



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΔΙΑΤΑΞΕΩΝ & ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΑΠΟΦΑΣΕΩΝ

**Προβλεπτική Αναλυτική Δεδομένων σε Μπαταρίες
Li-Ion με Αυτοματοποιημένη Μηχανική Μάθηση**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του

ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΥ ΚΟΥΪΝΗ

Επιβλέπων : Γρηγόρης Μέντζας
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Οκτώβριος 2022

Η σελίδα αυτή είναι σκόπιμα λευκή.



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΔΙΑΤΑΞΕΩΝ
ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΑΠΟΦΑΣΕΩΝ

Προβλεπτική Αναλυτική Δεδομένων σε Μπαταρίες Li-Ion με Αυτοματοποιημένη Μηχανική Μάθηση

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του

ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΥ ΚΟΨΙΝΗ

Επιβλέπων : Γρηγόρης Μέντζας
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 25^η Οκτωβρίου 2022.

(Υπογραφή)

.....
Γρηγόρης Μέντζας
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

(Υπογραφή)

.....
Ιωάννης Ψαρράς
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

(Υπογραφή)

.....
Δημήτρης Ασκούνης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Οκτώβριος 2022

(Υπογραφή)

.....

ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ ΚΟΨΙΝΗΣ

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

© 2022 – All rights reserved

Περίληψη

Με το παγκόσμιο ενδιαφέρον να στρέφεται όλο και περισσότερο στον δραστικό περιορισμό των εκπομπών άνθρακα, η χρήση των μπαταριών ιόντων λιθίου σε εφαρμογές όπως η ηλεκτροκίνηση και η αποθήκευση ανανεώσιμης ενέργειας για την τροφοδοσία του Συστήματος Ηλεκτρικής Ενέργειας πρόκειται μόνο να εντατικοποιηθεί. Σε αυτό το πλαίσιο, τα υπάρχοντα φυσικά μοντέλα μπαταριών λιθίου για την εκτίμηση των καταστάσεων της μπαταρίας και την κατ' επέκταση ορθή διαχείρισή τους από το Σύστημα Διαχείρισης Μπαταρίας (Battery Management System ή BMS) κρίνονται ανεπαρκή. Συνεπώς, έχουν προταθεί νέα μοντέλα, βασισμένα σε δεδομένα και εκπαιδευμένα με μεθόδους Μηχανικής Μάθησης (Machine Learning ή ML), και βρίσκονται πλέον στο επίκεντρο του ερευνητικού ενδιαφέροντος.

Παράλληλα, ένας νέος ανερχόμενος τομέας, αυτός της Αυτοματοποιημένης Μηχανικής Μάθησης (Automated Machine Learning ή AutoML), έρχεται να καταστήσει το πρόβλημα της εύρεσης του καλύτερου μοντέλου προσιτό ακόμα και στους μη ειδικούς αναλυτές, μέσα από την αλγοριθμική αναζήτηση του καλύτερου δυνατού μοντέλου ML από έναν συγκεκριμένο χώρο αναζήτησης. Πλέον, η ανάπτυξη μοντέλων ML δεν αποτελεί προνόμιο των εξειδικευμένων επιστημόνων, παύει να εξαρτάται από την χειροκίνητη ρύθμιση υπερ-παραμέτρων με βάση την εμπειρία και τη διαίσθηση και συστηματοποιείται ώστε να εκτελείται αυτόματα από βιβλιοθήκες προσβάσιμες και φιλικές σε όλους.

Ο σκοπός της διπλωματικής εργασίας είναι να εξετάσει κατά πόσο σύγχρονες τεχνικές AutoML μπορούν να εφαρμοστούν στο πεδίο των μπαταριών ιόντων λιθίου και να πραγματοποιήσουν επιτυχείς προβλέψεις των καταστάσεών τους. Για αυτό το λόγο, επιλέχθηκε ένα ανοιχτό σύνολο δεδομένων κύκλισης μπαταρίας (battery cycling dataset) και ένα πακέτο AutoML, το AutoKeras, για την εκτέλεση αναζήτησης βέλτιστης αρχιτεκτονικής νευρωνικού δικτύου (Neural Architecture Search ή NAS) κατά την πρόβλεψη της κατάστασης φόρτισης μπαταρίας (State of Charge ή SOC). Τα μοντέλα αξιολογήθηκαν επιτυχώς δείχνοντας ότι η προτεινόμενη προσέγγισή μας έχει βάσεις και χρήζει περαιτέρω διερεύνησης.

Λέξεις Κλειδιά: Μπαταρίες Ιόντων Λιθίου, Σύστημα Διαχείρισης Μπαταρίας, Καταστάσεις Μπαταρίας, Κατάσταση Φόρτισης, Αυτοματοποιημένη Μηχανική Μάθηση, Αναζήτηση Αρχιτεκτονικής Νευρωνικού, AutoKeras

Η σελίδα αυτή είναι σκόπιμα λευκή.

Abstract

With global attention increasingly turning to drastically reducing carbon emissions, the use of lithium-ion batteries in applications such as e-mobility and the storage of renewable energy to power the electric grid is only going to intensify. In this context, the existing physical models of lithium batteries for estimating the battery states and by extension their proper management by the Battery Management System (BMS) are considered insufficient. Thus, new data-driven models trained with Machine Learning (ML) methods have been proposed and lie at the epicenter of scientific interest.

Meanwhile, a new emerging field, that of Automated Machine Learning (AutoML), emerges to make the problem of finding the best model accessible even to non-expert analysts, through the algorithmic search of the best possible ML model from a particular search space. Now, the development of ML models is no longer a privilege of expert scientists, it ceases to depend on manual hyper-parameter tuning based on experience and intuition, and it is systematized to be performed automatically by user-friendly modules accessible to everyone.

The aim of this thesis is to examine whether modern AutoML techniques can be applied in the field of lithium-ion batteries and make successful predictions of their states. For this reason, a public battery cycling dataset and an AutoML module, namely AutoKeras, were chosen to perform Neural Architecture Search (NAS) when predicting the battery State of Charge or SOC). The models were successfully evaluated showing that our proposed approach has merit and warrants further investigation.

Keywords: Lithium Ion Batteries (Li-ion Batteries), Battery Management System (BMS), Battery States, State of Charge (SOC), Automated Machine Learning (Auto-ML), Neural Architecture Search (NAS), AutoKeras

Η σελίδα αυτή είναι σκόπιμα λευκή.

Ευχαριστίες

Με την ολοκλήρωση της διπλωματικής μου εργασίας και των προπτυχιακών μου σπουδών θα ήθελα να ευχαριστήσω τους ανθρώπους που με βοήθησαν και με στήριξαν στην προσπάθεια μου αυτή.

Καταρχάς, ευχαριστώ θερμά τον καθηγητή κ. Γρηγόρη Μέντζα για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε με την ανάθεση αυτής της διπλωματικής εργασίας. Επίσης, θέλω να ευχαριστήσω ιδιαίτερα τον διδάκτορα ερευνητή Αλέξανδρο Μπουσδέκη, καθώς και τους υποψήφιους διδάκτορες Κατερίνα Λεπενιώτη και Αφροδίτη Φούκα για την καθοδήγηση και την ενθάρρυνση που μου παρέιχαν καθ' όλη τη διάρκεια της εκπόνησης της εργασίας αυτής. Οι συμβουλές, η αφοσίωση και ο οργανωμένος τρόπος λειτουργίας τόσο του καθηγητή όσο και των διδακτορικών ερευνητών έκαναν αυτό το τελευταίο κομμάτι των σπουδών μου ανεπανάληπτο και νιώθω ευγνώμων για την ευκαιρία που είχα να συνεργαστώ μαζί τους. Κοντά τους έμαθα πάρα πολλά πέραν του ίδιου του γνωστικού αντικείμενου με το οποίο ασχολήθηκα, όπως τη συνεργασία εντός μιας ερευνητικής ομάδας, την αλληλεπίδραση με άτομα διαφορετικών τομέων ειδίκευσης, τη σύνθεση των γνώσεών τους σε μια νέα οντότητα, τη μεθοδολογία της έρευνας και, τέλος, την σύνταξη του περιεχομένου αυτής της ίδιας της διπλωματικής εργασίας.

Επιπλέον, θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους τους φίλους μου για την υποστήριξη τα προηγούμενα χρόνια καθώς και όλους τους συμφοιτητές με τους οποίους συμπορεύτηκα στο Πολυτεχνείο και σημάδεψαν την φοιτητική μου πορεία με όμορφες στιγμές και αναμνήσεις.

Τέλος, ευχαριστώ τους γονείς μου, Χαράλαμπο και Παναγιώτα, την αδερφή μου, Μαρία, καθώς και όλη μου την ευρύτερη οικογένεια για την ανιδιοτελή στήριξη, την αγάπη και τα εφόδια που μου έδωσαν όλα αυτά τα χρόνια.

Κωνσταντίνος Κοψίνης
Αθήνα, 25η Οκτωβρίου 2022

Η σελίδα αυτή είναι σκόπιμα λευκή.

Πίνακας περιεχομένων

Προβλεπτική Αναλυτική Δεδομένων σε Μπαταρίες Li-Ion με Αυτοματοποιημένη Μηχανική Μάθηση		1
1	Εισαγωγή	1
1.1	Μοντελοποίηση Καταστάσεων για τις Μπαταρίες Ιόντων Λιθίου	1
1.2	Αντικείμενο διπλωματικής	2
1.3	Οργάνωση κειμένου	3
2	Βιβλιογραφική Επισκόπηση.....	4
2.1	Φυσικά Μοντέλα Μπαταριών Λιθίου	4
2.1.1	Κατάσταση Φόρτισης (SOC).....	5
2.1.2	Κατάσταση Ενέργειας (SOE)	8
2.1.3	Κατάσταση Υγείας (SOH)	9
2.1.4	Κατάσταση Ισχύος (SOP)	10
2.2	Μηχανική Μάθηση για Προβλέψεις SOC	11
2.2.1	Συλλογή Δεδομένων.....	11
2.2.2	Αλγόριθμοι Μηχανικής Μάθησης.....	14
2.3	Αυτοματοποιημένη Μηχανική Μάθηση.....	15
2.3.1	Χώρος αναζήτησης	17
2.3.2	Μέθοδος Βελτιστοποίησης Αρχιτεκτονικής	20
3	Προτεινόμενη Προσέγγιση	25
3.1	Δεδομένα Μπαταριών	26
3.1.1	Συλλογή Δεδομένων.....	26
3.1.2	Διερευνητική Ανάλυση Δεδομένων.....	26
3.1.3	Καθαρισμός Δεδομένων.....	27
3.1.4	Μηχανική Χαρακτηριστικών.....	27
3.2	Μορφισμός δικτύου κατευθυνόμενος από μπεϋζιανή βελτιστοποίηση	31
4	Υλοποίηση και Αξιολόγηση	39

4.1	Τεχνολογίες.....	39
4.2	Συλλογή Δεδομένων.....	43
4.3	Διερευνητική Ανάλυση Δεδομένων;	45
4.4	Προετοιμασία Δεδομένων	50
4.4.1	<i>Καθαρισμός δεδομένων</i>	50
4.4.2	<i>Μηχανική Χαρακτηριστικών</i>	51
4.5	Εύρεση καλύτερου μοντέλου με Auto-ML	53
4.5.1	<i>Παραγωγή Μοντέλου</i>	53
4.5.2	<i>Αξιολόγηση Μοντέλου</i>	57
4.6	Πειραματικά Αποτελέσματα	59
4.6.1	<i>Πρόβλεψη SOC σε σειρά από κύκλους εκφόρτισης</i>	61
4.6.2	<i>Πρόβλεψη SOC σε μεμονωμένους κύκλους εκφόρτισης</i>	63
5	Συμπεράσματα και Μελλοντική Εργασία	67
5.1	Σύνοψη και συμπεράσματα.....	67
5.2	Μελλοντικές επεκτάσεις	68
6	Βιβλιογραφία	69

1

Εισαγωγή

1.1 Μοντελοποίηση Καταστάσεων για τις Μπαταρίες Ιόντων

Λιθίου

Με την υπερθέρμανση του πλανήτη να εντείνει τις ανησυχίες για τη δραστική μείωση του παγκόσμιου ανθρακικού αποτυπώματος της ανθρώπινης δραστηριότητας, η ηλεκτροδότηση των μεταφορών έχει αναδειχθεί πρόσφατα σε σημαντική προτεραιότητα για πολλές χώρες. Το 2015, το 50% όλων των ατμοσφαιρικών ρύπων με οξείδιο του αζώτου στον κόσμο, που αντιστοιχεί σε 53 εκατομμύρια τόνους ατμοσφαιρικών εκπομπών οξειδίου του αζώτου, μπορεί να αποδοθεί στον τομέα των μεταφορών. Επιπλέον, το ήμισυ του συνολικού οικονομικού κόστους που σχετίζεται με την υγεία, που εκτιμάται σε 865 δισεκατομμύρια δολάρια το 2010, πιστώνεται στην ατμοσφαιρική ρύπανση [1]. Σήμερα, ορισμένες χώρες λαμβάνουν αναλογικά μέτρα για να εξουδετερώσουν αυτές τις αρνητικές επιπτώσεις απαγορεύοντας τα νέα βενζινοκίνητα και πετρελαιοκίνητα οχήματα έως το 2030 ή ήδη από το 2025, στην περίπτωση της Νορβηγίας. [2]

Οι μπαταρίες ιόντων λιθίου (Li-ion) δεν χρησιμοποιούνται μόνο σε μεγάλο βαθμό στα περισσότερα φορητά ηλεκτρονικά και τα ηλεκτρικά οχήματα (Electric Vehicles ή EVs), αλλά και στην τεχνολογία έξυπνων συστημάτων ηλεκτρικής ενέργειας (smart-grids) με ανανεώσιμες πηγές ενέργειας για εξισορρόπηση φορτίου καθώς και σε νεότερες τεχνολογίες όπως τα μη

επανδρωμένα εναέρια οχήματα (Unmanned Aerial Vehicles ή UAV) και τα επιβατικά drones που στοχεύουν σε αποστάσεις μικρής εμβέλειας [3]. Αυτό μπορεί να αποδοθεί σε πολλά πλεονεκτήματα που προσφέρουν οι μπαταρίες Li-ion σε σχέση με άλλες μπαταρίες. Αυτά περιλαμβάνουν υψηλή ειδική ενέργεια και πυκνότητα ενέργειας που επιτρέπει στα ηλεκτροκίνητα οχήματα μεγαλύτερη αυτονομία οδήγησης μόνο με ηλεκτρισμό, υψηλή διάρκεια κύκλου ζωής, υψηλή απόδοση κυλόμπ (έως 98%) και χαμηλή αυτοεκφόρτιση [4, 5]. Λόγω των πλεονεκτημάτων των μπαταριών ιόντων λιθίου που περιγράφονται παραπάνω, τα ηλεκτροκίνητα οχήματα που τροφοδοτούνται από μπαταρίες ιόντων λιθίου είναι επί του παρόντος ένας από τους καλύτερους τρόπους για να μετριαστούν τα προβλήματα που προαναφέρθηκαν. [2]

Συνεπώς, η διαχείριση της μπαταρίας είναι υψίστης σημασίας για την αποδοτική λειτουργία, την ασφάλεια, την αξιοπιστία και το αποτελεσματικό κόστος των απανταχού ενεργειακών συστημάτων που τροφοδοτούνται από μπαταρίες. [6] Εξαιτίας πολύπλοκων ηλεκτροχημικών δυναμικών, μια απλοϊκή απομίμηση μπαταριών στη λογική ενός μαύρου κουτιού που ανιχνεύει μόνο τάση, ρεύμα και επιφανειακή θερμοκρασία δεν μπορεί προφανώς να καταλήξει σε συστήματα διαχείρισης μπαταριών (Battery Management Systems ή BMSs) υψηλής επίδοσης. Το να καταφέρουμε να υπολογίσουμε και να παρατηρήσουμε κρίσιμες εσωτερικές καταστάσεις της μπαταρίας με ακρίβεια και ευρωστία αποτελεί το κλειδί για την επίτευξη τεχνολογιών για προηγμένα BMSs. [3]

Η εκτίμηση της κατάστασης μιας μπαταρίας έχει ήδη εξελιχθεί σε ένα αχανές πεδίο έρευνας, με μεγάλο αριθμό καταγεγραμμένων προσεγγίσεων στη βιβλιογραφία. Παρά την πρόοδο στην ανάπτυξη πιο ακριβών και γρήγορων μοντέλων για on-line εκτιμήσεις των καταστάσεων της μπαταρίας, εξακολουθεί να υπάρχει σαφής ανταγωνισμός μεταξύ της υπολογιστικής απόδοσης και της ακρίβειας των προβλέψεων των μοντέλων. Πρόσφατα, τα μοντέλα που βασίζονται σε δεδομένα (Data-Driven Models ή DDMs) έχουν τραβήξει μεγάλη προσοχή. Σε συνδυασμό με τεχνικές μηχανικής μάθησης, αυτά τα μοντέλα είναι σε θέση να κάνουν προβλέψεις χωρίς προηγούμενη γνώση του συστήματος. Έτσι, έχουν εφαρμοστεί πολλές τεχνικές μηχανικής μάθησης – συμπεριλαμβανομένου των νευρωνικών δικτύων (NN), της μηχανής διανυσμάτων υποστήριξης (Support Vector Machine), των τεχνικών τυχαίου δάσους (Random Forest) και παλινδρόμησης (Regression) – για την πρόβλεψη αυτών των καταστάσεων. [2]

1.2 Αντικείμενο διπλωματικής

Σε αυτή την διπλωματική εργασία, επιχειρούμε την ανάπτυξη μοντέλων νευρωνικών δικτύων για την πρόβλεψη των καταστάσεων της μπαταρίας σε ζωντανό χρόνο. Έχοντας διατρέξει τα φυσικά μοντέλα περιγραφής της μπαταρίας, εστιάζουμε στα πλεονεκτήματα που

προσφέρουν τα data-driven μοντέλα. Συγκεκριμένα, αξιοποιούμε για πρώτη φορά το καινοτόμο εργαλείο της Αυτοματοποιημένης Μηχανικής Μάθησης (Automated Machine Learning ή Auto-ML) στο πεδίο των μπαταριών λιθίου για την εκτέλεση αναζήτησης αρχιτεκτονικής νευρωνικού (Neural Architecture Search ή NAS) και την εύρεση του καλύτερου μοντέλου (best model). Στο τέλος, τα μοντέλα που παράγονται αξιολογούνται πάνω σε συγκεκριμένα σύνολα ελέγχου (test sets) και επαληθεύεται η αποτελεσματικότητα της μεθόδου.

1.3 Οργάνωση κειμένου

Η διπλωματική εργασία αποτελείται από 6 κεφάλαια.

Στο **Κεφάλαιο 2** παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο πάνω στο οποίο βασίζεται η διπλωματική. Συγκεκριμένα, παρουσιάζονται οι βασικές θεωρητικές έννοιες για τα φυσικά μοντέλα περιγραφής των καταστάσεων των μπαταριών λιθίου και οι αδυναμίες που αυτά παρουσιάζουν. Κατόπιν, στρεφόμαστε στο πεδίο της μηχανικής μάθησης περιγράφοντας τις μεθόδους απόκτησης δεδομένων για την εκπαίδευση μοντέλων καθώς και τη σχετική βιβλιογραφία και έρευνα για την πρόβλεψη της κατάστασης φόρτισης (State of Charge ή SOC) μπαταρίας με τη χρήση νευρωνικών δικτύων. Τέλος, παρατίθεται το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο μεθόδων AutoML για την αυτοματοποιημένη εκτέλεση NAS.

Στο **Κεφάλαιο 3** παρουσιάζεται η προτεινόμενη προσέγγιση της διπλωματικής εργασίας και συγκεκριμένα ο τρόπος προ-επεξεργασίας των δεδομένων, η μεθοδολογία αναζήτησης αρχιτεκτονικής νευρωνικού και ο τρόπος αξιολόγησης του.

Στο **Κεφάλαιο 4** παρουσιάζεται αναλυτικά η υλοποίηση που έγινε στα πλαίσια της διπλωματικής, η πειραματική προσέγγιση, τα πειράματα, τα αποτελέσματα των προβλέψεων και τα συμπεράσματα των πειραμάτων.

Στο **Κεφάλαιο 5** γίνεται μια σύνοψη της διπλωματικής μαζί με τα συνολικά συμπεράσματα που προκύπτουν συνοδευόμενα από τις προοπτικές για μελλοντική εργασία πάνω στο συγκεκριμένο αντικείμενο.

Τέλος, στο **Κεφάλαιο 6** παρουσιάζεται η βιβλιογραφία της διπλωματικής εργασίας.

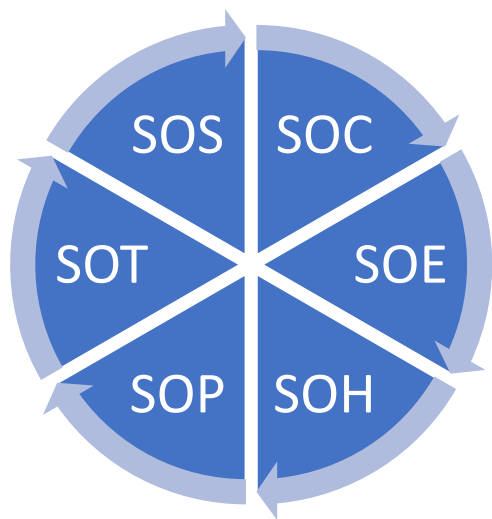
2

Βιβλιογραφική Επισκόπηση

Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζουμε τα υπάρχοντα φυσικά μοντέλα μπαταριών λιθίου και τα μειονεκτήματά τους για να καταλήξουμε στα μοντέλα που βασίζονται σε δεδομένα (data-driven models) και τις ενθαρρυντικές προοπτικές που εμφανίζουν τα τελευταία χρόνια. Τέλος, εισάγουμε τον αναγνώστη στο πεδίο της αυτοματοποιημένης μηχανικής μάθησης (AutoML) και των μεθόδων εκτέλεσης αναζήτησης αρχιτεκτονικής νευρωνικού (NAS).

2.1 Φυσικά Μοντέλα Μπαταριών Λιθίου

Είναι γενικά γνωστό ότι εξαιτίας πολύπλοκων ηλεκτροχημικών δυναμικών, μια απλοϊκή απομίμηση μπαταριών στη λογική ενός μαύρου κουτιού που ανιχνεύει μόνο τάση, ρεύμα και επιφανειακή θερμοκρασία δεν μπορεί προφανώς να καταλήξει σε Συστήματα Διαχείρισης Μπαταριών (Battery Management Systems ή BMSs) υψηλής επίδοσης. Το να καταφέρουμε να υπολογίσουμε και να παρατηρήσουμε κρίσιμες εσωτερικές καταστάσεις της μπαταρίας με ακρίβεια και ευρωστία αποτελεί το κλειδί για την επίτευξη τεχνολογιών για προηγμένα BMSs. Η αξιόπιστη γνώση της



Εικόνα 1: Ενδεικτικές καταστάσεις της μπαταρίας που καλείται να εκτιμήσει το εκάστοτε BMS.

Κατάστασης Φόρτισης (State of Charge ή SOC), της Κατάστασης Ενέργειας (State of Energy ή SOE), της Κατάστασης Ενέργειας (State of Health ή SOH), της Κατάστασης Ισχύος (State of Power ή SOP), της Κατάστασης Θερμοκρασίας (State of Temperature ή SOT) και της Κατάστασης Ασφάλειας (State of Safety ή SOS) είναι απαραίτητη προϋπόθεση για την

αποτελεσματική φόρτιση, τη θερμική διαχείριση και τη διαχείριση της υγείας των μπαταριών. Η εκτίμηση των καταστάσεων της μπαταρίας έχει ήδη εξελιχθεί σε ένα τεράστιο πεδίο έρευνας, με μεγάλο αριθμό προσεγγίσεων που αναφέρονται στη βιβλιογραφία [3]

2.1.1 Κατάσταση Φόρτισης (SOC)

Ορισμός

Ως ένας από τους κρίσιμους παράγοντες στα BMSs, η Κατάσταση Φόρτισης (State of Charge ή SOC) μπορεί να εκφραστεί με πολλές διατυπώσεις προβλημάτων [7]. Σε γενικές γραμμές, το SOC αναφέρεται στη διαθέσιμη χωρητικότητα (Q_a) εκφρασμένη ως το ποσοστό της ονομαστικής χωρητικότητας (Q_n). Εν προκειμένω, το Q_n αφορά το μέγιστο μέγεθος φορτίου που μπορεί να αποθηκευτεί στην μπαταρία. **Χρησιμοποιώντας το ντεπόζιτο καυσίμων ενός οχήματος σαν αναλογία, το SOC παρέχει την ίδια λειτουργικότητα με τον μετρητή του καυσίμου.** Έστω ότι το ρεύμα I είναι θετικό κατά τη φόρτιση και αρνητικό κατά την εκφόρτιση, ένας συνήθης ορισμός του SOC μπορεί να δοθεί ως εξής:

$$SOC(t) = SOC(t_0) + \int_{t_0}^t \frac{I(t) \cdot \eta}{Q_n} dt \quad (1)$$

όπου $SOC(t)$ και $SOC(t_0)$ είναι οι τιμές του SOC τη χρονική στιγμή t και την αρχική στιγμή t_0 αντίστοιχα και η είναι κουλομπική αποδοτικότητα που αντανακλά το λόγο της ενέργειας πλήρους εκφόρτισης προς την ενέργεια φόρτισης που απαιτείται για την ανάκτηση της αρχικής χωρητικότητας. [3]

Από την άλλη, ένας πιο προσιτός ορισμός δίνεται στο [5], ορίζοντας το SOC ως **το υπολειπόμενο φορτίο εντός της μπαταρίας** και εξισώνοντάς το με τον λόγο της υπολειπόμενης χωρητικότητας της μπαταρίας προς την ονομαστική χωρητικότητά της, όπου η υπολειπόμενη χωρητικότητα μπορεί να υπολογιστεί αφαιρώντας από την τρέχουσα μέγιστη δυνατή χωρητικότητα την τρέχουσα χωρητικότητα:

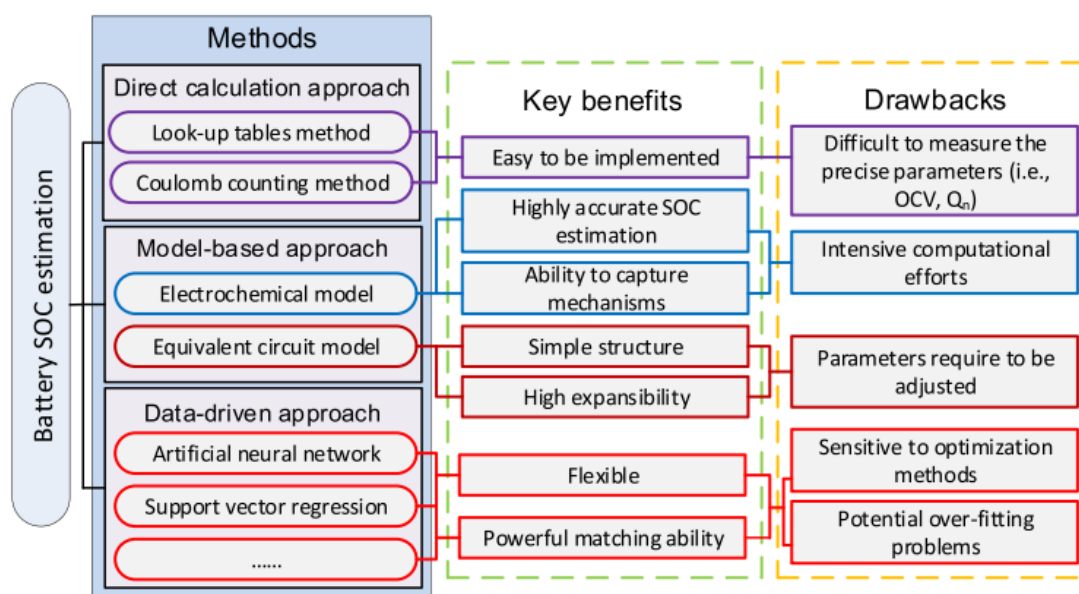
$$SOC = \frac{ResidualCapacity}{NominalCapacity} = \frac{FullCapacity - CurrentCapacity}{NominalCapacity} \quad (2)$$

Τα BMSs απαιτούν ακριβή πληροφόρηση για το SOC, ενδεικτικής της υπολειπόμενης διαθέσιμης ενέργειας εντός της μπαταρίας κατά τη διάρκεια της λειτουργίας. Για την ίδια την μπαταρία, τέτοια πληροφορία κατάστασης βρίσκει εφαρμογή στην παροχή a priori γνώσης για στρατηγικές φόρτισης/εκφόρτισης, ώστε να εξασφαλιστεί η λειτουργία της μπαταρίας εντός ασφαλών και αξιόπιστων συνθηκών. Σε συνθήκες εργαστηρίου, γνωρίζοντας την αρχική τιμή του SOC, οι τιμές αναφοράς του SOC αποκτώνται συνήθως από μια καλά ελεγχόμενη μέθοδο

μέτρησης κουλόμπ που συσσωρεύει αθροιστικά το μεταφερόμενο φορτίο [8]. Ωστόσο, εξαιτίας περίπλοκων ηλεκτροχημικών αντιδράσεων και ισχυρών χαρακτηριστικών σύζευξης (coupling characteristics), είναι δύσκολο να μετρήσουμε απευθείας το SOC της μπαταρίας σε εφαρμογές του πραγματικού κόσμου. Συνεπώς, ο ακριβής υπολογισμός του SOC σε πραγματικό χρόνο καθίσταται μία κρίσιμη λειτουργία στα BMSs και κατ' επέκταση προσελκύει σεβαστές ερευνητικές προσπάθειες. [3]

Μέθοδοι και βασικά ζητήματα

Μέχρι σήμερα έχουν προταθεί ποικίλες προσεγγίσεις στην βιβλιογραφία για να απευθυνθούν στις προκλήσεις του υπολογισμού του SOC. Μπορούμε να τις διακρίνουμε σε τρεις βασικές κατηγορίες, οι οποίες συνοψίζονται και στην **Εικόνα 2**.



Εικόνα 2: Μέθοδοι εκτίμησης SOC από την άποψη των βασικών πλεονεκτημάτων και μειονεκτημάτων τους. [3]

ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΑΠΕΥΘΕΙΑΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ – Για την **προσέγγιση του απευθείας υπολογισμού (direct calculation approach)**, δύο συνήθεις τρόποι θεωρούνται άξιοι αναφοράς. Πρώτον, εξαιτίας μιας προφανούς σχέσης αντιστοιχίας μεταξύ του SOC και αρκετών παραμέτρων όπως η τάση ανοιχτού κυκλώματος (Open Circuit Voltage ή OCV) και η σύνθετη αντίσταση, το SOC της μπαταρίας μπορεί να συμπεραθεί μέσα από πίνακες αναζήτησης που περιγράφουν μια τέτοια σχέση [9]. Δεύτερον, η μεταβολή του SOC μπορεί εύκολα να υπολογιστεί μέσω της μεθόδου μέτρησης κουλόμπ (coulomb counting method) σε περιπτώσεις όπου η ονομαστική χωρητικότητα της μπαταρίας και τα χαρακτηριστικά του ρεύματος είναι γνωστά επακριβώς. Κάτι τέτοιο δείχνει εύκολο να υλοποιηθεί για τον υπολογισμό του SOC. Ωστόσο, η ακριβής μέτρηση των σχετικών παραμέτρων σε συνθήκες λειτουργίας (online) αποτελεί ακόμα μια τρομακτική πρόκληση, λόγω του ότι απαιτείται μια

περίοδος ανάπαυσης για τη λήψη του OCV και η χωρητικότητα της μπαταρίας ποικίλει γενικότερα υπό διαφορετικά επίπεδα γήρανσης. Συνεπώς, έχουν γίνει προσπάθειες για να υπολογιστεί το SOC μέσα από άλλους υποστηρικτές, όπως τα μοντέλα μπαταρίας. [3]

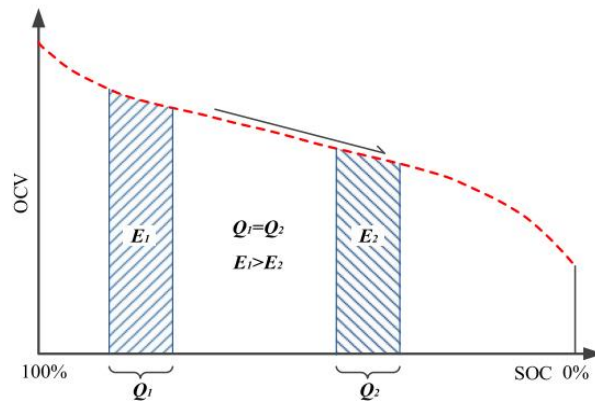
ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΒΑΣΙΣΜΕΝΗ ΣΕ ΦΥΣΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ – Η βασισμένη σε φυσικό μοντέλο προσέγγιση (model-based approach) βασίζεται σε κατάλληλα μοντέλα με ποικίλες τεχνικές υπολογισμού για την προσέγγιση του SOC. Ένας ευρέως χρησιμοποιούμενος τύπος μοντέλου είναι τα ηλεκτροχημικά μοντέλα (Electrochemical Models ή Ems) χάρη στην ισχυρή ικανότητάς τους να συλλαμβάνουν και τις κινητικές μεταφορές και τις μεταφορές φορτίου εντός της μπαταρίας, καταλήγοντας κατ' επέκταση σε μια ιδιαίτερα ακριβή ένδειξη για το SOC [10]. Παρόλα αυτά, οι προσεγγίσεις βασισμένες στα EMs συνήθως απαιτούν εντατικές υπολογιστικές προσπάθειες εξαιτίας των πολλών παραμέτρων που εμπλέκονται και των μερικών διαφορικών εξισώσεων. Επιπλέον, κατά την υλοποίησή τους σε πραγματικό χρόνο είναι απαραίτητες κατάλληλες απλοποιήσεις. Ένας άλλος δημοφιλής τύπος μοντέλου είναι τα μοντέλα ισοδύναμου κυκλώματος (Equivalent Circuit Models ή ECMs) τα οποία κάνουν χρήση διατάξεων ηλεκτρικού κυκλώματος για να μιμηθούν τις δυναμικές της μπαταρίας. Χάρη στην απλή δομή τους και την επεκτασιμότητά τους εντός λογικών πλαισίων, τα ECMs εμφανίζονται πολλά υποσχόμενα για την εκτίμηση SOC πραγματικού χρόνου [11]. Ωστόσο, λαμβάνοντας υπόψη ότι οι παράμετροι των ECMs θα άλλαζαν με τον χρόνο, θα ήταν ασύνετο να χρησιμοποιηθούν οι αμετάβλητες παράμετροι σε μεταβλητή θερμοκρασία, SOC ή επίπεδα γήρανσης [12]. Κατ' επέκταση, απαιτούνται σημαντικές προσπάθειες για την περιοδική επαναρύθμιση των παραμέτρων των ECMs ώστε να εξασφαλιστεί η επεκτασιμότητά τους. Επιπλέον, είναι κρίσιμο να αναπτυχθούν κατάλληλες στρατηγικές, όπως κάποιο εργαλείο από κοινού εκτίμησης παραμέτρων και SOC (joint parameter/SOC estimation tool), για την προσαρμοσμένη ρύθμιση των παραμέτρων των μοντέλων σε πρακτικές εφαρμογές. [3]

ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΚΑΘΟΔΗΓΟΥΜΕΝΗ ΑΠΟ ΔΕΔΟΜΕΝΑ – Η καθοδηγούμενη από δεδομένα προσέγγιση (data-driven approach), ελεύθερη από την παρακολούθηση οποιουδήποτε φυσικοχημικού μηχανισμού, έχει επίσης αξιοποιηθεί στην εκτίμηση του SOC των μπαταριών. Εξαιτίας των δυνητικών πλεονεκτημάτων όπως η ευελιξία της, η ιδιαίτερα μη-γραμμική αντιστοίχισή της και η ισχυρή προσαρμοστικότητά της, έχουν χρησιμοποιηθεί πολλές έξυπνες τεχνικές (π.χ. τεχνητά νευρωνικά δίκτυα [13], μηχανές διανυσμάτων υποστήριξης (Support Vector Machines ή SVMs) [14] κλπ.) στον τομέα του υπολογισμού του SOC. Ωστόσο, αυτές οι έρευνες είναι πολύ ευαίσθητες στις μεθόδους βελτιστοποίησης και στην ποιότητα των δεδομένων που υιοθετούνται. Επιπλέον, μπορεί να προκύψουν πιθανά προβλήματα over-fitting κατά την χρήση ακατάλληλων τρόπων εκπαίδευσης. [3]

2.1.2 Κατάσταση Ενέργειας (SOE)

Δεδομένου ότι οι χημείες των περισσότερων μπαταριών χαρακτηρίζουν μια έντονη πτώση τάσης κατά τη διαδικασία της εκφόρτισης, μια ίση διέλευση φορτίου σε διαφορετικά επίπεδα SOC αναμφίβολα παρέχει/απορροφά ασύμφωνα ποσά ενέργειας, ιδιαίτερα κατά την προσέγγιση και των δύο άκρων της τάσης, όπως φαίνεται και από την **Εικόνα 3**.

