

О ВОЗМОЖНОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАЗРЯДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЛИТИЙ-СЕРНЫХ АККУМУЛЯТОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЧЕТКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

© 2021 г. Д. В. Колосницын^а, *, Е. В. Карасева^а, Е. В. Кузьмина^а, В. С. Колосницын^а

^аУфимский Институт химии Уфимского федерального исследовательского центра РАН
просп. Октября, 69, Уфа, 450054 Россия

*e-mail: dkolosnitsyn@gmail.com

Поступила в редакцию 17.04.2020 г.

После доработки 12.08.2020 г.

Принята к публикации 31.08.2020 г.

В работе рассмотрена возможность моделирования изменения характеристик литий-серных аккумуляторов в процессе циклирования с использованием адаптивной сети на основе системы нечеткого вывода (Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System, ANFIS). Выполнено моделирование разрядных кривых и кривой уменьшения разрядной ёмкости литий-серных ячеек в процессе циклирования. Обучение нейронной сети было произведено на каждом 5-м цикле из первых 95. Показано, что смоделированные разрядные кривые литий-серных ячеек имеют хорошее совпадение с разрядными кривыми, полученными экспериментально. После обучения модели на первых 95 циклах, точность экстраполяции на 45 последующих циклов (с 96-го по 140-й) составила 5%. Время симулирования одной разрядной кривой составляет 4.5 с, что делает возможным использование данного подхода при разработке систем управления и контроля аккумуляторных батарей (Battery Management System, BMS).

Ключевые слова: литий-серный аккумулятор, моделирование, нейронные сети, ANFIS

DOI: 10.31857/S042485702103004X

ВВЕДЕНИЕ

Одной из важнейших задач при разработке различного типа аккумуляторов является прогнозирование характеристик аккумуляторов и их изменения в процессе работы. Ключевой характеристикой аккумулятора является изменение его разрядных ёмкости и энергии в процессе циклирования. Об изменении разрядной ёмкости аккумулятора можно судить по изменению длины разрядной кривой (времени разряда), а об изменении разрядной энергии — по изменениям формы разрядной кривой (среднему разрядному напряжению).

Разрядная кривая литий-серных аккумуляторов (ЛСА) (рис. 1) более сложна, чем разрядные кривые других типов аккумуляторов [1]. Она имеет две площадки с характерным перегибом между ними. При циклировании ЛСА может изменяться соотношение длин высоковольтной и низковольтной площадок, среднее разрядное напряжение на них, а также время разряда.

Одним из способов предсказания поведения аккумуляторов в процессе длительного циклирования является моделирование. Математическое моделирование является эффективным методом, позволяющим понять механизмы процессов, про-

исходящих в электрохимических аккумуляторах, проверить те или иные гипотезы, касающиеся этих процессов [2, 3], прогнозировать характеристики аккумуляторов и их изменения в процессе работы.

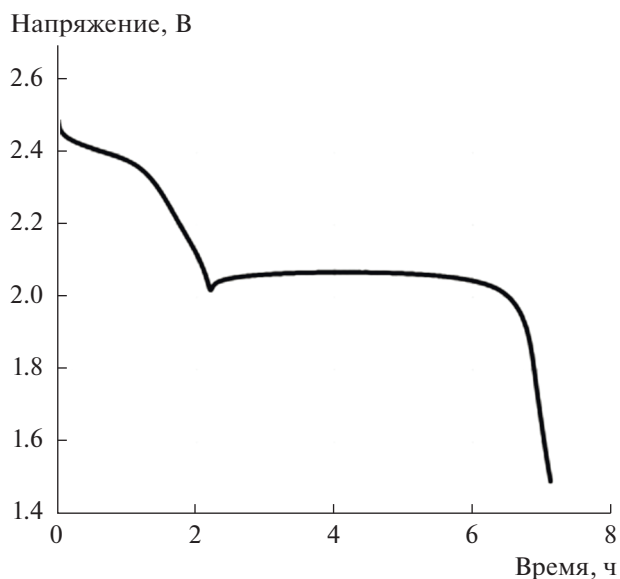


Рис. 1. Типичная разрядная кривая ЛСА.

Точные и нетребовательные к вычислительным ресурсам модели электрохимических аккумуляторов необходимы для проектирования BMS¹.

Для моделирования аккумуляторов используются различные типы моделей: статистические, эмпирические, электрохимические и др. Каждый тип моделей имеет как свои преимущества, так и свои недостатки.

