

# 基于可解释机器学习的固体填充床储热装置快速设计研究

范昌浩<sup>1</sup>, 李明佳<sup>2</sup>, 李梦杰<sup>1</sup>, 张腾<sup>1</sup>, 张传琪<sup>2</sup>

(1. 西安交通大学国家储能技术产教融合创新平台(中心), 710049, 西安;

2. 北京理工大学机械与车辆学院, 100081, 北京)

**摘要:** 为了解决填充床储热装置性能计算耗时、设计方法匮乏、难以满足多种储热场景需求的问题,提出了一种具有一定通用性、能够快速给出准确设计结果的固体填充床储热装置设计方法。首先,建立了固体填充床储热装置储热效能数据集,基于此训练了可准确预测装置储热效能的人工神经网络模型;其次,采用 SHapley Additive exPlanation 方法对人工神经网络模型的预测进行解释,量化了材料物性、装置结构尺寸以及运行参数对装置储热效能的影响;最后,建立了固体填充床储热装置储热效能关联式,基于储热效能关联式提出了适用于多种储热场景的填充床储热装置设计流程,并以西班牙 Andasol 1 光热电站中的储热装置为实例进行了计算分析。研究结果表明:储热效能关联式计算结果与数值模拟结果的相对偏差在 10% 以内,可用于填充床储热装置储热效能的快速计算和准确预测;与传统数值模拟方法相比,所提方法的计算效率提高了 5 个数量级,设计方案经济上可行,证明了该储热效能关联式在工程实践中的便利性和实用性。

**关键词:** 填充床储热装置;储热效能;快速设计;可解释机器学习

**中图分类号:** TK124 **文献标志码:** A

**DOI:** 10.7652/xjtuxb202411008 **文章编号:** 0253-987X(2024)11-0087-11

## Research on Rapid Design of Solid Packed-Bed Heat Storage Devices Based on Interpretable Machine Learning

FAN Changhao<sup>1</sup>, LI Mingjia<sup>2</sup>, LI Mengjie<sup>1</sup>, ZHANG Teng<sup>1</sup>, ZHANG Chuanqi<sup>2</sup>

(1. National Innovation Platform (Center) for Industry-Education Integration of Energy Storage Technology,

Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China; 2. School of Machinery and Vehicle,

Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

**Abstract:** In order to address the issues of time-consuming performance calculations, lack of design methods, and difficulty in meeting various heat storage requirements for packed-bed heat storage devices, a design method for solid packed-bed heat storage devices is proposed which is versatile and can rapidly provide accurate design results. Firstly, a dataset of heat storage efficiency for solid packed-bed heat storage devices is established, and an artificial neural network model is trained to accurately predict the device's heat storage efficiency. Secondly, the SHapley Additive exPlanation method is used to explain the predictions of the artificial neural network model, quantifying the effects of material properties, device structure dimensions and operating

收稿日期: 2024-02-09。 作者简介: 范昌浩(1999—),男,博士生;李明佳(通信作者),女,教授,博士生导师。

基金

项目: 国家自然科学基金资助项目(52293413,52076161)。

网络出版时间: 2024-07-30

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/61.1069.T.20240725.1809.002>

parameters on the device's heat storage efficiency. Finally, a correlation formula for the heat storage efficiency of solid packed-bed heat storage devices is established. Based on the heat storage efficiency correlation formula, a design process for packed-bed heat storage devices suitable for various heat storage scenarios is proposed and analyzed using the heat storage device in the Andasol 1 solar thermal power station in Spain as a case study. The results demonstrate that the relative deviation of the heat storage efficiency correlation calculation results from the numerical simulation results is within 10%, suitable for rapid calculation and accurate prediction of heat storage efficiency for packed-bed heat storage devices. Compared to traditional numerical simulation methods, the computational efficiency is increased by five orders of magnitude. In addition, the design solution is economically feasible, emphasizing the convenience and practicality of the thermal storage efficiency correlation formula in engineering practice.

**Keywords:** packed-bed heat storage device; heat storage efficiency; rapid design; interpretable machine learning

储热技术具有储能密度高、容量大等优点,可以有效解决热能供需不匹配问题,是一种极具应用前景的规模化储能技术<sup>[1]</sup>。固体填充床储热是一种新型的储热技术,其采用固体颗粒(如石英岩等)作为储热材料进行热能存储,熔盐或导热油等作为传热流体与固体颗粒进行换热。由于储放热过程可以在一个储罐内实现,且固体储热材料成本较低,因此与双罐储热相比,固体填充床储热技术的储热成本可有效降低,在技术和经济层面均有望实现规模化工程应用<sup>[2]</sup>。在填充床储热装置内部存在复杂的非稳态导热-对流耦合传热过程,储热性能受多因素、多过程影响。目前,文献中对填充床储热装置的储热性能评估可以概括为以下3种方法。

第1种储热性能评估方法为数值模拟方法,即通过求解控制方程获得装置中传热流体与储热材料之间的热量传递以及温度分布,进而得到装置的储热性能,其中舒曼模型、同心-扩散模型与连续固相模型是常用的填充床储热装置数值模型<sup>[3-4]</sup>。Wu等<sup>[5]</sup>采用舒曼模型对填充床储热装置的储热性能进行了数值研究,发现减小储热材料颗粒直径可以有效提升装置的储热效能。Li等<sup>[6]</sup>采用同心-扩散模型研究了储热材料颗粒直径对填充床储热装置储热性能的影响,并提出了一种新型的变球径填充床储热装置。Xu等<sup>[7]</sup>采用连续固相模型研究了储热材料导热系数对装置储热性能的影响,发现在储热材料颗粒直径较大时,降低材料导热系数会显著减弱与传热流体之间的换热。Li等<sup>[8]</sup>采用连续固相模型对填充床储热装置的储热性能进行了数值研究,并提出了一种采用多种储热材料的多层填充床储热装置,其储热效能比单层填充床储热装置提高了10.5%。

第2种储热性能评估方法为性能评价图表及关联式方法,即通过对填充床储热装置的控制方程进行合理简化、无量纲处理以及理论计算,绘制出性能评价图表并拟合关联式,以快速评估填充床储热装置的储热性能。Li等<sup>[9]</sup>通过对无量纲化的控制方程进行理论计算,绘制了填充床储热装置储热性能评价图表,工程师可以通过查询图表确定填充床储热装置的结构尺寸以及运行参数。Ma等<sup>[10]</sup>对熔盐填充床储热装置控制方程中的各物理量进行无量纲化,通过理论计算提出了熔盐填充床储热装置的储热效能评价图及关联式,可以应用于熔盐填充床储热装置的快速设计。

