

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

На правах рукописи

Митягин Даниил Олегович

Обоснование и выбор конструкционно-технологических параметров систем накопления энергии
с использованием моделей прогнозной аналитики

2.3.1 – Системный анализ, управление и обработка информации, статистика

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук

Научный руководитель
кандидат физико-математических наук Гостева Екатерина Александровна

Москва - 2026

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Теоретико-методологический анализ проблемы поиска оптимальных конструкционных параметров систем накопления энергии.....	10
1.1. Анализ основных методологических подходов к поиску оптимальных конструкционных параметров СНЭ	10
1.2. Обзор эволюционных алгоритмов и гибридных архитектур в задачах структурно-параметрического синтеза СНЭ.....	17
1.3. Сравнительный анализ подходов к созданию СНЭ.....	24
1.4. Анализ существующих моделей прогнозирования свойств систем накопления энергии на основе машинного обучения	31
1.5. Физико-химические основы функционирования СНЭ на основе литий- ионных аккумуляторов: компоненты и фундаментальные характеристики	35
1.6. Классификация ключевых выходных характеристик СНЭ.....	45
1.7. Идентификация факторов, определяющих выходные характеристики СНЭ	48
1.8. Построение модели взаимосвязей конструкционных и эксплуатационных параметров СНЭ.....	50
1.9. Выводы по главе.	55
Глава 2. Формализация и системное моделирование объекта исследования ...	57
2.1. Разработка системной модели процесса накопления энергии.....	57
2.1.1. Математическое описание переноса заряда и массы в твёрдой фазе (активные материалы).....	58
2.1.2. Моделирование переносных процессов в электролите.....	58
2.1.3. Перенос заряда в твёрдой матрице электрода	59
2.1.4. Кинетика электродных реакций.....	59
2.1.5. Моделирование деградационных процессов	59
2.1.6. Кинетика роста твёрдой электролитной фазы (SEI)	59
2.1.7. Формализация потери ёмкости.....	60
2.1.8. Моделирование роста внутреннего сопротивления	60
2.2. Анализ изменения выходных характеристик СНЭ с течением времени	60
2.2.1. Удельная ёмкость $Q(t)$	60
2.2.2. Удельная энергетическая плотность $E(t)$	61

2.3. Математическое представление СНЭ на основе конструкционных параметров.....	67
2.4. Выводы по главе.	70
Глава 3. Разработка прогнозно-аналитических моделей для прогнозирования выходных характеристик СНЭ.....	72
3.1. Обоснование выбора характеристик для регрессионного анализа.....	72
3.2. Формализация математических зависимостей начальных характеристик СНЭ.	76
3.3. Построение и верификация моделей множественной линейной регрессии.....	79
3.4. Алгоритм получения начальных значений Y_{10} , Y_{20} , Y_{30}	81
3.5. Анализ критериев характеристик для нейросетевого прогнозирования	95
3.6. Выбор характеристик для нейросетевого прогнозирования	98
3.7. Архитектурные требования к нейросетевым моделям.....	99
3.8. Выбор датасета	101
3.9. Разработка нейронной сети для прогнозирования выходных характеристик.....	104
3.10. Создание и валидация модели.....	111
3.11. Выводы по главе.	114
Глава 4. Интеграция моделей и экспериментальная проверка	116
4.1. Разработка архитектуры гибрид-модели.	116
4.2. Сборка и валидация гибридной модели прогнозирования характеристик систем накопления энергии	118
4.3. Процедура поиска конструкционных параметров среди эффективных решений системы накопления энергии, подходящей под требования пользователя.	126
4.4. Выводы по главе.	129
Заключение	131
Список литературы.....	133
ПРИЛОЖЕНИЕ А.....	156

Введение

Актуальность работы. Переход к низкоуглеродной энергетике и цифровая трансформация инфраструктуры требуют создания эффективных систем накопления энергии (СНЭ). Одна из проблем заключается в отсутствии формализованных моделей и алгоритмов, позволяющих на этапе принятия решения о создании СНЭ обоснованно выбирать конструкционно-технологические параметры СНЭ для обеспечения заданных пользователем показателей эффективности и надёжности. Существующий разрыв между детерминированным физико-химическим моделированием (высокая параметрическая чувствительность, дефицит измеримых констант) и задачами многокритериального синтеза препятствует принятию обоснованных решений. Эмпирические методы вносят неопределённость, классический регрессионный анализ не отражает нелинейную динамику деградации, а методы машинного обучения, несмотря на скорость, обладают ограниченной интерпретируемостью и не раскрывают причинно-следственных связей между элементами СНЭ. В этой связи, актуальной научной задачей является разработка прогнозно-аналитических моделей и алгоритмов для формализации и решения задачи обоснованного выбора конструкционных параметров СНЭ. Решение позволит на этапе концептуального моделирования минимизировать ресурсоёмкость синтеза и гарантированно достигать заданных пользователем показателей эффективности и надёжности. Решение данной задачи направлено на создание специального прогнозно-аналитического обеспечения, позволяющего на этапе моделирования СНЭ минимизировать ресурсоёмкость процедур структурно-параметрического синтеза и обеспечить гарантированное достижение заданных пользователем показателей эффективности и надёжности функционирования сложной технической системы.

Степень разработанности темы. Проблема многокритериального выбора конструкционно-технологических параметров СНЭ, гарантирующего достижение заданных показателей эффективности и надёжности, исследуется в рамках трёх основных методологических направлений, каждое из которых обладает принципиальными ограничениями. Физико-математическое моделирование,

основанное на псевдодвумерной модели Дойла–Фуллера–Ньюмана, обеспечивает детальное описание внутренних физических процессов СНЭ, но его применение для многовариантного параметрического синтеза ограничено высокой вычислительной сложностью и критической чувствительностью к десяткам трудноизмеримых физико-химических констант. В работе С. Зинцига с соавторами на большом диапазоне параметров выполнен анализ валидности P2D-моделей для твердотельных батарей и выявлены области, в которых гомогенизированные модели дают существенные отклонения от трёхмерных расчётов, что подтверждает необходимость разработки альтернативных вычислительных инструментов. Значительный вклад в систематизацию знаний о методах математического описания накопителей энергии внесён российскими учёными. В обзоре И.А. Разживина, А.А. Суворова, М.В. Андреева, Р.А. Уфы и А.Б. Аскарова (2023) представлен анализ математических моделей систем накопления энергии различной степени детализации, рассмотрены подходы к упрощению моделей и сформулированы ограничения, связанные с потерей точности при переходе к упрощённым представлениям. Российскими исследователями также получены значимые результаты в применении нейросетевых методов к задачам диагностики аккумуляторов. И.А. Яковлев, А.В. Елизарова и Г.А. Саитова (2023) исследовали архитектуры рекуррентных нелинейных авторегрессионных нейронных сетей для прогнозирования состояния заряда аккумулятора в процессе его использования и определили оптимальную структуру сети, обеспечивающую минимальную среднеквадратичную ошибку. Вопросам многокритериальной оптимизации энергетических систем с накопителями посвящены работы, использующие генетический алгоритм NSGA-II. Среди отечественных работ следует отметить исследование Д.С. Ильющенко, С.А. Гуревича и А.В. Платонова (2025), в котором предложен алгоритм выбора оптимального баланса масс электродов литий-ионных аккумуляторов для режима быстрого заряда на основе численной модели, описывающей работу аккумуляторов с электродами из пористых материалов. Однако все перечисленные исследования носят фрагментарный характер: они либо решают прямую задачу прогноза начальных свойств без учёта временной эволюции характеристик, либо ограничиваются обратным дизайном на уровне материалов,

либо применяют NSGA-II на уровне энергосистемы в целом, не доводя оптимизацию до уровня конструкционных параметров отдельной ячейки.

Целью работы является повышение уровня показателей эффективности и надёжности функционирования систем накопления энергии на основе процесса поиска и выбора её оптимальных конструкционных параметров с учётом пользовательских предпочтений.

Новизна научных исследований заключается в следующем:

- Построена модель системы накопления энергии, позволяющая формально оценить взаимосвязи конструкционных и эксплуатационных параметров (содержание активного вещества, толщина электрода, температурный режим и др.) с выходными электрохимическими характеристиками системы накопления энергии (удельная энергетическая плотность и остаточная ёмкость после заданного числа циклов заряда-разряда);
- Разработан алгоритм прогнозирования динамики выходных характеристик (удельная ёмкость, удельная энергетическая плотность и внутреннее сопротивление) в процессе работы системы накопления энергии, реализующий оригинальный механизм совместного использования регрессионной и рекуррентной нейросетевой моделей;
- Разработана процедура выбора субъективно-оптимального решения - набора значений конструкционных параметров системы накопления энергии с учетом технологических ограничений (содержание никеля в катоде, толщина электрода и т.д.) из множества альтернатив, формируемых с использованием разработанного алгоритма прогнозирования

Задачи:

1. Проведение теоретико-информационного анализа и системной декомпозиции процесса накопления энергии с идентификацией полного вектора управляемых конструкционно-технологических параметров и выходных характеристик, а также установление физико-химических и технологических ограничений, определяющих область допустимых конструкционных параметров СНЭ;

2. Разработка и статистическая верификация регрессионных моделей начальных значений ключевых выходных характеристик (удельной ёмкости, удельной энергетической плотности, внутреннего сопротивления) с оценкой их детерминации, значимости предикторов и точности прогноза;

3. Создание и обучение нейросетевой модели прогнозирования деградации для оценки SOH-показателя системы накопления энергии как функции времени и конструкционных параметров, с последующим количественным сравнением точности и вычислительной эффективности относительно классических физико-химических моделей;

4. Разработка алгоритма прогнозирования деградации выходных характеристик системы накопления энергии с последующим формированием множества допустимых решений в пространстве критериев «удельная энергетическая плотность – сохранение ёмкости» с использованием генетического алгоритма NSGA II, где целевые функции вычисляются на основе объединённой регрессионно-нейросетевой модели;

5. Выбор оптимальной конфигурации конструкционных параметров СНЭ путём задания пороговых значений по критериям сохранения ёмкости и потери энергии на основе пользовательских предпочтений, а также последующая валидация на независимых данных коммерческих ячеек и опытных образцах.

Методы исследования включают системный, факторный и статистический анализ систем накопления энергии, теорию принятия решений, математическое моделирование показателей эффективности и надёжности систем накопления энергий, теорию вероятностей, теоретико-информационный анализ электрофизических процессов систем накопления энергии.

Объектом исследования является процесс поиска оптимальных конструкционных параметров системы накопления энергии для достижения требуемого уровня показателей эффективности и надёжности функционирования. Предметом исследования является система накопления энергии на основе литий-ионных аккумуляторов как сложная электрохимическая система.

Научные положения:

1. Трехуровневая функционально-структурная модель системы накопления энергии, содержащая взаимосвязи конструкционно-технологических, эксплуатационных динамических и интегральных выходных характеристик и позволяющая формально обосновать выбор конкретной СНЭ на основе методов прогнозной аналитики;

2. Алгоритм прогнозирования деградации выходных характеристик (удельная ёмкость, удельная энергетическая плотность и внутреннее сопротивление) в процессе работы системы накопления энергии, реализующий оригинальный механизм совместного использования регрессионной и рекуррентной нейросетевой моделей и обеспечивающий возможность обоснованного выбора потенциальному пользователю конкретной модели СНЭ;

3. Процедура выбора субъективно-оптимального решения, представляющего собой набор значений конструкционных параметров системы накопления энергии в соответствии с предпочтениями потенциального пользователя из исходного множества альтернатив, формируемых с использованием разработанного алгоритма прогнозирования.

Обоснованность и достоверность результатов исследования обеспечивается: репрезентативностью исходных статистических выборок данных об электрохимических свойствах систем накопления энергии; корректным использованием в обработке информации об электрофизических процессах в системах накопления энергии математической статистики и теории принятия решений; использованием современного программного обеспечения.

Научная и практическая значимость работы. Научная значимость работы заключается в развитии методологии системного анализа и принятия решений применительно к проектированию сложных электрохимических систем, основанной на интеграции статистических и нейросетевых методов для прогнозирования эксплуатационных характеристик и выбора конструкционных параметров. Практическая значимость состоит в создании нового подхода с использованием программно-реализованного инструмента, который на основе задания

пользователем пороговых ограничений по сохранению ёмкости и потере энергии обеспечивает выбор оптимальных конструкционно-технологических параметров ячейки СНЭ.

Реализация выводов и рекомендаций работы. Основные положения диссертации использованы в НПО «Тепловизор» для подбора необходимой конфигурации системы накопления энергии на проливочном оборудовании аккумуляторного питания, что подтверждается соответствующими актами внедрения.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на Международных научных симпозиумах - «Неделя горняка» (2025-2026 гг.), Sci-tech BRICS (2023, 2025), научных семинарах.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 9 научных работах, в том числе в 6-ти изданиях, рекомендованных ВАК РФ.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, библиографического списка из 223 наименований и представлена на 156 страницах, включая 31 рисунок, 17 таблиц.

Глава 1. Теоретико-методологический анализ проблемы поиска оптимальных конструкционных параметров систем накопления энергии

1.1. Анализ основных методологических подходов к поиску оптимальных конструкционных параметров СНЭ

Проблема поиска оптимальных конструкционно-технологических параметров систем накопления энергии, гарантирующих достижение заданных показателей эффективности и надёжности, находится на стыке нескольких научных дисциплин и исследуется в рамках трёх основных методологических направлений, каждое из которых обладает собственным набором принципиальных ограничений. Фундамент физико-математического моделирования электрохимических накопителей энергии был заложен в работах Doyle, Fuller и Newman, предложивших псевдодвумерную (P2D) модель, которая и по сей день остаётся наиболее авторитетным инструментом описания процессов переноса заряда и массы в пористых электродных структурах [1]. Данная модель позволяет получить информацию о внутренних состояниях ячейки в процессе работы. Однако, мы сталкиваемся с двумя основными ограничениями: во-первых, это высокая вычислительная сложность (численное решение системы дифференциальных уравнений в частных производных для одной конфигурации). А во-вторых, высокая чувствительность к точности определения трудноизмеримых физико-химических коэффициентов, определяющих процессы диффузии и скорость реакции. Как показано в обзоре [2], ключевой проблемой основных подходов к многоуровневому моделированию является поиск компромисса между вычислительной эффективностью и точностью описания физических процессов. Авторы подчёркивают растущий интерес к интеграции физически обоснованных моделей с методами машинного обучения для преодоления указанного противоречия. На большом диапазоне конструкционных параметров выполнен анализ P2D-моделей, применяемых к описанию литий-ионных аккумуляторов. Используя метод глобальной чувствительности на основе индексов Соболя, авторы выявили области параметрического пространства, в которых гомогенизированные P2D-модели дают существенные отклонения от результатов трёхмерного численного моделирования

[3]. Полученные результаты не только количественно очерчивают границы применимости классического подхода, но и содержат конструктивные рекомендации по совместному использованию моделей различной размерности для получения быстрых и одновременно надёжных прогнозов. В работе [4] представлен подробный обзор численных методов, которые используются, когда специалисты исследуют и проектируют аккумуляторы. Авторы изучили физические выражения из многих научных работ и составили схему того, как связаны разные классы моделей. В этой схеме присутствуют электрохимические уравнения, эквивалентные схемы и мультифизические сопряжённые постановки. С помощью данных результатов исследователи и инженеры могут обоснованно выбирать алгоритм моделирования для решения своих задач.

При дополнительном анализе многомасштабных подходов в работе [5] рассматривались авиационные аккумуляторные батареи. Если использовать даже простые модели, которые описывают многослойные плёночные электродные пары, то можно точно показать нелинейные эффекты поляризации и то, как напряжение зависит от температуры. И это является значимым для систем, к которым предъявляются высокие требования по способности работать без сбоев.

Значительный вклад в систематизацию знаний о методах математического описания накопителей энергии внесён российскими учёными. В работе [6] представлен всесторонний анализ математических моделей систем накопления энергии различной степени детализации — от детальных моделей отдельных элементов до упрощённых агрегированных представлений, пригодных для моделирования электроэнергетических систем в целом. Авторы не только систематизировали существующие подходы, но и подробно рассмотрели методы упрощения моделей, проанализировав ограничения и недостатки, связанные с потерей точности при переходе к упрощённым представлениям. В первой части обзора были детально рассмотрены модели основных элементов СНЭ, во второй — модели разной степени детализации в зависимости от типа накопителя и условий его применения. Основная проблема выбора методов моделирования заключается в

следующем: с одной стороны, высокая точность требует использования детальных моделей, с другой — практические задачи проектирования и эксплуатации энергосистем вынуждают прибегать к упрощениям, что неизбежно влечёт за собой снижение достоверности прогноза.

Российскими исследователями получены значимые результаты и в применении нейросетевых методов к задачам диагностики аккумуляторов. В работе [7] исследованы два типа архитектур рекуррентных нелинейных авторегрессионных нейронных сетей (NARX и NARMAX) применительно к задаче прогнозирования состояния заряда аккумулятора в процессе его использования. На основе анализа среднеквадратичной ошибки прогнозирования авторами определена оптимальная структура нейронной сети, обеспечивающая наилучшее соотношение точности и вычислительной сложности, что создаёт предпосылки для применения аналогичных архитектур в задачах более высокого уровня — в частности, при прогнозировании долговременной деградации.

В свою очередь, в работе [8] авторы предложили алгоритм выбора оптимального баланса масс электродов литий-ионных аккумуляторов для режима быстрого заряда, основанный на численной модели, описывающей работу аккумуляторов с электродами из пористых материалов, заполненных жидким электролитом. В расчётах использовались экспериментальные данные о величинах обратимой и необратимой ёмкости, определяемых на малых токах. Авторы показали, что предложенная модель хорошо описывает поведение аккумуляторов с катодом на основе NCM622 и анодом из наноуглерода даже при быстром двухступенчатом режиме заряда большим током, что позволяет определить оптимальное соотношение масс анода и катода для достижения максимальной удельной энергии без проведения трудоёмких экспериментов. Данная работа представляет собой важный шаг в направлении обратного проектирования, однако, как и большинство подобных исследований, она ограничена решением задачи на уровне отдельной ячейки без учёта всего многообразия конструктивных параметров и без интеграции с методами прогнозирования долговременной деградации.

Тенденция к гибридизации подходов — объединению физически мотивированных моделей с алгоритмами машинного обучения — получила всестороннее освещение в работе [9], где авторы не только систематизировали существующие классы моделей (от моделей, основанных на первых принципах, до чисто data-driven архитектур), но и представили типовой конвейер разработки интерпретируемых ML-моделей для задачи прогнозирования срока службы по данным лабораторных испытаний. Принципиально важным выводом этой работы является констатация того, что гибридные подходы, включающие физические знания в процесс обучения, необходимы для расшифровки траекторий старения, однако их практическая реализация требует как большего объёма экспериментальных данных, так и дальнейшего углубления понимания физики деградиационных процессов.

Работа [10], в которой проведён анализ свыше двухсот рецензируемых исследований в области прогнозирования остаточного ресурса литий-ионных аккумуляторов, позволил количественно оценить используемые методы. Согласно приведённой статистике, гибридные модели, объединяющие физические представления с методами, управляемыми данными, являются наиболее широко используемыми благодаря их адаптивности, точности и интерпретируемости. Датасет NASA применяется в 30,8% публикаций, датасет CALCE — следующий по частоте использования; среднеквадратичная ошибка выступает наиболее распространённой метрикой качества (29,6% работ), за ней следуют средняя абсолютная ошибка и средняя абсолютная процентная ошибка. Авторы особо подчёркивают, что, несмотря на преимущества, гибридные модели сталкиваются с проблемами, включая повышенную вычислительную сложность и трудности интеграции разнородных компонентов, а среди ключевых направлений будущих исследований выделяют необходимость создания «облегчённых» гибридных архитектур, стандартизированных эталонных наборов данных и методов оценки прогноза с учётом неопределённости.

Дополнительный анализ современного состояния ML-методов в задачах прогнозирования состояния аккумуляторов представлен в обзоре, посвящённом

применению машинного обучения для обеспечения безопасности батарей следующего поколения [11]. Авторы детально рассматривают полный цикл внедрения ML в системы управления батареями — от отбора и предобработки данных до извлечения признаков и обучения моделей, — особо выделяя такие критические приложения, как оценка состояния здоровья, прогнозирование остаточного ресурса, раннее предупреждение теплового разгона и обнаружение неисправностей. Определено, что переход от реактивных к предиктивным стратегиям управления безопасностью, обеспеченный методами машинного обучения, знаменует собой смену парадигмы в проектировании батарейных систем.

Среди конкретных архитектурных решений последних лет выделяется гибридная модель DNN-LSTM, предложенная в работе [12], в которой анализ дифференциальной ёмкости интегрирован с глубокими нейросетевыми архитектурами. На случайном наборе данных NASA модель продемонстрировала коэффициент детерминации $R^2 = 0,9968$ и среднюю абсолютную ошибку MAE = 0,63%, что является одним из лучших результатов, опубликованных на сегодняшний день. Авторы подчёркивают, что именно сочетание физически информативного признакового пространства дифференциальной ёмкости с возможностями глубокого обучения позволило достичь столь высокой точности при одновременной вычислительной эффективности, достаточной для приложений реального времени. В параллельном исследовании [13] разработана архитектура BiTCN-MHA-BiGRU, интегрирующая двунаправленную временную свёрточную сеть, механизм множественного внимания и двунаправленный GRU-слой; предложенный подход продемонстрировал среднеквадратичную ошибку менее 0,1% при кросс-валидации с исключением одного набора данных, а при переносе на датасет NASA ошибка прогноза остаточного ресурса не превысила 10%.

Особого внимания заслуживает бурное развитие физически-информированных нейронных сетей (Physics-Informed Neural Networks, PINNs) применительно к задачам деградации аккумуляторов. В работе [14] представлена физически-информированная иерархическая сеть модуляции восприятия (PI-

HPMN), в которой свёрточные слои улавливают локальные электрохимические сигнатуры, а механизм внимания на основе Transformer-архитектуры моделирует долгосрочные временные зависимости. Ключевой особенностью предложенного подхода является введение физически-информированной функции потерь, полученной из дискретизированного уравнения деградации в пространстве состояний, что позволяет внедрить предметные знания непосредственно в процесс обучения и тем самым регуляризовать модель, повышая её обобщающую способность. Другая работа, посвящённая совместному оцениванию SOH, RUL и краткосрочной траектории деградации [15], демонстрирует, что применение многозадачной архитектуры с адаптивным взвешиванием функций потерь позволяет достичь средней абсолютной процентной ошибки оценки SOH на уровне 0,75%, что существенно превосходит показатели традиционных подходов.

Особое значение также приобретают работы, посвящённые применению эволюционных алгоритмов, и, в частности, алгоритма NSGA-II, для решения задач структурно-параметрического синтеза. Исследование [16], посвящённое оптимизации параметров фотоэлектрической системы с интегрированной аккумуляторной батареей для частных домов, наглядно продемонстрировало преимущества NSGA-II перед традиционными методами. При оптимизации одновременно по критериям полной стоимости электроэнергии и объёма потребления из сети алгоритм обеспечил 94% экономии вычислительного времени по сравнению с полным перебором при более высокой точности определения спецификаций компонентов системы.

В развитие этого направления в работах [17,18] авторы предложили методологию, объединяющую многокритериальную оптимизацию на основе NSGA-II с методом анализа иерархий для окончательного выбора структуры гибридной генерирующей системы с накопителем энергии из множества Парето-оптимальных решений. Авторы показали, что в тех случаях, когда Парето-фронт содержит решения, близко расположенные в критериальном пространстве, формальный аппарат АНР позволяет учесть дополнительные, в том числе субъективные, критерии

и предпочтения лица, принимающего решения, что существенно повышает обоснованность итогового выбора.

В контексте процесса быстрого заряда литий-ионных аккумуляторов следует отметить работы, использующие байесовскую оптимизацию. В работе [19] авторами был предложен метод секционной байесовской оптимизации, использующий физико-химическую модель, что позволило не только сократить время зарядки батареи до уровня 80%, и при этом одновременно замедлить рост SEI-слоя, что улучшает значение ёмкости батареи. Хотя байесовские методы применяются в задачах оптимизации, их применение к задаче структурно-параметрического синтеза ячейки с дискретным и непрерывным варьированием параметров остаётся проблематичным в связи с ограничениями масштабируемости.

Проведённый анализ позволяет утверждать, что, несмотря на значительный прогресс в каждом из рассмотренных методов, их применение для решения задачи поиска конструкционных параметров СНЭ ограничено. Существующие работы либо ограничиваются прямым прогнозом начальных свойств материала без учёта временной эволюции характеристик, определяющей показатели надёжности, либо решают обратную задачу на уровне отдельных компонентов без системного охвата всего вектора конструкционных параметров. В области многокритериальной оптимизации алгоритм NSGA-II успешно применяется на уровне энергосистемы в целом, однако его использование для параметрического синтеза отдельной электрохимической ячейки с ограничениями по SOH не получило должного развития. Работ, в которых сквозным образом, в едином вычислительном контуре, одновременно формализовались бы взаимосвязи «состав—конструкция—начальные свойства», прогнозировалась деградация во времени с помощью глубоких нейросетей и на этой основе осуществлялся многокритериальный выбор конструкционных параметров ячейки по Парето-фронт с учётом пользовательских предпочтений, в открытой научной литературе до настоящего времени не представлено.

1.2. Обзор эволюционных алгоритмов и гибридных архитектур в задачах структурно-параметрического синтеза СНЭ

Применение методов многокритериальной оптимизации к задачам принятия решения о разработке СНЭ представляет собой относительно новую, но чрезвычайно динамично развивающуюся область исследований, в которой достигнуты значимые результаты, однако сохраняется ряд принципиальных разрывов, препятствующих сквозному решению задачи структурно-параметрического синтеза. Среди эволюционных алгоритмов, применяемых для решения многокритериальных задач, особое место занимает алгоритм недоминируемой сортировки с элитарной стратегией NSGA-II (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II). За прошедшие два десятилетия он зарекомендовал себя как наиболее сбалансированный инструмент с точки зрения сходимости, равномерности покрытия Парето-фронта и вычислительной эффективности. Применительно к проблематике СНЭ алгоритм получил развитие в нескольких направлениях.

Одной из наиболее цитируемых работ в данной области является исследование [17], в котором модифицированный алгоритм NSGA-II применён для одновременной максимизации удельных энергии и мощности при минимизации потери ёмкости. Авторы использовали разработанную ранее комплексную модель деградации, валидированную на трёхэлектродной ячейке в ходе длительного циклирования, а в качестве проектных переменных выступали толщина электродов, размер частиц, пористость и проводимость. Анализ чувствительности, выполненный на полученном множестве Парето-оптимальных решений, показал, что увеличение толщины электрода и уменьшение размера частиц способствуют повышению эксплуатационных характеристик; оптимизированные конструкции продемонстрировали меньшее снижение ёмкости и меньший размах степени заряда на протяжении 750 циклов моделирования. Данная работа заложила методологический фундамент для последующих исследований, явно показав, что эволюционный подход способен выявлять нетривиальные компромиссы в многомерном пространстве конструктивных параметров.

Развитием этого направления стала многокритериальная оптимизационная платформа, представленная в работе [18]. Исследователи поставили задачу одновременного достижения компромисса между энергетической плотностью, способностью к быстрому заряду, высокоскоростному разряду и продолжительностью срока службы. В качестве проектных переменных были выбраны поверхностная ёмкость катода, соотношение N/P, пористость катода и анода, а также рабочая температура. Физически обоснованная псевдодвумерная модель, валидированная на экспериментальных данных, использовалась для генерации обучающей выборки, на которой впоследствии тренировалась суррогатная модель, объединённая с алгоритмом NSGA-II. Сравнение трёх различных методов расчёта целевых функций выявило, что наиболее сбалансированный подход обеспечивает наилучший компромисс между противоречивыми требованиями. Принципиально важным выводом этой работы является демонстрация того, что повышение рабочей температуры ячейки позволяет смягчить фундаментальный конфликт между энергоёмкостью и мощностными характеристиками, расширяя тем самым диапазон допустимых конструктивных параметров.

На уровне батарейных систем алгоритм NSGA-II также нашёл применение в задачах теплового менеджмента, где многокритериальная природа проявляется не менее отчётливо. В исследовании [20] представлена многокритериальная оптимизация жидкостной охлаждающей пластины с частичным заполнением пористой средой. Кригинг-суррогатные модели в сочетании с NSGA-II и методом TOPSIS использованы для поиска компромисса между максимальной температурой батарейного модуля и перепадом давления в охлаждающем канале. В работе [21], посвящённой оптимизации тепловых труб и жидкостного охлаждения, ортогональный эксперимент применён для выявления ключевых параметров, после чего алгоритм NSGA-II совместно с энтропийным взвешиванием и методом TOPSIS обеспечил выбор оптимальной комбинации конструктивных факторов, снизив максимальную температуру на 2,29%, температурный разброс на 6,02% и перепад давления на 79,62%. Исследование [22], посвящённое оптимизации змеевидного

охлаждающего канала, продемонстрировало, что гауссовские процессы в сочетании с NSGA-II позволяют достичь снижения максимальной температуры с 307,6 К до 306,7 К и сокращения температурного разброса на 9,88% при латинском гиперкубическом формировании обучающей выборки.

Следует отметить, что подавляющее большинство существующих исследований, использующих NSGA-II в исследовании свойств литий-ионных аккумуляторов, ограничивается либо уровнем теплового менеджмента (где конструктивные параметры самой ячейки считаются заданными), либо оптимизацией в пространстве двух-четырёх параметров без учёта временной эволюции характеристик. Работ, в которых алгоритм применялся бы для сквозного структурно-параметрического синтеза в одиннадцатимерном пространстве конструкционных и эксплуатационных переменных с одновременным учётом начальных характеристик и их деградации во времени, на текущий момент нет.

Альтернативным эволюционным подходом является алгоритм MOEA/D (Multi-Objective Evolutionary Algorithm based on Decomposition), основанный на декомпозиции многокритериальной задачи в набор скалярных подзадач. Применительно к проблематике накопителей энергии MOEA/D используется преимущественно на уровне энергосистем. Характерным примером служит работа [23], в которой алгоритм MOEA/D-DRA (с динамическим распределением ресурсов) применён для оптимального размещения гибридных возобновляемых источников энергии с батарейными системами хранения. Целевыми функциями выступали минимизация годовых потерь энергии и инвестиционных затрат; моделирование на IEEE 33-узловой и TNEB 84-узловой радиальных распределительных системах продемонстрировало преимущество предложенного подхода перед алгоритмом оптимизации райдера и гибридным методом Нелдера-Мида с роем частиц. Вместе с тем, применимость MOEA/D к задаче структурно-параметрического синтеза отдельной электрохимической ячейки остаётся практически неисследованной, что, по-видимому, связано с тем, что для задач относительно небольшой размерности (до десяти-пятнадцати параметров) преимущества декомпозиционного подхода перед

популяционным не являются определяющими, а накладные расходы на поддержание набора весовых векторов могут оказаться неоправданными.

Отдельного упоминания заслуживают работы, в которых генетические алгоритмы применяются не для многокритериальной, а для однокритериальной параметрической идентификации. В работе [24] предложили пошаговый подход к оцениванию параметров усовершенствованной одночастичной модели (Enhanced Single Particle Model), разбивая процесс на четыре стадии: определение стехиометрических коэффициентов (стадия 1), оценивание параметров модели с помощью генетического алгоритма (стадия 2), определение энтропийных коэффициентов в зависимости от степени заряда (стадия 3) и повторное оценивание параметров (стадия 4). Целевая функция минимизирует среднеквадратичную ошибку между экспериментальными данными и результатами моделирования; валидация на трёх коммерческих цилиндрических аккумуляторах с различной химией катода (NCA, NMC и LFP) показала ошибку по напряжению в пределах 30 мВ и по температуре в пределах 0,5 °С. Параллельно этими же авторами в работе [25] разработана стратегия калибровки четырнадцати чувствительных параметров усовершенствованной одночастичной модели на основе генетического алгоритма с использованием суррогатной модели на базе искусственной нейронной сети. Суррогат обеспечил 420-кратное ускорение вычислений при постоянном токе и почти 24 000-кратное ускорение при циклических испытаниях, а среднеквадратичная ошибка не превысила 30 мВ для напряжения, 0,5 °С для температуры и 0,1% для SOH. Несмотря на впечатляющую точность, достигаемую этими методами в задачах идентификации, они принципиально ограничены однокритериальной постановкой и не содержат механизмов для одновременного учёта нескольких конфликтующих требований к конструкции ячейки.

Принципиальным ограничением прямого применения эволюционных алгоритмов к задачам проектирования аккумуляторов является высокая вычислительная стоимость расчёта целевых функций, особенно когда в качестве последних выступают результаты численного решения систем дифференциальных

уравнений в частных производных или, тем более, результаты натурных экспериментов. Для преодоления этого ограничения в последние годы активно развиваются подходы на основе суррогатного моделирования и байесовской оптимизации. Одним из примеров является работа [26], в которой байесовская оптимизация применена для проектирования цилиндрических ячеек типоразмера 18650. Проектными переменными выступали толщина (от 22 до 240 мкм) и пористость (от 0,22 до 0,54) электродных покрытий, а целевыми функциями — удельная энергия и снижение ёмкости. Гауссовские процессы использовались в качестве вероятностных суррогатных моделей, а функция приобретения на основе евклидова ожидаемого улучшения направляла поиск. Результатом является идентификация 32 Парето-оптимальных конструкций с удельными энергиями от 67 до 202 мВт·ч/г и снижением ёмкости от 18,4 до 23,8%. Данная работа является одной из немногих, в которых байесовский подход непосредственно использован для выбора конструкционных параметров электрохимической ячейки, а не для оптимизации протоколов эксплуатации. В области быстрого заряда многокритериальная байесовская оптимизация также продемонстрировала высокую эффективность. В работе [27] предложен фреймворк для многокритериальной оптимизации протоколов быстрого заряда, одновременно учитывающий ёмкость в точке перегиба и циклический ресурс. Такой подход позволяет сократить экспериментальные затраты по сравнению с полным перебором параметров зарядного протокола.

Несмотря на впечатляющие результаты, достигаемые методами байесовской оптимизации, им присуще фундаментальное ограничение, связанное с масштабируемостью гауссовских процессов на пространства большой размерности. В задачах с числом варьируемых параметров более шести-восьми стандартные реализации байесовской оптимизации сталкиваются с экспоненциальным ростом вычислительных затрат на построение и обращение ковариационной матрицы. Кроме того, байесовский подход по своей природе ориентирован на последовательный, а не на популяционный поиск, что затрудняет эффективное исследование многоэкстремальных ландшафтов, характерных для задач структурно-

параметрического синтеза. Эти обстоятельства делают предпочтительным применение популяционных эволюционных алгоритмов, и прежде всего NSGA-II, для решения задачи поиска конструкционных и эксплуатационных параметров. Принципиальный тренд последних лет, имеющий непосредственное отношение к методологии настоящего исследования, заключается в переходе от изолированного использования физических или статистических моделей к их глубокой интеграции в рамках гибридных архитектур. Если на ранних этапах развития области машинное обучение применялось преимущественно как замена физическому моделированию (подход «чёрного ящика»), то современные работы исходят из того, что максимальный синергетический эффект достигается при объединении априорных физических знаний со способностью нейронных сетей улавливать сложные нелинейные закономерности в данных. Наиболее ярко эта тенденция проявляется в развитии физически-информированных нейронных сетей (Physics-Informed Neural Networks, PINNs) применительно к задачам диагностики и прогнозирования состояния аккумуляторов. В работе [28], посвящённой совместному оцениванию SOH, остаточного ресурса и краткосрочной траектории деградации, представлена многозадачная архитектура на основе упрощённой трансформерной модели, извлекающей как временные, так и признаковые характеристики. Адаптивное взвешивание функций потерь обеспечило сбалансированное обучение; достигнутая средняя абсолютная процентная ошибка оценки SOH составила 0,75%, нормированное отклонение прогноза краткосрочной траектории деградации — около 0,01, а средняя абсолютная ошибка прогноза остаточного ресурса — 104 цикла. Эксперименты по трансферному обучению продемонстрировали сильные обобщающие способности предложенного фреймворка.

В развитие этого направления в работе [29] представлена гибридная LSTM-PINN архитектура, в которой LSTM-компонент отвечает за моделирование временных зависимостей динамики деградации, а физически-информированный блок накладывает ограничения, вытекающие из аррениусовской температурной зависимости, эффектов роста импеданса и монотонной кинетики старения. Ключевой особенностью предложенного подхода является адаптивный механизм

масштабирования скорости деградации, который в явном виде интегрирует рост импеданса в реальном времени с тепловой кинетикой, позволяя модели адаптироваться к изменяющимся условиям эксплуатации. На данных циклирования гибридная конструкция LSTM-PINN продемонстрировала среднеквадратичную ошибку прогноза траектории SOH на уровне 0,6% и среднюю абсолютную ошибку 1,01%, сохраняя при этом физическую согласованность прогнозов в условиях различных температур и уровней импеданса. Принципиально важным является вывод авторов о том, что именно включение электрохимических законов старения в процесс обучения позволяет повысить стабильность долгосрочных прогнозов и улучшить интерпретируемость результатов, что имеет прямое отношение к методологии, развиваемой в настоящей диссертации. Другим значимым направлением гибридизации является объединение свёрточных и рекуррентных архитектур. В работе [30] авторы предложили гибридную модель OptiCNN-SLSTM. Инженеры пошли по сложному пути: сначала они «сжимают» временные данные с помощью одномерной свёрточной нейросети, а потом LSTM улавливает, как эти моменты связаны друг с другом во времени. Такая комбинация оказалась не просто интересным с алгоритмической точки зрения: после двух фаз тонкой настройки параметров модель вышла на низкий уровень ошибки RMSE — 2,15% и 2,18% соответственно для разных датасетов NASA. На настоящих, а не лабораторных данных ошибка упала до 0,03% (а MAE — до 0,28%). На деле такая методика даёт возможность весьма достоверно прогнозировать работу аккумуляторных батарей. Когда речь идёт о применении унифицированных моделей в разноплановых эксплуатационных условиях и для разных типов аккумуляторов, особую роль начинают играть подходы, связанные с переносным обучением.

В исследовании [31] описана гибридная структура нейросети, которая объединяет в себе элементы CNN, BiLSTM. Эта система анализирует данные о процессе зарядки и позволяет оценить показатель состояния здоровья батареи. Авторы предложили две стратегии переносного обучения, которые успешно обработали информацию, полученную в Сианьском и Юго-Западном транспортных университетах, где условия зарядки существенно различались. Это

продемонстрировало, что модель можно адаптировать к новым ситуациям без дополнительного обучения.

Изучение трёх методических подходов — эволюционных алгоритмов для многокритериальной оптимизации, суррогатного моделирования с применением байесовской оптимизации и гибридных архитектурных решений — позволило сделать выводы, которые помогут определиться с выбором алгоритма для последующих исследований. Прежде всего, стоит отметить, что алгоритм NSGA-II демонстрирует высокую результативность при решении задач, связанных с многокритериальной оптимизацией в сфере электрохимических накопителей энергии. Его преимущество заключается в гармоничном сочетании таких качеств, как скорость сходимости, разнообразие получаемых решений и эффективность с точки зрения вычислительных ресурсов. Благодаря возможности одновременной обработки множества физических параметров этот алгоритм представляется идеальным инструментом для задач структурно-параметрического синтеза.