Статистические модели, или, как их иногда называют, модели типа “черный ящик” – нетребовательны к вычислительным ресурсам, но имеют весьма ограниченный диапазон применения. Они работоспособны, как правило, только в тех условиях, в которых были получены экспериментальные данные.

Эмпирические модели описывают полученные экспериментальные данные функциональными зависимостями, которые подбираются на основе тех или иных представлений о работе электрохимического аккумулятора. Их достоинством также является нетребовательность к вычислительным ресурсам.

Электрохимические модели потенциально обладают наибольшей информативностью и точностью. Предполагается, что данные модели должны описывать большинство процессов (или все процессы), протекающих в электрохимических аккумуляторах. Модели данного типа больше других подходят для изучения процессов, происходящих в электрохимических аккумуляторах. Невозможность определения некоторых параметров электрохимических моделей с достаточной точностью, их требовательность к вычислительным ресурсам делают электрохимические модели непригодными для использования в BMS.

В связи со стремительным увеличением вычислительной мощности современных компьютеров, развитием нейросетевых технологий появился новый вид моделирования – моделирование с помощью искусственных нейронных сетей (ИНС) [4, 5]. Искусственная нейронная сеть – математическая модель, построенная по принципу функционирования биологических нейронных сетей.

Процесс моделирования² с помощью нейронных сетей отличается от “традиционного” моделирования.

Создание модели на основании ИНС состоит из следующих этапов:

- сбор данных для обучения;
- подготовка и нормализация данных;
- выбор топологии сети;

¹ BMS – Battery Management System. Система управления батареей.

² В данном контексте под моделированием понимается процесс создания модели, а не вычислительный эксперимент.

Таблица 1. Спецификация литий-серных ячеек

Тип	Призматическая в металлополимерном корпусе (pouch cell)
Размеры электродного модуля, мм	62 × 80 × 2.5
Номинальное напряжение, В	2.3
Номинальная ёмкость, А ч	2.1
Удельная ёмкость положительного электрода (серный электрод), мА ч/см ²	2.5
Количество электродных пар	8

- подбор характеристик сети;
- обучение;
- проверка обучения.

Нейронные сети не программируются в привычном нам понимании, а обучаются. Именно способность нейронных сетей к обучению позволяет им устанавливать сложные зависимости между входными и выходными параметрами, проводить обобщение. В случае успешного обучения нейронная сеть может вычислить правильный выходной сигнал на основании зашумленных или частично искаженных данных. Одним из видов нейронных сетей является адаптивная сеть на основе системы нечеткого вывода – ANFIS (Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System)³ (рис. 2). По своей сути ANFIS является самообучающейся экспертной системой, объединяющей принципы нечеткой логики с нейронными сетями. При обучении такой сети происходит вывод нечетких правил “если–то”.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Объекты исследования

В качестве объектов исследования использовали литий-серные ячейки (ЛСЯ) с электродным модулем стековой конструкции в корпусе из металлополимерного ламината, изготовленные в лаборатории электрохимии УФИХ УФИЦ РАН. Характеристики ячеек приведены в табл. 1.

Гальваностатическое циклирование ЛСЯ осуществлялось с помощью потенциоста-гальвано-

³ В русском языке пока нет устоявшегося термина, и встречаются различные варианты названий такого типа сетей – нечеткая нейронная сеть, нейронно-нечеткая сеть, гибридная сеть и т.п.

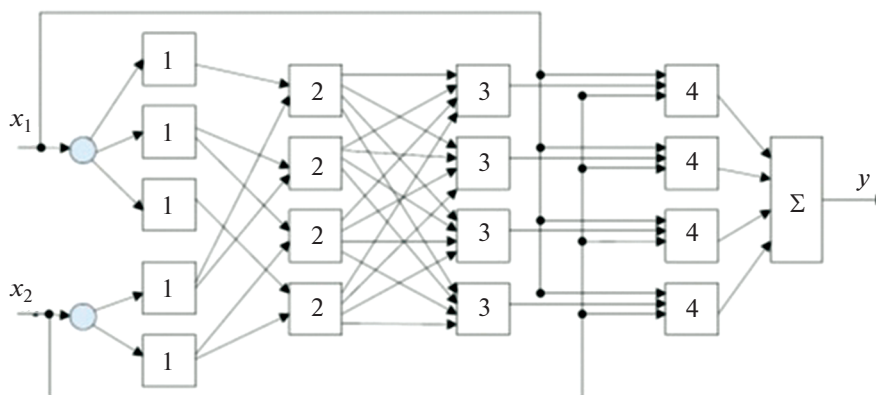


Рис. 2. Нечеткая нейронная сеть ANFIS с двумя входными параметрами.

