壓力， $\rho \vec{g}$ 與 \vec{F} 分別為重力與系統所受外力，由於本研究系統為孤立系統，二者皆設為零。 k_{eff} 為有效熱傳導係數 ($k + k_t$)，而 k_t 為紊流熱傳導係數。 \vec{J}_j 為擴散通量， $\bar{\tau}$ 則為壓力張量。 S_h 為外加熱源，在本研究中產生自電池發熱。

本研究之紊流模型採用 RANS 中的 $k-\epsilon$ 模型。其傳遞方程(transport equations)如下式(3-5)、(3-6)：



$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G - \rho \varepsilon \quad (3-5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon v_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3-6)$$

上二式中， μ_t 為紊流黏滯係數，由下式(3-7)求得：

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3-7)$$

σ_k 與 σ_ω 為 k 與 ε 的紊流普朗特常數(turbulent Prandtl numbers)， G 為紊流動能生成項， $C_{1\varepsilon}$ 、 $C_{2\varepsilon}$ 與 $C_{3\varepsilon}$ 為常數。

k - ε 模型提供精準且快速的紊流場模擬計算，惟流場中存在逆向壓力梯度或牆面分離現象時容易失真，此時通常以 k - ω 模型替代。本研究流場以 k - ε 模型模擬結果與實驗相符，後續分析皆以此模式進行。

3-1.3. 邊界條件與數值模擬設定

本研究以 Ansys Fluent 商用軟體進行數值模擬。下表 3-3 列出模擬系統之邊界條件，其中固體邊界包含儲能系統外殼牆面及電池表面，流體於速度進口之溫度皆設定為 298 K (25 °C)，速度則在 5 個進風口處獨立控制(於 3-1.4 節詳述)。

計算域涵蓋圖 3-3 所示的半個電池機櫃。

表 3-4 則列出其他相關模擬設定，網格切分與時間步階獨立性驗證於下節詳析。



表 3-3 數值模擬邊界條件

計算域	邊界條件
速度進口	自定義流體速度與溫度
壓力出口	錶壓 = 0
固體邊界	無滑移： $\vec{v} = 0$
對稱面	物理量法向通量 = 0

表 3-4 數值模擬其他相關設定

模擬設定名稱	設定及參數
求解器類型	Pressure-based, transient
時間步階大小	2 s
總網格數	2.02×10^7

3-1.4. 獨立性驗證與網格切分設定

本研究之物理模型參考黃新棧(2023)之設計，網格與時間步階設定大致雷同。以下依相同設定，分別展示時間步階與網格數獨立性驗證之再現結果。

網格獨立性驗證

數值模擬之網格大小可大幅影響計算結果。適當的加密網格可確保計算確實收斂，但過密的網格將嚴重影響計算效率。本研究儲能貨櫃模型主要的熱傳發生於固體(電池)與氣體(空氣)交界處及電池內部，故網格切分的關鍵尺度為電池間氣體通道，以及固體區域。本研究將此二區域網格設為統一尺寸，並以 0.5% 做為收斂條件進行獨立性驗證。將電池間隔通道寬切為 1、2、4、8 個網格分別進行長時間



模擬，檢視電池組中最高溫度與最低溫度，數值模擬結果如下表 3-5。其中，切分比例為 1/4 時誤差皆落於 0.5 % 以下，故選用為本研究網格設定，網格數約為 1.19×10^7 。

表 3-5 網格獨立性驗證結果

網格切分比例	最小網格尺寸 (mm)	網格數	電池最高溫度 (K) / 誤差	電池最低溫度 (K) / 誤差
1	30	551761	299.38 / 0.59%	291.76 / 0.80%
1/2	15	2520628	299.27 / 0.55%	291.29 / 0.64%
1/4	7.5	11947771	298.95 / 0.44%	290.72 / 0.44%
1/8	3.75	65617628	297.63 / -	289.44 / -

時間步階獨立性驗證

除網格外，數值模擬之時間步階設定亦影響其運算精準度與效率，越短的時間步階通常造就更精準而耗時的模擬。以上述驗證之網格設定，分別以 8、4、2、1 秒之時間步階進行獨立性驗證。結果如表 3-6，當時間步階設為 2 秒時，誤差與 4 秒作為時間步階之結果誤差具數倍之差，為求模擬計算精確度，採用 2 秒為本研究時間步階設定。

表 3-6 時間步階獨立性驗證結果

時間步階 (s)	電池最高溫度 (K) / 誤差	電池最低溫度 (K) / 誤差
8	299.78 / 0.51%	290.43 / 0.21%
4	298.95 / 0.23%	290.27 / 0.16%
2	298.24 / -0.07%	289.80 / -0.03%
1	298.26 / -	289.81 / -



3-1.5. 資料集建立策略

本研究旨在建立可替代或輔助加速模擬，進行時空序列預測之機器學習模型，以及對應的模擬配置之工作流程。參考黃新棧(2023)研究中使用之機器學習方法，本研究首先進行多次數值模擬，並以蒐集之資料訓練簡單人工神經網路，進行電池溫度預測及參數最佳化。接著，針對此方法之侷限性，本研究重新建立新的資料蒐集策略，並採用較複雜之深度學習模型以完成上述任務。兩模型之架構設計於 3.2 節詳述。

擬穩態資料集

本研究最初試圖補充黃新棧的研究中未考量的 5 個入風口獨立控制，僅探討各入風口具均等入口風速的情形，以類似其研究的方式進行資料蒐集與模型訓練。此資料集之建立方法如下：

- 維持總入口風量為 $5 \text{ m}^3/\text{s}$ ，以 $0.5 \text{ m}^3/\text{s}$ 為間隔，隨機決定 5 個入風口各自風量。
- 每次數值模擬計算 2000 步階 (4000 秒)，並記錄 80 個電池各自最終之平均溫度、最高溫度與最低溫度。

由於本模型之電池溫度變化相當緩慢，於 4000 秒後，變化幅度已趨近於零；然而若持續運算至 8000 秒、12000 秒後，可以發現電池溫度仍有 5°C 以內之變化。在此將該極緩慢變化之狀態稱為「擬穩態(pseudo steady state)」，雖於定義上仍未達穩態，仍以此結果作為最終狀態進行分析及討論。

暫態資料集

前述資料蒐集策略具有資料量過少、分佈過於集中、初始條件受限等問題，實務應用價值有限(見 4-1.1)。針對這些問題，本研究重構資料收集策略與方法，以有效訓練深度學習模型。



考量可用運算資源的前提下，透過模擬產生訓練及測試資料階段須符合下述條件：

- 單筆資料產生時間短，以利產生足夠多的資料，避免過擬合。
- 篩選有效之特徵，避免模型過於複雜而難以訓練，同時須使案例之物理條件對模型非全然不可知(agnostic)

本研究中，所選用特徵包含 x 、 y 、 z 三軸方向速度 u 、 v 、 w ，以及溫度分佈 T 。如下圖 3-5 所示，在前、後兩組電池設定截面，並隨每個步階輸出上述四個物理量之分層設色圖，以二維資料預測三維空間變化，可對資料降維而加速模型訓練，節省硬體需求。

為捕捉電池溫度與紊流場暫態變化，以 100 步階為單位，每步階輸出 8 張圖片，以產生資料集。做為控制變因的入風口風速，於資料蒐集過程中以兩種不同的控制策略進行抽樣，以 100 個步階為單位，隨機產生一組新的入風口條件。每輪模擬之初始條件即前一輪模擬之最終狀態，惟第一輪之初始溫度設為 $T_{t=0} = 298 \text{ K}$ 之外界溫度。

前人研究分析，在 5 入風口風速皆達 5 m/s 以上時，電池最高溫度可控制於約 308 K ($35 \text{ }^\circ\text{C}$)。本研究以 $0 - 10 \text{ m/s}$ 做為採樣範圍， 0.01 m/s 為精度，各入風口獨立以下二種策略進行抽樣：

- 均勻隨機抽樣，風速期望值為 5 m/s 。
- 以平均為 0，標準差為 3.33 的高斯分佈抽樣，風速期望值約為 2.66 m/s 。

二者交替採用，以蒐集電池處於安全工作溫度($40 \text{ }^\circ\text{C}$)與過熱時的溫度場變化。此原始數據將在進行資料前處理後，用於訓練深度學習模型。本資料集初步分析見 4-1.2。

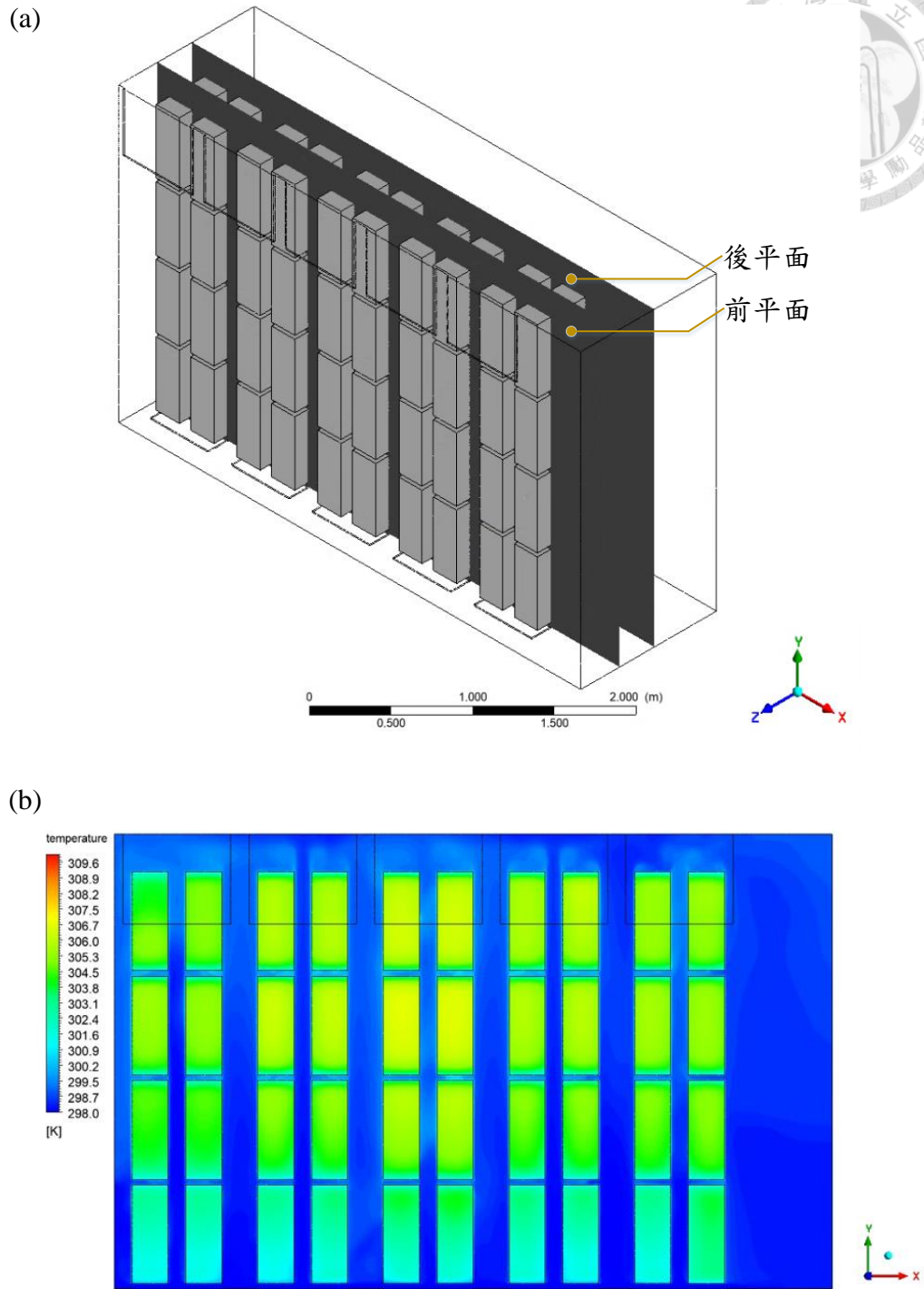


圖 3-5 (a)前、後二平面示意圖，二平面分別設於前後兩排電池中心處，(b)所蒐集資料示意圖，此為前平面於特定步階之溫度分佈



3-2. 神經網路模型

於複雜非線性迴歸問題，如中尺度紊流系統的温度預測，深度學習近年成為最受歡迎的工具之一。藉由以梯度下降方式自動更新模型中激勵函數之係數，深度學習模型理論上可擬合任意形式的高維函數。如何界定此函數的輸入輸出關係，選用合適的模型與超參數等，則是影響模型訓練及應用成功與否的關鍵因素。

本研究基於 ConvLSTM 模型架構，建立能根據入口風速與時空特徵資料預測模擬結果之模型，以降低複雜系統模擬與最佳化參數掃描所耗時間及運算資源。以下將分節詳述此模型的建立與應用方法。

3-2.1. 簡易 ANN 模型

本研究之目標為開發較數值模擬更迅速進行電池温度預測，並以此作為逆向工程之工具。針對此任務，本研究首先嘗試訓練簡單的單層神經網路，預計結果可作為基礎對照模型，同時確認複雜方法的必要性。

此模型以 5 個入風口風速作為輸入，所有電池中的最高温度及最大温差作為輸出。模型架構為單層全連接層，其超參數設定如下表 3-7 所示。

表 3-7 淺層模型超參數設定

超參數名稱	設定值
隱藏層神經元數目	64
學習率(learning rate)	10^{-5}
啟動函數	ReLU
優化器(optimizer)	Adam
損失函數	均方差 (mean square error, MSE)



本研究選用最常見的其中一種全連接層啟動函數：Rectified Linear Unit (ReLU)，其作圖如下圖 3-6。此函數將輸入映射至 $(0, \infty)$ 區間，以賦予神經網路擬合非線性函數的能力。

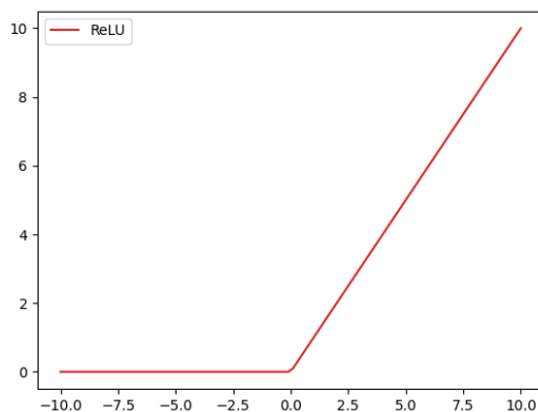


圖 3-6 ReLU 函數

神經網路之輸入(x)、輸出(y)可由下式(3-8)表達，其中 w_j^i 、 b_i 為隱藏層各神經元的權重與偏差， c_i 與 B 則為輸出層之權重與偏差。

$$y = \sum_i^{64} c_i \sigma \left(\sum_{j=0}^5 w_j^i x_j + b_i \right) + B \quad (3-8)$$