第3种储热性能评估方法为机器学习方法,即通过对大量数据进行分析 and 处理,以建立预测模型来快速评估填充床储热装置的储热性能。Anand等<sup>[11]</sup>对比评估了多种机器学习模型在填充床储热装置性能预测方面的表现,证明了机器学习方法在分析填充床储热装置性能方面的有效性。Yang等<sup>[12]</sup>采用支持向量机模型对填充床储热装置储热性能进行了预测,并采用遗传算法进行了优化,研究结果表明,优化后的填充床储热装置储热量与放热量得到提升。

然而,实际应用场景中热量来源广泛,性能需求复杂,亟需具有一定通用性、能够快速给出准确设计结果的固体填充床储热装置设计方法。对于数值模拟方法,其优点为性能预测准确、适用范围广泛,可用于多种储热场景下的填充床储热装置性能预测,但该方法需要求解偏微分方程来获得装置性能,计算量较大,难以满足填充床储热工程设计的时效性。对于性能评价图表及关联式方法,其优点在于装置

性能预测效率高,但图表难以涵盖工程应用中各种参数,关联式是在进行一定简化的基础上理论推导获得,适用范围较窄,难以满足储热多场景设计需求。对于机器学习方法,其优点在于性能预测效率高、适用范围广泛,但机器学习模型本质上是“黑箱模型”,忽略了装置内部的物理本质,难以给出令人信服的设计方案。

近年来,可解释机器学习方法逐渐受到关注,该方法具有极强的非线性挖掘能力,能够对输入特征的贡献进行量化和排序,目前已应用于多个领域,为填充床储热装置的储热性能快速评估和装置高效设计提供了解决思路<sup>[13-15]</sup>。Qiao 等<sup>[16]</sup>采用可解释机器学习方法对能源消耗与二氧化碳排放进行了研究,不仅准确获得了两者的未来预测,而且定量揭示了每个输入特征对预测的贡献。Bialek 等<sup>[17]</sup>采用人工神经网络(ANN)模型对区域供热网络总热需求进行了预测,并采用 SHapley Additive exPlanations (SHAP)方法对模型预测进行解释,准确获得了热需求的未来预测以及与各输入特征的关系,建立了对“黑箱模型”的信任。从以上研究可以看出,可解释机器学习方法可以准确地反映预测变量与输入特征之间的非线性关系,量化各输入特征的贡献,可用于构建填充床储热装置储热效能关联式,提高关联式的预测精度和通用性,实现填充床储热装置的快速设计。

鉴于此,本文将可解释机器学习方法应用于固体填充床储热装置的性能快速评估与装置高效设计,采用储热效能作为装置储热性能的评价指标。首先,利用 ANN 模型挖掘材料物性、装置结构尺寸以及运行参数与装置储热效能的非线性关系,获得装置储热效能的快速准确预测;其次,采用 SHAP 可解释方法对 ANN 模型预测进行全局解释,量化各影响因素对装置储热效能的影响;最后,提出固体填充床储热装置储热效能关联式,并将其应用到装置快速设计中,形成适用于多种储热场景的固体填充床储热装置设计流程。

## 1 模型与方法

### 1.1 填充床储热装置模型

填充床储热装置的物理模型如图 1 所示。在储热过程中,高温传热流体经过均流器,从罐体顶部流入填充床区域,将热量传递给固体储热材料,被冷却后从罐体底部流出;当斜温层区域到达罐体底部时,出口温度升高,当达到储热过程出口阈值温度时,储

热过程停止。在放热过程中,来自于罐体底部的低温传热流体经过均流器流入填充床区域,固体储热材料将热量传递给传热流体,被加热的传热流体从罐体顶部流出;当斜温层区域到达罐体顶部时,出口温度降低,当达到放热过程出口阈值温度时,放热过程停止。

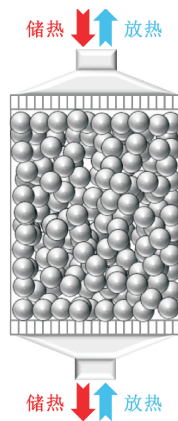


图 1 填充床储热装置物理模型

Fig. 1 Physical model of packed-bed heat storage device

在热源温度及用热温度的限制下,储热和放热过程的出口阈值温度根据文献[8]确定,分别如下式所示

$$\frac{T_{\text{ch,th}} - T_{\text{dch,in}}}{T_{\text{ch,in}} - T_{\text{dch,in}}} = 0.39 \quad (1)$$

$$\frac{T_{\text{dch,th}} - T_{\text{dch,in}}}{T_{\text{ch,in}} - T_{\text{dch,in}}} = 0.74 \quad (2)$$

式中:  $T_{\text{ch,th}}$  和  $T_{\text{dch,th}}$  分别代表储热和放热过程的出口阈值温度;  $T_{\text{ch,in}}$  和  $T_{\text{dch,in}}$  分别代表储热和放热过程的进口传热流体温度。

采用同心-扩散模型计算填充床储热装置中传热流体和储热材料的温度分布,二者的能量方程分别如下

$$\epsilon \frac{\partial(\rho_f c_{p,f} T_f)}{\partial t} + u \frac{\partial(\rho_f c_{p,f} T_f)}{\partial x} = \epsilon \lambda_f \frac{\partial^2 T_f}{\partial x^2} + h_v (T_{s,R} - T_f) + h_w (T_a - T_f) \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho_s c_{p,s} T_s)}{\partial t} = \lambda_s \left( \frac{\partial^2 T_s}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) \quad (4)$$

式中:  $\epsilon$  为孔隙率;  $\rho$  和  $c_p$  分别代表密度和比热容;  $t$  为时间;  $x, r$  分别为罐体轴向坐标、储热颗粒径向坐标;  $T_{s,R}$  为储热材料颗粒外表面温度;  $u$  为传热流体流速;  $\lambda$  为导热系数; 下标 f、s 和 a 分别代表传热流体、储热材料和外界空气;  $h_v$  是间隙对流换热系数;  $h_w$  描述从传热流体到外界空气的热损失<sup>[18-19]</sup>。 $\epsilon$ 、 $h_v$ 、 $h_w$  的计算公式如下

$$\varepsilon = 0.368 + 0.216d_p/D_{bed} \quad (5)$$

$$h_v = 6(1 - \varepsilon)\lambda_f(2 + 1.1Pr^{1/3}Re^{0.6})/d_p^2 \quad (6)$$

$$h_w = \frac{2}{r_1} \left( \frac{1}{h_{inner}} + r_1 \sum_{i=1}^2 \frac{1}{\lambda_i} \ln \left( \frac{r_{i+1}}{r_i} \right) \right) \quad (7)$$

$$h_{inner} = \frac{\lambda_f}{d_p} [(0.203Re^{1/3}Pr^{1/3}) + (0.220Re^{0.8}Pr^{0.4})] \quad (8)$$