стата VT-05PG [6]. Циклирование ЛСЯ производили в диапазоне потенциалов от 1.8 до 2.5 В. Обработка экспериментальных данных и подготовка данных для обучения нейронной сети осуществлялась с использованием ПО “ElChemLab, Data Analyzer” [7, 8].

Для моделирования использовали данные, полученные при циклировании литий-серной ячейки в гальваностатическом режиме при $t = 30^\circ\text{C}$.

Модель

Напряжение на ЛСЯ при циклировании, в конкретный момент времени, зависит от SoH^4 ячейки и от SoC^5 . Для упрощения будем считать, что SoH прямо пропорционален количеству прошедших циклов, а SoC – времени, прошедшему с начала цикла. Тогда:

$$U = f(n, t), \quad (1)$$

где: U – напряжение на ячейке; n – номер текущего цикла; t – время с начала текущего цикла.

Для обучения использовали экспериментальные данные (разрядные кривые) каждого 5-го цикла с 10-го по 95-й цикл, за исключением 50-го цикла. Поскольку на первых 5–10 циклах происходит перераспределение активного материала (серы) по объему ячейки, характер изменения ёмкости ЛСЯ на этих циклах отличается от характера изменения ёмкости ЛСЯ на последующих циклах. Эти циклы являются “формовочными” и не включались в обучающую выборку.

Для моделирования была создана сеть ANFIS с алгоритмом вывода Сугэно, с двумя входами – n и t , и одним выходом – U . Количество функций принадлежности для параметра n было принято равным 20, для параметра t – 100. Количество эпох обучения – 3. Большее количество функций

принадлежности увеличивает время обучение модели, а меньшее – ухудшает точность.

Для симулирования кривой изменения ёмкости ЛСЯ в процессе циклирования использовалась модель, аналогичная описанной выше. На каждом цикле симулировалась разрядная кривая в диапазоне от 2.5 до 1.8 В. Шаг по времени был принят равным 50 с (как правило, измерение параметров ячейки в реальном эксперименте происходит через этот промежуток времени). Разрядная ёмкость на цикле рассчитывалась по формуле:

$$Q_n = it_n, \quad (2)$$

где: Q_n – ёмкость на n -ом цикле, мАч; i – разрядный ток, мА; t_n – длительность полуцикла разряда, ч.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для оценки возможности моделирования разрядной кривой были смоделированы разрядные кривые на 50-м, 100-м, 140-м и 160-м циклах (рис. 3). Как видно из рис. 3а, моделируемая кривая на 50-м цикле практически полностью повторяет экспериментальную кривую. Хорошее совпадение на данном цикле можно объяснить тем, что он находится в диапазоне обучающей выборки. На смоделированных кривых 100-го, 140-го и 160-го циклов видно постепенное “расхождение” между экспериментальными и расчетными данными.

Симулированная кривая спада ёмкости также хорошо совпадает с экспериментальной кривой (рис. 4). На 140-м цикле разница между симулированной и экспериментально измеренной ёмкостью составляет 5%.

⁴ SoH – State of Health, работоспособность ячейки.

⁵ SoC – State of Charge, зарядовое состояние ячейки.