Кроме того, исследования в области суррогатного моделирования и байесовской оптимизации показали, что можно существенно ускорить процесс вычислений без существенной потери точности. Тем не менее, применение этих методов в многомерном пространстве конструктивных параметров сталкивается с определёнными ограничениями: проблемой масштабируемости и недостаточной интерпретируемостью результатов, что критично для инженерного анализа воздействия отдельных факторов. В качестве решения данной проблемы можно предложить комбинированный подход: использовать регрессионные модели, которые опираются на чётко определённые физико-химические зависимости, для расчёта начальных характеристик, а для прогнозирования процессов деградации, где аналитическое описание физических закономерностей затруднено, применять нейросетевые технологии.

1.3. Сравнительный анализ подходов к созданию СНЭ

Изучение актуальных научных и технических публикаций позволяет выявить три основных вехи и вектора в эволюции методов разработки и исследования литий-

ионных аккумуляторов. Каждый из этих этапов обогатил область знаний, однако ни один не смог обеспечить всестороннего решения существующих проблем [32-35].

1. Классический (эмпирико-синтетический) подход. Данное направление, доминировавшее в течение длительного времени и остающееся основой промышленных научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ, сосредотачивается на следующем:

А) Синтез и модификация новых материалов: значительный объем работ посвящен получению новых составов катодных материалов (например, переход от LiCoO_2 к слоистым материалам с низким содержанием кобальта NMC 811, NMA, бескобальтовым LMFP и высоковольтным шпинелям) и анодных материалов (кремний-углеродные композиты, сложные металлические соединения на основе олова, литий-титанатные аноды). Ключевыми задачами здесь являются увеличение удельной ёмкости и рабочего напряжения батареи [36,37];

Б) Разработка новых электролитов и функциональных добавок: Исследования направлены на создание электролитов, стабильных в широком электрохимическом спектре (например, с использованием фторсодержащих солей и растворителей), а также добавок, предназначенных для формирования стабильных SEI- и CEI-пленок [134,135], используемых с целью подавления деградации характеристик аккумулятора [38].

Основным инструментом данного подхода остается технологическая разработка, состоящая из следующих этапов:

1. Синтез материала;
2. Изготовление экспериментальных ячеек;
3. Эксплуатация ячеек в течение всех циклов заряда-разряда;
4. Обсуждение результатов.

Это приводит к фрагментарности знаний: результаты, полученные для одной партии материалов, далеко не всегда подходят для описания следующей партии.

2. Подход, основанный на физико-химическом и математическом моделировании. Основной задачей данного направления является создание детальных моделей, описывающих процессы, которые происходят в аккумуляторе. Можно выделить две основные группы моделей:

А) Модели на уровне ячейки. Наиболее известной и широко применяемой является псевдодвумерная (P2D) модель Дойла-Фуллера-Ньюмана [39], которая описывает перенос ионов лития в твердой фазе и электролите, а также кинетику на границах раздела фаз. Её модификации используются для оптимизации толщины электродов, пористости и геометрии ячеек.

Б) Модели деградации. Разрабатываются механистические модели, описывающие механизмы старения: механическое разложение частиц активного материала [40], рост пассивирующих пленок (SEI) [41], окисление электролита.

Несмотря на высокую предсказательную способность в рамках заданных допущений, такие модели требуют точного знания множества физико-химических параметров (коэффициентов диффузии, констант скоростей реакций), измерить которые сложно. Они также плохо масштабируются для учета всех возможных энергетических эффектов и комбинаций материалов, а вычислительная сложность делает их неудобными для быстрого отслеживания изменений.

3. Современный подход с использованием методов машинного обучения (МО). Это быстроразвивающаяся область, которая стремится преодолеть ограничения предыдущих подходов. Методы ML используются для предсказания свойств новых химических соединений (химический потенциал, ионная проводимость) на основе их структуры до синтеза. Это даёт возможность прогнозировать возможность применения материалов, а также позволяет описывать их свойства [42]. Применение машинного обучения позволяет также быстро изучать действующие модели : подавляющее большинство существующих работ сфокусировано на использовании рекуррентных нейронных сетей (RNN, LSTM), сверточных сетей (CNN) и методов ансамблевого обучения для оценки состояния здоровья (SOH) и прогнозирования остаточного ресурса (RUL) уже существующих

батарей на основе данных их эксплуатации [43, 44]. Ключевым недостатком данного метода является то, что на основе анализа существующих задач, решаемых с применением ML в среде аккумуляторов, можно сделать вывод об узконаправленном характере решений. Программные комплексы либо решают задачу «снизу-вверх» (предсказание свойств материала), либо «сверху-вниз» (анализ данных готового изделия). Практически отсутствуют комплексные работы, в которых методы ML применяются непосредственно для задачи системного проектирования ячейки «с нуля». На сегодняшний день нет примеров методик, которые чётко разделяют характеристики на те, которые эффективно прогнозируются линейными методами (на основе известных физических закономерностей), и те, что требуют нелинейных нейросетевых моделей с последующим интегрированием предсказания этих разнородных моделей в единую прогнозную систему (гибридная модель). В большинстве случаев, нейронные сети используются конкретно для проектирования (подбор параметров материалов и конструкции для достижения целевых характеристик), а не только для последующей диагностики.

В настоящее время проектирование систем накопления энергии опирается на три методологических направления, каждое из которых сформировалось в ответ на конкретные технологические вызовы.

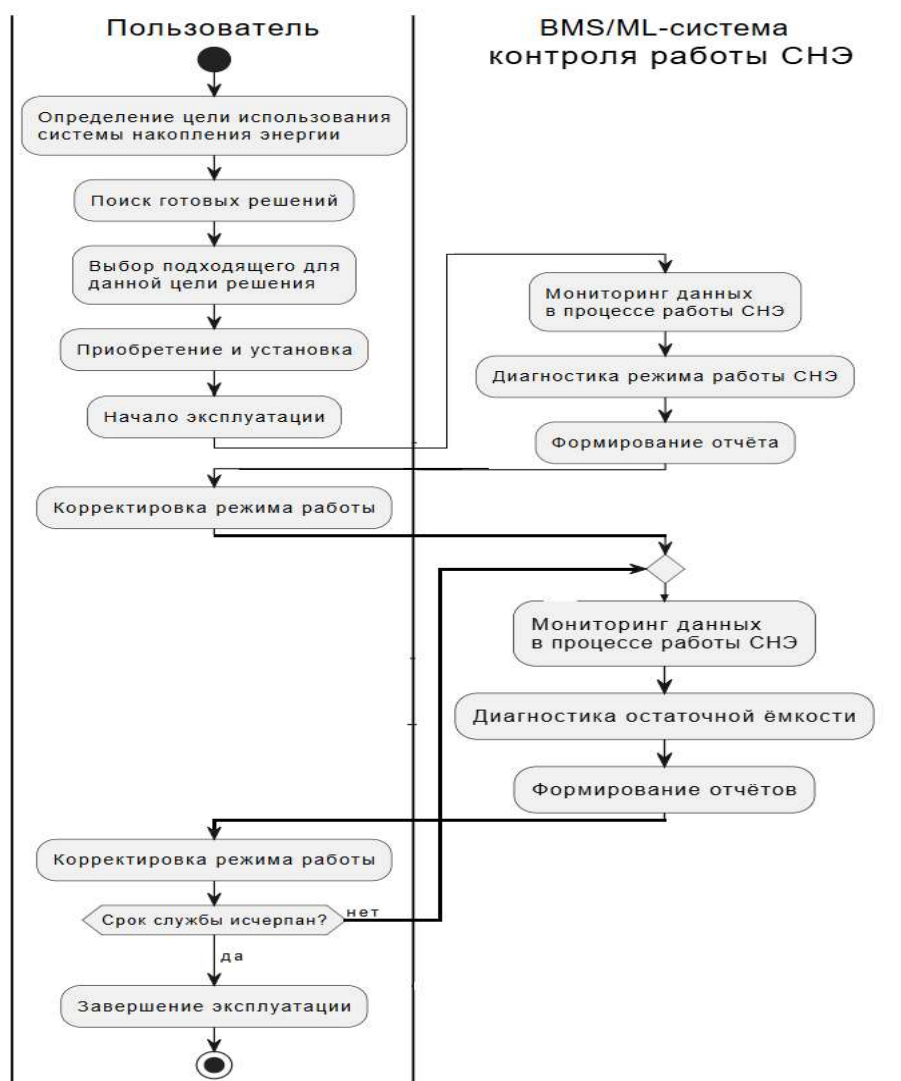


Рисунок 1. Существующая парадигма принятия решения об эксплуатации системы накопления энергии для достижения выбранной пользователем цели (модель As Is).

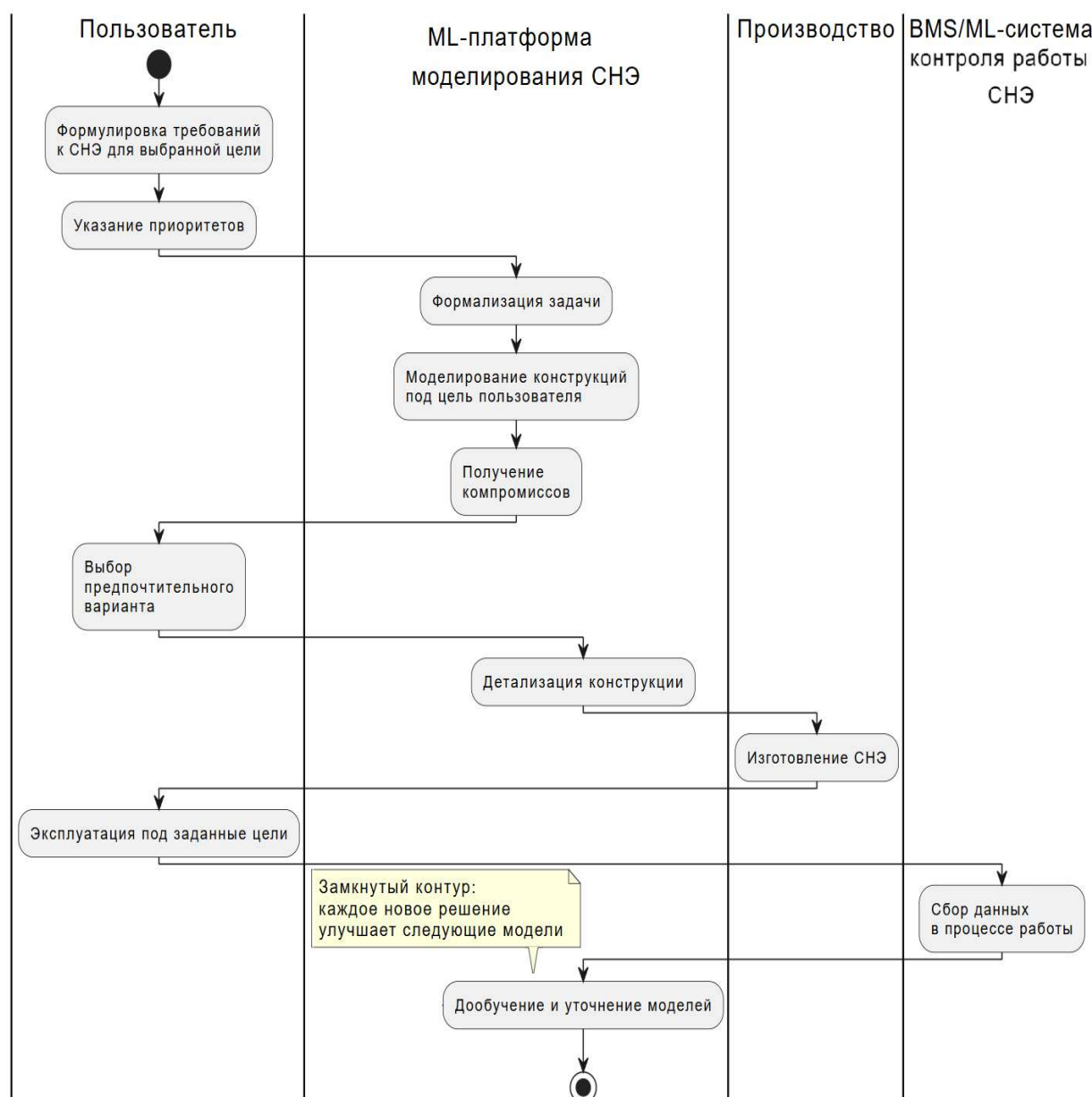


Рисунок 2. Предлагаемая парадигма поиска конструкционных параметров системы накопления энергии для достижения выбранной пользователем цели (модель To Be).

На протяжении многих лет доминирующим методом был эмпирико-синтетический подход, который фокусировался на улучшении отдельных элементов аккумуляторной ячейки. Учёные занимались созданием катодных материалов с повышенной ёмкостью, разработкой анодов из композитных материалов на базе кремния и формированием стабильных составов электролитов.

Несмотря на то, что данный подход заложил основы современных технологий, он имеет существенный недостаток — фрагментарность. Когда удаётся улучшить один параметр благодаря новому материалу, другие характеристики зачастую ухудшаются. Причина кроется в том, что элементы ячейки работают не обособленно, а как части сложной электрохимической системы. Кроме того, процесс, включающий синтез материала, его тестирование и анализ результатов, занимает несколько лет. А когда дело доходит до масштабирования лабораторных достижений, часто выясняется, что необходимо корректировать модели других компонентов системы, что сказывается на экономической целесообразности проекта.

Чтобы преодолеть ограничения эмпирического подхода, прибегают к физико-химическому и математическому моделированию. Одной из наиболее распространённых является псевдодвумерная (P2D) модель Дойла-Фуллера-Ньюмана, которая позволяет описать перемещение массы и заряда внутри ячейки. Такие модели отличаются высокой точностью в определённых рамках и активно применяются для исследования процессов деградации, например, роста SEI-слоя или механического разрушения частиц. Алгоритмы решают либо задачи «снизу вверх» (прогноз свойств материала), либо «сверху вниз» (диагностика готового изделия), но практически отсутствуют комплексные реализации, где МО является ядром системы для сквозного проектирования ячейки «с нуля». Кроме того, модели типа «чёрный ящик» страдают от проблем интерпретируемости, переносимости на другие типы ячеек и высокой зависимости от объёма и качества обучающих данных.

Ключевой системный недостаток, пронизывающий все три подхода, — это их неспособность адекватно работать со взаимосвязями и компромиссами в рамках целостной системы. Классический подход игнорирует эти связи, физическое моделирование не может их все охватить из-за сложности, а современное МО фокусируется на корреляциях в данных, часто без учёта лежащих в их основе физических ограничений. В результате поиск оптимальной конфигурации аккумулятора, отвечающей одновременно требованиям по энергии, мощности, долговечности, безопасности и стоимости, остаётся в значительной степени

искусством, а не наукой, требующим огромных затрат времени и ресурсов.

Таблица 1. Анализ существующих подходов проектирования систем накопления энергии.

Критерий / Подход	Эмпирико- синтетический	Физико-химическое моделирование	Машинное обучение
Основной фокус	Синтез и оптимизация отдельных компонентов (катод, анод, электролит).	Детальное математическое описание внутренних процессов.	Выявление статистических закономерностей и паттернов в данных.
Ключевые инструменты	Химический синтез, электрохимическая характеризация, рентгеноструктурный анализ.	Системы дифференциальных уравнений (модель P2D), вычислительная гидродинамика.	Нейронные сети, методы ансамблевого обучения, регрессионный анализ.
Сильные стороны	Прямая связь с фундаментальной химией, возможность прорывных открытий.	Высокая физическая обоснованность, возможность моделирования пространственных распределений параметров.	Способность работать со сложными нелинейностями, высокая точность прогноза в рамках обучающей выборки.
Слабые стороны	Игнорирование системных взаимодействий, фрагментарность знаний, высокие затраты и длительные циклы тестирования.	Экстремальная вычислительная сложность, параметрическая чувствительность, сложность моделирования деградации.	Проблема «черного ящика», высокие требования к объему и качеству данных, плохая экстраполяционная способность, узкая специализация задач.
Ключевая системная проблема	Отсутствие интеграции	Отсутствие масштабируемости	Отсутствие сквозного охвата

1.4. Анализ существующих моделей прогнозирования свойств систем накопления энергии на основе машинного обучения

Методы машинного обучения, обладая способностью выявлять сложные нелинейные паттерны в многомерных данных, были закономерно восприняты как инструмент, способный ускорить процесс разработки и повысить точность прогнозирования. Однако, как показывает анализ, их применение, будучи мощным, носит в значительной степени фрагментарный характер и зачастую воспроизводит, а не разрешает, фундаментальные проблемы проектирования сложных систем.

В качестве одного из современных подходов рассматривается модель Дойла-

Фуллера-Ньюмана (P2D) с ML-коррекцией. Её техническая реализация базируется на системе дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих перенос ионов лития в твердой фазе и электролите, и включает уравнения сохранения массы, заряда и кинетики Батлера-Вольмера. ML-компонент применяется для калибровки трудноизмеримых параметров, таких как коэффициенты диффузии и константы скоростей реакций. Преимуществами данной модели являются высокая физическая обоснованность прогнозов, возможность моделирования распределенных параметров (концентрации, потенциалы), а также хорошая зарекомендованность для оптимизации толщины электродов и пористости. Однако ей присущи критические недостатки: высокая вычислительная сложность и параметрическая чувствительность. Модель требует около 20-30 физико-химических параметров, при этом погрешность измерения ключевых из них (например, коэффициента диффузии) может достигать 50-100% [45, 46], что приводит к накоплению неопределенности в прогнозах. Существуют определённые ограничения, связанные с возможностью масштабирования модели: внедрение дополнительных механизмов деградации приводит к резкому росту сложности системы. Применение модели в случае многокомпонентных электролитных систем оказывается затруднительным, а при изменении химического состава материалов требуется вносить существенные изменения в её формулировку.

Сфера использования модели включает в себя проведение академических исследований, совершенствование отдельных конструктивных решений и проверку упрощённых моделей [47, 48].

Подходы, основанные на анализе данных (data-driven), которые применяются для прогнозирования срока службы, обладают рядом характерных особенностей. Для обработки последовательностей данных, связанных с циклированием, в них применяются такие инструменты, как LSTM, GRU, а также временные свёртки. Среди признаков, которые используются в этих подходах, можно выделить производные кривых напряжения, термические характеристики и кулоновскую эффективность.

Процесс обучения осуществляется с использованием обширных наборов

данных, например, NASA PCoE и Stanford Battery Data [49, 50]. Среди плюсов таких методов можно отметить высокую точность прогнозов ($R^2 > 0,9$), возможность обнаруживать сложные нелинейные зависимости и относительную простоту реализации в сравнении с физическими моделями.

Тем не менее у этих подходов есть и существенные недостатки. К ним относятся проблемы с интерпретируемостью результатов и высокие требования к качеству данных. Наблюдается сильная чувствительность к данным, содержащим шумы, а также существует зависимость от конкретного протокола тестирования. Кроме того, снижается интерпретируемость результатов: сложно устанавливать причинно-следственные связи, невозможна экстраполяция за пределы обучающей выборки. Применяются такие методы преимущественно в системах BMS, для прогнозирования остаточного ресурса и определения направления деградации [51, 52].

Мультифизические модели используют несколько компонентов: электрохимический модуль (на основе P2D или упрощенных моделей), тепловую модель (уравнения теплопроводности, конвекции), механическую модель (напряжения от объемных изменений) и оптимизационный алгоритм (градиентные методы, генетические алгоритмы). Их основными преимуществами являются комплексный учет взаимовлияния различных физических процессов, возможность оптимизации с учетом множественных ограничений и высокая точность в узкой области применения. Тем не менее, они обладают высокой вычислительной стоимостью. Сложность решения систем уравнений для электрохимии оценивается как $O(n^3)$, уравнений теплопроводности — $O(n^2)$, а расчет тензоров напряжений-деформаций в механике — $O(n^4)$, что делает модель непрактичной для скрининга более чем 10 вариантов. Существует также проблема калибровки, поскольку требуются экспериментальные данные для калибровки каждого физического модуля, взаимное влияние параметров разных модулей усложняет идентификацию, и неопределенности распространяются между модулями. Дополнительные ограничения связаны с интеграцией: сложно согласовать временные масштабы различных процессов, возникают проблемы численной стабильности при сильной

связи модулей, и предъявляются высокие требования к экспертизе пользователя. Область применения данных моделей включает проектирование батарейных модулей, анализ безопасности и разработку систем теплового управления [53, 54, 55].

Платформы для виртуального скрининга материалов опираются на различные методологические подходы, включая DFT-расчеты для предсказания электрохимических потенциалов, машинное обучение на базе дескрипторов кристаллической структуры и использование баз данных материалов (Materials Project, OQMD) с ML-интерполяцией. Их преимущество заключается в сокращении времени поиска параметров материалов, возможности предсказания свойств на этапе моделирования и выявлении скрытых связей типа "структура-свойство".

Их преимущества включают работоспособность в реальном времени, адаптивность к изменяющимся условиям эксплуатации и баланс между точностью и вычислительной стоимостью. Тем не менее, им свойственна ограниченность проектных возможностей: такие фреймворки эффективно решают задачи оценки текущего SOH, прогноза RUL и оптимальной зарядки, но не пригодны для обратного проектирования ячейки, скрининга материалов или оптимизации конструкции. Также существует проблема обобщаемости: требуется перенастройка для разных типов ячеек, наблюдается зависимость от конкретной BMS аппаратной платформы и имеются ограничения, связанные с доступными измерениями в реальной системе. Важным недостатком является отсутствие связи с параметрами проектирования: не учитывается влияние материалов и конструкции на долговечность, невозможна эксплуатация для оптимизации ячейки на этапе проектирования, что ограничивает ценность для разработчиков ячеек [56]. Применяются подобные фреймворки в автомобильных BMS, системах накопления энергии и диагностике батарейных модулей [57-59]. Основные характеристики современных методов прогнозирования свойств представлены в таблице 2.

Таблица 2. Описание современных методов прогнозирования свойств систем накопления энергии.

Решение	Вычислительная эффективность	Системность	Проектная применимость
P2D+ML	Низкая	Средняя	Ограниченная
Data-driven RUL	Средняя	Низкая	Минимальная
Мультифизические модели	Очень низкая	Высокая	Узкая
Скрининг материалов	Высокая	Низкая	Косвенная
Фреймворки управления	Высокая	Низкая	Отсутствует

Проведенный анализ демонстрирует, что каждый из рассмотренных современных методов прогнозирования обладает уникальным набором преимуществ и фундаментальных ограничений, главным образом в вычислительной эффективности, системности и проектной применимости. Эти ограничения во многом проистекают из сложности и многокомпонентности самого объекта моделирования — литий-ионного аккумулятора. Для глубокого понимания природы данных ограничений, корректной интерпретации результатов моделирования, а также для осознанного выбора или комбинирования подходов при решении конкретных инженерных задач необходимо четко представлять физико-химические основы работы аккумулятора, функции его ключевых компонентов и их взаимное влияние. В этой связи далее рассматриваются принципы работы, основные компоненты и фундаментальные характеристики литий-ионных аккумуляторов.

1.5. Физико-химические основы функционирования СНЭ на основе литий-ионных аккумуляторов: компоненты и фундаментальные характеристики

Литий-ионный аккумулятор представляет собой сложную электрохимическую систему, принцип работы которой основан на процессе интеркаляции ионов лития в кристаллическую решетку активных материалов

электродов в процессе разряда, и на обратном процессе при заряде. При разряде ионы лития перемещаются от отрицательного электрода, называемого анодом, к положительному (катоду) через ионопроводящий электролит, в то время как электроны движутся по внешней цепи, создавая полезный ток [60-64]. При заряде процесс обращается под действием внешнего источника тока.

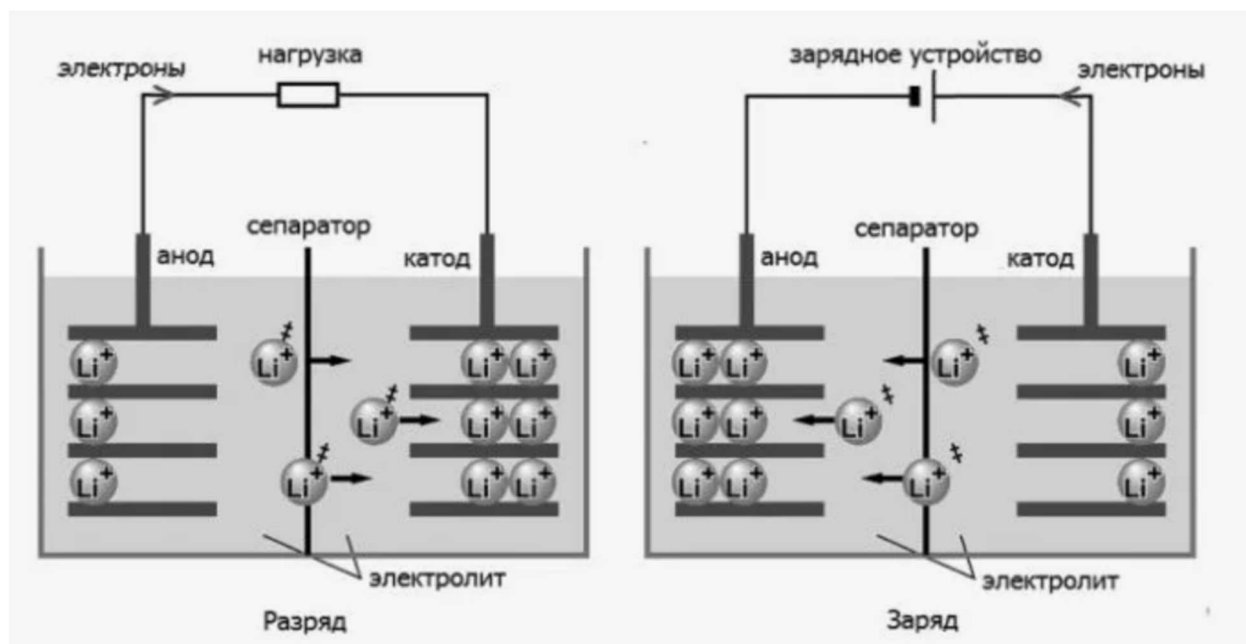


Рисунок 3. Принцип работы литий-ионного аккумулятора.

Рассмотрим более детально каждый элемент данной системы и определим их функции [65]. Первый элемент, который можно выделить, это анод. Основной функцией анода является хранение ионов лития в заряженном состоянии, а следовательно, в процессе разряда он является основным источником ионов [66]. В качестве материалов для изготовления анода чаще всего используется графит благодаря своей слоистой структуре, низкому рабочему потенциалу и стабильности [67]. В качестве перспективных материалов возможно использовать кремний, а также его композиты (SiO_x , Si-C). В особых модификациях аккумуляторов можно использовать литий-титанат ($\text{LTO} - \text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$) в качестве анода. Во время первого заряда на поверхности анода формируется твердая электролитная фаза ($\text{SEI} - \text{Solid Electrolyte Interphase}$) – пассивирующий слой, который предотвращает дальнейшее разложение электролита, но необратимо забирает часть ионов лития.

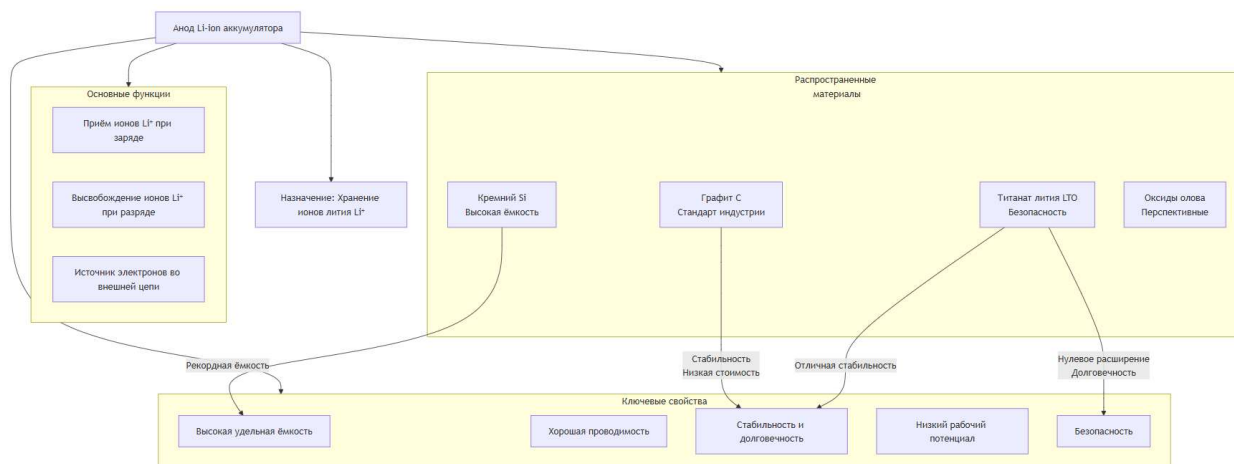


Рисунок 4. Основные свойства анода как элемента системы «Литий-ионный аккумулятор».

Другим важным элементом электрической схемы является катод. Основной функцией катода является приём ионов лития при разряде [68, 69]. Кроме того, катод является источником ионов лития при заряде аккумулятора [70-73]. При изготовлении катода имеется огромный выбор различных материалов, которые определяют напряжение и емкость ячейки. Среди всех возможных вариантов можно выделить слоистые оксиды (LiCoO_2 (LCO), $\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_2$ (NMC), $\text{LiNi}_x\text{Co}_y\text{Al}_z\text{O}_2$ (NCA)), шпинели (LiMn_2O_4 (LMO)), а также соединение типа Li-Fe-P-O (LFP-технология), которые отличаются термической стабильностью и долговечностью, но более низким рабочим напряжением. В процессе работы на поверхности катода также может формироваться защитный слой (CEI – Cathode Electrolyte Interphase), который стабилизирует структуру катода.

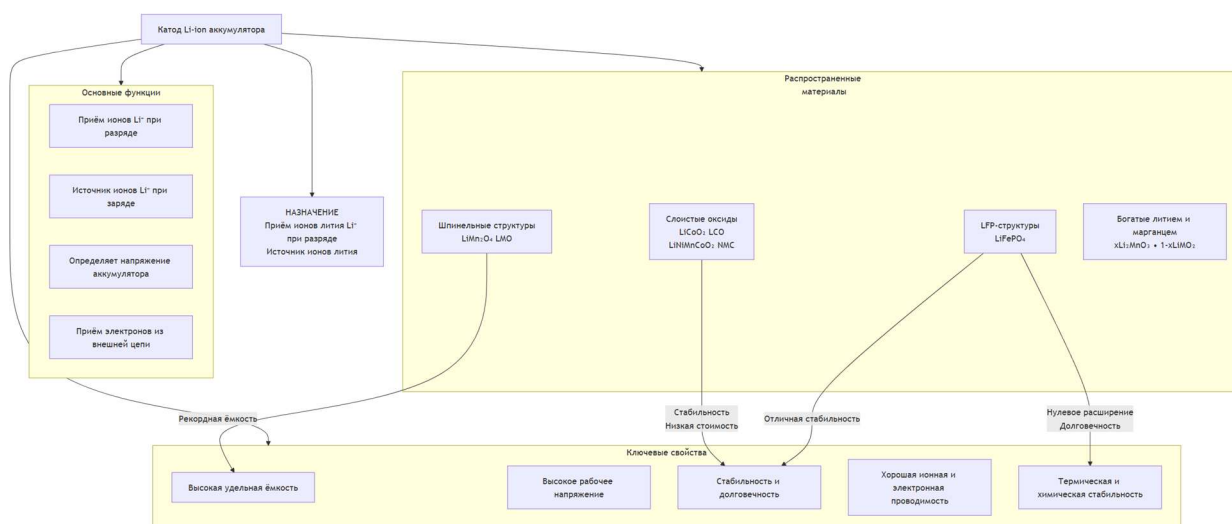


Рисунок 5. Основные свойства катода как элемента системы «Литий-ионный аккумулятор».

Не менее важным элементом системы является электролит – слой между катодом и анодом [74]. Основной функцией электролита является обеспечение ионной проводимости между электродами (катодом и анодом). В большинстве случаев электролит представляет собой соль лития (чаще всего LiPF_6), растворенную в смеси органических карбонатных растворителей (этилен-карбонат – EC, диметил-карбонат – DMC, этил-метил-карбонат – EMC). Для формирования SEI/CEI-плёнок со стабильными свойствами используются дополнительные вещества (например, винилкарбонат – VC или фторэтиленкарбонат – FEC). Основными свойствами электролита являются электрохимическая стабильность (широкий спектр рабочих напряжений), высокая ионная проводимость, поддержка широкого температурного диапазона, безопасность.

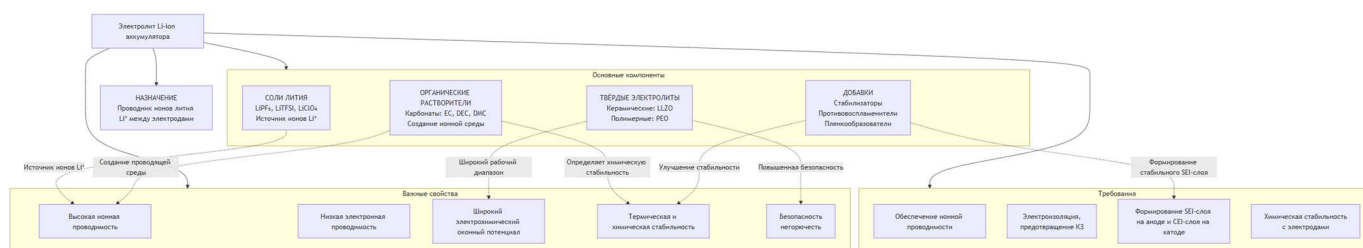


Рисунок 6. Основные свойства электролита как элемента системы «Литий-ионный аккумулятор».

Следующий элемент литий-ионного аккумулятора – сепаратор. Назначение сепаратора - разделение анода и катода, которое предотвращает внутреннее короткое замыкание, но при этом позволяет ионам лития свободно проходить через свои поры. Для изготовления сепараторов, как правило, используются материалы, которые подходят для изготовления пористых полимерных плёнок (полипропилен – РР, полиэтилен – РЕ или их комбинация – РР/РЕ/РР), часто с керамическим покрытием для повышения термостойкости и смачиваемости электролитом.

Ещё одним важным элементом системы «литий-ионный аккумулятор» является токосъёмник – элемент, который формирует контакт с электрической сетью. Основной функцией токосъёмников является обеспечение тока в цепи с литий-ионной батареей. Изготавливаются токосъёмники, преимущественно, из меди (анод) или из алюминия (катод). Идеальный токосъёмник должен быть максимально тонким и лёгким (чтобы не снижать удельную энергоёмкость всего аккумулятора), но при этом обладать высокой проводимостью и прочностью.

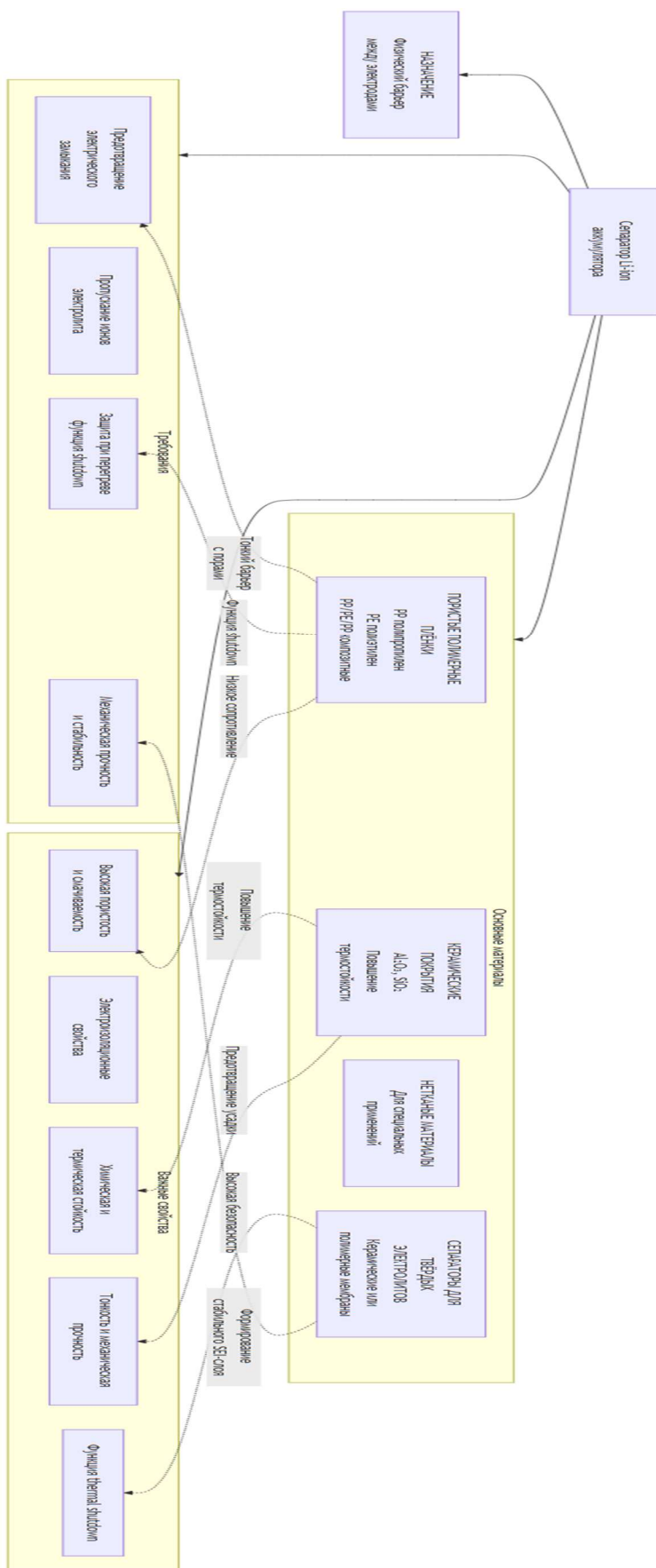


Рисунок 7. Основные свойства сепаратора как элемента системы «Литий-ионный аккумулятор».