式中:  $d_p$  为储热材料颗粒直径;  $D_{bed}$  代表填充床储热装置的罐体直径;  $Pr$  和  $Re$  分别是普朗特数和雷诺数;  $h_{inner}$  是传热流体与填充床储罐内壁之间的对流换热系数;  $r_1$ 、 $r_2$  和  $r_3$  分别表示储罐内表面半径、储罐外表面半径和保温层外表面半径。

模型的初始条件与边界条件如下式所示

$$T_f = T_s = T_{dch,in}, t = 0 \quad (9)$$

$$T_f = T_{in}, x = 0; \frac{\partial T_f}{\partial x} = 0, x = H \quad (10)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial r} = 0, r = 0; \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} = h_v(T_f - T_s), r = \frac{d_p}{2} \quad (11)$$

式中:  $T_{in}$  为进口传热流体温度。

为了便于定量描述填充床储热装置的储热性能,定义了以下关键参数:理论储热量( $Q_{ide}$ )为储热装置在运行温度范围内可储存的最大热量;储热功率( $\Phi_{ch}$ )和放热功率( $\Phi_{dch}$ )分别表示储热过程和放热过程中传热流体和储热材料之间的热交换功率;有效放热量( $Q_{eff}$ )为传热流体在放热过程中实际带走的热量;储热效能( $\eta$ )为有效放热量与理论储热量之比,反映填充床储热装置的能量利用率<sup>[10]</sup>。这些参数计算式如下

$$Q_{ide} = \frac{\pi D_{bed}^2 H_{bed}}{4} (T_{ch,in} - T_{dch,in}) \cdot [\varepsilon \rho_f c_{p,f} + (1 - \varepsilon) \rho_s c_{p,s}] \quad (12)$$

$$\Phi_{ch} = \rho_f v_{ch} \frac{\pi D_{bed}^2}{4} c_{p,f} (T_{ch,in} - T_{ch,out}) \quad (13)$$

$$\Phi_{dch} = \rho_f v_{dch} \frac{\pi D_{bed}^2}{4} c_{p,f} (T_{dch,out} - T_{dch,in}) \quad (14)$$

$$Q_{eff} = \int_0^{t_{dch}} \Phi_{dch} dt \quad (15)$$

$$\eta = \frac{Q_{eff}}{Q_{ide}} \quad (16)$$

式中:  $H_{bed}$  代表填充床储热装置的罐体高度;  $t_{dch}$  代表有效放热时间;  $v$  为传热流体流速; 下标  $ch$ 、 $dch$ 、 $in$  和  $out$  分别代表储热过程、放热过程、入口和出口。

为了保证模型的可靠性,取储热时间 150 min、高度 4 m 处的储热材料温度进行了网格和时间步长独立性检验,检验了 8 种网格尺寸和 6 种时间步长,

检验结果如图 2 所示,最终网格尺寸选择  $dx=0.01$  m、 $dr=0.0005$  m,时间步长选择 1 s。

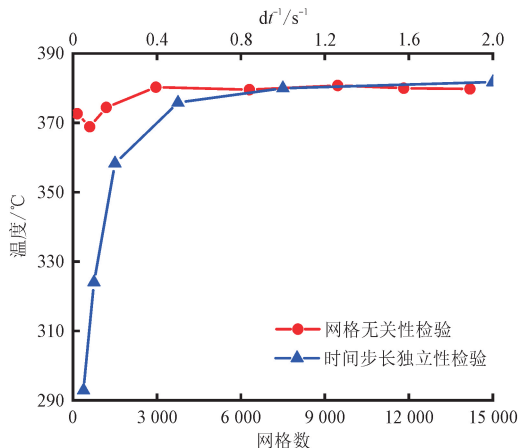


图 2 网格和时间步长独立性检验

Fig. 2 Grid and time step independence tests

此外,将仿真结果与美国桑迪亚国家实验室的实验结果<sup>[20]</sup>进行了对比,图 3 展示了不同放热时刻罐体沿轴线传热流体温度分布的模拟与实验结果对比,可以看出模拟与实验结果温度分布趋势吻合良好,最大相对误差在 10% 以内,说明模型有效。

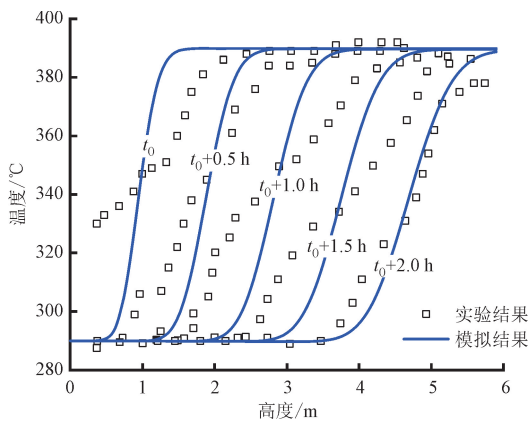


图 3 模型准确性验证

Fig. 3 Validation of the model with the experimental results

## 1.2 人工神经网络模型

人工神经网络是由简单神经元组成的并行互联网络,其典型代表为多层前馈神经网络,能够以任意精度逼近任意复杂程度的连续函数,可以有效处理大规模数据和高维特征问题<sup>[21]</sup>。反向传播(BP)算法是训练 ANN 模型的典型算法,采用梯度下降策略,实现损失函数最小化<sup>[22]</sup>。考虑到所建立的数据集特点(数据量大、特征维度高),使用基于 BP 算法的多层前馈神经网络预测装置储热效能,激活函数和优化算法分别选择 ReLU 函数和 Adam 算法,模

型评价指标选择回归系数 ( $R^2$ ) 和均方根误差 ( $\delta_{\text{MSE}}$ )<sup>[23]</sup>, 分别如下所示

$$R^2 = 1 - \left[ \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2 \right] / \left[ \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2 \right] \tag{17}$$

$$\delta_{\text{MSE}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2 \tag{18}$$