Από την άλλη πλευρά, υψηλοί ρυθμοί εκφόρτισης μπορούν να οδηγήσουν σε σημαντικές απώλειες εσωτερικής ενέργειας σε σχέση με την αμελητέα συρρίκνωση της χωρητικότητας [15]. Έτσι, ο πιο γενικός δείκτης του SOC μπορεί μόνο να αναπαραστήσει την εναπομείνουσα χωρητικότητα (Ah) (residual capacity) αντί για το διαθέσιμο ενεργειακό



Εικόνα 3: Μια ίση διέλευση φορτίου σε διαφορετικά επίπεδα SOC έχει ως αποτέλεσμα διαφορετικές ποσότητες ενέργειας. [3]

απόθεμα (Wh). Ως αποτέλεσμα, μια άλλη πρακτική έννοια, αυτή του SOE, έχει προταθεί και έχει χρησιμοποιηθεί για την αξιόπιστη πρόβλεψη των υπολειπόμενων χιλιομέτρων οδήγησης σε εφαρμογές με ηλεκτρικά οχήματα [16, 17]. Ο μαθηματικός ορισμός του SOE μπορεί να εκφραστεί ως εξής:

$$SOE(t) = SOE(t_0) + \frac{\int_{t_0}^t P(\tau) d\tau}{E_N} \quad (3)$$

όπου $SOE(t)$ και $SOE(t_0)$ είναι οι τιμές του SOE τη χρονική στιγμή t και την αρχική στιγμή t_0 αντίστοιχα, E_N το ονομαστικό ποσό ενέργειας και $P(\tau)$ η ισχύς τη χρονική στιγμή τ . Γενικά, οι τιμές αναφοράς στις ασκήσεις εκτίμησης SOE λαμβάνονται από καλά ελεγχόμενες μεθόδους ενσωμάτωσης ισχύος σε συνθήκες εργαστηρίου, οι οποίες, όμως, στην πράξη θα εισήγαγαν αναπόφευκτα ένα σταδιακά αποκλίνον αποτέλεσμα προκαλούμενο από συσσωρευτικά λάθη. Σε αντίθεση με αυτό, ένα τρόπος βασισμένος στην μετέπειτα επεξεργασία και ο οποίος ολοκληρώνει την καταγεγραμμένη ισχύ από την τελική στιγμή και προς τα πίσω στην αρχική στιγμή αποδεικνύεται πιο ορθολογικός [18, 19]. Έχουν επίσης διερευνηθεί μέσα φυσικής ανίχνευσης ως δείκτες κατάστασης μπαταρίας, π.χ. με μηχανική και μαγνητική ανίχνευση χαρακτηριστικών [20, 21]. Ωστόσο, αυτές οι τεχνικές απαιτούν σήματα που δεν είναι διαθέσιμα παρά μόνο εάν εγκατασταθούν πρόσθετοι ακριβοί αισθητήρες. [3]

2.1.3 Κατάσταση Υγείας (SOH)

Οι ηλεκτροχημικές μπαταρίες αναπόφευκτα υφίστανται σταδιακή επιδείνωση της επίδοσής τους κατά τη διάρκεια της λειτουργικής ζωής τους εξαιτίας παράπλευρων αντιδράσεων [22]. Αυτό οδηγεί στο λεγόμενο φαινόμενο γήρανσης το οποίο προκαλεί απώλειες του αποθεματικού του λιθίου και των ενεργών μετάλλων [23]. Το SOH χρησιμοποιείται συχνά για την ποσοτική εκτίμηση του επιπέδου της γήρανσης της μπαταρίας όσον αφορά την εξασθένηση στην χωρητικότητα και την εσωτερική αντίσταση [24]. Ο ορισμός του SOH μπορεί μαθηματικά να εκφραστεί ως:

$$SOH = \frac{C_a}{C_r} \times 100\% \quad (4)$$

ή

$$SOH = \frac{R_a - R_r}{R_r} \times 100\% \quad (5)$$

όπου C_a και C_r η πραγματική και η βαθμολογημένη (rated) τιμή της χωρητικότητας αντίστοιχα και R_a και R_r η πραγματική και η βαθμολογημένη εσωτερική αντίσταση αντίστοιχα.

Μια εξασθένηση χωρητικότητας κατά 20% και/ή μια αύξηση της εσωτερικής αντίστασης κατά 100% θεωρούνται συχνά ως το τέλος ζωής (End-of-Life ή EOL) της μπαταρίας στις εφαρμογές αυτοκίνησης. Το SOH της μπαταρίας είναι μια κρίσιμη κατάσταση που εκφράζει την ασφάλεια, την αξιοπιστία και την αποδοτικότητα των λειτουργιών των συστημάτων μπαταρίας [25]. Η έγκαιρη και ακριβής μέτρηση του SOH κατά την λειτουργία του οχήματος είναι κρίσιμη για τη διάγνωση σφαλμάτων της μπαταρίας, την εκτίμηση των SOC/SOP και τα χρονοδιαγράμματα συντήρησης/αντικατάστασης. **Προς το παρόν, ούτε η χωρητικότητα ούτε η εσωτερική αντίσταση είναι απευθείας μετρήσιμες με εμπορικά διαθέσιμους αισθητήρες.** Συνεπώς, το κλειδί στην απόκτηση του SOH είναι η ανάπτυξη αλγορίθμων εκτίμησης που επιτρέπουν την μέτρηση του SOH σε συνθήκες λειτουργίας (online) βασισμένη στην χαμηλού κόστους γκάμα αισθητήρων. Γι' αυτό το λόγο, γίνονται διαρκώς ουσιαστικές προσπάθειες με πλούσια βιβλιογραφία σε αυτό το ζήτημα.

Αξίζει να αναφερθεί ότι το SOH αναφοράς πρέπει να αποκτάται με ακρίβεια προκειμένου να εξετάζεται η επίδοση των προτεινόμενων αλγορίθμων εκτίμησης κάθε φορά. Συνήθως, οι δοκιμές γήρανσης μπαταρίας λαμβάνουν χώρα σε καλά ελεγχόμενο περιβάλλον και η πραγματική χωρητικότητα της μπαταρίας ή της εσωτερικής αντίστασης μετρώνται περιοδικά με όργανα υψηλής ακριβείας. Αυτά τα πειραματικά δεδομένα που συλλέγονται μπορούν στη συνέχεια να αποτελέσουν το SOH αναφοράς για την αξιολόγηση των αλγορίθμων εκτίμησης. [3]

2.1.4 Κατάσταση Ισχύος (SOP)

Αποτελώντας άλλον έναν παράγοντα-κλειδί στα BMSs, η **κατάσταση ισχύος** (State of Power ή SOP) συνήθως αναφέρεται στη διαθέσιμη ισχύ που η μπαταρία μπορεί να προσφέρει στο σύστημα μετάδοσης κίνησης του οχήματος ή να απορροφήσει από αυτό σε ένα παράθυρο χρόνου [26]. Το SOP της μπαταρίας μπορεί να θεωρηθεί ως ένα γινόμενο του ρεύματος κατωφλίου με την αντίστοιχη τάση κατά τη στιγμή που ποικίλοι περιορισμοί λειτουργίας πρέπει ρητώς να ληφθούν υπόψη και να τηρηθούν. Έστω ότι η ισχύς της μπαταρίας είναι θετική κατά την εκφόρτιση και αρνητική κατά την φόρτιση. Ένας γενικός ορισμός για το SOP μπορεί να εκφραστεί από το [27]:

$$\begin{cases} SOP^{charge}(t) = \max(P_{min}, V(t + \Delta t) \cdot I_{min}^{charge}) \\ SOP^{discharge}(t) = \max(P_{max}, V(t + \Delta t) \cdot I_{max}^{discharge}) \end{cases} \quad (6)$$

υποκείμενο σε ορισμένους περιορισμούς, όπου $SOP^{charge}(t)$ και $SOP^{discharge}(t)$ είναι το SOP φόρτισης και εκφόρτισης της μπαταρίας τη στιγμή t αντίστοιχα, P_{min} και P_{max} είναι το ελάχιστο και το μέγιστο όριο ισχύος της μπαταρίας, Δt ένα συγκεκριμένο χρονικό παράθυρο, $V(t + \Delta t)$ η τερματική τάση στο $(t + \Delta t)$ -οστό χρονικό δείγμα I_{min}^{charge} και $I_{max}^{discharge}$. Πρέπει επίσης να γνωρίζει κανείς ότι τα I_{min}^{charge} και $I_{max}^{discharge}$ πρέπει να ληφθούν υπό συνθήκες που δεν παραβιάζονται ορισμένοι περιορισμοί. Αυτοί οι περιορισμοί περιλαμβάνουν γενικά την τάση, το ρεύμα, το SOC και ακόμη και τη θερμοκρασία της μπαταρίας [28]. Επιπλέον, οι βασικές μικροσκοπικές μεταβλητές μπορούν να περιοριστούν εάν χρησιμοποιηθούν κάποια μοντέλα που βασίζονται στη φυσική.

Στις συνθήκες προσομοίωσης, οι τιμές αναφοράς του SOP λαμβάνονται γενικά μέσω ενός μοντέλου μπαταρίας υψηλής πιστότητας που λαμβάνει υπόψη διάφορους περιορισμούς [29]. Σε συνθήκες εργαστηρίου, το SOP της μπαταρίας μπορεί να προσεγγιστεί με καλά σχεδιασμένες δοκιμές παλμού που λαμβάνουν υπόψη ορισμένες τροποποιήσεις του εφαρμοσμένου ρυθμού ρεύματος, του χρόνου διάρκειας, κ.λπ. [26]. Για εφαρμογές EV, καθώς η διαχείριση της ροής ενέργειας, π.χ. όσον αφορά τον διαχωρισμό ισχύος και τη φόρτιση της μπαταρίας κατά την αναγεννητική πέδηση, σχετίζεται σε μεγάλο βαθμό με τη διαθέσιμη ισχύ της μπαταρίας, η ακριβής εκτίμηση SOP μπορεί να αξιοποιηθεί όχι μόνο για τη ρύθμιση της ροής ισχύος του οχήματος με μεγαλύτερη ακρίβεια, αλλά και τη βελτιστοποίηση της συνολικής απόδοσης του συστήματος μετάδοσης κίνησης [30]. Επιπλέον, για την ίδια την μπαταρία, η γνώση του μελλοντικού SOP μπορεί να κάνει τη γρήγορη φόρτιση πιο εφικτή και να ωφελήσει την απόδοση της μπαταρίας, βελτιώνοντας περαιτέρω τη διάρκεια ζωής της ανάλογα. Για το σκοπό αυτό, είναι ζωτικής σημασίας να αναπτυχθεί μια ακριβής και αποτελεσματική μέθοδος

εκτίμησης SOP που να λαμβάνει υπόψη την εξαιρετικά μη γραμμική δυναμική της μπαταρίας και διάφορους βασικούς περιορισμούς. [3]

2.2 Μηχανική Μάθηση για Προβλέψεις SOC

Όπως φάνηκε και από την προηγούμενη ενότητα, κάθε φυσικό μοντέλο πρόβλεψης συνοδεύεται και από τους δικούς του περιορισμούς και δυσκολίες. Γι' αυτό το λόγο και έχει αξία να ερευνησουμε κατά πόσο μπορούμε να παράγουμε αυτές τις προβλέψεις μέσα από μεθόδους που βασίζονται σε δεδομένα (data-driven approach). Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζουμε καταρχάς τους τρόπους με τους οποίους μπορεί κάποιος να αποκτήσει τέτοιου είδους δεδομένα μπαταριών και στη συνέχεια παραθέτουμε προηγούμενες έρευνες που κατάφεραν να επιτύχουν αξιοσημείωτες προβλέψεις χρησιμοποιώντας μηχανική μάθηση.

2.2.1 Συλλογή Δεδομένων

Προκειμένου να αναπτύξουμε τα data-based μοντέλα μας, χρειαζόμαστε τα ίδια τα δεδομένα. Η πειραματική διαδικασία μέσω της οποίας λαμβάνονται αυτά τα δεδομένα είναι ιδιαίτερα σημαντική και επηρεάζει το τελικό αποτέλεσμα. Ακόμα και αν ο ερευνητής δεν διεξάγει ο ίδιος τα πειράματα αλλά επιλέξει να εργαστεί με κάποιο έτοιμο και διαθέσιμο σύνολο δεδομένων μπαταριών, είναι σημαντικό να γνωρίζει επακριβώς τις συνθήκες κάτω από τις οποίες αυτό δημιουργήθηκε. Σε αυτή την ενότητα θα κάνουμε μια επισκόπηση των διαφόρων μεθόδων συλλογής δεδομένων για μπαταρίες, ενημερώνοντας έτσι τον αναγνώστη για τις εναλλακτικές που έχει στην αναπαραγωγή της προτεινόμενης προσέγγισης αυτής της εργασίας.

Οι δύο βασικοί τρόποι με τους οποίους μπορεί κάποιος να συλλέξει δεδομένα (data collection) είναι με Κυκλιστές (Cyclers) ή το BMS.

Δεδομένα από Κυκλιστές

Οι κυκλιστές μπαταριών (battery cyclers) είναι εξειδικευμένα όργανα διεξαγωγής ελέγχων σε μπαταρίες μέσα από την επαναλαμβανόμενη φόρτιση και εκφόρτισή τους βάση συγκεκριμένων πρωτοκόλλων φόρτισης. Καλύπτουν ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών ελέγχων όπως γενική ηλεκτροχημεία, έλεγχος κύκλου ζωής, μέτρηση κουλόμπ υψηλής ακριβείας καθώς και ηλεκτροχημική φασματογραφία εσωτερικής αντίστασης (Electrochemical Impedance Spectroscopy ή EIS). Συνοδεύονται, επίσης και από το απαραίτητο λογισμικό για την πλήρη παρακολούθηση της διαδικασίας ελέγχου των μπαταριών από το σχεδιασμό του ελέγχου μέχρι την εξαγωγή και την ανάλυση των μετρήσεων.¹

¹ <https://youtu.be/zJ9iG84G14Q>

Διακρίνουμε τους εξής τύπους δεδομένων συλλογής από cyclers:

ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΓΗΡΑΝΣΗΣ ΚΥΚΛΟΥ – Τα δεδομένα γήρανσης κύκλου (cycle ageing data) παράγονται από cyclers που παρακολουθούν την μπαταρία από την αρχή μέχρι το τέλος της ζωής της, γι' αυτό και απαιτούν σημαντική επένδυση χρόνου και πόρων σε ένα βάθος πολλών μηνών ή και χρόνων. Τα πειράματα διεξάγονται για να ερευνηθεί η επίδραση ενδοκυκλικών παραγόντων (ρεύμα φόρτισης, ρεύμα εκφόρτισης, θερμοκρασία και DOD) στην κατακράτηση χωρητικότητας και (μερικές φορές) την αύξηση της εσωτερικής αντίστασης των μπαταριών. Τυπικά, τα datasets γήρανσης κύκλου περιλαμβάνουν μετρήσεις του ρεύματος, της τάσης και της θερμοκρασίας εντός κύκλου και μετρήσεις της χωρητικότητας και εσωτερικής αντίστασης ή σύνθετης αντίστασης ανά κύκλο. Κατόπιν, μπορούν να αναπτυχθούν μοντέλα σύμφωνα με τα καταγεγραμμένα δεδομένα κύκλισης (cycling dataset) που, μεταξύ άλλων, προβλέπουν τη μελλοντική κατακράτηση χωρητικότητας, την αύξηση της εσωτερικής αντίστασης και άλλες μετρικές της υγείας της μπαταρίας. [31]

ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΚΥΚΛΟΥ ΟΔΗΓΗΣΗΣ - Τα δεδομένα κύκλου οδήγησης (drive cycle data) παράγονται από cyclers που μιμούνται την συμπεριφορά ενός ηλεκτρικού οχήματος.

Για την λειτουργία ενός αυτοκινούμενου οχήματος απαιτείται ενέργεια. Με μία συμβατική μηχανή εσωτερικής καύσης το όχημα κινείται με την καύση ορυκτών καυσίμων που μετατρέπονται σε μηχανική ενέργεια. Ωστόσο, με την παγκόσμια ανησυχία αναφορικά με τα επίπεδα αερίων του θερμοκηπίου κυριαρχεί μια έντονη ώθηση της βιομηχανίας της αυτοκίνησης στη μείωση των εκπομπών άνθρακα. Για αυτόν τον λόγο, είναι απαραίτητο να υπάρχουν τυποποιημένες διαδικασίες δοκιμών που να συλλαμβάνουν τις μεταβαλλόμενες απαιτήσεις ισχύος κατά την οδήγηση, ώστε να καθίσταται δυνατή η σύγκριση της σχετικής αποδοτικότητας και επίδοσης μεταξύ των μηχανών. Αυτές οι πρότυπες διαδικασίες ελέγχου αναφέρονται ως κύκλοι οδήγησης (driving cycles).

Ένας κύκλος οδήγησης είναι το χρονοδιάγραμμα μιας τυποποιημένης δυναμικής εμπειρίας οδήγησης ενός οχήματος κωδικοποιημένης μέσω ενός πίνακα ταχύτητας σε συνάρτηση με το χρόνο. Η ταχύτητα και η επιτάχυνση προγραμματίζονται εκ των προτέρων για κάθε χρονικό βήμα και συνεπώς η απαιτούμενη μηχανική ισχύς είναι συνάρτηση του χρόνου. Το ολοκλήρωμα της μηχανικής ισχύος πάνω στη διάρκεια του χρονοδιαγράμματος οδήγησης αναπαριστά τη συνολική ενέργεια που απαιτήθηκε για τον συγκεκριμένο κύκλο οδήγησης. Για τα ηλεκτρικά οχήματα, η απαιτούμενη μηχανική ενέργεια υπολογίζεται από το BMS. Τα dataset που συγκεντρώνονται κάνοντας κύκλιση (cycling) μπαταριών σύμφωνα με τα χρονοδιαγράμματα οδήγησης μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη σύγκριση της αποδοτικότητας των EVs σε σχέση με τα παραδοσιακά οχήματα και να δοκιμάσει την επίδοση των εξαγόμενων μοντέλων μπαταριών και των αλγορίθμων εκτίμησης SOC υπό ρεαλιστικές συνθήκες.

Οι παγκοσμίως αναγνωρισμένοι πίνακες κύκλων οδήγησης μπορούν να διαιρεθούν ως εξής: Ευρωπαϊκοί κύκλοι οδήγησης, Αμερικανικοί κύκλοι οδήγησης και Ασιατικοί (Ιαπωνικοί και Κινέζικοι) κύκλοι οδήγησης. Μερικά παραδείγματα για το τις συνθήκες οδήγησης που μπορούν να περιγράψουν οι παραπάνω πίνακες, είναι τα εξής: οδήγηση σε πόλη με χαμηλή επιβάρυνση, οδήγηση επιθετική με υψηλά φορτία μηχανής, αστική με μοτοιλιάρισμα, αστική ελευθέρως ροής, δευτερεύοντος οδικού δικτύου, κύριοι δρόμοι και αυτοκινητόδρομοι, οδήγηση κάτω των 60mph σε αυτοκινητόδρομο κ.α. [31]

ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΗΜΕΡΟΛΟΓΙΑΚΗΣ ΓΗΡΑΝΣΗΣ – Η ημερολογιακή γήρανση (calendar ageing data) «περιλαμβάνει όλες τις διαδικασίες γήρανσης που οδηγούν σε φθορά μιας κυψέλης μπαταρίας ανεξάρτητα από τον κύκλο φόρτισης-εκφόρτισης» [32]. Τέτοιος τύπος γήρανσης είναι πιο έντονος σε εφαρμογές όπου οι περίοδοι αδράνειας είναι μεγαλύτεροι από τις περιόδους λειτουργία, όπως συμβαίνει στα ηλεκτρικά οχήματα. Υποστηρίζεται ότι η ημερολογιακή γήρανση μπορεί επίσης να παίζει ρόλο σε μελέτες γήρανσης κύκλου όπου οι διάρκειες του κύκλου και οι τρέχοντες ρυθμοί είναι χαμηλοί [33]. [31]

ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΓΙΑ ΕΞΕΙΔΙΚΕΥΜΕΝΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ – Πέρα από τα παραδοσιακές μεθόδους γήρανσης κύκλου φόρτισης, κύκλου οδήγησης και ημερολογιακής γήρανσης, υπάρχουν μερικά δημόσια datasets που περιέχουν δεδομένα κύκλων μπαταρίας από εξειδικευμένες εφαρμογές. Τέτοιες μπορούν να αφορούν μπαταρίες για ηλεκτρικά μη επανδρωμένα αεροσκάφη, δορυφόρους ή στατικές αποθήκες ενέργειας. [31]

ΣΥΝΘΕΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ - Οι προσεγγίσεις που βασίζονται σε δεδομένα απαιτούν τα ίδια τα δεδομένα. Συνεπώς, η έλλειψη δεδομένων αποτελεί σημαντικό εμπόδιο στη χρήση τους. Η προφανής λύση της συλλογής περισσότερων δεδομένα, που καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα συνθηκών λειτουργίας είναι ακριβή και χρονοβόρα. Μια άλλη προσέγγιση είναι η χρήση των διαθέσιμων δεδομένων για τη δημιουργία περισσότερων δεδομένων. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί με τη επαύξηση των δεδομένων (data augmentation) ή με τη δημιουργία τεχνητών δεδομένων. Τα συνθετικά δεδομένα μπορούν να βελτιώσουν τα υπάρχοντα σύνολα δεδομένων βελτιώνοντας την επίδοση των εκπαιδευμένων μοντέλων και επιτρέποντας την ενσωμάτωση συνθηκών κύκλισης που δεν περιλαμβάνονται στα πειραματικά δεδομένα. Αυτό το βήμα της παρεμβολής δεδομένων μπορεί να είναι ιδιαίτερα σημαντικό για προσεγγίσεις που βασίζονται σε δεδομένα επιτρέποντας την πρόβλεψη πειραματικών δεδομένων που βρίσκονται εκτός της γνωστής κατανομής. [31]

Δεδομένα από Σύστημα Διαχείρισης Μπαταρίας

Σύστημα διαχείρισης μπαταρίας (Battery Management System ή BMS) είναι κάθε ηλεκτρονικό σύστημα που διαχειρίζεται μια επαναφορτιζόμενη μπαταρία (κυψέλη ή πακέτο μπαταριών), όπως η προστασία της μπαταρίας από τη λειτουργία εκτός της ασφαλούς περιοχής λειτουργίας

της, η παρακολούθηση της κατάστασής της, ο υπολογισμός δευτερευόντων δεδομένων, η αναφορά αυτών των δεδομένων, ελέγχοντας το περιβάλλον τους, επαληθευόντάς τα ή/και εξισορροπώντας τα [34]. Το BMS ελέγχει επίσης την επαναφόρτιση της μπαταρίας ανακατευθύνοντας την ανακτώμενη ενέργεια (δηλαδή από την αναγεννητική πέδηση) πίσω στην μπαταρία. Τα δεδομένα που παρακολουθεί/λαμβάνει προέρχονται και από τα τρία συστατικά επίπεδα της μπαταρίας, δηλ. το πακέτο μπαταριών (battery pack) που συνήθως αποτελείται από έναν αριθμό μονάδων μπαταρίας (battery modules), καθεμία αποτελούμενη από έναν αριθμό κυψελών (battery cells).

Ένα BMS μπορεί να παρακολουθεί την κατάσταση της μπαταρίας όπως αντιπροσωπεύεται από διάφορα στοιχεία, όπως:

- **Τάση:** συνολική τάση, τάσεις μεμονωμένων κυψελών ή τάση περιοδικών συνδέσεων
- **Θερμοκρασία:** μέση θερμοκρασία, θερμοκρασία εισόδου ψυκτικού, θερμοκρασία εξόδου ψυκτικού ή θερμοκρασίες μεμονωμένων κυψελών
- **Ροή ψυκτικού:** για μπαταρίες που ψύχονται με υγρό
- **Ρεύμα:** ρεύμα εισόδου ή εξόδου από την μπαταρία
- **Υγεία μεμονωμένων κυττάρων**
- **Κατάσταση ισορροπίας των κυττάρων**

Φυσικά, πέραν αυτών το BMS αναλαμβάνει και τον υπολογισμό επιπλέον μεγεθών, όπως τα SOC, SOE κλπ. που περιγράφηκαν προηγουμένως, σύμφωνα πάντα με κάποιο επιλεγμένο μοντέλο.²

Έχοντας, επομένως, κανείς όλα αυτά υπόψη για τα BMSs, μπορεί πράγματι να λάβει δεδομένα από τέτοια συστήματα προκειμένου να προσομοιώσει ρεαλιστικές συνθήκες φόρτισης και εκφόρτισης. Όσο και αν οι cyclers προσπαθούν να μιμηθούν την χρήση της μπαταρίας από τον τελικό καταναλωτή δεν παύουν να αποτελούν ένα τεχνητό περιβάλλον δημιουργίας δεδομένων. Εν τέλει, μόνο τα δεδομένα από ένα εν χρήση BMS μπορούν να αντικατοπτρίσουν τις αληθινές συνθήκες λειτουργίας

2.2.2 Αλγόριθμοι Μηχανικής Μάθησης

Στην παρούσα διπλωματική εκτιμούμε το SOC μπαταριών αναπτύσσοντας μοντέλα βασισμένα σε νευρωνικά δίκτυα. Η μέθοδος νευρωνικού δικτύου (NN) έχει μια εξαιρετική ικανότητα υλοποίησης ενός μη γραμμικού μετασχηματισμού για την αναπαράσταση ενός σύνθετου μη γραμμικού μοντέλου. [35] Οι Dang et al. [36] πρότειναν μια μέθοδο εκτίμησης του SOC με βάση το OCV και το μοντέλο μπαταρίας διπλής σύντηξης NN. Το γραμμικό μοντέλο μπαταρίας NN χρησιμοποιήθηκε για τον προσδιορισμό των παραμέτρων του πρώτης τάξης ή δεύτερης τάξης ηλεκτροχημικού μοντέλου και το δεύτερο NN οπισθοδρόμησης (Back-

² https://en.wikipedia.org/wiki/Battery_management_system

Propagation NN ή BPNN) χρησιμοποιήθηκε για να συλλάβει τη σχέση μεταξύ OCV και SOC. Οι Sun et al. [37] ανέπτυξαν έναν αλγόριθμο ποσοτικοποίησης αβεβαιότητας με βάση το νευρωνικό δίκτυο συνάρτησης ακτινικής βάσης (Radial Basis Function Neural Network ή RBFNN) για την κατασκευή προσεγγιστικού μοντέλου επιφάνειας απόκρισης (Response Surface Approximate Model ή RSAM) της συνάρτησης μεροληψίας μοντέλου για την εκτίμηση του SOC μπαταρίας πολλαπλών κυψελών. Οι Tong et al. [38] καθιέρωσαν ένα μοντέλο NN ταξινόμησης φορτίου για εκτίμηση του SOC. Η δομή του μοντέλου και η επεξεργασία εκ των υστέρων βελτιώνουν την καταστολή του overfitting. Οι Chemali et al. [39] ανέπτυξαν μια εκτίμηση SOC για μπαταρίες Li-ion βασισμένη σε ένα μακρύ επαναλαμβανόμενο νευρωνικό δίκτυο βραχυπρόθεσμης μνήμης (Long Short-Term Memory Recurrent Neural Network LSTM-RNN). Μια στρατηγική εκτίμησης SOC που βασίζεται στο BPNN εισήχθη στο [40]. Επιπλέον, χρησιμοποιήθηκαν η κύρια ανάλυση συνιστωσών (Principal Component Analysis ή PCA) και η βελτιστοποίηση σμήνους σωματιδίων (Particle Swarm Optimization ή PSO) για τη βελτίωση της ακρίβειας και της ευρωστίας της εκτίμησης. Μια νέα μέθοδος βασισμένη σε βαθιά τροφοδοτούμενα NN χρησιμοποιήθηκε για την εκτίμηση SOC μπαταρίας στο [2] και οι μετρήσεις της μπαταρίας μπορούν να αντιστοιχηθούν απευθείας στο SOC. Οι Chen et al. [13] πρότειναν έναν μη γραμμικό παρατηρητή βασισμένο σε RBFNN χρησιμοποιώντας ένα συμπεριληπτικό μοντέλο ισοδύναμου κυκλώματος για την εκτίμηση SOC. Ένας βελτιωμένος μη γραμμικός αυτοπαλινδρομικός με εξωγενή είσοδο (NARX) αλγόριθμος βασισμένος σε NN (NARXNN) αναπτύχθηκε για την εκτίμηση του SOC των μπαταριών στο [41]. Ο αλγόριθμος αναζήτησης φωτισμού (Lighting Search Algorithm ή LSA) χρησιμοποιήθηκε για την εύρεση της καλύτερης τιμής των καθυστερήσεων εισόδου και ανάδρασης και των νευρώνων των κρυμμένων επιπέδων (hidden layers). Οι Xia et al. [42] πρότειναν μοντέλο NN κυματιδίου (Wavelet NN ή WNN) πολλαπλών κρυφών επιπέδων βελτιστοποιημένο από με τον αλγόριθμο Levenberg-Marquardt (L-M). Ο αλγόριθμος PSO αξιοποιήθηκε στην βελτιστοποιημένη του WNN για την εκτίμηση του SOC. Οι Yang et al. [43] ανέπτυξαν ένα RNN με περιφραγμένες επαναλαμβανόμενες μονάδες για την εκτίμηση του SOC της μπαταρίας. Ένα στοιβαγμένο δίκτυο LSTM προτάθηκε στο [44] για να μοντελοποιήσει τη δυναμική των μπαταριών φωσφορικού σιδήρου λιθίου και να εκτιμήσει το SOC. Η προτεινόμενη μέθοδος παρουσίασε γρήγορη σύγκλιση στο αληθινό SOC ακόμα κι όταν τα αρχικά SOC ήταν ανακριβή.

2.3 Αυτοματοποιημένη Μηχανική Μάθηση

Τα τελευταία χρόνια, η βαθιά μάθηση έχει εφαρμοστεί σε ποικίλα ερευνητικά πεδία και έχει χρησιμοποιηθεί για να λύσει πολλά απαιτητικά προβλήματα του AI, σε περιοχές όπως η ταξινόμηση εικόνας [45, 46], η αναγνώριση αντικειμένου [47] και η μοντελοποίηση γλώσσας

[48, 49]. Ειδικότερα, από τότε που το AlexNet [45] ξεπέρασε όλες τις άλλες παραδοσιακές χειροκίνητες μεθόδους το 2012, προτείνονται ολοένα και περισσότερο περίπλοκα και βαθιά νευρωνικά δίκτυα. **Το πρόβλημα, ωστόσο, είναι ότι όλα αυτά τα μοντέλα σχεδιάζονται από τους ειδικούς χειροκίνητα μέσα από μια διαδικασία δοκιμής και λάθους, το οποίο σημαίνει ότι ακόμα και οι ειδικοί χρειάζονται σημαντική ποσότητα πόρων και χρόνου για να δημιουργήσουν μοντέλα αξιολόγων επιδόσεων.**

Προκειμένου, λοιπόν, να μειωθούν αυτά τα υπέρογκα κόστη ανάπτυξης, μια νέα ιδέα έχει έρθει στο προσκήνιο, αυτή της αυτοματοποίησης ολόκληρου του pipeline της μηχανικής μάθησης (ML), δηλ. η Αυτοματοποιημένη Μηχανική Μάθηση (AutoML). Για παράδειγμα, σύμφωνα με το [50] η AutoML έχει σχεδιαστεί για να μειώσει την απαίτηση για εξειδικευμένους data scientists και ταυτόχρονα να δώσει την δυνατότητα σε ειδικούς του κλάδου να αναπτύξουν αυτόματα εφαρμογές ML χωρίς ιδιαίτερη εμπάθυνση στο αντικείμενο. Ένα πλήρες σύστημα AutoML μπορεί να κάνει δυναμικά συνδυασμό πολλών διαφορετικών τεχνικών προκειμένου να δημιουργήσει ένα εύχρηστο από άκρο σε άκρο ML pipeline. Πολλές εταιρίες AI έχουν δημιουργήσει και μοιραστεί δημόσια τέτοια συστήματα (π.χ. το Cloud AutoML της Google) για να βοηθήσουν ανθρώπους με λίγη ή και καθόλου γνώση ML να αναπτύξουν custom μοντέλα υψηλής ποιότητας.

Η καρδιά της AutoML είναι η Αναζήτηση Αρχιτεκτονικής του Νευρωνικού (Neural Architecture Search ή NAS). Το NAS αποτελείται από τρεις σημαντικές συνιστώσες: το χώρο αναζήτησης αρχιτεκτονικών του νευρωνικού, μεθόδους βελτιστοποίησης αρχιτεκτονικής και μεθόδους αξιολόγησης (evaluation) του μοντέλου. Οι Zoph et al. [51] ήταν οι πρώτοι που πρότειναν το NAS, όπου ένα επαναληπτικό δίκτυο εκπαιδεύεται με ενισχυτική μάθηση να αναζητήσει αυτόματα την αρχιτεκτονική με την καλύτερη επίδοση. Από τη στιγμή που ανακάλυψαν ένα νευρωνικό δίκτυο με αποτελέσματα συγκρίσιμα μοντέλων που σχεδιάστηκαν από ανθρώπους, έχει υπάρξει μια έκρηξη ερευνητικού ενδιαφέροντος για την AutoML, εστιάζοντας κυρίως στο NAS. Ουσιαστικά, το NAS στοχεύει στην αναζήτηση μίας εύρωστης αρχιτεκτονικής νευρωνικού καλής επίδοσης επιλέγοντας και συνδυάζοντας βασικές λειτουργίες από έναν προκαθορισμένο χώρο αναζήτησης.

Το NAS pipeline διακρίνεται από τις επιλογές σε τρεις παραμέτρους: το χώρο αναζήτησης, τη μέθοδο βελτιστοποίησης αρχιτεκτονικής και τη μέθοδο αξιολόγησης του μοντέλου.

ΧΩΡΟΣ ΑΝΑΖΗΤΗΣΗΣ: Καθορίζει την αρχή σχεδίασης της αρχιτεκτονικής του νευρωνικού. Διαφορετικά σενάρια απαιτούν διαφορετικούς χώρους αναζήτησης. Υπάρχουν τέσσερις τύποι συχνά χρησιμοποιούμενων χώρων αναζήτησης: μονολιθικά δομημένος, βασισμένος σε δομικές μονάδες, ιεραρχικός και βασισμένος σε μορφισμό.

ΜΕΘΟΔΟΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗΣ: Έχοντας προσδιορίσει τον χώρο αναζήτησης, η μέθοδος βελτιστοποίησης αρχιτεκτονικής καθορίζει πώς θα καθοδηγηθεί η αναζήτηση, ώστε να βρεθεί αποδοτικά αρχιτεκτονική μοντέλου με υψηλή επίδοση.

ΜΕΘΟΔΟΣ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ: Έχοντας δημιουργήσει ένα μοντέλο, πρέπει να αξιολογηθεί η επίδοσή του. Η απλούστερη προσέγγιση για να γίνει αυτό, είναι να εκπαιδευτεί το μοντέλο μέχρι να συγκλίνει στο training set και μετά να εκτιμηθεί η επίδοση του μοντέλου πάνω στο validation set. Ωστόσο, αυτό είναι κοστοβόρο σε χρόνο και ενέργεια. Κάποιες προχωρημένες μέθοδοι μπορούν να επιταχύνουν την διαδικασία της αξιολόγησης αλλά χάνουν σε αξιοπιστία. Συνεπώς, η εξισορρόπηση της αποδοτικότητας σε σχέση με την αποτελεσματικότητα μιας αξιολόγησης είναι ένα πρόβλημα που χρήζει μελέτης. [52]

2.3.1 Χώρος αναζήτησης

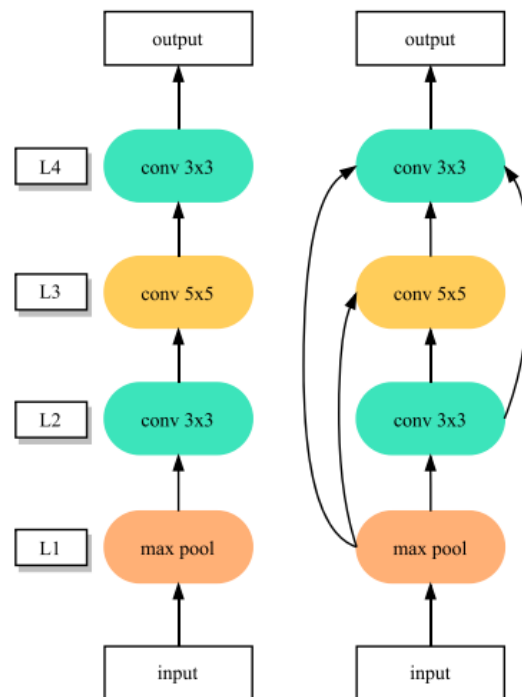
Μια αρχιτεκτονική νευρωνικού μπορεί να αναπαρασταθεί ως ένας κατευθυνόμενος ακυκλικός γράφος (Directed Acyclic Graph ή DAG) που περιλαμβάνει B διατεταγμένους κόμβους. Στο DAG, κάθε κόμβος και κάθε κατευθυνόμενη ακμή υποδεικνύουν έναν τανυστή χαρακτηριστικών και μια πράξη αντίστοιχα. Η Εξίσωση (7) παρουσιάζει τον τύπο υπολογισμού οποιουδήποτε κόμβου $Z_k, k \in \{1, 2, \dots, B\}$.

$$Z_k = \sum_{i=1}^{N_k} o_i(I_i), o_i \in O$$

(7)

όπου N_k ο έσω βαθμός του κόμβου Z_k , I_i και o_i ο τανυστής εισόδου και η σχετική πράξη του, αντίστοιχα, και O ένα σύνολο υποψήφιων πράξεων, όπως συνέλιξη, pooling, συναρτήσεις ενεργοποίησης, παράβλεψη σύνδεσης, συνένωση και προσθήκη. Η επιλογή και ο συνδυασμός αυτών των πράξεων ποικίλλει ανάλογα με το σχεδιασμό του χώρου αναζήτησης. Με άλλα λόγια, ο χώρος αναζήτησης ορίζει τα δομικά στιγμιότυπα που μπορούν να εξερευνηθούν οι μέθοδοι βελτιστοποίησης αρχιτεκτονικής. Επομένως, ο σχεδιασμός ενός καλού χώρου αναζήτησης είναι ζωτικής σημασίας αλλά και ένα απαιτητικό πρόβλημα. Σε γενικές γραμμές, ένας καλός χώρος αναζήτησης αναμένεται να αποκλείει την ανθρώπινη προκατάληψη και να είναι αρκετά ευέλικτος ώστε να καλύπτει μια ευρύτερη ποικιλία αρχιτεκτονικών μοντέλων. Με βάση τις υπάρχουσες μελέτες NAS, αναλύουμε παρακάτω τους πιο ευρέως χρησιμοποιούμενους χώρους αναζήτησης. [52]

ΜΟΝΟΛΟΘΙΚΑ ΔΟΜΗΜΕΝΟΣ ΧΩΡΟΣ ΑΝΑΖΗΤΗΣΗΣ – Ο χώρος των μονολιθικά δομημένων νευρωνικών δικτύων (entire-structured search space) [51, 53] είναι ένας από τους πιο προφανείς και ξεκάθαρους χώρους αναζήτησης. Η **Εικόνα 4** παρουσιάζει δύο απλουστευμένα παραδείγματα μονολιθικά δομημένων μοντέλων, τα οποία κατασκευάζονται με στοιβαξη προκαθορισμένου αριθμού κόμβων, όπου κάθε κόμβος αντιπροσωπεύει ένα επίπεδο και εκτελεί μια καθορισμένη λειτουργία. Το αριστερό μοντέλο που φαίνεται στην **Εικόνα 4** δείχνει την απλούστερη δομή, ενώ το δεξιό μοντέλο είναι σχετικά πιο πολύπλοκο, καθώς επιτρέπει αυθαίρετες συνδέσεις παράλειψης [46] μεταξύ των διατεταγμένων κόμβων. Αυτές οι συνδέσεις έχουν αποδειχθεί αποτελεσματικές στην πράξη [51]. Αν και μια μονολιθική δομή είναι εύκολο να εφαρμοστεί, έχει αρκετά μειονεκτήματα. Για παράδειγμα, είναι ευρέως αποδεκτό ότι όσο πιο βαθύ είναι το μοντέλο, τόσο καλύτερη είναι η ικανότητα γενίκευσής του. Ωστόσο, η αναζήτηση για ένα τόσο βαθύ δίκτυο είναι επαχθής και υπολογιστικά δαπανηρή. Επιπλέον, η παραγόμενη αρχιτεκτονική στερείται δυνατότητα μεταφοράς, δηλαδή ένα μοντέλο που δημιουργείται σε ένα μικρό σύνολο δεδομένων μπορεί να μην ταιριάζει σε ένα μεγαλύτερο σύνολο δεδομένων, γεγονός που καθιστά αναγκαία τη δημιουργία ενός νέου μοντέλου για μεγαλύτερο σύνολο δεδομένων.