Adam 是 Kingma (2014)提出的優化器，結合了動量設計概念增加學習彈性，以及自適應學習率增進訓練效率並避免梯度爆炸問題的技巧，為現今機器學習領域最常被使用的優化器之一。

損失函數定義出模型預測結果與理想輸出的差距，藉由反向傳播，神經網路可自動學習降低損失函數，進而有效進行建模。也因此，損失函數直接定義模型表現形式，其設計方法對模型效能至關重要。此神經網路採用之損失函數為均方差(MSE loss)，其方程式表示如下式(3-9)：

$$loss = \frac{\sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}, n = 2 \quad (3-9)$$

其中 y_i 為模型輸出(最高溫度、最大溫差)， \hat{y}_i 則為對應的基準真值。

此模型使用之擬穩態資料集在訓練時以 10% 之比例切分出測試資料，其餘資料中又以 8:2 之比例切分訓練與驗證資料。由於總資料筆數為 41 筆，每個訓練周期(epoch)共有 30 筆資料用於訓練，7 筆資料用於驗證，4 筆資料用於測試，前二者在每周期被重新隨機選出。在每個訓練週期中，依據所設定的批次(batch)大小，模型先以訓練資料計算輸出，並依損失進行反向傳播與參數更新；接著以驗證資料之輸出損失檢驗模型表現，並存取最佳版本的模型。訓練結束後，再以未於訓練過程中使用之測試資料，檢視模型對未知條件的預測表現。此訓練模式為機器學習方法通用方法，在以下的模型訓練中皆雷同。

3-2.2. 深度學習模型

儘管淺層神經網路可以在訓練資料定義域範圍內有精準的預測(詳見 4-2)，仍有兩個重大的侷限：

1. 擬穩態資料集的資料量過少，使神經網路極易過擬合，使其在訓練資料外的條件下的預測重度失真。過擬合現象同時導致訓練後的模型無法用於逆向工程。
2. 在實際應用場域中，電池熱管理系統必須針對實時狀況作出相應回應。此模型僅能對單一起使條件進行預測，實際應用中效益受限。

基於上述原因，本研究重塑了資料蒐集策略(見 3-1.4)，並由於此方法產生的龐大資料集以單層全連接層訓練效率不彰，開發新模型架構及工作流程，以達成暫態溫度預測目標。以下將就模型建構過程進行說明。

資料前處理

在輸入模型進行訓練或推論前，原始資料須進行前處理以符合模型需要的輸入、輸出形式。並且，透過適當的前處理，模型訓練之難易度將可大幅降低，其表



現也可能隨之提高。

暫態資料集中含有 28000 時間步階，每步 8 張，共 224000 張之分層設色圖構成。在每張資料圖輸入模型前，皆經過下列的轉換與標準化：

- A. 根據原始色彩圖(color map)，將圖片轉為純量張量。
- B. 對所有特徵進行標準化： x 、 y 、 z 三軸速度調整至 $[-0.5, 0.5]$ 區間；溫度調整至 $[0, 1]$ 區間。
- C. 將圖片大小調整為 256×256 (pixels)。

標準化步驟可彌平各特徵原始數值之大小差距，避免模型於訓練前受此影響，而難以進行特徵萃取。此外，對於作為模型輸入的入風口風速，也將同時進行上採樣(upsampling)至 256×256 ，以對應 ConvLSTM 模型的隱藏層輸入維度。經處理後之溫度場示意圖如下圖 3-7，由於經上述 A-C 步驟轉換之資料為數值張量，圖 3-7 為資料經 A'(A 之逆向轉換)可視化後的結果。

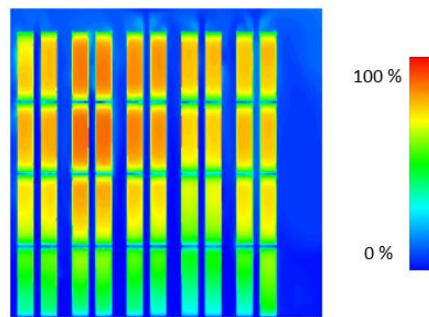


圖 3-7 經前處理後資料可視化結果

資料集切分方面，由於此資料集建置包含由兩台工作站運算至分別 15000 步與 13000 步之結果(下稱 case 1、case 2)。測試資料集分別由兩個 case 在各溫度變化段(見 4-1.2)擷取 10% 組成。此外 9 成的資料，再以 9:1 之比例切為訓練及驗證集。



模型架構

本研究以 Andrea Palazzi (2017) 撰寫之開源程式 ConvLSTM_pytorch 為模型基礎，進行調整與應用。以下分就 ConvLSTM 之原理、輸入輸出形式、隱藏層架構與各超參數設定等面向詳述。

➤ ConvLSTM

LSTM 屬於 RNN 的變種，藉由在每次輸入、輸出間更新並傳播單元記憶(cell memory)，LSTM 模型即具有選擇性記憶與遺忘的能力。基於此性質，LSTM 在多個領域的應用中被證實具有穩定預測長時距的時間相依特徵之能力。在建立長時距紊流熱傳數值模擬的深度學習替代模型任務中，LSTM 為適切的候選架構。

每一個 LSTM 模型單元層可由下圖 3-8 代表，其中 x 為輸入， O 為輸出， h 為隱藏層輸出， c 為單元記憶； σ 與 \tanh 分別表 sigmoid 與 tanh 啟動函數， c 與 h 分別表記憶單元與隱藏輸入/輸出值。

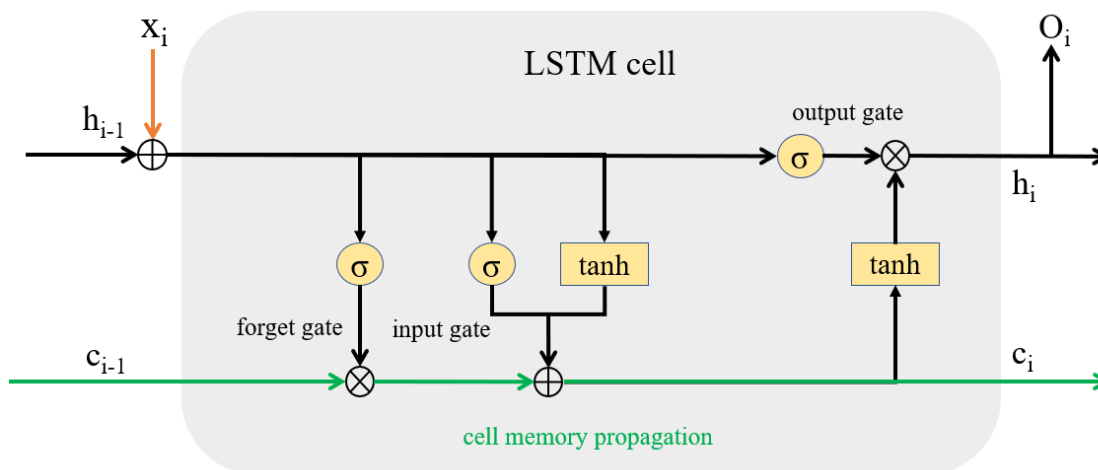


圖 3-8 LSTM 單元層示意圖

三道「門」分別根據輸入決定：

- A. 是否刪除既有記憶。
- B. 是否存取新記憶。



C. 是否將記憶用於影響輸出。

並以此控管單元記憶的傳播。 h 即是每一個 LSTM 單元的最終輸出值，由於可堆疊多個 LSTM 單元組成深度學習網路，故稱為「隱藏層輸出」。

ConvLSTM 與基礎 LSTM 的差異，在其於 x 、 h 在經過啟動函數前，將先行經過卷積(convolution)操作。

相對 RNN 捕捉時間相依特徵，CNN 常用於捕捉空間相依特徵，故普遍應用於影像辨識、電腦視覺等領域，在具有空間連續性的迴歸預測任務上表現亦佳。其基礎概念可藉下圖 3-9 說明：針對每個指定的接受區範圍(圖中呈現為 3×3 格點)，卷積操作即對每個格點通過非線性操作後加總。在掃掠過整張圖像後，卷積層便生成新的特徵地圖(圖中綠色圖塊)，其代表原始圖像的空間連續性特徵萃取結果。

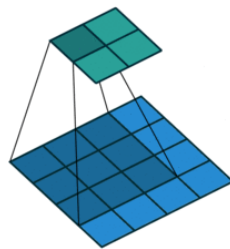


圖 3-9 CNN 之特徵提取方式 (Dumoulin & Visin, 2016)

結合 LSTM 與 convolution operation 而成的 ConvLSTM，在其原始論文中用作天氣預測，爾後在許多具時間、空間連續性之任務上陸續被應用，而得到出色的結果。有鑒於本研究案例之紊流熱傳系統恰具高度時空相依性，此模型足適為基底模型架構。ConvLSTM 單元對輸入、輸出進行之操作可由下方程組(3-10)代表， i_t 、 o_t 、 f_t 分別表 input gate、output gate 與 forget gate。 $*$ 表卷積操作子， \circ 則表阿達瑪乘積(Hadamard product)。



$$\begin{aligned}
 i_t &= \text{sigmoid}(W_{x,i} * x_t + W_{h,i} * h_{t-1} + b_i) \\
 f_t &= \text{sigmoid}(W_{x,f} * x_t + W_{h,f} * h_{t-1} + b_f) \\
 o_t &= \text{sigmoid}(W_{x,o} * x_t + W_{h,o} * h_{t-1} + b_o) \\
 c_t &= f_t \circ c_{t-1} + i_t \circ \text{tanh}(W_{x,c} * x_t + W_{h,c} * h_{t-1} + b_c) \\
 h_t &= o_t \circ \text{tanh}(c_t)
 \end{aligned}$$

(3-10)

➤ 輸入、輸出形式

本研究之資料集自變數為各入風口風速，應變數為特定時間點之流場速度、電池與流體溫度分佈。此階段，深度學習模型之學習目標乃作為數值模擬之替代模型，輸入、輸出即各自定義為入口風速及觀測物理量分佈。

在入口風速外，深度網路之第一隱藏層輸入 \hat{O}_0 初始化為起始時間之物理量分佈。輸入輸出之圖像化於下圖 3-10 中展示，其中 I_t 為 t 時刻之輸入， O_t 為 t 時刻之輸出， \hat{O}_t 為 t 時刻之基準真值， $V_{n,t}$ 為第 n 個入風口於 t 時刻之風速。

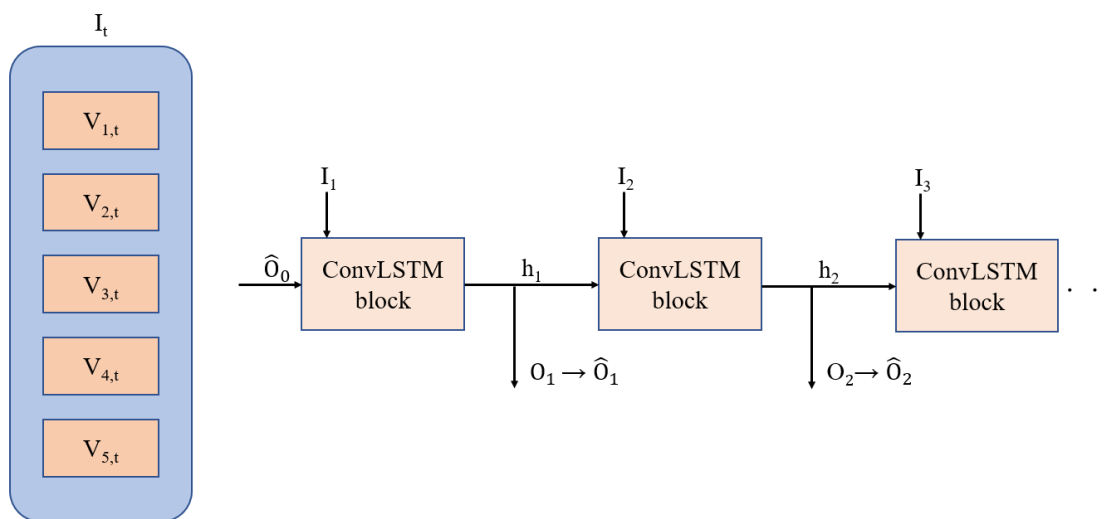


圖 3-10 模型輸入輸出示意圖

➤ 特徵縮放與殘差連結

參考 Ronneberger *et al.* 於 2015 提出的 U-net 架構，對應神經網路編碼器的特徵維度增加，特徵地圖隨之縮小；反之，解碼器之特徵地圖則逐步放大。用於特徵

縮放的卷積層步幅(stride)設為特徵維度之平方根，維度每放大 4 倍，地圖長、寬各減少 1/2。此設計令神經網路中各隱藏層之資料量維持固定，避免過度壓縮而使細部特徵過於均質化。

本研究同時採用 U-net 中加入的殘差連結(residual connection)，使模型僅預測兩步階間的差值，而非以舊步階的特徵直接合成新步階的圖像。此設計有助於模型學習與計算效率，並大幅提升訓練過程穩定性。不同於 U-net 以接合(concatenate)方式合併張量，本研究則在特徵縮放後直接將各對稱層之輸出相加。

特徵縮放與殘差連結之示意圖如圖 3-11。各灰色方塊為一 ConvLSTM 隱藏層之輸出維度，以卷積層進行的特徵縮放由實線箭頭表示，殘差連結部分則以虛線箭頭代表。各灰色方塊上下所標數字為該層之特徵維度，以長 x 寬 x 通道數(channel)表示。在編碼器區段，特徵地圖逐漸縮小，通道數漸增，以抽取高維資訊；在解碼器區段，特徵地圖放大，通道數縮減，還原輸出張量。編碼器與解碼器中，維度相同的對應部分以殘差連結銜接，模型僅學習各層級輸入與輸出間的差值關係，可大幅改善訓練與預測穩定度(參見附錄)。