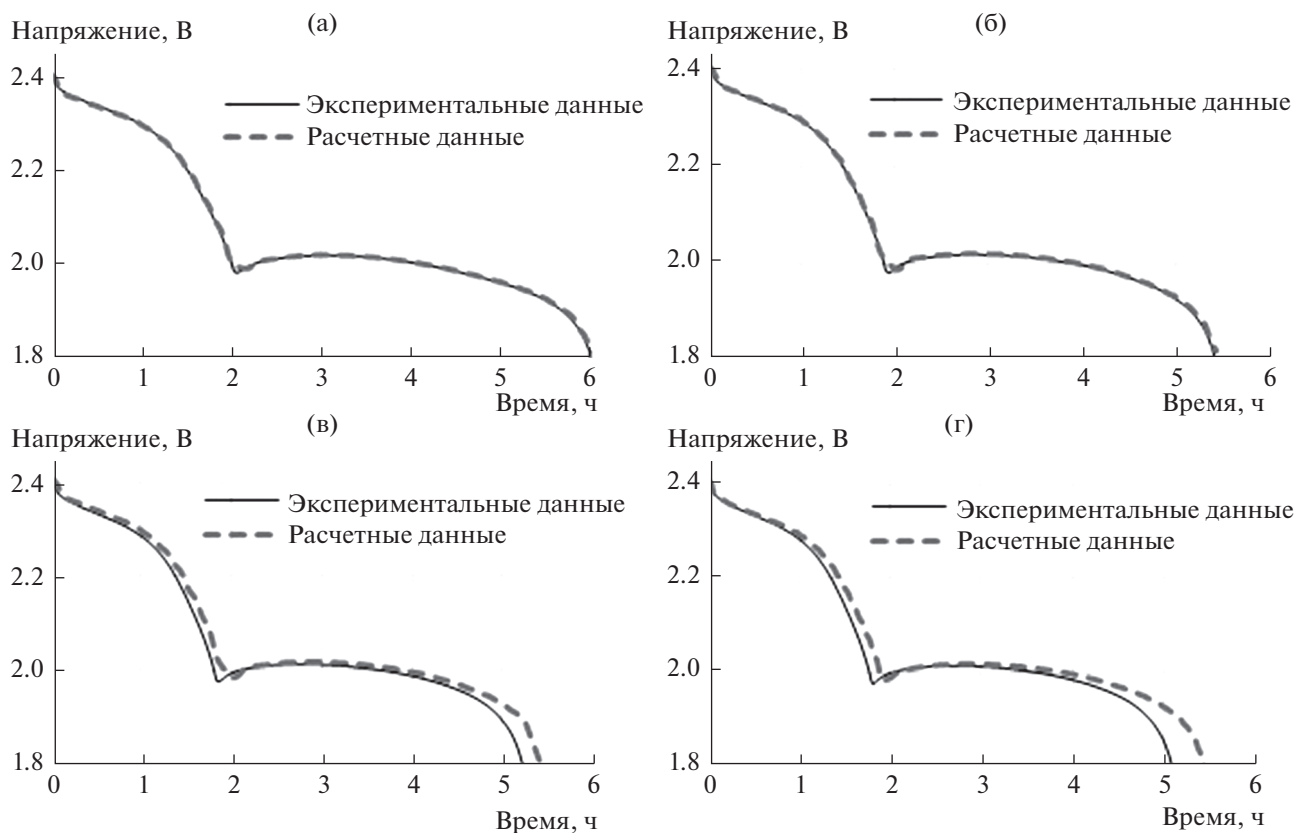


Рис. 3. Экспериментальные и смоделированные разрядные кривые литий-серных ячеек: а – 50 цикл; б – 100 цикл; в – 140 цикл; г – 160 цикл.

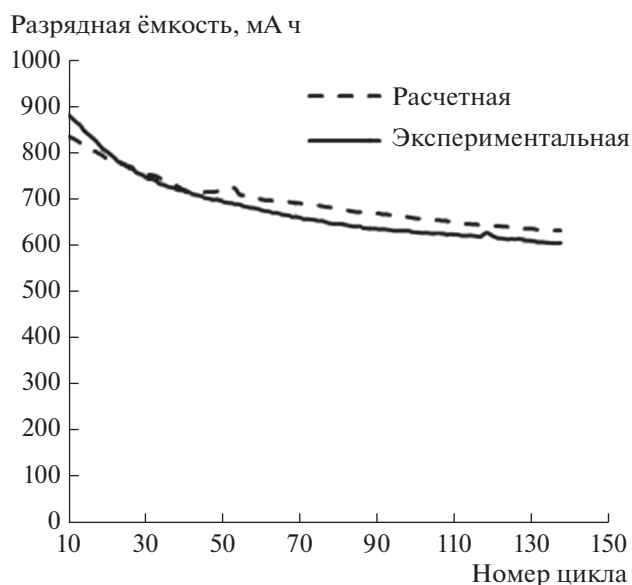


Рис. 4. Изменение практической и смоделированной разрядной ёмкости в процессе циклирования литий-серной ячейки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено моделирование изменения разрядно-зарядных кривых литий-серных аккумуляторов в процессе циклирования с помощью ANFIS. Показано, что смоделированные разрядные кривые имеют хорошее совпадение с разрядными кривыми, полученными экспериментально.

После обучения модели на первых 95 циклах, точность экстраполяции на 45 последующих циклов (с 96-го по 140-й) составила 5%.