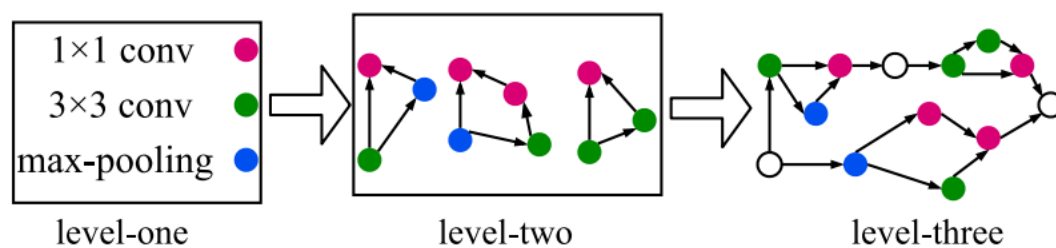


Εικόνα 4: Δύο απλουστευμένα παραδείγματα μονολιθικά δομημένων νευρωνικών αρχιτεκτονικών. Το κάθε επίπεδο καθορίζεται με διαφορετική λειτουργία, όπως λειτουργίες συνέλιξης και μέγιστης συγκέντρωσης. Η ακμή υποδεικνύει τη ροή της πληροφορίας. Η λειτουργία της σύνδεσης παράκαμψης που χρησιμοποιείται στο δεξί παράδειγμα μπορεί να βοηθήσει στην εξερεύνηση βαθύτερων και πιο περίπλοκων αρχιτεκτονικών νευρωνικών. [52]

ΧΩΡΟΣ ΑΝΑΖΗΤΗΣΗΣ ΒΑΣΙΣΜΕΝΟΣ ΣΕ ΔΟΜΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ – Προκειμένου το παραγόμενο μοντέλο να μπορεί να μεταφερθεί, έχει προταθεί ο **βασισμένος σε δομικές μονάδες χώρος αναζήτησης (cell-based search space)** [54, 55, 53] στον οποίο η αρχιτεκτονική του νευρωνικού αποτελείται από έναν σταθερό αριθμό επαναλαμβανόμενων δομικών μονάδων. Αυτή η σχεδιαστική προσέγγιση βασίζεται στην παρατήρηση ότι πολλά μοντέλα με καλές επιδόσεις που έχουν σχεδιαστεί από τον άνθρωπο [46, 56] κατασκευάζονται ακριβώς με τη στοιβαξη ενός σταθερού αριθμού δομικών μονάδων. Για παράδειγμα, η οικογένεια ResNet δημιουργεί πολλές παραλλαγές, όπως η ResNet50, η ResNet101 και η ResNet152 με τη στοιβαξη πολλών μονάδων “Bottleneck” [46]. Συνήθως, η επιλογή της

δομικής μονάδας γίνεται χειροκίνητα, μια κοινή πρακτική του σχεδιασμού νευρωνικών δικτύων. Σε αντίθεση με τον μονολιθικά δομημένο χώρο αναζήτησης, το μοντέλο με χώρο αναζήτησης βασισμένο σε δομικές μονάδες μπορεί να επεκταθεί για να σχηματίσει ένα μεγαλύτερο μοντέλο απλά προσθέτοντας περισσότερες μονάδες χωρίς να αναζητηθεί εκ νέου η δομή της μονάδας. Εν τω μεταξύ, πολλές προσεγγίσεις [57, 53, 54] έχουν αποδείξει πειραματικά τη δυνατότητα μεταφοράς του παραγόμενου μοντέλου σε τέτοιους χώρους αναζήτησης, όπως το μοντέλο που βασίζεται στο CIFAR-10, που μπορεί επίσης να επιτύχει συγκρίσιμα αποτελέσματα με αυτά που επιτυγχάνονται από ανθρωπίνως σχεδιασμένα μοντέλα τελευταίας τεχνολογίας στο ImageNet.

ΙΕΡΑΡΧΙΚΟΣ ΧΩΡΟΣ ΑΝΑΖΗΤΗΣΗΣ – Ο βασισμένος σε δομικές μονάδες χώρος αναζήτησης επιτρέπει τη δυνατότητα μεταφοράς του παραγόμενου μοντέλου και οι περισσότερες από τις μεθόδους που βασίζονται σε μονάδες [53, 54, 58, 55, 59, 60] ακολουθούν μια ιεραρχία δύο επιπέδων: το εσωτερικό είναι το επίπεδο μονάδας, το οποίο επιλέγει την πράξη και τη σύνδεση για κάθε κόμβο στη μονάδα, και το εξωτερικό είναι το επίπεδο δικτύου, το οποίο ελέγχει τις μεταβολές χωρικών αποφάσεων. Ωστόσο, αυτές οι προσεγγίσεις επικεντρώνονται στο επίπεδο μονάδας και αγνοούν το επίπεδο δικτύου. Έτσι, με στόχο την από κοινού μάθηση του κατάλληλου συνδυασμού επαναχρησιμοποιούμενων δομών μονάδας και δικτύου, οι Liu et al. [61] όρισαν μια γενική διατύπωση για μια δομή σε επίπεδο δικτύου, με την οποία πολλά υπάρχοντα καλά σχέδια δικτύων μπορούν να αναπαραχθούν. Πρόκειται για τον **ιεραρχικό χώρο αναζήτησης**.



Εικόνα 5: Παράδειγμα αναπαράστασης ιεραρχικής αρχιτεκτονικής τριών επιπέδων. Οι πρωταρχικές λειτουργίες επιπέδου ένα συναρμολογούνται σε κελιά επιπέδου δύο. Τα κελιά επιπέδου δύο θεωρούνται ως αρχικές λειτουργίες και συναρμολογούνται σε κελί επιπέδου τρία. [52]

Τελικά, οι Liu et al. [62] πρότειναν ένα καινοτόμο ιεραρχικό σχήμα γενετικής αναπαράστασης, συγκεκριμένα το HierNAS, στο το οποίο ένα μπλοκ υψηλότερου επιπέδου δημιουργείται με την επαναληπτική ενσωμάτωση μονάδων χαμηλότερου επιπέδου. Όπως φαίνεται στην **Εικόνα 5** τα μπλοκ επιπέδου 1 μπορούν να είναι μερικές στοιχειώδεις πράξεις, όπως συνέλιξη 1×1 και 3×3 ή 3×3 max-pooling, και είναι τα βασικά συστατικά των μπλοκ επιπέδου δύο. Στη συνέχεια, τα μπλοκ δευτέρου επιπέδου χρησιμοποιούνται ως στοιχειώδεις πράξεις για τη δημιουργία μπλοκ επιπέδου τρία. Το μπλοκ υψηλότερου επιπέδου είναι ένα

μπλοκ από μόνο του που αντιστοιχεί στην πλήρη αρχιτεκτονική. Επιπλέον, ένα κελί υψηλότερου επιπέδου ορίζεται από έναν ρυθμιζόμενο άνω-τριγωνικό πίνακα γειννίαςσης G , όπου $G_{ij} = k$ δείχνει ότι η k -οστή πράξη O_k υλοποιείται μεταξύ των κόμβων i και j . Για παράδειγμα, το κελί επιπέδου δύο που φαίνεται στην **Εικόνα 5(α)** ορίζεται από έναν πίνακα G , όπου $G_{01} = 2, G_{02} = 1, G_{12} = 0$ (ο δείκτης ξεκινά από 0). Αυτή η μέθοδος μπορεί να περιγράψει περισσότερους τύπους μοναδιαίων δομών με πιο πολύπλοκες και ευέλικτες τοπολογίες.

ΧΩΡΟΣ ΑΝΑΖΗΤΗΣΗΣ ΒΑΣΕΙ ΜΟΡΦΙΣΜΟΥ – Ο χώρος αναζήτησης βάσει μορφισμού επιχειρεί το σχεδιασμό νέων νευρωνικών δικτύων που βασίζονται σε ένα ήδη υπάρχον δίκτυο εισάγοντας μετασχηματισμούς μορφισμού μεταξύ των επιπέδων των νευρωνικών δικτύων. Δύο παραδείγματα μετασχηματισμών μορφισμού είναι οι βάθους και πλάτους που καθιστούν δυνατή την αντικατάσταση του αρχικού μοντέλου με ένα αντίστοιχο μοντέλο που είναι βαθύτερο ή πλατύτερο. Ο μορφισμός δικτύου (network morphism) [63], επιτρέπει σε ένα θυγατρικό δίκτυο να κληρονομήσει όλη τη γνώση από το καλά εκπαιδευμένο γονεϊκό δίκτυο και να συνεχίσει να αναπτύσσεται σε ένα ανθεκτικότερο δίκτυο μέσα σε έναν συντομευμένο χρόνο εκπαίδευσης. Μπορεί να χειριστεί αυθαίρετες μη γραμμικές συναρτήσεις ενεργοποίησης και μπορεί να εκτελεί ταυτόχρονα μορφοποιήσεις βάθους, πλάτους και μεγέθους πυρήνα σε μία μόνο πράξη. Τα πειραματικά αποτελέσματα στο [63] δείχνουν ότι ο μορφισμός δικτύου μπορεί να επιταχύνει σημαντικά τη διαδικασία εκπαίδευσης, καθώς χρησιμοποιεί το ένα δέκατο πέμπτο του χρόνου εκπαίδευσης και επιτυγχάνει καλύτερα αποτελέσματα.

Αρκετές μεταγενέστερες μελέτες [64, 65, 66, 67, 68] βασίζονται στον μορφισμό δικτύου. Για παράδειγμα, οι Jin et al. [65] πρότειναν ένα πλαίσιο που επιτρέπει στη μεϋζιανή βελτιστοποίηση να καθοδηγήσει τον μορφισμό δικτύου για μια αποτελεσματική αναζήτηση αρχιτεκτονικής νευρωνικού. Οι Wei et al. [66] βελτίωσαν περαιτέρω τον μορφισμό δικτύου σε υψηλότερο επίπεδο, δηλ. μορφοποιώντας ένα συνελκτικό επίπεδο σε αυθαίρετη μονάδα νευρωνικού δικτύου. Επιπλέον, οι Tan και Le [69] πρότειναν το EfficientNet, το οποίο επανεξετάζει την επίδραση της κλιμάκωσης του μοντέλου σε συνελκτικά νευρωνικά δίκτυα και απέδειξε ότι η προσεκτική εξισορρόπηση του βάθους, του πλάτους και της ανάλυσης του δικτύου μπορεί να οδηγήσει σε καλύτερη επίδοση. [52]

2.3.2 Μέθοδος Βελτιστοποίησης Αρχιτεκτονικής

Αφού ορίσουμε τον χώρο αναζήτησης, πρέπει να αναζητήσουμε την αρχιτεκτονική με τις καλύτερες επιδόσεις, μια διαδικασία που ονομάζουμε βελτιστοποίηση αρχιτεκτονικής (Architecture Optimization ή AO). Παραδοσιακά, η αρχιτεκτονική ενός νευρωνικού δικτύου θεωρείται ως ένα σύνολο στατικών υπερπαραμέτρων που ρυθμίζονται με βάση την απόδοση που παρατηρείται στο σύνολο επικύρωσης. Ωστόσο, αυτή η διαδικασία εξαρτάται σε μεγάλο

βαθμό από την εμπειρία των ειδικών και απαιτεί σημαντικό χρόνο και πόρους για δοκιμές. Ως εκ τούτου, έχουν προταθεί πολλές μέθοδοι ΑΟ για την απαλλαγή των ανθρώπων από αυτή την κουραστική διαδικασία και την αυτόματη αναζήτηση νέων αρχιτεκτονικών. Ακολουθεί μια σύντομη αναφορά στις πιο συνήθεις μεθόδους ΑΟ.

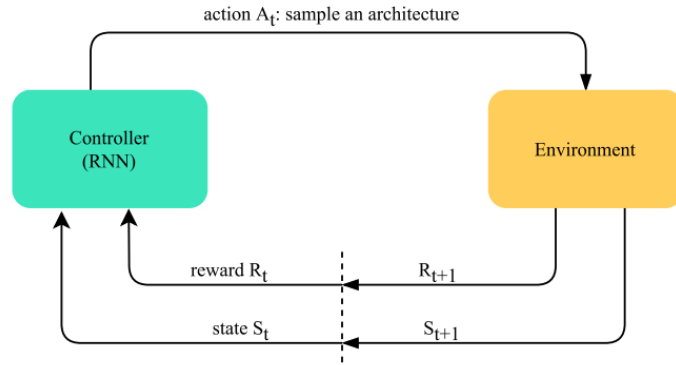
ΕΞΕΛΙΚΤΙΚΟΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ – Ο εξελικτικός αλγόριθμος (Evolutionary Algorithm ή EA) είναι ένας γενικός αλγόριθμος μετα-ευριστικής βελτιστοποίησης βάσει πληθυσμού που εμπνέεται από την βιολογική εξέλιξη. Σε σύγκριση με τους παραδοσιακούς αλγορίθμους βελτιστοποίησης, όπως οι εξαντλητικές μέθοδοι, η EA είναι μια ολική μέθοδος βελτιστοποίησης με υψηλή ευρωστία και ευρεία εφαρμογή. Μπορεί να αντιμετωπίσει αποτελεσματικά τα περίπλοκα προβλήματα που οι παραδοσιακοί αλγόριθμοι βελτιστοποίησης δυσκολεύονται να λύσουν, χωρίς να περιορίζεται από τη φύση του προβλήματος. Ένας τυπικός EA περιλαμβάνει τα ακόλουθα βήματα: επιλογή, διασταύρωση, μετάλλαξη και ενημέρωση:

- **Επιλογή:** Αυτό το βήμα περιλαμβάνει την επιλογή για τη διασταύρωση ενός υποσυνόλου των δικτύων από όλα τα δημιουργημένα δίκτυα, το οποίο στοχεύει στη διατήρηση αρχιτεκτονικών νευρωνικού με καλές επιδόσεις, ενώ εξαλείφει τις αδύναμες.
- **Διασταύρωση:** Μετά την επιλογή, τα δίκτυα ζευγαρώνονται ανά δύο για τη δημιουργία ενός νέου θυγατρικού δικτύου, το οποίο κληρονομεί το ήμισυ των γενετικών του πληροφοριών από καθένα εκ των δύο γονέων του. Αυτή η διαδικασία είναι ανάλογη με τον γενετικό ανασυνδυασμό, ο οποίος συμβαίνει κατά τη βιολογική αναπαραγωγή και τη διασταύρωση
- **Μετάλλαξη:** Καθώς αντιγράφονται οι γενετικές πληροφορίες των γονέων και κληρονομούνται από την επόμενη γενιά, εμφανίζεται επίσης γονιδιακή μετάλλαξη. Κατ' αναλογία με τη βιολογική διαδικασία, παρόλο που μια μετάλλαξη μπορεί να εμφανιστεί ως λάθος που προκαλεί ζημιά στη δομή του δικτύου και οδηγεί σε απώλεια της λειτουργικότητας, επιτρέπει επίσης την εξερεύνηση περισσότερων νέων δομών και διασφαλίζει την ποικιλομορφία.
- **Ενημέρωση:** Με την ολοκλήρωση του παραπάνω βήματος δημιουργούνται πολλά νέα δίκτυα και, λαμβάνοντας υπόψη τους περιορισμούς στους υπολογιστικούς πόρους, ορισμένα από αυτά πρέπει να καταργηθούν. Έτσι, έχουν προταθεί διάφοροι κανόνες ρύθμισης του πληθυσμού και περιορισμού του σε λογικά πλαίσια για τη συνέχιση της εξερεύνησης. [52]

ΕΝΙΣΧΥΤΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ – Η **Εικόνα 6** παρουσιάζει την επισκόπηση ενός αλγορίθμου NAS που βασίζεται σε ενισχυτική μάθηση (Reinforcement Learning ή RL). Εδώ, ο ελεγκτής είναι συνήθως ένα επαναλαμβανόμενο νευρωνικό δίκτυο (Recurrent Neural Network ή RNN) που εκτελεί μία δράση A_t σε κάθε βήμα t για να δοκιμάσει μια νέα αρχιτεκτονική από το χώρο αναζήτησης και λαμβάνει μια παρατήρηση της κατάστασης S_t μαζί με μια βαθμωτή ανταμοιβή R_t από το περιβάλλον για την ενημέρωση της στρατηγικής δειγματοληψίας του ελεγκτή. Το

περιβάλλον αναφέρεται στη χρήση μιας σταθερής διαδικασίας εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων για την εκπαίδευση και αξιολόγηση του δικτύου που δημιουργείται από τον ελεγκτή, μετά από το οποίο επιστρέφονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα (όπως η ακρίβεια). [52]

ΚΑΤΑΒΑΣΗ ΚΛΙΣΗΣ - Οι προαναφερθείσες στρατηγικές αναζήτησης δοκιμάζουν αρχιτεκτονικές νευρωνικών από έναν διακριτό χώρο αναζήτησης. Ένας πρωτοποριακός αλγόριθμος, συγκεκριμένα ο DARTS [57], ήταν μεταξύ των πρώτων μεθόδων βασισμένων στην κατάβαση κλίσης (Gradient Descent ή GD) που αναζήτησαν αρχιτεκτονικές νευρωνικών σε έναν συνεχή και παραγωγίσιμο χώρο αναζήτησης χρησιμοποιώντας μια συνάρτηση softmax για να χαλαρώσει τον διακριτό χώρο, όπως περιγράφεται παρακάτω:



Εικόνα 6: Επισκόπηση της αναζήτησης αρχιτεκτονικής νευρωνικού με τη χρήση ενισχυτικής μάθησης.

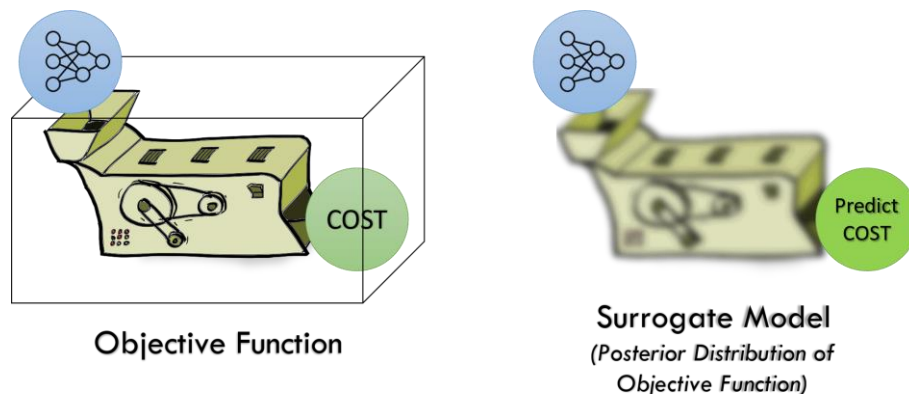
$$\bar{o}_{i,j}(x) = \sum_{k=1}^K \frac{\exp(a_{i,j}^k)}{\sum_{l=1}^K \exp(a_{i,j}^l)} o^k(x)$$

(8)

όπου $o(x)$ η λειτουργία που εκτελείται στην είσοδο x , $a_{i,j}^k$ το βάρος που έχει εκχωρηθεί στη λειτουργία o^k μεταξύ ενός ζευγαριού των κόμβων (i, j) και K ο αριθμός των προκαθορισμένων υποψήφιων πράξεων. Μετά τη χαλάρωση, το έργο της αναζήτησης αρχιτεκτονικών μετατρέπεται σε από κοινού βελτιστοποίηση της αρχιτεκτονικής νευρωνικού a και τα βάρη θ αυτής της αρχιτεκτονικής νευρωνικού. Αυτοί οι δύο τύποι παραμέτρων βελτιστοποιούνται εναλλάξ, υποδεικνύοντας ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης σε δύο επίπεδα. Συγκεκριμένα, τα a και θ βελτιστοποιούνται με το σύνολο επικύρωσης και εκπαίδευσης, αντίστοιχα. [52]

ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΒΑΣΕΙ ΥΠΟΚΑΤΑΣΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ - Μια άλλη ομάδα μεθόδων βελτιστοποίησης αρχιτεκτονικής είναι οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης με βάση το υποκατάστατο μοντέλο (Surrogate Model-Based Optimization ή SMBO) [70, 71, 72, 73, 74]. Η βασική ιδέα του SMBO είναι ότι δημιουργεί ένα υποκατάστατο μοντέλο της αντικειμενικής συνάρτησης διατηρώντας επαναληπτικά μία καταγραφή των αποτελεσμάτων της προηγούμενης αξιολόγησης και χρησιμοποιεί το υποκατάστατο μοντέλο για να προβλέψει την αρχιτεκτονική που υπόσχεται τα περισσότερα. Έτσι, αυτές οι μέθοδοι μπορούν να μειώσουν σημαντικά τον χρόνο αναζήτησης και να βελτιώσουν την αποτελεσματικότητα. Οι αλγόριθμοι SMBO διαφέρουν ανάλογα με τα υποκατάστατα μοντέλα που χρησιμοποιούν, τα οποία μπορούν σε γενικές γραμμές να χωριστούν σε μεθόδους μπεϋζιανής βελτιστοποίησης

(Bayesian Optimization ή BO), συμπεριλαμβανομένης της γκαουσιανής διαδικασίας (Gaussian Process ή GP) [75], του τυχαίου δάσους (Random Forest ή RF) [76] και τον δενδρικής δομής εκτιμητή Parzen (Tree-structured Parzen Estimator TPE) [77], και νευρωνικά δίκτυα [73, 78, 74, 72].



Εικόνα 7: Η αντικειμενική συνάρτηση είναι ένα μαύρο κουτί το οποίο καλείται να προσεγγίσει το υποκατάστατο μοντέλο.

Μπεϋζιανή Βελτιστοποίηση

Η μπεϋζιανή βελτιστοποίηση (Bayesian Optimization ή BO) είναι μια αποτελεσματική μέθοδος για την ολική βελτιστοποίηση υπολογιστικά ακριβών συναρτήσεων που είναι δύσκολο να υπολογιστούν. Η αντικειμενική συνάρτηση παίρνει τη μορφή μια άγνωστης δομής, η οποία αναφέρεται ως «μαύρο κουτί» (black box).

Το BO είναι μια μέθοδος SMBO που δημιουργεί ένα πιθανοτικό μετασχηματισμό μοντέλου από τις υπερπαραμέτρους στις αντικειμενικές μετρικές που αξιολογούνται στο σύνολο επικύρωσης (validation set). Εξισορροπεί καλά την εξερεύνηση (αξιολογώντας όσο το δυνατόν περισσότερα σύνολα υπερπαραμέτρων) και την εκμετάλλευση (κατανομή περισσότερων πόρων σε πολλά υποσχόμενες υπερπαραμέτρους).

Τα βήματα του SMBO εκφράζονται στον Αλγόριθμο 1 (υιοθετήθηκε από το [79]). Εδώ, πρέπει να προκαθοριστούν αρχικά αρκετές είσοδοι, συμπεριλαμβανομένης μιας συνάρτησης αξιολόγησης f , του χώρου αναζήτησης θ , της συνάρτησης απόκτησης S , του πιθανοτικού μοντέλου M και της εγγραφής δεδομένων D . Συγκεκριμένα, το D είναι ένα σύνολο δεδομένων που καταγράφει πολλά ζεύγη δειγμάτων (θ_i, y_i) , όπου το $\theta_i \in \theta$ υποδηλώνει μια δειγματοληπτική νευρική αρχιτεκτονική και το y_i υποδεικνύει το αποτέλεσμα αξιολόγησής της. Μετά την αρχικοποίηση, τα βήματα SMBO περιγράφονται ως εξής:

1. Το πρώτο βήμα είναι ο ρύθμιση του πιθανοτικού μοντέλου M ώστε να ταιριάζει στο σύνολο δεδομένων εγγραφής D .
2. Η συνάρτηση απόκτησης S χρησιμοποιείται για την επιλογή της επόμενης πολλά υποσχόμενης αρχιτεκτονικής από το πιθανοτικό μοντέλο M .

3. Η επίδοση της επιλεγμένης αρχιτεκτονικής αξιολογείται από το f , το οποίο είναι ένα υπολογιστικά ακριβό βήμα καθώς περιλαμβάνει την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου στο σύνολο εκπαίδευσης και την αξιολόγησή του στο σύνολο επικύρωσης.
4. Το σύνολο δεδομένων εγγραφής D ενημερώνεται με την προσθήκη ενός νέου ζεύγους αποτελεσμάτων (θ_i, y_i) .

Algorithm 1: Surrogate Model-Based Optimization

```

INPUT:  $f, \theta, S, M$ 
 $D \leftarrow \text{INITSAMPLES}(f, \theta)$ 
for  $i$  in  $[1, 2, \dots, T]$  do
     $p(y|\theta, D) \leftarrow \text{FITMODEL}(M, D)$ 
     $\theta_i \leftarrow \arg \max_{\theta \in \Theta} S(\theta, p(y|\theta, D))$ 
     $y_i \leftarrow f(\theta_i)$ 
     $D \leftarrow D \cup (\theta_i, y_i)$ 
end for

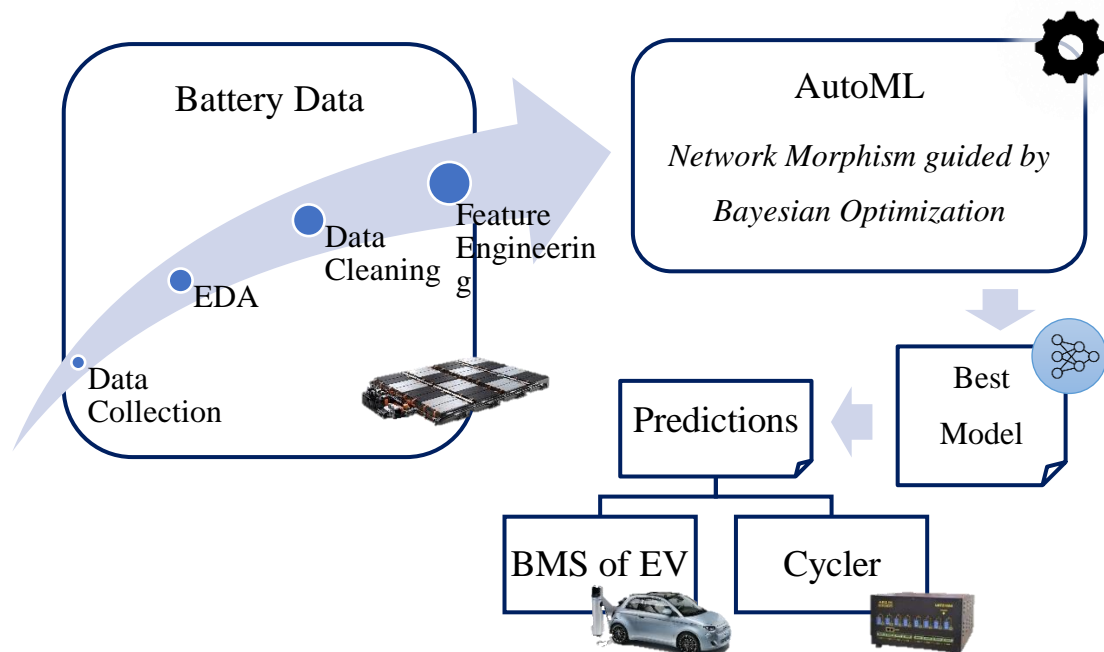
```

Εικόνα 8: Βελτιστοποίηση Βάσει Υποκατάστου Μοντέλου

Τα παραπάνω τέσσερα βήματα επαναλαμβάνονται T φορές, όπου το T πρέπει να καθοριστεί σύμφωνα με το συνολικό χρόνο ή τους διαθέσιμους πόρους. Τα συνήθως χρησιμοποιούμενα υποκατάστατα μοντέλα για τη μέθοδο BO είναι τα GP, RF και TPE. Το GP είναι ένα από τα πιο δημοφιλή υποκατάστατα μοντέλα. Ωστόσο, ο GP κλιμακώνεται κυβικά με τον αριθμό των δειγμάτων δεδομένων, ενώ το RF μπορεί να χειριστεί εγγενώς μεγάλους χώρους και να κλιμακωθεί καλύτερα σε πολλά δείγματα δεδομένων. Εξάλλου, οι Falkner and Klein et al. [80] πρότειναν τον αλγόριθμο υπερζώνης που βασίζεται σε BO (BO-Based Hyperband ή BOHB), ο οποίος συνδυάζει τις δυνάμεις του BO βασισμένου σε TPE και της υπερζώνης, και ως εκ τούτου, αποδίδει πολύ καλύτερα από τις τυπικές μεθόδους BO. Επιπλέον, το FABOLAS [81] είναι μια ταχύτερη διαδικασία BO, η οποία αντιστοιχεί την απώλεια επικύρωσης (validation loss) και τον χρόνο εκπαίδευσης ως συναρτήσεις του μεγέθους του συνόλου δεδομένων, δηλαδή εκπαιδεύει ένα παραγωγικό μοντέλο (generative model) σε ένα υποσύνολο δεδομένων που σταδιακά αυξάνεται σε μέγεθος. Εδώ, ο FABOLAS είναι 10–100 φορές ταχύτερος από άλλους αλγόριθμους BO τελευταίας τεχνολογίας και προσδιορίζει τις πιο πολλά υποσχόμενες υπερπαραμέτρους. [52]

3

Προτεινόμενη Προσέγγιση



Εικόνα 9: Η προτεινόμενη προσέγγιση της εργασίας μας

Στην παρούσα διπλωματική εργασία προτείνουμε μια νέα μέθοδο πρόβλεψης σε ζωντανό χρόνο του SOC της μπαταρίας εκπαιδώντας μοντέλα AutoML, η οποία παρουσιάζεται συγκεντρωτικά στην Error! Reference source not found.. Αρχικά, συλλέγουμε τα δεδομένα μέσα από πειραματικές μετρήσεις ποικίλων φυσικών μεγεθών της μπαταρίας κατά την εκτέλεση επαναληπτικών κύκλων φόρτισης ορισμένης πολιτικής, ξεκινώντας από την αρχή της ζωής της μέχρι και το τέλος της (δηλ. μέχρι η χωρητικότητα να φτάσει το 80% της ονομαστικής χωρητικότητας). Κατόπιν, διεξάγουμε διερευνητική ανάλυση δεδομένων (EDA) για την μελέτη του dataset και αφαιρούμε τα αποκλίνοντα δείγματα. Μετά και από την εξαγωγή των κατάλληλων χαρακτηριστικών, τρέχουμε ένα σύστημα αυτοματοποιημένης μηχανικής

μάθησης για την εύρεση του βέλτιστου μοντέλου πρόβλεψης του SOC. Συγκεκριμένα, πάνω σε ένα χώρο αναζήτησης μορφισμού δικτύου εκτελούμε μπεϋζιανή βελτιστοποίηση (BO) με υποκείμενο μοντέλο γκαουσσισιανής διαδικασίας (GP) και συνάρτηση απόκτησης το ανώ όριο εμπιστοσύνης (UCB). Τέλος, μελετάμε την επίδοση του μοντέλου που δημιουργήθηκε πάνω σε διαφορετικά υποσύνολα του αρχικού dataset, είτε πολλών κύκλων φόρτισης, είτε και μεμονωμένων.

3.1 Δεδομένα Μπαταριών

3.1.1 Συλλογή Δεδομένων

Η προσέγγισή μας χρησιμοποιεί δεδομένα γήρανσης κύκλου (cycle ageing data) που παρήχθησαν από cyclers. Ως τώρα, οι περισσότερες εργασίες πάνω στο SOC εστιάζουν στην πρόβλεψή του εντός του κύκλου φόρτισης. Έτσι, θελήσαμε να διευρύνουμε το ερευνητικό πεδίο μελετώντας τη συμπεριφορά μοντέλων που έχουν εκπαιδευτεί με κύκλους φόρτισης από ολόκληρο το εύρος ζωής της μπαταρίας. Συνεπώς, τα δεδομένα γήρανσης κύκλου είναι τα μόνα κατάλληλα για αυτό το σκοπό.

Όσον αφορά τα μετρούμενα φυσικά μεγέθη, θέτουμε ως ελάχιστη προϋπόθεση την ύπαρξη καθ' όλη τη διάρκεια της ζωής της μπαταρίας μετρήσεων ρεύματος, τάσης και θερμοκρασίας ως είσοδο στα μοντέλα και του SOC ως έξοδο.

3.1.2 Διερευνητική Ανάλυση Δεδομένων

Η Διερευνητική Ανάλυση Δεδομένων (Exploratory Data Analysis ή EDA) χρησιμοποιείται από τους data scientists για να αναλύουν και να εξερευνούν datasets και να συνοψίζουν τα βασικά χαρακτηριστικά τους, συχνά επιστρατεύοντας μεθόδους οπτικοποίησης δεδομένων. Βοηθάει στον προσδιορισμό της βέλτιστης διαχείρισης πηγών δεδομένων για τη λήψη των επιθυμητών απαντήσεων, διευκολύνοντας τους data scientists να ανακαλύψουν πρότυπα (patterns), να εντοπίσουν ανωμαλίες, να ελέγξουν υποθέσεις ή να επαληθεύσουν συμπεράσματα. Η EDA χρησιμοποιείται κυρίως για να δούμε τι μπορεί να αποκαλύψουν τα δεδομένα πέρα από την τυπική διαδικασία ελέγχου ενός μοντέλου ή μιας υπόθεσης και παρέχει μια καλύτερη κατανόηση των μεταβλητών του dataset και των μεταξύ τους σχέσεων. Μπορεί ακόμα να βοηθήσει στον καθορισμό της καταλληλότητας των υποψήφιων στατιστικών τεχνικών που θα χρησιμοποιηθούν στην ανάλυση δεδομένων. Έχοντας επινοηθεί από τον Αμερικανό μαθηματικό John Tukey τη δεκαετία του 1970, οι τεχνικές EDA εξακολουθούν να χρησιμοποιούνται ευρέως στη διαδικασία ανακάλυψης δεδομένων σήμερα.

Ο βασικός στόχος της EDA είναι να βοηθήσει να δούμε τα δεδομένα πριν βγάλουμε ακόμα συμπεράσματα. Μπορεί να συντελέσει στην ταυτοποίηση προφανών λαθών, την καλύτερη κατανόηση προτύπων (patterns) εντός των δεδομένων, των εντοπισμό outliers ή ανώμαλων γεγονότων, την εύρεση αξιόλογων σχέσεων μεταξύ των μεταβλητών. Οι data scientists μπορούν να τη χρησιμοποιήσουν για να εξασφαλίσουν ότι τα αποτελέσματα που παράγουν είναι έγκυρα και εφαρμόσιμα σε οποιονδήποτε επιχειρηματικό στόχο. Βοηθάει ακόμα τους stakeholders επιβεβαιώνοντας ότι θέτουν τις σωστές ερωτήσεις. Απαντάει σε ζητήματα τυπικής απόκλισης, κατηγορικών μεταβλητών και διαστημάτων εμπιστοσύνης. Τέλος, με την ολοκλήρωση της EDA και την άντληση πληροφοριών, τα χαρακτηριστικά της μπορούν να αξιοποιηθούν σε περισσότερο εκλεπτυσμένες αναλύσεις ή μοντελοποιήσεις δεδομένων, συμπεριλαμβανομένης και της Μηχανικής Μάθησης.³

3.1.3 Καθαρισμός Δεδομένων

Η ίδια η χρήση του SOC το καθιστά χρήσιμο πρωτίστως κατά την εκφόρτιση της μπαταρίας, οπότε και έχει νόημα για τον χρήστη να το παρακολουθεί ώστε να εκτιμάει πόση ενέργεια του απομένει. Με άλλα λόγια, δεν έχει νόημα ο υπολογισμός του SOC σε συνθήκες φόρτισης, καθότι αυτές λαμβάνουν χώρα ως επί των πλείστων σε ελεγχόμενο περιβάλλον και μάλιστα αποσκοπούν στην πλήρη φόρτιση της μπαταρίας, αγνοώντας τις ενδιάμεσες διακυμάνσεις του SOC. Συνεπώς, πήραμε τη σχεδιαστική πρωτοβουλία για κάθε κύκλο φόρτισης-εκφόρτισης των δεδομένων μας να αφαιρέσουμε το τμήμα της φόρτισης και να κρατήσουμε μόνο τις μετρήσεις εκφόρτισης.