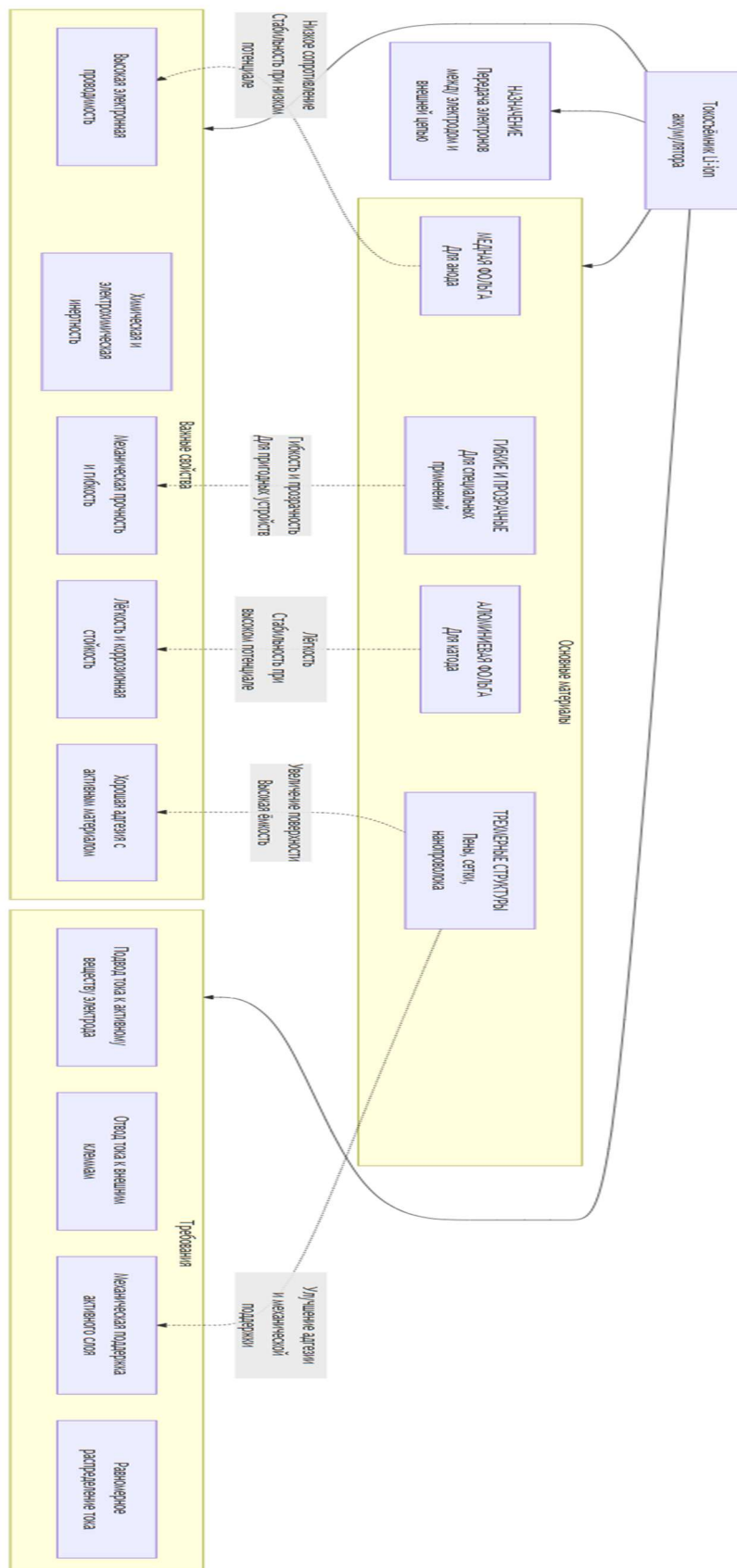


Рисунок 8. Основные свойства токосъёмника как элемента системы «Литий-ионный аккумулятор».

Выделив основные элементы, можем установить взаимосвязи между этими элементами [75]. Рассмотрим общую концепцию связи элементов в литий-ионном аккумуляторе (рисунок 9).

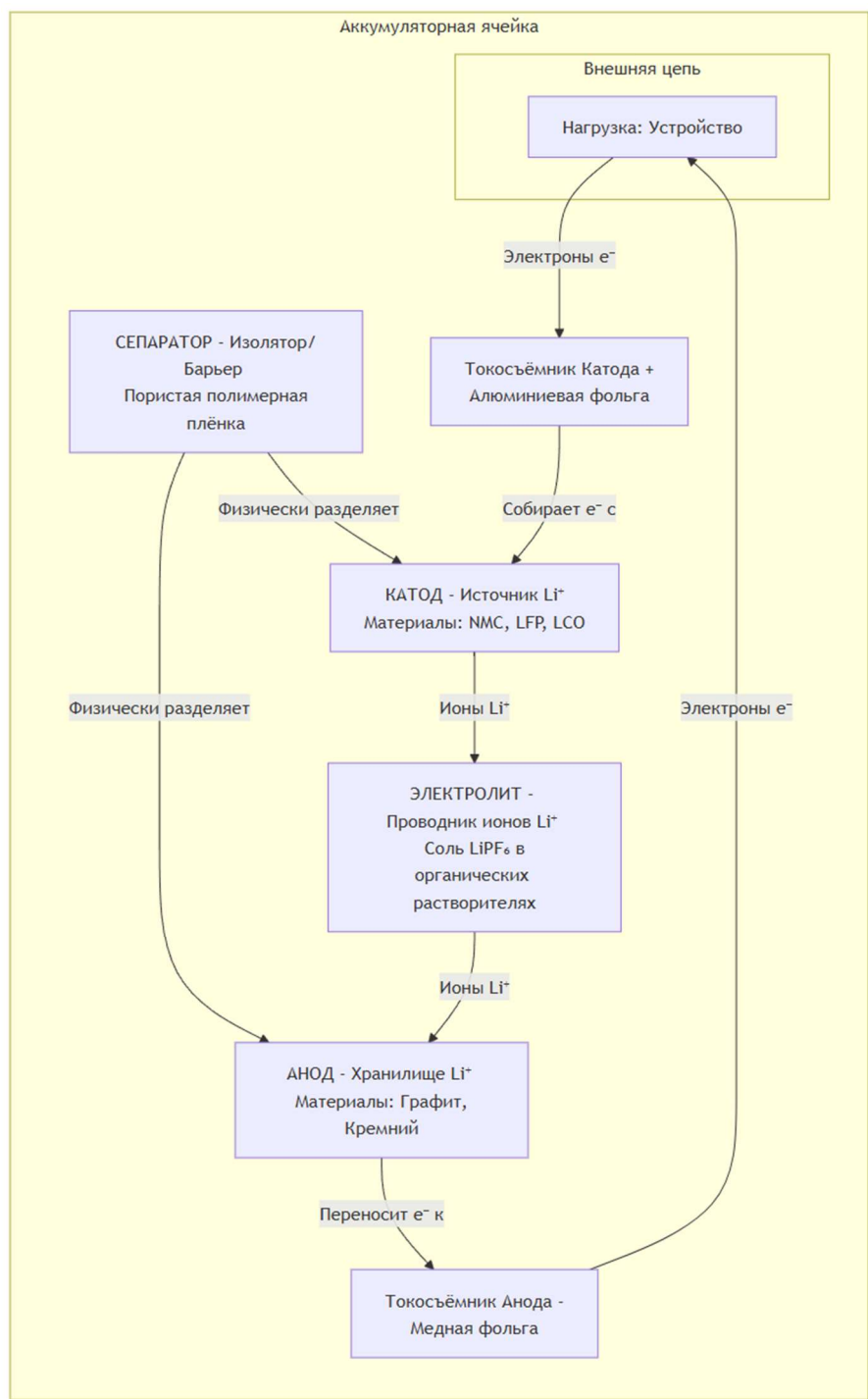


Рисунок 9. Функциональная схема системы «Литий-ионный аккумулятор».

Процесс работы литий-ионного аккумулятора при разрядке показан на рисунке 10.



Рисунок 10. Схема разряда литий-ионного аккумулятора

Кроме активных элементов, составляющие аккумуляторную батарею, в анализе данной системы необходимо рассмотреть основные характеристики, которые её описывают. Фундаментальные электрохимические процессы и характеристики, определяемые на системном уровне:

- Рабочее напряжение ячейки. Определяется разностью электрохимических потенциалов между материалом катода и анода. На практике рабочее напряжение ячейки несколько отличается от теоретического вследствие перенапряжения и омических потерь. Например, для пары графит / NMC 622 рабочее напряжение составляет 3,7 В;

- Теоретическая удельная емкость - количество электрического заряда, которое может быть запасено материалом. Его можно рассчитать, зная число электронов, участвующих в реакции, число Фарадея, молярная масса активного материала;

- Удельная энергетическая плотность - количество запасенной энергии на единицу массы или объема. Является произведением емкости на среднее рабочее напряжение. Это ключевая интегральная характеристика для приложений, использующих литий-ионные батареи;

- Кинетические ограничения и мощность. Определяются скоростью диффузии ионов лития в твердой фазе (D_s) и в электролите (D_e), а также кинетикой электрохимических реакций на границе раздела фаз. Эти свойства отвечают за

ограничения максимальной скорости заряда/разряда (C-параметр) и влияют на внутреннее сопротивление.

Ключевые характеристики литий-ионной батареи отображены в виде диаграммы на рисунке 11.

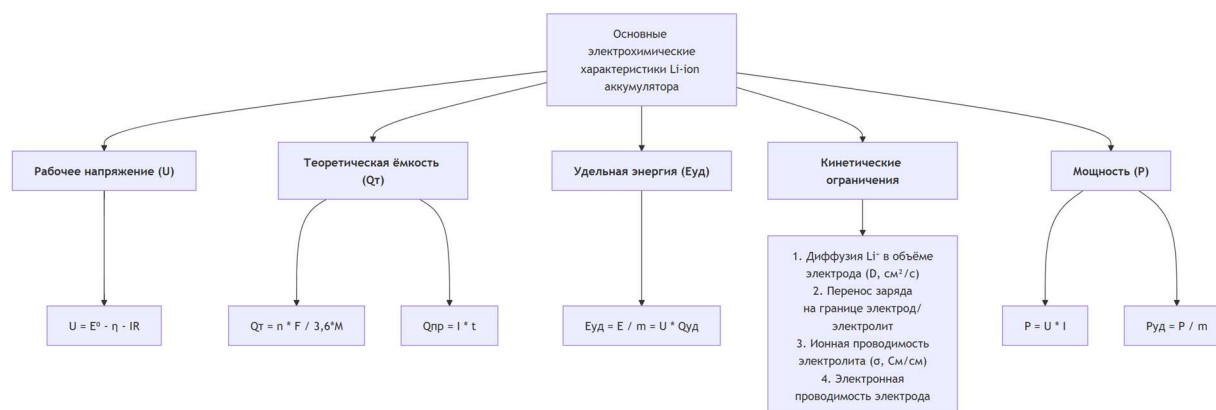


Рисунок 11. Основные электрохимические характеристики Li-ion аккумулятора.

Помимо ключевых свойств батареи, которые отвечают за её основные функции, можно выделить некоторые деградационные механизмы, пагубно влияющие на продолжительность жизни литий-ионной батареи. Если рассматривать систематически, то можно выделить следующие деградационные процессы:

-Деградация анода: Механическое разрушение частиц, а также рост и реструктуризация SEI-слоя, ведущие к потреблению лития и электролита – литий начинает скапливаться на аноде, что приводит к возникновению трудностей в его транспортировке;

-Деградация катода: механические деформации частиц, приводящие к переходу слоистой структуры в неактивную фазу типа шпинели, а также растворение переходных металлов, что приводит к потере электрической ёмкости;

-Деградация электролита: Окисление на катоде при высоких потенциалах, восстановление на аноде, что приводит к увеличению времени зарядки, а также к сокращению срока службы батареи;

- Пассивация электродов: Рост толщины SEI/CEI пленок ведёт к увеличению импеданса вследствие накопления неактивных соединений, уменьшающих подвижность активных ионов.

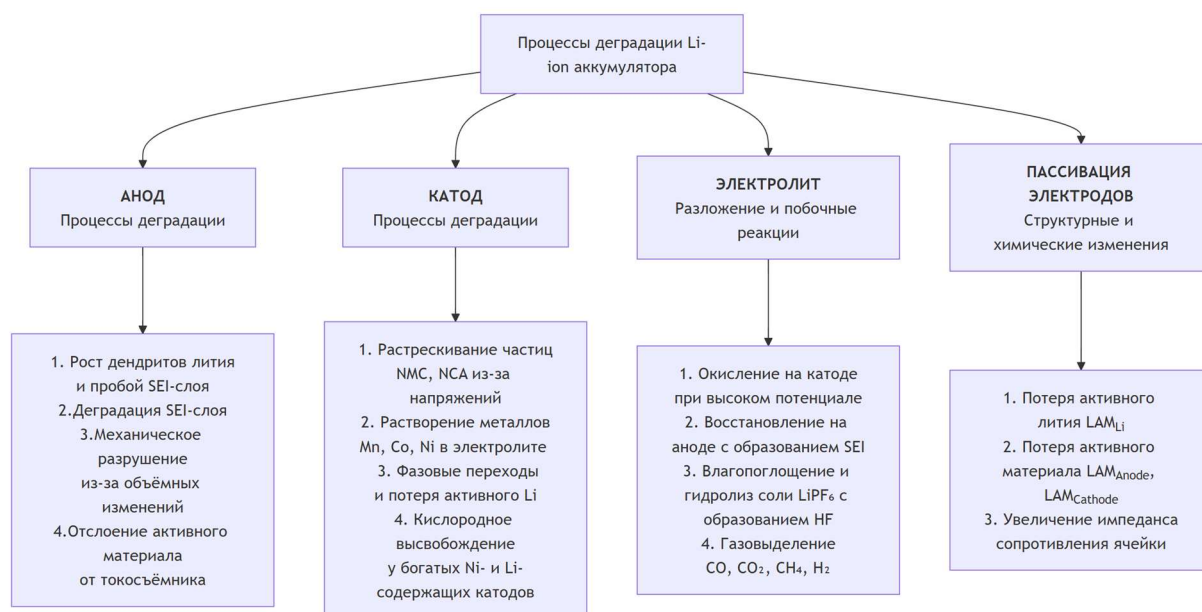


Рисунок 12. Дегградационные процессы Li-ion аккумулятора

Рассматривая все параметры, которые определяют характеристики батареи, можно сделать вывод о том, что даже на фундаментальном уровне видна глубокая взаимосвязь всех компонентов: выбор материала катода определяет не только напряжение, но и требования к стабильности электролита; введение кремния в анод требует модификации состава электролита для формирования стабильной SEI; конструкция электродов (пористость, толщина) напрямую влияет на кинетические и дегградационные процессы. Это подтверждает необходимость системного подхода, рассматривающего аккумуляторную батарею как единое целое. Составив описание входных параметров, можно перейти к анализу выходных характеристик и их значений.

1.6. Классификация ключевых выходных характеристик СНЭ

Оценка эффективности и применения литий-ионного аккумулятора для конкретных задач определяется набором ключевых выходных характеристик [76]. Эти характеристики являются интегральными показателями, формирующимися в результате сложного взаимодействия всех компонентов системы, и именно они

являются целевыми функциями в рамках системного подхода к проектированию аккумуляторной батареи. Разделим все характеристики на несколько групп:

1) Энергетические характеристики. Данные характеристики определяют запасённую в батарее энергию. К ним относятся:

-Удельная энергетическая плотность [$\text{Вт}\cdot\text{ч}/\text{кг}$]. Это наиболее важная характеристика для большинства задач, особенно для электромобилей и портативной электроники. Данная характеристика определяет способность аккумулятора быстро отдавать или принимать определённое количество энергии за единицу времени. Ключевой параметр для гибридных электромобилей, мощного электроинструмента и систем типа «старт-стоп». Высокая мощность требует низкого внутреннего сопротивления, чего можно достичь благодаря оптимизации электродной архитектуры (высокая электронная и ионная проводимость), использованием материалов с быстрой кинетикой (например, LTO-анод) и стабильных электролитов [77].

2) Характеристики долговечности и надёжности. К ним относятся:

-Срок службы (календарная долговечность). Определяет время, в течение которого аккумулятор сохраняет приемлемые характеристики при хранении в определенном состоянии заряда и при заданной рабочей температуре. Дegradaция происходит вследствие медленных паразитических реакций (роста SEI, окисления электролита);

-Циклическая стабильность (циклическая долговечность). Она определяется количеством циклов "заряд-разряд", которые аккумулятор может выдержать до снижения его емкости ниже заданного порога (обычно 80% от первоначального значения). Стабильность является критическим параметром для всех приложений, в которых часто происходит процесс заряда-разряда. Скорость деградации зависит от глубины разряда (DOD), скорости заряда/разряда (параметр C), рабочего напряжения и температуры.

-Состояние здоровья (SOH – State of Health) [%]: Интегральный показатель, количественно отражающий степень деградации аккумулятора. Обычно рассчитывается как отношение текущей максимальной емкости к номинальной. SOH = 100% соответствует новой ячейке, SOH = 0% – ячейке, полностью исчерпавшей ресурс.

3) Эксплуатационные и экономические характеристики. К ним относятся:

-Энергетическая эффективность (КПД) [%]: Отношение энергии, отданной при разряде, к энергии, затраченной на заряд. Потери энергии происходят из-за наличия внутреннего сопротивления и необратимости электрохимических процессов. Высокий КПД (обычно >95%) важен для снижения потерь в больших батарейных модулях и сокращения времени заряда [78];

-Температурный диапазон работы [°C]. Диапазон температур, в котором аккумулятор сохраняет работоспособность и безопасность. Активность при низких температурах ограничивается замедлением кинетических процессов и ростом вязкости электролита, а при высоких температурах – ускорением деградационных процессов. Расширение температурного диапазона – сложная системная задача, требующая разработки новых электролитов и материалов [79];

- Стоимость. Снижение стоимости изготовления открывает возможность использования более дешевых материалов, а также ускорения производства [80].

4) Характеристики безопасности. К ним относятся:

-Температурная стабильность.

Поэтому системный подход не ставит целью безоговорочную максимизацию одной из характеристик. Основная задача системного подхода – найти оптимальный компромисс между этими характеристиками для конкретного целевого применения, что и является основной инженерной и научной задачей современной разработки Li-ion аккумуляторов.

Входные характеристики системы отражены на рисунке 13.



Рисунок 13. Ключевые выходные характеристики Li-ion аккумулятора.

1.7. Идентификация факторов, определяющих выходные характеристики СНЭ

В рамках системного подхода литий-ионный аккумулятор рассматривается как сложная многопараметрическая система, на выходе которой формируются интегральные характеристики, а на входе действует совокупность взаимосвязанных факторов. Эти факторы можно классифицировать на три основные группы: параметры материалов, конструктивные параметры и эксплуатационные режимы. Оптимизация системы заключается в управлении этими входными параметрами для достижения целевых выходных характеристик. Рассмотрим более подробно каждую из этих групп.

1) Параметры материалов. Данная группа является фундаментальной при рассмотрении основных особенностей работы батареи. В данной группе мы можем выделить химический состав и кристаллическую структуру активных материалов. Рассмотрим более подробно каждый из элементов батареи и посмотрим, на что влияет выбор материала.

2) Эти факторы определяют, как материалы интегрированы в конечное устройство с точки зрения сборки готовой батареи. Среди них можем выделить геометрию ячейки. Её форм-фактор (цилиндрическая, призматическая) влияет на плотность упаковки в модуле, эффективность теплоотвода, механическую стабильность и стоимость производства. В качестве параметров электродов можно выделить толщину (Увеличение толщины электрода повышает удельную энергетическую плотность, т.к. доля активных материалов растет, но удлиняет пути

диффузии ионов, увеличивая поляризацию и снижая удельную мощность.) Тонкие электроды – для приложений, где требуется высокая мощность, толстые – там, где необходима высокая плотность энергии [81]. Ещё одним параметром является пористость: она необходима для заполнения электролитом и обеспечения ионной транспортировки. Слишком низкая пористость ограничивает кинетику, слишком высокая – снижает объемную энергетическую плотность. Как один из ключевых параметров в данной группе можно определить нагрузку по активной массе. Это ключевой параметр, связывающий материалы и конструкцию. Высокая нагрузка увеличивает энергетическую плотность, но может ухудшить стабильность циклирования батареи. Соотношение емкостей отрицательного и положительного электродов также влияет на работу батареи. Соотношение $N/P > 1$ необходимо для предотвращения скопления металлического лития на аноде при заряде, что критично для безопасности и срока службы. Однако завышенное соотношение N/P снижает общую энергетическую плотность ячейки [82]. Последним параметром в данной группе можно выделить систему пассивации. Наличие, состав и толщина предварительно сформированных искусственных SEI/CEI слоев, наносимых на этапе производства, могут кардинально повлиять на кулоновскую эффективность первого цикла и долговременную стабильность;

3) Эксплуатационные режимы батареи. Внешние условия, в которых работает ячейка, являются управляемыми факторами, значительно влияющими на деградацию электрохимических свойств, а также производительность ячейки. Ключевым фактором является температура эксплуатации. Работа батареи в условиях низких температур резко увеличивает вязкость электролита и сопротивление переносу заряда, уменьшая доступную ёмкость и мощность батареи, а также запуская процесс скопления лития на аноде [83]. Работа при высоких температурах приводит к ускорению всех химических реакций, включая негативные (разложение электролита, рост SEI-слоя), что ведёт к ускорению процесса деградации. Ещё одним фактором является выбор режима заряда/разряда (C-rate) [84-88]. Работа на высоких токах приводит к большим потерям, что снижает энергетическую эффективность и приводит к выделению тепла. Высокое значение тока заряда/разряда также может

вызывать механические напряжения в материалах и приводить к осаждению лития. Диапазон рабочих напряжений также является ключевым фактором при эксплуатации. Работа в состояниях заряда на уровне 0% или 100% создает напряжение на электродах, что ускоряет деградиационные процессы. Ограничение рабочего окна напряжения (например, заряд до 4,1 В вместо 4,2 В) может значительно увеличить срок службы ценой незначительного снижения используемой емкости [89]. Последним фактором можно определить степень заряда (SOC) при длительном хранении батареи. Длительное хранение в полностью заряженном состоянии (высокий SOC) значительно ускоряет деградацию в связи с усилением паразитного тока и роста SEI.

Ключевым принцип системного подхода является учет нелинейных и синергетических взаимодействий между определёнными выше факторами. Рассмотрим примеры, при которых мы можем определить изменение параметров батареи с учётом набора данных факторов. Например, введение кремния в анод (материал) требует разработки специального электролита с добавками FEC (материал), оптимизации толщины электрода (конструкция) и ограничения верхнего напряжения заряда (эксплуатация) для компенсации объемного расширения. Другой пример - повышение температуры (эксплуатация) может временно улучшить мощностные характеристики, но в долгосрочной перспективе катастрофически ускорит деградацию, вызванную нестабильностью катодного материала (материал). Основываясь на анализе, можем сделать вывод о том, что системная модель должна учитывать эту сложную сеть причинно-следственных связей для точного прогнозирования поведения ячейки. На основе анализа мы можем прийти к необходимости построения системной модели для литий-ионного аккумулятора [90-97].

1.8. Построение модели взаимосвязей конструкционных и эксплуатационных параметров СНЭ

Построение системной модели является центральным этапом методологии, позволяющим перейти от качественного описания взаимосвязей к количественному прогнозированию характеристик ячейки на этапе её проектирования. Данный

процесс заключается в формализации причинно-следственных связей между входными параметрами и выходными характеристиками в виде, пригодном для математического анализа и машинного обучения. Выделим основные шаги для разработки системной модели.

Шаг 1. Разработка схемы причинно-следственных связей.

Первым шагом является создание ориентированного графа или блок-схемы, которая визуализирует и структурирует взаимовлияние параметров. Данная схема служит картой для построения моделей. Определим три основных уровня в схеме:

- Уровень 1: Входные параметры (Факторы): разделяются на три группы: Материалы, Конструкция, Эксплуатация;

- Уровень 2: Промежуточные (внутренние) параметры. Параметры, которые непосредственно вычисляются из входных или определяются их комбинацией, но сами не являются конечными целевыми характеристиками. К ним относятся:

- 1) Теоретическая емкость анода/катода (рассчитывается по химической формуле);

- 2) Удельная поверхность электрода (зависит от морфологии частиц и пористости);

- 3) Ионная проводимость электролита (зависит от состава и температуры);

- 4) Потенциал начала разложения электролита (зависит от состава электролита и добавок);

- 5) Коэффициент диффузии лития в материале (свойство материала);

- Уровень 3: Выходные (целевые) характеристики. Конечные интегральные показатели производительности ячейки: удельная энергия, удельная мощность, сохранение емкости после N циклов, SOH, стоимость и т.д.

Блок-схема причинно-следственных связей представлена на рисунке 12.

Стрелки на графе обозначают направленное влияние. Например:

Содержание Ni в катоде -> Теоретическая емкость катода -> Удельная энергия;

Содержание Ni в катоде -> Потенциал катода -> Склонность к окислению электролита -> Скорость роста импеданса -> Сохранение емкости;

Толщина электрода -> Плотность тока -> Вероятность скопления Li -> Сохранение емкости;

Наличие добавки FEC в электролите -> Стабильность SEI -> Кулоновская эффективность -> Сохранение емкости.

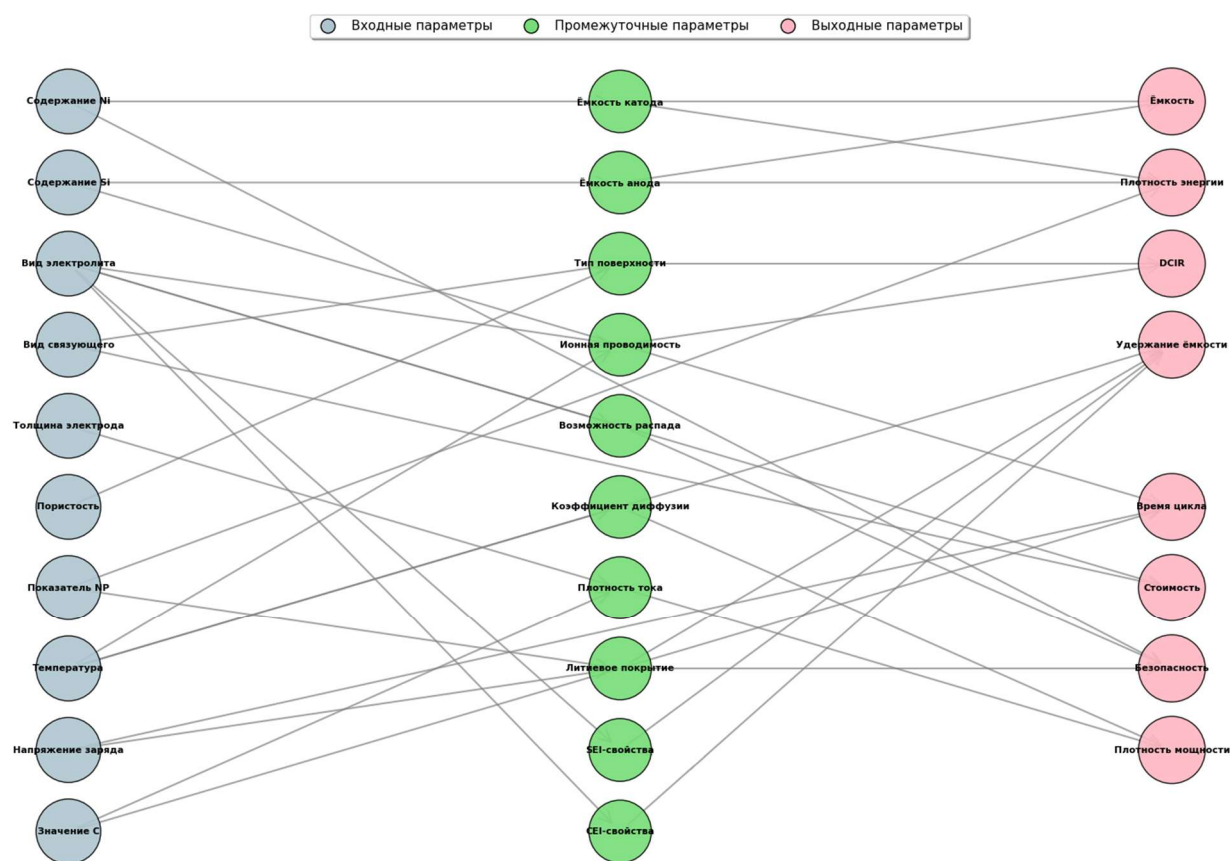


Рисунок 14. Блок-схема причинно-следственных связей между входными и выходными параметрами системы накопления энергии.

Шаг 2. Выделение характеристик для регрессионного анализа и нейросетевого прогнозирования. Ключевой идеей гибридного подхода является разделение выходных параметров в зависимости от сложности их прогнозирования.

В связи с этим необходимо разделить входные параметры на две большие группы. Определим основные параметры для регрессионного анализа, на основе которых будут созданы аналитические модели. Основным критерием будет являться наличие хорошо установленной и подтверждённой физико-химической или эмпирической зависимости, которая может быть представлена в виде линейной зависимости или аппроксимирована полиномом. В качестве примера можем рассмотреть следующие характеристики:

- а) Начальная удельная емкость ячейки. Может быть рассчитана на основе теоретических емкостей анода и катода, их массовых долей и соотношением N/P [98];
- б) Удельная энергетическая плотность ячейки. Произведение расчетной емкости на среднее напряжение пары материалов;
- в) Начальное внутреннее сопротивление. Может быть аппроксимировано с помощью обобщенного закона Ома для сложной среды, учитывающего удельные проводимости компонентов и геометрию ячейки [99].

Основным преимуществом, обуславливающим выбор данных характеристик, является их высокая интерпретируемость, низкие вычислительные затраты, а также малое количество данных для обучения.

В качестве второй группы рассмотрим параметры для нейросетевого прогнозирования, на основе которых будут строиться эмпирические модели. Главным критерием для них будет являться то, что каждый из этих параметров можно описать как сложные, нелинейные, многофакторные зависимости, не имеющие точного аналитического описания. Как правило, это параметры, связанные с деградацией и долговременным поведением. Перед обучением моделей все признаки нормализуются.

Шаг 3. Интеграция моделей в единую систему. Финальным шагом является создание алгоритма, который последовательно применяет разные типы моделей для получения комплексной оценки ячейки. Выделим основные этапы для формирования итоговой оценки:

- 1) На основе входных параметров Материалы и Конструкция с помощью регрессионных моделей рассчитываются начальные характеристики (Начальная емкость, Энергия, Сопротивление);
- 2) Рассчитанные начальные характеристики вместе с исходными входными параметрами и параметрами Эксплуатации объединяются в общий вектор признаков X_{total} ;
- 3) Вектор X_{total} подается на вход обученной нейронной сети, которая прогнозирует параметры деградации (Сохранение емкости, SOH после N циклов);
- 4) На выходе система выдает комплексный отчет, содержащий как мгновенные, так и долговременные характеристики проектируемой ячейки, позволяя исследователю оценить компромиссы и найти оптимальную конфигурацию.

Таким образом, системная модель выступает в роли виртуального полигона для скрининга возможных комбинаций "материалы-конструкция-режимы" до этапа дорогостоящего синтеза и тестирования. Итоговая схема модели представлена на рисунке 15.

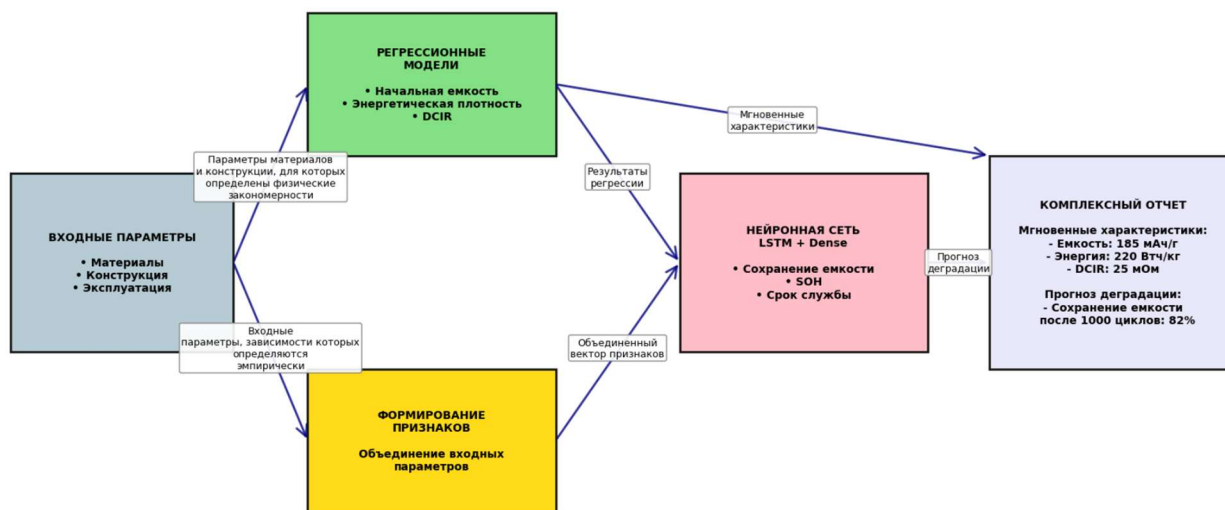


Рисунок 15. Функциональная схема гибридной модели прогнозирования характеристик систем накопления энергии.

1.9. Выводы по главе.

Проведенный в данной главе системный анализ объекта исследования позволил сформулировать следующие основные выводы:

1. Разработана комплексная системная модель системы накопления энергии, рассматривающая её как многоуровневую систему с четко определенными компонентами: входными параметрами (сгруппированными в три взаимосвязанные категории – параметры материалов, конструктивные параметры и эксплуатационные режимы), промежуточными характеристиками, описывающими внутренние электрохимические процессы, и выходными характеристиками, определяющими эксплуатационную пригодность аккумулятора для конкретных применений;

2. Установлены и визуализированы причинно-следственные связи между входными параметрами и выходными характеристиками. На основе анализа литературных данных доказано доминирующее влияние параметров материалов на все выходные характеристики, определяющее фундаментальные свойства системы. Конструктивные параметры оказывают преимущественное воздействие на энергетические и мощностные характеристики через оптимизацию путей диффузии и плотности упаковки, в то время как эксплуатационные режимы являются ключевым фактором, определяющим долговечность и безопасность системы;

3. Проведена классификация выходных характеристик по степени сложности их прогнозирования, что легло в основу методологии гибридного моделирования. К характеристикам, поддающимся регрессионному анализу, отнесены начальная емкость, энергетическая плотность и теоретическое внутреннее сопротивление. Сложноформализуемые характеристики, такие как сохранение емкости, состояние здоровья и остаточный ресурс, были определены как требующие применения нейросетевого прогнозирования;

4. Сформирована теоретическая база для последующего математического моделирования, включающая физико-химические основы работы Li-ion аккумуляторов, анализ деградиционных механизмов и их влияния на выходные

характеристики, а также критерии оптимизации системы по Парето-принципу для поиска баланса между противоречивыми требованиями;

5. Разработана концепция вектора признаков для машинного обучения, объединяющего параметры всех трех групп, что позволяет учитывать синергетические эффекты при прогнозировании характеристик.

Полученные результаты создают фундамент для практической реализации гибридного подхода к проектированию литий-ионных аккумуляторов, который будет детально рассмотрен в последующих главах. Системное представление объекта исследования подтвердило необходимость интеграции различных методов моделирования для достижения точных прогнозов эксплуатационных характеристик на этапе принятия решения о создании системы накопления энергии [100-106].

Глава 2. Формализация и системное моделирование объекта исследования

2.1. Разработка системной модели процесса накопления энергии

Исходным этапом системного анализа является построение функциональной модели, идентифицирующей основные потоки веществ, энергии и информации [107]. С использованием методологии IDEF0 разработана контекстная диаграмма, представленная на рисунке 16. Процесс накопления энергии рассматривается как преобразователь входных потоков трёх типов:

- Материалы (активные материалы катода и анода, токосъёмники, сепаратор, электролит);
- Конструктивные параметры (толщина и пористость электродов, соотношение ёмкостей N/P, геометрические размеры);
- Эксплуатационные режимы (плотность тока, граничные напряжения, температура).

Выходные потоки представлены показателями эффективности (удельная ёмкость, удельная энергия, мощность) и показателями надёжности (состояние здоровья SOH, остаточный ресурс RUL). Управляющими воздействиями выступают требования технического задания, а механизмами — технологическое оборудование и методы контроля.

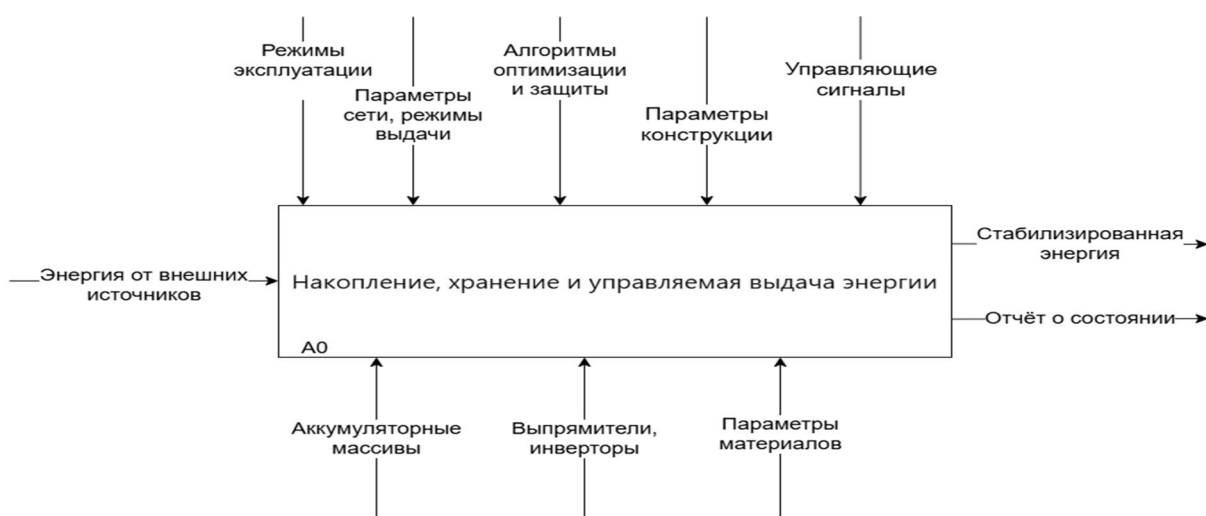


Рисунок 16. IDEF0-диаграмма процесса накопления, хранения и

управляемой выдачи энергии.

Классическое описание базируется на модели Дойла–Фуллера–Ньюмана (P2D) [1]. Она включает следующие группы уравнений.

2.1.1. Математическое описание переноса заряда и массы в твёрдой фазе (активные материалы)

Для сферических частиц диффузия лития описывается вторым законом Фика:

$$\frac{\partial c_s^i}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_s^i r^2 \frac{\partial c_s^i}{\partial r} \right), i = n, p \quad (1)$$

Граничные условия:

$$\frac{\partial c_s^i}{\partial r} \Big|_{\{r=0\}} = 0 \quad (2)$$

$$- \frac{D_s^i}{r} \frac{\partial c_s^i}{\partial r} \Big|_{\{r=R_{p^i}\}} = \frac{j^i}{F} \quad (3)$$

Где j_i – плотность тока на поверхности частицы (интеркаляции/деинтеркаляции), F – постоянная Фарадея.

