由於我目前是專題生,在實驗室裡我還沒有開始進行研究,上個學期開始有跟著實驗室的學長學習 Deep Learning 的相關知識,並在這學期以復現許家維學長的碩士論文《基於深度學習進行電池性質預測》內的電池壽命預測模型為驗收目標。

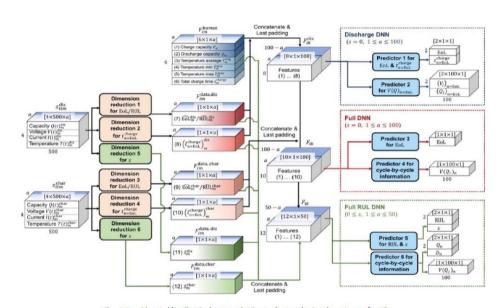


圖 13 特徵篩選器與預測器於本研究框架的示意圖。

這篇論文使用 K. A. Severson 等人的研究 "Data-driven prediction of battery cycle life before capacity degradation" 內的電池資料,目前我還不具備自己產資料的能力,因此在復現時也是使用這個資料集。

由於老師們很熟悉這篇論文,因此文章的內容我就不再贅述,我會將重點放在 我在復現的過程中遇到的問題,以及有哪些嘗試與想法。

首先我的第一個目標是上圖框架的 Predictor 1, 也就是只使用放電資料預測電池 EOL 以及在「達到 EOL 循環的充電時間」的模型, Predictor 1 的訓練會用到 6 個循環間的放電資料, 以及 2 個特徵篩選器的預測結果, 其中, 這兩

個特徵篩選器是使用 4 個循環內資料訓練的 1-D CNN 訓練而成,我在訓練特徵 篩器的過程中就遇到了嚴重的 overfitting,我嘗試過加入 batch normalization layer、調整各項模型參數(dropout, weight decay, learning rate 等)以及使用自 動化參數搜尋法等方式,都還是沒辦法取得跟學長論文內一樣高的準確率,並 且在後續訓練 Predictor 1 時,同樣出現以上問題,模型的預測能力不穩定,導 致預測結果時好時壞,而目前我在 Predictor 1 能夠得到最低的 RMSE 是 127,與學長論文中的 33 還差非常多。

由於這個任務本身已經是使用機器學習,因此我將談談我想嘗試以什麼方法來突破目前遇到的瓶頸。首先是要更加瞭解資料集本身,資料本身的好壞是最直接決定模型能否訓練成功的,因此我需要將資料集都以視覺化的方式呈現,並確定所有資料都是合理的,在這之前還需要去學習與電池相關的專業知識。其次是多去閱讀相關模型架構的論文,我認為光是瞭解模型的用法和數學理論是無法把模型訓練好的,例如1-DCNN,透過閱讀其他不同任務但是同樣使用1-DCNN的論文,不僅可以觀察該模型在什麼情況下會有好的成效,也能學習他人用了哪些方式改善訓練遇到的問題。

最後如果能成功結束對這篇學長論文的學習, 我也會想嘗試其他與電池製程有關的任務, 更進一步結合機器學習與材料本系的專長。