3.1.4 Μηχανική Χαρακτηριστικών

Είναι γενικά αποδεκτό ότι τα δεδομένα και τα χαρακτηριστικά καθορίζουν το άνω φράγμα του ML και ότι τα μοντέλα και οι αλγόριθμοι μπορούν μόνο να προσεγγίσουν αυτό το όριο. Έχοντας αυτό υπόψη, η μηχανική χαρακτηριστικών (feature engineering) έχει ως στόχο να μεγιστοποιήσει την εξαγωγή των χαρακτηριστικών από τα ακατέργαστα δεδομένα για τη χρήση τους από τους αλγόριθμους και τα μοντέλα. Η μηχανική χαρακτηριστικών αποτελείται από τρεις υπο-κατηγορίες: την επιλογή χαρακτηριστικών, την εξαγωγή χαρακτηριστικών και την κατασκευή χαρακτηριστικών. Η εξαγωγή και κατασκευή χαρακτηριστικών είναι παραλλαγές της μετατροπής χαρακτηριστικών, κατά την οποία δημιουργείται ένα νέο σύνολο χαρακτηριστικών. Στις περισσότερες περιπτώσεις, η εξαγωγή χαρακτηριστικών στοχεύει στη μείωση της διαστατικότητας των χαρακτηριστικών εφαρμόζοντας συγκεκριμένες συναρτήσεις μετασχηματισμού ενώ η κατασκευή χαρακτηριστικών χρησιμοποιείται για να διευρύνει τον

³ <https://www.ibm.com/cloud/learn/exploratory-data-analysis>

αρχικό χώρο χαρακτηριστικών και ο στόχος της επιλογής χαρακτηριστικών είναι να μειώσει την περίσσεια των χαρακτηριστικών επιλέγοντας σημαντικά χαρακτηριστικά. Συνεπώς, η ουσία της μηχανικής χαρακτηριστικών είναι ο δυναμικός συνδυασμός αυτών των τριών διαδικασιών. [52]

ΕΠΙΛΟΓΗ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΩΝ – Η επιλογή χαρακτηριστικών (feature selection) κατασκευάζει ένα υποσύνολο χαρακτηριστικών βασισμένο στο αρχικό μειώνοντας τα άσχετα ή πλεονάζοντα χαρακτηριστικά. Αυτό τείνει να απλουστεύει το μοντέλο και συνεπώς αποφεύγει την υπερ-εκπαίδευση (overfitting) και βελτιώνει την επίδοση του μοντέλου. Τα επιλεγόμενα χαρακτηριστικά είναι συνήθως αποκλίνοντα και υψηλά συσχετισμένα με αντικειμενικές τιμές (object values). [52]

ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΩΝ – Η κατασκευή χαρακτηριστικών (feature construction) είναι μια διαδικασία που κατασκευάζει νέα χαρακτηριστικά από το βασικό χώρο χαρακτηριστικών ή τα ακατέργαστα δεδομένα για να ενισχύσει την ανθεκτικότητα και την ικανότητα γενίκευσης του μοντέλου. Ουσιαστικά, αυτό γίνεται για να αυξηθεί η ικανότητα εκπροσώπησης των πρωταρχικών χαρακτηριστικών. Αυτή η διαδικασία είναι παραδοσιακά ιδιαίτερα εξαρτημένη από την ανθρώπινη εξειδίκευση. Μια από τις πιο ευρέως χρησιμοποιούμενες μεθόδους είναι οι μετασχηματισμοί προεπεξεργασίας, όπως η τυποποίηση, η κανονικοποίηση και η διακριτοποίηση χαρακτηριστικών. Επιπλέον, οι πράξεις μετασχηματισμού για διαφορετικούς τύπους χαρακτηριστικών μπορεί να ποικίλουν. Για παράδειγμα, πράξεις όπως η σύζευξη, η διάζευξη και η άρνηση χρησιμοποιούνται συνήθως σε δυαδικά χαρακτηριστικά. Πράξεις όπως μέγιστο, ελάχιστο, πρόσθεση, αφαίρεση, μέση τιμή κλπ. χρησιμοποιούνται σε αριθμητικά χαρακτηριστικά. [52]

ΕΞΑΓΩΓΗ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΩΝ – Η εξαγωγή χαρακτηριστικών (feature extraction) είναι μια διαδικασία μείωσης της διαστατικότητας που πραγματοποιείται από mapping functions. Εξάγει μη πλεονάζοντα χαρακτηριστικά που περικλείουν πληροφορία σύμφωνα με συγκεκριμένες μετρικές. Αντίθετα με την επιλογή χαρακτηριστικών, η εξαγωγή χαρακτηριστικών τροποποιεί τα αρχικά χαρακτηριστικά. Η καρδιά της εξαγωγής χαρακτηριστικών είναι ένα mapping function το οποίο μπορεί να υλοποιηθεί με πολλούς τρόπους. Οι πιο κυρίαρχες προσεγγίσεις είναι η ανάλυση κυρίαρχων συνιστωσών (PCA), η ανάλυση ανεξάρτητων συνιστωσών (ICA), η isomap, η μη γραμμική μείωση της διαστατικότητας και η ανάλυση γραμμικής διάκρισης (LDA). Προσφάτως, έχει γίνει δημοφιλής η προσέγγιση με τα νευρωνικά δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης, η οποία χρησιμοποιεί τις εσωτερικές τιμές προεκπαιδευμένων μοντέλων ως εξαγμένα χαρακτηριστικά. Ακόμα, έχουν προταθεί πολλοί αλγόριθμοι βασισμένοι σε αυτοκωδικοποιητές. [52]

Η δική μας προσέγγιση

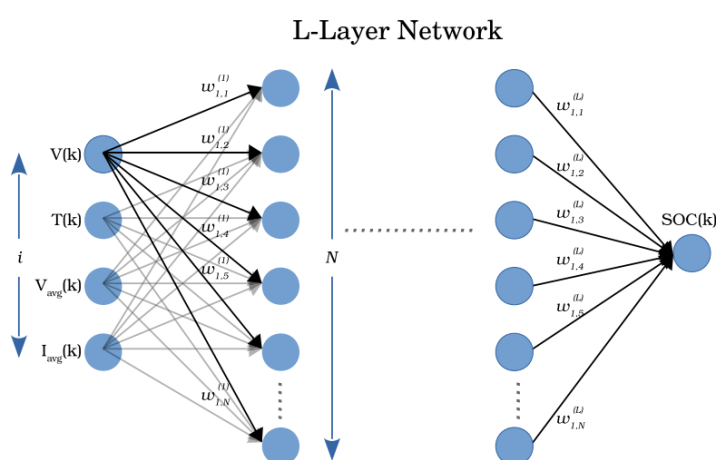
Η μηχανική χαρακτηριστικών που αναπτύξαμε στηρίζεται στα συμπεράσματα των Chemali et al. [2], οι οποίοι προέβλεψαν το SOC με δεδομένα τάσης, θερμοκρασίας, μέσου ρεύματος και μέσης τάσης. Ωστόσο, κατασκευάζουμε συμπληρωματικά και έναν εσωτερικό μετρητή κύκλου.

Στην εργασία των Chemali et al. [2] το διάνυσμα των εισόδων ορίζεται ως $\psi(t) = [V(t), T(t), I_{avg}(t), V_{avg}(t)]$ όπου τα $V(t), T(t), I_{avg}(t)$ και $V_{avg}(t)$ αντιπροσωπεύουν την τάση, τη θερμοκρασία, το μέσο ρεύμα και τη μέση τάση της μπαταρίας στο χρονικό βήμα t . Το μέσο ρεύμα και τάση υπολογίζονται και τα δύο σε προηγούμενα χρονικά βήματα, τα οποία κυμαίνονται από 50 έως 400 χρονικά βήματα. Αυτό δεν πρέπει να συγχέεται με το συνολικό

χρονικό διάστημα δεδομένων που ορίζεται από το τ , όπου $\xi < \tau$. Εξετάστηκαν πολλοί διαφορετικοί τύποι εισόδων στην προσπάθεια κατά την πρόβλεψη να ενσωματωθεί πληροφορία και από τις προηγούμενες χρονικές στιγμές (ώστε να εισαχθεί μνήμη και χρονική εξάρτηση), και

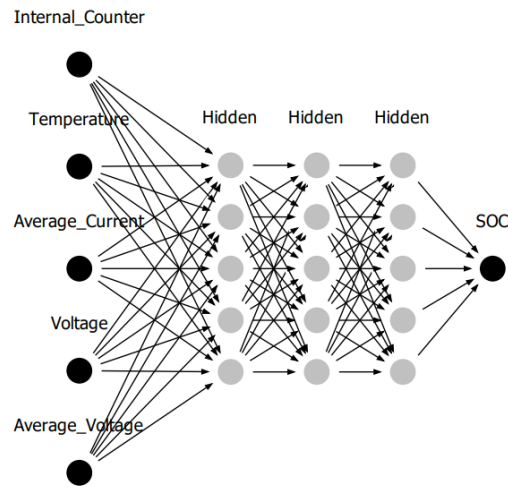
διαπιστώθηκε ότι τα $I_{avg}(t)$ και $V_{avg}(t)$ είναι προτιμότερα για την τροφοδοσία του δικτύου αντί της τροφοδοσίας με πολλές προηγούμενες τιμές ρεύματος και τάσης. Συγκεκριμένα, η τροφοδοσία του μοντέλου με πολλές προηγούμενες τιμές ρεύματος και τάσης προσθέτοντας παραπάνω εισόδους οδηγούσε σε αναλογική αύξηση των νευρώνων και των βαρών του νευρωνικού και κατ' επέκταση σε υψηλές απαιτήσεις μνήμης και υπολογιστικής ισχύος. Συνεπώς, έκρινε αποδοτικότερη την καταγραφή της δυναμικής του συστήματος στο χρόνο μέσω ενός μέσου όρου του ρεύματος και της τάσης πάνω σε ένα σταθερό εύρος περασμένων χρονικών στιγμών.

Ως προς την επιλογή χαρακτηριστικών, παίρνουμε αυτούσια τα χαρακτηριστικά της **τάσης** και της **θερμοκρασίας**.



Εικόνα 10: Η μηχανική χαρακτηριστικών των Chemali et al. [2]

Ως προς την κατασκευή χαρακτηριστικών, δημιουργούμε το **μέσο ρεύμα** και τη **μέση τάση** υπολογίζοντας τη μέση τιμή τους πάνω σε ένα κυλιόμενο χρονικό παράθυρο μεταξύ μιας προηγούμενης χρονικής στιγμής και της τρέχουσας. Η ουσία της μελέτης μας έγκειται στον προσδιορισμό του κινούμενου παραθύρου διότι αυτό είναι που εισάγει μνήμη στο τελικό μοντέλο μας. Ένα υπερβολικά μικρό παράθυρο δημιουργεί εξάρτηση από πολύ κοντινές χρονικές στιγμές και συνεπώς ίσως δεν καταφέρει να



Εικόνα 11: Ενδεικτικό νευρωνικό δίκτυο με είσοδο δεδομένα τάσης, θερμοκρασίας, μέσου ρεύματος και τάσης και εσωτερικού μετρητή κύκλου φόρτισης και έξοδο την κατάσταση φόρτισης (SOC).

περιγράψει επαρκώς την μεταβολή του μεγέθους. Από την άλλη, ένα υπερβολικά μεγάλο παράθυρο εισάγει παραπληροφόρηση στο σύστημα, δημιουργεί ανύπαρκτες εξαρτήσεις από μακρινές προγενέστερες χρονικές στιγμές και γενικά ομογενοποιεί τα δεδομένα καθιστώντας το μοντέλο δυσκίνητο στην αναγνώριση μεταβολών του μεγέθους. Από αυτά, προκύπτουν μεν κάποιοι εμπειρικοί κανόνες για το βέλτιστο μέγεθος παραθύρου (όπως για παράδειγμα ότι είναι μάλλον άστοχο να υπερβεί το μισό της μέσης διάρκειας ενός κύκλου φόρτισης), αλλά από εκεί και πέρα ο εντοπισμός του είναι ένα ανοιχτό πεδίο έρευνας.

Κατόπιν, ξεφεύγουμε από τα όρια των Chemali et al. και κατασκευάζουμε ένα επιπλέον χαρακτηριστικό που ονομάζουμε **εσωτερικό μετρητή κύκλου**. Πρόκειται για έναν δείκτη που αυξάνεται ανά δείγμα κατά ένα και μηδενίζεται στην αρχή κάθε νέου κύκλου εκφόρτισης. Η χρησιμότητά του είναι και αυτή αρκετά προφανής: χάρη σε αυτόν εισέρχεται ρητά και ξεκάθαρα στο μοντέλο μας η πληροφορία της μετάβασης από τον ένα κύκλο εκφόρτισης στον επόμενο, καθώς και η πρόοδος εντός του τρέχοντος κύκλου. Πρόκειται για παραμέτρους που επηρεάζουν δραστικά το SOC της μπαταρίας αλλά παρουσιάζουν χαλαρή συσχέτιση με αυτές του Μέσου Ρεύματος και της Μέσης Τάσης. Για παράδειγμα, η μετάβαση από τον ένα κύκλο στον επόμενο τείνει να εξομαλυνθεί από μια συνάρτηση κινούμενου μέσου (rolling average), ενώ ο μηδενισμός μιας θετικής μεταβλητής δεν αφήνει περιθώριο για παρερμηνείες. Έτσι, ένα χαρακτηριστικό σαν τον εσωτερικό μετρητή κύκλου θα οδηγήσει σε καλύτερες προβλέψεις.

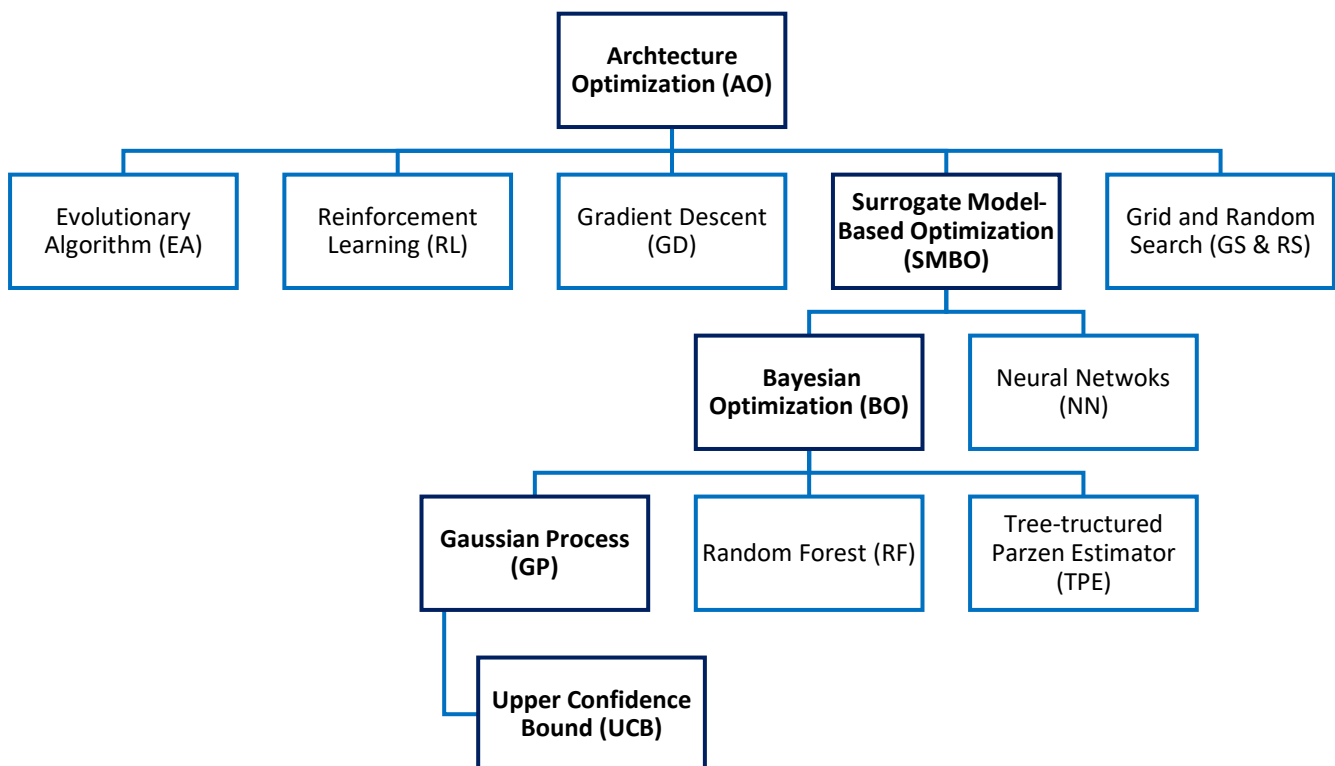
Τέλος, το ίδιο του **SOC** υπολογίζεται εύκολα με βάση την Εξίσωση (2).

Στην **Εικόνα 11** παρουσιάζεται η σύνοψη της προτεινόμενης μηχανικής χαρακτηριστικών μέσα από την παράθεση της ενδεικτικής αρχιτεκτονικής του επιζητούμενου νευρωνικού.

3.2 Μορφισμός δικτύου κατευθυνόμενος από μπεϋζιανή

βελτιστοποίηση

Για την εκτέλεση του NAS ακολουθούμε την μελέτη των Jin et al. [65], η οποία υλοποίησε έναν χώρο αναζήτησης βασισμένο στον μορφισμό δικτύου και κατευθυνόμενο από μπεϋζιανή βελτιστοποίηση με υποκείμενη γκαουσιανή διαδικασία. Οι επιλογές μας ως προς τη μέθοδο βελτιστοποίησης αρχιτεκτονικής φαίνονται με σκούρα γράμματα στην **Εικόνα 12**.



Εικόνα 12: Διάγραμμα όλων των μεθόδων βελτιστοποίησης αρχιτεκτονικής. Η προτεινόμενη μέθοδος βελτιστοποίησης αρχιτεκτονικής παρουσιάζεται με σκούρα (bold) γραμματοσειρά.

Η Αυτοματοποιημένη Μηχανική Μάθηση (AutoML) έχει καταστεί πολύ σημαντικό ερευνητικό πεδίο με ευρείες εφαρμογές τεχνικών μηχανικής μάθησης. **Ο στόχος της AutoML είναι να δώσει τη δυνατότητα σε άτομα με περιορισμένη εμπειρία στη μηχανική μάθηση να χρησιμοποιήσουν μοντέλα μηχανικής μάθησης εύκολα.** Έχουν γίνει εργασίες για την αυτοματοποιημένη επιλογή μοντέλων, αυτοματοποιημένη ρύθμιση υπερπαραμέτρων, κ.λπ. Στο πλαίσιο της βαθιάς μάθησης, η αναζήτηση αρχιτεκτονικής νευρωνικού (Neural Architecture Search ή NAS), η οποία στοχεύει στην αναζήτηση της καλύτερης αρχιτεκτονικής νευρωνικού δικτύου για τη δεδομένη μαθησιακή εργασία και σύνολο δεδομένων, έχει εξελιχθεί σε ένα αποτελεσματικό υπολογιστικό εργαλείο στο AutoML. Δυστυχώς, οι υπάρχοντες αλγόριθμοι NAS είναι συνήθως ακριβοί υπολογιστικά. Η χρονική πολυπλοκότητα του NAS

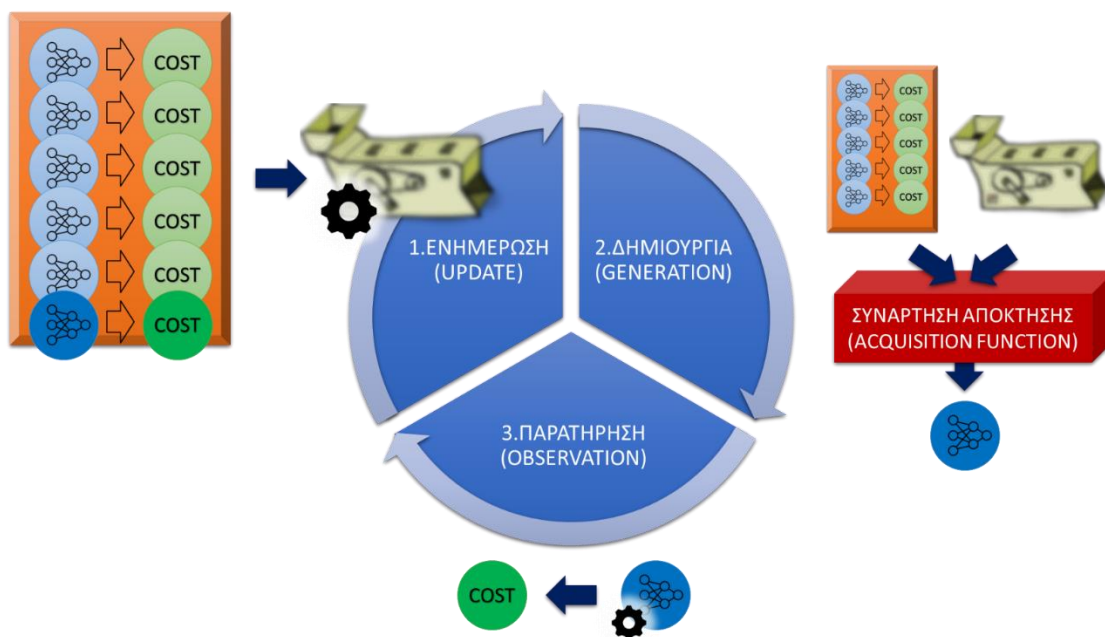
είναι $O(n\bar{\epsilon})$, όπου n ο αριθμός αρχιτεκτονικών νευρωνικού που αξιολογήθηκαν κατά την αναζήτηση και $\bar{\epsilon}$ είναι η μέση κατανάλωση χρόνου για την αξιολόγηση καθενός από τα n νευρωνικά δίκτυα. Πολλές προσεγγίσεις NAS, όπως η βαθιά ενισχυτική μάθηση [58, 53, 82, 55, 51] μέθοδοι που βασίζονται σε κλίση [83, 57, 78] και οι εξελικτικοί αλγόριθμοι [84, 85, 62, 60, 59, 86] απαιτούν μεγάλο n για να φτάσουν σε καλή απόδοση. Επιπλέον, πολλοί από αυτούς εκπαιδεύουν το καθένα τα n νευρωνικά δίκτυα από την αρχή, κάτι που είναι πολύ αργό. [65]

Από την άλλη, κάποιες αρχικές προσπάθειες έχουν αφιερωθεί στη χρήση του **μορφισμού δικτύου** στο NAS [67, 67]. Είναι μια τεχνική για τη μορφοποίηση της αρχιτεκτονικής ενός νευρωνικού δικτύου διατηρώντας τη λειτουργικότητά του [87, 63]. Επομένως, είμαστε σε θέση να τροποποιήσουμε ένα εκπαιδευμένο νευρωνικό δίκτυο σε μια νέα αρχιτεκτονική χρησιμοποιώντας τις λειτουργίες μορφισμού δικτύου, π.χ. εισαγωγή ενός επιπέδου ή προσθήκη σύνδεσης παράλειψης. Κατόπιν, απαιτούνται μόλις λίγες ακόμη εποχές για την περαιτέρω εκπαίδευση της νέας αρχιτεκτονικής προς μια καλύτερη απόδοση. Η χρήση του μορφισμού δικτύου θα μείωνε τον μέσο χρόνο εκπαίδευσης στην αναζήτηση αρχιτεκτονικής νευρωνικού. Το πιο σημαντικό πρόβλημα που πρέπει να λυθεί για NAS που βασίζεται σε μορφισμό δικτύου μέθοδοι είναι η επιλογή των πράξεων, η οποία είναι η επιλογή μιας λειτουργίας από τη λειτουργία μορφισμού δικτύου που έχει οριστεί για να μεταμορφώσει μια υπάρχουσα αρχιτεκτονική σε μια νέα. Οι μέθοδοι NAS που βασίζονται στον μορφισμό δικτύου δεν είναι αρκετά αποτελεσματικές. Είτε απαιτούν μεγάλο αριθμό παραδειγμάτων εκπαίδευσης [67] ή είναι αναποτελεσματικές στην εξερεύνηση μεγάλων χώρων αναζήτησης [88]. Η αποτελεσματική εκτέλεση αναζήτησης αρχιτεκτονικής νευρωνικού με μορφισμό δικτύου παραμένει ένα δύσκολο πρόβλημα. [65]

Όπως είναι γνωστό, η **μπεϋζιανή βελτιστοποίηση (Bayesian optimization ή BO)** [89] έχει υιοθετηθεί ευρέως στην αποδοτική εξερεύνηση συναρτήσεων μαύρου κουτιού (black-box functions) για ολική βελτιστοποίηση, των οποίων οι παρατηρήσεις είναι δαπανηρές στην απόκτηση. Για παράδειγμα, έχει χρησιμοποιηθεί στη ρύθμιση υπερπαραμέτρων για μοντέλα μηχανικής εκμάθησης [90, 91, 92, 93, 89, 94] στα οποία πραγματοποιεί αναζήτηση μπεϋζιανής βελτιστοποίησης μεταξύ διαφορετικών συνδυασμών υπερπαραμέτρων. Κατά τη διάρκεια της αναζήτησης, κάθε αξιολόγηση ενός συνδυασμού υπερπαραμέτρων συνεπάγεται μια δαπανηρή διαδικασία εκπαίδευσης και ελέγχου του μοντέλου μηχανικής μάθησης, το οποίο μοιάζει πολύ με το πρόβλημα του NAS. Οι μοναδικές ιδιότητες της μπεϋζιανής βελτιστοποίησης μας παρακινούν να εξερευνήσουμε την ικανότητά της να καθοδηγεί τον μορφισμό του δικτύου για να μειώσει τον αριθμό των εκπαιδευμένων νευρωνικών δικτύων n και να κάνει την αναζήτηση πιο αποτελεσματική. [65]

Σε αυτή την εργασία, προτείνεται μια αποδοτική αναζήτηση αρχιτεκτονικής νευρωνικού με μορφισμό δικτύου, η οποία χρησιμοποιεί μπεϋζιανή βελτιστοποίηση για την

καθοδήγηση εντός του χώρου αναζήτησης, επιλέγοντας τις πιο πολλά υποσχόμενες πράξεις κάθε φορά. Για την αντιμετώπιση των προαναφερθέντων προκλήσεων, κατασκευάζεται ένας πυρήνας για την απόσταση επεξεργασίας (edit-distance) του νευρωνικού δικτύου. Όντας συνεπής με τη βασική ιδέα του μορφισμού δικτύου, μετράει πόσες πράξεις απαιτούνται για την αλλαγή ενός νευρωνικού δικτύου σε ένα άλλο. Επιπλέον, έχει σχεδιαστεί ειδικά για χώρο αναζήτησης δενδρικής δομής ένα νέο εργαλείο βελτιστοποίησης συνάρτησης απόκτησης (acquisition function), το οποίο είναι ικανό να εξισορροπήσει μεταξύ εξερεύνησης και εκμετάλλευσης (exploration vs exploitation), ώστε να μπορεί η μπεϋζιανή βελτιστοποίηση να επιλέξει ανάμεσα στις πράξεις. Επιπλέον, ορίζεται ένας μορφισμός δικτύου σε επίπεδο γράφου για την αντιμετώπιση των αλλαγών των αρχιτεκτονικών νευρωνικού που βασίζονται στον μορφισμό δικτύου σε επίπεδο στρώματος (layer-level). Η προτεινόμενη προσέγγιση συγκρίνεται από το [65] με τις σύγχρονες μεθόδους NAS [88, 95] σε σύνολα δεδομένων αναφοράς των MNIST, CIFAR10 και Fashion-MNIST. Μέσα σε περιορισμένο χρόνο αναζήτησης, οι αρχιτεκτονικές που βρέθηκαν από την παραπάνω μέθοδο επιτυγχάνουν τα χαμηλότερα ποσοστά σφάλματος σε όλα τα σύνολα δεδομένων.



Εικόνα 13: Τα στάδια της μπεϋζιανής βελτιστοποίησης

Η βασική ιδέα της προτεινόμενης μεθόδου είναι η εξερεύνηση του χώρου αναζήτησης μέσω της μορφοποίησης των νευρωνικών αρχιτεκτονικών που καθοδηγούνται από τον αλγόριθμο μπεϋζιανή βελτιστοποίησης (BO). Η παραδοσιακή μπεϋζιανή βελτιστοποίηση αποτελείται από έναν βρόχο τριών βημάτων, ενημέρωση, δημιουργία και παρατήρηση, όπως αναπαριστάται και στην Error! Reference source not found.. Στο πλαίσιο του NAS, ο προτεινόμενος αλγόριθμος μπεϋζιανής βελτιστοποίησης διεξάγει επαναληπτικά: (1)

Ενημέρωση: εκπαίδευση του υποκείμενου μοντέλο γκαουσιανής διαδικασίας με τις υπάρχουσες αρχιτεκτονικές και τις επιδόσεις τους. **(2) Δημιουργία:** δημιουργία της επόμενης αρχιτεκτονικής προς παρατήρηση βελτιστοποιώντας μια προσεκτικά καθορισμένη συνάρτηση απόκτησης. **(3) Παρατήρηση:** εύρεση της πραγματικής επίδοσης εκπαιδύοντας την αρχιτεκτονική νευρωνικού που δημιουργήθηκε.

Υπάρχουν τρεις κύριες προκλήσεις στο σχεδιασμό μιας μεθόδου για τη διαμόρφωση των νευρωνικών αρχιτεκτονικών με βελτιστοποίηση Bayes:

ΠΥΡΗΝΑΣ ΑΠΟΣΤΑΣΗΣ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑΣ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ ΓΙΑ ΓΚΑΟΥΣΣΙΑΝΗ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑ – Η πρώτη πρόκληση που πρέπει να αντιμετωπίσουμε είναι ότι ο χώρος NAS δεν είναι ένας Ευκλείδειος χώρος, κάτι που δεν ικανοποιεί την υπόθεση της παραδοσιακής γκαουσιανής διαδικασίας (Gaussian Process ή GP). Η απευθείας μετατροπή σε διάνυσμα της αρχιτεκτονικής δεν είναι πρακτική λόγω του αβέβαιου αριθμού επιπέδων και παραμέτρων που μπορεί να περιέχει. Δεδομένου ότι η γκαουσιανή διαδικασία είναι μια μέθοδος πυρήνα, αντί να μετατρέψουμε σε διάνυσμα μια αρχιτεκτονική νευρωνικού, προτείνουμε να αντιμετωπίσουμε την πρόκληση σχεδιάζοντας μια συνάρτηση πυρήνα νευρωνικού δικτύου. Η διαίσθηση πίσω από τη συνάρτηση πυρήνα είναι η απόσταση επεξεργασίας για τη μετατροπή μιας αρχιτεκτονικής νευρωνικού σε μια άλλη. Όσο περισσότερες επεξεργασίες απαιτούνται από τη μια αρχιτεκτονική στην άλλη, τόσο μεγαλύτερη είναι η απόσταση μεταξύ τους, άρα είναι λιγότερο παρόμοια.

Ορισμός πυρήνα: Ας υποθέσουμε ότι το f_a και το f_b είναι δύο νευρωνικά δίκτυα. Εμπνευσμένοι από τους πυρήνες βαθύ γράφου (Deep Graph Kernels) [96], προτείνουμε έναν πυρήνα απόστασης επεξεργασίας για νευρωνικά δίκτυα. Απόσταση επεξεργασίας εδώ σημαίνει πόσες πράξεις χρειάζονται για να μετατραπεί ένα νευρωνικό δίκτυο σε άλλο. Η συγκεκριμένη συνάρτηση πυρήνα ορίζεται ως:

$$\kappa(f_a, f_b) = e^{-\rho^2(d(f_a, f_b))} \quad (9)$$

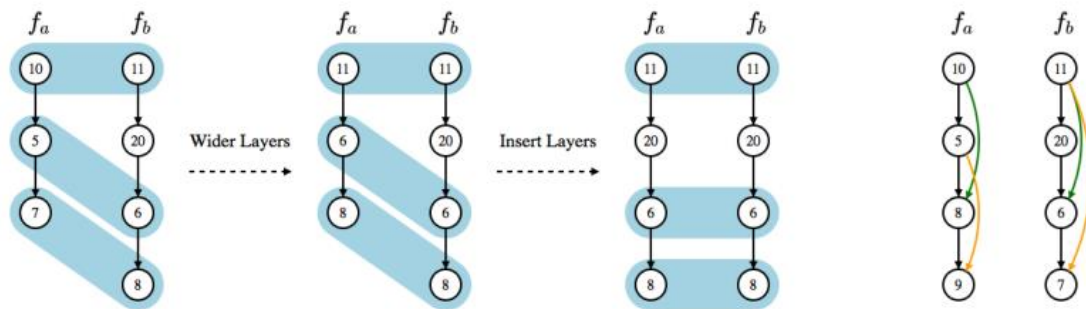
όπου η συνάρτηση $d(\cdot, \cdot)$ δηλώνει την απόσταση επεξεργασίας δύο νευρωνικών δικτύου, της οποίας το εύρος είναι $[0, +\infty)$ και το ρ είναι μια συνάρτηση μετασχηματισμού, η οποία αντιστοιχίζει την απόσταση από τον αρχικό μετρικό χώρο στην αντίστοιχη απόσταση στο νέο χώρο. Ο νέος χώρος κατασκευάζεται ενσωματώνοντας τον αρχικό μετρικό χώρο σε έναν νέο χρησιμοποιώντας το Θεώρημα Bourgain [97], το οποίο διασφαλίζει την εγκυρότητα του πυρήνα. Στο παράρτημα του [65] παρατίθεται η απόδειξη της εγκυρότητας της συνάρτησης πυρήνα.

Ο υπολογισμός της απόστασης επεξεργασίας δύο νευρωνικών δικτύων μπορεί να αντιστοιχηθεί στον υπολογισμό της απόστασης επεξεργασίας δύο γραφημάτων, το οποίο είναι

ένα NP-δύσκολο πρόβλημα. Αντιμετωπίζουμε το πρόβλημα προτείνοντας μια προσεγγιστική λύση ως εξής:

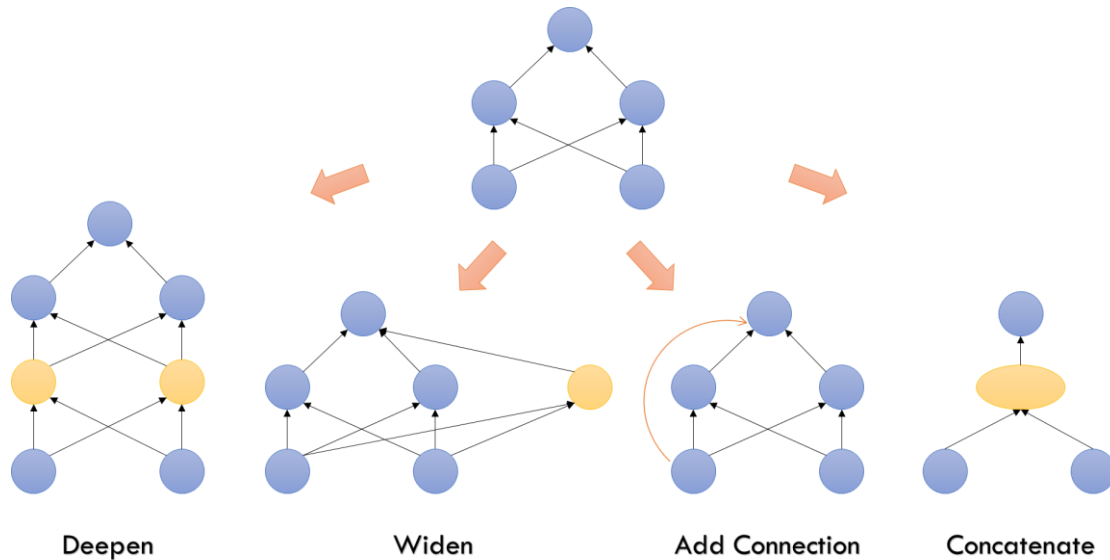
$$d(f_a, f_b) = D_l(L_a, L_b) + \lambda D_s(S_a, S_b) \quad (10)$$

όπου το D_l υποδηλώνει την απόσταση επεξεργασίας για τη μορφοποίηση των επιπέδων, δηλ. το ελάχιστο βημάτων επεξεργασίας που απαιτούνται για τη μετατροπή του f_a σε f_b εάν αγνοηθούν οι συνδέσεις παράλειψης, L_a και L_b είναι τα σύνολα των επιπέδων (layers) των νευρωνικών δικτύων f_a και f_b , D_s είναι η κατά προσέγγιση απόσταση επεξεργασίας για τη μορφοποίηση των συνδέσεων παράλειψης μεταξύ δύο νευρικών, S_a και S_b είναι τα σύνολα των σύνδεσης παράλειψης (skip-connections) των νευρωνικών δικτύων f_a και f_b , και το λ είναι ο παράγοντας εξισορρόπησης μεταξύ της απόστασης των επιπέδων και της απόστασης συνδέσεων παράλειψης.



Εικόνα 14: Πυρήνας νευρωνικών δικτύων. Λαμβάνοντας υπόψη δύο νευρωνικά δίκτυα f_a, f_b και αντιστοιχίσεις μεταξύ των παρόμοιων επιπέδων, το σχήμα δείχνει πώς τα επίπεδα του f_a μπορούν να αλλάξουν στα ίδια με το f_b . Ομοίως, οι συνδέσεις παράλειψης στο f_a . [65]

ΜΟΡΦΙΣΜΟΣ ΔΙΚΤΥΟΥ ΣΕ ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΤΡΩΜΑΤΟΣ – Ακολουθώντας το [88], ορίζουμε τις τέσσερις πράξεις μορφοποίησης δικτύου σε ένα νευρωνικό δίκτυο $f \in F$, οι οποίες μπορούν όλες να αντικατοπτριστούν στην αλλαγή ενός υπολογιστικού γράφου G . Η πρώτη πράξη είναι η εισαγωγή ενός επιπέδου στο f για να γίνει βαθύτερο, που συμβολίζεται ως $deep(G, u)$, όπου u είναι ο κόμβος που επισημαίνει τη θέση εισαγωγής του επιπέδου. Η δεύτερη πράξη είναι η διεύρυνση ενός κόμβου στο f που συμβολίζεται ως $wide(G, u)$, όπου u είναι ο κόμβος που αντιπροσωπεύει τον ενδιάμεσο τανυστή εξόδου που πρόκειται να διευρυνθεί. Η διεύρυνση εδώ θα μπορούσε να σημαίνει είτε το να γίνει μακρύτερο το διάνυσμα εξόδου του προηγούμενου πλήρως συνδεδεμένου επιπέδου του u είτε η προσθήκη περισσότερων φίλτρων στο προηγούμενο συνελκτικό επίπεδο του u , ανάλογα με τον τύπο του προηγούμενου επιπέδου. Η τρίτη πράξη είναι προσθήκη μιας πρόσθετης σύνδεσης από τον κόμβο u στον κόμβο v που συμβολίζεται ως $add(G, u, v)$. Το τέταρτο είναι η προσθήκη μιας συνενωτικής σύνδεσης από τον κόμβο u στον κόμβο v που συμβολίζεται ως $concat(G, u, v)$. Η παραπάνω πράξεις φαίνονται συνοπτικά στην **Εικόνα 15**.