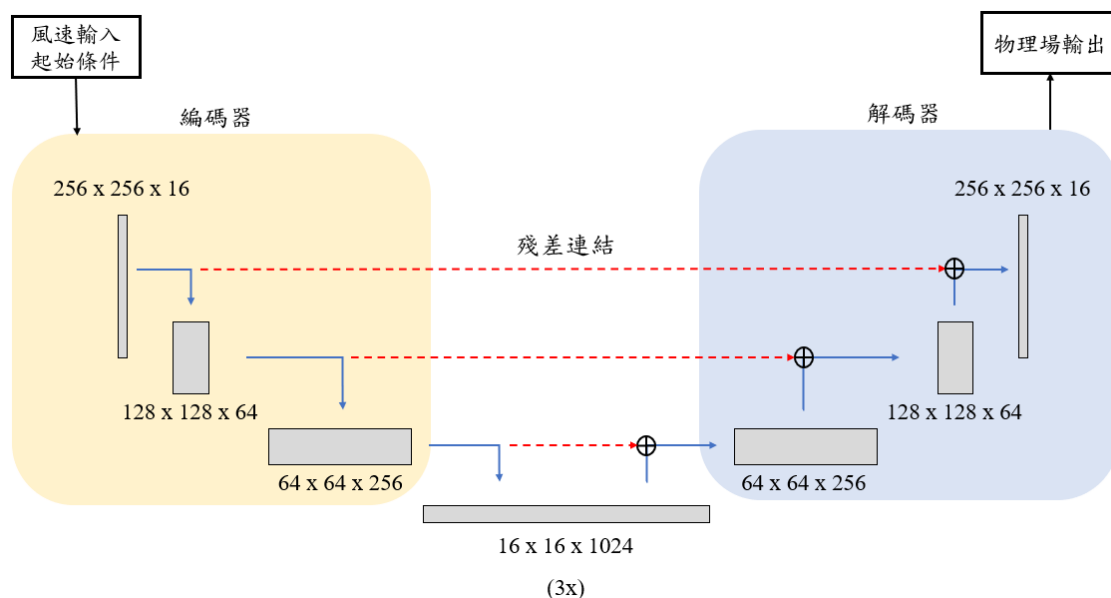


圖 3-11 特徵縮放路徑示意圖



➤ 超參數設定

深度學習模型之表現與訓練成本與其超參數(hyperparameters)設定息息相關。表 3-8 列出本研究中訓練之模型超參數設定。序列時距設定與隱藏層層數設定，考量硬體設備之記憶體負荷上限，並平衡二者而定。損失函數之設計方式則在下節詳述。

表 3-8 深度模型超參數設定

超參數名稱	設定值
訓練序列時距 (時間步階)	50
核(kernel)大小	3 x 3
隱藏層輸出特徵維度	16, 64, 256, (編碼器) 1024, 1024, 1024, 256, 64, 16 (解碼器)
隱藏層總數	9
學習率	5×10^{-4}
填充方式(padding)	half
優化器	Adam
損失函數	MSE based loss

3-2.3. 損失函數設計與訓練方法

為使 LSTM 具備長時距預測能力，在訓練時，將一次輸入一段固定時長之資料(下稱序列時距)，並令模型以其輸出作為新輸入進行迭代。計算損失時，則將訓練時距內之輸出個別與該時刻之基準真值比較，回傳所有損失之平均值。又因 LSTM 需要以記憶輔助預測，在每個訓練週期中，序列時距中的前 5 步階將不納入損失



計算。本模型採用均方差定義損失函數，計算方式由下式(3-11)表示：

$$loss = \frac{1}{L-5} \sum_{t=6}^L \frac{\sum_i (p_{i,t} - \hat{p}_{i,t})^2}{N_p}, t \in [0, L], i \in [0, 256^2] \quad (3-11)$$

其中 L 為序列時距， p 為該像素物理量值， N_p 為每張圖像像素總數(即 256×256)。

由於速度場預測牽涉電池所在區域速度為零的物理條件限制，針對速度場的損失計算，本研究測試了兩種方法：

1. 將電池區域速度設為 0，以式(3-11)計算損失，令模型學習此物理特徵。
2. 在損失計算及預測結果後處理時，遮罩電池區域。此方法將該物理條件定為硬性規則，對模型不可知，亦無需學習。


後者等同加入物理模型結構資訊的規則，進而降低模型訓練難度，改善模型預測表現。二者比較列於附錄。

3-2.4. 模型評估

在訓練後，深度學習模型須以訓練時未使用之測試資料驗證其可靠性與效果。幾項常見的指標包含但不限於：

- A. 精準度(accuracy)：模型預測結果與基準真值之差距。
- B. 穩定性(stability)：模型受輸入擾動影響之程度。
- C. 泛化能力(generalization ability)：模型應用於超出其訓練資料範圍外的資料集之表現。
- D. 穩健性(robustness)：模型受極端值或雜訊影響表現之程度。

考量本研究模型建立之目標在於針對連續性紊流場與溫度監控產出準確預測，在此採以下幾項指標判定 ConvLSTM 模型之表現。

- 
- A. 以同於訓練時的序列時距，隨機抽取測試集中的樣本以模型進行迭代預測，並檢視均方誤差。
- B. 以長於訓練時的序列時距作為樣本，以模型進行迭代預測，檢視模型的泛化能力與長時距預測能力。
- C. 將輸出還原為圖像，並檢視邊界條件、流場特性(如渦漩位置)、速度場與溫度場連續性等關鍵物理性質是否被滿足。

針對各判斷指標，以調整超參數、損失函數與模型架構方式，探究本系統數值模擬之深度學習替代模型的可行性與效益，並建議最佳設定及訓練方式。



第四章 結果與討論

本章節將就建立之單層神經網路，以及深度網路替代模型之表現作分析與討論。首先，分析單層神經網路的預測誤差、正向傳播與反向推論能力，以及其成效與侷限性；接著，針對其侷限性，在以重構之資料集與深度網路架構建立之替代模型表現，將以數值與可視化圖像的形式予以討論。圖 4-1 為本章節架構圖。

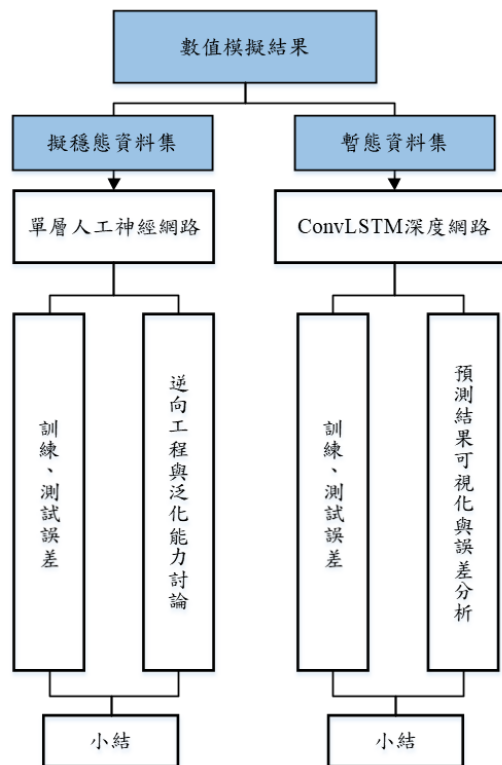


圖 4-1 結果與討論架構圖

4-1. 數值模擬結果

訓練資料的品質為深度學習模型效度與表現的決定因子。本節初步分析數值模擬產生的資料，確認其合理性與物理性質，並在後續章節做為替代模型預測結果的討論依據。



4-1.1. 擬穩態資料集

作為單層 ANN 神經網路模型的原始資料，擬穩態資料集共包含 41 筆資料。每筆資料含有隨機調整入風口風量分配作為邊界條件，在固定冷卻條件下運轉 4000 秒後，80 顆電池各自之最高溫度與最低溫度。下表 4-1 列所蒐集資料的分佈狀況，其中 ΔT 表各組資料中最高溫與最低溫之差值。以 $5 \text{ m}^3/\text{s}$ 為入口總風量之模擬資料中，最高溫均不超過 $305 \text{ K}(32^\circ\text{C})$ ，最大溫差不超過 4 K ，顯示除極端狀況下，無論如何分配風量，此設置下電池均可安全運作；同時，各資料間標準差極低，顯示資料集中各數據分佈相當集中。資料分佈對所訓練神經網路模型之影響將於 4.2 節詳述。

表 4-1 擬穩態資料集分佈狀況

單位：K	最大值	最小值	平均	標準差
T_{\max}	304.04	301.56	302.32	0.56712
T_{\min}	300.23	298.83	299.22	0.29701
ΔT	3.81	2.49	2.72	0.32873

4-1.2. 暫態資料集

相較試圖逼近穩態，以暫態模擬電池儲能貨櫃溫度變化更符合真實工作情境，並減輕資料量不足造成神經網路模型過擬合的問題。兩工作站分別以環境溫度 (298 K) 為起始條件，進行 15000 步階(case 1)與 13000 步階(case 2)的數值模擬，並記錄不同入風口條件造成的速度場與電池溫度變化。

圖 4-2 (a) 為兩個模擬案例的最高溫度變化圖，(b) 則為電池均溫變化圖。在各入風口在 $0 - 10 \text{ m/s}$ 隨機抽樣之初使條件下，電池首先升溫至約 $308 \text{ K}(35^\circ\text{C})$ 以下，並維持穩定震盪。兩個案例分別在 6000 步、10000 步切換入風口條件為期望值略低的高斯分布，並分別升溫至 $319 \text{ K}(46^\circ\text{C})$ 與 $313 \text{ K}(40^\circ\text{C})$ 以下。Case 2 截止於升溫段，Case 1 則達到新的穩定震盪期，並在 13000 步切換為原始的入風口



抽樣條件，蒐集 2000 步階自高溫降溫的資料。

觀察圖 4-2，可發現前平面(橘、黃線)相較後平面(藍、灰線)可觀察到較高的最高溫度，而平均溫度的差異則較不顯著。此外，在穩定震盪階段，不同的風量配置使電池平均溫度產生約 2 K 的短期波動。兩個採樣方式的電池穩定最高溫分別略低或略高於安全工作溫度 40 °C，此資料集即涵蓋電池熱管理系統關鍵作動範圍。經此資料訓練之替代模型可於電池溫度進入或超過危險範圍時給予警示、甚或介入冷卻條件調控。

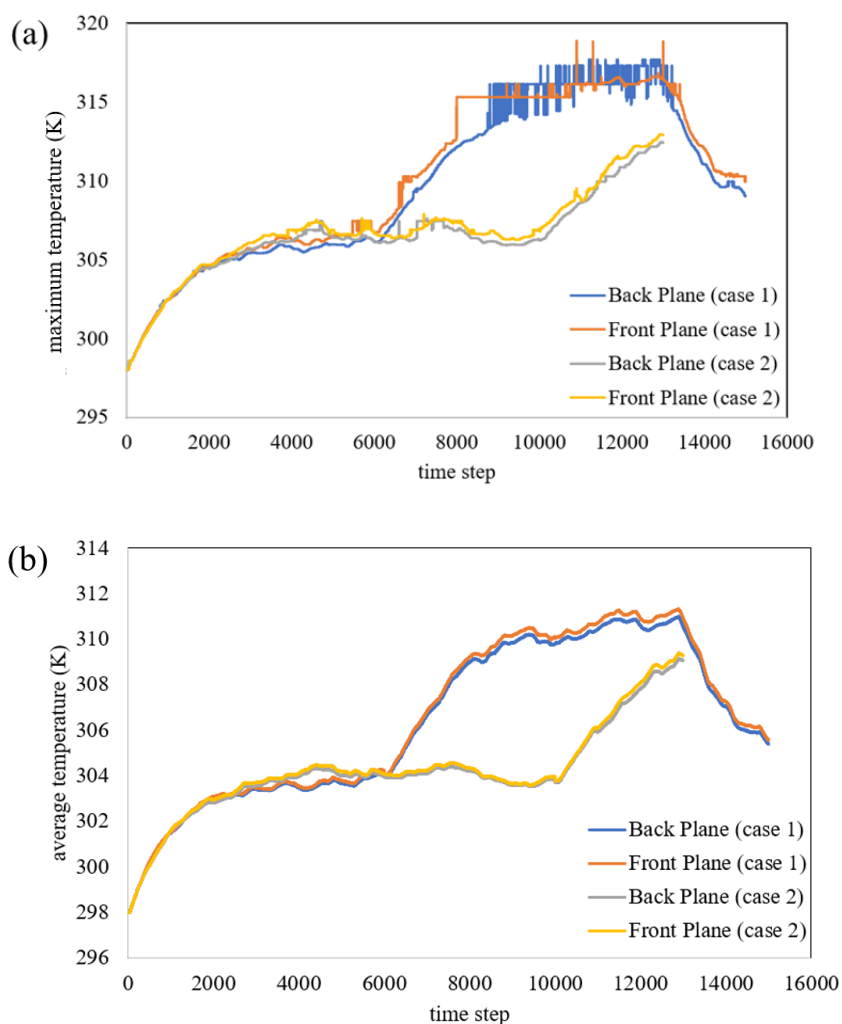


圖 4-2 電池組最高溫度與平均溫度隨時間變化圖 (a)兩案例最高電池溫度趨勢，
(b)兩案例平均電池溫度趨勢



4-2. 單層人工神經網路

本節針對單層神經網路預測電池在不同起始條件下的最高溫度與最大溫差之準確率、逆向推論能力，與不同輸入下的泛化能力進行分析及討論。

4-2.1. 訓練、測試誤差

本研究應用數值模擬以及開發神經網路模型以建立電池熱管理系統的控制策略，其主要目標可分為降低電池最高溫度及電池間溫差。因此，本節建立之單層神經網路以同樣的起始入風口風速條件，分別預測電池組中之最高溫與最低溫，再以此計算二者之訓練與測試誤差。原始資料在輸入神經網路模型前進行資料前處理，透過將 80 個電池平均溫度篩選出最高溫與最低溫，降低模型複雜度，增加訓練效率。以下討論將分別稱用於預測最高溫與最低溫之模型為 T_{max} 模型與 T_{min} 模型。

訓練誤差

在訓練階段， T_{max} 與 T_{min} 模型已可順利收斂至相當低的訓練與驗證誤差，在多次訓練中皆可得到低於 0.2 K 之最低驗證均方誤差，而最低可降至 0.1 K 以下。

下圖 4-3 為二模型單次訓練曲線示例圖。

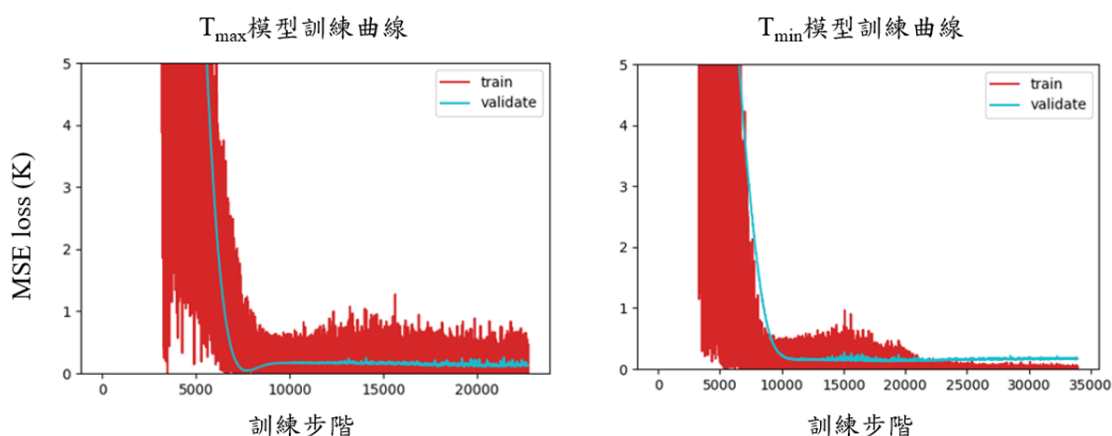


圖 4-3 單層神經網路訓練曲線

測試誤差

每次模型訓練完成，將從資料集中抽取 4 筆未用於訓練之資料進行測試。由



於原始資料分佈相當集中(見表 4- 1)，故採用 z -分數以及絕對誤差作為衡量模型表現之指標，二者計算方式如下式(4-1)、(4-2)，其中 \hat{x} 為基準真值， \bar{x} 為原始資料之平均， σ_x 為原始資料之標準差。

$$z = \frac{x - \bar{x}}{\sigma_x} \quad (4-1)$$

$$E_{abs} = |x - \hat{x}| \quad (4-2)$$

表 4- 2 T_{max} 模型測試結果

(單位: K)	預測溫度	模擬結果	絕對誤差	z 分數
case 1	302.2	302.2	0.02465	0.04134
case 2	302.4	302.2	0.1337	0.2243
case 3	302.4	301.7	0.6805	1.141
case 4	302.3	302.3	0.0580	0.09728