式中:  $y_i$  和  $\hat{y}_i$  分别为储热效能的模拟值和预测值;  $\bar{y}_i$  为储热效能的平均值。

在 ANN 模型训练过程中, 为了提高预测精度的同时避免过拟合, 采用网格搜索算法和五折交叉验证对模型中的超参数进行寻优, 超参数集合包括隐藏层神经元数量。ANN 模型训练过程如图 4 所示, 分为 3 个步骤。

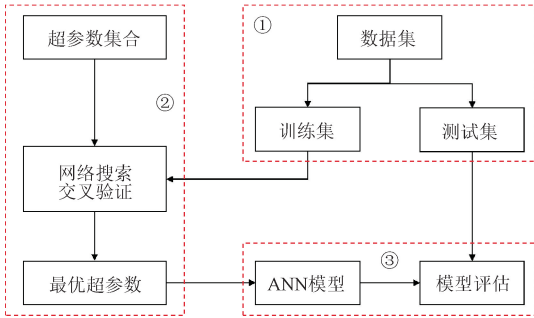


图 4 ANN 模型训练流程图

Fig. 4 Flow chart for training ANN model

(1)数据集划分:将预处理后的数据集随机排序,80%作为训练集(12 000 个样本),20%作为测试集(3 000 个样本);

(2)超参数寻优:采用网格搜索算法遍历超参数集合,对每一个超参数组合进行五折交叉验证,获得

模型评分,筛选最优超参数;

(3)模型评估:根据最优超参数确定 ANN 模型结构,并在测试集上进行测试,获得模型最终评分。

1.3 SHAP 可解释方法

SHAP 是由 Lundberg 等<sup>[24]</sup> 基于合作博弈论提出的模型解释方法,可进行模型的全局与局部解释。该方法首先构建不同输入特征的组合,通过比较输入特征  $x_i$  存在或不存在情况下模型输出变化的平均值来阐明其贡献,即模型中输入特征  $x_i$  的贡献,其计算公式为

$$\varphi(x_i) = \sum \left\{ \frac{|S|!(N-|S|-1)!}{N!} \cdot [f(S \cup \{x_i\}) - f(S)] \right\} \tag{19}$$

式中:  $N$  为输入特征数;  $N_{\{i\}}$  为不包括  $x_i$  的所有输入特征可能的集合;  $S$  为  $N_{\{i\}}$  中的特征子集;  $f(S)$  为特征子集  $S$  的模型预测;  $f(S \cup \{x_i\})$  为特征子集  $S$  加上特征  $x_i$  的模型预测。

基于此,SHAP 可解释方法将模型的预测值  $\hat{y}$  解释为每个输入特征对储热效能的贡献之和,计算公式为

$$\hat{y} = \varphi_0 + \sum_{i=1}^N \varphi(x_i) \tag{20}$$

式中:  $\varphi_0$  表示当没有特征对模型预测有贡献时的模型预测基值。

2 数据集建立

根据本团队已有研究可知,填充床储热装置的储热性能受材料物性、装置结构尺寸以及运行参数等多层面因素影响,基于此确定了 12 个线性不相关的变量及其上下界,如表 1 所示。

表 1 变量及其上下界

Table 1 Variables and their range

| 类型   | 参数                                                                      | 下界      | 上界    |
|------|-------------------------------------------------------------------------|---------|-------|
| 材料物性 | 储热材料密度 $\rho_s/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$                         | 2 000   | 6 000 |
|      | 储热材料比热容 $c_{p,s}/(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$   | 500     | 1 500 |
|      | 储热材料导热系数 $\lambda_s/(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ | 1       | 30    |
|      | 传热流体密度 $\rho_f/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$                         | 1 000   | 3 000 |
|      | 传热流体比热容 $c_{p,f}/(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$   | 500     | 2 000 |
|      | 传热流体导热系数 $\lambda_f/(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ | 0.1     | 3.0   |
|      | 传热流体动力黏度 $\mu/(\text{Pa} \cdot \text{s}^{-1})$                          | 0.001   | 0.005 |
| 结构尺寸 | 储热材料颗粒直径 $d_p/\text{m}$                                                 | 0.01    | 0.05  |
|      | 储热罐体高度 $H_{\text{bed}}/\text{m}$                                        | 2       | 10    |
|      | 储热罐体直径 $D_{\text{bed}}/\text{m}$                                        | 2       | 10    |
| 运行过程 | 储热过程传热流体流速 $v_{\text{ch}}/(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$               | 0.000 1 | 0.001 |
|      | 放热过程传热流体流速 $v_{\text{dch}}/(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$              | 0.000 1 | 0.001 |

拉丁超立方抽样是一种应用于多维特征的均匀抽样方法,可以在有限数据点的情况下提高样本的覆盖度和均匀性,从而保证样本代表性与多样性<sup>[25]</sup>。本文采用拉丁超立方抽样随机组合各研究变量,通过大量数值模拟构建了填充床储热装置的储热性能数据集,装置的输入特征维度为 12,输入特征中每个变量的取值范围被归一化为 0~1,数据集样本总数为 15 000,拉丁超立方抽样的具体实施步骤如下:

- (1)将输入特征每个维度的取值范围均分为互不重叠的 15 000 个区间,并使得在每个区间取点的概率相等;
- (2)对输入特征的每个维度,在每个小区间内随机抽样,并将取出的 15 000 个点随机排列,得到每个样本在该维度的值;
- (3)将每个样本在每个维度抽样的值组合成向量,即得到含有 15 000 个样本的数据集,数据集的输入涵盖了材料物性、装置结构尺寸以及运行参数,输出为储热效能。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 ANN 模型评估与储热效能全局解释

本节利用网格搜索与交叉验证方法对 ANN 模型的隐藏层数和隐藏层神经元数量进行了优化,

结果如表 2 所示,可以看出,隐藏层数为 3,隐藏层神经元数量为[130, 110, 90]的 ANN 模型在验证集和测试集上的回归系数均最高,由此可知该模型的预测性能最优。在训练过程中,最优 ANN 模型的损失曲线和准确率曲线分别如图 5 和图 6 所示,可以看出,随着训练过程的进行,模型的损失函数逐渐降低,在 100 次迭代后达到稳定且接近于 0;模型的准确率逐渐升高,在 50 次迭代后达到稳定且接近于 1,说明模型训练稳定性较好。训练结束后 ANN 模型的误差直方图如图 7 所示,可以看出在训练集和测试集上的误差直方图中,大部分误差较小且集中在 0 附近,训练集和测试集上的误差分布相似程度较高,表明 ANN 模型的预测误差较小,不存在欠拟合和过拟合问题。

