

基于数据驱动方法锂离子电池多物理场耦合模型的降阶及参数辨识研究

潘佳琪¹, 纪金鸿², 鲍英超³

1. 海南师范大学, 海南 海口 571158

2. 万向一二三股份公司, 浙江 杭州 311215

3. 杭州猎板科技有限公司, 浙江 杭州 310015

DOI: 10.61369/SSSD.2025170040

摘要 : 针对电动汽车需求增长对电池模型精度的要求, 本研究构建了整合电化学、老化与热现象的锂离子电池综合耦合机理模型, 以保障电池性能、安全性及使用寿命。为解决模型中大量未知参数的辨识问题, 研究采用数据驱动方法展开参数优化: 首先通过拉丁超立方抽样生成多样化参数组合, 基于该组合仿真耦合机理模型以获取宏观响应数据集; 随后利用该数据集训练人工神经网络构建元模型, 显著提升优化效率; 再经敏感性分析筛选出关键影响参数; 最后采用遗传算法优化参数, 最小化模型预测值与实验数据的偏差。结果显示, 在33个模型参数中, 9个高敏感性参数与10个中敏感性参数对模型输出影响显著; 优化后模型在电压、温度、容量仿真中的平均绝对误差分别为0.0147、0.2132、0.0163。研究证实所提方法具备高准确性与有效性, 为锂离子电池建模提供了稳健高效的解决方案。

关键词 : 锂离子电池; 日历老化; 电化学 – 热耦合机理模型; 参数辨识

Research on Order Reduction and Parameter Identification of Multi Physics Field Coupling Model for Lithium-Ion Batteries Based on Data-Driven Methods

Pan Jiaqi¹, Ji Jinhong², Bao Yingchao³

1. Hainan Normal University, Haikou, Hainan 571158

2. Wanxiang A123 Systems Corp., Hangzhou Zhejiang 311215

3. Hangzhou PCBHUNT Technology Co., Ltd., Hangzhou Zhejiang 310015

Abstract : In response to the increasing demand for electric vehicles and the requirement for battery model accuracy, this study constructs a comprehensive coupling mechanism model of lithium-ion batteries that integrates electrochemical, aging, and thermal phenomena to ensure battery performance, safety, and service life. To solve the problem of identifying a large number of unknown parameters in the model, a data-driven approach is adopted for parameter optimization. Firstly, a diversified parameter combination is generated through Latin hypercube sampling, and a coupling mechanism model is simulated based on this combination to obtain a macroscopic response dataset; Subsequently, the dataset was used to train an artificial neural network to construct a meta model, significantly improving optimization efficiency; Further screening key influencing parameters through sensitivity analysis; Finally, genetic algorithm is used to optimize parameters and minimize the deviation between model predictions and experimental data. The results showed that among the 33 model parameters, 9 high-sensitivity parameters and 10 medium sensitivity parameters had a significant impact on the model output; The average absolute errors of the optimized model in voltage, temperature, and capacity simulations are 0.0147, 0.2132, and 0.0163, respectively. The research confirms that the proposed method has high accuracy and effectiveness, providing a robust and efficient solution for modeling lithium-ion batteries.

Keywords : lithium-ion battery; calendar aging; electrochemical thermal coupling mechanism model; parameter identification

引言

锂离子电池 (LIBs) 因其优异的能量密度、无记忆效应和低自放电率等优点，被广泛应用于电动汽车和储能系统中^[1, 2]。LIBs 的老化源于充放电循环过程中不可逆的电化学反应和物理结构变化，这会导致电池容量下降和安全性降低。这种退化会缩短车辆续航里程、削弱动力性能，并加剧热安全风险，甚至可能引发燃烧或爆炸。例如，随着电池老化，负极动力学性能的恶化会导致在充电电流或截止电压未作调整的情况下发生锂沉积和枝晶生长，从而显著降低容量并增加安全隐患。因此，准确监测 LIBs 的运行状态并实施合适的管理和维护策略，对于确保其安全高效使用以及延长使用寿命至关重要^[3-5]。