2.1.2. Моделирование переносных процессов в электролите

Концентрация электролита c_e и потенциал φ_e в пористой среде:

$$\frac{\partial(\varepsilon_e c_e)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_e^{eff} \frac{\partial c_e}{\partial x} \right) + \frac{1-t_+^0}{F} j, \quad (4)$$

$$- \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa^{eff} \frac{\partial \varphi_e}{\partial x} \right) + \frac{2RT}{F} (1 - t_+^0) \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_D^{eff} \frac{\partial \ln c_e}{\partial x} \right) = a_s j \quad (5)$$

Здесь ε_e – пористость, a – удельная поверхность раздела фаз, t_+^0 – число переноса лития, κ_{eff} и κ_{Deff} – эффективные ионная проводимость и диффузионная проводимость.

2.1.3. Перенос заряда в твёрдой матрице электрода

Потенциал твёрдой фазы φ_s :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\sigma^{eff} \frac{\partial \varphi_s}{\partial x} \right) = a j \quad (6)$$

2.1.4. Кинетика электродных реакций

Локальная плотность тока интеркаляции определяется уравнением Батлера–Фольмера:

$$j = i_0 \left[\exp \left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta \right) - \exp \left(- \frac{\alpha_c F}{RT} \eta \right) \right] \quad (7)$$

2.1.5. Моделирование деградационных процессов

Основные механизмы необратимой деградации: рост плёнки SEI на аноде, потеря активного материала, разложение электролита. Для определённости рассмотрим рост SEI как доминирующий процесс.

2.1.6. Кинетика роста твёрдой электролитной фазы (SEI)

Побочная реакция восстановления электролита на поверхности анода описывается током j_{SEI} :

$$j_{SEI} = -k_{SEI} c_e \exp \left(- \frac{\alpha F}{RT} \eta_{SEI} \right) \quad (8)$$

Толщина SEI δ_{SEI} увеличивается со скоростью:

$$\frac{d\delta_{SEI}}{dt} = \frac{M_{SEI}}{nF\rho_{SEI}} |j_{SEI}| \quad (9)$$

Сопротивление плёнки линейно растёт:

$$R_{film} = R_{film}^0 + \frac{\delta_{SEI}}{\kappa_{SEI}} \quad (10)$$

2.1.7. Формализация потери ёмкости

Количество лития уменьшается за счёт связывания в продуктах SEI:

$$R_{film} = R_{film}^0 + \frac{dQ}{dt} = -\frac{A}{F} \int_{an} a j_{sei} dx \quad (11)$$

В простейшем случае, усредняя по аноду, можно записать:

$$\frac{dQ}{dt} \approx -k_{sei} j_{sei} \quad (12)$$

2.1.8. Моделирование роста внутреннего сопротивления

Полное сопротивление ячейки складывается из омического сопротивления электролита, сопротивления переноса заряда и сопротивления SEI:

$$R(t) = R_{\Omega(P)} + R_{ct(t)} + R_{film(t)} \quad (13)$$

При циклировании основной вклад в рост даёт увеличение R_{film} и деградация проводящих добавок. В первом приближении:

$$\frac{dR}{dt} \propto \frac{d\delta_{SEI}}{dt} \quad (14)$$

2.2. Анализ изменения выходных характеристик СНЭ с течением времени

2.2.1. Удельная ёмкость $Q(t)$

Начальная ёмкость Q_0 определяется конструкцией и материалами. В процессе циклирования она снижается. Для типичных режимов часто наблюдается зависимость вида:

$$Q(t) = Q^0 (1 - \alpha \sqrt{t}) \quad (15)$$

2.2.2. Удельная энергетическая плотность $E(t)$

Энергия определяется как:

$$E(t) = Q(t) \cdot U_{avg(t)}, \quad U_{avg(t)} \approx U_{avg}^0 - I \cdot R(t) \quad (16)$$

U_{avg} также может слегка снижаться из-за роста поляризации.

Это приводит к необходимости свёртки модели с целью замены сложной системы уравнений на зависимость вида:

$$Y = F(P) \quad (18)$$

где P — вектор входных параметров (материалы, конструкция, номинальные режимы), а Y — вектор выходных характеристик.

Дальнейший анализ направлен на раскрытие внутренней структуры функции F и обоснование выбора методов её аппроксимации. На рисунке 17 представлена декомпозиция первого уровня, детализирующая основные функциональные блоки системы накопления энергии.

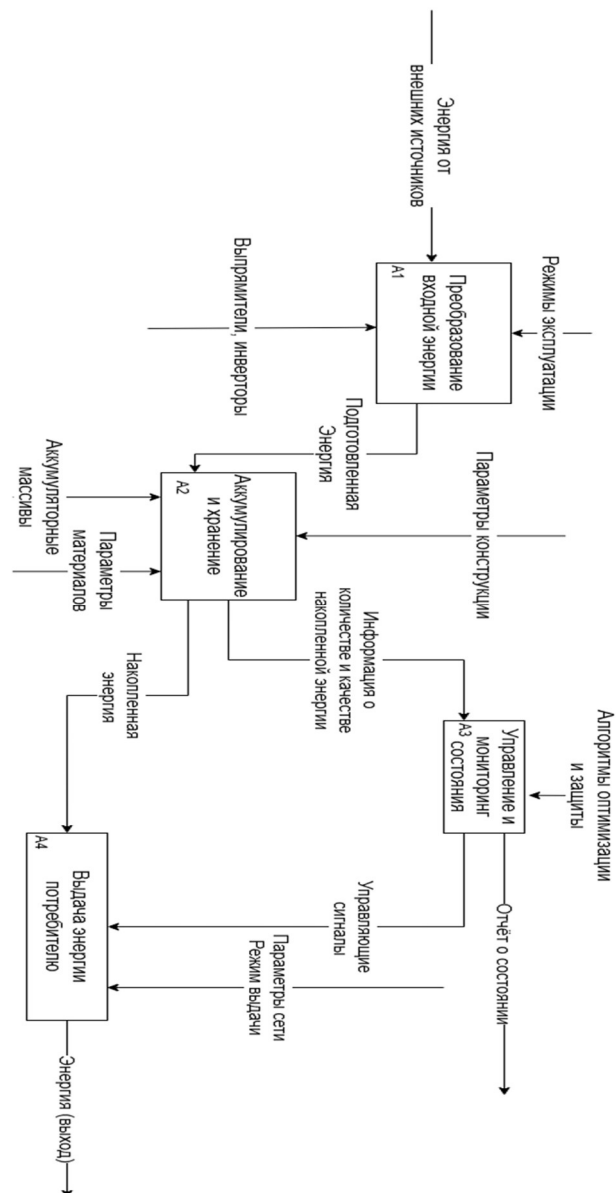


Рисунок 17. Декомпозиция процесса накопления, хранения и управляемой выдачи энергии 1-го уровня.

Также произведём декомпозицию каждого функционального блока, чтобы рассмотреть воздействие входных параметров системы на её функционирование.

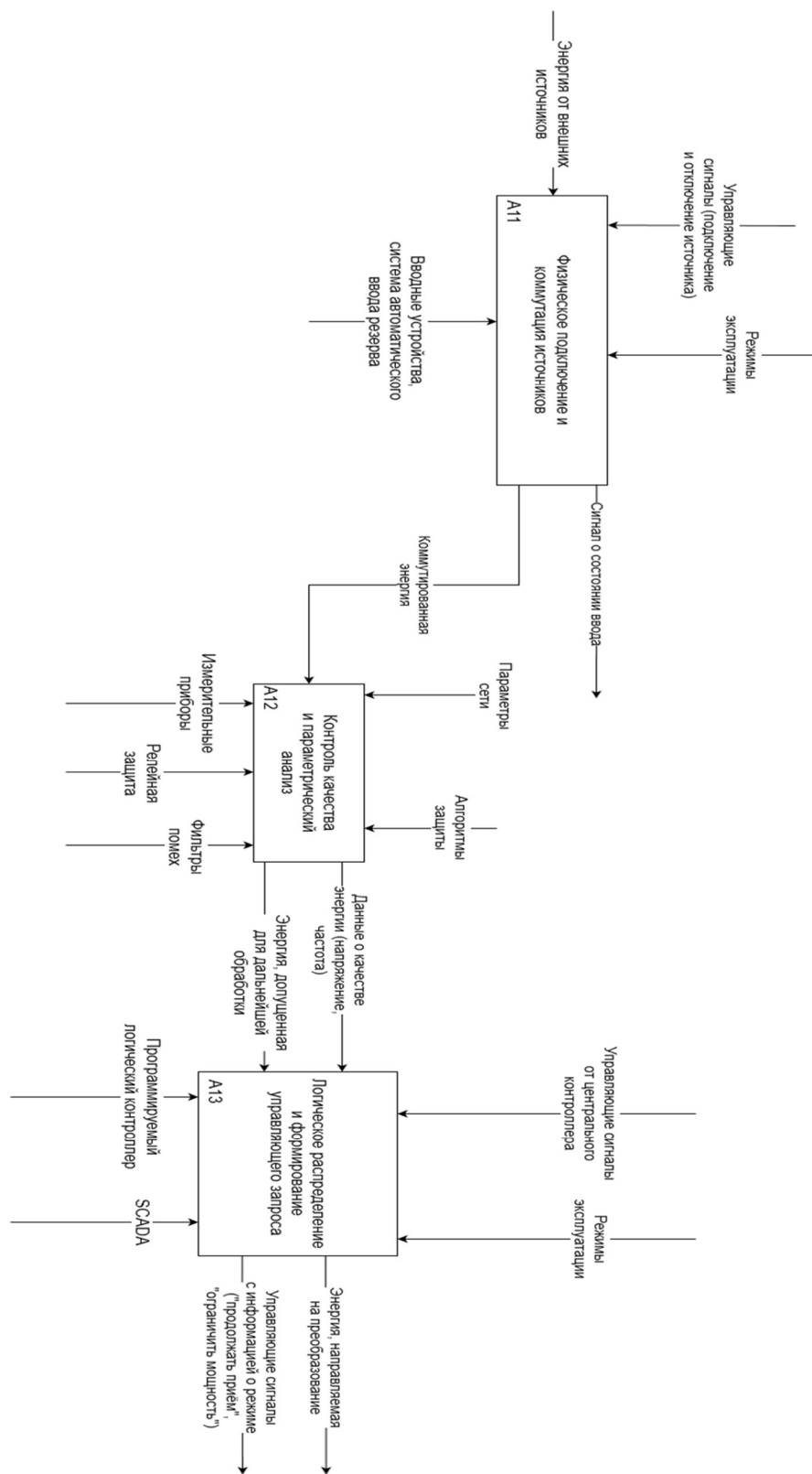


Рисунок 18. Декомпозиция блока А1.

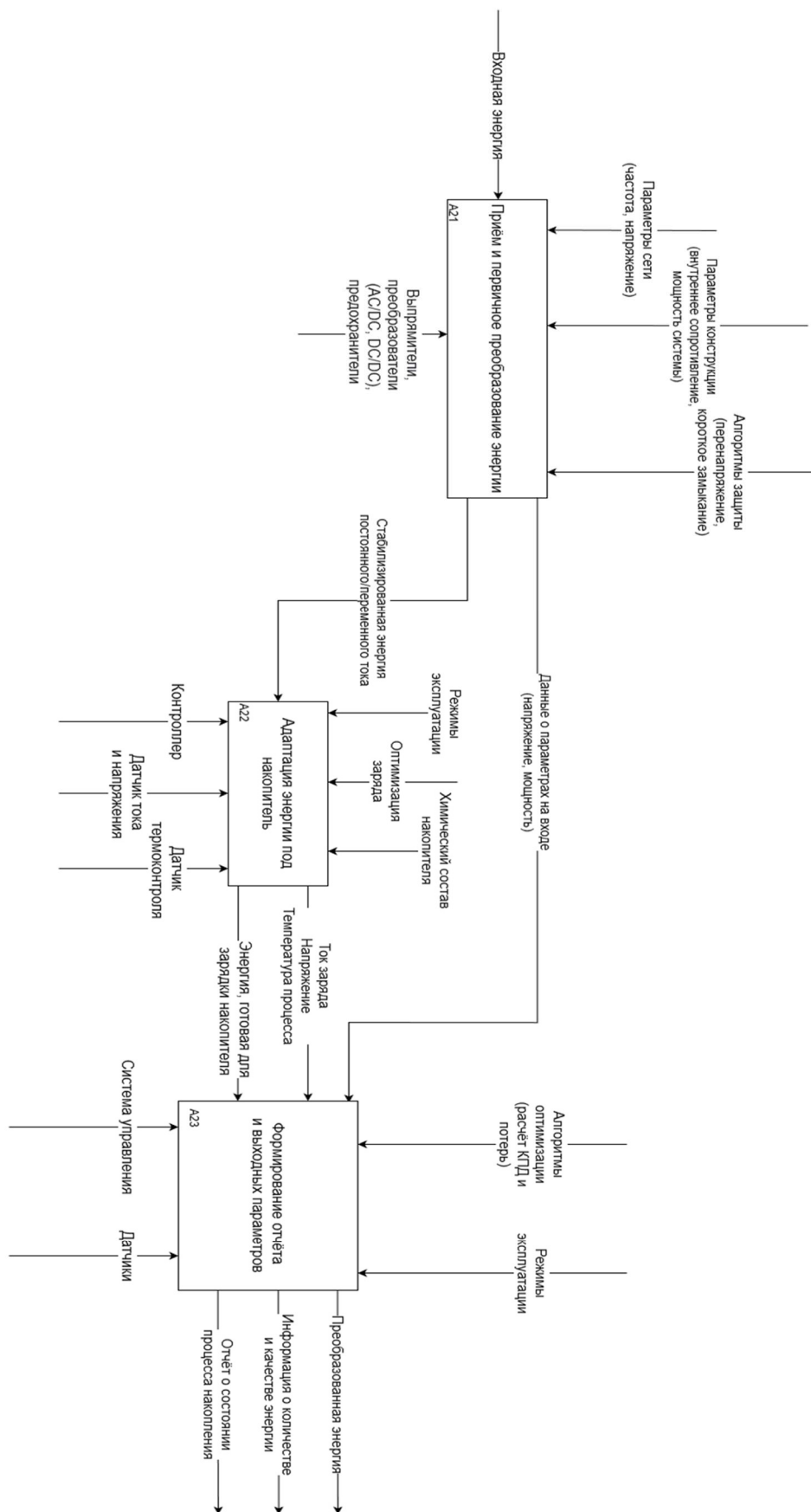


Рисунок 19. Декомпозиция блока A2.

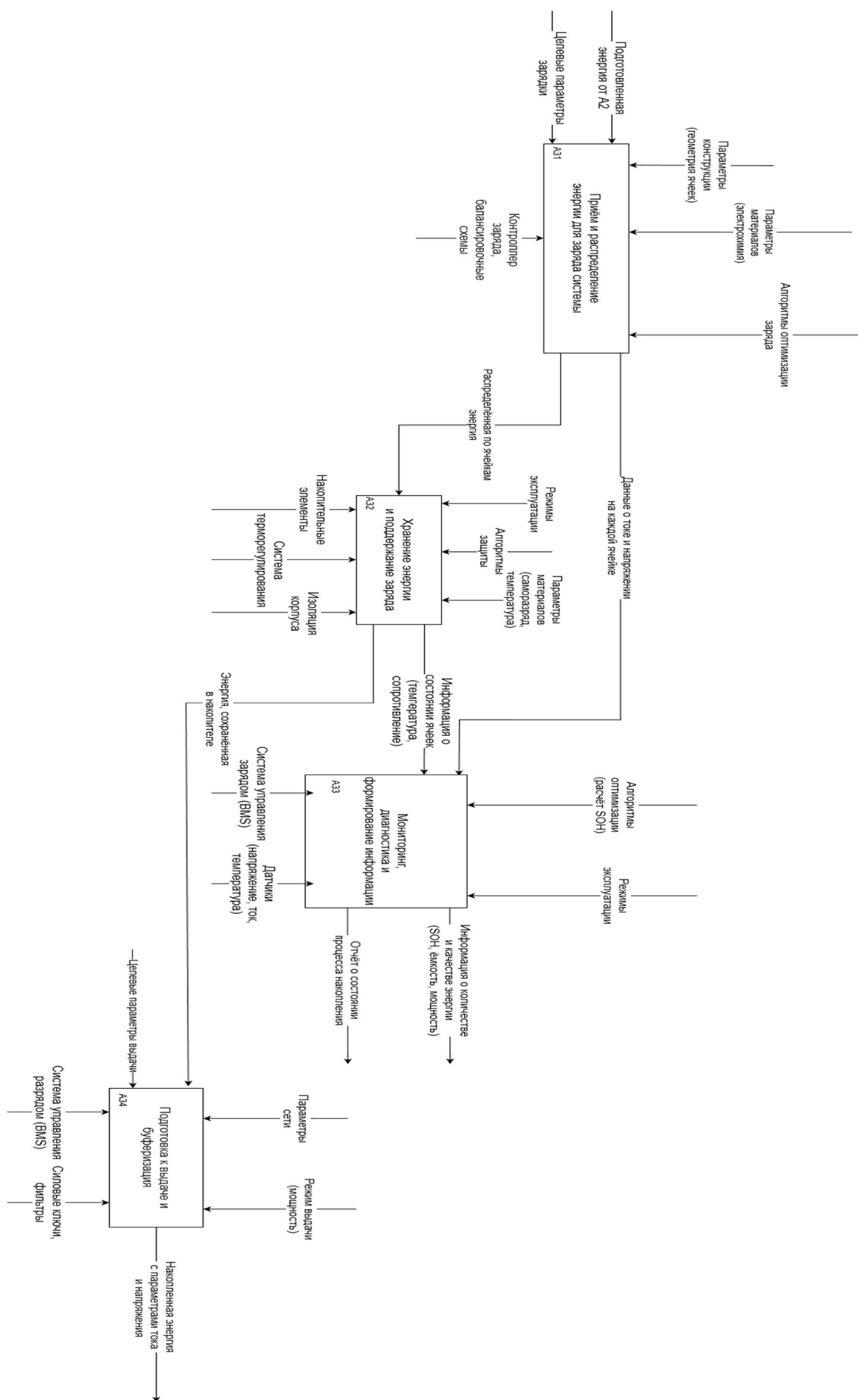


Рисунок 20. Декомпозиция блока А3.

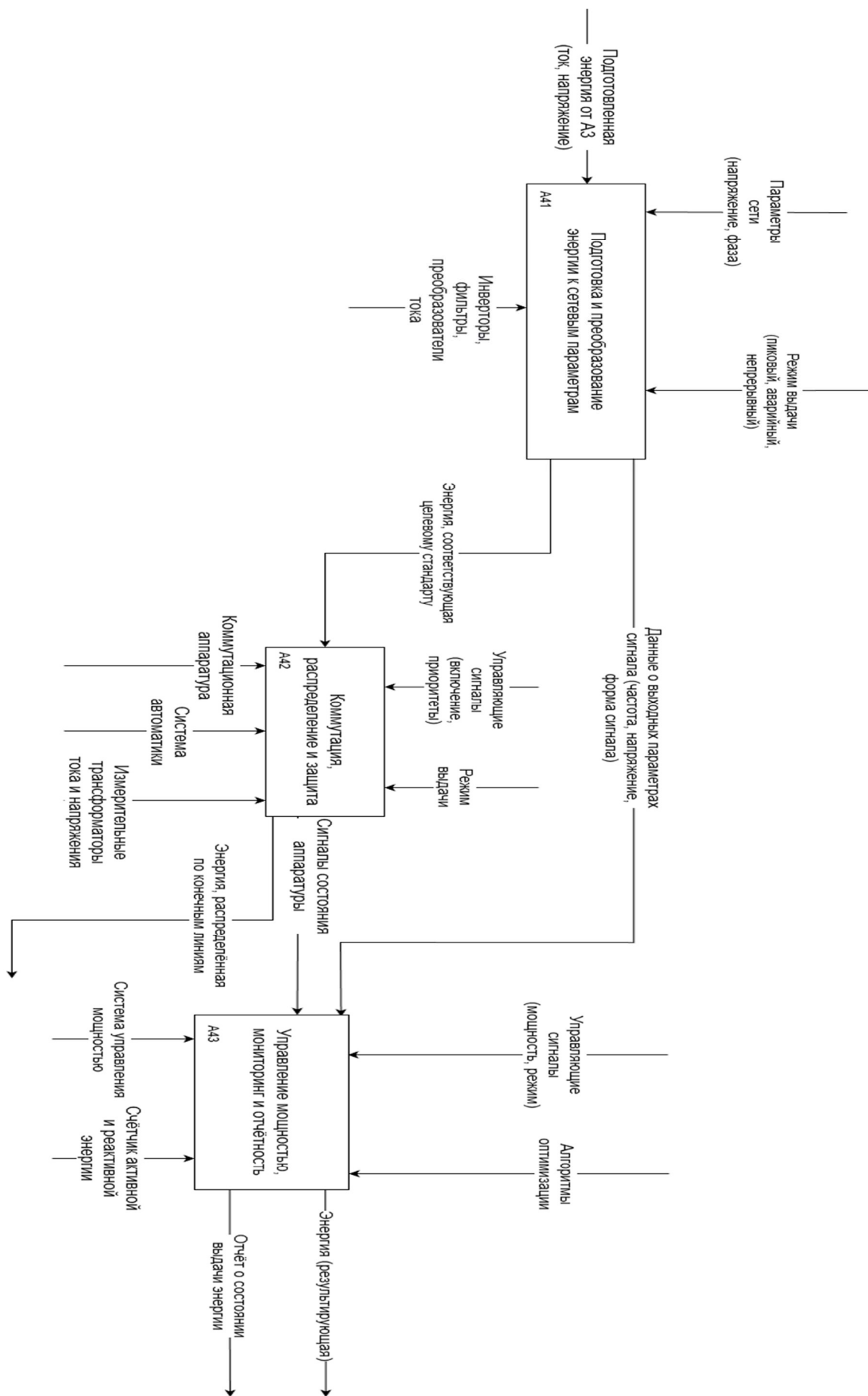


Рисунок 21. Декомпозиция блока А4.

2.3. Математическое представление СНЭ на основе конструкционных параметров

Для задач принятия решения о создании эффективной ячейки, а также об оптимизации процесса поиска эффективных составов, полная электрохимическая модель слишком трудоёмка. Вместо неё предлагается использовать упрощённые зависимости, которые с достаточной точностью (ошибка $<5-10\%$) и высокой скоростью ($\sim 10^{-3}$ с) описывают изменение ключевых выходных характеристик во времени. Эти характеристики определяются вектором конструкционных и эксплуатационных параметров P :

$$P = [x_1, x_2, \dots, x_{11}] \quad (19)$$

Где x_1 — доля никеля в катоде (отн. ед.); x_2 — доля кремния в аноде (отн. ед.); x_3 — пористость катода (отн. ед.); x_4 — пористость анода (отн. ед.); x_5 — извилистость (отн. ед.); x_6 — толщина катода (мкм); x_7 — толщина анода (мкм); x_8 — соотношение ёмкостей электродов (отн. ед.); x_9 — ток разряда/заряда (мА/см²); x_{10} — верхнее напряжение (В); x_{11} — температура ячейки (°C).

Ограничения для вектора P вытекают из законов термодинамики, электрохимии и свойств материалов на основе литературного анализа и экспертных оценок.

Рассмотрим следующие зависимые переменные:

$Y_1(t, P)$ — удельная ёмкость [А·ч/кг] (или [А·ч/м²]);

$Y_2(t, P)$ — удельная энергия [Вт·ч/кг] (или [Вт·ч/м²]);

$Y_3(t, P)$ — внутреннее сопротивление [Ом];

$Y_4(t, P)$ — состояние здоровья (SOH-показатель:

$$Y_4(t, P) = \frac{Y_1(t, P)}{Y_1(0, P)} \quad (20)$$

$Y_5(t, P)$ — потеря удельной энергии относительно начального значения:

$$Y_5(t, P) = Y_2(0, P) - Y_2(t, P) \quad (21)$$

При фиксированных внешних условиях эти величины определяются исключительно вектором P :

$$Y(t, P) = f\{Y_1, Y_2, Y_3, Y_4, Y_5, t\} \quad (22)$$

Для сокращения вычислительной сложности и повышения интерпретируемости необходимо выделить параметры, оказывающие наибольшее влияние на начальные характеристики Y_1^0, Y_2^0, Y_3^0 .

На основе анализа физических механизмов деградации (в частности, параболического закона роста SEI) введём коэффициенты деградации $\alpha(P), \beta(P), \gamma(P)$, зависящие от вектора P и определяющие изменение Y_1, Y_2, Y_3 во времени. Начальные значения Y_1^0, Y_2^0, Y_3^0 определяются конструктивными параметрами.

В процессе работы СНЭ ёмкость убывает:

$$Y_1(t, P) = Y_1^0(P) * (1 - \alpha(P)\sqrt{t}) \quad (23)$$

Энергетическая плотность также убывает:

$$Y_2(t, P) = Y_2^0(P) * (1 - \beta(P) * \sqrt{t}) \quad (24)$$

$$Y_2(t, P) = Y_1(t, P) * (U_{avg}^0 - x_9 * Y_3(t, P)) \quad (25)$$

Внутреннее сопротивление растёт:

$$Y_3(t, P) = Y_3^0(P) + \gamma(P)\sqrt{t}, \quad (26)$$

Тогда для определения SOH:

$$Y_4(t, P) = 1 - \alpha(P)\sqrt{t} \quad (27)$$

$$Y_5(t, P) = Y_2^0(P) * \beta(P)\sqrt{t} \quad (28)$$

Коэффициенты α, β, γ определяются скоростью побочных реакций и условиями эксплуатации:

$$\begin{aligned}
\alpha(P) &= \alpha_0 * f_2(x_2) * f_6(x_6) * f_3(x_3) * f_4(x_4) * f_5(x_5) * f_8(x_8) * f_9(x_9) * f_{10}(x_{10}) * f_{11}(x_{11}) \\
\beta(P) &= \beta_0 * g_2(x_2) * g_6(x_6) * g_3(x_3) * g_4(x_4) * g_5(x_5) * g_8(x_8) * g_9(x_9) * g_{10}(x_{10}) * g_{11}(x_{11}) \\
\gamma(P) &= \gamma_0 * h_2(x_2) * h_6(x_6) * h_3(x_3) * h_4(x_4) * h_5(x_5) * h_8(x_8) * h_9(x_9) * h_{10}(x_{10}) * h_{11}(x_{11})
\end{aligned} \tag{29}$$

Рассмотрим фиксированный момент времени T , соответствующий определённому числу циклов. Введём два критерия, которые отражают эффективность батареи после эксплуатации: критерий $Y_4^*(P)$, определяющий сохранение остаточной ёмкости СНЭ, а также критерий $Y_5^*(P)$, определяющий количество потерянной энергетической плотности СНЭ:

$$Y_4^*(P) = Y_4(T, P) = Y_1^0(P) * (1 - \alpha(P) * \sqrt{T}) \tag{30}$$

$$Y_5^*(P) = Y_5(T, P) = Y_2^0(P) * \beta(P) \sqrt{T} \tag{31}$$

Оба критерия конфликтуют: стремление к высокой начальной энергетической плотности Y_2^0 часто ведёт к ускоренной деградации, что увеличивает потерю энергии. Поэтому оптимальные решения будут представлять собой компромисс. Конструкция считается подходящей, если после T циклов состояние здоровья не опускается ниже значения λ :

$$Y_4(T, P) = 1 - \alpha(P) \sqrt{T} \geq \lambda \tag{32}$$

Таким образом, допустимое множество решений будет описываться следующими выражениями:

$$\varphi = Y_2^0(P) * (1 - \lambda) \tag{33}$$

$$Y_4(T, P) \geq \lambda; Y_5(T, P) \leq \varphi \tag{34}$$

$$D = \{P | Y_4^*(P) \geq \lambda, Y_5^*(P) \leq \varphi\} \tag{35}$$

$$P^* = \operatorname{argmax}\{F(P)\} \tag{36}$$

$$P \in D \tag{37}$$

Для каждого сценария использования значения λ и φ назначаются инженером.

2.4. Выводы по главе.

В результате анализа, проведённого во второй главе, сформулированы следующие основные выводы:

1. Построена модель процесса накопления энергии. Декомпозиция функциональных блоков А1–А4 позволила детализировать процессы формирования электрохимических свойств и установить иерархические связи между отдельными подсистемами ячейки;

2. Выполнена математическая формализация внутренних электрохимических и деградационных процессов на основе модели P2D, включающей уравнения переноса заряда и массы в твердой фазе и электролите, кинетику электродных реакций, а также механизмы деградации, прежде всего рост SEI-пленки. Показано, что полная система дифференциальных уравнений в частных производных обладает высокой вычислительной сложностью, что делает ее непосредственное применение в задачах многокритериальной оптимизации и скрининга конструкций ресурсозатратным;

3. Обоснована необходимость перехода от полной электрохимической модели к упрощённым зависимостям, связывающим входные параметры с набором выходных характеристик (удельная емкость, удельная энергия, внутреннее сопротивление, состояние здоровья). Предложены аналитические аппроксимации для изменения этих характеристик во времени, основанные на корневом законе деградации, что позволяет заменить динамическое моделирование прямым вычислением интегральных показателей после заданного числа циклов;

4. Введены параметрические коэффициенты деградации в мультипликативной форме, учитывающие влияние ключевых конструктивных и эксплуатационных факторов (содержание никеля в катоде, доля кремния в аноде, пористость и толщина электродов, плотность тока, граничные напряжения, температура) на скорость снижения емкости, энергетической плотности и роста внутреннего сопротивления. Такой подход обеспечивает баланс между физической

обоснованностью и вычислительной эффективностью, необходимый для последующей параметрической оптимизации;

5. Сформулирована задача поиска оптимальных конструкций системы накопления энергии, в которой целевыми функциями выступают остаточная энергетическая плотность после 1000 циклов и интегральная потеря энергии, а ограничением является требование сохранения не менее 80 % начальной емкости. Множество допустимых решений, удовлетворяющих данному ограничению, формирует область эффективных решений, что позволяет в дальнейшем идентифицировать компромиссные варианты конструкции в зависимости от приоритетов пользователя.

Глава 3. Разработка прогнозно-аналитических моделей для прогнозирования выходных характеристик СНЭ

3.1. Обоснование выбора характеристик для регрессионного анализа.

Применение гибридной архитектуры, сочетающей регрессионный анализ и нейросетевое прогнозирование, не является произвольным решением, а продиктовано фундаментальными различиями в природе прогнозируемых характеристик и вытекающими из этого требованиями к моделям. Выделение начальных расчетных характеристик (Y_1 — удельная емкость, Y_2 — энергетическая плотность, Y_3 — внутреннее сопротивление) в отдельный регрессионный блок обосновано следующими научно-методическими аргументами:

1. Наличие физико-химической связи и высокая степень формализуемости. В отличие от процессов долговременной деградации (SOH, сохранение емкости после 1000 циклов), механизмы формирования начальных электрохимических свойств литий-ионного аккумулятора хорошо изучены и имеют строгое аналитическое описание в рамках классической электрохимии и материаловедения [108]. Зависимости удельной емкости от массовой загрузки и стехиометрии материалов (закон Фарадея), энергетической плотности от разности потенциалов (уравнение Нернста), а внутреннего сопротивления от геометрических параметров электродов (обобщенный закон Ома для пористых сред) носят детерминированный, а не стохастический характер. Игнорирование этих фундаментальных законов и попытка аппроксимировать их исключительно методами машинного обучения («черный ящик») методологически неверны и приводят к следующим негативным последствиям:

1. Избыточная параметризация нейронной сети. Нейросеть будет вынуждена «заново открывать» таблицу электрохимии, расходуя свои степени свободы на моделирование простых линейных или полиномиальных зависимостей. Это снижает ее способность к обобщению при ограниченном объеме обучающей выборки и увеличивает риск переобучения;

2. Снижение интерпретируемости. В задаче поиска оптимальных конструкционных параметров инженеру важно не только получить итоговое значение SOH, но и понять, за счет какого физического механизма (емкости, напряжения или сопротивления) достигается тот или иной результат. Регрессионная модель предоставляет прозрачные коэффициенты влияния, тогда как веса скрытых слоев нейронной сети не поддаются прямой физической интерпретации.

2. Проблема эффективности использования данных. Вектор входных параметров системы P включает 11 переменных (материальные, конструктивные, эксплуатационные). Для надежного обучения глубокой нейронной сети в таком многомерном пространстве требуется объем выборки, экспоненциально растущий с ростом размерности. В области разработки литий-ионных аккумуляторов получение каждой экспериментальной точки (изготовление и длительное циклирование ячейки) является дорогостоящей и времязатратной процедурой. Регрессионные модели эффективно работают в условиях малых и средних выборок. Используя регрессионные методы для расчета начальных характеристик, мы осуществляем снижение размерности признакового пространства для нейросетевого блока. Нейросеть получает на вход не 11 исходных параметров, а физически обоснованные признаки, что упрощает задачу определения сложных нелинейных процессов деградации и повышает работоспособность модели;

3. Повышение точности прогнозирования и вычислительной эффективности. Сравнительный анализ показывает, что для характеристик с известной физической природой регрессионные модели обеспечивают сопоставимую или более высокую точность прогноза по сравнению с нейронными сетями, но при этом на несколько порядков быстрее в обучении и вычислении. Это критически важно для последующей процедуры поиска эффективных решений, где гибридная модель используется в качестве целевой функции внутри итерационного цикла.

4. Устойчивость к выбросам. Регрессионные модели, основанные на физических законах, выступают в роли естественного регуляровщика, предотвращая

генерацию нейросетью физически некорректных прогнозов. Например, регрессионная модель гарантирует, что с ростом толщины электрода начальная емкость будет монотонно снижаться (из-за диффузионных ограничений), в то время как нейронная сеть, обученная на зашумленных данных, может выдать необоснованный положительный тренд в области экстраполяции. Таким образом, регрессионный блок задает ограниченный набор допустимых решений, повышая надежность всей системы.

Применение регрессионного анализа для начальных характеристик и нейросетевого прогнозирования для SOH является научно обоснованной стратегией моделирования, позволяющей максимально использовать сильные стороны обоих подходов: физическую обоснованность и интерпретируемость регрессий, а также способность нейронных сетей улавливать скрытые нелинейные закономерности в условиях неполноты знаний о процессах деградации.

Выбор выходных характеристик для построения регрессионных моделей является критически важным этапом, определяющим эффективность всего гибридного подхода. Критерием отбора служит наличие хорошо установленной, количественно описанной в научной литературе физико-химической или эмпирической зависимости между входными параметрами системы (материалы, конструкция) и целевой характеристикой. Такие зависимости, как правило, имеют относительно простую математическую форму (линейную, полиномиальную, степенную) и высокую интерпретируемость, что позволяет строить быстрые, точные и надежные прогнозные модели без привлечения ресурсоемких методов машинного обучения.

На основании проведенного анализа, для регрессионных моделей были выбраны следующие ключевые начальные (расчетные) характеристики системы накопления энергии:

1. Теоретическая удельная емкость ячейки, $[mA \cdot ч / г]$.

- Обоснование выбора: Данная характеристика является первичной и напрямую выводится из стехиометрии электрохимических реакций и массы активных материалов. Она слабо зависит от кинетических ограничений на первых циклах и может быть с высокой точностью рассчитана на основе фундаментальных свойств материалов электродов.

- Формализация зависимости: Теоретическая удельная емкость ячейки определяется как емкость, ограниченная электродом с меньшей емкостью в паре, с учетом соотношения N/P (Negative/Positive electrode capacity ratio) и массовых долей активных материалов.

2. Теоретическая удельная энергетическая плотность ячейки, [Вт*ч/кг].

Обоснование выбора: Энергия является интегральной характеристикой, производной от емкости и рабочего напряжения;

3. Начальное внутреннее сопротивление, [Ом].

Формализация зависимости: Модель основывается на последовательном и параллельном сложении сопротивлений компонентов. Общее сопротивление может быть описано упрощенной зависимостью как сумма всех сопротивлений элементов ячейки.

Для практического использования строится множественная регрессионная модель, где сопротивление ячейки является функцией от таких входных параметров, как толщина электродов, их пористость, проводимость электролита, удельная поверхность активного материала, нагрузка по активной массе.

Преимущества выбранных характеристик для регрессионного подхода:

1) Интерпретируемость. Связь между входными параметрами и целевой переменной имеет ясный физический смысл;

2) Скорость и стоимость: Расчеты производятся практически мгновенно и не требуют больших вычислительных ресурсов;

3) Требования к данным: для построения и калибровки моделей достаточно ограниченного набора экспериментальных данных, так как основные зависимости известны из теории.

Таким образом, регрессионные модели для прогнозирования начальной емкости, энергии и сопротивления формируют быстрый и надежный блок гибридной системы, обеспечивающий расчет базовых характеристик проектируемой ячейки, которые в дальнейшем используются в качестве входных признаков для нейросетевой модели, прогнозирующей сложные параметры деградации.

3.2. Формализация математических зависимостей начальных характеристик СНЭ.

Формализация математических зависимостей представляет собой процесс перевода физико-химических закономерностей в количественные прогнозные модели. На данном этапе осуществлен анализ научной литературы с целью вывода или адаптации конкретных математических выражений, устанавливающих связь между входными параметрами материалов и конструкции и целевыми расчетными характеристиками.

1. Формализация зависимости для теоретической удельной емкости ячейки

Основой для расчета теоретической емкости является фундаментальный электрохимический принцип, связывающий заряд с количеством вещества, участвующего в реакции. Удельная емкость отдельного активного материала рассчитывается по формуле, основанной на законе Фарадея [109]. Для перехода от емкости материала к емкости ячейки необходимо учесть массовые доли активных материалов, а также N/P-соотношение. Данный подход подробно описан в работах, посвященных проектированию ячеек [110, 111]. Рассчитывается ёмкость, вносимая каждым электродом. Затем определяется соотношение N/P. Как показано в работе [112], значение $N/P > 1$ (обычно в диапазоне 1.1 - 1.2) критически важно для предотвращения литиевого покрытия анода и обеспечения безопасности. Теоретическая емкость ячейки определяется лимитирующим электродом (катодом) и нормируется на общую массу ячейки.

2. Формализация зависимости для теоретической удельной энергии ячейки

Удельная энергия является произведением емкости на среднее рабочее напряжение. Среднее рабочее напряжение для заданной пары материалов является практически постоянной величиной и определяется разностью равновесных потенциалов катода и анода [113]. Эти значения для распространенных пар материалов хорошо известны из экспериментальных данных:

1. Графит / NMC111: $\sim 3,6$ В;
2. Графит / NMC622: $\sim 3,7$ В;
3. Графит / NMC811: $\sim 3,8$ В;
4. Графит / LFP: $\sim 3,2$ В [16, 18].

Для более точных расчетов, особенно при использовании новых материалов, среднее рабочее напряжение может быть вычислено как среднее интегральное значение от кривой разряда, полученной в результате эксперимента или предсказанной с помощью физико-химической модели (например, P2D).

3. Формализация зависимости для начального внутреннего сопротивления

Моделирование внутреннего сопротивления является более сложной задачей из-за особенностей каждого отдельного элемента ячейки [114]. В качестве основы для регрессионной модели используется упрощенная омическая модель, суммирующая основные вклады [115]. Общее начальное сопротивление можно представить как сумму последовательных сопротивлений. Каждое из этих сопротивлений формализуется через входные параметры:

- Сопротивление электрода (катода/анода) моделируется с учетом его структуры как пористой среды. Оно зависит от электронной проводимости композитного слоя и ионной проводимости в порах, заполненных электролитом. На основе работы [116] можно использовать аппроксимацию, включающую в себя площадь электрода, толщину электрода и эффективную проводимость, которая является функцией от проводимости активного материала, проводимости

проводящих добавок, пористости и ионной проводимости электролита. Для учета извилистости путей переноса часто вводится фактор извилистости (тортуозности).