此外,为了验证 ANN 模型的泛化能力,对其在测试集上的预测性能进行了检验,检验结果如图 8 所示,可以看出储热效能的预测值与真实值吻合度较高,仅有个别散点偏离真实值较多,相对偏差维持在 5%以内。由此可知,ANN 模型能够较好地反映材料物性、装置结构尺寸以及运行参数与装置储热效能之间的非线性关系,模型的稳定性、预测精度与泛化能力均较高。

表 2 隐藏层数和神经元数量优化结果

| Table 2 Optimization results of hidden layer numbers and neuron numbers |                       |                |         |         |
|-------------------------------------------------------------------------|-----------------------|----------------|---------|---------|
| 隐藏层数                                                                    | 神经元数量搜索范围             | 最优神经元数量        | 验证集回归系数 | 测试集回归系数 |
| 1                                                                       | [0~5 000]             | [4 400]        | 0.927   | 0.946   |
| 2                                                                       | [0~500, 0~500]        | [350, 300]     | 0.941   | 0.958   |
| 3                                                                       | [0~200, 0~150, 0~100] | [130, 110, 90] | 0.957   | 0.972   |

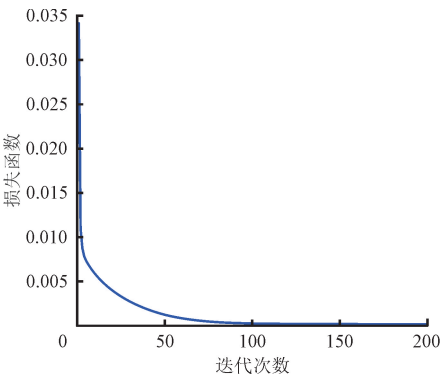


图 5 ANN 模型损失曲线  
Fig. 5 Loss curve of ANN model

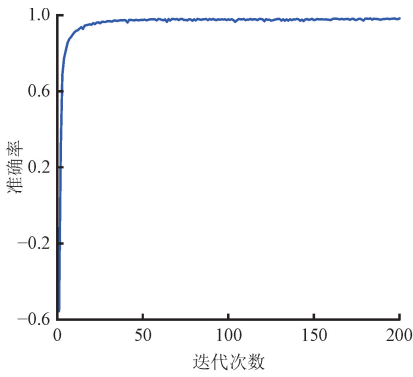
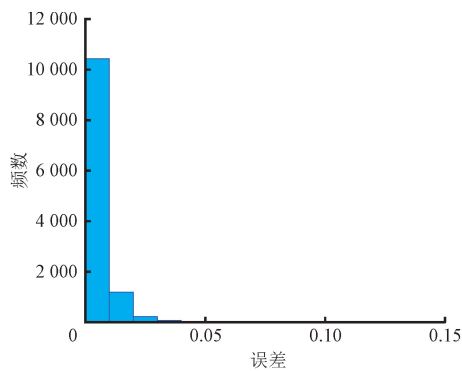
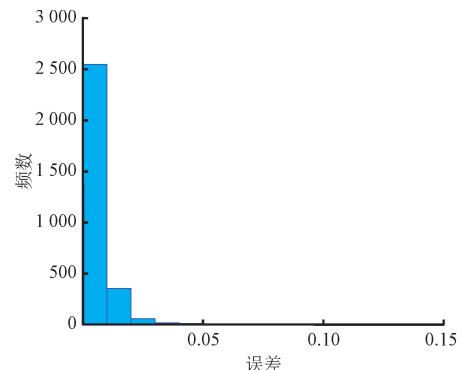


图 6 ANN 模型准确率曲线  
Fig. 6 Accuracy curve of ANN model



(a)训练集



(b)测试集

图 7 ANN 模型误差直方图  
Fig. 7 Error histogram of ANN model

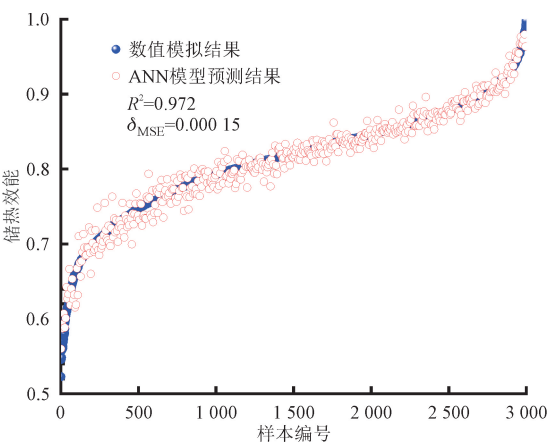


图 8 ANN 模型泛化能力评估

Fig. 8 Generalization ability evaluation of ANN model

采用 SHAP 可解释方法对构建的 ANN 模型进行解释,如图 9 所示,其中横轴表示各输入特征对装置储热效能的贡献,纵轴按照重要程度对输入特征排序;图中的每个点代表一个样本,样本量在纵向堆积;颜色表示输入特征的值,红色对应高值,蓝色对应低值。可以看出,储热材料颗粒直径、储热罐体高度以及传热流体导热系数是影响装置储热效能的主要因素。其中,储热材料颗粒直径与储热效能呈负

相关,即高的储热材料颗粒直径(红色)对储热效能呈现负向影响,低的储热材料颗粒直径(蓝色)对储热效能呈现正向影响,因此减小储热材料颗粒直径是提高装置储热效能的有效措施。同理可以发现,储热罐体高度、传热流体导热系数均与储热效能呈现正相关,即增加储热罐体高度、选择高导热的传热流体可以有效提高装置的储热效能。因此,储热效能全局解释可以定性指导固体填充床储热装置的性能强化。