表 4- 3 T_{min} 模型測試結果

(單位: K)	預測溫度	模擬結果	絕對誤差	z 分數
case 1	299.5	299.5	0.0082	0.02568
case 2	299.1	299.4	0.2628	0.8230
case 3	299.4	299.3	0.06146	0.1925
case 4	299.7	298.9	0.8007	2.508

表 4- 2、表 4- 3 示例二模型訓練完成後進行之測試結果，計算得之絕對誤差皆小於 1 K，且 z 分數多數相當接近 0，僅在兩次測試中各於 1 個案例中超過 1。由於最小溫度之原始資料分佈較最大溫度更為集中，模型輸出更容易因微小預測



失準而計得較高的 z 分數(如 case 4 之 2.508)，但其預測絕對誤差仍落於 1 K 以內。

從上列測試資料可以觀察得知，正因原始資料分佈相當集中，ANN 模型僅需圍繞資料平均值進行預測即可得到優異的結果。因此，以下將進一步根據其泛化能力及逆向推論能力進行驗證，並討論此模型實際應用之價值。

4-2.2. 逆向工程與泛化能力討論

基於 ANN 模型訓練與測試表現良好之前提，本研究將訓練完成之模型嘗試用於逆向推論。具體而言，針對給定的輸出條件：最大溫差低於 5 °C、各入風口總體積流率固定，令模型以梯度下降方式尋找具有最低之 T_{max} 的入口風速組合。以 5 入風口平均分配風量作為起始點，上述方法進行之逆向推論結果如下表 4-4 所示，入風口編號排序如圖 4-4。在逆向工程任務中，ANN 模型推論出相當反常且不合理的結果，且非特殊個案：在不同的訓練與部署嘗試中，模型最終皆得到 5 入風口其一開啟，剩餘風口皆關閉的結論。

表 4-4 ANN 模型逆向推論最佳入口風速組合

入風口編號	1	2	3	4	5
最佳風速 (m/s)	0	0	0	0	16.67
預測最高溫度 (K)	301.2				

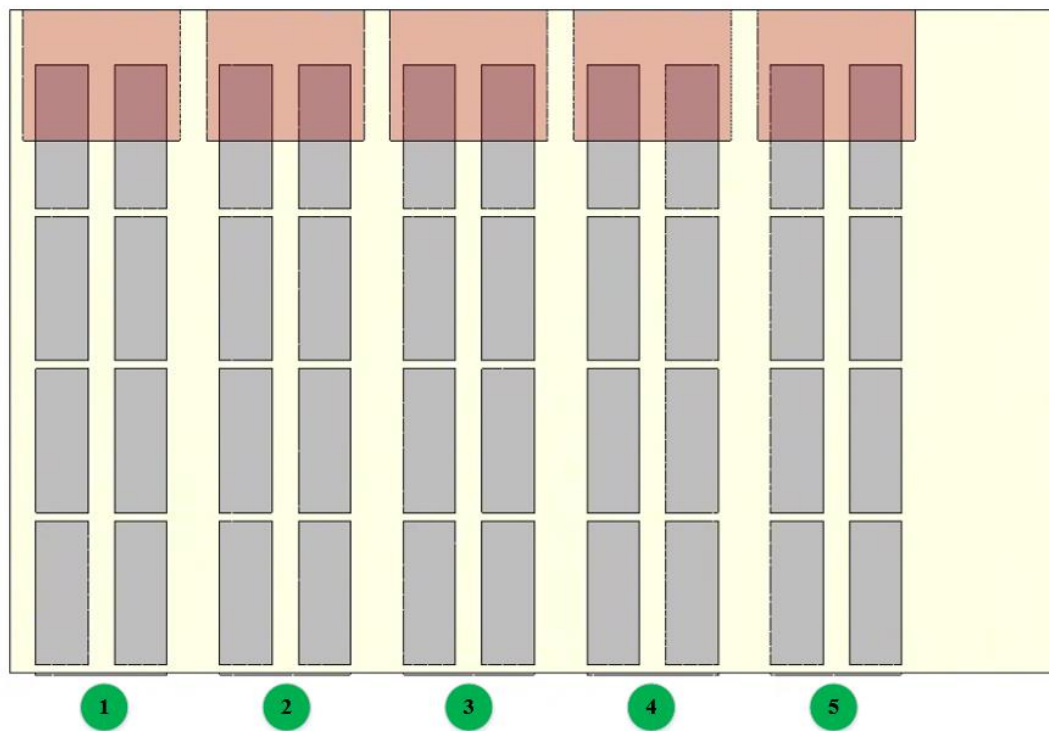


圖 4-4 五入風口位置與其編號

為探究模型表現異常之原因，進一步以訓練資料範圍之外的輸入進行模型測試，所得輸出列於表 4-5，各列入風口風速分別由左至右對應編號 1 至 5 之風口。由於原始資料集的分布相當集中，且樣本數極少，模型表現出強烈的過擬合，幾無泛化能力或穩健性，在超出訓練範圍以外之資料中，模型預測表現並不可靠。圖 4-5 固定除第一入風口外的各入風口風速，並以第一入風口風速對 T_{\max} 模型預測結果作圖。結果顯示，ANN 經訓練後僅擬合出在訓練範圍值域內精準預測，接近純線性之模型。因此，在嘗試逆向工程時，模型將得到「冷卻流體風速愈低，電池溫度愈低」的錯誤結論。

表 4-5 ANN 模型對極端輸入之預測結果

入風口風速 (m/s)					預測溫度 (K)
3.33	3.33	3.33	3.33	3.33	302.8
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	18.49
100.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1720.0

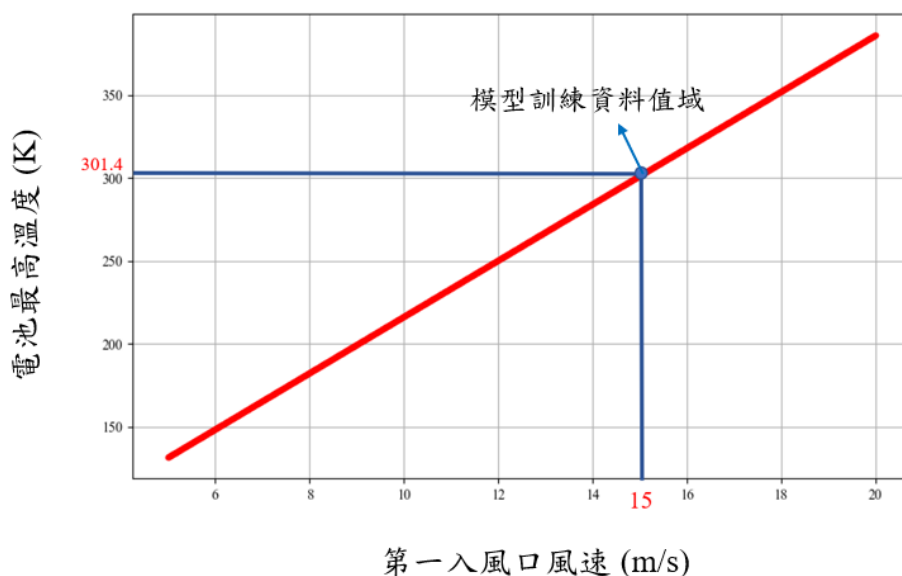


圖 4-5 第一入風口風速對 T_{max} 模型預測結果作圖

4-2.3. 小結

從上述討論中可以歸納出，ANN 模型雖能準確進行預測，無論在超出訓練範圍資料的預測，或逆向推論測試中，表現都未達預期。此結果主要致因於擬穩態資料集資料過少且分佈過於集中，使模型不需掌握實際物理條件與系統中的非線性關係以進行有效預測。此外，該資料集僅考慮電池儲能系統以室溫、靜止流場為起始條件之情境，難以應用於真實應用情境中，以不同溫度與流場分佈作為起始條件的狀況。又因採集資料僅含各電池的平均溫度，亦未能考量電池內部不均勻熱傳或產生局部熱點的問題。

綜上所述，此資料蒐集方式與建立之模型應用彈性有限，並不顯著優於傳統數值模擬之設計流程。因此，本研究重新建立資料集蒐集方式(見 3-1.4)，並針對新資料集更為複雜之資料結構，重新設計神經網路架構(見 3-2.2)。下文詳述其訓練結果分析與討論。

4-3. ConvLSTM 深度網路

基於暫態資料集，本研究根據 ConvLSTM 架構訓練深度神經網路，以建立相較 ANN 模型更具泛化能力、更有穩健性，應用價值更高之替代模型。以下將就模型誤差表現及物理特徵表現進行質性與量性分析。

4-3.1. 訓練、測試誤差

本研究中表現最佳的模型之訓練曲線如下圖 4-6，訓練耗時約 1.5 日。由於原始資料經過標準化後全距為 1，均方誤差的理論值亦應落於 $[0, 1]$ 的範圍。如圖所示，本模型訓練誤差穩定的降至接近 0。此外，在不同溫度範圍的測試資料中，模型預測也穩定測得低於 2% 的均方誤差。

此處計算之誤差為依像素計算後，以 8 個特徵圖(前後平面的三維速度場與溫度場)之平均求得，亦即，此處顯示之誤差為所有特徵圖片像素點與基準真值之均方誤差的平均。

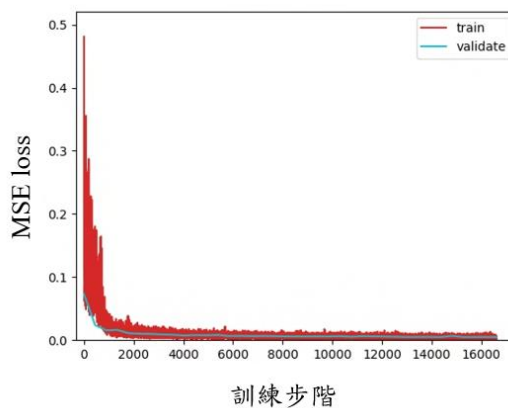


圖 4-6 ConvLSTM 模型訓練曲線

由像素計算之均方誤差顯示模型整體而言預測相當精準。然而，在原始資料圖片中，一張圖像中的所有像素點並不是等同重要的——例如，電池溫度之變化遠比流體溫度之變化顯著，也更為重要；溫度場之預測精準度亦遠較垂直於入風口流向之速度場(x、z 軸速度場)預測精準度關鍵。因此，在像素誤差外，下文將模型輸出還原為圖片，並針對預測結果作進一步分析。

4-3.2. 預測結果可視化與誤差分析

測試資料溫度對比

針對測試資料集各片段，下圖 4-7 展示模型預測結果與原始資料在電池最高溫與平均溫度的比較。測試資料集乃由兩個模擬案例中，由正常工作溫度區、過高溫區及降溫區等不同溫度變化區段中，擷取佔總資料量 10% 的數個連續片段構成。圖 4-7 以 100 序列時距為一測試案例，總計 23 個測試案例拼接而成，橫軸步階僅標註段落間隔處。4 張圖分別為電池最高溫、電池平均溫度的前、後平面溫度變化圖。藍點為預測溫度(predicted, p)，橘叉為基準真值(ground truth, g)。

模型預測的最高溫與平均溫度大致吻合模擬結果。最大差異發生於後平面的最高溫度，該區段模擬最高溫震盪劇烈，可能源自於模擬與資料處理過程中的雜訊。替代模型並未追隨此雜訊，顯示其具備穩健性。此外，替代模型於低溫區預測結果多半高於模擬結果，高溫區則反之。此源自於神經網路平均化預測的特性，可能導致對電池高溫的警訊不夠敏感。在實務應用上，可以針對高溫加以較高的損失權重，訓練對高溫敏感的替代模型；抑或設定安全係數，在替代模型預測到接近電池工作溫度上限時便給予警告，進而調整冷卻條件。

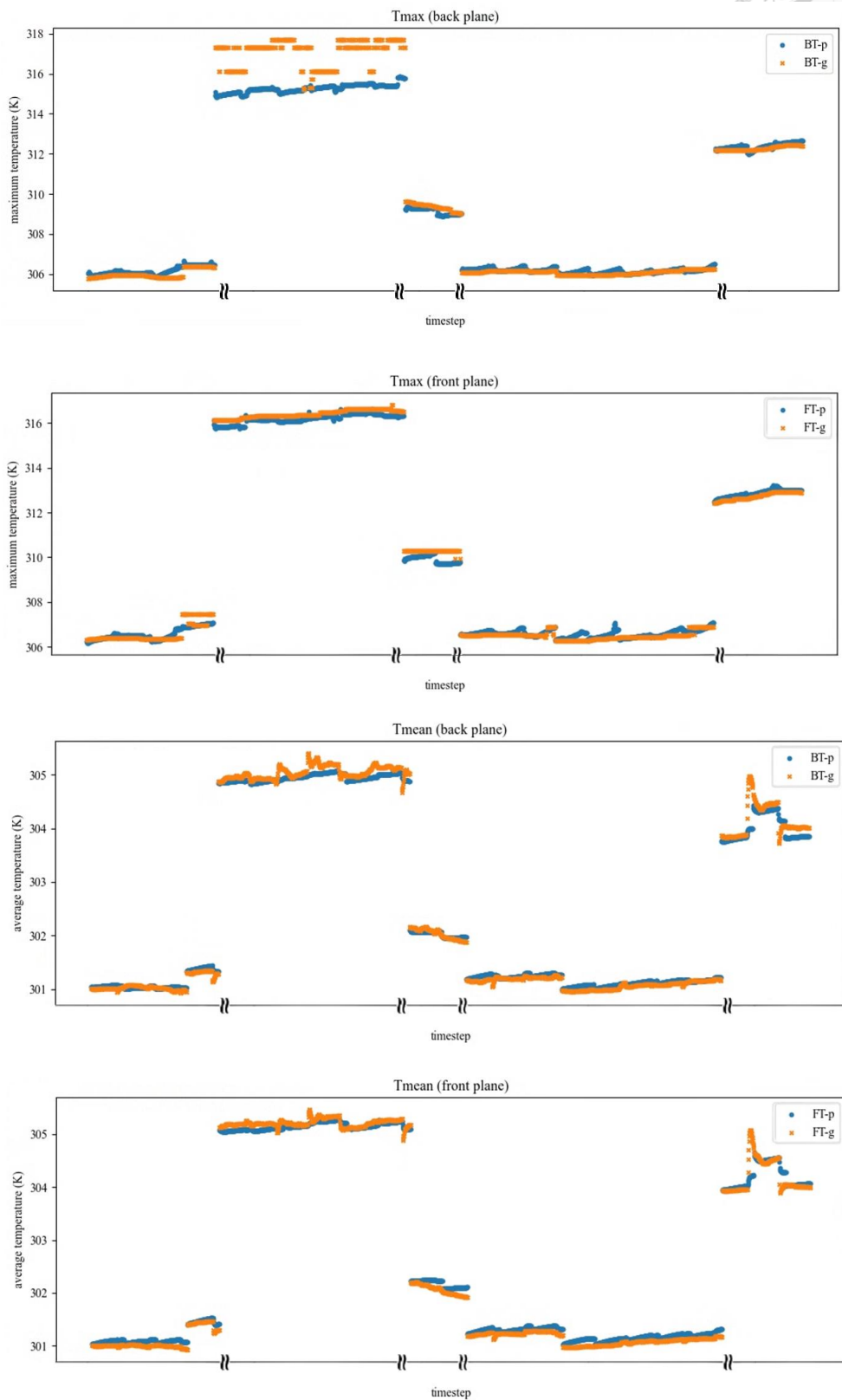
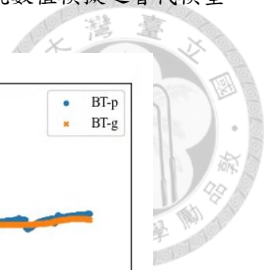