Следует отметить, что процесс обучения ANFIS достаточно длительный и длится несколько десятков минут, однако после обучения моделирование одной разрядной кривой занимает всего порядка 4.5 с, что делает возможным использование данного подхода в BMS.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме № АААА-А20-120012090022-1 (В.С. Колосницын) и при финансовой поддержке РФФ (проект №17-73-20115) «Экспериментальные и теоретические исследования механизмов необратимых процессов в

литий-серных аккумуляторов” (Д.В. Колосницын, Е.В. Карасева, Е.В. Кузьмина).

СОБЛЮДЕНИЕ ЭТИЧЕСКИХ СТАНДАРТОВ

Настоящая статья не содержит каких-либо исследований с использованием животных и людей в качестве объектов.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колосницын, В.С., Карасева, Е.В. Литий-серные аккумуляторы. Проблемы и решения. *Электрохимия*. 2008. Т. 44. С. 548. [Kolosnitsyn, V.S. and Karaseva, E.V., Lithium–sulfur batteries: problems and solutions, *Russ. J. Electrochem.*, 2008, vol. 44, p. 506.] <https://doi.org/10.1134/S1023193508050029>
2. Галушкин, Н.Е., Язвинская, Н.Н., Галушкин, Д.Н., Галушкина, И.А. Нелинейная структурная модель аккумулятора, исследование процессов релаксации после заряда. *Электрохим. энергетика*. 2014. Т. 14. № 1. С. 45. [Galushkin, N.E., Yazvinskaya, N.N., Galushkin, D.N., and Galushkina, I.A., Nonlinear structural model of the battery, research of processes of relaxation after charge, *Elektrokhimicheskaya energetika* (in Russian), 2014, vol. 14, no. 1, p. 45.]
3. Аксютёнок, М.В., Москвичёв, А.А., Гунько, Ю.Л., Козина, О.Л., Михаленко, М.Г. Моделирование зарядно-разрядных процессов на кадмиевом электроде никель-кадмиевого аккумулятора. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2012. Т. 55. Вып. 4. С. 96. [Aksyutenok, M.V., Moskvichyov, A.A., Gunko, Yu.L., Kozina, O.L., and Mikhalenko, M.G., Modeling of charge-discharge processes on a cadmium electrode of a nickel–cadmium battery, *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* (in Russian), 2012, vol. 55, no. 4, p. 96.]
4. Parthiban, T., Ravi, R., and Kalaiselvi, N., Exploration of artificial neural network [ANN] to predict the electrochemical characteristics of lithium-ion cells, *Electrochim. Acta*, 2007, vol. 53, p. 1877. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2007.08.049>
5. Fotouhi, A., Auger, D.J., Propp, K., and Longo, S., Lithium–Sulfur Battery State-of-Charge Observability Analysis and Estimation, *IEEE Transactions on Power Electronics*, 2018, vol. 33, no. 7, p. 5847. <https://doi.org/10.1109/TPEL.2017.2740223>
6. Мочалов, С.Э., Антипин, А.В., Нурғалиев, А.Р., Колосницын, В.С. Многоканальный потенциостат-гальваностат для циклических испытаний аккумуляторов и электрохимических ячеек. *Электрохим. энергетика*. 2015. Т. 15. № 1. С. 45. [Mochalov, S.E., Antipin, A.V., Nurgaliev, A.R., and Kolosnitsyn, V.S., Multichannel potentiostat-galvanostat for cycling of batteries and electrochemical cells, *Elektrokhimicheskaya energetika* (in Russian), 2015, vol. 15, no. 1, p. 45.]
7. Свид. 2019611773 РФ. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. “EiChemLab, Data Analyzer” / Д.В. Колосницын; правообладатель УФИЦ РАН (RU). Опубл. 04.02.2019, Реестр программ для ЭВМ. 1 с. [2019611773 RF. “EiChemLab, Data Analyzer” / D.V. Kolosnitsyn; UFRS RAS (RU). – published. 04.02.2019].
8. Колосницын, Д.В., Кузьмина, Е.В., Карасева, Е.В. Автоматизация обработки данных электрохимических исследований аккумуляторных ячеек. *Электрохим. энергетика*. 2019. Т. 19. № 4. С. 186. [Kolosnitsyn, D.V., Kuzmina, E.V., and Karaseva, E.V., Automation of Data Processing of Electrochemical Studies of Battery Cells, *Elektrokhimicheskaya energetika* (in Russian), 2019, vol. 19, no. 4, p. 186.] <https://doi.org/10.18500/1608-4039-2019-19-4-186-197>