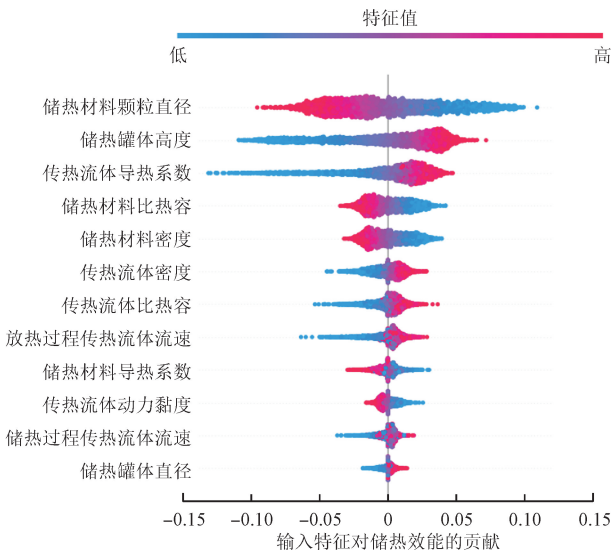


图 9 储热效能全局解释

Fig. 9 Global explanation of the heat storage effectiveness

3.2 储热效能关联式建立

在 3.1 节的基础上,提取材料物性、装置结构尺寸以及运行参数对储热效能的定量影响关系,建立储热效能的定量描述关联式。为了提高关联式的普适性,对输入特征进行了无量纲化处理,包括储热材料密度  $\rho_s$ 、储热材料比热容  $c_{p,s}$ 、储热材料导热系数  $\lambda_s$ 、传热流体密度  $\rho_f$ 、传热流体比热容  $c_{p,f}$ 、传热流体导热系数  $\lambda_f$ 、传热流体动力黏度  $\mu$ 、储热材料颗粒直径  $d_p$ 、储热罐体高度  $H_{bed}$ 、储热罐体直径  $D_{bed}$ 、储热过程传热流体流速  $v_{ch}$  及放热过程传热流体流速  $v_{dch}$ , 计算公式为

$$x_i^* = \frac{x_i - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}$$

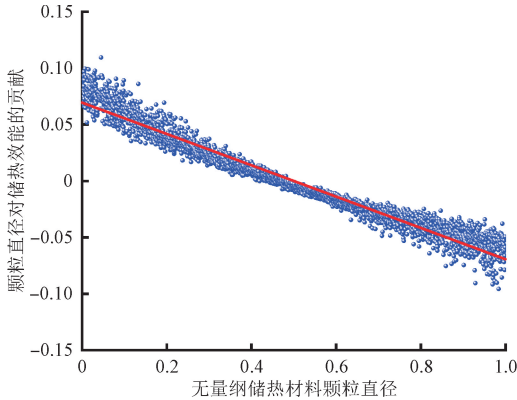
(21)

式中:  $x_i$  代表特征量的实际值;  $x_{max}$ 、 $x_{min}$  分别代表特征量的上、下界;  $x_i^*$  代表无量纲化后的特征值。

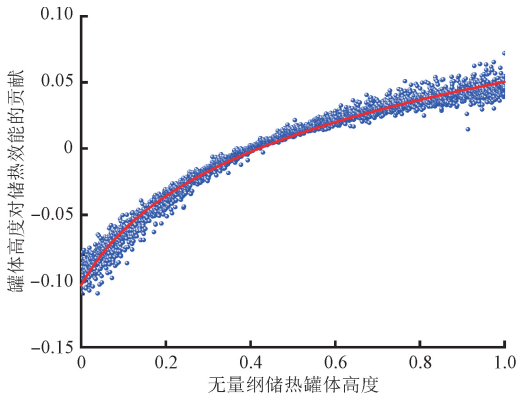
根据 SHAP 可解释方法分析结果可知,ANN 模型的储热效能预测基值为 0.812。图 10 展示了主要因素对储热效能的定量影响关系,可以看出,储热效能与无量纲储热材料颗粒直径呈现线性关系,与无量

纲储热罐体高度及传热流体导热系数呈现对数关系。根据式(20),将所有输入特征的贡献与 ANN 模型预测基值相加,得到储热效能关联式

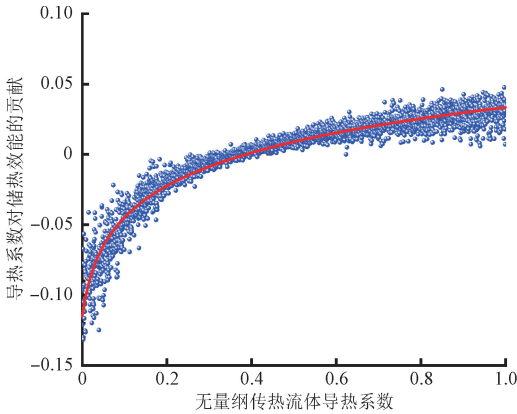
$$\eta = -0.046\ln(\rho_s^* + 0.50) - 0.059\ln(c_{p,s}^* + 0.71) - 0.018\lambda_s^* + 0.025\ln(\rho_f^* + 0.29) + 0.014\ln(c_{p,f}^* + 0.073) + 0.036\ln(\lambda_f^* + 0.16) - 0.014\ln(\mu_f^* + 0.30d) - 0.14d_p^* + 0.069\ln(H_{bed}^* + 0.12) + 0.0063\ln(D_{bed}^* + 0.11) + 0.0061v_{ch}^* + 0.025v_{dech}^* + 0.97 \quad (22)$$



(a) 储热材料颗粒直径



(b) 储热罐体高度



(c) 传热流体导热系数

图 10 主要因素对储热效能的定量影响

Fig. 10 Quantitative influence of main influencing factors on the heat storage effectiveness

为了验证储热效能关联式的可靠性与通用性,在数据集范围之外( $10\text{ m} \leq H_{bed} \leq 16\text{ m}$ ,  $10\text{ m} \leq D_{bed} \leq 50\text{ m}$ )随机抽取了 500 个样本对其预测性能进行检验<sup>[26]</sup>。图 11 给出了储热效能关联式计算结果与模拟结果的误差对比,可以看出关联式计算结果与模拟结果吻合较好,二者之间的相对偏差在 10% 以内,表明利用可解释机器学习方法构建的储热效能关联式可用于填充床储热装置储热效能的快速准确预测。

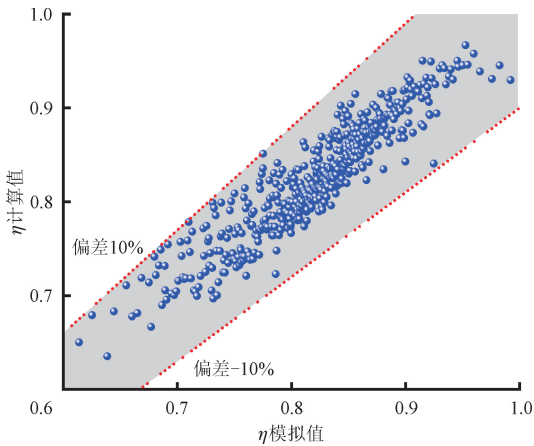


图 11 储热效能关联式计算结果与数值模拟结果的对比  
Fig. 11 Comparison between the results calculated by the heat storage effectiveness correlation and numerical simulation