Εικόνα 15: Οι τέσσερις πράξεις για τον μετασχηματισμό μιας αρχιτεκτονικής σε μία νέα θυγατρική της

ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΑΠΟΚΤΗΣΗΣ ΓΙΑ ΧΩΡΟ ΔΕΝΔΡΙΚΗΣ ΔΟΜΗΣ – Η

τρίτη πρόκληση για τη χρήση της μπεύζιανής βελτιστοποίησης για την καθοδήγηση του μορφισμού του δικτύου είναι η **βελτιστοποίηση της συνάρτησης απόκτησης $a(f)$** . Οι παραδοσιακές συναρτήσεις απόκτησης ορίζονται στον Ευκλείδειο χώρο. Οι μέθοδοι βελτιστοποίησης δεν ισχύουν για την αναζήτηση σε δομή δέντρου μέσω μορφισμού δικτύου και έτσι χρειαζόμαστε μια νέα μέθοδο για την αποτελεσματική βελτιστοποίηση της συνάρτησης απόκτησης στο χώρο δενδρικής δομής.

Για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος, επιλέγεται ως **συνάρτηση απόκτησης** το ανώ όριο εμπιστοσύνης (Upper-Confidence Bound ή UCB) [98], η οποία ορίζεται ως:

$$a(f) = UCB(f) = \mu(y_f) - \beta\sigma(y_f)$$

(11)

όπου y_f είναι το κόστος του νευρωνικού δικτύου f πάνω στο σύνολο εκπαίδευσης και επικύρωσης, $\mu(y_f)$ και $\sigma(y_f)$ είναι η εκ των υστέρων (posterior) μέση τιμή και τυπική απόκλιση της μεταβλητής y_f που εκτίμησε η γκαουσιανή διαδικασία και β είναι ο παράγοντας εξισορρόπησης μεταξύ των δύο για ρύθμιση ανάμεσα σε εξερεύνηση και εκμετάλλευση.

Ο χώρος δενδρικής δομής ορίζεται ως εξής: Κατά τη βελτιστοποίηση του $a(f)$, το f' πρέπει να λαμβάνεται από μια παρατηρούμενη αρχιτεκτονική $f^{(i)}$ στο ιστορικό αναζήτησης, H και μια ακολουθία πράξεων O για τη μετατροπή της αρχιτεκτονικής σε μία νέα. Ο μορφισμός της f σε f' μέσα από τις O συμβολίζεται ως $f' \leftarrow M(f, O)$, όπου $M(\cdot, \cdot)$ είναι η συνάρτηση που μετασχηματίζει την f μέσα από τις πράξεις του O . Επομένως, η αναζήτηση μπορεί να θεωρηθεί ως αναζήτηση δενδρικής-δομής, όπου κάθε κόμβος είναι μια αρχιτεκτονική νευρωνικού, της οποίας τα παιδιά μορφοποιούνται από αυτήν με πράξεις μορφοποίησης

δικτύου. Τελικά, η καλύτερη αρχιτεκτονική νευρωνικού f_{min} που δημιουργήθηκε και θα χρησιμοποιηθεί για την επόμενη παρατήρηση υπολογίζεται από την:

$$f_{min} = arg \min_{f'} a(f') \quad (12)$$

Εμπνεόμενοι από διάφορους ευριστικούς αλγόριθμους αναζήτησης για την εξερεύνηση του χώρου αναζήτησης δενδρικής δομής και μεθόδων βελτιστοποίησης που εξισορροπούν την εξερεύνηση και την εκμετάλλευση, προτείνεται μια νέα μέθοδος βασισμένη στην αναζήτηση A^* [99] και στην προσομοιωμένη απόπτωσης (simulated annealing) [100]. Ο αλγόριθμος A^* χρησιμοποιείται ευρέως για την αναζήτηση δέντρων. Διατηρεί μια ουρά προτεραιότητας κόμβων και συνεχίζει να επεκτείνει τον καλύτερο κόμβο στην ουρά. Εφόσον ο A^* εκμεταλλεύεται πάντα τον καλύτερο κόμβο, εισάγεται προσομοιωμένη απόπτωση για να εξισορροπηθεί η εξερεύνηση και η εκμετάλλευση ώστε, βάσει κάποιας πιθανότητας, να μην επιλέγει πάντα την εκτιμώμενη καλύτερη αρχιτεκτονική.

Ο αλγόριθμος λαμβάνει ως είσοδο την ελάχιστη θερμοκρασία T_{low} , τον ρυθμό μείωσης της θερμοκρασίας r για την προσομοιωμένη απόπτωση και το ιστορικό αναζήτησης H . Εξάγει μια νευρωνική αρχιτεκτονική $f \in H$ και μια ακολουθία πράξεων O για να μορφοποιηθεί η f στη νέα αρχιτεκτονική.

1. Αρχικά, οι αρχιτεκτονικές που αναζητήθηκαν προωθούνται στην ουρά προτεραιότητας Q , η οποία ταξινομεί τα στοιχεία σύμφωνα με την τιμή της συνάρτησης κόστους ή την τιμή της συνάρτησης απόκτησης. Εφόσον επιλέγεται ως συνάρτηση απόκτησης η UCB, η $a(f)$ είναι άμεσα συγκρίσιμη με τις τιμές $c^{(i)}$ του ιστορικού παρατήρησης.
2. Κατόπιν, εκτελούμε τον βρόχο που βελτιστοποιεί τη συνάρτηση απόκτησης. Ακολουθώντας την αναζήτηση A^* , σε κάθε επανάληψη, η αρχιτεκτονική f με τη χαμηλότερη τιμή συνάρτησης απόκτησης βγαίνει από την ουρά ($Q.pop$) για να επεκταθεί. Συγκεκριμένα, εκτελούνται πάνω της επαναληπτικά όλες οι ακολουθίες πράξεων $\{o\}$ του O για την μορφοποίησή τους μέσω της $M(f, \{o\})$ σε νέες αρχιτεκτονικές f' .
3. Ωστόσο, δεν ωθούνται όλα τα παιδιά στην ουρά προτεραιότητας για σκοπούς εξερεύνησης. Η απόφαση για το αν θα ωθηθεί στην ουρά λαμβάνεται με προσομοίωση απόπτωσης με τη συνθήκη $e^{\frac{c_{min}-a(f')}{T}} < Rand()$ όπου $e^{\frac{c_{min}-a(f')}{T}}$ είναι μια τυπική συνάρτηση αποδοχής σε προσομοίωση απόπτωσης και T η θερμοκρασία της απόπτωσης που με κάθε επανάληψη μειώνεται με ρυθμό r .
4. Τέλος επιστρέφονται η ελάχιστη τιμή c_{min} της συνάρτησης απόκτησης και η αντίστοιχη αρχιτεκτονική f_{min} .

Παρατήρηση: Το πιο κοινό ελάττωμα του μορφισμού του δικτύου είναι ότι μεγαλώνει μόνο το μέγεθος της αρχιτεκτονικής αντί και να τη συρρικνώνει. Έτσι, η χρήση του μορφισμού δικτύου για το NAS μπορεί να καταλήξει σε μια πολύ μεγάλη αρχιτεκτονική χωρίς αρκετή εξερεύνηση στις μικρότερες αρχιτεκτονικές. Ωστόσο, στην αναζήτηση δενδρικής δομής, δεν

επεκτείνουμε μόνο τα φύλλα αλλά και τους εσωτερικούς κόμβους, πράγμα που σημαίνει ότι οι μικρότερες αρχιτεκτονικές που βρίσκονται στο αρχικό στάδιο μπορούν να επιλεγούν πολλές φορές για να μεταμορφωθούν σε μικρότερες συγκριτικά αρχιτεκτονικές.

Τελικά, η παραπάνω μέθοδος AutoML θα επιστρέψει την καλύτερη αρχιτεκτονική νευρωνικού της αναζήτησης την οποία και χρησιμοποιούμε στη συνέχεια για την παραγωγή προβλέψεων. Οι προβλέψεις αυτές μπορούν να αξιοποιηθούν είτε σε εργαστηριακό περιβάλλον για την εκτίμηση του SOC κατά την εκτέλεση πειραμάτων με τους cyclers είτε σε εφαρμοσμένο επίπεδο εντός του BMS ενός ηλεκτρικού οχήματος.

4

Υλοποίηση και Αξιολόγηση

Εν συντομία, η υλοποίησή μας στηρίχθηκε στα Jupyter Notebooks και σε πολλές βιβλιοθήκες της Python. Ειδικά για την AutoML χρησιμοποιήθηκε το AutoKeras. Αφότου επιλέξαμε για σύνολο δεδομένων τα πειράματα των [101] προχωρήσαμε στην γραφική αναπαράστασή τους με EDA ώστε να συλλέξουμε πολύτιμες πληροφορίες για αυτά. Κάνοντας κατόπιν την κατάλληλη προεπεξεργασία ήμασταν σε θέση να εκπαιδεύσουμε μοντέλα AutoML για την πρόβλεψη του SOC. Τέλος, κατά την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων με διαφορετικά test sets οδηγηθήκαμε σε αξιολογικά συμπεράσματα που παραθέτονται στο τέλος αυτού του κεφαλαίου.

4.1 Τεχνολογίες

PYTHON - JUPYTER NOTEBOOKS – Η παρούσα εργασία υλοποιήθηκε σε Python 3.10.2 και εντός του προγραμματιστικού περιβάλλοντος που προσφέρουν τα Jupyter Notebooks. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιήθηκε το module notebook, έκδοση 6.4.11. Το **Jupyter Notebook** είναι μια διαδικτυακή εφαρμογή ανοιχτού κώδικα που επιτρέπει στον χρήστη να δημιουργεί και να μοιράζεται αρχεία που περιέχουν ζωντανό κώδικα, εξισώσεις, οπτικοποιήσεις δεδομένων και κείμενο και συντηρείται από την ομάδα του Project Jupyter⁴.

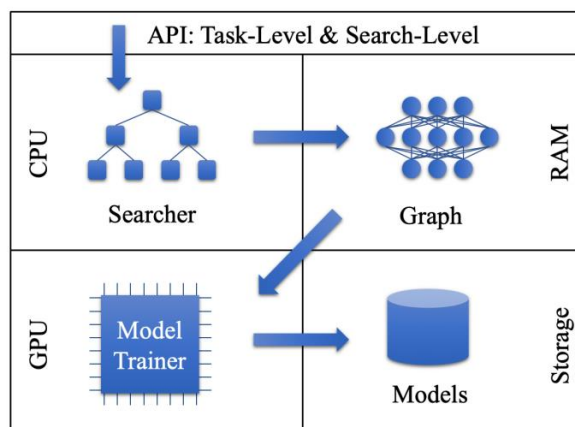
AUTO-KERAS – Για την εκπαίδευση των μοντέλων μας χρησιμοποιήθηκε το **Auto-Keras**, ένα σύστημα AutoML ανοιχτού κώδικα βασισμένο στο Keras που αναπτύχθηκε από το DATA Lab του Πανεπιστημίου του Τέξας με στόχο να κάνει την Μηχανική Μάθηση προσβάσιμη σε όλους⁵. Το πλαίσιο (framework) προτάσσει ένα νέο αλγόριθμο αποδοτικότερης αναζήτησης αρχιτεκτονικής νευρωνικού (NAS) για την αυτόματη ρύθμιση βαθιών νευρωνικών δικτύων, που επιτρέπει στην μπεϋζιανή βελτιστοποίηση με ένα υποκείμενο μοντέλο

⁴ <https://jupyter.org/>

⁵ <https://autokeras.com/>

γκαουσιανής διαδικασίας να κατευθύνει την μορφή του δικτύου. Μέσα από ένα πυρήνα νευρωνικών δικτύων και έναν αλγόριθμο βελτιστοποίησης με συνάρτηση απόκτησης (acquisition function) για την αποδοτικότερη εξερεύνηση του χώρου αναζήτησης, επιτυγχάνει ανώτερη επίδοση από αλγόριθμους τελευταίας τεχνολογίας όπως ο NASNet [51] και ο PNAS [102]. Ο κώδικας και η τεκμηρίωση βρίσκεται στο <https://autokeras.com>. Το σύστημα τρέχει παράλληλα σε CPU και GPU, με μια στρατηγική αναζήτησης που προσαρμόζεται στα διαφορετικά όρια μνήμης της GPU. [65]

Η αρχιτεκτονική συστήματος του Auto-Keras φαίνεται στην **Εικόνα 16**. Επιλέγουμε αυτήν την αρχιτεκτονική για να αξιοποιήσουμε πλήρως τους υπολογιστικούς πόρους τόσο της CPU όσο και της GPU, να χρησιμοποιήσουμε αποτελεσματικά τη μνήμη τοποθετώντας μόνο τις τρέχουσες χρήσιμες πληροφορίες στη μνήμη RAM και να αποθηκεύσουμε τα υπόλοιπα στις συσκευές αποθήκευσης, π.χ. σκληρούς δίσκους. Το επάνω μέρος είναι η διεπαφή προγραμματισμού εφαρμογής (Application Programming Interface ή API), η οποία καλείται απευθείας από



Εικόνα 16: Επισκόπηση συστήματος Auto-Keras. (1) Ο χρήστης καλεί το API. (2) Ο “Searcher” δημιουργεί αρχιτεκτονικές νευρωνικού στη CPU. (3) Το “Graph” δημιουργεί πραγματικά νευρωνικά δίκτυα με παραμέτρους στη μνήμη RAM από τις αρχιτεκτονικές νευρωνικού. (4) Το νευρωνικό δίκτυο αντιγράφεται σε GPU για εκπαίδευση. (5) Τα εκπαιδευμένα νευρωνικά δίκτυα αποθηκεύονται σε συσκευές αποθήκευσης. Ο Searcher ενημερώνεται με βάση τα αποτελέσματα της εκπαίδευσης. Τα βήματα (2) έως (5) θα επαναληφθούν μέχρι κάποιο όριο στον χρόνο ή τις δοκιμές. [65]

τους χρήστες. Είναι υπεύθυνη για την κλήση αντίστοιχων μονάδων μεσαίου επιπέδου για την ολοκλήρωση ορισμένων λειτουργιών. Ο “Searcher” είναι η μονάδα του αλγορίθμου αναζήτησης αρχιτεκτονικής νευρωνικού που περιέχει τον Μπεϋζιανό Βελτιστοποιητή (Bayesian Optimizer) και τη Γκαουσιανή Διαδικασία (Gaussian Process). Αυτοί οι αλγόριθμοι αναζήτησης εκτελούνται στη CPU. Το “Model Trainer” (εκπαιδευτής μοντέλου) είναι η μονάδα που είναι υπεύθυνη για τον υπολογισμό στις GPU. Εκπαιδεύει δεδομένα νευρωνικών δικτύων με τα δεδομένα εκπαίδευσης σε μια ξεχωριστή διαδικασία για παραλληλισμό. Το “Graph” είναι η μονάδα που επεξεργάζεται τα υπολογιστικά γραφήματα των νευρωνικών δικτύων, η οποία ελέγχεται από τον “Searcher” για τις λειτουργίες μορφοποίησης δικτύου. Η τρέχουσα αρχιτεκτονική νευρωνικού στο “Graph” τοποθετείται στη μνήμη RAM για ταχύτερη πρόσβαση. Το “Model Storage” είναι μια ομάδα εκπαιδευμένων μοντέλων. Δεδομένου ότι το μέγεθος των νευρωνικών δικτύων είναι μεγάλο και δεν μπορεί να αποθηκευτεί ολόκληρο στη μνήμη, το “Model Storage” αποθηκεύει όλα τα εκπαιδευμένα μοντέλα στις συσκευές αποθήκευσης. [65]

Μια τυπική ροή εργασίας για το σύστημα Auto-Keras είναι η εξής. Ο χρήστης ξεκίνησε μια αναζήτηση για την καλύτερη νευρωνική αρχιτεκτονική για το σύνολο δεδομένων. Το API έλαβε την κλήση, προεπεξεργάζεται το σύνολο δεδομένων και το διαβιβάζει στον “Searcher” για να ξεκινήσει η αναζήτηση. Ο μπεϋζιανός βελτιστοποιητής στον “Searcher” θα δημιουργήσει μια νέα αρχιτεκτονική χρησιμοποιώντας τη CPU. Καλεί τη μονάδα “Graph” για να χτίσει την αρχιτεκτονική που δημιουργήθηκε σε ένα πραγματικό νευρωνικό δίκτυο εντός της RAM. Η νέα αρχιτεκτονική αντιγράφεται στη GPU για να την εκπαιδεύσει ο Model Trainer με το σύνολο δεδομένων. Το εκπαιδευμένο μοντέλο αποθηκεύεται στο Model Storage. Η επίδοση του μοντέλου ανατροφοδοτείται πίσω στον “Searcher” για ενημέρωση της γκαουσιανής διαδικασίας. [65]

Η σχεδίαση του API ακολουθεί τον κλασικό σχεδιασμό του Scikit-Learn API [103, 104], ο οποίος είναι συνοπτικός και παραμετροποιήσιμος. Η εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου απαιτεί μόλις τρεις γραμμές κώδικα που καλούν τον κατασκευαστή (constructor), τη συνάρτηση προσαρμογής (fit) και πρόβλεψης (predict) αντίστοιχα. Για να καλύψουμε τις ανάγκες διαφορετικών χρηστών, σχεδιάσαμε δύο επίπεδα API. Το πρώτο επίπεδο ονομάζεται επίπεδο εργασίας. Οι χρήστες χρειάζεται να γνωρίζουν μόνο την εργασία τους, π.χ. ταξινόμηση εικόνας (Image Classification), παλινδρόμηση κειμένου (Text Regression) κλπ., για να χρησιμοποιήσουν το API. Το δεύτερο επίπεδο ονομάζεται επίπεδο αναζήτησης, το οποίο είναι για προχωρημένους χρήστες. Ο χρήστης μπορεί να αναζητήσει έναν συγκεκριμένο τύπο αρχιτεκτονικών νευρωνικών δικτύων, π.χ. πολυεπίπεδο perceptron (Multi-Layer Perceptron ή MLP), συνελκτικό νευρωνικό δίκτυο (Convolutional Neural Network ή CNN). Για να χρησιμοποιήσουν αυτό το API, πρέπει να προεπεξεργάζονται το σύνολο δεδομένων μόνοι τους και να γνωρίζουν ποιος τύπος νευρωνικού δικτύου, π.χ. CNN ή MLP, είναι ο καλύτερος για την εργασία τους. [65]

Ακόμα, έχουν εφαρμοστεί αρκετές ρυθμίσεις για τη βελτίωση της εμπειρίας χρήστη με το πακέτο Auto-Keras. Πρώτον, ο χρήστης μπορεί να επαναφέρει και να συνεχίσει μια προηγούμενη αναζήτηση που μπορεί να τερματιστεί κατά λάθος. Από την πλευρά των χρηστών, η κύρια διαφορά της χρήσης Auto-Keras σε σύγκριση με τα συστήματα AutoML που στοχεύουν σε ρηγά μοντέλα είναι η πολύ μεγαλύτερη κατανάλωση χρόνου. Δεδομένου ότι ένας ικανός αριθμός βαθιών νευρωνικών δικτύων εκπαιδεύεται κατά την αναζήτηση αρχιτεκτονικής νευρωνικού είναι πιθανό να συμβεί κάποιο ατύχημα που να σκοτώσει τη διαδικασία πριν ολοκληρωθεί η αναζήτηση. Επομένως, η αναζήτηση εξάγει όλες τις αρχιτεκτονικές νευρωνικών δικτύων που αναζητήθηκαν με τις εκπαιδευμένες παραμέτρους τους σε έναν συγκεκριμένο φάκελο στο δίσκο. Εφόσον παρέχεται η διαδρομή προς τον φάκελο, η προηγούμενη αναζήτηση μπορεί να αποκατασταθεί. Δεύτερον, ο χρήστης μπορεί να εξάγει τα αποτελέσματα αναζήτησης, τα οποία είναι αρχιτεκτονικές νευρωνικού, ως αποθηκευμένα

μοντέλα Keras για άλλες χρήσεις. Τρίτον, για προχωρημένους χρήστες, μπορούν να καθορίσουν όλα τα είδη υπερπαραμέτρων της διαδικασίας αναζήτησης και της διαδικασίας βελτιστοποίησης νευρωνικού δικτύου από τις προεπιλεγμένες παραμέτρους στη διεπαφή. [65]

PANDAS – Η **Pandas** είναι ένα γρήγορο, ισχυρό, ευέλικτο και εύκολο στη χρήση εργαλείο ανάλυσης και χειρισμού δεδομένων ανοιχτού κώδικα, χτισμένο πάνω στη γλώσσα προγραμματισμού Python.⁶ Εμείς την χρησιμοποιήσαμε για την ανάγνωση του αρχείου “.csv”, την αποθήκευσή του σε μορφή *pandas.DataFrame()* και την ανάλυση και διαχείριση των dataframes.

MATPLOTLIB – Το **Matplotlib** είναι μια ολοκληρωμένη βιβλιοθήκη για τη δημιουργία στατικών, κινούμενων και διαδραστικών απεικονίσεων στην Python. Προσφέρει τη δυνατότητα για δημιουργία γραφικών αναπαραστάσεων επιπέδου δημοσίευσης και διαδραστικών εικόνων που μπορείς να μεγεθύνεις, μετατοπίσεις και ενημερώσεις, προσαρμογή του οπτικού στυλ και της διάταξης, εξαγωγή σε πολλές μορφές αρχείων, ενσωμάτωση στο JupyterLab και τις γραφικές διεπαφές χρήστη (Graphical User Interfaces ή GUIs).⁷ Την χρησιμοποιήσαμε για την οπτικοποίηση των δεδομένων της EDA αλλά και της αξιολόγησης των μοντέλων μας μέσω γραφημάτων.

SCIKIT-LEARN – Το **Scikit-Learn** είναι μια δωρεάν βιβλιοθήκη μηχανικής εκμάθησης για την Python. Υποστηρίζει μηχανική εκμάθηση τόσο με επίβλεψη όσο και χωρίς επίβλεψη, παρέχοντας διάφορους αλγόριθμους για ταξινόμηση, παλινδρόμηση, ομαδοποίηση και μείωση διαστάσεων. Η βιβλιοθήκη έχει δημιουργηθεί χρησιμοποιώντας πολλές γνωστές βιβλιοθήκες, όπως οι NumPy και SciPy. Παίζει επίσης καλά με άλλες βιβλιοθήκες, όπως το Pandas και το Seaborn.⁸ Εμείς χρησιμοποιήσαμε την μετρική του για το μέσο τετραγωνικό σφάλμα.

TENSORFLOW – Το **TensorFlow** είναι μια δωρεάν βιβλιοθήκη λογισμικού ανοιχτού κώδικα για μηχανική μάθηση και τεχνητή νοημοσύνη. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μια σειρά δυνατοτήτων, αλλά έχει ιδιαίτερη εστίαση στην εκπαίδευση και την εξαγωγή συμπερασμάτων σε βαθιά νευρωνικά δίκτυα.⁹ Εμείς το χρησιμοποιήσαμε για την εισαγωγή των αποθηκευμένων μοντέλων μας κατά την αξιολόγησή τους.

Βιβλιοθήκη	Έκδοση
AutoKeras	1.0.19
Pandas	1.4.1
Matplotlib	3.5.1
Scikit-Learn	1.1.1
TensorFlow	2.8.0

⁶ <https://pandas.pydata.org/>

⁷ <https://matplotlib.org/>

⁸ <https://datagy.io/python-scikit-learn-introduction/>

⁹ <https://en.wikipedia.org/wiki/TensorFlow>

4.2 Συλλογή Δεδομένων

Προκειμένου να υλοποιήσουμε την προτεινόμενη προσέγγιση έπρεπε να προσδιορίσουμε με τι είδους δεδομένα θα τρέχαμε τα πειράματά μας. Οι δυνατότητες του εργαστηρίου μας δεν μας επέτρεψαν να διεξάγουμε ζωντανά πειράματα ώστε να πάρουμε ρεαλιστικές μετρήσεις κι έτσι αποφασίσαμε να καταφύγουμε σε κάποιο ανοιχτό dataset από αυτά που είναι διαθέσιμα στην ερευνητική κοινότητα για αυτόν ακριβώς τον λόγο.

Το dataset στο οποίο καταφύγαμε, αυτό των Severson et al. [101], σχεδιάστηκε να εξερευνήσει την επίδραση των πρωτοκόλλων ταχείας φόρτισης στη γήρανση των κυψελών. Κάθε κυψέλη, φορτίστηκε και εκφορτίστηκε κυκλικά με ένα από 72 διαφορετικά πρωτόκολλα ταχείας φόρτισης ενός ή δύο βημάτων και ένα κοινό πρωτόκολλο φόρτισης σταθερού ρεύματος (CC). Οι μετρήσεις λαμβάνονταν σε περιβάλλον σταθερής θερμοκρασίας από τον δεύτερο κύκλο και μέχρι κάθε κυψέλη να φτάσει το τέλος ζωής της (EOL), δηλ. 80% SOC. Το dataset περιέχει μετρήσεις ρεύματος, τάσης, θερμοκρασίας, χωρητικότητας φόρτισης και εκφόρτισης εντός κύκλου καθώς και ανά κύκλο μετρήσεις χωρητικότητας, εσωτερικής αντίστασης και χρόνου φόρτισης.

Ο λόγος που επιλέξαμε για τον υπολογισμό του SOC τα δεδομένα της παραπάνω μελέτης ήταν ακριβώς το ότι περιείχαν μετρήσεις από ολόκληρο τον κύκλο ζωής των μπαταριών, κάτι το οποίο και θέλαμε σχεδιαστικά να λάβουν υπόψη τα υποψήφια μοντέλα μας. Αντίθετα, άλλα datasets για προβλέψεις εντός μεμονωμένου κύκλου φόρτισης αποκλείστηκαν *de facto*.

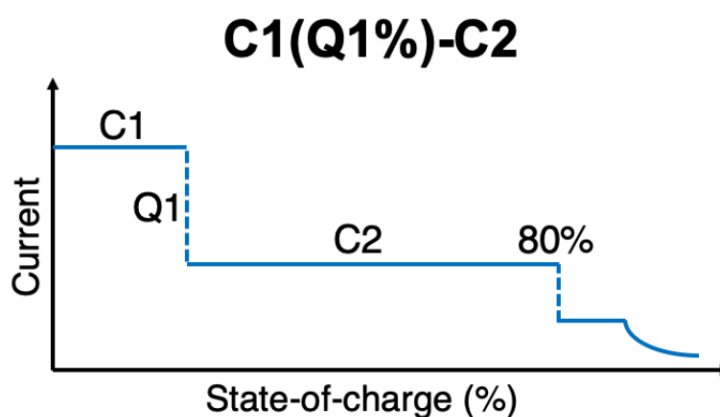
Παράλληλα, σύμφωνα με την ίδια την έρευνα, επειδή το αρνητικό ηλεκτρόδιο από γραφίτη διαμορφώνει καθοριστικά το ρυθμό εκφόρτισης σε αυτές τις κυψέλες, τα αποτελέσματά της θα μπορούσαν να φανούν χρήσιμα και σε άλλες μπαταρίες ιόντων λιθίου βασισμένες σε γραφίτη [101]. Αυτό, λοιπόν, θα προσέδιδε ακόμα μεγαλύτερη αξία στα αποτελέσματα που θα δημοσιεύαμε καθώς θα ήταν συμβατά και με άλλα use cases.

Στη συνέχεια συνοψίζουμε την τεκμηρίωση των παραπάνω datasets:

Χρησιμοποιήθηκαν 124 εμπορικές κυψέλες φωσφορικού σίδηρου λιθίου (LiFePO_4 ή LFP) υψηλής ισχύος με γραφίτη (κατασκευαστής A123 Systems, μοντέλο APR18650M1A). Οι κυψέλες έχουν ονομαστική χωρητικότητα 1.1Ah και ονομαστική τάση 3.3 V. Το προτεινόμενο πρωτόκολλο ταχείας φόρτισης από τον κατασκευαστή είναι 3.6 C (όπου 1 C είναι 1.1A) σταθερού ρεύματος και σταθερής τάσης (CC-CV). Όλες οι κυψέλες δοκιμάστηκαν μέσα σε κυλινδρικά εξαρτήματα με επαφές τεσσάρων σημείων σε έναν Arbin LBT cycler 48 καναλιών για δοκιμές μπαταριών. Οι δοκιμές πραγματοποιήθηκαν υπό σταθερή θερμοκρασία 30 °C σε έναν θάλαμο περιβάλλοντος (environmental chamber) της Amerex Instruments. Οι θερμοκρασίες του δοχείου κυψέλης (cell can) καταγράφηκαν αφαιρώντας ένα μικρό τμήμα της

πλαστικής μόνωσης και φέρνοντας σε επαφή ένα θερμοστοιχείο (thermocouple) τύπου T στο γυμνό μεταλλικό περίβλημα χρησιμοποιώντας θερμική εποξειδική ουσία (OMEGATHERM 201) και ταινία Kapton. [101]

Οι κυψέλες φορτίστηκαν και εκφορτίστηκαν κάτω από διαφορετικές υποψήφιες πολιτικές ταχείας φόρτισης και πανομοιότυπες συνθήκες εκφόρτισης. Συγκεκριμένα, από 0% μέχρι 80% state-of-charge (SOC) φορτίστηκαν με μία εκ των 72 διαφορετικών πολιτικών φόρτισης ενός ή δύο βημάτων. Κάθε βήμα είναι ένα ρυθμός C εφαρμοσμένος πάνω σε δεδομένο εύρος SOC. Για παράδειγμα, μια πολιτική δύο βημάτων θα μπορούσε να συνίσταται σε ένα βήμα φόρτισης 6 C από 0% μέχρι 50% SOC, ακολουθούμενο από ένα βήμα φόρτισης 4 C από 50% μέχρι 80% SOC. Σημειωτέον ότι 1 C ισούται με 1.1A (ή αλλιώς το απαιτούμενο ρεύμα για την πλήρη εκφόρτιση της ονομαστικής χωρητικότητας 1.1Ah σε 1 ώρα). [101]



Εικόνα 17: Απεικόνιση μιας δομής πολιτικής υπερβολικά γρήγορης φόρτισης (περίπου 10 λεπτά για 80% SOC). Όλες οι κυψέλες σε αυτό το dataset δοκιμάστηκαν με πολιτική φόρτισης δύο βημάτων. Το C1 και το C2 αναπαριστούν τα πρώτα και δεύτερα ρεύματα που εφαρμόστηκαν, ενώ το Q1 αναπαριστά την τιμή του SOC στην οποία πραγματοποιήθηκε η μετάβαση στα ρεύματα. Μετά από το 80% SOC, όλες οι κυψέλες φορτίστηκαν γαλβανοστατικά στο 1 C προς 3.6 V και κατόπιν ποτενσιοστατικά στα 3.6 V. Η άνω τιμή για κάθε ρεύμα περιορίζεται από το άνω όριο τάσης του κατασκευαστή (3.6 V). [101]

Οι 72 πολιτικές φόρτισης εκπροσωπούν διαφορετικούς συνδυασμούς από βήματα φόρτισης μεταξύ 0% και 80% SOC. Οι μέσοι ρυθμοί φόρτισης που προκλήθηκαν κυμαίνονταν από 3.6 C, τον προτεινόμενο ρυθμό ταχείας φόρτισης από τον κατασκευαστή, μέχρι 6 C, για την επίτευξη επίδοσης κυψελών ισχύος ρεύματος (current-generation power cells) υπό ακραίες συνθήκες ταχείας φόρτισης (φόρτιση σε περίπου 10 λεπτά), μία περιοχή με ιδιαίτερο εμπορικό ενδιαφέρον. Ο χρόνος φόρτισης από 0% σε 80% SOC κυμάνθηκε από 9 μέχρι 13.3 λεπτά. Η μέτρηση της εσωτερικής αντίστασης λαμβάνονταν κατά τη φόρτιση στο 80% SOC υπολογίζοντας τη μέση τιμή 10 παλμών ± 3.6 C με ένα πλάτος παλμού 30 ή 33 ms. Κατόπιν, όλες οι κυψέλες φορτίζονταν από 80% σε 100% SOC με ένα ομοιόμορφο 1C CC-CV βήμα φόρτισης σε 3.6 V και αποκοπή (cutoff) ρεύματος στα C/50. Τέλος, όλες οι κυψέλες εκφορτίζονταν με μια CC-CV εκφόρτιση με 4 C σε 2.0 V και αποκοπή ρεύματος στα C/50. Οι

αποκοπές τάσης που χρησιμοποιήθηκαν ακολουθούν τις προτεινόμενες από τον κατασκευαστή. [101]

Εν τέλει, παρήχθη ένα dataset που καλύπτει ένα μεγάλο εύρος κύκλων ζωής, από περίπου 150 μέχρι και 2,3000 κύκλοι (μέσος κύκλος ζωής 806 με τυπική απόκλιση 377). Παρόλο που η θερμοκρασία του θαλάμου ήταν ελεγχόμενη, οι θερμοκρασίες των κυψελών απέκλιναν μέχρι και 10 °C εντός ενός κύκλου εξαιτίας των μεγάλων ποσοτήτων θερμότητας που παράγονται κατά την φόρτιση και την εκφόρτιση. Η τάση, το ρεύμα, η θερμοκρασία και η εσωτερική αντίσταση μετρούνταν συνεχώς κατά τη διάρκεια των πειραμάτων. [101]

Στην παρούσα διπλωματική χρησιμοποιήσαμε τα δεδομένα από ένα και μόνο dataset με όνομα αρχείου *2017-05-12_5_4C-40per_3_6C_CH19.csv*. Ερμηνεύοντας, λοιπόν, το όνομα του αρχείου, το πείραμα πραγματοποιήθηκε:

- στις 12 Μαρτίου 2017 με
- 1^ο βήμα φόρτισης στα 5.4 C από 0% μέχρι 40% SOC και
- 2^ο βήμα φόρτισης στα 3.6 C από 40% μέχρι 80% SOC
- στο 19^ο κανάλι του cycler.

Τέλος, η μελέτη επισυνάπτει ότι στα πειράματα που πραγματοποιήθηκαν στις 12.05.2017, η παύση κατά την επίτευξη 80% SOC στην φόρτιση ήταν 1 min και η παύση μετά την εκφόρτιση ήταν 1 s.

4.3 Διερευνητική Ανάλυση Δεδομένων;

Έχοντας λάβει στα χέρια το dataset με τα δεδομένα μπαταριών, το επόμενο βήμα που χρειάστηκε να κάνουμε, προτού μπούμε καν στη διαδικασία να επεξεργαστούμε τα δεδομένα μας και να εκπαιδύσουμε μοντέλα μηχανικής μάθησης, ήταν να τα αναπαραστήσουμε γραφικά και να μελετήσουμε τη μορφή τους. Πραγματοποιήσαμε, με άλλα λόγια, μια διερευνητική ανάλυση δεδομένων (Exploratory Data Analysis ή EDA). Αυτό ήταν απαραίτητο ώστε να εξοικειωθούμε με αυτά, να αντιληφθούμε τις ιδιομορφίες τους, να εντοπίσουμε προβληματικά σημεία που χρήζουν παρεμβάσεων και γενικότερα να χαράξουμε την πολιτική επεξεργασίας δεδομένων που θα δώσει την καλύτερη είσοδο στα μοντέλα της εκπαίδευσης. **Άλλωστε, είναι ευρέως αποδεκτό ότι τα δεδομένα καθορίζουν το άνω φράγμα των δυνατοτήτων της Μηχανικής Μάθησης και τα μοντέλα και οι αλγόριθμοι μπορούν μόνο να το προσεγγίσουν αυτό το όριο [2].**

Εκτελώντας την εντολή *dataframe.info()* πήραμε σημαντικές πληροφορίες για το dataset, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 18. Στον οριζόντιο άξονα έχουμε 14 στήλες για τις τιμές 14 διαφορετικών χαρακτηριστικών. Από αυτά αξίζει να εστιάσουμε στο ρεύμα (Current), την τάση (Voltage) και τη θερμοκρασία (Temperature), τα οποία και θα χρειαστούν για την

εκπαίδευση των μοντέλων με τον τρόπο που αναδείχθηκε στην Ενότητα 3, καθώς και τη χωρητικότητα φόρτισης και εκφόρτισης (**Charge_Capacity** και **Discharge_Capacity**) τα οποία θα χρησιμεύσουν στον υπολογισμό του SOC. Στον κατακόρυφο άξονα έχουμε τις τιμές των δεδομένων για 1.204.300 χρονικές στιγμές. Παρατηρούμε ακόμη ότι δεν υπάρχουν τιμές null και όλα τα δεδομένα έχουν τύπο κινητής υποδιαστολής 64 bytes. Η μνήμη που δεσμεύουν είναι 137.8 MB.