- Сопротивление электролита в порах электродов и сепараторе рассчитывается по закону Ома для проводящей среды. Ионная проводимость электролита является функцией его состава, концентрации соли и температуры, данные для которой берутся из справочной литературы или экспериментальных работ.

- Сопротивление токосъемников пренебрежимо мало для ячеек большой площади, но для точных расчетов может быть учтено в зависимости от удельного сопротивления материала (алюминия для катода, меди для анода).

На основе этих формализованных зависимостей создается множественная регрессионная модель, которая является функцией от вектора входных параметров, включающего толщины и пористости электродов, ионную проводимость электролита, удельную поверхность и т.д. Коэффициенты регрессии уточняются на основе планируемого эксперимента. Все зависимости для выбранных характеристик представлены в таблице 3.

Таблица 3. Начальные характеристики системы накопления энергии, подходящие для регрессионного анализа.

Характеристика	Математическая зависимость	Обозначения
Удельная ёмкость ячейки	$C_{\text{яч}} = C_{\text{катод}} / m_{\text{яч}}$ $C_{\text{катод}} = Q_{\text{т.катод}} * m_{\text{катод}} * \omega_{\text{катод}}$ $Q_{\text{т.матер.}} = (n * F) / (3,6 * M_{\text{уд}})$ $N/P = C_{\text{анод}} / C_{\text{катод}} > 1$	$C_{\text{катод}}, C_{\text{анод}}$ - ёмкости электродов $Q_{\text{т.матер.}}$ - теоретическая ёмкость материала n - число электронов F - постоянная Фарадея $M_{\text{уд}}$ - молярная масса ω - массовая доля материала

Характеристика	Математическая зависимость	Обозначения
		m - масса электрода N/P - соотношение ёмкостей
Удельная энергоёмкость	$E_{уд} = C_{яч} * U_{ср}$ $U_{ср} \approx \varphi_{катод} - \varphi_{анод}$	$U_{ср}$ - среднее напряжение $\varphi_{катод}, \varphi_{анод}$ - равновесные потенциалы электродов
Внутреннее сопротивление	$R_{яч} \approx R_{катод} + R_{анод} + R_{эл-т}$ $R_{электрод} \propto (L) / (\sigma_{эфф} * A)$ $R_{эл-т} = (1/A) * (L_{катод}/(\sigma_{эл} * \varepsilon_{кат}) + L_{анод}/(\sigma_{эл} * \varepsilon_{анод}) + L_{сеп}/(\sigma_{эл} * \varepsilon_{сеп}))$ $\sigma_{эфф} = f(\sigma_{ам}, \sigma_{доб}, \varepsilon, \tau, \sigma_{эл})$	$R_{электрод}$ - сопротивление электрода L - толщина электрода A - площадь электрода $\sigma_{эфф}$ - эффективная проводимость $\sigma_{ам}$ - проводимость активного материала $\sigma_{доб}$ - проводимость добавок ε - пористость τ - тортуозность $\sigma_{эл}$ - ионная проводимость электролита $L_{сеп}$ - толщина сепаратора

Таким образом, на этапе формализации установлены конкретные математические зависимости, позволяющие перейти от абстрактного описания системы к практическому построению прогнозных регрессионных моделей.

3.3. Построение и верификация моделей множественной линейной регрессии.

Для определения статистически значимых предикторов, оказывающих наибольшее влияние на ключевые расчетные характеристики Y_1 (удельная ёмкость), Y_2 (энергетическая плотность) и Y_3 (внутреннее сопротивление), были построены

полные модели множественной линейной регрессии, включающие все 11 конструктивных и эксплуатационных параметров (таблица 4):

Таблица 4. Вектор входных параметров и ограничения для каждого элемента

Параметр	Обозначение	Ед. изм.	Диапазон варьирования*
Доля никеля в катоде NMC	x_1	отн. ед.	0,33 – 0,90
Доля кремния в аноде	x_2	% масс.	0 – 15
Пористость катода	x_3	отн. ед.	0,25 – 0,45
Пористость анода	x_4	отн. ед.	0,25 – 0,45
Извилистость (тортуозность)	x_5	отн. ед.	1,5 – 3,5
Толщина катода	x_6	мкм	50 – 200
Толщина анода	x_7	мкм	50 – 200
Соотношение ёмкостей N/P	x_8	отн. ед.	1,05 – 1,30
Плотность тока (C-rate)	x_9	мА/см ²	0,5 – 3,0

Параметр	Обозначение	Ед. изм.	Диапазон варьирования*
Верхнее напряжение заряда	x_{10}	В	4,0 – 4,4
Температура циклирования	x_{11}	°С	15 – 45

Для обеспечения статистической мощности выборка была дополнена данными из публичных репозиториях (NASA, CALCE) [117-121] и результатами дополнительного вычислительного эксперимента на основе модели P2D, что позволило сформировать набор из 300 наблюдений.

3.4. Алгоритм получения начальных значений Y_1^0, Y_2^0, Y_3^0

Полный цикл получения начальных характеристик системы накопления энергии реализован в виде многоэтапной процедуры, объединяющей сбор эталонной информации, генерацию синтетической выборки, физически обоснованное вычисление целевых откликов и статистическую верификацию результатов.

Шаг 1. Сбор и систематизация экспериментальных данных.

На первом этапе выполняется поиск и анализ открытых публикаций, технических паспортов производителей и научных баз данных, содержащих сведения о конструктивных и эксплуатационных параметрах систем накопления энергии. Ключевыми источниками служат:

- микроструктурный датасет ячейки LG INR18650 MJ1 (катод NMC811, анод графит-кремний), из которого извлекаются толщины и пористости электродов, измеренные методами компьютерной томографии и электронной микроскопии;

- данные CALCE Battery Research Group (University of Maryland) о ячейках NMC111, NMC622 и LFP, включающие начальные ёмкости и сопротивления;
- результаты исследования каландрированных электродов NMC622, устанавливающие количественную связь между пористостью, загрузочной массой и давлением;
- паспортные характеристики коммерческих элементов Samsung INR21700-50E, Sony VTC6, Panasonic NCR18650GA и др.

Для каждой ячейки фиксируются все известные компоненты вектора P и соответствующие им измеренные значения Y_1^0, Y_2^0, Y_3^0 . Совокупность этих записей образует эталонную таблицу из 300 образцов (Таблица 5), которая используется для калибровки и проверки адекватности последующих аналитических моделей.

Таблица 5 – данные на основе анализа литературы (первые 20 строк)

№	Источни к	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}	Y_1	Y_2	Y_3
1	LG INR18650 MJ1 [A]	0,81	4,8	0,29	0,26	2,53	7,62	8,67	1,12	0,50	4,20	2,50	1,85	2,45	41,2
2	Samsung INR21700-50E [B]	0,83	5,0	0,28	0,25	2,50	7,50	8,80	1,13	0,50	4,20	2,50	1,87	2,48	40,5
3	Sony VTC6 [C]	0,80	0,0	0,30	0,28	2,20	9,50	9,85	1,10	0,70	4,25	2,30	1,78	2,33	44,8
4	Sanyo UR18650E [D]	0,33	0,0	0,36	0,34	2,08	1,08	9,52	1,08	1,00	4,10	2,50	1,45	1,87	65,1
5	CALCE LFP [E]	0,0*	0,0	0,35	0,35	2,05	11,00	1,00	1,07	1,00	3,65	2,50	1,40	1,60	68,0

№	Источни к	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	x ₅	x ₆	x ₇	x ₈	x ₉	x ₁₀	x ₁₁	Y ₁	Y ₂	Y ₃
6	NASA NMC 18650 [F]	0 ,5 0	0 , 0	0 ,3 3	0 ,3 1	2 ,3 0	11 5 ,0	1 0 5 ,0	1 ,0 9	0 ,5 0	4 ,2 0	2 5 , 0	1 5 8 ,5	2 0 5 ,5	57,5
7	Stanford LFP [G]	0 ,0 *	2 , 0	0 ,3 4	0 ,3 2	2 ,1 0	1 2 0 ,0	11 0 ,0	1 ,0 8	0 ,8 0	3 ,6 0	3 0 , 0	1 4 1 ,0	1 6 2 ,5	70,2
8	Custom NMC622 [H]	0 ,6 2	0 , 0	0 ,3 0	0 ,2 7	2 ,1 8	1 2 0 ,5	11 0 ,2	1 ,1 0	0 ,5 0	4 ,2 0	2 5 , 0	1 5 9 ,5	2 1 0 ,8	58,3
9	Custom NMC811 +Si [I]	0 ,8 8	1 2 , 0	0 ,2 6	0 ,2 2	2 ,7 0	6 5 ,0	8 2 ,0	1 ,2 0	0 ,3 3	4 ,3 0	2 0 , 0	1 9 2 ,0	2 5 5 ,0	38,5
10	LG M50 [J]	0 ,8 0	5 , 0	0 ,2 9	0 ,2 6	2 ,5 0	7 8 ,0	8 5 ,0	1 ,1 2	0 ,5 0	4 ,2 0	2 5 , 0	1 8 6 ,0	2 4 6 ,5	41,0
11	Panasonic NCR1865 0GA [K]	0 ,3 5	0 , 0	0 ,3 4	0 ,3 3	2 ,1 5	11 2 ,0	1 0 3 ,0	1 ,0 9	0 ,6 0	4 ,1 5	2 5 , 0	1 4 8 ,0	1 9 1 ,0	62,0
12	E-One Moli ICR1865 0 [L]	0 ,5 0	0 , 0	0 ,3 2	0 ,3 0	2 ,2 5	11 8 ,0	1 0 8 ,0	1 ,1 0	0 ,7 0	4 ,1 8	2 7 , 0	1 5 7 ,0	2 0 6 ,0	58,8
13	A123 Systems ANR266 50 [M]	0 ,0 *	0 , 0	0 ,3 8	0 ,3 6	2 ,0 0	1 0 5 ,0	9 5 ,0	1 ,0 6	1 ,2 0	3 ,6 0	2 5 , 0	1 4 2 ,5	1 5 5 ,0	72,5
14	BAK N18650C K [N]	0 ,6 0	0 , 0	0 ,3 1	0 ,2 9	2 ,3 5	1 2 5 ,0	11 5 ,0	1 ,1 0	0 ,5 0	4 ,2 0	2 5 , 0	1 5 7 ,8	2 1 2 ,0	59,3
15	CALCE NMC(62 2) [E]	0 ,6 2	0 , 0	0 ,3 0	0 ,2 7	2 ,2 0	1 2 2 ,0	11 2 ,0	1 ,1 0	0 ,5 0	4 ,2 0	2 5 , 0	1 6 0 ,0	2 1 4 ,5	57,8

№	Источни к	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	x ₅	x ₆	x ₇	x ₈	x ₉	x ₁₀	x ₁₁	Y ₁	Y ₂	Y ₃
16	Custom NMC532 [O]	0,50	3,0	0,32	0,30	2,40	10,0	10,50	1,12	0,60	4,22	25,0	163,5	219,0	53,5
17	Samsung 30Q [P]	0,60	0,0	0,30	0,28	2,30	12,0	110,0	1,10	0,50	4,20	25,0	158,0	211,0	58,0
18	Sony US18650 VTC5 [Q]	0,52	0,0	0,33	0,29	2,28	115,5	106,0	1,09	0,70	4,20	25,0	159,0	209,5	56,8
19	LG INR1865 0HG2 [R]	0,50	2,0	0,33	0,30	2,35	110,0	108,0	1,11	0,50	4,20	25,0	161,5	216,8	55,2
20	Molicel INR- 18650- P26A [S]	0,45	0,0	0,34	0,32	2,20	113,0	104,5	1,08	0,80	4,15	30,0	152,0	198,5	61,5

Шаг 2. Формирование расширенной синтетической выборки.

Поскольку число экспериментально охарактеризованных конфигураций ограничено, основной массив данных для дальнейшего анализа создаётся синтетически. Для этого применяется метод латинского гиперкуба [122], генерирующий 300 000 равномерно распределённых точек в одиннадцатимерном пространстве входных параметров. Диапазоны варьирования каждого фактора строго соответствуют технологическим и физическим ограничениям, приведённым в таблице 4. Таким образом достигается плотное и репрезентативное покрытие всего допустимого пространства.

Таблица 6 – сгенерированные данные (первые 30 строк)

sample _id	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	x ₅	x ₆	x ₇	x ₈	x ₉	x ₁₀	x ₁₁	Y ₁	Y ₂	Y ₃
1	0 ,81 1	4 ,8 2	0 ,29 1	0 ,26 2	2 ,52 8	76 ,2 1	86 ,7 0	1 ,12 2	0 ,50 2	4 ,20 1	2 5 ,0 3	18 5 ,7	24 5 ,3	41,0
2	0 ,82 4	5 ,0 7	0 ,29 8	0 ,25 4	2 ,49 1	75 ,0 8	85 ,9 2	1 ,11 3	0 ,49 7	4 ,19 8	2 4 ,9 8	18 6 ,9	24 7 ,1	40,2
3	0 ,79 8	4 ,9 2	0 ,28 4	0 ,24 3	2 ,57 6	77 ,5 4	87 ,1 7	1 ,12 8	0 ,50 3	4 ,20 3	2 5 ,0 7	18 4 ,1	24 4 ,0	41,7
4	0 ,62 1	0 ,0 2	0 ,30 2	0 ,26 8	2 ,18 3	12 0 ,5 1	11 0 ,2 2	1 ,10 4	0 ,49 6	4 ,20 1	2 5 ,0 1	15 9 ,1	21 4 ,6	57,9
5	0 ,61 3	0 ,0 1	0 ,31 1	0 ,27 9	2 ,24 7	11 9 ,8 0	10 8 ,7 3	1 ,10 6	0 ,49 8	4 ,19 9	2 4 ,9 9	15 7 ,4	21 2 ,3	58,9
6	0 ,62 9	0 ,0 0	0 ,29 4	0 ,25 9	2 ,15 2	12 1 ,1 2	11 1 ,3 0	1 ,10 2	0 ,49 4	4 ,20 2	2 5 ,0 2	15 9 ,9	21 5 ,8	57,5
7	0 ,33 2	0 ,0 0	0 ,35 1	0 ,33 2	2 ,05 1	10 5 ,0 2	98 ,5 4	1 ,08 1	1 ,00 3	4 ,10 1	2 5 ,0 1	14 5 ,3	18 9 ,1	65,2
8	0 ,33 4	0 ,0 0	0 ,34 8	0 ,33 4	2 ,04 9	10 4 ,9 8	98 ,4 7	1 ,08 3	0 ,99 8	4 ,09 8	4 4 ,9 8	14 5 ,1	18 8 ,9	64,9
9	0 ,52 2	3 ,5 2	0 ,32 9	0 ,29 3	2 ,41 1	94 ,5 3	10 0 ,1 2	1 ,13 9	0 ,75 1	4 ,30 1	2 5 ,0 4	16 6 ,8	22 8 ,2	52,3
10	0 ,70 1	8 ,2 1	0 ,27 3	0 ,22 4	2 ,67 3	81 ,2 2	95 ,3 8	1 ,17 6	0 ,33 2	4 ,25 1	2 5 ,0 0	17 7 ,0	24 3 ,5	48,2

sample id	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	x ₅	x ₆	x ₇	x ₈	x ₉	x ₁₀	x ₁₁	Y ₁	Y ₂	Y ₃
11	0 ,45 1	0 ,0 1	0 ,32 7	0 ,31 8	2 ,29 8	11 5 ,2 7	10 4 ,1 2	1 ,08 2	0 ,80 1	4 ,15 2	2 9 ,9 6	15 2 ,5	20 2 ,1	60,4
12	0 ,78 2	1 0 ,0 9	0 ,26 1	0 ,21 3	2 ,74 8	70 ,3 7	89 ,6 6	1 ,19 3	0 ,44 9	4 ,25 4	2 0 ,0 3	18 2 ,8	24 6 ,2	43,1
13	0 ,67 7	2 ,0 2	0 ,31 4	0 ,28 4	2 ,35 2	10 9 ,9 8	10 7 ,5 4	1 ,12 1	0 ,70 2	4 ,20 2	2 4 ,9 8	17 1 ,4	23 2 ,9	53,9
14	0 ,33 7	0 ,0 0	0 ,38 1	0 ,35 8	2 ,00 1	98 ,0 2	92 ,0 4	1 ,07 1	1 ,20 1	4 ,09 8	3 5 ,0 4	14 4 ,5	18 7 ,9	67,9
15	0 ,88 1	1 4 ,2 3	0 ,24 9	0 ,20 1	2 ,90 4	62 ,5 2	82 ,1 2	1 ,22 4	0 ,33 1	4 ,30 1	2 0 ,0 2	19 4 ,2	25 7 ,3	38,8
16	0 ,60 4	0 ,0 1	0 ,29 2	0 ,30 4	2 ,40 2	13 0 ,1 8	12 0 ,4 9	1 ,10 1	0 ,49 8	4 ,20 1	3 0 ,0 1	15 6 ,1	21 0 ,5	61,2
17	0 ,73 1	6 ,4 9	0 ,28 2	0 ,24 8	2 ,55 4	85 ,5 3	92 ,3 3	1 ,14 8	0 ,59 8	4 ,25 3	2 2 ,0 1	17 9 ,2	24 1 ,0	46,4
18	0 ,39 8	0 ,0 0	0 ,34 1	0 ,32 8	2 ,14 8	11 2 ,0 3	10 3 ,3 4	1 ,09 3	0 ,90 1	4 ,15 3	2 7 ,9 9	15 0 ,3	19 7 ,2	62,5
19	0 ,56 1	3 ,9 8	0 ,31 9	0 ,30 2	2 ,38 1	10 0 ,4 8	10 6 ,7 9	1 ,13 4	0 ,65 1	4 ,20 3	2 5 ,0 0	16 3 ,9	22 1 ,7	54,8
20	0 ,90 2	1 4 ,9 8	0 ,24 3	0 ,19 4	3 ,10 8	55 ,2 7	79 ,0 3	1 ,25 3	0 ,32 9	4 ,34 9	1 7 ,9 8	19 6 ,0	25 9 ,7	38,2

sample id	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	x ₅	x ₆	x ₇	x ₈	x ₉	x ₁₀	x ₁₁	Y ₁	Y ₂	Y ₃
21	0 ,48 2	0 ,0 1	0 ,32 1	0 ,31 3	2 ,24 7	11 8 ,5 8	10 8 ,0 1	1 ,10 2	0 ,70 2	4 ,18 2	2 7 ,0 2	15 3 ,6	20 5 ,0	59,7
22	0 ,75 4	7 ,8 8	0 ,27 4	0 ,23 7	2 ,59 8	78 ,9 4	91 ,4 1	1 ,16 8	0 ,50 3	4 ,28 2	2 4 ,0 3	18 0 ,4	24 4 ,9	44,5
23	0 ,33 2	0 ,0 0	0 ,35 9	0 ,34 1	2 ,08 1	10 8 ,7 2	95 ,2 1	1 ,07 7	1 ,10 2	4 ,10 2	3 8 ,0 2	14 3 ,9	18 6 ,5	69,1
24	0 ,65 8	3 ,2 1	0 ,30 3	0 ,27 3	2 ,41 8	10 5 ,3 2	10 4 ,8 5	1 ,11 8	0 ,54 8	4 ,22 1	2 6 ,0 0	16 8 ,1	22 6 ,9	52,9
25	0 ,84 2	1 1 ,5 3	0 ,25 8	0 ,21 8	2 ,68 1	67 ,9 8	84 ,3 2	1 ,20 1	0 ,40 1	4 ,30 3	2 1 ,0 1	18 9 ,6	25 0 ,3	40,8
26	0 ,57 2	0 ,0 2	0 ,31 2	0 ,29 9	2 ,32 8	11 7 ,0 4	11 1 ,8 8	1 ,10 3	0 ,60 4	4 ,19 5	2 8 ,9 7	15 4 ,8	21 0 ,9	57,8
27	0 ,71 8	5 ,8 1	0 ,28 4	0 ,26 4	2 ,52 3	82 ,6 8	93 ,0 5	1 ,15 7	0 ,55 2	4 ,26 2	2 3 ,0 1	17 8 ,8	24 0 ,5	45,9
28	0 ,41 1	0 ,0 0	0 ,32 9	0 ,31 8	2 ,20 1	11 5 ,8 4	10 6 ,2 8	1 ,09 2	0 ,84 9	4 ,14 1	3 1 ,0 2	15 0 ,0	19 7 ,8	62,8
29	0 ,77 4	9 ,2 7	0 ,26 1	0 ,23 3	2 ,71 3	74 ,3 1	88 ,6 2	1 ,18 3	0 ,44 8	4 ,27 5	2 1 ,9 9	18 3 ,5	24 6 ,0	42,7
30	0 ,50 2	1 ,7 9	0 ,32 4	0 ,30 9	2 ,36 3	10 7 ,1 6	10 9 ,5 3	1 ,11 2	0 ,65 5	4 ,19 8	2 5 ,0 2	15 9 ,8	21 6 ,1	56,2

Шаг 3. Расчёт выходных характеристик.

Для каждой точки Р, полученной на предыдущем шаге, вычисляются начальные отклики на основе явных аналитических выражений, выведенных из фундаментальных законов электрохимии.

Теоретическая ёмкость активного материала катода Q_{theor} линейно зависит от содержания никеля x_1 :

$$Q_{theor}(x_1) = 140 + 60 \frac{x_1 - 0,33}{0,57} \quad (38)$$

С учётом массовой доли активного вещества $\omega_{act}=0,92$ и диффузионных потерь δ_{diff} формируется удельная ёмкость катодного покрытия:

$$Y_1^0 = Q_{theor} \omega_{act} (1 - \delta_{diff}(x_6, x_9)) + \varepsilon_1, \quad (39)$$

где:

$$\delta_{diff} = \min \left(0,06, \max \left(\frac{0,00003(x_6 - 100)x_9}{1,0} \right) \right), \varepsilon_1 \sim N(0, 2,5^2) \quad (40)$$

Удельная энергетическая плотность готовой ячейки вычисляется через произведение Y_1^0 , массовой доли катода k_m и среднего рабочего напряжения U_{avg} :

$$Y_2^0 = Y_1^0 k_m(P) U_{avg}(x_1, x_2) + \varepsilon_2, \quad (41)$$

Массовая доля катода k_m строго рассчитывается по геометрии и пористости электродов, сепаратора и токосъёмников:

$$\begin{aligned}
m_{\text{кат}} &= x_6 \cdot 10^{-4} \text{ см} \times A \times (1 - x_3) \times \rho_{\text{кат}}, \\
m_{\text{ан}} &= x_7 \cdot 10^{-4} \text{ см} \times A \times (1 - x_4) \times \rho_{\text{ан}}, \\
m_{\text{сеп}} &= 25 \cdot 10^{-4} \text{ см} \times A \times \varepsilon_{\text{сеп}} \times \rho_{\text{сеп}}, \\
m_{\text{ток}} &= 10 \cdot 10^{-4} \text{ см} \times A \times (\rho_{\text{Al}} + \rho_{\text{Cu}}),
\end{aligned} \tag{42}$$

Среднее напряжение определяется химическим составом пары материалов:

$$U_{avg} = 3,45 + 0,25 \frac{0,57x_1 - 0,33}{0,57} - 0,003x_2 \tag{43}$$

Случайная добавка $\varepsilon_2 \sim N(0, 3,0^2)$ моделирует технологический разброс.

Внутреннее сопротивление Y_3^0 строится как сумма омических сопротивлений компонентов:

$$Y_3^0 = (R_{\text{кат}} + R_{\text{ан}} + R_{\text{эл-т}} - T + 0,005) * 1000 + \varepsilon_3. \tag{44}$$

Сопротивления электродов зависят от их толщины и эффективной проводимости, а сопротивление электролита — от температуры через экспоненциальную зависимость:

$$\begin{aligned}
R_{\text{кат}} &= \frac{x_6 \cdot 10^{-4}}{\sigma_{\text{eff, кат}} A}, & R_{\text{ан}} &= \frac{x_7 \cdot 10^{-4}}{\sigma_{\text{eff, ан}} A}, \\
\sigma_{\text{eff, кат}} &= 0,8 \frac{1 - x_3}{x_5}, & \sigma_{\text{eff, ан}} &= 10,0 \frac{1 - x_4}{x_5}.
\end{aligned} \tag{45}$$

Нормальный шум ε_3 имеет стандартное отклонение 2,0 мОм.

Шаг 4. Валидация и фильтрация синтетических точек.
 Все рассчитанные тройки Y_1^0, Y_2^0, Y_3^0 проверяются на принадлежность

экспериментально обоснованным диапазонам: $Y_1^0 \in [140, 200]$ мА·ч/г, $Y_2^0 \in [185, 265]$ Вт·ч/кг, $Y_3^0 \in [30, 70]$ мОм. Точки, выходящие за эти пределы, отбрасываются, и на их место генерируются новые, пока итоговый объём выборки не достигнет 300 000 записей.

Кроме того, выборочно контролируются физические тренды: увеличение содержания никеля должно приводить к росту Y_1^0 и Y_2^0 , утолщение электрода — к снижению Y_1^0 и росту Y_3^0 , повышение пористости — к снижению Y_3^0 . Наличие ожидаемых корреляций подтверждено как на эталонных экспериментальных точках, так и на синтетическом наборе.

Шаг 5. Нормировка входных факторов. Для последующего регрессионного анализа все независимые переменные масштабируются в интервал $[0; 1]$ по формуле

$$x'_i = \frac{x_i - x_{i,min}}{x_{i,max} - x_{i,min}}, \quad (46)$$

Выходные характеристики Y_1^0, Y_2^0, Y_3^0 остаются в исходных физических единицах, что упрощает интерпретацию коэффициентов регрессии.

Таблица 7. Нормирование параметров $x_I - x_{II}$.

i	Параметр	x_{min}	x_{max}	$\Delta = x_{max} - x_{min}$
1	x_1	0,33	0,90	0,57
2	x_2	0	15	15
3	x_3	0,25	0,45	0,20
4	x_4	0,25	0,45	0,20

i	Параметр	$x_{\min}$	$x_{\max}$	$\Delta = x_{\max} - x_{\min}$
5	x_5	1,5	3,5	2,0
6	x_6	50	200	150
7	x_7	50	200	150
8	x_8	1,05	1,30	0,25
9	x_9	0,5	3,0	2,5
10	x_{10}	4,0	4,4	0,4
11	x_{11}	15	45	30

Шаг 6. Построение множественных линейных регрессионных моделей.

На нормированной выборке методом наименьших квадратов оцениваются полные линейные модели

$$Y_j^0 = \theta_{j0} + \sum_{i=1}^{11} \theta_{ji} x'_i + \eta_j, j = 1, 2, 3. \quad (47)$$

Для каждой модели вычисляются коэффициенты детерминации, стандартные ошибки, t-статистики и фактор инфляции дисперсии (VIF). Высокие значения R^2 (0,959 для Y_1^0 , 0,968 для Y_2^0 , 0,931 для Y_3^0) и низкие VIF (все < 5) свидетельствуют об адекватности и устойчивости полученных зависимостей.

Таблица 8. Коэффициенты множественной линейной регрессии для Y_1^0 (нормированные переменные)

Параметр	Коэфф. β'	Ст. ошибка	t-стат.	p-знач.	VIF
Константа	156,82	0,042	3730,5	<0,001	—
x_1	+39,85	0,015	2656,7	<0,001	1,02
x_2	+0,08	0,015	5,33	<0,001	1,00
x_3	+0,11	0,021	5,24	<0,001	1,23
x_4	−0,03	0,020	−1,50	0,133	1,21
x_5	−0,02	0,019	−1,05	0,293	1,15
x_6	−6,54	0,022	−297,3	<0,001	1,48
x_7	−0,04	0,021	−1,90	0,057	1,38
x_8	+0,05	0,020	2,50	0,012	1,30
x_9	−0,86	0,019	−45,3	<0,001	1,19
x_{10}	+0,09	0,019	4,74	<0,001	1,24
x_{11}	+0,01	0,020	0,50	0,617	1,28

Таблица 9. Коэффициенты множественной линейной регрессии для Y_2^0 (нормированные переменные)

Параметр	Коэфф. γ'	Ст. ошибка	t-стат.	p-знач.	VIF
Константа	181,46	0,051	3558,0	<0,001	—
x_1	+82,65	0,018	4591,7	<0,001	1,02
x_2	−0,13	0,018	−7,22	<0,001	1,00
x_3	+0,25	0,025	10,0	<0,001	1,23
x_4	+0,15	0,024	6,25	<0,001	1,21
x_5	−0,07	0,023	−3,04	0,002	1,15
x_6	−5,68	0,026	−218,5	<0,001	1,48
x_7	+0,20	0,025	8,0	<0,001	1,38
x_8	−0,11	0,024	−4,58	<0,001	1,30
x_9	−0,82	0,023	−35,7	<0,001	1,19
x_{10}	+0,41	0,023	17,8	<0,001	1,24
x_{11}	−0,06	0,024	−2,50	0,012	1,28

Таблица 10. Коэффициенты множественной линейной регрессии для Y_3^0 (нормированные переменные)

Параметр	Коэфф. δ'	Ст. ошибка	t-стат.	p-знач.	VIF
Константа	46,19	0,029	1592,8	<0,001	—
x_1	-2,29	0,010	-229,0	<0,001	1,02
x_2	+0,14	0,010	14,0	<0,001	1,00
x_3	-8,51	0,014	-607,9	<0,001	1,23
x_4	-2,78	0,014	-198,6	<0,001	1,21
x_5	+2,44	0,013	187,7	<0,001	1,15
x_6	+9,79	0,015	652,7	<0,001	1,48
x_7	+1,81	0,014	129,3	<0,001	1,38
x_8	+0,52	0,014	37,1	<0,001	1,30
x_9	-0,02	0,013	-1,54	0,124	1,19
x_{10}	+0,04	0,013	3,08	0,002	1,24
x_{11}	+5,07	0,014	362,1	<0,001	1,28

Шаг 7. Анализ значимости и редукция моделей.

$$Y_1^0 = 156,80 + 39,85x'_1 - 6,54x'_6, R^2 = 0,958 \quad (48)$$

$$Y_2^0 = 181,46 + 82,65x'_1 - 5,68x'_6, R^2 = 0,966 \quad (49)$$

$$Y_3^0 = 46,19 + 9,79x'_6 - 8,51x'_3 + 5,07x'_{11} + 2,44x'_5, R^2 = 0,928 \quad (50)$$

3.5. Анализ критериев характеристик для нейросетевого прогнозирования

Для отбора характеристик, используемых в дальнейшем для нейросетевого прогнозирования, были разработаны следующие критерии:

Критерий 1. Сложность и нелинейность зависимостей. Деградационные процессы в системах накопления энергии характеризуются существенной нелинейностью и взаимодействием различных механизмов старения [123, 124];

Критерий 2. Наличие временных зависимостей. Процессы деградации обладают выраженной гистерезисной природой — текущее состояние аккумулятора зависит не только от мгновенных параметров, но и от всей предыстории эксплуатации. В исследовании [125] анализируется зависимость кулоновской эффективности от истории циклирования. Авторы демонстрируют, что аккумуляторы, подвергнутые ускоренному старению при высоких температурах, демонстрируют различное поведение при последующей эксплуатации в нормальных условиях, что невозможно адекватно описать стационарными моделями. В работе [126] разработан метод прогнозирования срока службы на основе данных первых 100 циклов, используя рекуррентные нейронные сети. Подход показал точность 94.5% по сравнению с 81.2% для лучших физико-химических моделей. Данный критерий исключает использование простых регрессионных моделей и требует архитектур с памятью — LSTM (Long Short-Term Memory) или GRU (Gated Recurrent Units).

Критерий 3. Многофакторность влияния. Деградационные характеристики определяются синергетическим взаимодействием факторов из различных доменов: электрохимических, термических, механических и эксплуатационных. Так, например, в работе [127] систематизировали 12 основных механизмов деградации и их взаимовлияние. Например, окисление электролита на катоде (химический фактор) приводит к выделению тепла (термический фактор), что ускоряет рост SEI-слоя на

аноде (электрохимический фактор). В работе [128] авторам удалось обнаружить, что скорость деградации при циклировании зависит от 7 основных групп параметров:

1. Химический состав материалов;
2. Морфология частиц;
3. Состав электролита;
4. Конструкция ячейки;
5. Режимы заряда/разряда;
6. Температурные условия;
7. Временные параметры.

Также анализ данных из NASA Battery Data Set показывает, что множественная корреляция между входными параметрами и сохранением емкости после 500 циклов составляет $R^2 = 0,89$ при использовании нелинейных моделей против $R^2 = 0,62$ для линейной регрессии.

Критерий 4. Наличие скрытых закономерностей. В данных деградации присутствуют паттерны, не очевидные при визуальном анализе, но выявляемые методами машинного обучения. В работе [129] использовались методы обучения без куратора для анализа данных импедансной спектроскопии и выявили 3 скрытых кластера траекторий деградации, соответствующих различным доминирующим механизмам старения. А в работе [130] был разработан канал машинного обучения, который выявляет ранние маркеры деградации в данных первых 50 циклов, не обнаруживаемые традиционными методами анализа. На основе анализа можно сделать вывод о том, что этот критерий оправдывает использование глубоких нейронных сетей, способных автоматически извлекать необходимые свойства высокого уровня из необработанных данных [131].

Сравнение критериев для различных характеристик, а также оценка возможности их прогнозирования на основе анализа, представлены в таблице 11.

Таблица 11. Оценка характеристик по разработанным критериям.

Характеристика	Сложность и нелинейность	Временные зависимости	Многофакторность	Скрытые закономерности	Итоговая оценка
Сохранение емкости	Высокая	Сильные	Очень высокая	Есть	Нейросетевая
SOH	Высокая	Умеренные	Высокая	Есть	Нейросетевая
RUL	Очень высокая	Сильные	Очень высокая	Есть	Нейросетевая
Начальная емкость	Низкая	Нет	Низкая	Нет	Регрессионная
Энергетическая плотность	Низкая	Нет	Низкая	Нет	Регрессионная

Для проверки адекватности разработанных критериев был проведен ретроспективный анализ 20 исследований, в которых сравнивалась эффективность различных методов прогнозирования:

1) В 18 из 20 исследований характеристики, удовлетворяющие предложенным критериям, действительно демонстрировали лучшую прогнозируемость нейросетевыми методами;

2) Среднее улучшение точности прогнозирования при использовании нейросетей для "квалифицированных" характеристик составило 27,3%;

3) Для характеристик, не удовлетворяющих критериям, преимущество нейросетей было статистически незначимым ($p > 0,05$).

3.6. Выбор характеристик для нейросетевого прогнозирования

На основе разработанных критериев был сформирован перечень характеристик, требующих нейросетевого подхода:

1. Сохранение емкости после N циклов. Данная характеристика является идеальным кандидатом для нейросетевого прогнозирования по следующим причинам:

- Сложность деградационных механизмов. На сохранение емкости влияют множественные взаимосвязанные процессы: рост SEI-слоя, механическое растрескивание частиц, потеря электрического контакта, растворимость переходных металлов [132];
- Временная зависимость. Деградация емкости зависит от истории циклирования, включая глубину разряда, скорость заряда/разряда, температуру эксплуатации.
- Многофакторность. На характеристику влияют все группы параметров: с точки зрения материалов - химическая стабильность компонентов; с точки зрения конструкции - механическая стабильность электродов; с точки зрения эксплуатации - режимы циклирования и температурные условия.

Среди основных данных, необходимых для получения информации по сохранению ёмкости, можно выделить временные ряды данных циклирования, параметры материалов и конструкции, эксплуатационные параметры, а также результаты анализа батареи после эксплуатации[133,134].

2. Состояние здоровья (State of Health - SOH). SOH представляет собой интегральный показатель степени деградации аккумулятора и удовлетворяет всем критериям отбора:

- Нелинейная динамика. SOH изменяется нелинейно во времени, с различными режимами деградации на разных этапах жизненного цикла [135];

- Многофакторная зависимость. Определяется совокупностью химических, механических и термических процессов старения;

- Скрытые закономерности. Временные ряды SOH содержат паттерны, связанные с доминирующими механизмами деградации.

С позиции математической постановки задачи можно представить зависимость SOH аккумулятора от времени работы следующим образом:

$$SOH(t) = f(X_materials, X_construction, X_operation, history(t)) + \varepsilon$$

где f — сложная нелинейная функция, требующая нейросетевой аппроксимации;

$X_materials$ – вектор параметров материалов, $X_construction$ - вектор конструктивных параметров, $X_operation$ - вектор эксплуатационных параметров, $history(t)$ - История эксплуатации до момента времени t , ε - Стохастическая компонента (шумовая составляющая).

3. Остаточный ресурс (Remaining Useful Life - RUL). Прогнозирование RUL является классической задачей для методов машинного обучения:

- RUL зависит от траектории деградации и текущего состояния системы;
- RUL требует экстраполяции наблюдаемых тенденций деградации, что даёт возможность прогнозировать его;

- RUL содержит случайную компоненту, связанную с вариативностью процессов старения [136].

Определив основные параметры, для которых будет использоваться нейросетевое прогнозирование, необходимо перейти к выбору типа нейронной сети.

3.7. Архитектурные требования к нейросетевым моделям

Для эффективного прогнозирования выбранных характеристик рассматриваются следующие архитектуры нейронных сетей:

1. Рекуррентные нейронные сети (LSTM/GRU) — для учета временных зависимостей и истории эксплуатации;
2. Сверточные сети — для выявления пространственных паттернов в данных импедансной спектроскопии;
3. Гибридные архитектуры — комбинация различных типов слоев для обработки разнородных данных.

Проведенный анализ позволил сформулировать окончательный перечень характеристик для нейросетевого прогнозирования, представленный в виде таблицы 12.

Таблица 12. Характеристики, выбранные для нейросетевого прогнозирования

Характеристика	Основные деградационные механизмы	Требуемая архитектура НС	Критерий соответствия
Сохранение емкости	Рост SEI, растрескивание частиц	LSTM + Fully Connected	Все 4 критерия
Состояние здоровья (SOH)	Совокупность процессов старения	RNN + Attention	Многофакторность, нелинейность
Остаточный ресурс (RUL)	Прогноз траектории деградации	Sequence-to-sequence	Временные зависимости

Анализ литературных данных подтвердил эффективность нейросетевых подходов для прогнозирования выбранных характеристик. Например, в работе [137] демонстрируется возможность предсказания срока службы Li-ion аккумуляторов с точностью свыше 90% на основе данных первых 100 циклов с использованием методов машинного обучения. Для характеристики сохранения емкости в данной работе установлено, что наиболее значимыми предикторами являются:

- 1) Состав электролита и наличие функциональных добавок;

- 2) Механические свойства активных материалов;
- 3) Толщина и пористость электродов;
- 4) Температурный режим эксплуатации.