3.3 储热效能关联式在装置设计中的应用

将 3.2 节提出的储热效能关联式应用于填充床储热装置的设计中,以获得针对给定储热场景的填充床储热装置全参数设计方案,流程如图 12 所示。

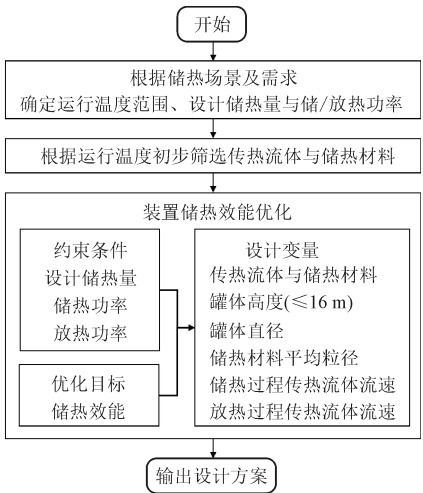


图 12 填充床储热装置设计流程

Fig. 12 Design procedure of the packed-bed heat storage device

对于给定的储热场景,已知运行温度范围、设计储热量以及储/放热功率。首先,根据给定的运行温度范围初步筛选合适的传热流体和储热材料。随后,以设计储热量、储热功率、放热功率为约束条件,以装置储热效能为优化目标,对填充床储热装置的全参数进行优化,获得储热装置材料物性、结构尺寸和运行参数的最优组合。在优化过程中,受结构强度的限制,通常情况下罐体高度不应超过 16 m<sup>[26]</sup>。

以西班牙 Andasol 1 光热电站中的储热装置<sup>[26]</sup>为例,其运行温度范围为 292~386 ℃,额定储/放热功率为 148 MW,储/放热时间为 7 h,设计储热量为 1 036 MW·h。首先,根据运行温度范围,选择太阳盐作为传热流体。从工程实际与经济性考虑,选取石英岩、高温混凝土作为备选储热材料,平均颗粒直径设置为 5 cm<sup>[27]</sup>。随后,以设计储热量与额定储/放热功率为约束条件,对装置储热效能进行优化,获得填充床储热装置的全参数设计方案,储热材料选择石英岩,其余参数见表 3。设计得到的填充床储热装置储热效能为 0.849,与数值模拟结果之间的偏差为 5.6%。在同等计算资源(11<sup>th</sup> Gen Intel(R) Core(TM) i5-11400@ 2.60 GHz)条件下,对比传统数值模拟方法,本文提出的设计方法将计算耗时从约 300 h 降低至 7.81 s,计算效率提升了 5 个数量级。此外,该设计方法以关联式的形式进行储热效能预测,适用于工程常见储热场景、传热流体(水、熔盐、导热油等)和储热材料(石英岩、高温混凝土等),可实现具体应用场景下的填充床储热装置全参数设计,具有较强的应用便利性与一定的通用性。

表 3 填充床储热装置设计方案  
Table 3 Design scheme of the packed-bed heat storage device

| 参数                                | 数值    |
|-----------------------------------|-------|
| 储热材料颗粒直径/cm                       | 5     |
| 储热罐体高度/m                          | 16.00 |
| 储热罐体直径/m                          | 36.68 |
| 储/放热过程传热流体流速/(m·h <sup>-1</sup> ) | 1.9   |

对设计的固体填充床储热装置进行经济性分析,计算并对比了本文设计方案与 Andasol 1 光热电站中现有双罐熔盐储热装置的总投资成本。该双罐熔盐储热装置采用太阳盐作为储传热介质,冷盐罐和热盐罐的高度为 14 m,直径为 36 m<sup>[26]</sup>。

储热装置的总投资成本包括储热与熔盐材料成本、罐体材料成本、保温材料成本以及基础平台成本 4 个方面,其中保温材料成本与基础平台成本根据

面积计算,其他成本根据质量计算<sup>[28]</sup>。表 4 展示了本文设计方案与 Andasol 1 光热电站中现有双罐熔盐储热装置的投资成本对比,可以发现,由于储放热过程可以在一个储罐内实现,且石英岩成本较低,因此本文设计的固体填充床储热装置 4 个方面的成本均低于双罐熔盐储热装置,总投资成本可降低约 13%,证明了本文设计方案经济上的可行性。

表 4 不同储热方案的投资成本估算结果  
Table 4 Investment cost estimation results of different heat storage options

| 成本类型         | 双罐熔盐储热   |          | 固体填充床储热  |
|--------------|----------|----------|----------|
|              | 冷罐       | 热罐       |          |
| 储热与熔盐材料成本/万元 | 1 441.6  | 1 441.6  | 1 509.7  |
| 罐体材料成本/万元    | 2 994.5  | 20 731.4 | 22 667.6 |
| 保温材料成本/万元    | 536.5    | 536.5    | 586.6    |
| 基础平台成本/万元    | 1 092.2  | 1 092.2  | 1 133.8  |
| 总成本/万元       | 29 866.5 |          | 25 897.7 |

4 结 论

本文将可解释机器学习方法应用于填充床储热装置的性能快速评估与装置高效设计,通过量化材料物性、装置结构尺寸以及运行参数对储热效能的影响,提出了固体填充床储热装置储热效能关联式,并将其应用到填充床储热装置的快速设计中,主要结论如下。

(1)采用网格搜索与交叉验证方法得到了 ANN 模型的最优结构,最优隐藏层神经元数量为[130, 110, 90],模型在测试集上的回归系数和均方误差分别为 0.972 和 0.000 15,与数值模拟结果之间的相对偏差在 5%以内,能够较好地反映各影响因素与储热效能之间的非线性关系。

(2)采用 SHAP 可解释方法对 ANN 模型预测进行了解释,提取了材料物性、装置结构尺寸以及运行参数对储热效能的定量影响关系,建立了储热效能关联式,其适用范围如下:罐体高度为 2~16 m,罐体直径为 2~50 m,其他参数的适用范围见表 1。关联式计算结果与数值模拟结果之间的相对偏差在 10%以内,可以有效用于填充床储热装置储热效能的快速计算和准确预测。