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
Int64Index: 1204300 entries, 0 to 1204299
Data columns (total 14 columns):
#   Column                Non-Null Count  Dtype
---  -
0   Test_Time             1204300 non-null float64
1   DateTime              1204300 non-null float64
2   Step_Time            1204300 non-null float64
3   Cycle_Index          1204300 non-null float64
4   Cycle_Index          1204300 non-null float64
5   Current               1204300 non-null float64
6   Voltage               1204300 non-null float64
7   Charge_Capacity      1204300 non-null float64
8   Discharge_Capacity  1204300 non-null float64
9   Charge_Energy        1204300 non-null float64
10  Discharge_Energy     1204300 non-null float64
11  dV/dt                1204300 non-null float64
12  Internal_Resistance  1204300 non-null float64
13  Temperature          1204300 non-null float64
dtypes: float64(14)
memory usage: 137.8 MB
```

Εικόνα 18: Οι βασικές πληροφορίες του dataset, όπως αυτές συλλέχθηκαν από την εντολή `dataframe.info()`

Εκτελώντας την εντολή `dataframe.describe()` πήραμε σημαντικές πληροφορίες για το dataset, οι οποίες παρουσιάζονται εποπτικά στον Πίνακα 1 (Εικόνα 18).

Ως προς τον κύκλο φόρτισης (**Cycle_Index**), παρατηρούμε ότι παρουσιάζει ακέραιες τιμές από το 0 μέχρι το 879. Συνεπώς, το dataset διατρέχει 880 κύκλους φόρτισης και εκφόρτισης και, κατ' επέκταση, τόσο είναι και η διάρκεια ζωής της μπαταρίας.

Ως προς το πεδίο **DateTime** διαπιστώνουμε ότι είναι σε μορφή timestamp. Συνεπώς, επιλέξαμε να το μετατρέψουμε από τύπο timestamp σε τύπο datetime με την εντολή `datetime.fromtimestamp()` προκειμένου να έχουμε ορθότερη αντίληψη του χρόνου κατά την δημιουργία των γραφημάτων.

Ως προς την τάση (**Voltage**) εντοπίζουμε μεγιστοποίηση στο 3.6, η οποία είναι και η ονομαστική τάση του κατασκευαστή.

Ως προς τις χωρητικότητες φόρτισης και εκφόρτισης (**Charge_Capacity** και **Discharge_Capacity**), παρατηρούμε ότι ξεκινούν από το μηδέν και μεγιστοποιούνται η πρώτη στο 1.18 και η δεύτερη στο 1.68.

	min	max	mean	std
Test_Time	0	456187.74	157265.34	128500.58
DateTime	1494645451	1497462115	1495788629	911511
Step_Time	-1190.60	17124.46	739.12	856.94
Step_Index	0	12	7.27	2.79
Cycle_Index	0	879	344.82	286.55
Current	-4.47	5.94	0.05	3.16
Voltage	2.00	3.6	3.11	0.48
Charge_Capacity	0	1.18	0.68	0.45
Discharge_Capacity	0	1.68	0.33	0.38
Charge_Energy	0	4.03	2.35	1.58
Discharge_Energy	0	5.17	1.00	1.16
dV/dt	-0.14	0.76	0	0.05
Internal_Resistance	0	0.02	0.02	0
Temperature	25.57	38.40	32.28	1.61

Πίνακας 1: Το ελάχιστο, το μέγιστο, η μέση τιμή και η τυπική απόκλιση των 14 χαρακτηριστικών του dataset

Ακολουθώντας την προτεινόμενη προσέγγιση, θα εστιάσουμε στο εξής την ανάλυσή μας μόνο στα μεγέθη του ρεύματος, της τάσης και της θερμοκρασίας, καθώς από αυτά θα προκύψουν και τα χαρακτηριστικά εκπαίδευσης των μοντέλων μας.

Πυκνότητα Πιθανότητας

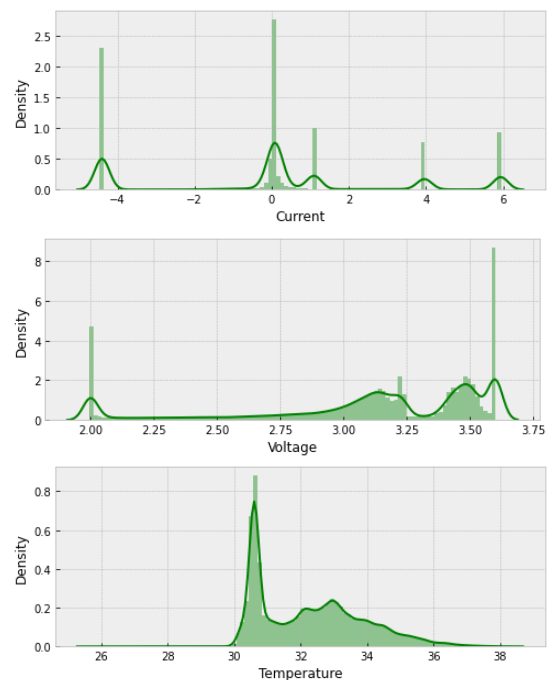
Στην **Εικόνα 19** αναπαριστώνται τα γραφήματα πυκνότητας πιθανότητας του ρεύματος, της τάσης και της θερμοκρασίας. Από αυτά, το μεγαλύτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει το ρεύμα. Από τα δεδομένα που αναπτύχθηκαν στην προηγούμενη ενότητα, γνωρίζουμε ότι η μπαταρία της οποίας μελετάμε τα δεδομένα φορτίστηκε στα:

- $5.4 C = 5.4 * 1.1 A = 5.94 A$ από 0% σε 50% SOC
- $3.6 C = 3.6 * 1.1 A = 3.96 A$ από 50% σε 80% SOC
- $1.0 C = 1.0 * 1.1 A = 1.10 A$ από 80% σε 100% SOC

και εκφορτίστηκε στα:

- $4 C = 4 * 1.1 A = 4.4 A$

Επανερχόμενοι, λοιπόν, στο γράφημα πυκνότητας πιθανότητας του ρεύματος, παρατηρούμε ευδιάκριτα τα spikes που εμφανίζονται γύρω από τις παραπάνω τιμές, δηλ 5.94, 3.96, 1.1 (θετικά αφού πρόκειται για φόρτιση και εισροή ρεύματος) και -4.4 (αρνητικό αφού πρόκειται



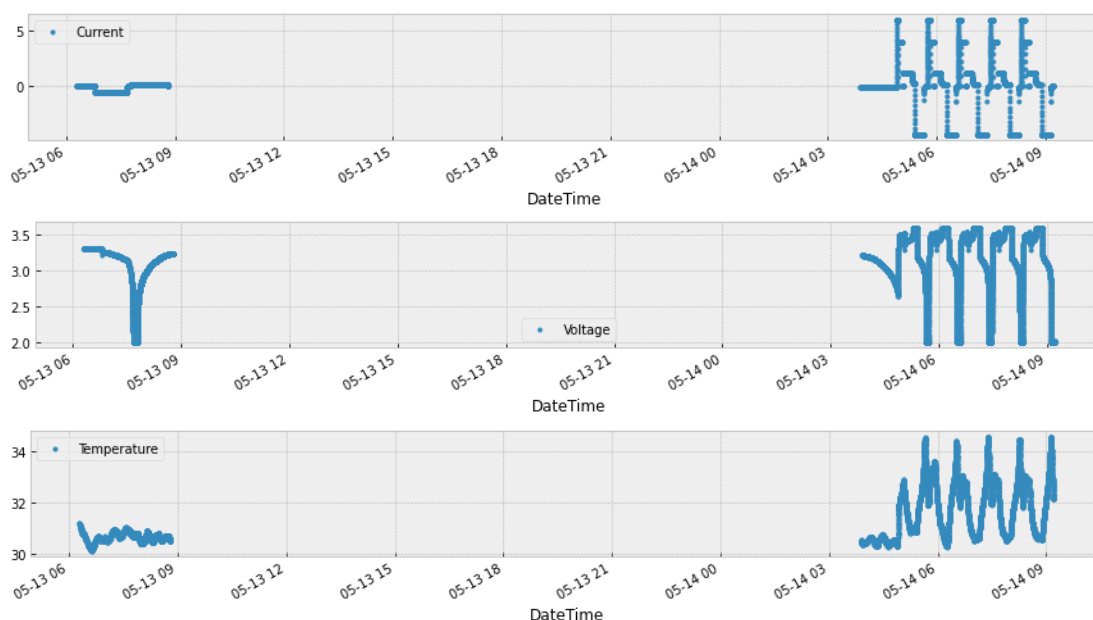
Εικόνα 19: Πυκνότητα Πιθανότητας του Ρεύματος, της Τάσης και της Θερμοκρασίας

για εκφόρτιση και εκροή ρεύματος). Συμπληρωματικά, παρατηρούμε ένα πέμπτο spike γύρω από το μηδέν που εκφράζει τις παύσεις που έγιναν κατά τη διάρκεια των πειραμάτων.

Ως προς την πυκνότητα πιθανότητας της τάσης, παρατηρούμε μεγάλα spikes στις τιμές 3.6, δηλ. την ονομαστική τάση της μπαταρίας, και 2, δηλ. την τάση εκφόρτισης σύμφωνα με τα πειράματα των Severson et co.

Πρώτοι 5 κύκλοι

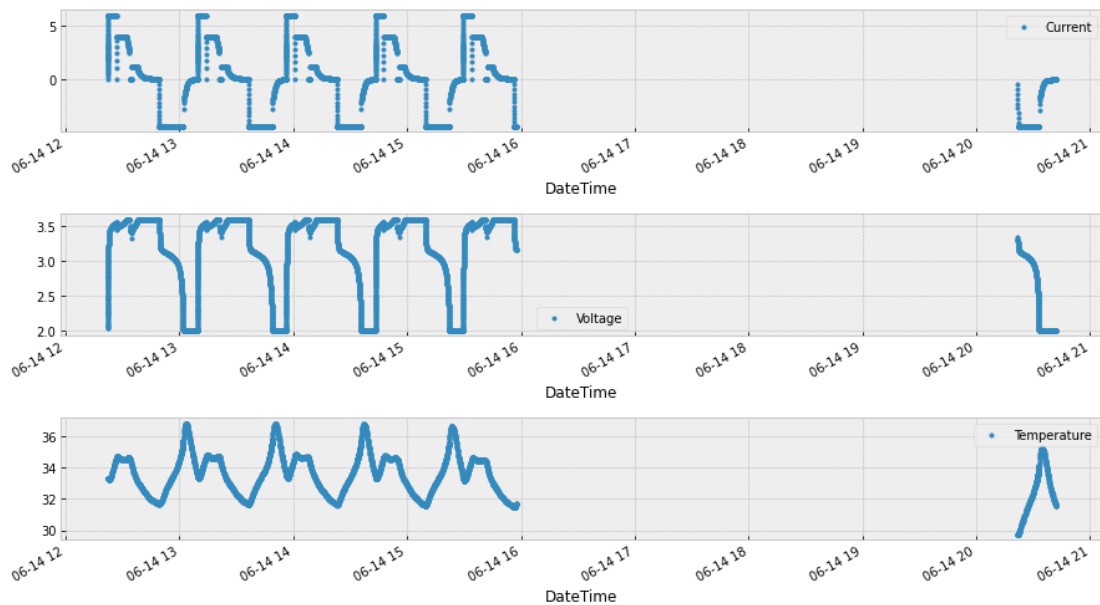
Σχεδιάζοντας τους πρώτους πέντε κύκλους της μπαταρίας για τα τρία μεγέθη, διαπιστώνουμε ότι ο πρώτος κύκλος διαφέρει ριζικά από τους επόμενους τόσο από τις τιμές που λαμβάνουν τα μεγέθη, όσο και από τη χρονική στιγμή που έλαβε χώρα (ένα εικοσιτετράωρο πριν την διενέργεια των επόμενων). Κατόπιν, παρατηρούμε ότι επέρχεται κανονικότητα στη διαδικασία φόρτισης και εκφόρτισης της μπαταρίας με τις κυματομορφές του ρεύματος, της τάσης και της θερμοκρασίας να εμφανίζουν αισθητή περιοδικότητα.



Εικόνα 20: Οι πρώτοι πέντε κύκλοι φόρτισης του Ρεύματος, της Τάσης και της Θερμοκρασίας

Τελευταίοι 5 κύκλοι

Σχεδιάζοντας τους τελευταίους πέντε κύκλους της μπαταρίας για τα τρία μεγέθη, διαπιστώνουμε ότι ο τελευταίος κύκλος διαφέρει ριζικά από τους προηγούμενους τόσο από τις τιμές που λαμβάνουν τα μεγέθη, όσο και από τη χρονική στιγμή που έλαβε χώρα (ένα εικοσιτετράωρο πριν την διενέργεια των επόμενων). Κατόπιν, παρατηρούμε ότι επέρχεται κανονικότητα στη διαδικασία φόρτισης και εκφόρτισης της μπαταρίας με τις κυματομορφές του ρεύματος, της τάσης και της θερμοκρασίας να εμφανίζουν αισθητή περιοδικότητα.

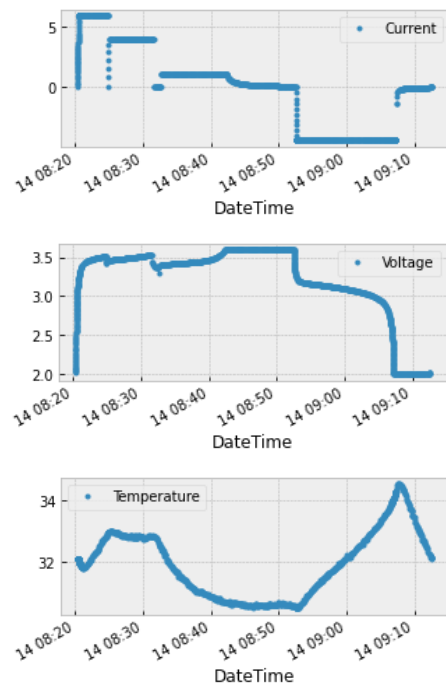


Εικόνα 21: Τελευταίοι πέντε κύκλοι του Ρεύματος, της Τάσης και της Θερμοκρασίας

4^{ος} Κύκλος

Στην **Εικόνα 22** επιχειρήσαμε να μελετήσουμε τη συμπεριφορά των τριών μεγεθών εντός ενός κύκλου φόρτισης, εν προκειμένω του 4^{ου}. Κατά τ' άλλα, εύκολα διαπιστώσαμε ότι ανάλογα μοτίβα απαντώνται στο σύνολο του dataset.

Εστιάζοντας, λοιπόν, εκ νέου στο γράφημα του ρεύματος, παρατηρούμε και πάλι να λαμβάνει τις πέντε διακριτές τιμές που αναφέραμε και προηγουμένως, δηλ. 5.94, 3.96, 1.1, -4.4 και 0. Η επιπρόσθετη πληροφορία έγκειται στην αλληλουχία τους η οποία ακολουθεί τη σειρά που περιγράψαμε αναλυτικά για τα τρία στάδια φόρτισης και την εκφόρτιση, με παρεμβαλλόμενες παύσεις μηδενισμού του ρεύματος. [105]

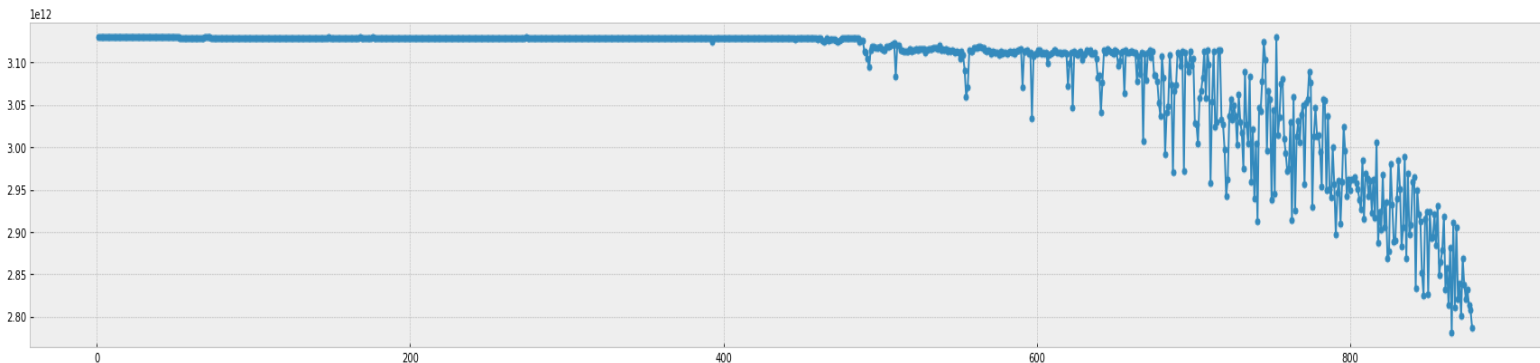


Εικόνα 22: Ο 4^{ος} κύκλος φόρτισης του Ρεύματος, της Τάσης και της Θερμοκρασίας

Εν συνεχεία, το γράφημα της τάσης είναι προφανές ότι ακολουθεί κατά γράμμα τις μεταβολές του ρεύματος μέσω εκθετικών καμπυλών μετάβασης, ενώ για το διάγραμμα της θερμοκρασίας αξίζει να επισημανθεί ότι η μεγαλύτερη πτώση της σημειώνεται κατά την πλήρη φόρτιση της μπαταρίας (φαίνεται μάλιστα ότι «κρυώνει» πλήρως αγγίζοντας οριακά θερμοκρασία θαλάμου στους 30 °C) και η μεγιστοποίησή της κατά την πλήρη εκφόρτιση (όπου ξεπερνάει τους 34 °C).

Διάρκεια Κύκλου Φόρτισης

Στη συνέχεια απεικονίσαμε τη διάρκεια του κύκλου φόρτισης από τον πρώτο (μηδενικό) κύκλο μέχρι και τον τελευταίο (879^ο). Είναι αισθητή η μείωση της διάρκειάς του από τη μέση της ζωής της μπαταρίας και μετά, γεγονός που οφείλεται στην μείωση της ικανότητας της μπαταρίας να φορτιστεί στο μέγιστο των κατασκευαστικών δυνατοτήτων της. Μικρότερη μέγιστη χωρητικότητα συνεπάγεται ταχύτερη φόρτιση και εκφόρτιση και κατ' επέκταση μικρότερη διάρκεια κύκλου φόρτισης.



Εικόνα 23: Διάρκεια Κύκλου Φόρτισης

4.4 Προετοιμασία Δεδομένων

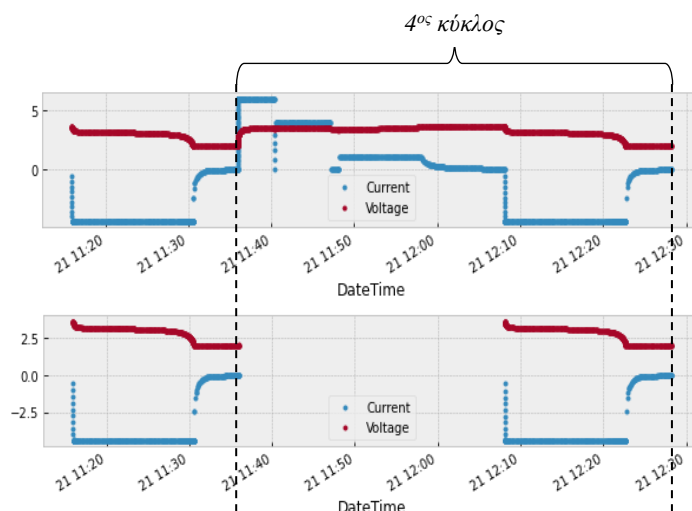
4.4.1 Καθαρισμός δεδομένων

Έχοντας πλέον μελετήσει τη μορφή των δεδομένων που έχουμε στα χέρια μας, αναδείχθηκαν ορισμένες παρατηρήσεις για την καλύτερη δυνατή επεξεργασία τους ώστε να βελτιστοποιήσουμε την εκπαίδευση των μοντέλων μας. Έτσι, λοιπόν, προχωρήσαμε με την απομάκρυνση ορισμένων δειγμάτων ως εξής:

Κατά την EDA διαπιστώσαμε ότι ο πρώτος και ο τελευταίος (879^{ος}) κύκλος φόρτισης αποτελούσαν οριακές περιπτώσεις με προφανείς ανωμαλίες (irregularities) και συνεπώς κρίθηκε απαραίτητη η αφαίρεσή τους, προκειμένου να μην επηρεαστεί αρνητικά η εκπαίδευση των μοντέλων. Η συνθήκη που χρησιμοποιήθηκε ήταν με βάση τον δείκτη κύκλου και συγκεκριμένα **Cycle_Index==0** και **Cycle_Index==879** αντίστοιχα.

Αυτό στην πράξη έγινε μέσα από συνθήκη για το πρόσημο του ρεύματος (στήλη Current). Συγκεκριμένα, παρατηρώντας ότι το ρεύμα έχει θετικό πρόσημο όταν εισέρχεται στην μπαταρία κατά την φόρτιση και αρνητικό όταν εξέρχεται κατά την εκφόρτιση, κρατήσαμε μόνο τα δείγματα που πληρούν τη συνθήκη **Current<0**. Στην **Εικόνα 24** δίνεται ένα παράδειγμα για το πώς απεικονίζονται το ρεύμα και η τάση του 4^{ου} κύκλου φόρτισης-εκφόρτισης ως

συνάρτηση του χρόνο πριν και μετά την αφαίρεση του κύκλου φόρτισης για την εξακρίβωση της αποτελεσματικότητας της παραπάνω συνθήκης. Πράγματι, είναι φανερό ότι στο κάτω σχήμα απουσιάζουν όλες οι θετικές τιμές του ρεύματος και παραμένουν οι αρνητικές που εκφράζουν την εκφόρτιση.



Εικόνα 24: Το ρεύμα και η τάση πριν και μετά την αφαίρεση των κύκλων φόρτισης

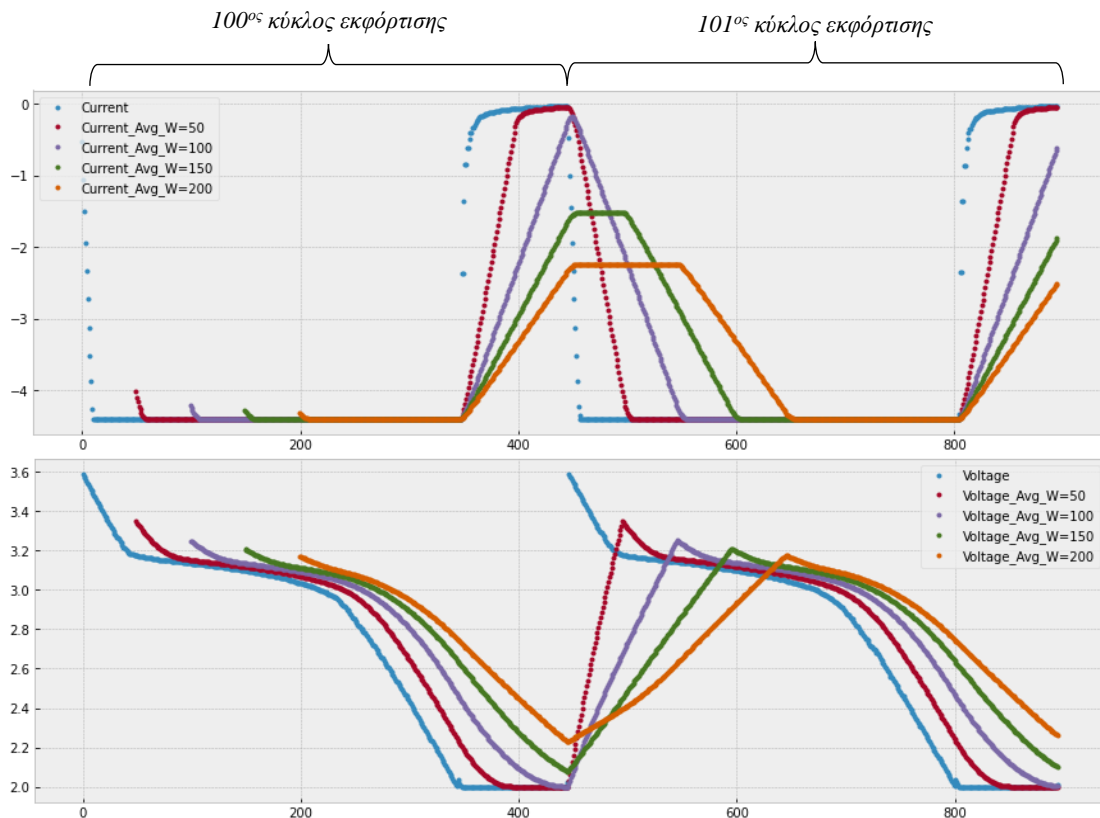
4.4.2 Μηχανική

Χαρακτηριστικών

Σύμφωνα με την προτεινόμενη προσέγγιση, αποφασίσαμε να τροφοδοτήσουμε τα προς εκπαίδευση μοντέλα μας με δεδομένα τάσης, θερμοκρασίας, μέσου ρεύματος και τάσης, εσωτερικού μετρητή κύκλου φόρτισης και κατάστασης φόρτισης (SOC). Απώτερος στόχος είναι η εύρεση της αρχιτεκτονικής κάποιου νευρωνικού σαν αυτού της **Εικόνα 11**.

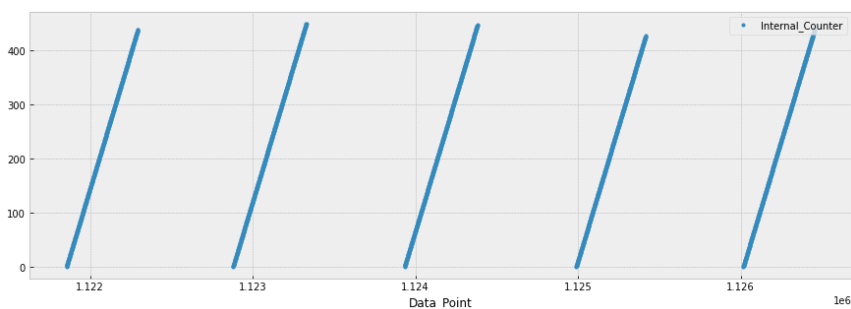
Όσον αφορά την **Τάση** και τη **Θερμοκρασία** κάθε χρονικής στιγμής, δεν χρειάστηκε να κάνουμε κάποια ειδική διαδικασία, καθώς περιλαμβάνονταν αυτούσια στο dataset των [101] για την εκάστοτε χρονική στιγμή. Συνεπώς, κρατήσαμε τις συγκεκριμένες στήλες ως έχουν. Απεναντίας, τα άλλα τέσσερα χαρακτηριστικά χρειάστηκε να κατασκευαστούν.

Για τον υπολογισμό του **Μέσου Ρεύματος** και της **Μέσης Τάσης** χρησιμοποιήθηκαν οι συναρτήσεις *rolling()* και *mean()* της βιβλιοθήκης **pandas.DataFrame**. Όσα προαναφέρθηκαν σχετικά με την επίδραση του κυλιόμενου παραθύρου στο πρόβλημά μας γίνονται περισσότερο κατανοητά στην **Εικόνα 25**, όπου παρουσιάζονται το μέσο ρεύμα και η μέση τάση για τους κύκλους φόρτισης υπ' αριθμόν 100 και 101 για τιμές παραθύρου κυμαινόμενες από 50 μέχρι και 200 δείγματα. Η πρώτη διαπίστωση που κάνουμε είναι ότι η συνάρτηση μηδενίζει την έξοδό της για χρονικές στιγμές που δεν έχουν επαρκή αριθμό προγενέστερων δειγμάτων για να καλύψουν το εύρος του παραθύρου. Κατ' επέκταση, με την αύξηση του μεγέθους του, η αρχή της γραφικής παράστασης μετατοπίζεται όλο και δεξιά. Παράλληλα, είναι ορατή και η εξομάλυνση που προκαλείται σε σχέση με την μητρική γραφική παράσταση (με μπλε χρώμα). Συγκεκριμένα, τα ακρότατα τείνουν να προσεγγίσουν την ολική μέση τιμή του κύκλου και οι κλίσεις της μεταβολής ρεύματος και τάσης μειώνονται με όριο στο μηδέν.



Εικόνα 25: Σύγκριση των αρχικών τιμών του ρεύματος και της τάσης με τις μέσες τιμές τους για διαφορετικά μήκη κυλιόμενου παραθύρου (50, 100, 150 και 200). Πρόκειται για τους κύκλους εκφόρτισης 100 και 101.

Η κατασκευή του **Εσωτερικού Μετρητή Κύκλου** υπό το όνομα `Internal_Counter` ήταν μια εξίσου εύκολη διαδικασία. Ουσιαστικά πρόκειται για έναν μετρητή που διατρέχοντας τις μετρήσεις μας αυξάνεται σε κάθε νέο δείγμα και μηδενίζεται εκ νέου στην περίπτωση που αυτό ανήκει σε νέο κύκλο φόρτισης.

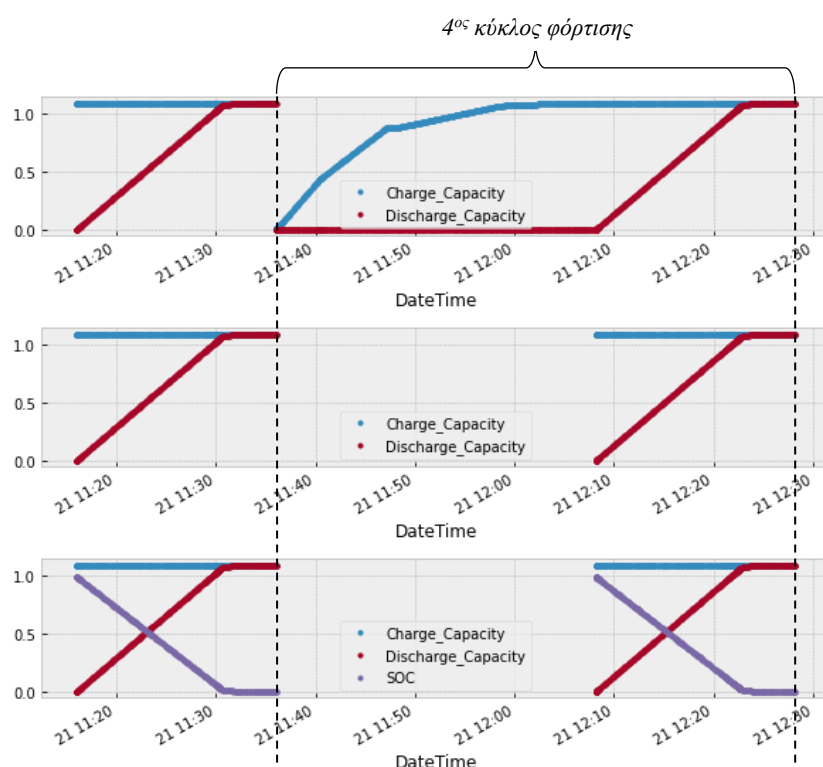


Εικόνα 26: Εσωτερικός Μετρητής Κύκλου για τους κύκλους 800 με 804

Ως προς τον υπολογισμό του **SOC**, χρησιμοποιήσαμε την Εξίσωση (2) που παρουσιάσαμε στην προτεινόμενη προσέγγιση. Θυμίζουμε ότι σύμφωνα με τον ορισμό των Chemali et co., το SOC είναι το εναπομείναν φορτίο εντός της μπαταρίας και υπολογίζεται ως το λόγο της υπολειπόμενης χωρητικότητας της μπαταρίας προς την ονομαστική χωρητικότητα. Για τις ανάγκες της δικής μας εφαρμογής του τύπου, υπολογίσαμε την υπολειπόμενη χωρητικότητα κάθε χρονικής στιγμής αφαιρώντας την χωρητικότητα εκφόρτισης

(Discharge_Capacity) της τρέχουσας χρονικής στιγμής από τη μέγιστη χωρητικότητα φόρτισης (Charge_Capacity) του τρέχοντος κύκλου. Η τιμή της ονομαστικής χωρητικότητας (Nominal_Capacity) τέθηκε ίση με 1.1Ah σύμφωνα με τις προδιαγραφές του κατασκευαστή που αναγράφουν οι Severson et co.

Για την καλύτερη κατανόηση του παραπάνω υπολογισμού, αναπαραστήσαμε γραφικά στην Εικόνα 27 τις χωρητικότητες φόρτισης και εκφόρτισης κατά τον 4ο κύκλο φόρτισης-εκφόρτισης. Στο επόμενο γράφημα δείχνουμε πώς αφαιρούνται με επιτυχία τα δείγματα του κύκλου φόρτισης μετά τον καθαρισμό δεδομένων που περιγράψαμε προηγουμένως. Τέλος, αναπαριστούμε γραφικά και το SOC έτσι όπως υπολογίστηκε συναρτήσει του Charge_Capacity, του Discharge_Capacity και του Nominal_Capacity.



Εικόνα 27: α) Οι χωρητικότητες φόρτισης και εκφόρτισης κατά τον 4^ο κύκλο φόρτισης-εκφόρτισης.
β) Οι χωρητικότητες φόρτισης και εκφόρτισης μετά την αφαίρεση του κύκλου φόρτισης.
γ) Οι χωρητικότητες φόρτισης και εκφόρτισης συγκριτικά με το SOC που υπολογίζεται μέσω αυτών.

4.5 Εύρεση καλύτερου μοντέλου με Auto-ML

4.5.1 Παραγωγή Μοντέλου

Το Auto Keras υποστηρίζει μια σειρά από επιλογές μηχανικής μάθησης. Στη δική μας περίπτωση επιλέξαμε την **παλινδρόμηση δομημένων δεδομένων** (structured data regression)

καθώς είναι συνήθης προσέγγιση σε τέτοιου είδους προβλήματα (το SOC είναι ένα συνεχές μέγεθος και τα δεδομένα εκπαίδευσης αποτελούνται από πέντε διακριτά χαρακτηριστικά).

Έχοντας επιλέξει το κατάλληλο task του AutoKeras, έμενε να προσδιορίσουμε τα πειράματά μας. Ωστόσο, δεν μπορούσαμε να επέμβουμε στις παραμέτρους και τις υπερπαραμέτρους των νευρωνικών μας καθώς όλα αυτά ρυθμίζονται αυτοματοποιημένα εντός της AutoML που καλείται να λειτουργήσει με αυτόν ακριβώς τον τρόπο, ως μαύρο κουτί. Συνεπώς, επιχειρήσαμε να πειραματιστούμε με παραμέτρους που αφορούν αφενός τα δεδομένα εκπαίδευσης και ελέγχου που τροφοδοτούμε στο black box και αφετέρου τις ίδιες τις δομές του AutoKeras.

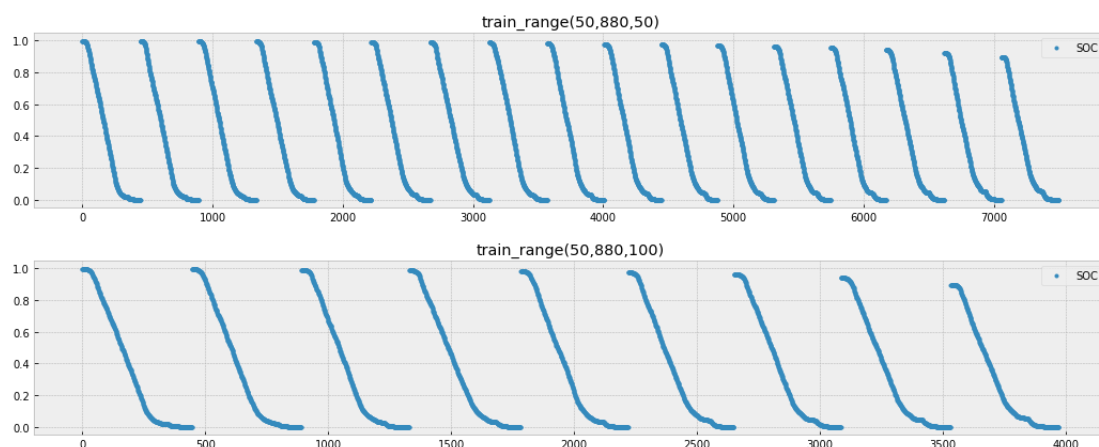
Παράμετροι που αφορούν τα δεδομένα εκπαίδευσης και ελέγχου

Η πρώτη παράμετρος που έπρεπε να προσδιορίσουμε ήταν το **σύνολο εκπαίδευσης** (training set). Η επιλογή των χαρακτηριστικών είχε γίνει φυσικά από πριν. Ωστόσο, θα ήταν άστοχο να τοφοδοτήσουμε το μοντέλο μας και με τους 878 κύκλους εκφόρτισης (που απέμειναν μετά και από τον καθαρισμό των δεδομένων) επειδή θα αυξάναμε δραματικά τον χρόνο εκπαίδευσης χωρίς ανάλογο κέρδος στην επίδοση του μοντέλου μας. Μην ξεχνάμε άλλωστε ότι για το πρώτο μισό της ζωής της μπαταρίας οι κύκλοι φόρτισης είναι πρακτικά ίδιοι και μόλις προς το τέλος της έχουμε αξιόλογες μεταβολές στις τιμές των μεγεθών, όπως ακριβώς φάνηκε και από την Εικόνα 23. Το ζητούμενο λοιπόν είναι η ποιότητα των δεδομένων και όχι απλώς η αφθονία του. Έτσι, αποφασίσαμε ότι θα ήταν αποτελεσματικότερο να απομονώσουμε κάποιους αντιπροσωπευτικούς κύκλους εκφόρτισης από όλο το εύρος των δεδομένων και να πραγματοποιήσουμε μόνο πάνω σε αυτούς την εκπαίδευση.

Για την καλύτερη συστηματοποίηση των πειραμάτων μας καταλήξαμε να απομονώσουμε κύκλους εκφόρτισης σταθερής απόστασης μεταξύ τους μέσα από τη συνάρτηση `range()` της `rython`. Έτσι, με το συμβολισμό `“range(50,880,100)”` εννοούμε ότι το training set περιλαμβάνει τους κύκλους 50, 150, 250, 350, 450, 550, 650, 750 και 850 ενωμένους συνεχόμενα μεταξύ τους. Στην πράξη, εκπαιδεύσαμε μοντέλα με δύο training sets, στα οποία δώσαμε τα ονόματα `“train_range(50,880,50)”` και `“train_range(50,880,100)”` με την προφανή ερμηνεία που αυτά συνεπάγονται για τους κύκλους που συμπεριλάβαμε στο καθένα.

Σημειωτέων ότι στον κώδικα που αναπτύξαμε το training set είναι πλήρως παραμετροποιημένο, για να μπορεί κάποιος να εκπαιδεύσει τα μοντέλα του υπό διαφορετικές συνθήκες. Για το σχηματισμό του, δημιουργήσαμε μια μεταβλητή, η οποία παίρνει ως τιμή μια λίστα με indexes κύκλων εκφόρτισης. Κατόπιν, τα μοντέλα εκπαιδεύονται πάνω στην ένωση των επιλεγμένων κύκλων εκφόρτισης.

Στην **Εικόνα 28** φαίνεται το SOC των “train_range(50,880,50)” και “train_range(50,880,100)”.



Εικόνα 28: Το SOC για τα δύο training sets που δημιουργήσαμε
α) “train_range(50,880,50)” με τους κύκλους εκφόρτισης 75, 125, 175, ..., 875 και
β) “train_range(50,880,100)” με τους κύκλους εκφόρτισης 75, 175, 275, ..., 875

Η επόμενη παράμετρος που πρέπει να καθορίσουμε είναι το **μέγεθος του κινούμενου παραθύρου** (window size) πάνω στο οποίο θα υπολογιστεί το μέσο ρεύμα και η μέση τάση. Θυμίζουμε ότι η επιλογή του δύναται να έχει σημαντική επίδραση στην επίδοση των μοντέλων μας καθώς εισάγει συσχέτιση με προηγούμενες χρονικές στιγμές. Αυτό σε γενικές γραμμές είναι θετικό, αρκεί να μην λάβει ακραίες διαστάσεις. Ένα υπερβολικά μικρό παράθυρο περισσότερο περιγράφει θόρυβο παρά μεταβολή του χαρακτηριστικού. Ένα υπερβολικά μεγάλο παράθυρο εξομαλύνει τα δεδομένα σε σημείο που δεν ανιχνεύει πιστά τις διακυμάνσεις του μεγέθους. Για παράδειγμα, ένα παράθυρο μεγαλύτερο του κύκλου φόρτισης δεν έχει νόημα ύπαρξης. Στη δική μας περίπτωση, μετρήσαμε το μέσο μήκος κύκλου στα 423 δείγματα και έτσι επιλέξαμε να εκπαιδεύσουμε μοντέλα με παράθυρο στα 50, 100, 150 και 200.

Παράμετροι που αφορούν το AutoKeras

Ο παλινδρομητής δομημένων δεδομένων (structured data regressior) που προσφέρει το AutoKeras έχει και αυτός μια σειρά από παραμέτρους που εκφράζουν ορισμένες σχεδιαστικές επιλογές.

Με την παράμετρο “*loss*” μπορούμε να ορίσουμε τη επιθυμητή συνάρτηση σφάλματος (από αυτές που υποστηρίζει το AutoKeras). Ακολουθώντας την προτεινόμενη προσέγγιση, επιλέξαμε τη συνάρτηση μέσου τετραγωνικού σφάλματος.

Με την παράμετρο “*max_trials*” μπορούμε να θέσουμε ένα άνω όριο στην αναζήτηση μοντέλων που πραγματοποιεί το AutoKeras. Αυτό σημαίνει ότι αν, δοκιμάζοντας μοντέλα (μέχρι να βρει το καλύτερο), ξεπεράσει το παραπάνω πλήθος δοκιμών, η διαδικασία θα

τερματίσει και θα επιστραφεί το καλύτερο τρέχον μοντέλο. Σημειωτέον ότι ο αλγόριθμος αναζήτησης δεν είναι υποχρεωτικό να φτάσει το μέγιστο αριθμό δοκιμών· είναι πιθανό να βρει γρηγορότερα κάποιο αρκετά καλό μοντέλο και έτσι να τερματίσει νωρίτερα. Φυσικά, το τι σημαίνει «αρκετά καλό» δεν είμαστε σε θέση να το προσδιορίσουμε, αλλά θα ήταν και λάθος να το πράξουμε διότι έτσι θα αναιρούσαμε την γενικότερη φιλοσοφία του black box και της εμπιστοσύνης στην AutoML που αυτή απαιτεί. Εμείς επιλέξαμε να κρατήσουμε την default τιμή των 100 δοκιμών αλλά στην πράξη παρατηρήσαμε τη διαδικασία να τερματίζει αρκετά νωρίτερα.

Η τελευταία παράμετρος που επηρέασε τα αποτελέσματά μας ήταν η “*epochs*” η οποία ορίζει ό,τι και το όνομά της, δηλαδή τον αριθμό των εποχών για τις οποίες θα εκπαιδευτούν τα μοντέλα μας. Όπως γνωρίζουμε από την θεωρία των νευρωνικών δικτύων, αποτελεί ιδιαίτερα σημαντική παράμετρο καθώς, αν είναι πολύ μικρή, δεν θα προλάβουν αν εκπαιδευτούν τα μοντέλα μας, ενώ, αν είναι πολύ μεγάλη και υπερ-εκπαιδευτούν, θα γίνει overfitting στα δεδομένα μας και το μοντέλο θα δυσκολευτεί να γενικεύσει σε άλλα. Και σε αυτήν την περίπτωση κρατήσαμε την default τιμή των 20 εποχών καθώς είδαμε εξ αρχής να δουλεύει στα πειράματά μας.

Συνοψίζοντας:

- loss = "mean_squared_error"
- max_trials = 100
- epochs = 20

Στο **Πίνακας 2** παρατίθεται συγκεντρωμένα η λίστα με τις οκτώ εκπαιδεύσεις που διαζάγαμε με βάση τον συνδυασμό των παραπάνω παραμέτρων που επιλέξαμε. Πρόκειται για οκτώ εκπαιδεύσεις οι οποίες οδήγησαν με τη σειρά τους σε οκτώ διαφορετικά καλύτερα μοντέλα που επεστρέφησαν από το AutoKeras.

Model No	Train Set	Window Size	Loss	Max Trials	Epochs
1	train_range(50,880,50)	50	"mean_squared_error"	100	20
2		100			
3		150			
4		200			
5	train_range(50,880,100)	50			
6		100			
7		150			
8		200			

Πίνακας 2: Λίστα με τις παραμέτρους των οκτώ εκπαιδεύσεων που διεξήχθησαν

4.5.2 Αξιολόγηση Μοντέλου