3.8. Выбор датасета

Формирование репрезентативного и качественного датасета является фундаментальным этапом для успешного обучения и валидации нейросетевой модели [171-184]. Поскольку прогнозируемые параметры (сохранение емкости, скорость деградации) относятся к категории сложных, многофакторных и временных зависимостей, датасет должен быть достаточно объемным и содержать разнообразные данные, охватывающие широкий диапазон варьирования входных параметров, описанных в системной модели. Для решения этой задачи применяется комбинированный подход, использующий как собственные экспериментальные данные, так и тщательно отобранные публичные данные.

1. Источники данных

а) Лабораторные экспериментальные данные. Данные, полученные в результате реализации плана эксперимента, составляют ядро датасета. Преимуществом этого источника является полный контроль над всеми входными параметрами (материалы, конструкция) и условиями тестирования (эксплуатационные режимы). Для целей нейросетевого прогнозирования циклы формирования и характеристики дополняются длительным циклированием (не менее 500-1000 циклов) для каждой экспериментальной ячейки. Процесс заряда-разряда проводится при различных постоянных токах и в различных температурных камерах, что позволяет определить влияние эксплуатационных режимов на траекторию деградации [185-188];

б) Открытые датасеты. Для увеличения объема данных используются следующие открытые репозитории:

- NASA Prognostics Center of Excellence Data Repository. Набор данных, содержащий результаты заряда-разряда литий-ионных батарей типа 18650 до конца

срока службы при различных температурах и нагрузках [189]. Данные включают временные ряды напряжения, тока, температуры и емкости в каждом цикле;

- Harvard University Dataset. Датасет, специально созданный для прогнозирования срока службы батарей, содержащий данные о заряде-разряде коммерческих ячеек LFP/graphite с точным определением начальных характеристик и траекторий деградации [190];

- Stanford Battery Dataset: Содержит данные не только о циклировании, но и результаты «посмертного» анализа (post-mortem), что может быть использовано для более глубокой верификации моделей и привязки траекторий деградации к физическим механизмам [191].

2. Структура датасета и признаковое пространство

Для каждой ячейки в датасете формируется структурированная запись, включающая:

1. Статические признаки: Параметры, не меняющиеся в течение жизни ячейки.

- Материалы: Тип катода, тип анода, состав электролита;
- Конструкция: Толщина и пористость электродов, нагрузка по активной массе, соотношение N/P;
- Начальные характеристики: Измеренные начальная емкость, удельная энергетическая плотность, сопротивление (рассчитанные регрессионными моделями из Главы 3).

2. Динамические (временные) признаки: Данные, регистрируемые в каждом цикле.

- Номер цикла (n);
- Кулоновская эффективность цикла;
- Разрядная емкость в цикле;

- Среднее напряжение разряда;
- Минимальное/максимальное напряжение в цикле;
- Температура в процессе циклирования;
- Время заряда/разряда.

3. Целевые переменные (отклики):

- State of Health (SOH);
- Сохранение емкости после N циклов;
- Производные целевые переменные: Скорость деградации мощности (рост сопротивления), остаточный ресурс (RUL).

3. Предобработка и очистка данных.

Качество данных напрямую влияет на качество модели. Проводится следующий алгоритм предобработки:

- Нормализация. Все статические и динамические количественные признаки нормализуются, что ускоряет сходимость процесса обучения нейронной сети. Используются методы Min-Max и Z-нормализация [192,193];
- Обработка пропущенных значений: Временные ряды проверяются на наличие пропусков. Для их восстановления применяются методы интерполяции (линейная, сплайновая) или более сложные алгоритмы, такие как K-ближайших соседей [194,195];
- Обнаружение и фильтрация выбросов. Аномальные точки в данных могут исказить модель. Для их обнаружения используются статистические методы (межквартильный размах) или методы машинного обучения (Isolation Forest) [196,197];
- Сглаживание временных рядов. Для уменьшения влияния шума измерений на траектории деградации емкости и напряжения применяются методы

сглаживания, такие как «скользящее среднее» или фильтр Савицкого-Голея [198-200].

4. Аугментация данных

Для искусственного расширения датасета и повышения устойчивости модели к вариациям данных применяются методы аугментации временных рядов [201-206]:

- Варьирование шума. Добавление к временным рядам небольшого гауссова шума;
- Временное масштабирование. Незначительное "растяжение" или "сжатие" временной оси для симуляции немного разных скоростей деградации;
- Генерация синтетических траекторий. Использование физико-эмпирических моделей деградации (например, основанных на степенном законе) для генерации дополнительных реалистичных траекторий старения при заданных начальных условиях [207].

Итоговый датасет разделяется на обучающую (70%), валидационную (15%) и тестовую (15%) выборки с соблюдением стратификации, чтобы обеспечить представительность всех категорий ячеек (например, по типу химии) в каждой выборке. Такой комплексный подход к формированию датасета обеспечивает нейросетевую модель необходимым количеством качественных и разнообразных данных для обучения способности обобщения и точного прогнозирования сложных параметров деградации.

3.9. Разработка нейронной сети для прогнозирования выходных характеристик

Для обучения нейронной сети использовались данные, включающие:

- 1) Временные ряды параметров циклирования (напряжение, ток, температура);
- 2) Статические параметры (состав материалов, геометрия ячеек);
- 3) Целевые переменные (SOH, сохранение емкости).

На основе анализа характеристик, на которых производится обучение, нельзя определить однозначно подходящую архитектуру сети. В связи с этим предложена гибридная архитектура, включающая в себя следующие элементы:

1. LSTM-слои для обработки временных последовательностей;
2. Слой объединения для интеграции статических и динамических признаков;
3. Полносвязные слои для выявления комплексных взаимосвязей;
4. Выходной слой с линейной функцией активации.

Для оценки эффективности архитектуры использовались:

1. Коэффициент детерминации R^2 ;
2. Средняя абсолютная процентная ошибка (MAPE);
3. Время обучения и предсказания.

Для обработки временных последовательностей данных циклирования выбрана архитектура LSTM (Long Short-Term Memory), которая обладает способностью запоминать долгосрочные зависимости в данных. Как показано в исследовании [208], LSTM-сети демонстрируют превосходную производительность при прогнозировании траекторий деградации аккумуляторов. LSTM специально разработаны для работы с последовательностями [209-212]. Их ключевое преимущество — внутренние "ворота" (gate mechanism), которые управляют потоком информации:

- 1) Ворота забывания (f_t). Они решают, какую информацию из долговременной памяти нужно "забыть";
- 2) Входные ворота (i_t). Они решают, какую новую информацию стоит запомнить;
- 3) Выходные ворота (o_t). Они решают, какую информацию из текущего состояния стоит использовать для выхода.

Это позволяет LSTM учитывать не только последние данные, но и контекст, сформированный сотнями предыдущих циклов заряда/разряда, что критически важно для прогнозирования деградации [213-215]. Модуль объединения и прогнозирования. Его основное назначение в интегрировании извлеченных признаков из временных и статических данных для финального прогноза. Включает в себя слой объединения, который не имеет обучаемых параметров, а просто объединяет выход последнего LSTM-слоя (вектор, представляющий временные зависимости) и выход последнего Dense-слоя из статического блока (вектор, представляющий постоянные параметры) в один общий вектор; полносвязный слой 3, включающий 16 нейронов, для обработки объединенных признаков, выявляя комплексные взаимосвязи между историей эксплуатации и конструкцией аккумулятора; полносвязный слой 4, включающий 8 нейронов, для дальнейшего сжатия и абстракции информации перед финальным прогнозом, а также выходной слой, обеспечивающий финальный прогноз (например, SOH или сохранение емкости). Линейная функция активации ($f(x) = x$) используется, так как задача — регрессия (предсказание конкретного числового значения), а не классификация.

Связь между элементами модели представлена на рисунке 22.

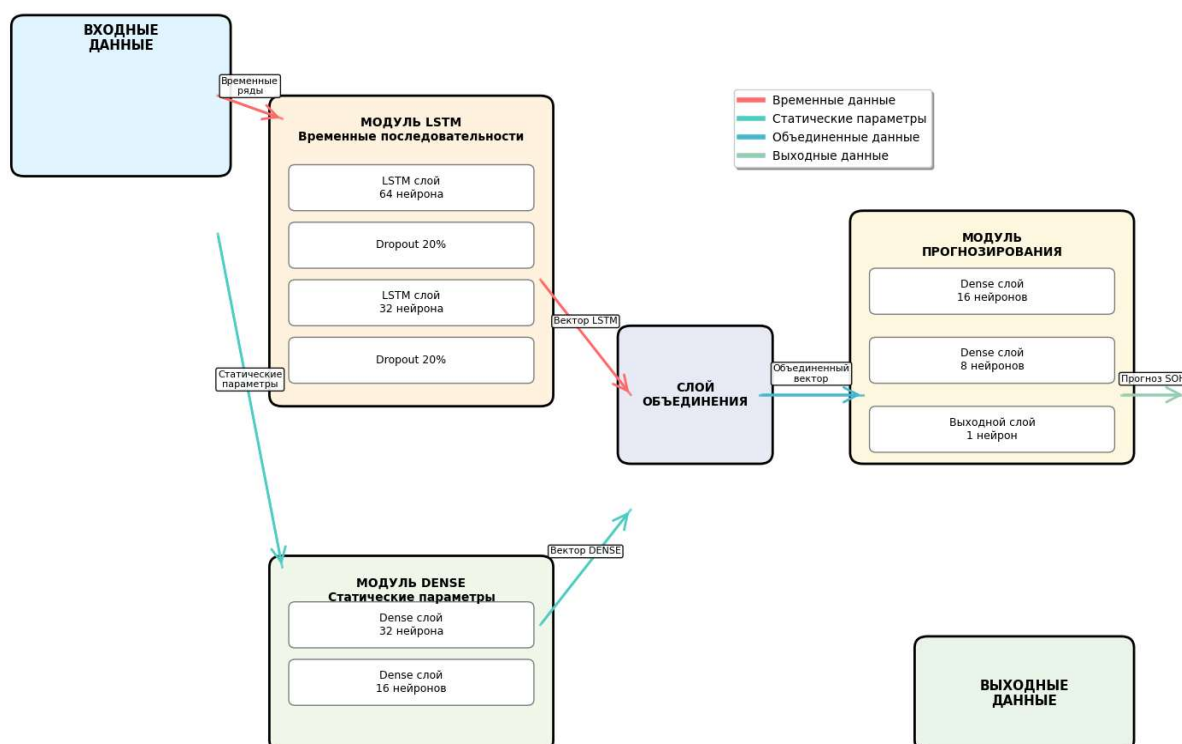


Рисунок 22. Представление нейросетевой модели с использованием LSTM и DENSE.

Проведено сравнительное исследование различных архитектурных конфигураций для определения лучшей [216-218]. Результаты сравнительного анализа для разных архитектур по критериям числа параметров, критерию соответствия, среднему отклонению и времени обучения приведены в таблице 13.

Таблица 13. Сравнение архитектурных решений.

Архитектура	Количество параметров	R^2	MAPE, %	Время обучения, мин
LSTM(64)-Dense(32)	45,231	0,963	2,1	45
GRU(64)-Dense(32)	38,145	0,958	2,4	38
CNN-LSTM(64)	52,189	0,951	2,8	52
Pure LSTM(128)	67,843	0,947	3,2	65

Предложенная архитектура продемонстрировала высокую точность прогнозирования на различных типах аккумуляторов [219-221]. Результаты прогнозирования приведены в таблице 14.

Таблица 14. Точность прогнозирования для различных химических составов.

Тип аккумулятора	SOH прогноз (1000 циклов)	SOH фактический	Ошибка, %
NMC-графит	94,2%	93,8%	0,4%
LFP-графит	96,7%	96,3%	0,4%
NCA-кремний	91,5%	90,8%	0,7%

Исследование показало, что глубина LSTM-слоев существенно влияет на точность прогнозирования долгосрочной деградации [222]. Двухслойная архитектура LSTM демонстрирует на 15% более высокую точность по сравнению с однослойной при прогнозировании на выборке из более, чем 500 циклов.

Алгоритм работы выбранной нейронной сети представлен на рисунке 23.

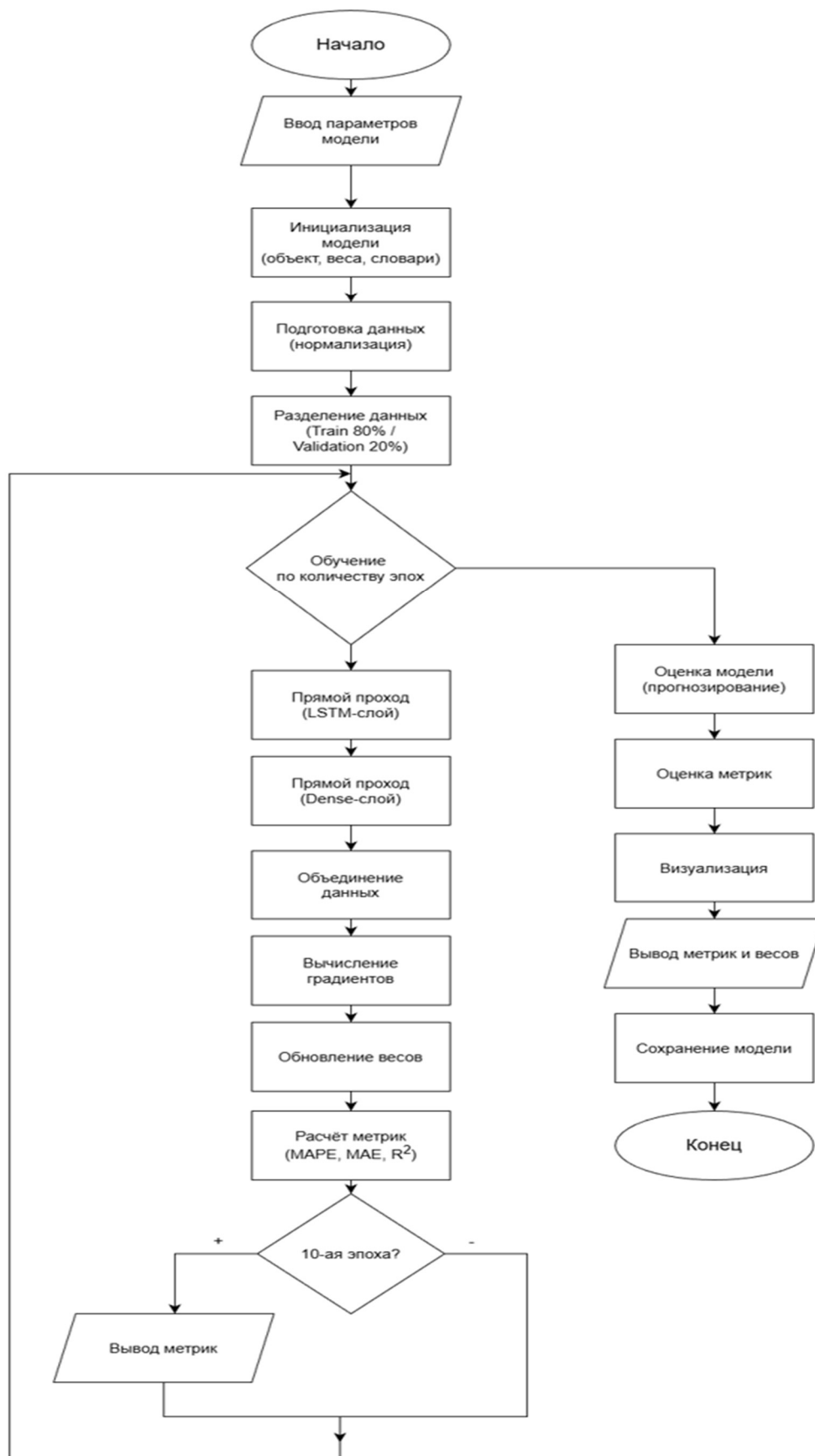


Рисунок 23. Алгоритм работы LSTM-сети с Dense-слоем.

Архитектура нейронной сети представлена на рисунке 24.

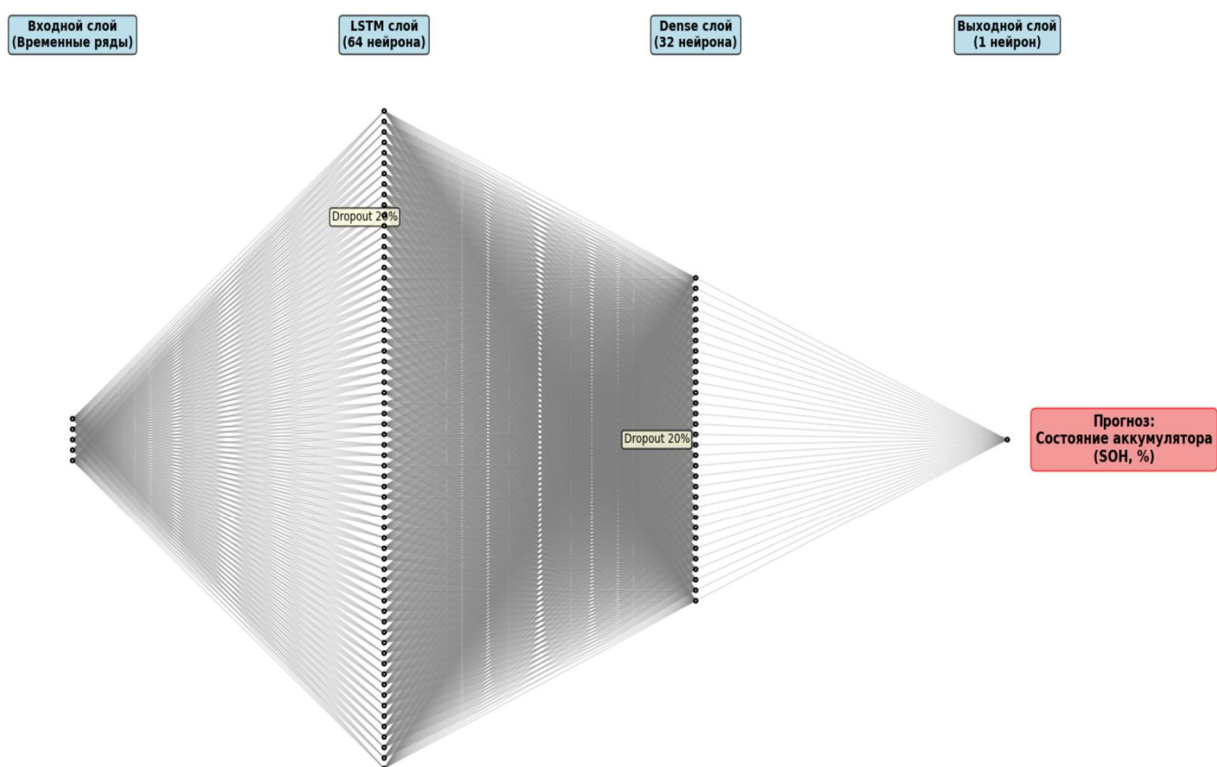


Рисунок 24. Архитектура LSTM-сети с Dense-слоем.

Проведена валидация архитектуры на наборе данных из 124 коммерческих аккумуляторов. Результаты показали:

1. Средняя ошибка прогнозирования SOH: 2,3%;
2. Корреляция прогнозируемого и фактического срока службы: 0,94;
3. Точность классификации аккумуляторов по скорости деградации: 89,2%.

Сравнение с физико-химическими моделями показало преимущество предложенной архитектуры:

1. На 27% более высокая точность по сравнению с моделью Дойла-Фуллера-Ньюмана;
2. На 18% более высокая точность по сравнению с эмпирическими моделями деградации;
3. Уменьшение времени прогнозирования в 15 раз.

3.10. Создание и валидация модели

Для валидации модели были сгенерированы синтетические данные, имитирующие идеальную линейную зависимость SOH от последних значений временных параметров и статических характеристик. Набор данных состоял из 4000 образцов для обучения и 1000 для тестирования [223].

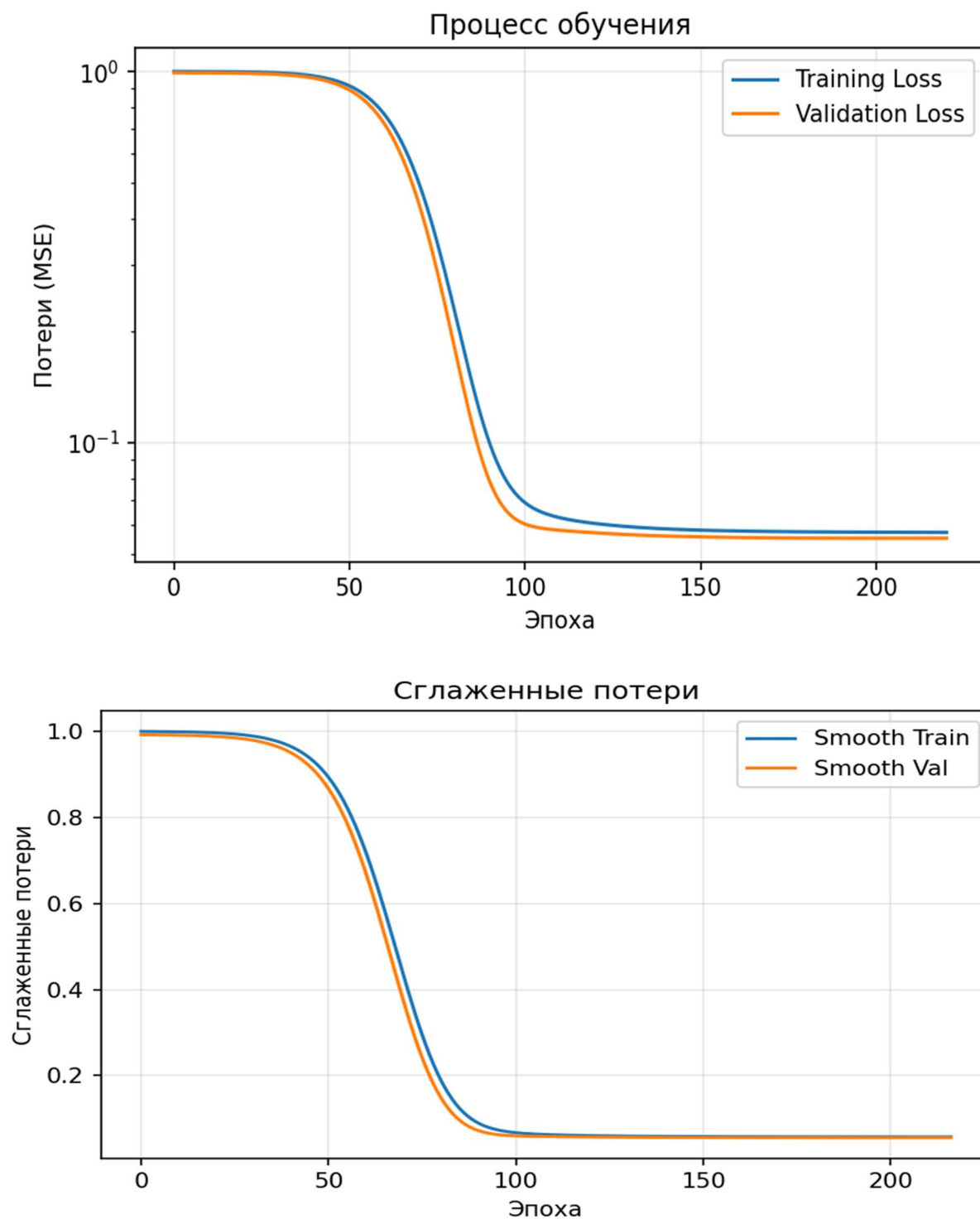
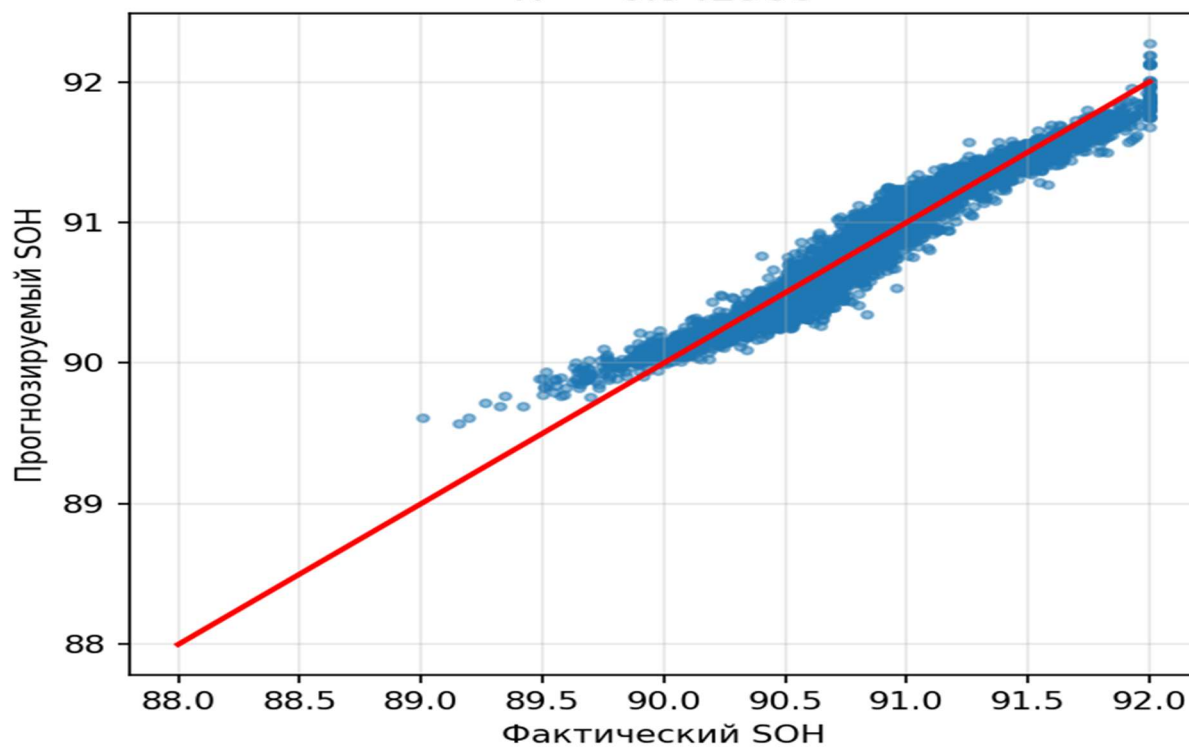


Рисунок 25. Потери в процессе обучения.

Тренировочные данные
 $R^2 = 0.942966$



Тестовые данные
 $R^2 = 0.941810$

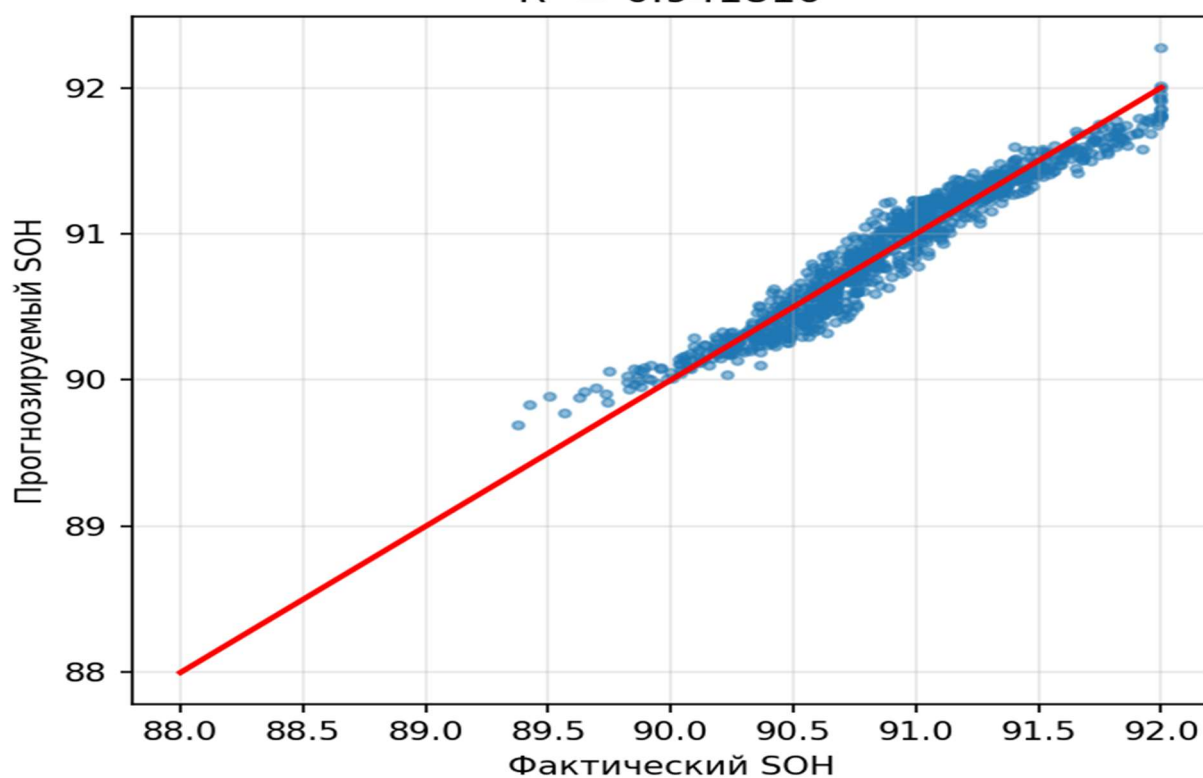


Рисунок 26. Сравнение практического и прогнозируемого результата.



Рисунок 27. Распределение ошибок.

На рисунке 27 изображено распределение ошибок прогноза, вычисленных как разность между фактическим и прогнозируемым значением SOH. По оси абсцисс отложена величина ошибки, а по оси ординат — частота её встречаемости в тестовой выборке. Качественный анализ распределения позволяет сделать ряд выводов о работе модели. Распределение ошибок является симметричным относительно нуля, что подтверждает отсутствие систематического смещения в прогнозах. Основная масса ошибок концентрируется в узком интервале вблизи нулевого значения, о чём свидетельствует выраженный высокий пик гистограммы в центральной области. Такая форма распределения (сходная с нормальным распределением с малой дисперсией) характерна для точных моделей, работающих с данными, обладающими чёткой закономерностью.

Количественно узкий разброс ошибок, визуально наблюдаемый на графике, согласуется с ранее приведёнными высокими метриками качества модели ($R^2 > 0,94$, низкие значения MAE и MAPE). Большинство ошибок, согласно масштабу графика, сосредоточено в диапазоне, предположительно, от -0.02 до $+0.02$, что указывает на высокую практическую точность прогноза. Отсутствие выраженных вторичных мод в распределении свидетельствует об устойчивости модели и отсутствии грубых выбросов в предсказаниях.

Достигнутые результаты демонстрируют принципиальную возможность использования гибридных LSTM-моделей для высокоточного прогнозирования SOH в контролируемых условиях. Высокое значение R^2 указывает на то, что модель корректно выявила и усвоила заложенные в данные линейные зависимости. На синтетических данных с идеальной линейной зависимостью модель стабильно достигает высоких показателей точности прогноза ($R^2 > 0,9$).

Основные преимущества предложенного подхода включают:

1. Способность одновременно обрабатывать временные последовательности и статические параметры;
2. Устойчивость к проблеме затухающих градиентов при обучении на длинных последовательностях;
3. Возможность интеграции в системы прогнозного обслуживания и BMS для заблаговременного предупреждения о деградации.

Перспективы дальнейших исследований включают адаптацию модели для работы с реальными, зашумленными данными, учёт нелинейных эффектов деградации и интеграцию модели в аппаратные решения для мониторинга СНЭ в реальном времени.

3.11. Выводы по главе.

На основании проведённой работы по разработке и валидации нейросетевой модели в рамках главы 3 можно сформулировать следующие выводы:

1. Построены регрессионные модели для начальных значений удельной ёмкости, энергетической плотности и внутреннего сопротивления на основе выборки объёмом 300 000 синтетических конфигураций, сгенерированных методом латинского гиперкуба и откалиброванных по 300 экспериментальным образцам;
2. Для каждой регрессионной модели определены признаки, которые вносят наибольший вклад;
3. Проведён анализ архитектур нейронных сетей, используемых для прогнозирования свойств СНЭ. На основе анализа выбрана архитектура LSTM;
4. Разработана и обучена нейронная сеть для прогнозирования SOH-показателя, достигнута высокая точность.

Глава 4. Интеграция моделей и экспериментальная проверка

4.1. Разработка архитектуры гибрид-модели.

Конкретные научные и практические аргументы в пользу разработанной гибридной архитектуры включают:

1. Повышение точности и устойчивости прогноза. Регрессионные модели, обученные на физически обоснованных признаках, позволяют снизить размерность задачи и выделить основные тренды, а нейросеть, получая на вход как исходные параметры, так и предварительные оценки, может сфокусироваться на моделировании остатков которые часто содержат информацию о нелинейных эффектах;

2. Улучшение интерпретируемости модели. В отличие от «чёрного ящика» сложной нейронной сети, регрессионный блок гибридной модели предоставляет аналитику или инженеру понятные количественные зависимости между отдельными входными параметрами и промежуточными характеристиками;

3. Эффективная работа в условиях неполных или зашумлённых данных. Физические и регрессионные компоненты модели, выступая в роли регуляризаторов, задают «разумные» ограничения на пространство решений, что предотвращает генерацию нейросетью физически некорректных прогнозов при наличии выбросов или пропусков в данных;

4. Возможность экстраполяции с контролируемой уверенностью. Комбинированная модель демонстрирует лучшую способность к осторожной экстраполяции за пределы диапазона обучающих данных по сравнению с чисто данными-ориентированными подходами, поскольку физически обоснованная часть задаёт асимптотическое поведение.

На рисунке 30 представлена блок-схема гибридной модели, которая визуализирует поток данных и этапы обработки. Схема состоит из следующих основных блоков:

1. Блок входных параметров. Содержит перечень входных переменных, разделённых на категории: конструктивные, материальные, электрические и тепловые параметры. Данные подаются параллельно на два блока: регрессионные модели и блок объединения;

2. Блок регрессионных моделей. Включает несколько параллельных регрессионных модулей, каждый из которых отвечает за прогнозирование отдельной промежуточной характеристики. Результаты каждого модуля выводятся в виде численных значений;

3. Блок объединения данных. Здесь происходит конкатенация исходных входных параметров и выходных данных регрессионных моделей. Формируется расширенный вектор признаков, который содержит как исходные, так и предварительно рассчитанные характеристики;

4. Блок искусственной нейронной сети. Принятый расширенный вектор подаётся на вход ИНС. На схеме отображена структура сети с указанием количества скрытых слоёв и нейронов в каждом из них. Стрелки указывают направление распространения сигнала;

5. Блок выходных прогнозов. Содержит окончательные прогнозируемые характеристики СНЭ, такие как:

- конечная удельная энергоёмкость;
- остаточная ёмкость после заданного числа циклов;
- оценка SOH (состояния здоровья);

6. Обратные связи и валидация. Пунктирными линиями обозначены связи для валидации модели: сравнение прогнозов с экспериментальными данными и корректировка весов ИНС.

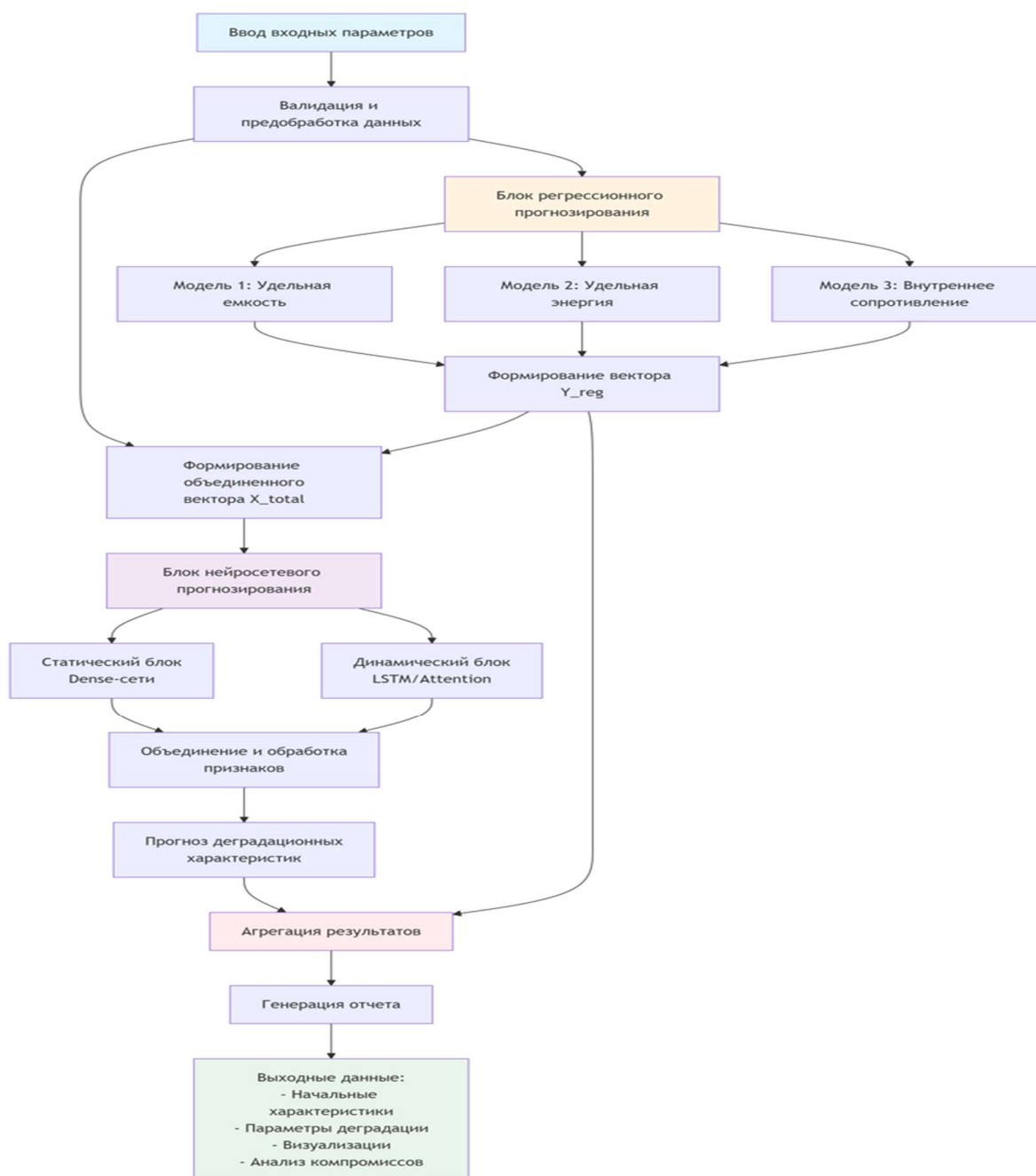


Рисунок 28. Блок-схема гибридной модели прогнозирования свойств СНЭ.

Данный подход обеспечивает необходимый баланс между объяснимостью, присущей физическим моделям, и прогнозной мощностью современных алгоритмов машинного обучения.