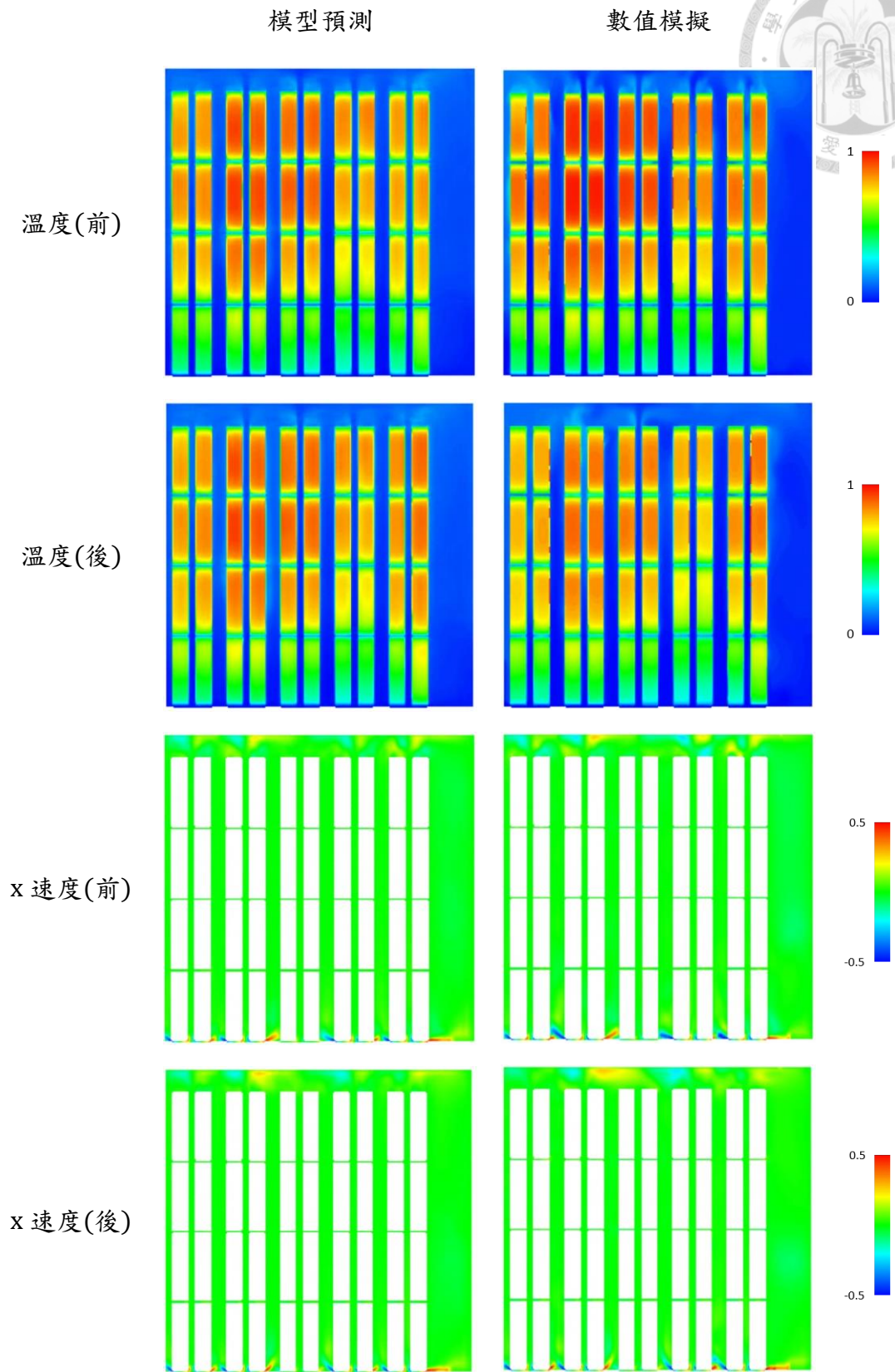
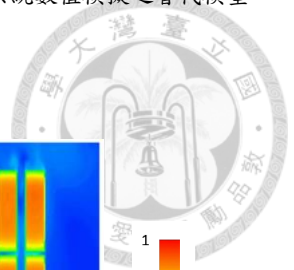
圖 4-7 不同序列時距的預測結果



局部物理場特徵可視化

為細部檢視模型預測結果捕捉物理性質的能力與可詮釋性，此段設計數個測試框架，並將模型輸出通過 3-2.2 資料前處理之逆轉換還原為圖片。下圖 4-8 展示在測試資料集抽取一初始時刻，以模型預測 50 步階後之特徵圖，並與數值模擬結果作對照。由於此資料仍為標準化後結果，右側標示之色彩映射即對應至各自之標準化範圍。為突顯物理場細節，此處溫度場採自風量較小的高溫段落，速度場則採自風量較大的低溫段落。兩測試案例均方誤差分別為 0.5 % 與 1.1 %。

可視化結果顯示替代模型表現出絕大多數的物理特徵。在溫度場方面，模型預測結果略低於模擬結果，而趨勢與模擬結果相符；速度場方面，在近牆面、電池周圍與稜角處，模型預測結果與數值模擬存在細微差異。出於紊流場擾動劇烈的特性，速度場的細微差異並不損其預測精確度。針對與訓練時距相同的 50 步階，此模型具備作為數值模擬替代模型的預測精確性。



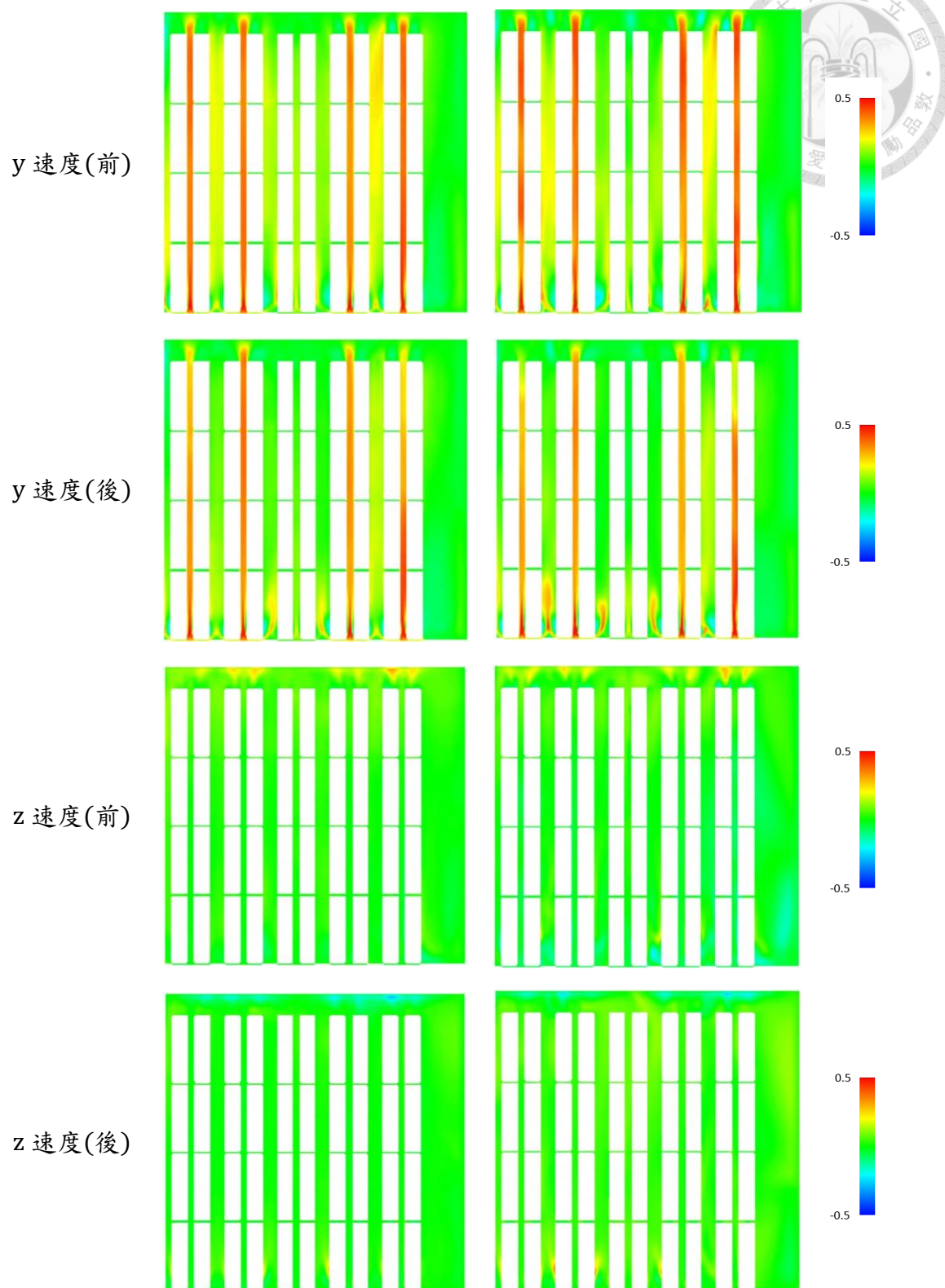
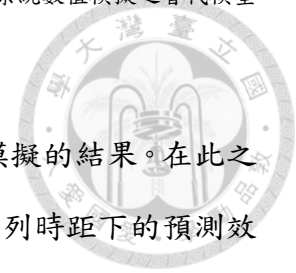


圖 4-8 預測結果與數值模擬結果對照圖



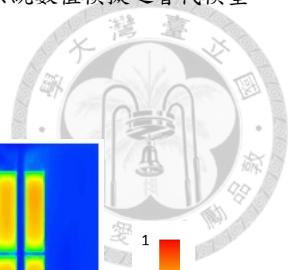
長時距預測

與訓練時相同的序列時距下，替代模型可以精準擬合數值模擬的結果。在此之上，為驗證此模型作為替代模型的可能性，需測試其在較長的序列時距下的預測效能。由於此模型乃以單一步階的輸入與模型記憶迭代下一步階之輸出，其預測誤差將隨序列時距的拉長而傳播。

如前文所述，測試資料集由數個連續步階片段構成。其中，單一連續片段最長持續 700 步階，為本測試資料集的連續步階長度上限。圖 4-9 展示於該片段中，抽取其中一起使時刻，令模型迭代 500 步階(訓練時距之 10 倍)後的物理場，以及對應的模擬結果。此測試案例整體均方誤差為 0.4 %。

速度場的預測結果在長時距測試中保持準確。在後平面的 x 、 y 速度場中，可以觀察到紊流場本身的不穩定造成流場不連續，而替代模型推論目標為穩定趨勢，故未表現相應特徵。實務應用中，若需捕捉紊流場之不穩定表現，仍須仰賴數值模擬及實驗。溫度場則可以觀察到較明顯的誤差傳播現象，電池及其周邊出現條紋狀瑕疵，且產生局部模糊化。短時長訓練的模型較難完全掌握長時距的物理特徵推論，如溫度場的連續性。若欲改善此狀況，未來可以逐步拉長時距訓練，或增加連續性相關損失函數著手。

此替代模型推論過程共耗時 16.77 秒，同樣時長的數值模擬約需時 20-30 小時不等，加速幅度達 4300 倍以上。在誤差不影響應用價值的前提下，本研究開發的替代模型可作為數值模擬的實時代理，針對電池熱管理系統的溫度分佈進行預測並發出警訊。

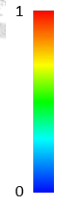
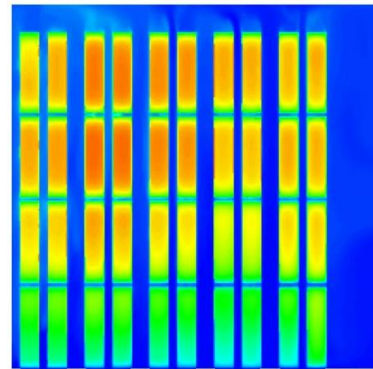
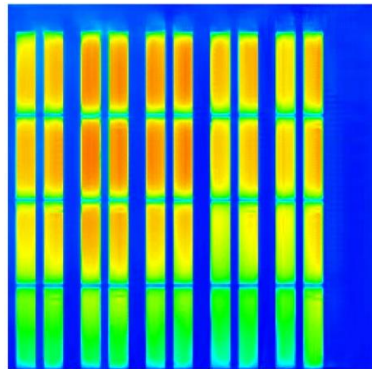


$\tau = 500$

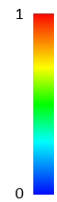
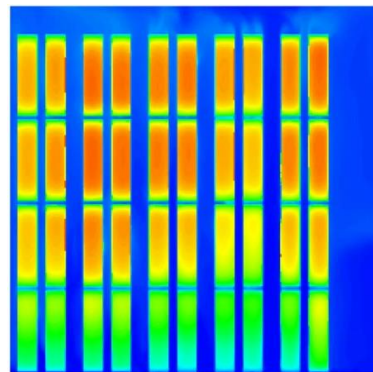
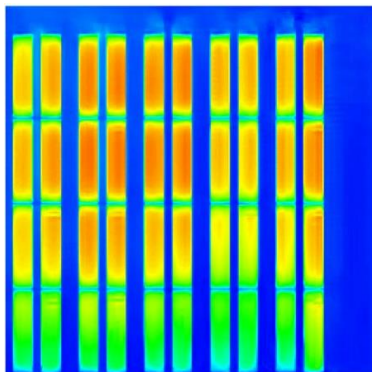
模型預測