(3)基于储热效能关联式提出了适用于多种储热场景的填充床储热装置设计流程,并以西班牙 Andasol 1 光热电站中的储热装置为实例进行了计算分析,在同等计算资源条件下,计算效率相比于传

统数值模拟方法提高了5个数量级,设计方案经济上可行,证明了所提储热效能关联式在工程实践中的便利性和实用性。

## 参考文献:

- [1] HAN Xue, XU Chao, PAN Xinyu, et al. Dynamic analysis of a concentrating photovoltaic/concentrating solar power (CPV/CSP) hybrid system [J]. *Science China Technological Sciences*, 2019, 62(11): 1987-1998.
- [2] PIETRUSKIEWICZ J, BRANDON B, HOLLENBACH R, et al. Solar thermocline storage systems: preliminary design study: NREL/TP-5500-48584 [R]. Palo Alto: Electric Power Research Institute, 2010.
- [3] DE GRACIA A, CABEZA L F. Numerical simulation of a PCM packed bed system: a review [J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2017, 69: 1055-1063.
- [4] ORÓ E, CHIU J, MARTIN V, et al. Comparative study of different numerical models of packed bed thermal energy storage systems [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2013, 50(1): 384-392.
- [5] WU Ming, LI Mingjia, XU Chao, et al. The impact of concrete structure on the thermal performance of the dual-media thermocline thermal storage tank using concrete as the solid medium [J]. *Applied Energy*, 2014, 113: 1363-1371.
- [6] LI Mingjia, JIN Bo, YAN Junjie, et al. Numerical and experimental study on the performance of a new two-layered high-temperature packed-bed thermal energy storage system with changed-diameter macro-encapsulation capsule [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 142: 830-845.
- [7] XU Chao, WANG Zhifeng, HE Yaling, et al. Sensitivity analysis of the numerical study on the thermal performance of a packed-bed molten salt thermocline thermal storage system [J]. *Applied Energy*, 2012, 92: 65-75.
- [8] LI Mengjie, QIU Yu, LI Mingjia. Cyclic thermal performance analysis of a traditional single-layered and of a novel multi-layered packed-bed molten salt thermocline tank [J]. *Renewable Energy*, 2018, 118: 565-578.
- [9] LI Peiwen, VAN LEW J, KARAKI W, et al. Generalized charts of energy storage effectiveness for thermocline heat storage tank design and calibration [J]. *Solar Energy*, 2011, 85(9): 2130-2143.
- [10] MA Zhao, LI Mingjia, YANG Weiwei, et al. General performance evaluation charts and effectiveness correlations for the design of thermocline heat storage system [J]. *Chemical Engineering Science*, 2018, 185: 105-115.
- [11] ANAND P, TEJES P K S, NAIK B K, et al. Design analysis and performance prediction of packed bed latent heat storage system employing machine learning models [J]. *Journal of Energy Storage*, 2023, 72(Part D): 108690.
- [12] YANG Xueming, CUI Jie, LI Yi, et al. Multi-factor analysis and optimization design of a cascaded packed-bed thermal storage system coupled with adiabatic compressed air energy storage [J]. *Energy Conversion and Management*, 2024, 300: 117961.
- [13] ZHANG Yan, TEOH B K, WU Maozhi, et al. Data-driven estimation of building energy consumption and GHG emissions using explainable artificial intelligence [J]. *Energy*, 2023, 262(Part A): 125468.
- [14] KIM S, ABBAS A, PYO J, et al. Developing a data-driven modeling framework for simulating a chemical accident in freshwater [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2023, 425: 138842.
- [15] LEI Yang, CHEN Yuming, CHEN Jinghai, et al. A novel modeling strategy for the prediction on the concentration of  $H_2$  and  $CH_4$  in raw coke oven gas [J]. *Energy*, 2023, 273: 127126.
- [16] QIAO Qingyao, ESKANDARI H, SAADATMAND H, et al. An interpretable multi-stage forecasting framework for energy consumption and  $CO_2$  emissions for the transportation sector [J]. *Energy*, 2024, 286: 129499.
- [17] BIALEK J, BUJALSKI W, WOJDAN K, et al. Dataset level explanation of heat demand forecasting ANN with SHAP [J]. *Energy*, 2022, 261(Part A): 125075.
- [18] HÄNCHEN M, BRÜCKNER S, STEINFELD A. High-temperature thermal storage using a packed bed of rocks-heat transfer analysis and experimental validation [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2011, 31(10): 1798-1806.
- [19] LI Mingjia, JIN Bo, MA Zhao, et al. Experimental and numerical study on the performance of a new high-temperature packed-bed thermal energy storage system with macroencapsulation of molten salt phase change material [J]. *Applied Energy*, 2018, 221: 1-15.
- [20] PACHECO J E, SHOWALTER S K, KOLB W J. Development of a molten-salt thermocline thermal storage system for parabolic trough plants [J]. *Journal of Solar Energy Engineering*, 2002, 124(2): 105-115.

153-159.

[21] HORNIK K, STINCHCOMBE M, WHITE H. Multilayer feedforward networks are universal approximators [J]. *Neural Networks*, 1989, 2(5): 359-366.

[22] RUMELHART D E, HINTON G E, WILLIAMS R J. Learning representations by back-propagating errors [J]. *Nature*, 1986, 323(6088): 533-536.

[23] 周志华. 机器学习 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2016.

[24] LUNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions [C]//*Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*. Red Hook, NY, USA: Curran Associates Inc., 2017: 4768-4777.

[25] LOH W L. On Latin hypercube sampling [J]. *The Annals of Statistics*, 1996, 24(5): 2058-2080.

[26] BAYÓN R, ROJAS E. Simulation of thermocline storage for solar thermal power plants: from dimensionless results to prototypes and real-size tanks [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2013, 60: 713-721.

[27] ALMENDROS-IBÁÑEZ J A, FERNÁNDEZ-TORRILLOS M, DÍAZ-HERAS M, et al. A review of solar thermal energy storage in beds of particles: packed and fluidized beds [J]. *Solar Energy*, 2019, 192: 193-237.

[28] STRASSER M N, SELVAM R P. A cost and performance comparison of packed bed and structured thermocline thermal energy storage systems [J]. *Solar Energy*, 2014, 108: 390-402.

(编辑 亢列梅)