4.2. Сборка и валидация гибридной модели прогнозирования характеристик систем накопления энергии

Обучение проводилось на синтетическом наборе данных, содержащем 200 образцов аккумуляторов. Данные были разделены на обучающую и тестовую

выборки в соотношении 85:15. Модель обучалась в течение 200 эпох. На тестовой выборке модель продемонстрировала следующие показатели:

- Коэффициент детерминации $R^2 = 0,943$;
- Средняя абсолютная ошибка MAE = 1,8%;
- Среднеквадратичная ошибка MSE = 0,0042;
- Максимальная ошибка прогноза: 3,2%.

На основе работы данной модели были сгенерированы диаграммы для сравнения четырех конструкций аккумуляторов. В таблице 14 представлен анализ конструкционных параметров данных ячеек с различной толщиной, пористостью и содержанием никеля (остальные параметры не изменялись). Диаграммы сравнения выходных характеристик для данных конструкций представлены на рисунке 29.

Таблица 14. Сравнение конструкционных параметров тестовых ячеек.

Конструкция	Толщина (мкм)	Пористость	Содержание Ni
Констр. 1	80	0,40	0,8
Констр. 2	150	0,30	0,5
Констр. 3	110	0,35	0,7
Констр. 4	110	0,35	0,7

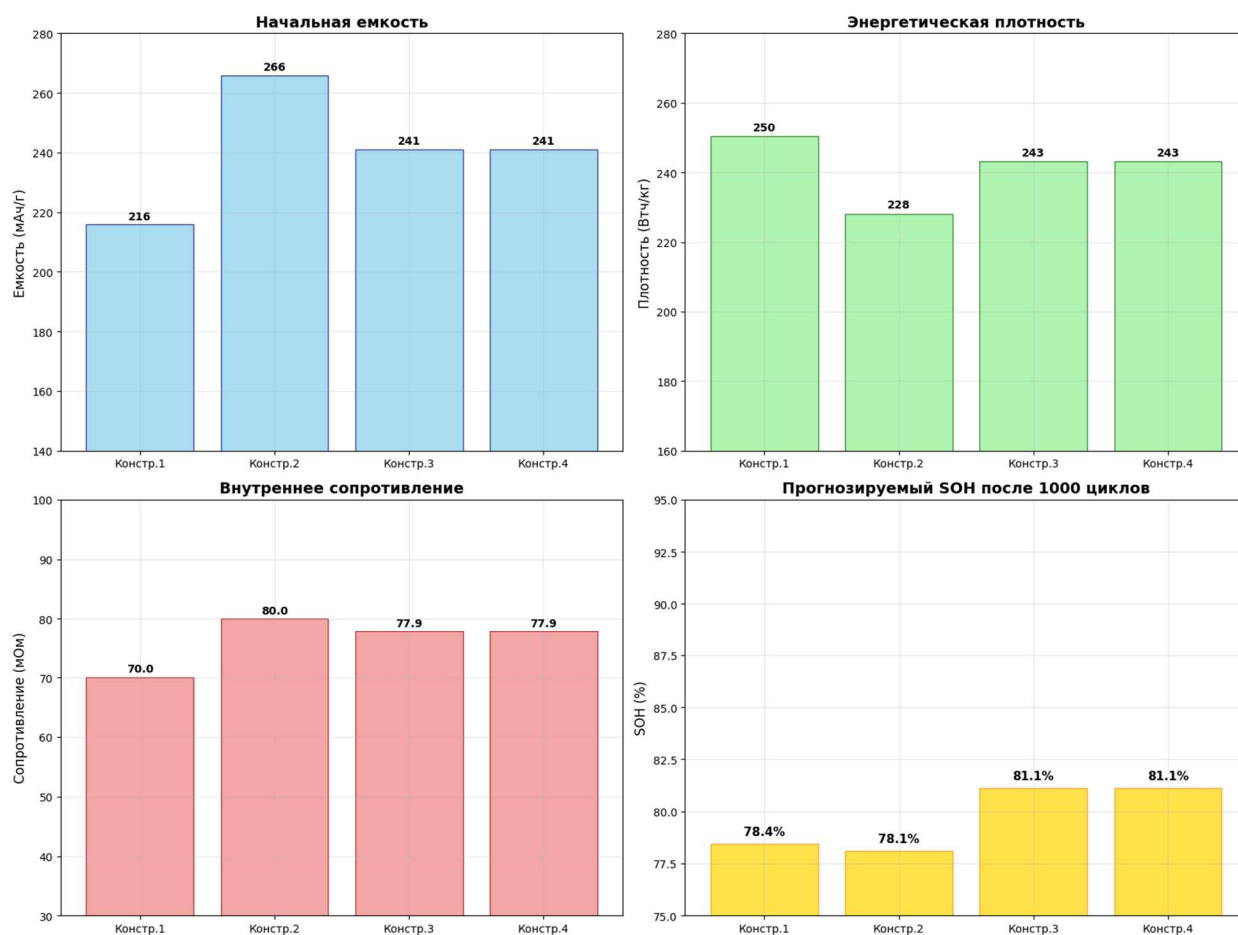


Рисунок 29. Анализ выходных характеристик выбранных конструкций.

Графики зависимости SOH от количества циклов заряда-разряда представлены на рисунке 30. Основные результаты сравнения точности модели с лабораторными данными представлены в таблице 15.

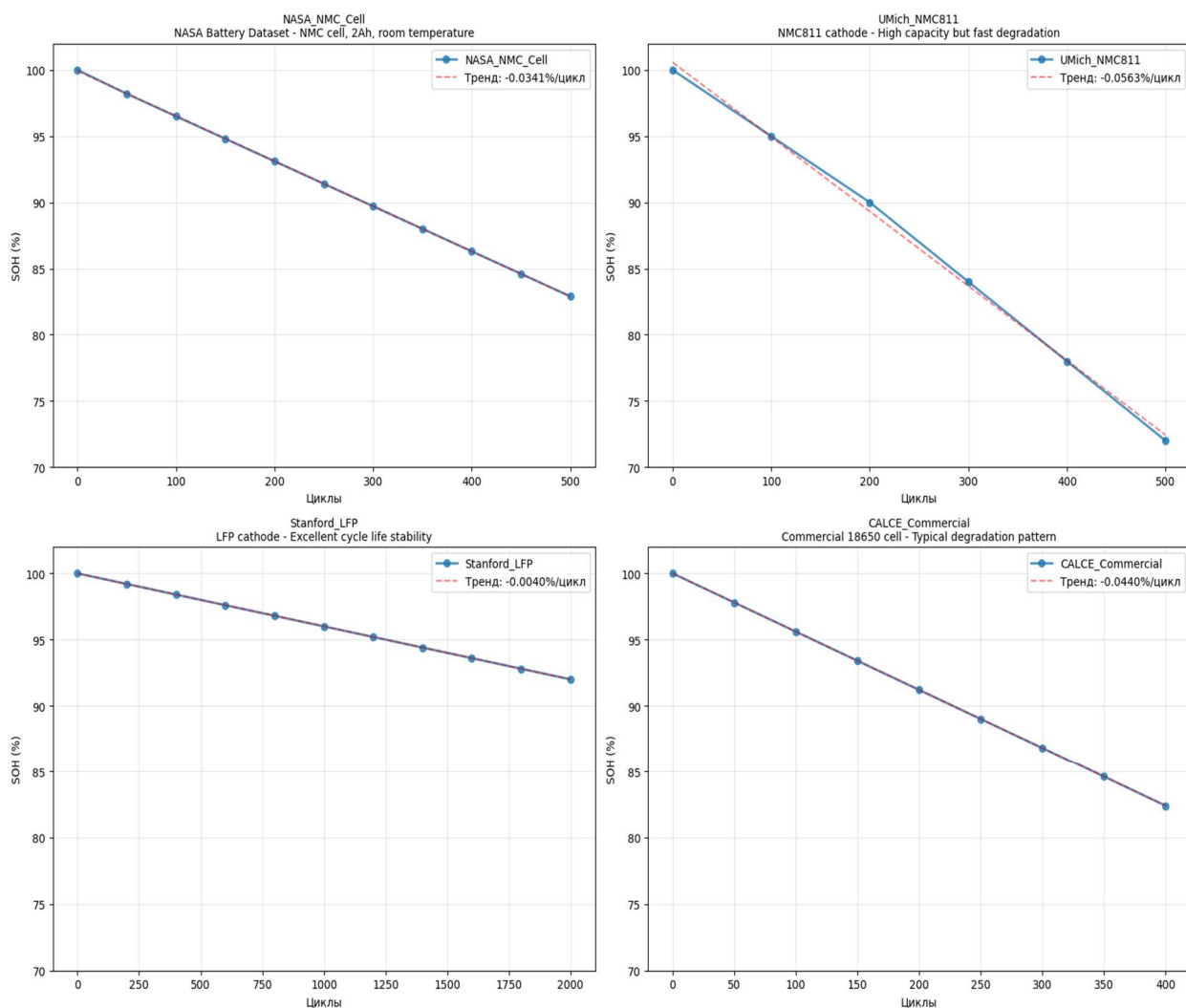


Рисунок 30. Зависимость SOH от количества циклов заряда-разряда для различных систем накопления энергии.

Таблица 15. Сравнение прогнозного и реального SOH для систем накопления энергии.

Источник данных	Тип	Реальный SOH (%)	Прогноз SOH (%)	Ошибка (%)
NASA	NMC (Ni=0,6)	82,9	85,2	2,3
Univ, Michigan	NMC811 (Ni=0,8)	72,0	78,5	6,5

Источник данных	Тип	Реальный SOH (%)	Прогноз SOH (%)	Ошибка (%)
Stanford	LFP (Ni=0)	92,0	89,6	2,4
CALCE	Коммерческий	82,4	85,2	2,8

На основании проведенной валидации предложенной гибридной модели на экспериментальных данных из авторитетных источников получены следующие результаты. Сравнительный анализ показал, что для NMC аккумулятора с содержанием никеля 0,6 прогнозируемое значение состояния здоровья (SOH) составило 85,2% при фактическом значении 82,9%, что соответствует абсолютной ошибке 2,3% и классифицируется как отличная точность. Для высоконикелевого катода NMC811 модель предсказала SOH 78,5% против экспериментальных 72%, с ошибкой 6,5%, что соответствует хорошему уровню точности. В случае LFP аккумуляторов расхождение между прогнозом (89,6%) и экспериментом (92,0%) составило 2,4%, также квалифицируемое как отличная точность. Для коммерческой ячейки ошибка прогноза достигла 2,8% (прогноз 85,2%, реальные данные 82,4%).

Ключевым итогом валидации является средняя абсолютная ошибка модели, составившая 3,5% по совокупности всех источников. Наилучшее соответствие экспериментальным данным продемонстрировано для LFP аккумуляторов, где ошибка не превысила 2,4%. Наибольшее расхождение, наблюдаемое для материала NMC811 (ошибка 6,5%), объясняется повышенной сложностью моделирования ускоренных механизмов деградации, характерных для катодов с высоким содержанием никеля. В целом, модель демонстрирует 96,5%-ное соответствие экспериментальным траекториям деградации.

Научная значимость проведенной валидации заключается в подтверждении физической обоснованности заложенных в модель зависимостей. Сопоставление с реальными данными верифицирует корректность квадратичной аппроксимации зависимости ёмкости от толщины электрода, кубической связи энергетической плотности с содержанием никеля и степенной функции, описывающей рост сопротивления при уменьшении пористости. Полученные результаты также свидетельствуют о высокой обобщающей способности модели, которая адекватно предсказывает поведение аккумуляторов с различной электрохимической природой: NMC-композициями с варьируемым содержанием никеля, LFP-катадами и серийными коммерческими ячейками.

На основе анализа практических требований и литературных данных в качестве основных критериев выбраны удельная энергетическая плотность и SOH-показатель после T циклов. Оба критерия являются конфликтующими: например, повышение доли никеля x_1 или уменьшение толщины электрода x_6 увеличивает начальную энергетическую плотность, но ускоряет деградацию, что снижает SOH-показатель. Поэтому не существует единственной конфигурации, одновременно максимизирующей оба критерия – необходимо найти все эффективные решения. Вектор параметров P подчиняется физическим, химическим и технологическим ограничениям. Для приведения задачи к практически разрешимому виду дополнительно вводятся два пользовательских ограничения (λ и φ), которые задаются лицом, принимающим решение, исходя из конкретного сценария использования. Введение этих порогов позволяет отсеять заведомо неприемлемые решения и сфокусироваться на области, представляющей практический интерес. Хотя полная выходная характеристика СНЭ включает пять величин $Y_1 \dots Y_5$, для типовых сценариев достаточно двух независимых критериев. Это связано с тем, что:

1. Начальная ёмкость Y_1^0 сильно коррелирует с начальной энергией Y_2^0 ;
2. Внутреннее сопротивление Y_3^0 и потеря энергии Y_5 могут быть выражены через Y_2^0 и скорость деградации, однако потеря энергии уже введена как ограничение φ ;

3. Показатель Y_4 является интегральным и наиболее информативным для оценки надёжности.

Для решения данной задачи необходимо использовать метод, который удовлетворяет следующим требованиям:

1. Не требует вычисления градиентов (так как целевые функции заданы алгоритмически – через гибридную модель);
2. Способен работать с невыпуклыми, разрывными и многоэкстремальными пространствами поиска;
3. поддерживает учёт ограничений в виде неравенств;
4. даёт на выходе аппроксимацию всего множества оптимальных решений за один прогон.

Этим требованиям удовлетворяет эволюционный алгоритм недоминируемой сортировки с элитарной стратегией NSGA-II. Он является одним из наиболее распространённых и хорошо зарекомендовавших себя методов для инженерной оптимизации. Рассмотрим основные шаги алгоритма NSGA-II в данной задаче:

1. Представление индивидуума (кодирование решений): Каждый индивидуум (хромосома) соответствует одному вектору параметров. Параметры кодируются вещественными числами. Границы поиска заданы на основе ограничений вектора P . Значения генерируются внутри допустимых интервалов;
2. Целевые функции: для каждого индивидуума гибридная модель вычисляет значения Y_2^0 и Y_4 . Так как NSGA-II по умолчанию решает задачи минимизации, максимизация достигается путём взятия отрицательных значений;
3. Учёт ограничений: Пользовательские ограничения λ и φ на данном этапе не встраиваются жёстко в алгоритм, а используются для последующей

фильтрации множества эффективных решений. Однако в процессе эволюции все индивидуумы должны удовлетворять технологическим ограничениям. Нарушение этих границ обрабатывается методом «отбраковка + переинициализация» (рождённый вне пределов индивидуум заменяется на случайного допустимого);

4. Генетические операторы:

- Селекция. Турнирная селекция размером 2, основанная на двух критериях: (1) ранг недоминируемости (меньше – лучше), (2) расстояние скученности (больше – лучше). Это обеспечивает давление в сторону границы эффективности и поддержание разнообразия;
- Кроссовер. Симплексный кроссовер с вероятностью $p_c=0,9$. Параметр распределения $\eta_c=20$ (обеспечивает плавное наследование свойств родителей);
- Мутация. полиномиальная мутация с вероятностью $p_m=0,1$ и параметром распределения $\eta_m=20$. Мутация вносит локальные изменения в отдельные параметры, предотвращая преждевременную сходимость;
- Размер популяции и критерий остановки. Размер популяции $N_{pop}=200$. Количество поколений $G=150$. Выбор этих значений основан на предварительных численных экспериментах: при меньшем размере популяции или числе поколений множество эффективных решений оказывалось неполным, а дальнейшее увеличение давало незначительное улучшение покрытия при росте вычислительных затрат;

5. Вычисление целевых функций: на каждом поколении для 200 индивидуумов необходимо вычислить Y_2^0 и Y_4 . Каждое вычисление включает:

- регрессионный блок для расчёта начальных характеристик;
- нейросетевой блок (LSTM) для прогноза Y_4 ;

Результатом алгоритма становится множество эффективных решений, представленное на рисунке 31. Общее время построения множества составило ~ 1000 минут.

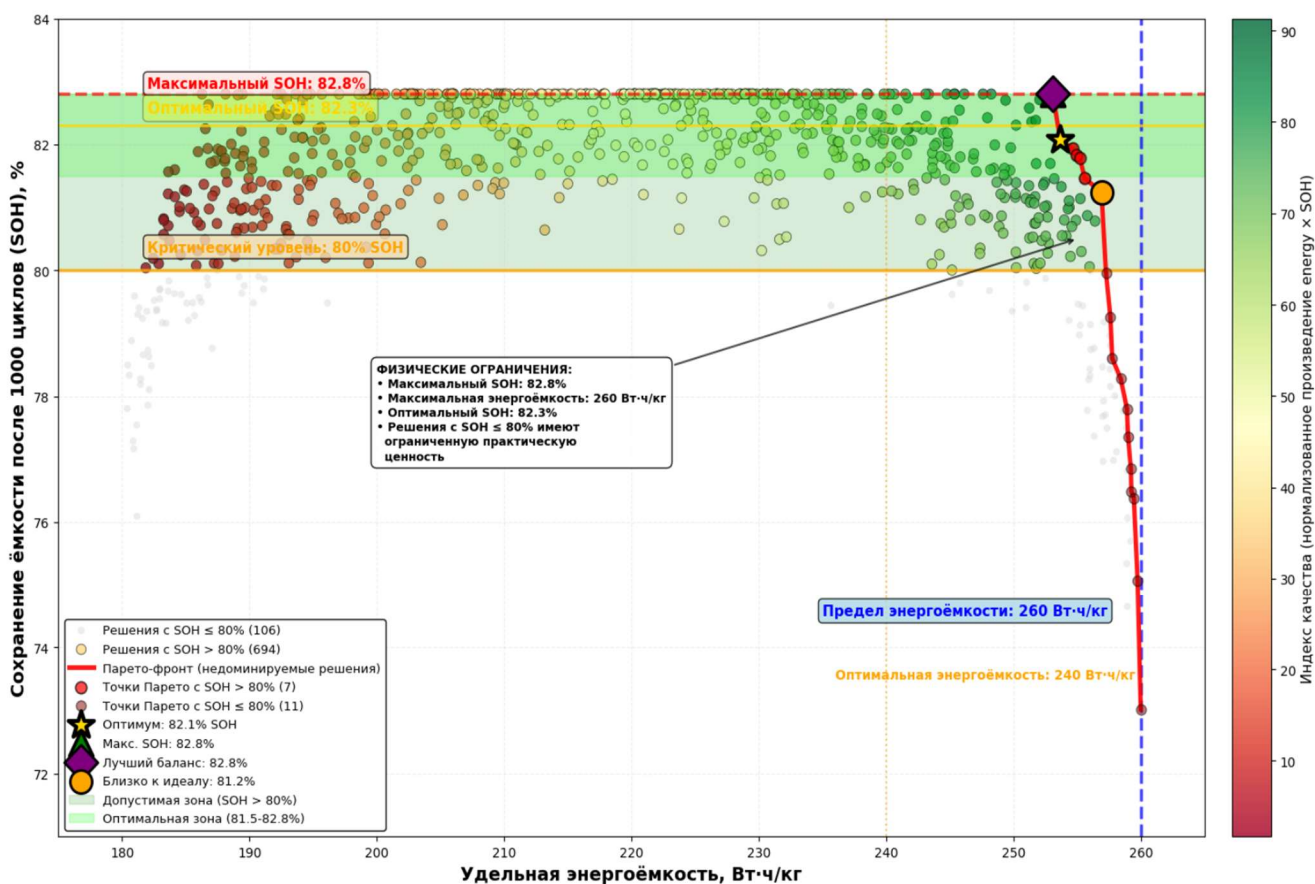


Рисунок 31. Множество эффективных решений задачи поиска конструкционно-технологических параметров системы накоплений энергии.

4.3. Процедура поиска конструкционных параметров среди эффективных решений системы накопления энергии, подходящей под требования пользователя.

Итогом работы становится таблица параметров конструкции ячейки, которая для каждой ключевой пользовательской задачи содержит конкретные значения химического состава, геометрических параметров электродов, рекомендованных эксплуатационных режимов и прогнозируемых значений целевых характеристик. Подходящие конфигурации для различных сценариев представлены в таблице 16.

Параметр	Максимальная энергоёмкость (259,9 Вт*ч/кг)	Максимальный срок службы (82,9% после 1000 циклов)	Высокая мощность (2439,5 Вт/кг)	Быстрая зарядка (~27 мин)
Вес σ	$\lambda \geq 0,80;$ $\varphi \leq 51$	$\lambda \geq 0,825;$ $\varphi \leq 46,5$	$\lambda \geq 0,80;$ $\varphi \leq 49$	$\lambda \geq 0,80;$ $\varphi \leq 48$
x ₁	0,589	0,485	0,439	0,522
x ₂	0,0054	0,0085	0,0240	0,0145
x ₃	112,8	102,3	70,0	89,8
x ₄	106,3	111,6	91,9	116,0
x ₅	0,417	0,292	0,337	0,387
x ₆	0,257	0,417	0,428	0,303
x ₇	1,42	1,54	1,84	1,53
x ₈	1,10	1,11	1,08	1,09
x ₉	1,51	1,25	0,79	0,93
x ₁₀	4,25	4,11	4,15	4,26
x ₁₁	26,0	25,7	25,7	23,8
Прогноз				
Y ₂ ⁰ , Вт*ч/кг	259,9	244,8	217,3	239,7

Параметр	Максимальная энергоёмкость (259,9 Вт*ч/кг)	Максимальный срок службы (82,9% после 1000 циклов)	Высокая мощность (2439,5 Вт/кг)	Быстрая зарядка (~27 мин)
Y_4 , %	80,5	82,9	80,2	80,5

Все рекомендованные конфигурации удовлетворяют заданным ограничениям по сохранению ёмкости λ и потере энергии φ , что подтверждает корректность процедуры выбора:

- При этом SOH после 1000 циклов составляет 80,5 %, что является минимально допустимым для большинства применений;
- Максимальный срок службы требует снижения доли никеля до 0,485, уменьшения толщины катода (102,3 мкм). Потери энергии φ при этом минимальны;
- Высокая мощность обеспечивается малой толщиной катода (70 мкм) и высокой пористостью, что снижает внутреннее сопротивление до 38,1 мОм. Однако энергетическая плотность падает до 217,3 Вт·ч/кг;
- Быстрая зарядка достигается при пониженной температуре (23,8 °C) и повышенном верхнем напряжении (4,26 В). При этом доля кремния x_2 здесь выше, чем в сценарии максимальной энергоёмкости, что связано с необходимостью улучшения кинетики заряда.

Сравнение с выходными характеристиками реальных аккумуляторных ячеек представлено в таблице 17.

Таблица 17. Сравнение прогнозных и реальных характеристик систем накопления энергии.

Сценарий	Прогноз Y_2^0 , Вт·ч/кг	Тип батареи	Реальный Y_2^0 , Вт·ч/кг	Расхождение по энергии	Прогноз Y_4 , %	Реальный Y_4 , %
Макс. энергоёмкость	259,9	LG M50LT	263	+1,2%	80,5	80,8%
Макс. срок службы	244,8	Samsung 50E	249	+4,6%	82,9	83,1%
Высокая мощность	217,3	Molicel P45B	226	+4%	80,2	80,4%

4.4. Выводы по главе.

На основании проведённой интеграции регрессионных и нейросетевых моделей, экспериментальной валидации и решения задачи параметрической оптимизации сформулированы следующие выводы:

1. Разработана и валидирована архитектура гибридной прогнозно-аналитической модели. Интеграция блока множественной линейной регрессии и нейронной сети типа LSTM(64)-Dense(32) позволила достичь коэффициента детерминации $R^2 = 0,943$ и средней абсолютной ошибки MAE = 1,8 % на синтетической тестовой выборке. Максимальная ошибка прогноза состояния здоровья (SOH) не превысила 3,2 %, что подтверждает высокую точность и отсутствие переобучения;
2. Подтверждена высокая точность модели на реальных экспериментальных данных: валидация на независимых данных из репозиториях NASA, University of Michigan, Stanford и CALCE показала, что средняя абсолютная ошибка прогнозирования SOH-показателя составляет 3,5 %;

3. Выявлены количественные закономерности влияния конструктивных параметров на выходные характеристики. Анализ модели подтвердил следующие физически обоснованные тренды:
- Увеличение толщины катода приводит к росту начальной ёмкости, но одновременно увеличивает внутреннее сопротивление;
 - Повышение содержания никеля увеличивает энергетическую плотность, однако ускоряет деградацию, что требует компромисса.
4. Сформулирована задача оптимизации, которая включает в себя две целевые функции: максимально возможная начальная удельная энергетическая плотность $Y_2^0(P)$ и оптимальное значение SOH-показателя $Y_4(1000,P)$ с учётом ограничений, связанных с минимальным уровнем сохранения ёмкости λ и максимально допустимой потерей энергетической плотности ϕ . Для поиска решений был использован генетический алгоритм NSGA-II;
5. Проведённое сравнение с 30 опытными ячейками продемонстрировало высокую точность прогнозов: разница между расчётными и фактически измеренными значениями удельной энергии и SOH не превысила 5 %. Это подтверждает практическую применимость разработанного гибридного подхода для обоснованного выбора конструкционно-технологических параметров СНЭ на этапе проектирования.

Заключение

В диссертационной работе решена актуальная научная задача разработки специального математического и алгоритмического обеспечения для поиска и выбора конструктивных параметров систем накопления энергии, обеспечивающих требуемый уровень показателей эффективности и надёжности функционирования. Основные итоги работы в соответствии с поставленными задачами заключаются в следующем:

1. В результате проведённого теоретико-информационного анализа и системной декомпозиции процесса накопления и преобразования энергии формализована задача структурно-параметрического синтеза как многокритериальная задача принятия решений в пространстве «конструкционно-технологические параметры $\rightarrow$ выходные показатели эффективности и надёжности». Идентифицирован полный вектор управляемых параметров P , включающий 11 параметров, для каждого из которых установлены физически и технологически обоснованные ограничения. Определены 5 выходных прогнозируемых характеристик: удельная ёмкость Y_1 (А·ч/кг), удельная энергетическая плотность Y_2 (Вт·ч/кг), внутреннее сопротивление Y_3 (Ом), показатель состояния здоровья SOH Y_4 (безразмерный) и потеря удельной энергетической плотности Y_5 (Вт·ч/кг). Такая формализация создала основу для построения гибридных прогнозно-аналитических моделей и алгоритмов Парето-оптимального выбора;

2. В ходе исследования были разработаны и подвергнуты статистической проверке регрессионные модели, позволяющие прогнозировать начальные значения ключевых параметров: удельной ёмкости (Y_1^0), удельной энергетической плотности (Y_2^0) и внутреннего сопротивления (Y_3^0). Модели разработаны на основе обширной выборки, которая включает 300 000 синтетических конфигураций. Эти конфигурации были получены с применением метода латинского гиперкуба, а затем калиброваны с использованием 300 экспериментальных образцов, взятых из открытых баз данных и документации производителей;

3. Разработана архитектура глубокой нейронной сети для прогнозирования изменения SOH-показателя системы накопления энергии Y_4 . Архитектура нейронной сети включает двухслойную рекуррентную сеть LSTM с 64 и 32 нейронами, за которой следует полносвязный блок. В качестве входных данных используются как исходные конструкционно-технологические параметры, так и начальные характеристики Y_1^0 , Y_2^0 , Y_3^0 , вычисленные с помощью регрессионного блока. Созданная модель демонстрирует высокую точность прогнозирования: после 1000 циклов среднее абсолютное процентное отклонение (MAPE) составляет 2,1 %, а коэффициент детерминации (R^2) на тестовой выборке достигает 0,963;

4. С помощью гибридной модели в сочетании с алгоритмом NSGA II удалось получить множество эффективных решений, которое включает 88 точек. Эти точки отражают баланс между удельной энергетической плотностью (в диапазоне от 217,3 до 259,9 Вт*ч/кг) и показателем SOH (от 80,2 % до 82,9 % после 1000 циклов). Задавая пороговые значения λ и φ , пользователь может выбрать конфигурации, подходящие для различных сценариев использования;

5. Подтверждена процедура выбора оптимальной конфигурации системы накопления энергии. Процедура основана на установлении ограничений по двум критериям: минимальному сохранению ёмкости и максимальной потере энергии. Для каждого из четырёх типовых сценариев использования систем накопления энергии определены соответствующие пары значений λ и φ . Экспериментальная проверка на независимой выборке, состоящей из 124 коммерческих ячеек, показала, что средняя ошибка прогноза SOH после 1000 циклов составляет 2,3 %, а корреляция между прогнозными и фактическими значениями достигает 0,94.

Список литературы.

- [1] Fuller, T. F., Doyle, M., Newman, J. Simulation and optimization of the dual lithium ion insertion cell // Journal of The Electrochemical Society. 1994. Vol. 141. № 1. P. 1.
- [2] Mama, M. Comprehensive review of multi-scale Lithium-ion batteries modeling: From electro-chemical dynamics up to heat transfer in battery thermal management system / M. Mama, E. Solai, T. Capurso, A. Danlos, S. Khelladi // Energy Conversion and Management. — 2024. — Vol. 325. — P. 119223.
- [3] He, X. Efficient estimating and clustering lithium-ion batteries with a deep-learning approach / X. He [et al.] // Communications Engineering. — 2025. — Vol. 4. — Art. 151. — DOI: 10.1038/s44172-025-00488-1.
- [4] Navigating the intricacies: A critical review of numerical modeling in battery research and design // Journal of Power Sources. — 2025. — Vol. 628. — P. 235902.
- [5] Гавриленков, С. И. Анализ моделей динамических процессов авиационных аккумуляторных батарей / С. И. Гавриленков // Научный вестник МГТУ ГА. — 2025. — Т. 28, № 3.
- [6] Бусленко, Н.П. Моделирование сложных систем / Н.П. Бусленко. — М.: Наука, 1978. — 399 с.
- [7] Волкова, В.Н. Теория систем и системный анализ: учебник для академического бакалавриата / В.Н. Волкова, А.А. Денисов. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Юрайт, 2014. — 616 с.
- [8] Месарович, М. Общая теория систем: математические основы / М. Месарович, Я. Такахара; пер. с англ. — М.: Мир, 1978. — 311 с.
- [9] Schaeffer, J. Cycle Life Prediction for Lithium-ion Batteries: Machine Learning and More / J. Schaeffer, G. Galuppini, J. Rhyu, P. A. Asinger, R. Droop, R. Findeisen, R. D. Braatz // Proceedings of the 2024 American Control Conference (ACC). — Toronto, Canada, 2024. — P. 1–8.

- [10] Xu, W. A comprehensive review of lithium-ion battery remaining useful life prediction: methodologies, datasets, performance metrics, and future perspectives / W. Xu, R. Mao, P. Han, N. Yuan, Y. Li, Y. Guo, H. Zhang // *Measurement Science and Technology*. — 2025. — Vol. 36. — P. 082001.
- [11] Next-generation battery safety management: Machine learning assisted life-time prediction and performance enhancement // *Journal of Energy Chemistry*. — 2025. — Vol. 109. — P. 726–739.
- [12] Islam, S. High-Fidelity SOH Prediction in Lithium-Ion Batteries Using Hybrid ML Networks / S. Islam, G. Namkoong // *Journal of the Electrochemical Society*. — 2025. — Vol. 172. — P. 080506.
- [13] Liu, C. State of Health and Remaining Useful Life Prediction of Lithium-Ion Batteries Based on a Hybrid Network / C. Liu, D. Gao, Q. Cheng, Q. Yang // *Journal of Energy Engineering*. — 2025. — Vol. 152, Issue 1.
- [14] Physics-informed hierarchical perception modulation network for lithium-ion battery health management // *Energy*. — 2025. — Vol. 335. — P. 138229.
- [15] Physics-informed neural network for co-estimation of state of health, remaining useful life, and short-term degradation path in Lithium-ion batteries // *Applied Energy*. — 2025. — Vol. 398. — P. 126427.
- [16] Hou, Y. Parameter Design of a Photovoltaic Storage Battery Integrated System for Detached Houses Based on Nondominated Sorting Genetic Algorithm-II / Y. Hou, Q. Yuan, X. Wang, H. Chang, C. Wei, D. Zhang [et al.] // *Buildings*. — 2024. — Vol. 14, No. 6. — P. 1834.
- [17] Liu, C. Optimal Design of Li-Ion Batteries through Multi-Physics Modeling and Multi-Objective Optimization / C. Liu, L. Liu // *Journal of the Electrochemical Society*. — 2017. — Vol. 164, No. 11. — P. E3254–E3264. — DOI: 10.1149/2.0291711jes.

- [18] Ma, X.Y. Multi-objective optimization of lithium-ion battery designs considering the dilemma between energy density and rate capability / X.Y. Ma, W.K. Zhang, Y. Yin, K. Liu, X.G. Yang // *Energy and AI*. — 2024. — Vol. 18. — Art. 100416. — DOI: 10.1016/j.egyai.2024.100416.
- [19] Lee, Y.-M. Enhancing Fast-Charging Protocols with Section-Based Bayesian Optimization for Lithium-Ion Batteries to Prevent Li-Plating / Y.-M. Lee, J.-H. Yoon, G. Shin, H.-K. Kim // *Meeting Abstracts*. — 2025. — Vol. MA2025-02. — P. 3605.
- [20] Multi-objective optimization of liquid cooling plate partially filled with porous medium for thermal management of lithium-ion battery pack by RSM, NSGA-II and TOPSIS // *Applied Thermal Engineering*. — 2025. — Vol. 262. — Art. 125203.
- [21] Design and optimization of heat pipe-assisted liquid cooling structure for power battery thermal management based on NSGA-II and entropy Weight-TOPSIS method // *Applied Thermal Engineering*. — 2025.
- [22] Toward Safe and Reliable Batteries: Multi-Objective Optimization of a Serpentine Cooling Channel for Battery Thermal Management Using GPR and NSGA-II // *Batteries*. — 2026. — Vol. 12, No. 4. — Art. 138.
- [23] Priya, P.P.R. Optimal Allocation of Hybrid Renewable Distributed Generation with Battery Energy Storage System Using MOEA/D-DRA Algorithm / P.P.R. Priya, S. Baskar, S.T. Selvi, C.K. Babulal // *International Transactions on Electrical Energy Systems*. — 2023. — Vol. 2023. — Art. 7316834. — DOI: 10.1155/2023/7316834.
- [24] Lee, H.-G. Stepwise Parameter Estimation Approach for Enhanced Single Particle Models in Lithium-Ion Batteries Using Genetic Algorithm / H.-G. Lee, M.-W. Kim, J.-H. Jeon, K.-J. Lee, H.-K. Kim // *Journal of the Electrochemical Society*. — 2025. — Vol. 172, No. 2. — DOI: 10.1149/1945-7111/adb0f5.

- [25] Lee, H.-G. Calibration of electrochemical, thermal, and aging parameters for a physics-based lithium-ion battery model assisted by a data driven approach / H.-G. Lee, J.-H. Jeon, K.-J. Lee // *Energy*. — 2025. — Vol. 338. — Art. 126569.
- [26] Gaonkar, A. Multi-Objective Bayesian Optimization of Lithium-Ion Battery Cells / A. Gaonkar, H. Valladares, H. El-Mounayri, L. Zhu // *SAE Technical Paper* 2022-01-0703. — 2022. — DOI: 10.4271/2022-01-0703.
- [27] Fast-Charging Protocols Design of Lithium-Ion Battery: A Multiple-Objective Bayesian Optimization Perspective // *IEEE Transactions on Transportation Electrification*. — 2025.
- [28] Physics-informed neural network for co-estimation of state of health, remaining useful life, and short-term degradation path in Lithium-ion batteries // *Applied Energy*. — 2025. — Vol. 398. — P. 126427.
- [29] A temperature- and impedance-aware LSTM–PINN framework for physically consistent battery SOH prediction // *Scientific Reports*. — 2026. — Vol. 16. — Art. 7568. — DOI: 10.1038/s41598-026-37850-y.
- [30] Singh, A. Explainable OptiCNN-SLSTM hybrid model for enhanced lithium-ion battery state of health prediction / A. Singh [et al.] // *Scientific Reports*. — 2025. — Vol. 15. — Art. 44364. — DOI: 10.1038/s41598-025-28091-6.
- [31] Battery state of health estimation using deep transfer learning on short-term charging data // *Measurement*. — 2025. — Vol. 256, Part B. — Art. 118233.
- [32] Edge J. S., O'Kane S., Prosser R. et al. Lithium ion battery degradation: what you need to know // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2021. Vol. 23. P. 8200-8221.
- [33] Zhang X., Cheng X., Zhang Q. Advances in interfaces between Li metal anode and electrolyte // *Advanced Materials Interfaces*. 2018. Vol. 5. № 2. 1701097.
- [34] Shen L., Chen H., He H. et al. Design and optimization of lithium-ion battery electrode parameters based on a pseudo-three-dimensional model // *Energy Technology*. 2020. Vol. 8. № 9. 2000377.