模擬結果

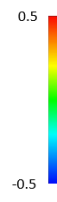
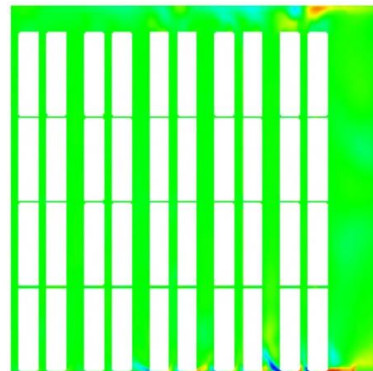
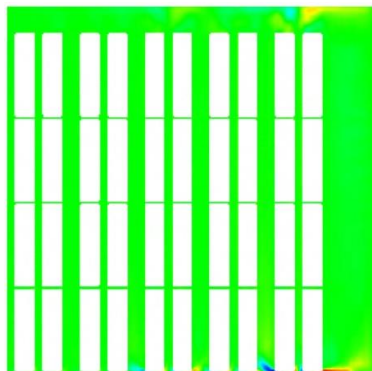
溫度(前)



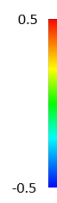
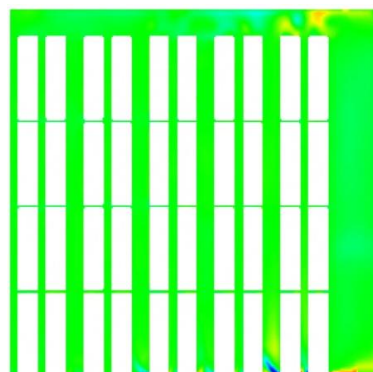
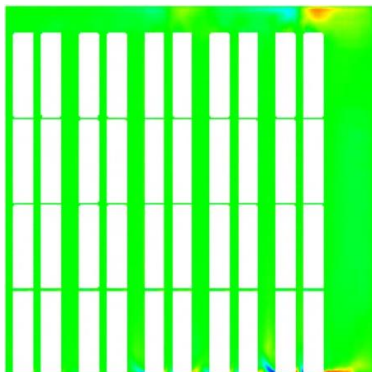
溫度(後)



x 速度(前)



x 速度(後)



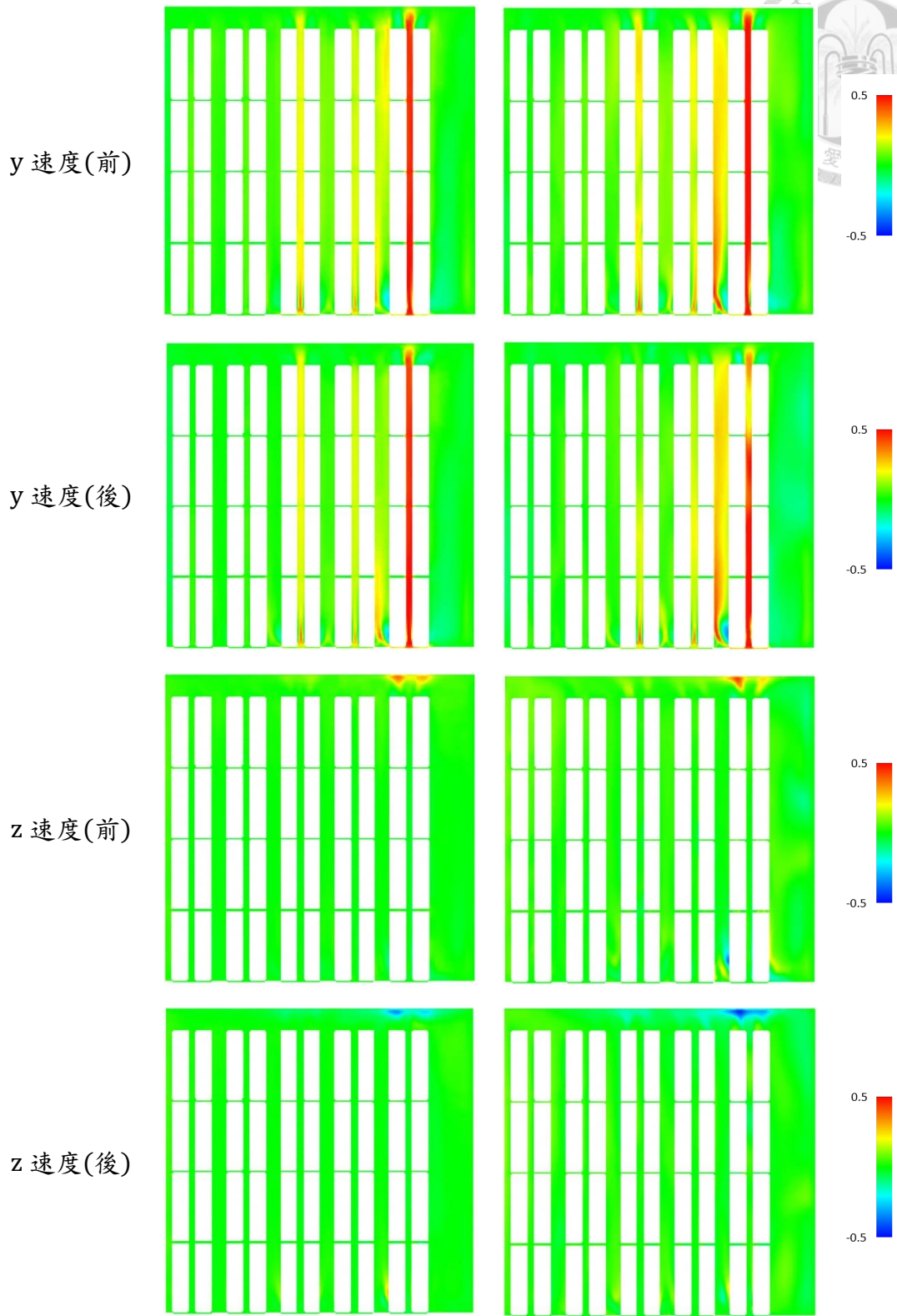
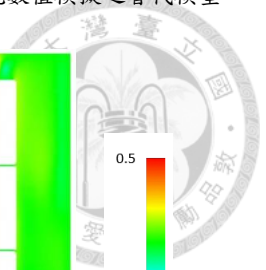


圖 4-9 長時距(500 步階)預測結果



4-4. 結論

電池熱管理系統之最佳化研究多以數值模擬工具進行設計迭代，而高耗時成為設計流程瓶頸。本研究探索不同深度學習方法應用於熱管理系統最佳化的方法，歸結出以下結論。

首先，以接近穩態的數值模擬結果建立資料集，並以淺層神經網路模型進行預測之方法，受限於資料分佈集中且總數過少等條件，無法避免模型過擬合問題。此模型對與訓練資料相近之輸入參數可精確預測輸出，而對超出此範圍的輸入條件預測大幅失真，全無泛化能力，也因此無法作為有效的最佳化工具。

以暫態方式蒐集模擬資料，可解決資料量過少問題，大量高維資料則須重新設計深度學習模型以提升訓練效率。本研究採用 ConvLSTM 模型架構處理時間、空間連續性，並以步階為單位生成基於初始條件後特定時距的物理場，作為數值模擬之替代模型。所訓練之數值模擬替代模型在短時距任務中精確表現不同邊界條件下的速度場與溫度場分佈，長時距推論亦能掌握物理場變化趨勢。此替代模型以低於數值模擬方法 0.1% 時間得到相近之結果，在熱管理系統設計或監控等數值模擬速度為瓶頸的任務中，具備極高的應用價值。



第五章 結論與未來展望

5-1. 結論

本研究針對大型電池儲能系統的熱管理挑戰，應用深度學習技術以建立可替代傳統數值模擬的預測模型。對照實驗驗證數值模擬模型，以自動化工作流程建立電池模型在不同溫度範圍的數值模擬結果資料集，以此訓練在不同起使條件、邊界條件下，透過自我迭代預測物理場分佈的神經網路模型。此替代模型以低於 2% 之均方誤差，推論任意入風口速度下，電池機櫃的整體溫度與速度分佈，運算速度較數值模擬提升 4300 倍，打破設計迭代與實時監控的數值模擬時間瓶頸。

透過建立高時空解析度的數值模擬資料集，本研究首先測試了傳統全連接神經網路預測電池溫度的效果。實驗結果顯示，該模型在資料量有限的情況下易發生過擬合，無法推估未見條件下的溫度分佈。固定初始條件的高度依賴性，使之難以用於制定熱管理策略。

本研究轉以暫態模式下的自動化工作流程蒐集大量不同起使條件與邊界條件的流場、溫度場資料，建立涵蓋不同散熱需求情境的資料集。分析資料變動趨勢，劃分出電池於安全工作溫度與過高溫的危險狀態，並依此切分資料集。為有效處理、學習複雜系統物理量的交互作用關係，開發基於 ConvLSTM 的神經網路模型。設計編碼器、解碼器架構、殘差連結，並在損失函數添加物理條件限制，訓練之模型成功捕捉流場與溫度分佈的變化趨勢，達到與傳統數值模擬相當的預測準確度，訓練與測試均方誤差皆在 2% 以內，且對資料集中波動劇烈的噪音具抵抗韌性。以模型預測結果與數值模擬結果做可視化質性分析，顯示替代模型可正確根據不同入風口條件產生與模擬相符的速度場、溫度場變化，細部特徵與紊流場不確定性之擾動因均質化的預測特性而較不明顯。在 10 倍於訓練時長的長時距測試中，模型預測結果因誤差傳播產生細部瑕疵，仍可精準捕捉關鍵物理性質如主要通道風速、電池溫度變化等。替代模型運算時間為數值模擬方法的 0.1% 以下，解決了數值模擬

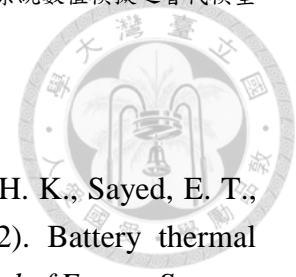
耗時瓶頸，為設計迭代迴圈與實時監控系統開啟新的可能。

與傳統基於物理方程的數值計算方法相比，深度學習方法能夠透過數據驅動的方式，從大量模擬數據中學習流場與熱傳行為，並以極低的計算成本提供高效預測。本研究實作深度神經網路於暫態紊流熱傳系統的建模與加速，驗證透過合適的模型架構與物理資訊編碼，可訓練相當於數值模擬精準度的替代模型。訓練完成的替代模型可用於不同邊界條件對電池最高溫、最大溫差、熱點位置等性質之相關性分析，用於熱管理策略建議的逆向工程系統則已於開發及測試中。本研究使用的資料蒐集集建模方法不僅適用於電池熱管理系統，未來亦可延伸至其他熱傳與流體工程問題，如冷卻系統優化、電子散熱設計，甚至更廣泛的能源與環境工程領域。

5-2. 未來展望

本研究主要價值在開發深度學習模型以大幅縮減數值模擬之運算成本，未來發展可分為兩大方向：一、針對本研究的資料蒐集方式與演算法進行優化，透過採集不同物理特徵資料、改良損失函數設計方法、階段式拉長訓練序列時距等方式，進一步改善長時距預測以及電池高溫的精準度；二、探索本研究開發之演算法在不同範圍的邊界條件、起使條件的泛化能力，測試減少資料量對訓練結果的影響，或運用類似的資料蒐集與訓練方法，在截然不同的熱傳、流場問題中，測試本研究方法的應用邊界。

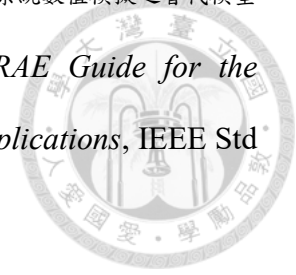
繼大型語言模型(large language models, LLM)取得廣泛且巨大的成功後，物理人工智慧(physical AI)成為當前人工智慧前沿技術之關注核心。假以時日，若可精確理解物理世界的大模型開發成功，亦可以微調、再訓練的方式應用至本研究問題中。屆時，模型訓練將不再從無至有，模擬資料的總量與品質將決定模型表現。倘欲應對此發展趨勢，當前亦可往轉移學習(transfer learning)與資料蒐集方法之改良方向前進。



參考文獻

- Abdelkareem, M. A., Maghrabie, H. M., Abo-Khalil, A. G., Adhari, O. H. K., Sayed, E. T., Radwan, A., Elsaid, K., Wilberforce, T., & Olabi, A. G. (2022). Battery thermal management systems based on nanofluids for electric vehicles. *Journal of Energy Storage*, 50, 104385.
- Ahmed, I., & Raihan, A. S. (2024). Spatiotemporal Data Analysis: A Review of Techniques, Applications, and Emerging Challenges. *Multimodal and Tensor Data Analytics for Industrial Systems Improvement*, 125-166. Springer Optimization and Its Applications, vol 211. Springer, Cham.
- Al-Zareer, M., Dincer, I., & Rosen, M. A. (2018). A review of novel thermal management systems for batteries. *International Journal of Energy Research*, 42(10), 3182-3205.
- Al-Zareer, M., Dincer, I., & Rosen, M. A. (2019). A novel approach for performance improvement of liquid to vapor based battery cooling systems. *Energy Conversion and Management*, 187, 191-204.
- Behi, H., Karimi, D., Behi, M., Jaguemont, J., Ghanbarpour, M., Behnia, M., Berecibar, M., & Van Mierlo, J. (2020). Thermal management analysis using heat pipe in the high current discharging of lithium-ion battery in electric vehicles. *Journal of Energy Storage*, 32, 101893.
- Chen, D., Jiang, J., Kim, G. H., Yang, C., & Pesaran, A. (2016). Comparison of different cooling methods for lithium ion battery cells. *Applied Thermal Engineering*, 94, 846-854.
- Chen, K. (2013). *Heat Generation Measurements of Prismatic Lithium Ion Batteries*. Master's Thesis, University of Waterloo.
- Chen, K., Chen, Y., Li, Z., Yuan, F., & Wang, S. (2018). Design of the cell spacings of battery pack in parallel air-cooled battery thermal management system. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 127, 393-401.
- Chen, S. C., Wan, C. C., & Wang, Y. Y. (2005). Thermal analysis of lithium-ion batteries. *Journal of Power Sources*, 140(1), 111-124.