Έχοντας εκπαιδέψει τα μοντέλα μας με τη λογική που αναπτύχθηκε στην προηγούμενη ενότητα, έπρεπε να προσδιορίσουμε τι είδους ελέγχους θέλαμε να διεξάγουμε με αυτά. Προσδιορίσαμε λοιπόν δύο ειδών εφαρμογές: πρόβλεψη SOC σε σειρά από κύκλους εκφόρτισης και πρόβλεψη SOC σε μεμονωμένους κύκλους εκφόρτισης. Και στις δύο περιπτώσεις θέλαμε να μελετήσουμε όλο το εύρος ζωής της μπαταρίας και συνεπώς δειγματοληψήσαμε κύκλους από ολόκληρο το μήκος του dataset.

Τελικά, προκειμένου να αξιολογήσουμε την επίδοση των μοντέλων που δημιουργήθηκαν στη φάση της εκπαίδευσης, δημιουργήσαμε δέκα **σύνολα ελέγχου** (test sets) απομονώνοντας κύκλους εκφόρτισης σταθερής απόστασης μεταξύ τους μέσα από τη συνάρτηση `range()` της python, κατ' αναλογία με το train set. Επιλέξαμε, λοιπόν, τους κύκλους του `“range(75,880,100)”` για να έχουμε δείγματα από όλο το εύρος ζωής της μπαταρίας. Ωστόσο, δεν αρκεστήκαμε απλώς στο evaluation των παραπάνω εννέα κύκλων (75, 175, ..., 875) ως ένα ενιαίο σύνολο δεδομένων, αλλά κάναμε προβλέψεις και για τον καθένα ξεχωριστά, ώστε να τεστάρουμε τα μοντέλα μας υπό διαφορετικές συνθήκες.

Κατ' αυτόν τον τρόπο, θα μπορούσαμε αφενός να ελέγξουμε κατά πόσο τα μοντέλα μας επιτυγχάνουν ανάλογες επιδόσεις με αυτές των πολλών κύκλων εκφόρτισης και αφετέρου να εντοπίσουμε μοντέλα με καλύτερες επιδόσεις σε συγκεκριμένα τμήματα του κύκλου ζωής της μπαταρίας. Για παράδειγμα, ένα μοντέλο που παράγει καλές προβλέψεις στο σύνολο των κύκλων της μπαταρίας μπορεί να μην έχει την ίδια επίδοση κατά τους τελευταίους κύκλους φόρτισης σε σχέση με ένα δεύτερο μοντέλο που το ξεπερνά στο συγκεκριμένο task κι ας μην είναι το ίδιο αποτελεσματικό κατά το πρώτο μισό της ζωής της μπαταρίας. Με την παραπάνω επιλογή των test sets, λοιπόν, αναμέναμε να έρθουν στην επιφάνεια τέτοιου είδους προβληματισμοί.

Στην **Εικόνα 29** φαίνονται τα δέκα test sets, δηλ. το `“range(75,880,100)”`, το `“cycleNo_75”`, το `“cycleNo_175”` κλπ., πάνω στα οποία αξιολογήθηκαν τα οκτώ μοντέλα μας.

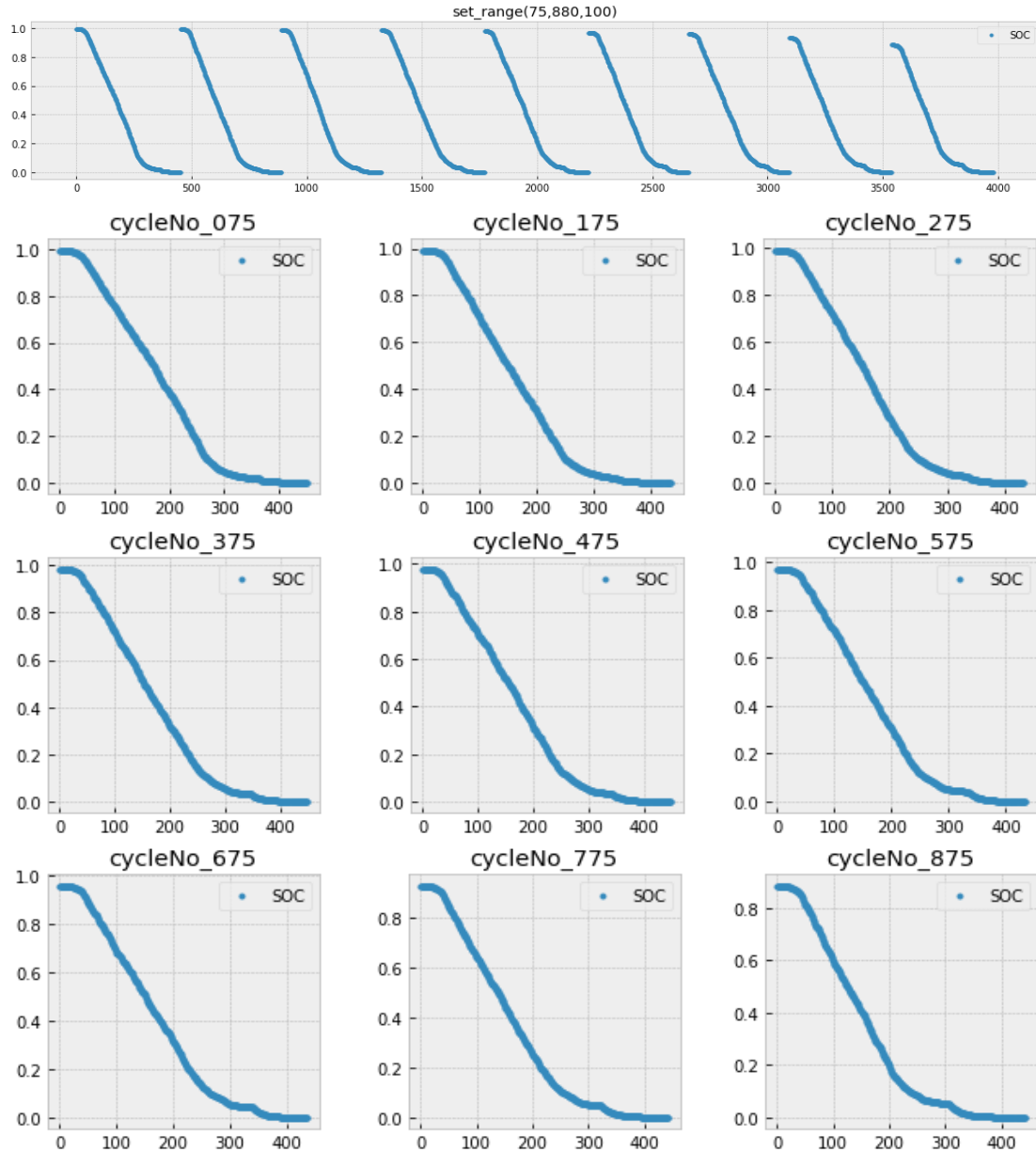
Σημειώτεον ότι στον κώδικα που αναπτύξαμε τα test sets είναι και αυτά παραμετροποιημένα, κατ' αναλογία με το training set, για να μπορεί κάποιος να τεστάρει τα μοντέλα του υπό διαφορετικές συνθήκες. Για το σχηματισμό τους, δημιουργήσαμε μια μεταβλητή, η οποία παίρνει ως τιμή μια λίστα με indexes κύκλων φόρτισης. Κατόπιν, τα μοντέλα αξιολογούνται για την επίδοσή τους τόσο στην ένωση των επιλεγμένων κύκλων φόρτισης σε ένα ενιαίο test set, όσο και στον καθένα ξεχωριστά.

Όπως αναπτύχθηκε και στην προτεινόμενη προσέγγιση, η **συνάρτηση αξιολόγησης** (evaluation function) των προβλέψεών μας σε σχέση με τις πραγματικές τιμές που επιλέχθηκε ήταν η συνάρτηση μέσου τετραγωνικού σφάλματος, η οποία ορίζεται από τον παρακάτω τύπο:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}$$

(13)

όπου \hat{y}_i είναι το SOC της πρόβλεψης και n ο συνολικός αριθμός δειγμάτων και είναι η ενδεικνύμενη από την βιβλιογραφία σε προβλήματα παλινδρόμησης.



Εικόνα 29: Τα test sets που δημιουργήσαμε για τον έλεγχο της επίδοσης των μοντέλων μας υπό διαφορετικές συνθήκες. Το πρώτο περιλαμβάνει εννέα κύκλους εκφόρτισης απομονωμένους και συρραμμένους μεταξύ τους, ενώ τα υπόλοιπα εννέα περιλαμβάνουν τους ίδιους κύκλους αλλά αυτή τη φορά ξεχωριστά.

4.6 Πειραματικά Αποτελέσματα

Στην προηγούμενη ενότητα παρουσιάσαμε τα πειράματα AutoML που διεξήγαμε. Εδώ, πρόκειται να συγκεντρώσουμε όλα τα αποτελέσματα, τις συγκρίσεις και τα συμπεράσματα που βγάλαμε από αυτά.

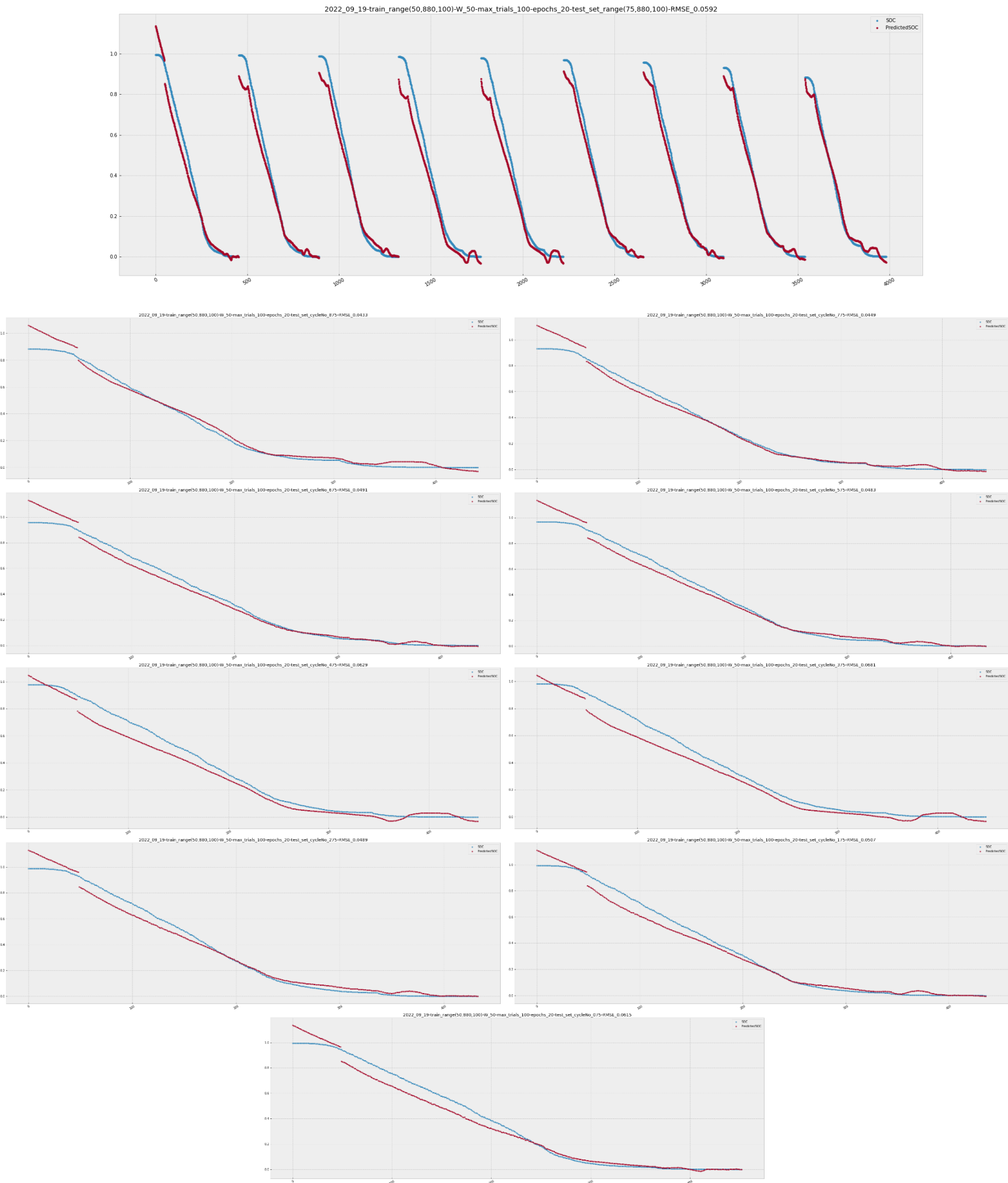
Όπως ήδη αναπτύξαμε, κάθε μοντέλο δοκιμάστηκε στις προβλέψεις του πάνω σε δέκα test sets, ένα αποτελούμενο από τους εννέα κύκλους εκφόρτισης υπ' αριθμό 75, 175, ..., 875 τοποθετημένους σειριακά τον ένα μετά τον άλλο και εννέα αποτελούμενα από τους ίδιους κύκλους εκφόρτισης, αλλά μεμονωμένα.

Το πρώτο πράγμα που επιχειρήσαμε ήταν να αναπρασθήσουμε γραφικά τις προβλέψεις μας σε σχέση με τις επιθυμητές τιμές του SOC. Στην **Εικόνα 30** έχουμε συγκεντρωμένα τα αποτελέσματα ενός μόνο μοντέλου, εκείνου που παρήχθη στο πείραμα νούμερο 5. Συγκεκριμένα, πρόκειται για το καλύτερο μοντέλο που εκπαιδεύτηκε έχοντας ως είσοδο το training set "train_range(50,880,100)", κυλιόμενο παράθυρο 50, συνάρτηση σφάλματος μέσου τετραγωνικού λάθους, μέγιστο αριθμό δοκιμών 100 και 20 εποχές εκπαίδευσης. Τα γραφήματα που παρουσιάζουμε περιέχουν με μπλε χρώμα το SOC έτσι όπως το είχαμε υπολογίσει εξ αρχής με την σχετική εξίσωση και με κόκκινο χρώμα το SOC που παρήγαγε το μοντέλο μας. Το πρώτο γράφημα απεικονίζει την επίδοση του μοντέλου πάνω στους κύκλους εκφόρτισης υπ' αριθμό 75, 175, ..., 875 τοποθετημένους σειριακά τον ένα μετά τον άλλο και τα υπόλοιπα εννέα την επίδοση του μοντέλου όταν αυτό τροφοδοτείται ξεχωριστά με καθέναν από αυτούς τους κύκλους.

Για κάθε μία από αυτές τις προβλέψεις υπολογίζουμε και το RMSE σύμφωνα με την εξίσωση (13) για να έχουμε μια πιο χειροπιαστή μετρική της επίδοσης. Τα RMSEs που υπολογίστηκαν παρατίθενται και αυτά με τη σειρά τους συγκεντρωμένα στον **Πίνακας 3**.

Model	Test Set	RMSE
5	test_range(75,880,100)	0.0592
5	cycleNo_075	0.0615
5	cycleNo_175	0.0507
5	cycleNo_275	0.0489
5	cycleNo_375	0.0681
5	cycleNo_475	0.0629
5	cycleNo_575	0.0483
5	cycleNo_675	0.0491
5	cycleNo_775	0.0449
5	cycleNo_875	0.0433

Πίνακας 3: Το RMSE των προβλέψεων του μοντέλου 5 πάνω στα δέκα test sets.



Εικόνα 30: Οι προβλέψεις του μοντέλου 5 (με "train_range(50,880,100)" και window=50) πάνω στα test sets "test_range(75,880,100)" και "cycleNo075", "cycleNo175" μέχρι "cycle_No875". Με μπλε εικονίζεται το πραγματικό SOC ενώ με κόκκινο το SOC που πρόβλεψε το μοντέλο μας.

Συμπεράσματα

Το πρώτο πράγμα που παρατηρούμε είναι ότι τα μέσα τετραγωνικά σφάλματα είναι πολύ μικρά και συνεπώς η εκπαίδευση στέφθηκε από επιτυχία. Αυτό επιβεβαιώνεται και από τις γραφικές παραστάσεις οι οποίες δείχνουν καμπύλες κοντά στις επιθυμητές. Αν και δυσκολεύεται να προσεγγίσει ικανοποιητικά την αρχή και το τέλος κάθε κύκλου εκφόρτισης, διαπιστώνεται υψηλή ακρίβεια στο ενδιάμεσό του. Όλο αυτό καταστά φανερό ότι η προτεινόμενη προσέγγισή μας έχει ορθές βάσεις και είναι άξια περαιτέρω διερεύνησης.

Όσον αφορά το πρώτο test set, παρατηρούμε ότι η ικανότητα του μοντέλου να προβλέπει το SOC έχει διακυμάνσεις ανάλογα με τις διαφορετικές φάσεις του κύκλου ζωής της μπαταρίας. Κάποιοι κύκλοι είναι πιο ακριβείς από κάποιους άλλους.

Όσον αφορά τα υπόλοιπα εννέα test sets, διαπιστώνουμε ότι κάποια από αυτά έχουν χαμηλότερο RMSE σε σχέση με το πρώτο και κάποια μεγαλύτερο. Σε όλα όμως είναι αρκετό καλό ώστε να επιβαβαιώνεται ότι η μέθοδος μας αποδίδει στους κύκλους εκφόρτισης όλης της ζωής της μπαταρίας, ακόμα και όταν έχει εξασθενήσει η μπαταρία.

Έχοντας παρουσιάσει ενδεικτικά την αξιολόγηση της επίδοσης ενός μόνο μοντέλου, μπορούμε πλέον να παρουσιάσουμε συγκεντρωτικά τα αποτελέσματα από όλα μας τα πειράματα.

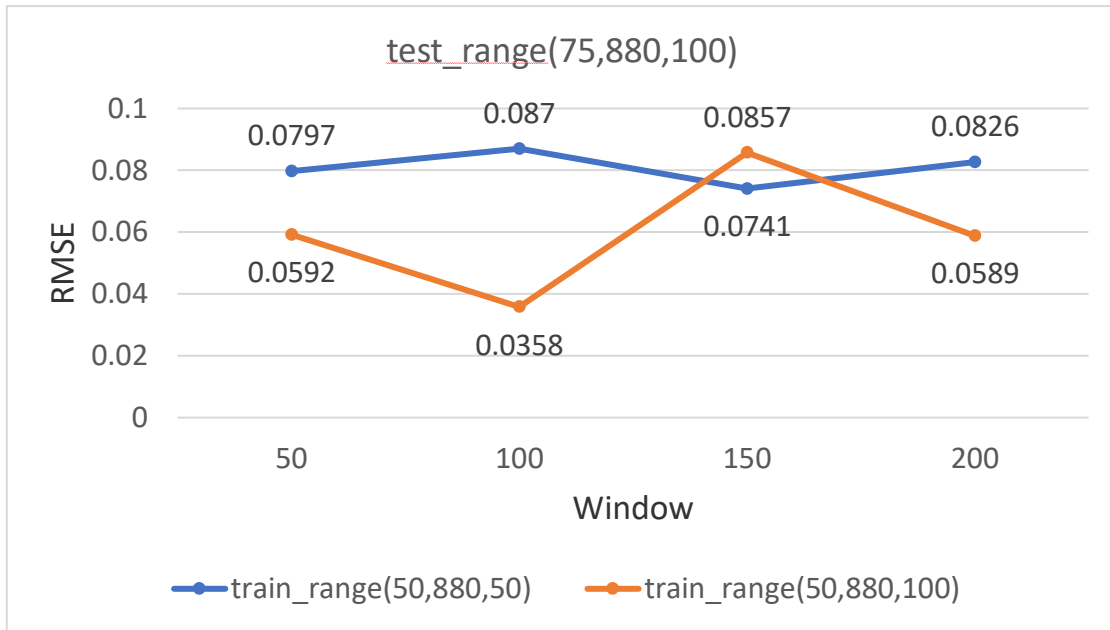
4.6.1 Πρόβλεψη SOC σε σειρά από κύκλους εκφόρτισης

Όπως αναφέραμε και παραπάνω, ο πρώτος έλεγχος που τρέξαμε για τα μοντέλα μας ήταν η πρόβλεψη SOC σε σειρά από κύκλους εκφόρτισης. Συγκεκριμένα, το test set που χρησιμοποιήσαμε ήταν το “range(75,880,100)”.

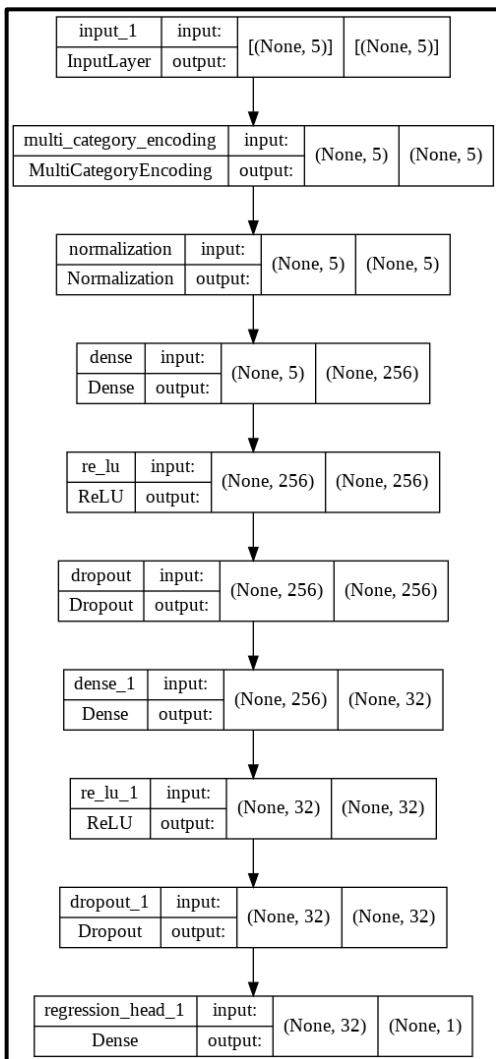
Στην **Εικόνα 33** παρουσιάζεται η επίδοση, δηλαδή το RMSE, των οκτώ μοντέλων μας κατηγοριοποιημένων σύμφωνα με το training set και το κυλιόμενο παράθυρο που χρησιμοποιήθηκε για να παραχθούν.

Όσον αφορά το “train_range(50,880,50)” παρατηρούμε μικρές διακυμάνσεις του RMSE σε σχέση με την μεταβολή του κυλιόμενου παραθύρου. Αυτό ίσως σχετίζεται με το γεγονός ότι περιλαμβάνει σχεδόν διπλάσιους κύκλους εκφόρτισης: πρόκειται δηλαδή για μια πυκνότερη δειγματοληψία με παραπάνω πληροφορία και έτσι επιστρέφει ένα ικανοποιητικό αποτέλεσμα προβλέψεων ανεξαρτήτως παραθύρου. Φυσικά, για πιο ακραίες τιμές του παραθύρου τα αποτελέσματα θα χειροτέρευαν. Αλλά το εύρος στο οποίο κινηθήκαμε (δηλ. 50 με 200) ήταν εξ αρχής ασφαλές.

Όσον αφορά το “train_range(50,880,100)” παρατηρούμε ότι η παρουσία λιγότερων δεδομένων εντός του συνόλου εκπαίδευσης αφήνει το περιθώριο στο παράθυρο εκπαίδευσης να επιδράσει εντονότερα. Μάλιστα, εδώ συναντάμε και το βέλτιστο μοντέλο μας, το υπ’



Εικόνα 33: Το RMSE των προβλέψεων όλων των μοντέλων (ανά training set και παράθυρο) πάνω στο test set "test_range(75,880,100)"



Εικόνα 32: Γραφική αναπαράσταση της αρχιτεκτονικής του μοντέλου No 6

Layer (type)	Output Shape	Param #
input_1 (InputLayer)	[(None, 5)]	0
multi_category_encoding (MultiCategoryEncoding)	(None, 5)	0
normalization (Normalization)	(None, 5)	11
dense (Dense)	(None, 256)	1536
re_lu (ReLU)	(None, 256)	0
dropout (Dropout)	(None, 256)	0
dense_1 (Dense)	(None, 32)	8224
re_lu_1 (ReLU)	(None, 32)	0
dropout_1 (Dropout)	(None, 32)	0
regression_head_1 (Dense)	(None, 1)	33

Total params: 9,804
Trainable params: 9,793
Non-trainable params: 11

Εικόνα 31: Το summary το μοντέλου No 6

αριθμόν 6, εκείνο που χρησιμοποίησε παράθυρο ίσο με 100. Όπως επίσης έχει ενδιαφέρον ότι παρουσιάζει μεγάλη διαφορά από τα υπόλοιπα μοντέλα μας. Φυσικά, μέσα από ένα νέο γύρο πειραμάτων που θα εστιάσουν σε ένα μέγεθος παραθύρου μεταξύ 75 και 125 θα μπορούσαμε να τελειοποιήσουμε την παράμετρο και να επιτύχουμε ακόμα καλύτερη επίδοση.

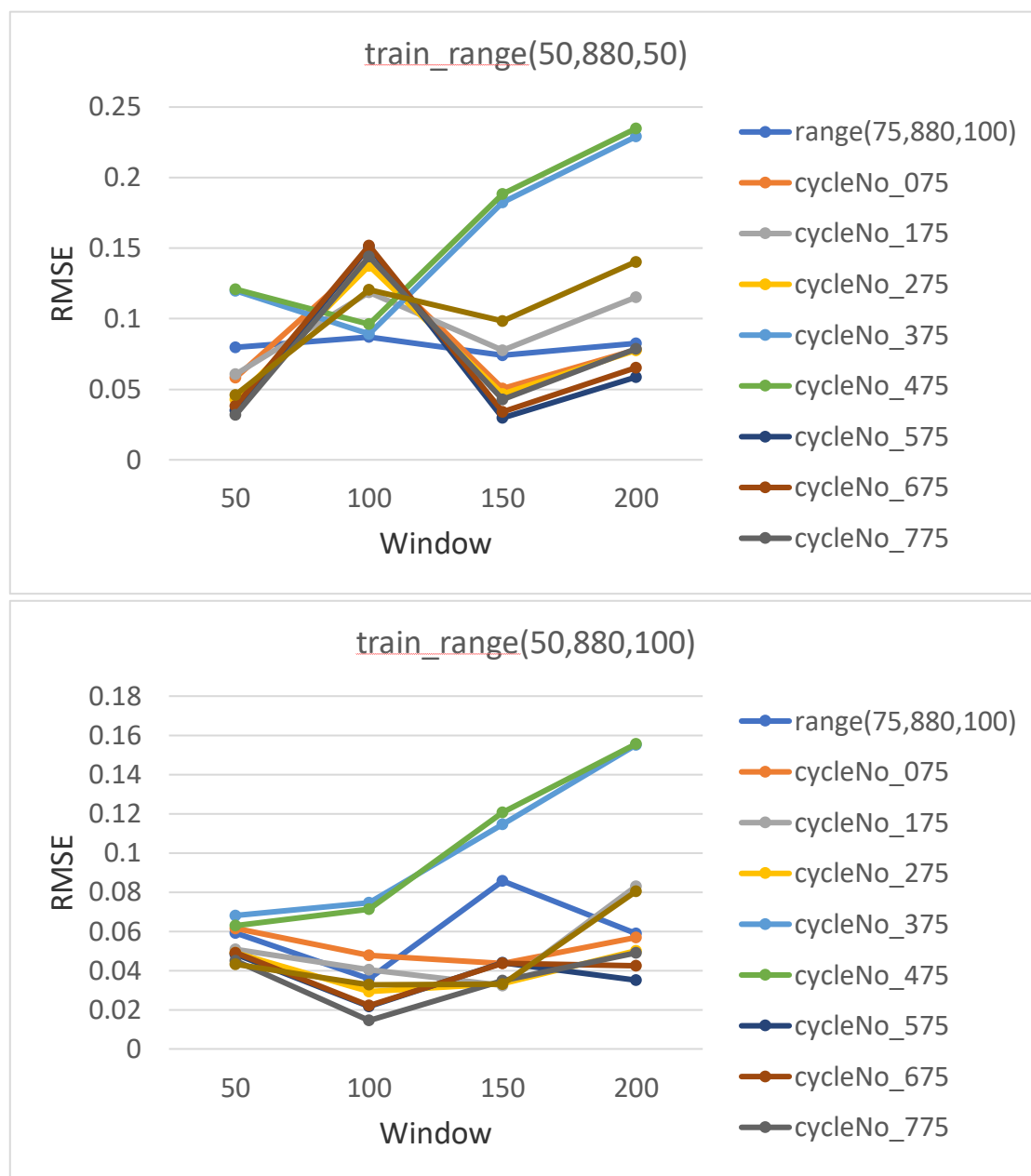
Έχοντας βρει πλέον το καλύτερο μοντέλο για την πρόβλεψη SOC σε σειρά από κύκλους εκφόρτισης, δηλαδή

το μοντέλο Νο 6, μπορούμε να ανατρέξουμε στο *summary()* του μοντέλου και να μελετήσουμε τη δομή του, η οποία και παρουσιάζεται στην **Εικόνα 31**, ενώ στην **Εικόνα 32** αναπαρίσταται σχηματικά.

4.6.2 Πρόβλεψη SOC σε μεμονωμένους κύκλους εκφόρτισης

Ο δεύτερος έλεγχος που διαζάγαμε με τα μοντέλα μας ήταν η πρόβλεψη SOC σε μεμονωμένους κύκλους εκφόρτισης. Συνεπώς, σε αυτή την ενότητα θα συνοψίσουμε την επίδοση των μοντέλων μας και στα υπόλοιπα test sets.

Στην **Εικόνα 34** βλέπουμε συγκεντρωτικά τα RMSEs των προβλέψεων όλων των μοντέλων μας ως προς όλα τα πιθανά test sets. Στο πρώτο γράφημα αναπαριστώνται τα



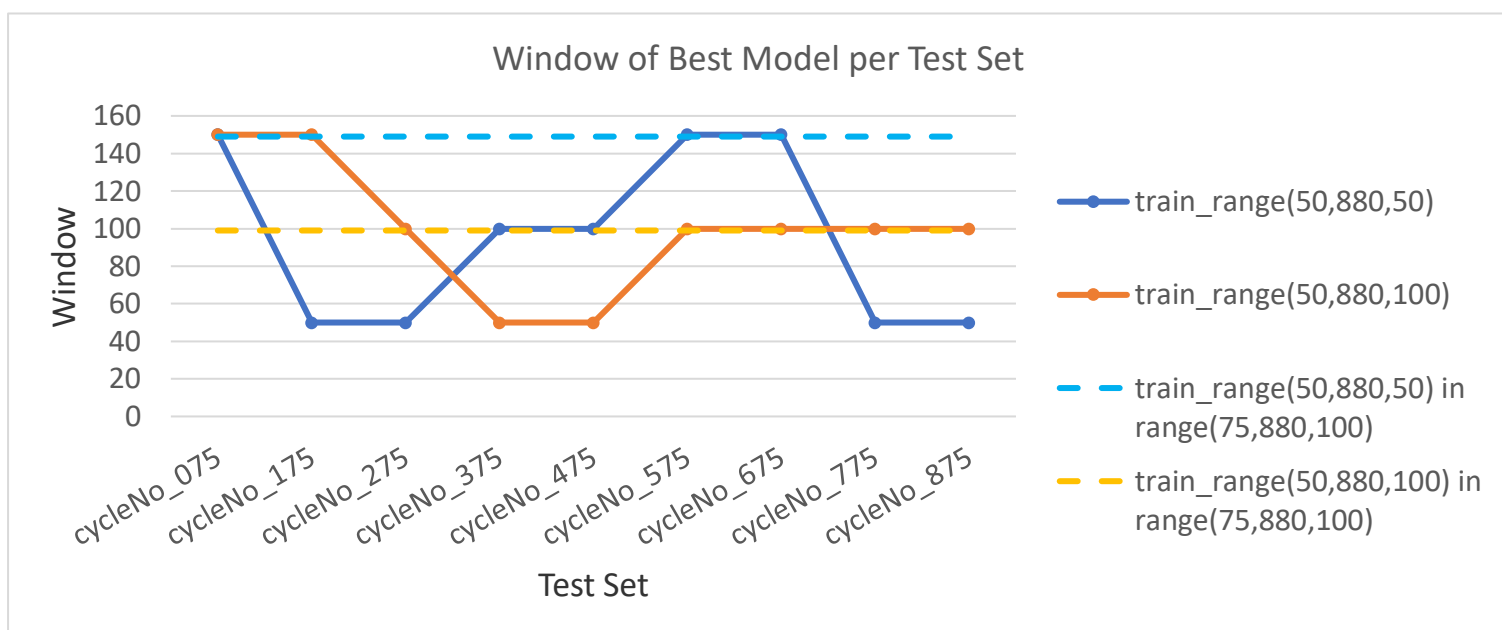
Εικόνα 34: α) Μοντέλα 1-4, το RMSE των δέκα σύνολων ελέγχου κατά την εκπαίδευση με το range(50,880,50)
β) Μοντέλα 5-8, το RMSE των δέκα σύνολων ελέγχου κατά την εκπαίδευση με το range(50,880,100)

πειράματα με τα πρώτα τέσσερα μοντέλα, αυτά που είχαν ως training set το “range(50,880,50)”, για τις τέσσερις διαφορετικές τιμές παραθύρου (50, 100, 150 και 200) και στο δεύτερο τα υπόλοιπα πειράματα, που είχαν ως σύνολο εκπαίδευσης το “range(50,880,100)” για τις ίδιες τιμές παραθύρου. Όλα τα μοντέλα μας αξιολογήθηκαν με βάση τα δέκα test sets που περιγράψαμε

Παρατηρούμε ότι:

- Σε γενικές γραμμές κάθε test set παρουσιάζει βέλτιστο RMSE σε διαφορετικό training set και με άλλο παράθυρο.
- Στην συντριπτική πλειοψηφία των πειραμάτων το παράθυρο μήκους 200 είναι το χειρότερο ανεξαρτήτως training set.
- Κάποιοι κοντινοί κύκλοι εκφόρτισης παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά, όπως οι 375 και 475
- Ως προς το “range(75,880,100)” όλα τα μοντέλα παρουσιάζουν μια ενδιαμέση επίδοση σε σχέση με τα υπόλοιπα test sets. Ενδιαφέρουσα εξαίρεση είναι το μοντέλο No 2, εκπαιδευμένο με “train_range(50,880,50)” και window=100 το οποίο έχει τις καλύτερες προβλέψεις στους ενωμένους κύκλους παρά στους μεμονωμένους.

Προκειμένου να μελετήσουμε την επίδραση του κινούμενου παραθύρου σε σχέση με τη ζωή της μπαταρίας, στην **Εικόνα 35** παρουσιάζουμε το παράθυρο του καλύτερου μοντέλου για κάθε test set. Συγκεκριμένα, με την μπλε γραμμή έχουμε τα μοντέλα που εκπαιδεύτηκαν με το “train_range(50,880,50)” και με την πορτοκαλί εκείνα που εκπαιδεύτηκαν με το “train_range(50,880,100)”. Για σύγκριση, συμπεριλάβαμε με διακεκομμένες γραμμές το καλύτερο παράθυρο για την πρόβλεψη του “range(75,880,100)” που πέτυχαν τα μοντέλα που εκπαιδεύτηκαν με το “train_range(50,880,50)” (γαλάζια γραμμή, window = 150) και εκείνα που εκπαιδεύτηκαν με το “train_range(50,880,100)” (κίτρινη γραμμή, window = 100).

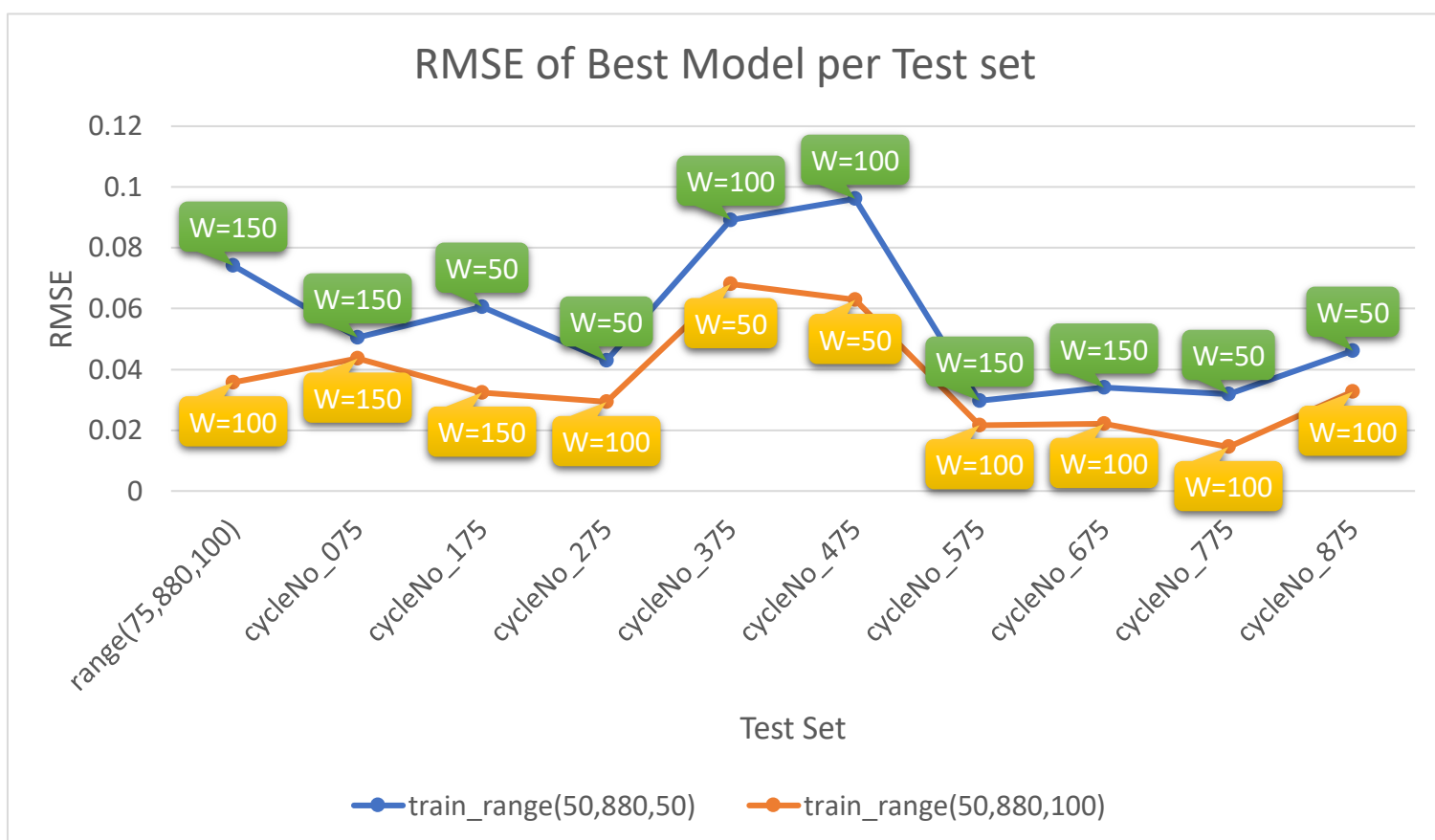


Εικόνα 35: Το παράθυρο του καλύτερου μοντέλου για κάθε συνδυασμό train test και test set.

Η βασική παρατήρησή μας για αυτό το διάγραμμα είναι ότι εντός του ίδιου training set, κοντινοί κύκλοι εκφόρτισης υπολογίζονται βέλτιστα με το ίδιο κυλιόμενο παράθυρο. Στο δικό μας παράδειγμα, τα ζευγάρια 345 και 475, 575 και 675, 775 και 875 έχουν το ίδιο βέλτιστο παράθυρο και στις δύο περιπτώσεις του training set. Επιπλέον, εκφράζοντας το ίδιο πράγμα από την άλλη πλευρά του νομίσματος, διαπιστώνουμε μια τάση μεταβολής του παραθύρου του βέλτιστου μοντέλου ανάλογα με το στάδιο του κύκλου ζωής της μπαταρίας.

Πέραν όμως της εξάρτησης του παραθύρου από το στάδιο του κύκλου ζωής της μπαταρίας, παρατηρείται εξάρτηση και από τα δεδομένα εκπαίδευσης. Μάλιστα, με εξαίρεση το “cycle_No075” όπου και τα δύο training sets πέτυχαν καλύτερη επίδοση με παράθυρο 150, όλα τα υπόλοιπα test sets απαιτήσαν διαφορετικό κυλιόμενο παράθυρο στο training set για τη βέλτιστη προσέγγισή τους. Συνεπώς, το παράθυρο επηρεάστηκε και από το ρυθμό δειγματοληψίας των κύκλων εκφόρτισης κατά την εκπαίδευση.

Τέλος, στην **Εικόνα 36** παρουσιάζουμε το RMSE του καλύτερου μοντέλου για κάθε test set. Συγκεκριμένα, με την μπλε γραμμή έχουμε τα μοντέλα που εκπαιδεύτηκαν με το “train_range(50,880,50)” και με την πορτοκαλί εκείνα που εκπαιδεύτηκαν με το “train_range(50,880,100)”.



Εικόνα 36: Το RMSE του καλύτερου μοντέλου για κάθε συνδυασμό train test και test set.

Η πιο ενδιαφέρουσα παρατήρησή μας αφορά τα δύο training sets που δημιουργήσαμε και το γεγονός ότι το “train_range(50,880,100)” παρουσιάζει σταθερά καλύτερη επίδοση από το “train_range(50,880,50)”. Αυτό σημαίνει ότι το πλήθος των δεδομένων εκπαίδευσης δεν είναι ενδεικτικό της επίδοσης του νευρωνικού. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, με τους μισούς κύκλους εκφόρτισης πετύχαμε καλύτερα αποτελέσματα και μάλιστα σε αισθητά λιγότερο χρόνο.

Σύνοψη

Τα αποτελέσματα της πρόβλεψης SOC σε μεμονωμένους κύκλους εκφόρτισης συνοψίζονται στον **Πίνακα 4** όπου παρουσιάζονται τα βέλτιστα μοντέλα πρόβλεψης καθενός test set και οι παράμετροί τους.

Test Set	Model No	Train Set	Window Size
test_range(75,880,100)	6	train_range(50,880,100)	100
cycleNo_075	7		150
cycleNo_175	6		100
cycleNo_275	5		50
cycleNo_375	6		100
cycleNo_475			
cycleNo_575			
cycleNo_675			
cycleNo_775			
cycleNo_875			

Πίνακας 4: Τα καλύτερα μοντέλα ανά test set και οι παράμετροι με τις οποίες εκπαιδεύτηκαν

5

Συμπεράσματα και Μελλοντική Εργασία

5.1 Σύνοψη και συμπεράσματα

Σε αυτή τη διπλωματική εργασία προτείναμε μία προσέγγιση βασισμένη στην αυτοματοποιημένη μηχανική μάθηση για την πρόβλεψη της κατάστασης φόρτισης (SOC) μπαταριών ιόντων λιθίου. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν αφορούσαν αρχεία καταγραφής ορισμένων φυσικών μεγεθών κατά την διαδοχική φόρτιση και εκφόρτιση κυψέλης μπαταρίας λιθίου από την αρχή μέχρι και το τέλος της ζωής της (80% SOH). Η προσέγγιση αποτελείται από τη φάση της προ-επεξεργασίας των δεδομένων, της αναζήτησης του καλύτερου νευρωνικού και της εξαγωγής των αποτελεσμάτων

Κατά την προ-επεξεργασία έγινε η επιλογή του συνόλου δεδομένων, η μελέτη των χαρακτηριστικών του, ο καθαρισμός του από ανεπιθύμητα δεδομένα και η μηχανική χαρακτηριστικών προκειμένου να δημιουργήσουμε ποικίλα σύνολα εκπαίδευσης και ελέγχου. Στη συνέχεια, τα μοντέλα πρόβλεψης βασίστηκαν σε νευρωνικά δίκτυα που δημιουργήθηκαν εκτελώντας αναζήτηση αρχιτεκτονικής νευρωνικού (NAS) μέσα σε ένα χώρο αναζήτησης βασισμένο στον μορφισμό δικτύου και κατευθυνόμενοι από μια διαδικασία μπεϋζιανής βελτιστοποίησης με υποκείμενο μοντέλο γκαουσιανής διεργασίας. Η υλοποίηση της παραπάνω μεθοδολογίας έγινε με τη βοήθεια του πακέτου AutoKeras με επιλογή ορισμένων παραμέτρων όπως η απώλεια (loss), ο μέγιστος αριθμός δοκιμών (max_trials) και οι εποχές εκπαίδευσης και διαφορετικό σύνολο εκπαίδευσης κάθε φορά. Τα μοντέλα, τέλος, αξιολογήθηκαν πάνω σε διαφορετικά σύνολα ελέγχου με πολύ καλές επιδόσεις.

Τα αποτελέσματα έδωσαν ενδείξεις ότι η AutoML είναι ένας συστηματικός τρόπος κατασκευής προβλεπτικών μοντέλων για μπαταρίες που αφαιρεί την υποκειμενικότητα του αναλυτή στην βελτιστοποίηση των υπερ-παραμέτρων και καταλήγει μεθοδικά και αντικειμενικά στον εντοπισμό των καλύτερων μοντέλων για το εκάστοτε πρόβλημα.

Αυτοματοποιεί τις διαδικασίες αναζήτησης καταργώντας την τυχαιότητα και την αβεβαιότητα της χειροκίνητης αναζήτησης, ενώ συγκλίνει σε ικανοποιητικές επιδόσεις γρήγορα και σε πεπερασμένο χρόνο.

5.2 Μελλοντικές επεκτάσεις

Φυσικά, η παρούσα διπλωματική εργασία δεν κατάφερε να ξεδιπλώσει όλο το φάσμα της AutoML, ενώ προσέφερε ενδείξεις και όχι αποδείξεις. Ουσιαστικά, εντόπισε κάποια μοντέλα εκτίμησης SOC που εκπαιδεύτηκαν σε κάποιους κύκλους εκφόρτισης μιας μπαταρίας ενός dataset. Συνεπώς, μπορούν να βελτιωθούν ως εξής:

- Περεταίρω διερεύνηση του βέλτιστου κυλιόμενου παραθύρου για τα παρόντα δεδομένα εκπαίδευσης. Εμείς εξετάσαμε μόνο τέσσερα παράθυρα (50, 100, 150 και 200) αλλά θα μπορούσαμε να διεξάγουμε μια πιο ενδελεχή έρευνα στο διάστημα 50 με 150.
- Εκπαίδευση με διαφορετικό συνδυασμό κύκλων εκφόρτισης του παρόντος dataset.
- Εκπαίδευση στο σύνολο των datasets για τα διαφορετικά πρωτόκολλα φόρτισης που προσφέρει η μελέτη των Severson et al. [101].
- Εκπαίδευση σε κάποιο άλλο ανοιχτό dataset με κυψέλες μπαταριών λιθίου διαφορετικού κατασκευαστή

Από την άλλη, θα ήταν λάθος να περιοριστούμε μόνο στην εκτίμηση του SOC. Όλα αυτά θα μπορούσαν να επεκταθούν και στην πρόβλεψη και άλλων καταστάσεων των μπαταριών όπως SOH, SOE κλπ. αλλά και του ίδιου του εναπομείναντος χρόνου ζωής της (Remaining Useful Life ή RUL).

6

Βιβλιογραφία

- [1] R. Cuscaden, «Special Report: Energy.,» *Building Design and Construction*, 17(11), pp. 40-46, 1976.
- [2] E. Chemali, P. Kollmeyer, M. Preindl και A. Emadi, «State-of-charge estimation of Li-ion batteries using deep neural networks: A machine learning approach.,» *Journal of Power Sources*, 400, pp. 242-255, 2018.
- [3] X. Hu, F. Feng, K. Liu, L. Zhang, J. Xie και B. Liu, «State estimation for advanced battery management: Key challenges and future trends.,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 114, p. 109334, 2019.
- [4] A. Emadi, «Advanced electric drive vehicles.,» *CRC Press.*, 2014.
- [5] E. Chemali, M. Preindl, P. Malysz και A. Emadi, «Electrochemical and electrostatic energy storage and management systems for electric drive vehicles: State-of-the-art review and future trends.,» *IEEE Journal of Emerging and Selected Topics in Power Electronics*, 4(3), pp. 1117-1134, 2016.
- [6] X. Hu, C. Zou, C. Zhang και Y. Li, «Technological developments in batteries: a survey of principal roles, types, and management needs.,» *IEEE Power and Energy Magazine* 15(5), pp. 20-31, 2017.
- [7] M. A. Hannan, M. H. Lipu, A. Hussain και A. Mohamed, « A review of lithium-ion battery state of charge estimation and management system in electric vehicle applications: Challenges and recommendations.,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 78, pp. 834-854, 2017.

- [8] W. Y. Chang, «The state of charge estimating methods for battery: A review.,» *International Scholarly Research Notices*, 2013.
- [9] F. Zheng, Y. Xing, J. Jiang, B. Sun, J. Kim και M. Pecht, «Influence of different open circuit voltage tests on state of charge online estimation for lithium-ion batteries.,» *Applied energy*, 183,, pp. 513-525, 2016.
- [10] X. Hu, D. Cao και B. Egardt, «Condition monitoring in advanced battery management systems: Moving horizon estimation using a reduced electrochemical model.,» *IEEE/ASME Transactions on Mechatronics*, 23(1), pp. 167-178, 2017.