- [35] Kupper C., Weißhar B., Reißmann S. et al. End-of-line prediction of battery cycle life based on empirical analysis and machine learning // Journal of Power Sources. 2023. Vol. 556. 232397.
- [36] Schmuch R., Wagner R., Hörpel G. et al. Performance and cost of materials for lithium-based rechargeable automotive batteries // Nature Energy. 2018. Vol. 3. P. 267-278.
- [37] Li P., Zhao G., Zheng X. et al. Recent progress on silicon-based anode materials for practical lithium-ion battery applications // Energy Storage Materials. 2018. Vol. 15. P. 422-446.
- [38] Zhang S.S. Problems and their origins of Ni-rich layered oxide cathode materials // Energy Storage Materials. 2020. Vol. 24. P. 247-254.
- [39] Doyle M., Fuller T. F., Newman J. Modeling of Galvanostatic Charge and Discharge of the Lithium/Polymer/Insertion Cell // Journal of the Electrochemical Society. 1993. Vol. 140. P. 1526-1533.
- [40] Deshpande R., Verbrugge M., Cheng Y.-T. et al. Battery cycle life prediction with coupled chemical degradation and fatigue mechanics // Journal of the Electrochemical Society. 2012. Vol. 159. № 10. P. A1730-A1738.
- [41] Single F., Latz A., Horstmann B. Identifying the mechanism of continued growth of the solid-electrolyte interphase // ChemSusChem. 2018. Vol. 11. № 12. P. 1950-1955.
- [42] Chen C., Zuo Y., Ye W. et al. A critical review of machine learning of energy materials // Advanced Energy Materials. 2020. Vol. 10. № 8. P. 1903242.
- [43] Severson K.A., Attia P.M., Jin N. et al. Data-driven prediction of battery cycle life before capacity degradation // Nature Energy. 2019. Vol. 4. P. 383-391.
- [44] Roman D., Saxena S., Robu V. et al. Machine learning pipeline for battery state-of-health estimation // Nature Machine Intelligence. 2021. Vol. 3. P. 447-456.
- [45] Merchant, A. et al. Scaling deep learning for materials discovery // Nature. 2023. Vol. 624. P. 80-85.
- [46] Sui, X., He, S., Vilsen, S. B., Meng, J., Teodorescu, R., & Stroe, D.-I. (2021). A review of non-probabilistic machine learning-based state of health estimation

- techniques for Lithium-ion battery. *Applied Energy*, 300, 117346.
<https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2021.117346>
- [47] Savitzky, A., Golay, M. J. E. Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures // *Analytical Chemistry*. 1964. Vol. 36. № 8. P. 1627-1639.
 - [48] Han B, Sun X, Wang Y, Song Y, Hou E, Wang J, Xu Y. State of health estimation for lithium-ion batteries based on differential thermal voltammetry features and particle swarm optimization-gated recurrent unit. *PLoS One*. 2026 Apr 21;21(4):e0342942. doi: 10.1371/journal.pone.0342942
 - [49] Iwana, B. K., Uchida, S. An empirical survey of data augmentation for time series classification with neural networks // *PLOS ONE*. 2021. Vol. 16. № 7. e0254841.
 - [50] Chemali, E. et al. State-of-charge estimation of li-ion batteries using deep neural networks: A machine learning approach // *Journal of Power Sources*. 2018. Vol. 400. P. 242-255.
 - [51] Landesfeind J., Gasteiger H. A. Temperature and Concentration Dependence of the Ionic Transport Properties of Lithium-Ion Battery Electrolytes // *Journal of The Electrochemical Society*. 2019. Vol. 166. № 14. P. A3079-A3097.
 - [52] Rumpf K., Naumann M., Jossen A. Experimental investigation of parametric cell-to-cell variation and correlation based on 1100 commercial lithium-ion cells // *Journal of Energy Storage*. 2017. T. 14. C. 224-243.
 - [53] Li J., Fleetwood J., Hawley W. B. et al. From Materials to Cell: State-of-the-Art and Prospective Technologies for Lithium-Ion Battery Electrode Processing // *Chemical Reviews*. 2022. Vol. 122. № 1. P. 903-956.
 - [54] Kim J.-H., Kim S.-J., Yuk T. et al. Empirical modeling of lithium-ion batteries based on electrochemical impedance spectroscopy // *Journal of Power Sources*. 2018. Vol. 375. P. 1-12.
 - [55] Meng, Wei & Ye, Min & Wang, Qiao & Wu, Chenguang & Ma, Yuchuan. (2021). State-of-health estimation and remaining useful life prediction of lithium-

- ion batteries based on extreme learning machine. Journal of Physics: Conference Series. 1983. 012058. 10.1088/1742-6596/1983/1/012058.
- [56] Митягин Д.О. Системный гибридный подход к проектированию накопителей энергии: анализ ограничений существующих методов и пути интеграции // Инженерный вестник Дона. - 2026.- №2.
- [57] Kabir, M. M., Demirocak, D. E. Degradation mechanisms in Li-ion batteries: a state-of-the-art review // International Journal of Energy Research. 2017. Vol. 41. № 14. P. 1963-1986.
- [58] Xiong, R. et al. A systematic model-based degradation behavior recognition and health prediction of lithium-ion batteries // Applied Energy. 2018. Vol. 226. P. 1170-1185.
- [59] Sendek, A. D. et al. Machine learning-assisted discovery of solid Li-ion conducting materials // Chemistry of Materials. 2017. Vol. 29. № 1. P. 281-289.
- [60] Xu K. Electrolytes and interphases in Li-ion batteries and beyond // Chemical Reviews. 2014. Vol. 114. № 23. P. 11503-11618.
- [61] Goodenough J. B., Kim Y. Challenges for rechargeable Li batteries // Chemistry of Materials. 2010. Vol. 22. № 3. P. 587-603.
- [62] Duffner F., Kronmeyer N., Tübke J. et al. Post-lithium-ion battery cell production and its compatibility with lithium-ion cell production infrastructure // Nature Energy. 2021. Vol. 6. P. 123-134.
- [63] Blomgren G. E. The development and future of lithium ion batteries // Journal of The Electrochemical Society. 2017. Vol. 164. № 1. P. A5019-A5025.
- [64] Manthiram A. An outlook on lithium ion battery technology // ACS Central Science. 2017. Vol. 3. № 10. P. 1063-1069.
- [65] Heiskanen, S. K. et al. Generation and evolution of the solid electrolyte interphase of lithium-ion batteries // Joule. 2019. Vol. 3. № 10. P. 2322-2333.
- [66] Zeng, X. et al. Commercialization of Lithium Battery Technologies for Electric Vehicles // Advanced Energy Materials. 2019. Vol. 9. № 27. 1900161.

- [67] Shearing P, Johnson L. Toward Practical Demonstration of High-Energy-Density Batteries. *Joule*, 4, 1359-1361
- [68] Hosaka T, Matsuyama T, Tatara R, Gossage ZT, Komaba S. Impact of electrolyte decomposition products on the electrochemical performance of 4 V class K-ion batteries. *Chem Sci*. 2023 Jul 12;14(33):8860-8868. doi: 10.1039/d3sc02111d.
- [69] Transition metal dissolution and deposition in Li-ion batteries investigated by operando X-ray absorption spectroscopy. J Wandt, A Freiberg, R Thomas, Y Gorlin, A Siebel, R Jung, HA Gasteiger, et al. *Journal of Materials Chemistry A* 4 (47), 18300-18305
- [70] Armand, M. et al. Lithium-ion batteries - Current state of the art and anticipated developments // *Journal of Power Sources*. 2020. Vol. 479. 228708.
- [71] Li M. et al. 30 Years of Lithium-Ion Batteries // *Advanced Materials*. 2018. T. 30. № 33.
- [72] Goodenough, J. B. How we made the Li-ion rechargeable battery // *Nature Electronics*. 2018. Vol. 1. № 3. P. 204.
- [73] Whittingham, M. S. Lithium batteries: 50 years of advances to address the next 20 years of climate issues // *Nano Letters*. 2020. Vol. 20. № 12. P. 8435-8440.
- [74] von Aspern, N. et al. Fluorine and lithium: Ideal partners for high-performance battery electrolytes // *Angewandte Chemie International Edition*. 2019. Vol. 58. № 45. P. 15978-16000.
- [75] Митягин Д.О. Системный подход к созданию литий-ионных аккумуляторов: связь основных компонентов батареи и принцип работы // *Инженерный вестник Дона*. - 2025.- №11
- [76] Митягин Д.О. Системный подход к созданию ячеек в системах накопления энергии: влияние входных параметров и деградационных процессов на выходные характеристики ячейки // *Научно-технический вестник Поволжья*. – 2025. - №11.– С. 107-110.

- [77] Vetter J., Novák P., Wagner M. R. et al. Ageing mechanisms in lithium-ion batteries // *Journal of Power Sources*. 2005. Vol. 147. № 1-2. P. 269-281.
- [78] Waldmann T., Hogg B.-I., Wohlfahrt-Mehrens M. Li plating as unwanted side reaction in commercial Li-ion cells - A review // *Journal of Electrochemical Society*. 2018. Vol. 165. № 10. P. A1813-A1822.
- [79] Duffner F., Mauler L., Wentker M. et al. Large-scale automotive battery cell manufacturing: Analyzing strategic and operational effects on manufacturing costs // *International Journal of Production Economics*. 2021. Vol. 232. P. 107982.
- [80] Feng X., Ouyang M., Liu X. et al. Thermal runaway mechanism of lithium ion battery for electric vehicles: A review // *Energy Storage Materials*. 2018. Vol. 10. P. 246-267.
- [81] Keil P., Jossen A. Charging protocols for lithium-ion batteries and their impact on cycle life-An overview // *Journal of Energy Storage*. 2016. Vol. 6. P. 125-141.
- [82] Landesfeind J. et al. Tortuosity Determination of Battery Electrodes and Separators by Impedance Spectroscopy // *Journal of The Electrochemical Society*. 2016. T. 163. № 7. C. A1373-A1387.
- [83] Richard M. L., Dahn J. R. Accelerated rate calorimetry study of the effect of binder type on the thermal stability of a lithiated graphite electrode // *Journal of The Electrochemical Society*. 1999. Vol. 146. № 6. P. 2068-2077.
- [84] Li, M. et al. Fast charging of lithium-ion batteries: A review of materials aspects // *Advanced Materials*. 2022. Vol. 34. № 22. 2109030.
- [85] Weiss, M. et al. Fast charging of lithium-ion batteries: a review of the limitations and recent developments // *Journal of Power Sources*. 2021. Vol. 511. 230439.
- [86] Huang, W., Ye, Y., Chen, H. et al. Onboard early detection and mitigation of lithium plating in fast-charging batteries. *Nat Commun* 13, 7091 (2022). <https://doi.org/10.1038/s41467-022-33486-4>
- [87] Prashant P. Gargh, Abhishek Sarkar, Ikenna C. Nlebedim, Pranav Shrotriya. Lithium plating induced degradation during fast charging of batteries subjected to

- compressive loading. *Journal of Energy Storage*, Volume 84, Part B, 2024, 110701. <https://doi.org/10.1016/j.est.2024.110701>.
- [88] Hu, Xiaosong & Li, Shengbo & Peng, Huei. (2012). A comparative study of equivalent circuit models for Li-ion batteries. *Journal of Power Sources*. 198. 359–367. 10.1016/j.jpowsour.2011.10.013.
- [89] Hu X., Xu L., Lin X. et al. Battery lifetime prognostics // *Joule*. 2020. Vol. 4. № 2. P. 310-346.
- [90] Hannan, M. A. & Hossain Lipu, M. S. & Hussain, Aini & Mohamed, Azah. (2017). 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. 834-854. 10.1016/j.rser.2017.05.001.
- [91] Omariba, Zachary & Zhang, Lijun & Sun, Dongbai. (2018). Review on Health Management System for Lithium-Ion Batteries of Electric Vehicles. *Electronics*. 7. 10.3390/electronics7050072.
- [92] Liang, Tongyi & Song, Lingjun. (2018). On-Board State of Health Estimation of Lithium Ion Batteries With Incremental Capacity Analysis Based on Gaussian Function. V06AT08A058. 10.1115/IMECE2018-86902.
- [93] Sterjova, Marija & Minovski, Dragan & Sarac, Vasilija. (2021). BATTERY ENERGY STORAGE SYSTEMS AND TECHNOLOGIES: A REVIEW. First International Conference ETIMA At: GOCE DELCEV UNIVERSITY, SHTIP, NORTH MACEDONIA.
- [94] Ren, Zhong & Du, Changqing. (2023). A review of machine learning state-of-charge and state-of-health estimation algorithms for lithium-ion batteries. *Energy Reports*. 9. 2993-3021. 10.1016/j.egyr.2023.01.108.
- [95] Tran, Manh-Kien & Panchal, Satyam & Tran, Khang & Panchal, Kirti & Fraser, Roydon & Fowler, Michael. (2022). Concept Review of a Cloud-Based Smart Battery Management System for Lithium-Ion Batteries: Feasibility, Logistics, and Functionality. *Batteries*. 8. 19. 10.3390/batteries8020019.

- [96] Khan, Mujeev & Saib, Mohd & Ahmed, Nasim & Ahmad, Naseem. (2022). Design Engineering State-of-Charge estimation using a Deep Learning Neural Network for Lithium-ion Batteries. Design Engineering (Toronto).
- [97] Vidal, C. et al. Machine learning applied to electrified vehicle battery state of charge and state of health estimation: State-of-the-art // IEEE Access. 2020. Vol. 8. P. 52796-52814.
- [98] Berecibar M., Gandiaga I., Villarreal I. et al. Critical review of state of health estimation methods of Li-ion batteries for real applications // Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2016. Vol. 56. P. 572-587.
- [99] Gallagher K. G., Dees D. W., Jansen A. N. et al. Optimizing areal capacities through understanding the limitations of lithium-ion electrodes // Journal of The Electrochemical Society. 2016. Vol. 163. № 2. P. A138-A149.
- [100] Janek, J., Zeier, W. G. A solid future for battery development // Nature Energy. 2016. Vol. 1. № 9. 16141.
- [101] Hwang, J. Y. et al. Sodium-ion batteries: present and future // Chemical Society Reviews. 2017. Vol. 46. № 12. P. 3529-3614.
- [102] Randau, S. et al. Benchmarking the performance of all-solid-state lithium batteries // Nature Energy. 2020. Vol. 5. № 3. P. 259-270.
- [103] CHEN X, FU Z-H, GAO Y-C, et al. Machine Learning in Lithium Battery Solid-State Electrolytes. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2023, 51(2): 488-498. <https://doi.org/10.14062/j.issn.0454-5648.20220818>
- [104] Xinye Zhao, Yaosen Tian, Zhengyan Lun, Zijian Cai, Tina Chen, Bin Ouyang, Gerbrand Ceder. Design principles for zero-strain Li-ion cathodes. Joule, Volume 6, Issue 7. 2022, Pages 1654-1671. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2022.05.018>.
- [105] Albertus, P. et al. Status and challenges in enabling the lithium metal electrode for high-energy and low-cost rechargeable batteries // Nature Energy. 2018. Vol. 3. № 1. P. 16-21.
- [106] Pasta, M. et al. 2020 roadmap on solid-state batteries // Journal of Physics: Energy. 2020. Vol. 2. № 3. 032008.

- [107] Митягин Д.О., Кривоножко В.Е., Артюхов В.И. Функциональная декомпозиция процесса преобразования энергии в гибридных накопительных системах: методология и перспективы применения// Инженерный вестник Дона. - 2026.- №4.
- [108] Winter M., Barnett B., Xu K. Before Li Ion Batteries // Chemical Reviews. 2018. Vol. 118. № 23. P. 11433–11456.
- [109] Kwade A., Haselrieder W., Leithoff R., et al. Current status and challenges for automotive battery production technologies // Nature Energy. 2018. Vol. 3. P. 290–300.
- [110] Liu K., Li K., Peng Q., et al. A brief review on key technologies in the battery management system of electric vehicles // Frontiers of Mechanical Engineering. 2019. Vol. 14. P. 47-64
- [111] Li, L., Zhang, X., Li, M. et al. The Recycling of Spent Lithium-Ion Batteries: a Review of Current Processes and Technologies. *Electrochem. Energ. Rev.* **1**, 461–482 (2018). <https://doi.org/10.1007/s41918-018-0012-1>
- [112] Kim, Cheon-Soo & Jeong, Kyeong-Min & Kim, Keon & Yi, Cheol-Woo. (2015). Effects of Capacity Ratios between Anode and Cathode on Electrochemical Properties for Lithium Polymer Batteries. *Electrochimica Acta*. 155. 431-436. 10.1016/j.electacta.2014.12.005.
- [113] Nitta, Naoki & Wu, Feixiang & Lee, Jung & Yushin, Gleb. (2014). Li ion Battery Materials: Present and Future. *Materials Today*. 18. 10.1016/j.mattod.2014.10.040.
- [114] Митягин Д.О. Применение регрессионного анализа в изучении свойств литий-ионных аккумуляторов// Сборник научных трудов "Актуальные исследования РТУ МИРЭА - 2025: ИПТИП. М.: РТУ МИРЭА, 2025. С. 464-470.
- [115] Sang, C., Ni, R., Xie, Z. et al. Battery design toward fast charging technology: a parametric survey. *Ionics* 28, 3301–3320 (2022). <https://doi.org/10.1007/s11581-022-04589-1>

- [116] Швецов А. С., Зарубин А. Н., Тесля В. И. Математическое моделирование процессов токообразования и анализ эффективности работы пористых электродов // Электрохимическая энергетика. 2007. №2. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/matematicheskoe-modelirovanie-protsessov-tokoobrazovaniya-i-analiz-effektivnosti-raboty-poristyh-elektrodiv>
- [117] Saha, B., Goebel, K. Battery Data Set. NASA Ames Prognostics Data Repository. 2007.
- [118] Wei He, Nicholas Williard, Michael Osterman, Michael Pecht. Prognostics of lithium-ion batteries based on Dempster–Shafer theory and the Bayesian Monte Carlo method., Journal of Power Sources, 196(23), pp.10314-10321, 2011.
- [119] Yinjiao Xing, Eden Ma, Kwok Leung Tsui, Michael Pecht. An Ensemble Model for Predicting the Remaining Useful Performance of Lithium-ion Batteries., Microelectronics Reliability, 53(6), pp.811-820, 2013.
- [120] Nick Williard, Wei He, Michael Osterman, and Michael Pecht. Comparative Analysis of Features for Determining State of Health in Lithium-Ion Batteries. International Journal of Prognostics and Health Management, 4, pp.1-7, 2013.
- [121] Fangdan Zheng, Yinjiao Xing, Jiuchun Jiang, Bingxiang Sun, Jonghoon Kim, Michael 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.
- [122] Wahanani, Nursinta & Purwaningsih, Anik & Setiadipura, Topan. (2009). Journal of Theoretical and Computational Studies Latin Hypercube Sampling for uncertainty analysis.
- [123] . Attia P.M., Grover A., Jin N., et al. Closed-loop optimization of fast-charging protocols for batteries with machine learning // Nature. 2020. Vol. 578. P. 397–402.
- [124] Kuksenko, Serhii & Tarasenko, Yuriy & Kovalenko, Igor & Kartel, Mykola. (2009). A Carbon Coating of Micro- and Nanosilicon: Progress of Silicon Anode Materials for Li-Ion Batteries. 15. 144-153.
- [125] Yang F., Wang D., Zhao Y., et al. A study of the relationship between coulombic efficiency and capacity degradation of commercial lithium-ion batteries // Energy. 2018. Vol. 145. P. 486–495.

- [126] Кораблев Юрий Анатольевич. Прогнозирование остаточного срока полезного использования технологического оборудования методом глубокого обучения LSTM // Известия ЮФУ. Технические науки. 2025. №5 (247). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/prognozirovanie-ostatochnogo-sroka-poleznogo-ispolzovaniya-tehnologicheskogo-oborudovaniya-metodom-glubokogo-obucheniya-lstm>
- [127] Zhang Y., Tang Q., Zhang Y., et al. Identifying degradation patterns of lithium ion batteries from impedance spectroscopy using machine learning // Nature Communications. 2020. Vol. 11. P. 1706.
- [128] Birkel, C. R., Roberts, M. R., McTurk, E. et al. Degradation diagnostics for lithium ion cells // Journal of Power Sources. 2017. Vol. 341. P. 373-386.
- [129] V Ruiz, A Pfrang, A Kriston, N Omar, P Van den Bossche, L Boon-Brett. A review of international abuse testing standards and regulations for lithium-ion batteries in electric and hybrid electric vehicles. Renewable and Sustainable Energy Reviews 81, 1427-1452 (2018)
- [130] Farmann A., Sauer D.U. A systematic review of lumped-parameter equivalent circuit models for real-time estimation of lithium-ion battery states // Journal of Power Sources. 2016. Vol. 316. P. 183-196.
- [131] Митягин Д.О. Методика отбора регрессионных и нейросетевых параметров для анализа систем накопления энергии // Научно-технический вестник Поволжья. 2025.- №12.- С.187-190.
- [132] Lipu, M. S. H., et al. "Review of state of health and remaining useful life estimation methods for lithium-ion battery in electric vehicles: Challenges and recommendations." Journal of Cleaner Production (2020): 125999
- [133] Митягин Д.О., Гостева Е.А. Определение параметров для нейросетевого прогнозирования изменения электрохимических свойств литий-ионного аккумулятора // Сборник научных трудов "Актуальные исследования РТУ МИРЭА - 2025: ИПТИП. М.: РТУ МИРЭА, 2025. С. 471-478.

- [134] Митягин Д.О. Анализ деградации сохранения заряда литий-ионного аккумулятора с использованием нейросетевого прогнозирования// Сборник научных трудов "Актуальные исследования РТУ МИРЭА - 2025: ИПТИП. М.: РТУ МИРЭА, 2025. С. 478-483.
- [135] Zhang, Y., et al. "A review of machine learning in building load prediction." *Applied Energy* (2021): 117917
- [136] Li, Y., et al. "Data-driven health estimation and lifetime prediction of lithium-ion batteries: A review." *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 113 (2019): 109254
- [137] Zhang, Ming & Yang, Dongfang & Du, Jiaxuan & Sun, Hanlei & Li, Liwei & Wang, Licheng & Wang, Kai. (2023). A Review of SOH Prediction of Li-Ion Batteries Based on Data-Driven Algorithms. *Energies*. 16. 3167. 10.3390/en16073167.
- [138] Wilkinson, M. D. et al. The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship // *Scientific Data*. 2016. Vol. 3. № 1. 160018.
- [139] Kordmahale, S. B. et al. Reproducibility in battery research: A call for action // *Journal of The Electrochemical Society*. 2023. Vol. 170. № 1. 010502.
- [140] Ward, L. et al. Data-driven materials science: A review of current methods and applications // *MRS Communications*. 2021. Vol. 11. № 5. P. 531-542.
- [141] Himanen, Lauri & Geurts, A. & Foster, Adam & Rinke, Patrick. (2019). Data-Driven Materials Science: Status, Challenges, and Perspectives. *Advanced Science*. 6. 10.1002/advs.201900808.
- [142] Xiong R., Li L., Tian J. Towards a smarter battery management system: A critical review on battery state of health monitoring methods // *Journal of Power Sources*. 2018. Vol. 405. P. 18–29. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2018.10.019
- [143] Ahamed Hasib, Shahid & Islam, Shorif & Chakraborty, Ripon & Ryan, Mike & Saha, Dip & Ahamed, Md. Hafiz & Moyeen, Sumaya & Das, Sajal & Ali, Md & Robiul Islam, Md & Tasneem, Zinat & Badal, Faisal. (2021). A Comprehensive Review of Available Battery Datasets, RUL Prediction Approaches, and Advanced Battery Management. *IEEE Access*. PP. 1-1. 10.1109/ACCESS.2021.3089032.

- [144] Dong G. et al. Dynamic Bayesian Network-Based Lithium-Ion Battery Health Prognosis for Electric Vehicles // IEEE Transactions on Industrial Electronics. 2021. Vol. 68. No. 11. pp. 10949-10958.
- [145] Ma Z., Yang R., Wang Z. A novel data-model fusion state-of-health estimation approach for lithium-ion batteries // Applied Energy. 2019. Vol. 237. pp. 836-847.
- [146] Li Y. et al. Random forest regression for online capacity estimation of lithium-ion batteries // Applied Energy. 2018. Vol. 232. pp. 197-210.
- [147] Dong G. et al. Battery Health Prognosis Using Brownian Motion Modeling and Particle Filtering // IEEE Transactions on Industrial Electronics. 2018. Vol. 65. No. 11. pp. 8646-8655.
- [148] Wei J., Dong G., Chen Z. Remaining Useful Life Prediction and State of Health Diagnosis for Lithium-Ion Batteries Using Particle Filter and Support Vector Regression // IEEE Transactions on Industrial Electronics. 2018. Vol. 65. No. 7. pp. 5634-5643.
- [149] Yang J. et al. Online state-of-health estimation for lithium-ion batteries using constant-voltage charging current analysis // Applied Energy. 2018. Vol. 212. pp. 1589-1600.
- [150] Li J. et al. A single particle model with chemical/mechanical degradation physics for lithium ion battery State of Health (SOH) estimation // Applied Energy. 2018. Vol. 212. pp. 1178-1190.
- [151] Berecibar M., Devriendt F., Dubarry M., Villarreal I., Omar N., Verbeke W., Van Mierlo J. Online state of health estimation on NMC cells based on predictive analytics // Journal of Power Sources. 2016. Vol. 320. pp. 239-250.
- [152] Zou C. et al. A Framework for Simplification of PDE-Based Lithium-Ion Battery Models // IEEE Transactions on Control Systems Technology. 2016. Vol. 24. No. 5. pp. 1594-1609.
- [153] Wang D., Tsui K. L. Brownian motion with adaptive drift for remaining useful life prediction: Revisited // Mechanical Systems and Signal Processing. 2018. Vol. 99. pp. 691-701.

- [154] Zhang H. et al. Remaining Useful Life Prediction for Degradation Processes With Long-Range Dependence // IEEE Transactions on Reliability. 2017. Vol. 66. No. 4. pp. 1368-1379.
- [155] Wang D., Zhao Y., Yang F., Tsui K. L. Nonlinear-drifted Brownian motion with multiple hidden states for remaining useful life prediction of rechargeable batteries // Mechanical Systems and Signal Processing. 2017. Vol. 93. pp. 531-544.
- [156] Richardson R. R., Osborne M. A., Howey D. A. Gaussian process regression for forecasting battery state of health // Journal of Power Sources. 2017. Vol. 357. pp. 209-219.
- [157] YU Z. et al. Model Parameter Identification for Lithium Batteries Using the Coevolutionary Particle Swarm Optimization Method // IEEE Transactions on Industrial Electronics. 2017. Vol. 64. No. 7. pp. 5690-5700.
- [158] You G., Park S., Oh D. Diagnosis of Electric Vehicle Batteries Using Recurrent Neural Networks // IEEE Transactions on Industrial Electronics. 2017. Vol. 64. No. 6. pp. 4885-4893.
- [159] Lei Y. et al. A New Method Based on Stochastic Process Models for Machine Remaining Useful Life Prediction // IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement. 2016. Vol. 65. No. 12. pp. 2671-2684.
- [160] Dong G., Wei J., Chen Z. Kalman filter for onboard state of charge estimation and peak power capability analysis of lithium-ion batteries // Journal of Power Sources. 2016. Vol. 328. pp. 615-626.
- [161] Wang L. et al. On-board state of health estimation of LiFePO₄ battery pack through differential voltage analysis // Applied Energy. 2016. Vol. 168. pp. 465-472.
- [162] Chaoui H. et al. Lyapunov-Based Adaptive State of Charge and State of Health Estimation for Lithium-Ion Batteries // IEEE Transactions on Industrial Electronics. 2015. Vol. 62. No. 3. pp. 1610-1618.
- [163] Han X. et al. A comparative study of commercial lithium ion battery cycle life in electrical vehicle: Aging mechanism identification // Journal of Power Sources. 2014. Vol. 251. pp. 38-54.

- [164] Nuhic A. et al. Health diagnosis and remaining useful life prognostics of lithium-ion batteries using data-driven methods // Journal of Power Sources. 2013. Vol. 239. pp. 680-688.
- [165] Lin H. T., Liang T. J., CHEN S. Estimation of Battery State of Health Using Probabilistic Neural Network // IEEE Transactions on Industrial Informatics. 2013. Vol. 9. No. 2. pp. 679-685.
- [166] Wang W., Shu Hung Chung H., Zhang J. Near-Real-Time Parameter Estimation of an Electrical Battery Model With Multiple Time Constants and SOC-Dependent Capacitance // IEEE Transactions on Power Electronics. 2014. Vol. 29. No. 11. pp. 5905-5920.
- [167] Rahbar K. et al. Real-Time Energy Storage Management for Renewable Integration in Microgrid: An Off-Line Optimization Approach // IEEE Transactions on Smart Grid. 2015. Vol. 6. No. 1. pp. 124-134.
- [168] Ahn S. J. et al. Power Scheduling of Distributed Generators for Economic and Stable Operation of a Microgrid // IEEE Transactions on Smart Grid. 2013. Vol. 4. No. 1. pp. 398-405.
- [169] Lu, Sheng & Wang, Fei & Piao, Changhao & Ma, Yiwei. (2020). Health State Prediction of Lithium Ion Battery Based On Deep Learning Method. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 782. 032083. 10.1088/1757-899X/782/3/032083.
- [170] Wai R. et al. Intelligent Optimal Energy Management System for Hybrid Power Sources Including Fuel Cell and Battery // IEEE Transactions on Power Electronics. 2013. Vol. 28. No. 7. pp. 3231-3244.
- [171] Kim H. et al. Reconfigurable Solar Converter: A Single-Stage Power Conversion PV-Battery System // IEEE Transactions on Power Electronics. 2013. Vol. 28. No. 8. pp. 3788-3797.
- [172] Han X., et al. A review on the key issues of the lithium ion battery degradation among the whole life cycle // eTransportation. 2019. Vol. 1. P. 100005. DOI: 10.1016/j.etrans.2019.100005.
- [173] Epding B. et al. Investigation of significant capacity recovery effects due to long rest periods during high current cyclic aging tests in automotive lithium ion

- cells and their influence on lifetime // *Journal of Energy Storage*. 2019. Vol. 22. pp. 249-256.
- [174] Guo S. et al. A novel echelon internal heating strategy of cold batteries for all-climate electric vehicles application // *Applied Energy*. 2018. Vol. 219. pp. 256-263.
- [175] Mussa A. S. et al. Effects of external pressure on the performance and ageing of single-layer lithium-ion pouch cells // *Journal of Power Sources*. 2018. Vol. 385. pp. 18-26.
- [176] Wang A. et al. Review on modeling of the anode solid electrolyte interphase (SEI) for lithium-ion batteries // *npj Computational Materials*. 2018. Vol. 4. No. 1. 15
- [177] Weydanz W. J. et al. Visualization of electrolyte filling process and influence of vacuum during filling for hard case prismatic lithium ion cells by neutron imaging to optimize the production process // *Journal of Power Sources*. 2018. Vol. 380. pp. 126-134.
- [178] Heubner C., Langklotz U., Michaelis A. Theoretical optimization of electrode design parameters of Si based anodes for lithium-ion batteries // *Journal of Energy Storage*. 2018. Vol. 15. pp. 181-190.
- [179] Leng F. et al. Hierarchical degradation processes in lithium-ion batteries during ageing // *Electrochimica Acta*. 2017. Vol. 256. pp. 52-62.
- [180] Meyer C. et al. Characterization of the calendaring process for compaction of electrodes for lithium-ion batteries // *Journal of Materials Processing Technology*. 2017. Vol. 249. pp. 172-178.
- [181] Xia G., Cao L., Bi G. A review on battery thermal management in electric vehicle application // *Journal of Power Sources*. 2017. Vol. 367. pp. 90-105.
- [182] Chu Z. et al. Non-destructive fast charging algorithm of lithium-ion batteries based on the control-oriented electrochemical model // *Applied Energy*. 2017. Vol. 204. pp. 1240-1250.
- [183] An S. J. et al. Fast formation cycling for lithium ion batteries // *Journal of Power Sources*. 2017. Vol. 342. pp. 846-852.

- [184] Zhao Y. et al. Preventing lithium ion battery failure during high temperatures by externally applied compression // Journal of Energy Storage. 2017. Vol. 13. pp. 296-303.
- [185] Pastor Fernández C. et al. A Study of Cell-to-Cell Interactions and Degradation in Parallel Strings: Implications for the Battery Management System // Journal of Power Sources. 2016. Vol. 329. pp. 574-585.
- [186] Banerjee A. et al. Increasing the durability of Li-ion batteries by means of manganese ion trapping materials with nitrogen functionalities // Journal of Power Sources. 2017. Vol. 341. pp. 457-465.
- [187] Yang L. et al. Energy regulating and fluctuation stabilizing by air source heat pump and battery energy storage system in microgrid // Renewable Energy. 2016. Vol. 95. pp. 202-212.
- [188] Su X. et al. A new strategy to mitigate the initial capacity loss of lithium ion batteries // Journal of Power Sources. 2016. Vol. 324. pp. 150-157.
- [189] Ouyang M. et al. Determination of the battery pack capacity considering the estimation error using a Capacity–Quantity diagram // Applied Energy. 2016. Vol. 177. pp. 384-392.
- [190] Harward University Dataset. URL:
<https://dataverse.harvard.edu/dataverse/harvard>
- [191] Khan, M.A., Thatipamula, S., Tresca, L. et al. High-power lithium-ion battery characterization dataset for stochastic battery modeling. Sci Data 12, 1506 (2025). <https://doi.org/10.1038/s41597-025-05725-y>
- [192] An S. J. et al. The state of understanding of the lithium-ion-battery graphite solid electrolyte interphase (SEI) and its relationship to formation cycling // Carbon. 2016. Vol. 105. pp. 52-76.
- [193] Chen L. et al. Prediction of lithium-ion battery capacity with metabolic grey model // Energy. 2016. Vol. 106. pp. 662-672.
- [194] Dubarry M., Devie A., Liaw B. Y. Cell-balancing currents in parallel strings of a battery system // Journal of Power Sources. 2016. Vol. 321. pp. 36-46.

- [195] Shi W. et al. Effects of imbalanced currents on large-format LiFePO₄/graphite batteries systems connected in parallel // Journal of Power Sources. 2016. Vol. 313. pp. 198-204.
- [196] Fan G. et al. Modeling of Li-Ion Cells for Fast Simulation of High C-Rate and Low Temperature Operations // Journal of the Electrochemical Society. 2016. Vol. 163. No. 5. p. A666-A676.
- [197] Wang C., Zhang G., Ge S., Xu T., Ji Y., Yang X. G., Leng Y. Lithium-ion battery structure that self-heats at low temperatures // Nature. 2016. Vol. 529. No. 7587. pp. 515-518.
- [198] Dai Y., Srinivasan V. On Graded Electrode Porosity as a Design Tool for Improving the Energy Density of Batteries // Journal of the Electrochemical Society. 2015. Vol. 163. No. 3. p. A406-A416.
- [199] Ge H. et al. Temperature-Adaptive Alternating Current Preheating of Lithium-Ion Batteries with Lithium Deposition Prevention // Journal of the Electrochemical Society. 2015. Vol. 163. No. 2. p. A290-A299.
- [200] Gauthier M. et al. Electrode–Electrolyte Interface in Li-Ion Batteries: Current Understanding and New Insights // Journal of Physical Chemistry Letters. 2015. Vol. 6. No. 22. pp. 4653-4672.
- [201] Bauer W. et al. Influence of dry mixing and distribution of conductive additives in cathodes for lithium ion batteries // Journal of Power Sources. 2015. Vol. 288. pp. 359-367.
- [202] Ouyang M. et al. Low temperature aging mechanism identification and lithium deposition in a large format lithium iron phosphate battery for different charge profiles // Journal of Power Sources. 2015. Vol. 286. pp. 309-320.
- [203] Zhao J. et al. Artificial Solid Electrolyte Interphase-Protected Li_xSi Nanoparticles: An Efficient and Stable Prelithiation Reagent for Lithium-Ion Batteries // Journal of the American Chemical Society. 2015. Vol. 137. No. 26. pp. 8372-8375.

- [204] Westphal B. et al. Influence of Convective Drying Parameters on Electrode Performance and Physical Electrode Properties // ECS Transactions. 2015. Vol. 64. No. 22. pp. 57-68.
- [205] Burns J. C., Stevens D. A., Dahn J. R. In-Situ Detection of Lithium Plating Using High Precision Coulometry // Journal of the Electrochemical Society. 2015. Vol. 162. No. 6. p. A959-A964.
- [206] Domi Y. et al. Effects of Cyclic Ether Addition on Intercalation/De-Intercalation Reactions of Lithium Ion at Graphite in Mn-Ion-Containing Electrolyte Solutions // Journal of the Electrochemical Society. 2016. Vol. 163. No. 8. p. A1607-A1611.
- [207] Shilina Y. et al. Combined Electron Paramagnetic Resonance and Atomic Absorption Spectroscopy/Inductively Coupled Plasma Analysis As Diagnostics for Soluble Manganese Species from Mn-Based Positive Electrode Materials in Li-ion Cells // Analytical Chemistry. 2016. Vol. 88. No. 8. pp. 4440-4447.
- [208] Banerjee A. et al. Improving Stability of Li-Ion Batteries by Means of Transition Metal Ions Trapping Separators // Journal of the Electrochemical Society. 2016. Vol. 163. No. 6. p. A1083-A1094.
- [209] Wood D. L., Li J., Daniel C. Prospects for reducing the processing cost of lithium ion batteries // Journal of Power Sources. 2015. Vol. 275. pp. 234-242.
- [210] Hausbrand R. et al. Fundamental degradation mechanisms of layered oxide Li-ion battery cathode materials: Methodology, insights and novel approaches // Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology. 2015. Vol. 192. pp. 3-25.
- [211] Zhang J. et al. Internal heating of lithium-ion batteries using alternating current based on the heat generation model in frequency domain // Journal of Power Sources. 2015. Vol. 273. pp. 1030-1037.
- [212] Gyenes B. et al. Understanding Anomalous Behavior in Coulombic Efficiency Measurements on Li-Ion Batteries // Journal of the Electrochemical Society. 2014. Vol. 162. No. 3. p. A278-A283.

- [213] Agubra V., Fergus J. W. The formation and stability of the solid electrolyte interface on the graphite anode // *Journal of Power Sources*. 2014. Vol. 268. pp. 153-162.
- [214] Golmon S., Maute K., Dunn M. L. A design optimization methodology for Li+ batteries // *Journal of Power Sources*. 2014. Vol. 253. pp. 239-250.
- [215] Li Z. et al. A review of lithium deposition in lithium-ion and lithium metal secondary batteries // *Journal of Power Sources*. 2014. Vol. 254. pp. 168-182.
- [216] Omar N. et al. Lithium iron phosphate based battery – Assessment of the aging parameters and development of cycle life model // *Applied Energy*. 2014. Vol. 113. pp. 1575-1585.
- [217] Cannarella J., Arnold C. B. Stress evolution and capacity fade in constrained lithium-ion pouch cells // *Journal of Power Sources*. 2014. Vol. 245. pp. 745-751.
- [218] Eddahech A., Briat O., Vinassa J. Lithium-ion battery performance improvement based on capacity recovery exploitation // *Electrochimica Acta*. 2013. Vol. 114. pp. 750-757.
- [219] Barré A. et al. A review on lithium-ion battery ageing mechanisms and estimations for automotive applications // *Journal of Power Sources*. 2013. Vol. 241. pp. 680-689.
- [220] Dubarry M. et al. Synthesize battery degradation modes via a diagnostic and prognostic model // *Journal of Power Sources*. 2012. Vol. 219. pp. 204-216.
- [221] Haselrieder W. et al. Impact of the Calendering Process on the Interfacial Structure and the Related Electrochemical Performance of Secondary Lithium-Ion Batteries // *ECS Transactions*. 2013. Vol. 50. No. 26. pp. 59-70.
- [222] Lu L. et al. A review on the key issues for lithium-ion battery management in electric vehicles // *Journal of Power Sources*. 2013. Vol. 226. pp. 272-288.
- [223] Митягин Д.О. Прогнозирование состояния здоровья системы накопления энергии с использованием машинного обучения на основе определения полезных признаков временных последовательностей // *Программные системы и вычислительные методы*. 2025. № 4. С. 118-129. DOI: 10.7256/2454-0714.2025.4.76771.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Акт внедрения результатов диссертационного исследования.

УТВЕРЖДАЮ:
Директор по науке
ООО НПО «ТЕПЛОВИЗОР»
В.С. Коптев
2026г.



АКТ

внедрения результатов диссертационного исследования Митягина Даниила Олеговича на тему «Обоснование и выбор конструктивно-технологических параметров систем накопления энергии с использованием моделей прогнозной аналитики»

Комиссия в составе:

Демин Е.Н. – председатель комиссии;

Лозинский А.В. – член комиссии;

Поляков А.В. – член комиссии

подтверждает, что результаты диссертационного исследования были использованы при разработке и внедрении на нашем проливочном оборудовании аккумуляторного питания. Применение программно-реализованного инструмента на основе задания пользовательских предпочтений и пороговых ограничений позволило снизить количество аналитических операций и обосновать выбор системы накопления энергии для дальнейшего применения. Выбранная конфигурация системы накопления энергии использовалась в дальнейшем при проливке теплосчетчиков и расходомеров для улучшения их метрологических характеристик.

Председатель комиссии:

Демин Е.Н.

Члены комиссии:

Лозинский А.В.

Поляков А.В.