- Dumoulin, V., & Visin, F. (2016). A guide to convolution arithmetic for deep learning. *arXiv preprint arXiv:1603.07285*.
- Ebbs-Picken, T., Romero, D. A., Da Silva, C. M., & Amon, C. H. (2023). Deep convolutional encoder-decoder hierarchical neural networks for conjugate heat transfer surrogate modeling. *arXiv preprint arXiv:2311.17068*.
- Fan, Y., Xu, K., Wu, H., Zheng, Y., & Tao, B. (2020). Spatiotemporal modeling for nonlinear distributed thermal processes based on KL decomposition, MLP and LSTM network. *IEEE Access*, 8, 25111-25121.
- Faroughi, S. A., Pawar, N. M., Fernandes, C., Raissi, M., Das, S., Kalantari, N. K., & Mahjour, S. K. (2024). Physics-guided, physics-informed, and physics-encoded neural networks and operators in scientific computing: Fluid and solid mechanics. *Journal of Computing and Information Science in Engineering*, 24(4), 040802.
- Forgez, C., Do, D. V., Friedrich, G., Morcrette, M., & Delacourt, C. (2010). Thermal modeling of a cylindrical LiFePO₄/graphite lithium-ion battery. *Journal of Power Sources*, 195(9), 2961-2968.
- Henke, M., & Hailu, G. (2020). Thermal management of stationary battery systems: A literature review. *Energies*, 13(6), 4194.
- Herrmann, L., & Kollmannsberger, S. (2024). Deep learning in computational mechanics: A review. *Computational Mechanics*, 74, 281-331.
- Hornik, K., Stinchcombe, M., & White, H. (1989). Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2(5), 359-366.
- Huang, X. Y., Chen, Y. W., & Yang, J. T. (2024). Inlet setting strategy via machine learning algorithm for thermal management of container-type battery energy-storage systems (BESS). *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 218, 124712.
- Huang, X. Y., Lu, Y. W., & Yang, J. T. (2024). Optimizing BESS performance: Anisotropic thermal properties and innovative parallel-flow cooling solutions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 224, 125354.
- IEA (2024). Electricity 2024. IEA. <https://www.iea.org/reports/electricity-2024>.



Institute of Electrical and Electronics Engineers. (2012). *IEEE/ASHRAE Guide for the Ventilation and Thermal Management of Batteries for Stationary Applications*, IEEE Std Guidel. IEEE, Piscataway, NJ, USA.

Jaguemont, J., Boulon, L., & Dubé, Y. (2016). A comprehensive review of lithium-ion batteries used in hybrid and electric vehicles at cold temperatures. *Applied Energy*, 164, 99-114.

Jarbratt, G., Kumar, S., Manghani, R., Patel, D., Pinner, D., Saraf, S., & Tai, H. (2023). Enabling renewable energy with battery energy storage systems. *McKinsey & Company*. <https://www.mckinsey.com/industries/automotive-and-assembly/our-insights/enabling-renewable-energy-with-battery-energy-storage-systems>. Extracted on July 20.

Kampouris, K., Drosou, V., Karytsas, C., & Karagiorgas, M. (2020). Energy storage systems review and case study in the residential sector. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 410, 012033.

Kim, J., Oh, J., & Lee, H. (2019). Review on battery thermal management system for electric vehicles. *Applied Thermal Engineering*, 149, 192-212.

Kingma, D. P. (2014). Adam: A method for stochastic optimization. *arXiv preprint arXiv:1412.6980*.

Kochkov, D., Smith, J. A., Alieva, A., Wang, Q., Brenner, M. P., & Hoyer, S. (2021). Machine learning--accelerated computational fluid dynamics. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 118(21), e2101784118.

Kumar, R. R., Bharatiraja, C., Udhayakumar, K., Devakirubakaran, S., Sekar, S., & Mihet-Popa, L. (2023). Advances in batteries, battery modeling, battery management system, battery thermal management, SOC, SOH, and charge/discharge characteristics in EV applications. *IEEE Access*, 11, 74011-74032.

Lai, Y., Wu, W., Chen, K., Wang, S., & Xin, C. (2019). A compact and lightweight liquid-cooled thermal management solution for cylindrical lithium-ion power battery pack. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 144, 118581.

- Lin, Y., Chen, Y. W., & Yang, J. T. (2023). Optimized thermal management of a battery energy-storage system (BESS) inspired by air-cooling inefficiency factor of data centers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 200, 123388.
- Liu, G., Ouyang, M., Lu, L., Li, J., & Han, X. (2014). Analysis of the heat generation of lithium-ion battery during charging and discharging considering different influencing factors. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 116(2), 1001-1010.
- Lv, Y., Zhou, D., Yang, X., Liu, X., Li, X., & Zhang, G. (2019). Experimental investigation on a novel liquid-cooling strategy by coupling with graphene-modified silica gel for the thermal management of cylindrical battery. *Applied Thermal Engineering*, 159, 113885.
- Menter, F.R., Lechner, R., Matyushenko, A. (2023). Best Practice: RANS Turbulence Modeling in Ansys CFD. *Ansys*.
- Mhaskar, H., Liao, Q., & Poggio, T. (2017). When and why are deep networks better than shallow ones?. in *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence* (Vol. 31, No. 1), 2343-2349.
- Nadeem, F., Hussain, S. M. S., Tiwari, P. K., Goswami, A. K., & Ustun, T. S. (2019). Comparative review of energy storage systems, their roles, and impacts on future power systems. *IEEE Access*, 7, 4555-4585.
- Olabi, A. G., Maghrabie, H. M., Adhari, O. H. K., Sayed, E. T., Yousef, B. A., Salameh, T., & Abdelkareem, M. A. (2022). Battery thermal management systems: Recent progress and challenges. *International Journal of Thermofluids*, 15, 100171.
- Palazzi, A. (2017). ConvLSTM_pytorch. *GitHub*.
https://github.com/ndrplz/ConvLSTM_pytorch/tree/master?tab=MIT-1-ov-file
- Qin, P., Liao, M., Mei, W., Sun, J., & Wang, Q. (2021). The experimental and numerical investigation on a hybrid battery thermal management system based on forced-air convection and internal finned structure. *Applied Thermal Engineering*, 195, 117212.
- Ronneberger, O., Fischer, P., & Brox, T. (2015). U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation. In *Medical image computing and computer-assisted intervention—MICCAI 2015: 18th international conference, Munich, Germany, October 5-9, 2015, proceedings, part III 18* (pp. 234-241). Springer international publishing.

- Shi, X., Chen, Z., Wang, H., Yeung, D. Y., Wong, W. K., & Woo, W. C. (2015). Convolutional LSTM network: A machine learning approach for precipitation nowcasting. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 28, 802-810.
- Thomas, K. E., & Newman, J. (2003). Thermal modeling of porous insertion electrodes. *Journal of the Electrochemical Society*, 150(2), A176.
- Tousi, M., Sarchami, A., Kiani, M., Najafi, M., & Houshfar, E. (2021). Numerical study of novel liquid-cooled thermal management system for cylindrical Li-ion battery packs under high discharge rate based on AgO nanofluid and copper sheath. *Journal of Energy Storage*, 41, 102910.
- Wang, Y., Wu, H., Zhang, J., Gao, Z., Wang, J., Philip, S. Y., & Long, M. (2022). Predrnn: A recurrent neural network for spatiotemporal predictive learning. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 45(2), 2208-2225.
- Yousif, M. Z., Yu, L., & Lim, H. (2022). Physics-guided deep learning for generating turbulent inflow conditions. *Journal of Fluid Mechanics*, 936, A21.
- Yu, C., Ma, X., Ren, J., Zhao, H., & Yi, S. (2020). Spatio-temporal graph transformer networks for pedestrian trajectory prediction. In *Computer Vision--ECCV 2020: 16th European Conference, Glasgow, UK, August 23--28, 2020, Proceedings, Part XII 16* (pp. 507-523). Springer.
- Zhang, J., Wu, B., Li, Z., & Huang, J. (2014). Simultaneous estimation of thermal parameters for large-format laminated lithium-ion batteries. *Journal of Power Sources*, 259, 106-116.
- Zhang, X., Li, Z., Luo, L., Fan, Y., & Du, Z. (2022). A review on thermal management of lithium-ion batteries for electric vehicles. *Energy*, 238, 121652.
- 黃新棫. (2023). 應用機器學習演算法設計具非等向熱傳性質電池儲能系統之熱管理策略. 碩士論文，國立台灣大學機械工程研究所.
- 陳怡妘. (2022). 改善電池儲能系統溫度分布之進風口控制策略. 碩士論文，國立台灣大學機械工程研究所.



附錄

近牆面網格加密對流場模擬結果之影響

根據 Menter *et al.* (2023) 所著之 Ansys 官方技術報告建議，數值模擬中網格應於固體與流體交界處加密至邊界層之 1/10 厚，以確保收斂性與計算精準度。本研究測試了針對近牆面網格加細與否對速度場與溫度分佈之影響，結果如圖 A-1 所示。放大檢視流場近牆面處，網格經加細(b 左)較未加細(b 右)之邊界層厚度明顯較小，顯示未在牆面進行網格加細將導致對邊界層流體行為之錯估。此二設定在長時間弱風量模擬得之電池最高溫度分別為 310.37 K 與 309.53 K，誤差約為 0.3%，並非顯著。同時，總網格數由原先之約 1194 萬增加為約 2022 萬。由於速度場之微觀特徵對整體電池溫度分佈影響較小，最終維持未於近牆面處加密之網格設定。

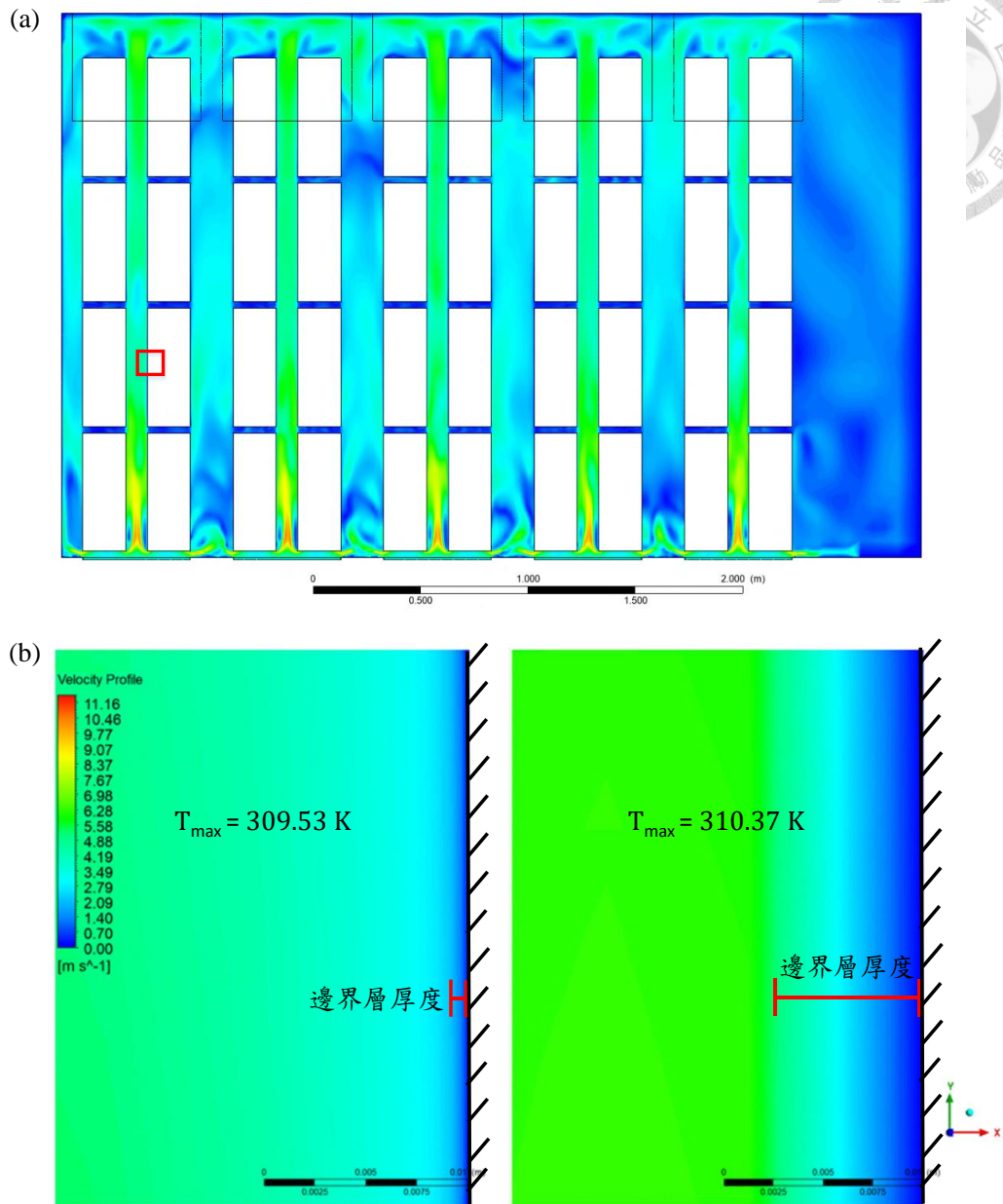


圖 A-1 (a)機櫃速度場前視圖，紅框處放大得下二圖，(b)近牆面網格加密(左)與未加密(右)之局部流場分佈

殘差連結對模型訓練之影響

殘差連結將模型對應層級輸入直接加予輸出，使模型學習輸入與輸出間的差值關係。此設計主要可在輸入、輸出間具相似特徵，殘差值遠小於二者的情況下，降低神經網路訓練的難度。圖 A-2 展示有無殘差連結對模型訓練之影響。左圖為右圖模型加上殘差連結結構後的訓練曲線，可以觀察到在相對極短的訓練步階內，

具殘差連結的模型(左)便快速收斂，而無殘差連結的模型(右)收斂緩慢外，驗證結果反覆大幅震盪，至訓練結束皆無法順利收斂，突顯該設計對模型訓練之重要性。

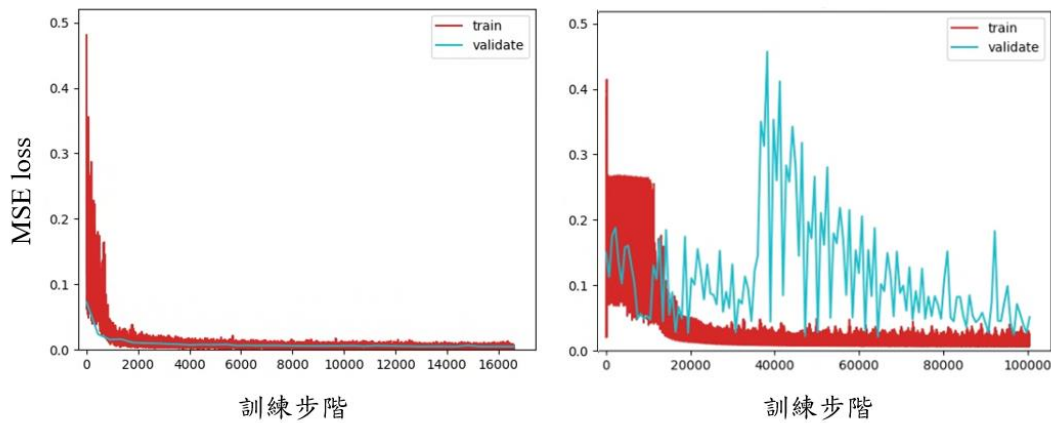


圖 A-2 殘差連結對訓練穩定性影響對照圖

損失函數遮罩對模型預測結果之影響

本研究物理模型中，速度場具電池所在區域速度為零之特質。本研究測試了令模型自行學習，以及在前、後處理另行遮罩，使模型略過學習兩種方式。訓練後模型在 50 步時距下，後平面之預測結果如圖 A-3 所示。此測試案例選用風速較高的低溫區，以突顯速度場預測差異。