- [11] X. Hu, S. Li και H. Peng, «A comparative study of equivalent circuit models for Li-ion batteries.,» *Journal of Power Sources*, 198,, pp. 359-367, 2012.
- [12] C. Zou, X. Hu, S. Dey, L. Zhang και X. Tang, «Nonlinear fractional-order estimator with guaranteed robustness and stability for lithium-ion batteries.,» *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 65(7), pp. 5951-5961, 2017.
- [13] J. Chen, Q. Ouyang, C. Xu και H. Su, «Neural network-based state of charge observer design for lithium-ion batteries.,» *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 26(1), pp. 313-320, 2017.
- [14] J. Meng, G. Luo και F. Gao, «Lithium polymer battery state-of-charge estimation based on adaptive unscented Kalman filter and support vector machine.,» *IEEE Transactions on Power Electronics*, 31(3),, pp. 2226-2238., 2015.
- [15] A. Barai, K. Uddin, W. D. Widanalage, A. McGordon και P. Jennings, «The effect of average cycling current on total energy of lithium-ion batteries for electric vehicles.,» *Journal of Power Sources*, 303,, pp. 81-85, 2016.
- [16] W. Zhang, W. Shi και Z. Ma, « Adaptive unscented Kalman filter based state of energy and power capability estimation approach for lithium-ion battery.,» *Journal of Power Sources*, 289, , pp. 50-62, 2015.
- [17] X. Liu, J. Wu, C. Zhang και Z. Chen, «A method for state of energy estimation of lithium-ion batteries at dynamic currents and temperatures.,» *Journal of Power Sources*, 270,, pp. 151-157, 2014.
- [18] J. Xie, J. Ma και J. Chen, «Peukert-equation-based state-of-charge estimation for LiFePO₄ batteries considering the battery thermal evolution effect.,» *Energies*, 11(5),, p. 1112., 2018.

- [19] J. Xie, J. Ma και J. Chen, «Available power prediction limited by multiple constraints for LiFePO₄ batteries based on central difference Kalman filter.,» *International Journal of Energy Research*, 42(15), pp. 4730-4745., 2018.
- [20] J. Cannarella και C. B. Arnold, «State of health and charge measurements in lithium-ion batteries using mechanical stress.,» *Journal of Power Sources*, 269, pp. 7-14, 2014.
- [21] J. Tinnemeyer, «New advances in lithium ion battery monitoring.,» *Battery Power Conference*, pp. 19-20, October.
- [22] X. Li, Z. Wang, L. Zhang, C. Zou και D. D. Dorrell, «State-of-health estimation for Li-ion batteries by combing the incremental capacity analysis method with grey relational analysis.,» *Journal of Power Sources*, 410, pp. 106-114., 2019.
- [23] M. Bercibar, I. Gandiaga, I. Villarreal, N. Omar, J. Van Mierlo και P. Van den Bossche, «Bercibar, M., Gandiaga, I., Villarreal, I., Omar, N., Van Mierlo, J., & Van den Bossche, P.,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 56, pp. 572-587., 2016.
- [24] L. Zheng, L. Zhang, J. Zhu, G. Wang και J. Jiang, «Co-estimation of state-of-charge, capacity and resistance for lithium-ion batteries based on a high-fidelity electrochemical model.,» *Applied Energy*, 180, pp. 424-434., 2016.
- [25] X. Hu, H. Yuan, C. Zou, Z. Li και L. Zhang, «Co-estimation of state of charge and state of health for lithium-ion batteries based on fractional-order calculus.,» *IEEE Transactions on Vehicular Technology*, 67(11), pp. 10319-10329., 2018.
- [26] A. Farmann και D. U. Sauer, « A comprehensive review of on-board State-of-Available-Power prediction techniques for lithium-ion batteries in electric vehicles.,» *Journal of Power Sources*, 329, , pp. 123-137., 2016.
- [27] Y. Wang, R. Pan, C. Liu, Z. Chen και Q. Ling, «Power capability evaluation for lithium iron phosphate batteries based on multi-parameter constraints estimation.,» *Journal of Power Sources*, 374, pp. 12-23, 2018.
- [28] G. L. Plett, «High-performance battery-pack power estimation using a dynamic cell model.,» *IEEE Transactions on vehicular technology*, 53(5), , pp. 1586-1593, 2004.
- [29] T. Feng, L. Yang, X. Zhao, H. Zhang και J. Qiang, «Online identification of lithium-ion battery parameters based on an improved equivalent-circuit model and its implementation on battery state-of-power prediction.,» *Journal of Power Sources*, 281, pp. 192-203, 2015.

- [30] X. Tang, X. Hu, W. Yang και H. Yu, «Novel torsional vibration modeling and assessment of a power-split hybrid electric vehicle equipped with a dual-mass flywheel.,» *IEEE transactions on vehicular technology*, 67(3), pp. 1990-2000, 2017.
- [31] G. dos Reis, C. Strange, M. Yadav και S. Li, «Lithium-ion battery data and where to find it.,» *Energy and AI*, 5, p. 100081, 2021.
- [32] P. Keil, S. F. Schuster, J. Wilhelm, J. Travi, A. Hauser, R. C. Karl και A. Jossen, «Calendar aging of lithium-ion batteries.,» *Journal of The Electrochemical Society*, 163(9), p. A1872., 2016.
- [33] A. J. Smith, H. M. Dahn, J. C. Burns και J. R. Dahn, «Long-term low-rate cycling of LiCoO₂/graphite Li-ion cells at 55 C.,» *Journal of The Electrochemical Society*, 159(6), p. A705., 2012.
- [34] B. Yevgen και J. Qian, *Battery Power Management for Portable Devices*, Artech House, 2013.
- [35] Y. Wang, J. Tian, Z. Sun, L. Wang, R. Xu, M. Li και Z. Chen, «A comprehensive review of battery modeling and state estimation approaches for advanced battery management systems.,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 131, p. 110015, 2020.
- [36] X. Dang, L. Yan, K. Xu, X. Wu, H. Jiang και H. Sun, «Open-circuit voltage-based state of charge estimation of lithium-ion battery using dual neural network fusion battery model.,» *Electrochimica Acta*, 188, pp. 356-366, 2016.
- [37] F. Sun, R. Xiong και H. He, «A systematic state-of-charge estimation framework for multi-cell battery pack in electric vehicles using bias correction technique.,» *Applied Energy*, 162, pp. 1399-1409, 2016.
- [38] S. Tong, J. H. Lacap και J. W. Park, «Battery state of charge estimation using a load-classifying neural network.,» *Journal of Energy Storage*, 7, pp. 236-243, 2016.
- [39] E. Chemali, P. J. Kollmeyer, M. Preindl, R. Ahmed και A. Emadi, «Long short-term memory networks for accurate state-of-charge estimation of Li-ion batteries.,» *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 65(8), pp. 6730-6739, 2017.
- [40] M. S. Hossain Lipu, M. A. Hannan, A. Hussain και M. H. M. Saad, «Optimal BP neural network algorithm for state of charge estimation of lithium-ion battery using PSO with PCA feature selection.,» *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, 9(6), p. 064102., 2017.

- [41] M. S. H. Lipu, M. A. Hannan, A. Hussain, M. H. Saad, A. Ayob και F. Blaabjerg, «State of charge estimation for lithium-ion battery using recurrent NARX neural network model based lightning search algorithm.,» *IEEE access*, 6, pp. 28150-28161., 2018.
- [42] B. Xia, D. Cui, Z. Sun, Z. Lao, R. Zhang, W. Wang, W. Sun, Y. Lai και M. Wang, «State of charge estimation of lithium-ion batteries using optimized Levenberg-Marquardt wavelet neural network.,» *Energy*, 153, pp. 694-705, 2018.
- [43] F. Yang, W. Li, C. Li και Q. Miao, «State-of-charge estimation of lithium-ion batteries based on gated recurrent neural network.,» *Energy*, 175, pp. 66-75, 2019.
- [44] F. Yang, X. Song, F. Xu και K. L. Tsui, «State-of-charge estimation of lithium-ion batteries via long short-term memory network.,» *Ieee Access*, 7, pp. 53792-53799, 2019.
- [45] A. Krizhevsky, I. Sutskever και G. E. Hinton, « ImageNet classification with deep convolutional neural networks.,» *International Conference on Neural*, p. 1097–1105, 2012.
- [46] K. He, X. Zhang, S. Ren και J. Sun, «Deep residual learning for image recognition.,» *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 770-778, 2016.
- [47] J. Redmon, S. Divvala, R. Girshick και A. Farhadi, «You only look once: Unified, real-time object detection.,» *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 779-788, 2016.
- [48] C. Gong, D. He, X. Tan, T. Qin, L. Wang και T. Y. Liu, «Frage: Frequency-agnostic word representation.,» *Advances in neural information processing systems*, 31., pp. 1334-1345, 2018.
- [49] Z. Dai, Z. Yang, Y. Yang, J. Carbonell, Q. V. Le και R. Salakhutdinov, «Transformer-xl: Attentive language models beyond a fixed-length context.,» *arXiv preprint arXiv:1901.02860.*, 2019.
- [50] M. A. Zöller και M. F. Huber, «Benchmark and survey of automated machine learning frameworks.,» *Journal of artificial intelligence research*, 70, pp. 409-472, 2021.
- [51] B. Zoph και Q. V. Le, «Neural architecture search with reinforcement learning.,» *arXiv preprint arXiv:1611.01578.*, 2016.
- [52] X. He, K. Zhao και X. Chu, «AutoML: A survey of the state-of-the-art.,» *Knowledge-Based Systems*, 212, p. 106622., 2021.

- [53] H. Pham, M. Guan, B. Zoph, Q. Le και J. Dean, «Efficient neural architecture search via parameters sharing.,» *International conference on machine learning* , pp. 4095-4104, July 2018.
- [54] B. Zoph, V. Vasudevan, J. Shlens και Q. V. Le, «Learning transferable architectures for scalable image recognition.,» *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 8697-8710, 2018.
- [55] Z. Zhong, J. Yan, W. Wu, J. Shao και C. L. Liu, «Practical block-wise neural network architecture generation.,» *In Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 2423-2432, 2018.
- [56] G. Huang, Z. Liu, L. Van Der Maaten και K. Q. Weinberger, «Densely connected convolutional networks.,» *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition* , pp. 4700-4708, 2017.
- [57] H. Liu, K. Simonyan και Y. Yang, «Darts: Differentiable architecture search.,» *arXiv preprint arXiv:1806.09055.*, 2018.
- [58] B. Baker, O. Gupta, N. Naik και R. Raskar, «Designing neural network architectures using reinforcement learning.,» *arXiv preprint arXiv:1611.02167.*, 2016.
- [59] E. Real, S. Moore, A. Selle, S. Saxena, Y. Suematsu, J. Tan, Q. Le και A. Kurakin, «Large-scale evolution of image classifiers.,» *International Conference on Machine Learning* , pp. 2902-2911, July 2017.
- [60] E. Real, A. Aggarwal, Y. Huang και Q. V. Le, «Regularized evolution for image classifier architecture search.,» *Proceedings of the aaai conference on artificial intelligence*, τόμ. 33, αρ. 01, pp. 4780-4789, July 2019.
- [61] C. Liu, L. C. Chen, F. Schroff, H. Adam, W. Hua, A. L. Yuille και L. Fei-Fei, «Auto-deeplab: Hierarchical neural architecture search for semantic image segmentation.,» *Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 82-92, 2019.
- [62] H. Liu, K. Simonyan, O. Vinyals, C. Fernando και K. Kavukcuoglu, «Hierarchical representations for efficient architecture search.,» *arXiv preprint arXiv:1711.00436.*, 2017.
- [63] T. Wei, C. Wang, Y. Rui και C. W. Chen, «Network morphism.,» *International conference on machine learning*, pp. 564-572, June 2016.

- [64] T. Elsken, J. H. Metzen και F. Hutter, «Efficient multi-objective neural architecture search via lamarckian evolution.,» *arXiv preprint arXiv:1804.09081*, 2018.
- [65] H. Jin, Q. Song και X. Hu, «Auto-keras: An efficient neural architecture search system.,» *In Proceedings of the 25th ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery & data mining*, pp. 1946-1956, 2019.
- [66] T. Wei, C. Wang και C. W. Chen, «Modularized morphing of neural networks.,» *arXiv preprint arXiv:1701.03281*, 2017.
- [67] H. Cai, T. Chen, W. Zhang, Y. Yu και J. Wang, «Efficient architecture search by network transformation.,» *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, τόμ. 32, αρ. 1, April 2018.
- [68] A. Gordon, E. Eban, O. Nachum, B. Chen, H. Wu, T. J. Yang και E. Choi, «Morphnet: Fast & simple resource-constrained structure learning of deep networks.,» *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 1586-1595, 2018.
- [69] M. Tan και Q. Le, «Efficientnet: Rethinking model scaling for convolutional neural networks.,» *International conference on machine learning*, pp. 6105-6114, May 2019.
- [70] H. Mendoza, A. Klein, M. Feurer, J. T. Springenberg και F. Hutter, «Mendoza, H., Klein, A., Feurer, M., Springenberg, J. T., & Hutter, F.,» *Workshop on automatic machine learning*, pp. 58-65, December 2016.
- [71] A. Zela, A. Klein, S. Falkner και F. Hutter, «Towards automated deep learning: Efficient joint neural architecture and hyperparameter search.,» *arXiv preprint arXiv:1807.06906*, 2018.
- [72] C. Liu, B. Zoph, M. Neumann, J. Shlens, W. Hua, L. Li, L. Fei-Fei, A. Yuille, J. Huang και K. Murphy, «Progressive neural architecture search.,» *Proceedings of the European conference on computer vision (ECCV)*, pp. 19-34, 2018.
- [73] C. White, W. Neiswanger και Y. Savani, «Bananas: Bayesian optimization with neural architectures for neural architecture search.,» *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, τόμ. 35, αρ. 12, pp. 10293-10301, May 2021.
- [74] J. M. Perez-Rua, M. Baccouche και S. Pateux, «Efficient progressive neural architecture search.,» *arXiv preprint arXiv:1808.00391*, 2018.
- [75] C. E. Rasmussen, «Gaussian processes in machine learning.,» *Summer school on machine learning*, pp. 63-71, February 2003.

- [76] F. Hutter, H. H. Hoos και K. Leyton-Brown, «Sequential model-based optimization for general algorithm configuration.,» *International conference on learning and intelligent optimization* , pp. 507-523, January 2011.
- [77] J. Bergstra, R. Bardenet, Y. Bengio και B. Kégl, «Algorithms for hyper-parameter optimization.,» *Advances in neural information processing systems*, 24., 2011.
- [78] R. Luo, F. Tian, T. Qin, E. Chen και T. Y. Liu, «Neural architecture optimization.,» *Advances in neural information processing systems*, 31., 2018.
- [79] M. Ian Dewancker και S. Clark, «Bayesian optimization primer.,» [Ηλεκτρονικό]. Available:
https://app.sigopt.com/static/pdf/SigOpt_Bayesian_Optimization_Primer.pdf.
- [80] S. Falkner, A. Klein και F. Hutter, «Practical hyperparameter optimization for deep learning.,» 2018.
- [81] A. Klein, S. Falkner, S. Bartels, P. Hennig και F. Hutter, «Fast bayesian optimization of machine learning hyperparameters on large datasets.,» *Artificial intelligence and statistics* , pp. 528-536, April 2017.
- [82] S. Xie, H. Zheng, C. Liu και L. Lin, «SNAS: stochastic neural architecture search.,» *arXiv preprint arXiv:1812.09926*., 2018.
- [83] H. Cai, L. Zhu και S. Han, «Proxylessnas: Direct neural architecture search on target task and hardware.,» *arXiv preprint arXiv:1812.00332*., 2018.
- [84] T. Desell, «Large scale evolution of convolutional neural networks using volunteer computing.,» *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion* , pp. 127-128, July 2017.
- [85] Z. Guo, X. Zhang, H. Mu, W. Heng, Z. Liu, Y. Wei και J. Sun, «Single path one-shot neural architecture search with uniform sampling.,» *European conference on computer vision* , pp. 544-560, August 2020.
- [86] M. Suganuma, S. Shirakawa και T. Nagao, «A genetic programming approach to designing convolutional neural network architectures.,» *Proceedings of the genetic and evolutionary computation conference*, pp. 497-504, July 2017.
- [87] T. Chen, I. Goodfellow και J. Shlens, «Net2net: Accelerating learning via knowledge transfer.,» *arXiv preprint arXiv:1511.05641*., 2015.
- [88] T. Elsken, J. H. Metzen και F. Hutter, «Simple and efficient architecture search for convolutional neural networks.,» *arXiv preprint arXiv:1711.04528*., 2017.

- [89] J. Snoek, H. Larochelle και R. P. Adams, «Practical bayesian optimization of machine learning algorithms.,» *Advances in neural information processing systems*, 25., 2012.
- [90] J. Bergstra, D. Yamins και D. D. Cox, «Hyperopt: A python library for optimizing the hyperparameters of machine learning algorithms.,» *Proceedings of the 12th Python in science conference*, τόμ. 13, αρ. 20, June 2013.
- [91] M. Feurer, A. Klein, E. K. J. Springenberg, M. Blum και F. Hutter, «Efficient and robust automated machine learning.,» *Advances in neural information processing systems*, 28., 2015.
- [92] F. Hutter, H. H. Hoos και K. Leyton-Brown, «Sequential model-based optimization for general algorithm configuration.,» *International conference on learning and intelligent optimization*, pp. 507-523, January 2011.
- [93] L. Kotthoff, C. Thornton, H. H. Hoos, F. Hutter και K. Leyton-Brown, «Auto-WEKA: Automatic model selection and hyperparameter optimization in WEKA.,» *Automated machine learning*, pp. 81-95, 2019.
- [94] C. Thornton, F. Hutter, H. H. Hoos και K. Leyton-Brown, «Auto-WEKA: Combined selection and hyperparameter optimization of classification algorithms.,» *Proceedings of the 19th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining*, pp. 847-855, August 2013.
- [95] K. Kandasamy, W. Neiswanger, J. Schneider, B. Póczos και E. P. Xing, «Neural architecture search with bayesian optimisation and optimal transport.,» *Advances in neural information processing systems*, 31., 2018.
- [96] P. Yanardag και S. V. N. Vishwanathan, «Deep graph kernels.,» *Proceedings of the 21th ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery and data mining*, pp. 1365-1374, August 2015.
- [97] J. Bourgain, «On Lipschitz embedding of finite metric spaces in Hilbert space.,» *Israel Journal of Mathematics*, 52(1), pp. 46-52, 1985.
- [98] P. Auer, N. Cesa-Bianchi και P. Fischer, «Finite-time analysis of the multiarmed bandit problem.,» *Machine learning*, 47(2), pp. 235-256, 2002.
- [99] P. E. Hart, N. J. Nilsson και B. Raphael, «A formal basis for the heuristic determination of minimum cost paths.,» *EEE transactions on Systems Science and Cybernetics*, 4(2), pp. 100-107, 1968.

- [100] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt Jr και M. P. Vecchi, «Optimization by simulated annealing. science, 220(4598),» pp. 671-680, 1983.
- [101] K. A. Severson, P. M. Attia, N. Jin, N. Perkins, B. Jiang, Z. Yang, ... και R. D. Braatz, «Data-driven prediction of battery cycle life before capacity degradation.,» *Nature Energy*, 4(5), pp. 383-391, 2019.
- [102] L. Chenxi, Z. Barret, S. Jonathon, H. Wei, L. Li-Jia, F.-F. Li, Y. Alan, H. Jonathan και K. Murphy, «Progressive neural architecture,» σε *European Conference on Computer Vision*, 2017.
- [103] L. Buitinck, G. Louppe, M. Blondel, F. Pedregosa, A. Mueller, O. Grisel, V. Niculae, P. Prettenhofer, A. Gramfort, J. Grobler και R. Layton, «API design for machine learning software: experiences from the scikit-learn project.,» *arXiv preprint arXiv:1309.0238.*, 2013.
- [104] F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort, V. Michel, B. Thirion, O. Grisel, M. Blondel, P. Prettenhofer, R. Weiss, V. Dubourg και J. Vanderplas, «Scikit-learn: Machine learning in Python.,» *the Journal of machine Learning research*, 12, pp. 2825-2830., 2011.
- [105] M. F. Ng, J. Zhao, Q. Yan, G. J. Conduit και Z. W. Seh, «Predicting the state of charge and health of batteries using data-driven machine learning,» *Nature Machine Intelligence*, 2(3), pp. 161-170, 2020.
- [106] N. O. Nikitin, P. Vychuzhanin, M. Sarafanov, I. S. Polonskaia, I. Revin, I. V. Barabanova, ... και A. Boukhanovsky, «Automated evolutionary approach for the design of composite machine learning pipelines.,» *Future Generation Computer Systems*, 127, pp. 109-125, 2022.
- [107] Q. Yao, M. Wang, Y. Chen, W. Dai, Y. F. Li, W. W. Tu, ... και Y. Yu, «Taking human out of learning applications: A survey on automated machine learning.,» *arXiv preprint arXiv:1810.13306.*, 2018.
- [108] M. S. H. Lipu, M. A. Hannan, A. Hussain, M. H. Saad, A. Ayob και F. Blaabjerg, «State of charge estimation for lithium-ion battery using recurrent NARX neural network model based lightning search algorithm.,» *IEEE access*, 6, pp. 28150-28161, 2018.