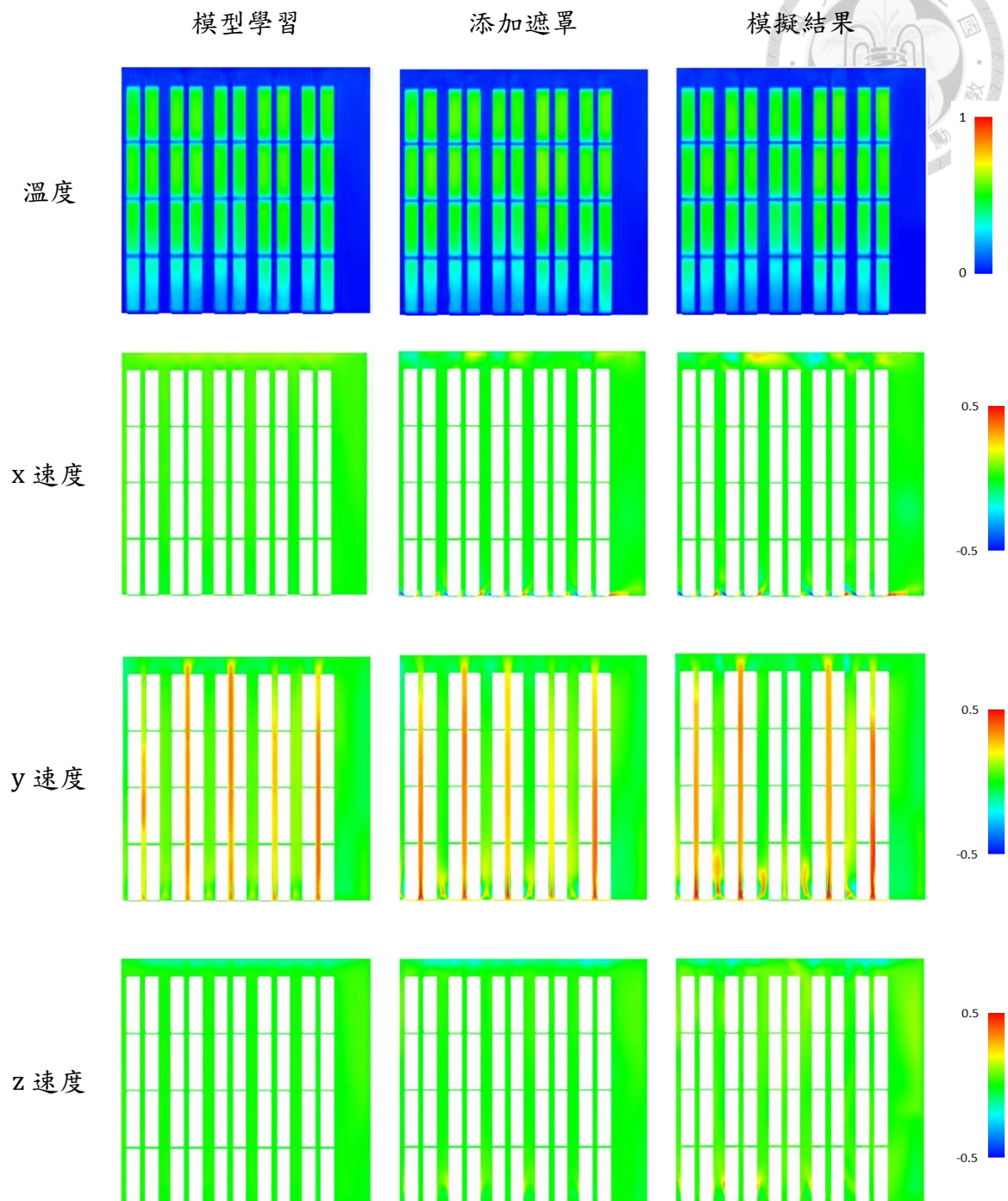


圖 A-3 損失函數遮罩前後模型預測比較

添加遮罩後，最明顯的差異出現於 x、z 速度場預測結果開始表現出非 0 向量。加上遮罩前，模型為降低電池所在區域預測值與 0 之差距，致使非電池的流體區域出現皆為 0 的表現。遮罩使模型略過學習此特質，進而成功學習速度場本身的

變化。 y 速度場與溫度場的精準度亦受影響，網格狀的不連續與模糊特質大幅緩解。此處模型尚未改變輸入前處理方式，故 y 速度場尚不精準，然而以可見相當程度的改進。本研究因而後續皆採遮罩方式處理速度場資料，並進行模型訓練。

輸入前處理方式對模型預測結果之影響

如上文所述，減少神經網路的學習目標可快速改善其學習成效。本研究進一步針對輸入進行前處理，給予額外的物理資訊以降低模型訓練難度。未進行處理前，本研究使 5 個入風口條件作為各自獨立的輸入參數。此設計令模型必須學習 5 個數值各自代表的意義，包括其對應的入風口位置。為使模型預先得知 5 個風速對應位置，本研究改將 5 個數值填入圖 A-4(左)中 1 至 5 號對應的空白處，再使之經過 5 層線性卷積層，轉為速度場分佈影響地圖。前處理後的輸入地圖示例如圖 A-4(右)。

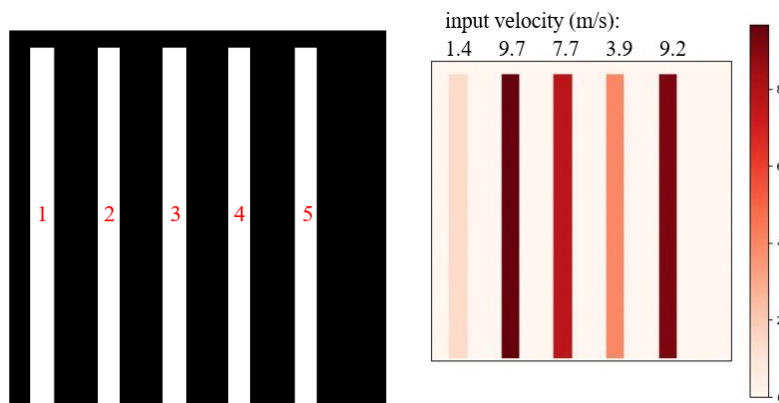


圖 A-4 輸入條件前處理示意圖

以此設計訓練後模型在 50 步時距下，後平面之預測結果如圖 A-5 所示。結果顯示，輸入前處理可大幅改善 y 速度場的預測精準度。由於 y 速度場為本研究模擬中變化最劇烈的物理場，模型學習難度較高；經前處理的輸入使模型更易於掌握對應的速度場變化趨勢，並依此得到正確的預測結果。本研究最終採用之模型即為輸入經前處理，損失函數進行遮罩所訓練的模型，不論於溫度或速度場皆可精確擬合模擬結果。

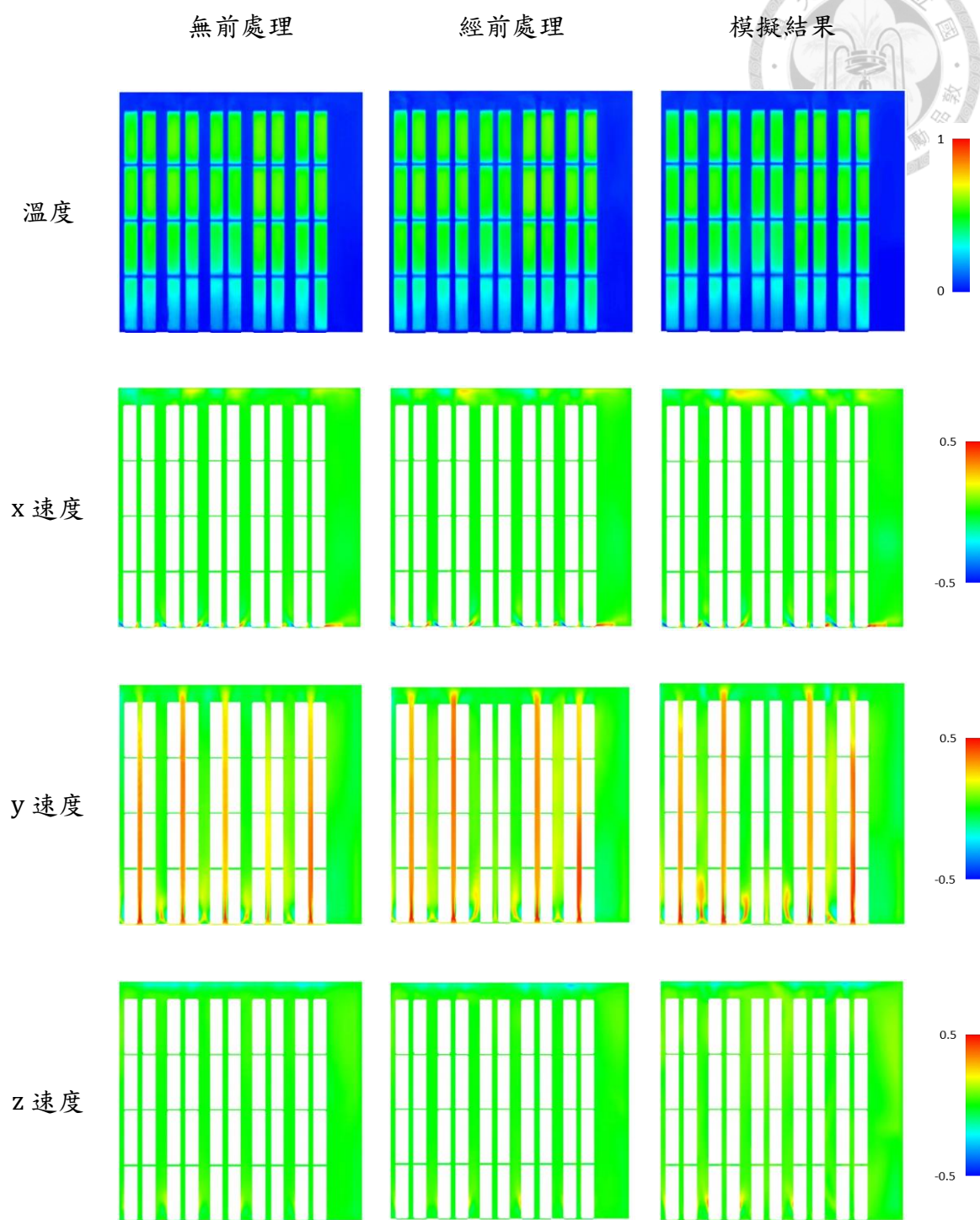
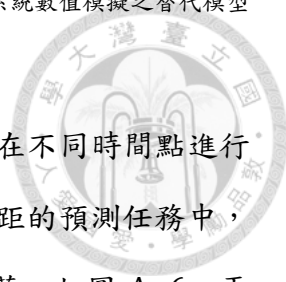


圖 A-5 不同輸入前處理方法模型預測比較



神經網路訓練之隨機性

神經網路之訓練存在隨機性。本研究以相同資料與演算法，在不同時間點進行再現性測試。所訓練模型略遜於上文所展示之模型。50 步階時距的預測任務中，兩個模型表現相若；在 500 步的預測上，二者的差異則相對顯著，如圖 A-6。再現之模型誤差傳播較原模型顯著，表現出模型訓練的不確定性。重複訓練可能改善或劣化模型表現，在時間與資源允許之情況下，可嘗試以同個演算法訓練數個模型，並挑選最優者進行後續應用。

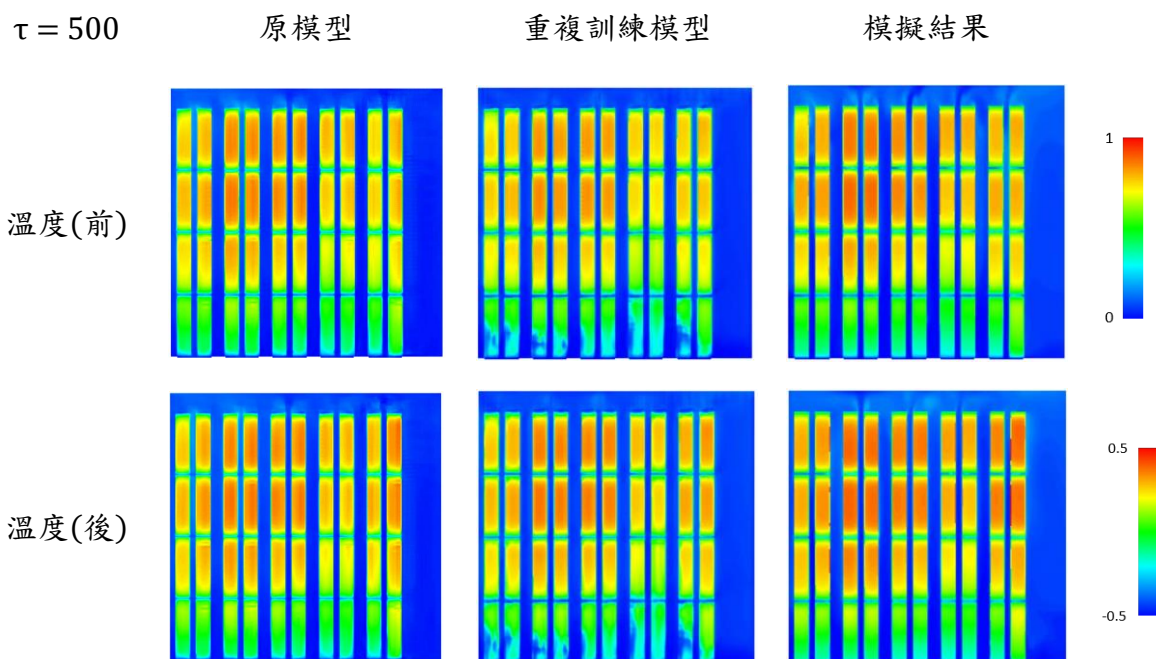


圖 A-6 模型重複訓練之表現差異比較