近期研究强调了三种主要的 LIBs 状态评估策略：实验测试、数据驱动分析和建模。实验测试包括测量电池开路电压 (OCV) 以评估荷电状态 (SOC)，测定内阻以获取健康状态 (SOH) 信息，以及采用库仑计数法追踪电荷变化。这些方法虽然简单直接，但仅能提供有限的电池状态概览，因为它们无法直接测量 SOC 和 SOH 等关键参数，而必须通过间接变量进行评估。这些测试通常在实验室进行，耗时过长，无法提供实时反馈或获取内部参数。另一方面，数据驱动技术通过分析运行数据来识别电池性能中复杂的非线性和多变量特征模式，使其在状态评估方面具有强大潜力^[6-8]。然而，数据驱动方法高度依赖于数据的质量和数量，而获取覆盖广泛运行和边界条件的电池历史运行数据仍然十分困难。此外，作为一种“黑箱”模型，数据驱动方法缺乏直观的物理解释，难以理解模型输出的原因，也无法为电池更精细的老化缓解和安全设计提供指导。

为了克服这些挑战，并提升机理模型在电池管理系统中的实际应用价值，本研究创新性地将电池老化机理和温度效应集成到 P2D 模型中，构建了一个全面的锂离子电池电 – 老化 – 热耦合机理模型 (ECAT)。此外，引入人工神经网络 (ANN) 作为复杂机理模型的高效近似器，通过构建耦合机理模型的元模型 (meta-model)，实现了对电池性能响应的快速准确预测。随后，通过引入敏感性分析，识别出对模型输出影响最大的参数，从而降低多参数优化的维度，并优化计算资源的分配。最后，通过优化算法获得了使模型预测值与实验数据差异最小的模型参数。如上所述，本文的主要贡献和创新点如下：

- (1) 开发了一个耦合的 ECAT 机理模型，以全面评估 LIBs 的电性能、老化和温度效应，并提出了一种数据驱动辅助的高效模型参数辨识方法，提高了耦合机理模型的精度和动态适应性。
- (2) 提出了一种基于 ANN 的元模型构建方法。在参数辨识过程中，用元模型替代原始耦合机理模型，能有效简化建模过程，降低计算成本，同时保持预测精度。
- (3) 设计了一种结合敏感性分析和遗传算法 (GA) 的多步多目标辨识策略，协同优化电池的电压、温度和容量输出响应。该策略高效地辨识了 19 个对电池模型有显著影响的参数，从而确保了模型输出的高精度。

一、锂离子电池的电 – 老化 – 热机理模型

本文为 18650 型 LIBs 开发了一个 ECAT 耦合模型，其中 P2D 模型用于描述负极、隔膜和正极中的固相和电解液动力学。如图 1 所示，LIBs 被划分为三个不同区域，即负极 (范围从 0 到 L_n)、隔膜 (范围从 L_n 到 $L_n + L_{sep}$) 和正极 (范围从 $L_n + L_{sep}$ 到 $L_n + L_{sep} + L_p$)。多孔电极由球形颗粒组成，周围被电解液包围，在运行过程中促进锂离子 (Li^{+}) 在颗粒表面的嵌入和脱嵌。为了准确模拟电化学、热力学和老化机理之间复杂的相互作用，采用了一个三维热模型来捕捉电池内部的温度变化。

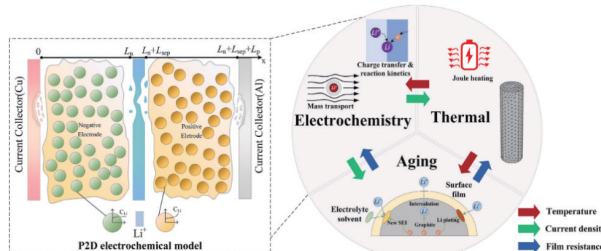


图 1. 耦合 ECAT 机理模型关系示意图

(一) 电化学模型

电荷转移方程描述了 Li^{+} 在电池电极表面的嵌入和脱嵌过程。

该过程伴随着电子的转移，是电池充放电过程中的基本反应，固相和溶液相的电荷转换方程由欧姆定律描述如下^[9]：

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-\sigma_s^{eff} \frac{\partial \phi_{s,i}}{\partial x} \right) = -a_i F j_{tot}, a_i = \frac{3\epsilon_{s,i}}{r_{e_{s,i}}} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-\sigma_e^{eff} \frac{\partial \phi_{e,i}}{\partial x} \right) + \sigma_e^{eff} \frac{2RT}{F} (1-t^+) \left(1 + \frac{d \ln f_{\pm}}{d \ln c_{e,i}} \right) \frac{\partial}{\partial x} (\ln c_{e,i}) = a_i F j_{tot} \quad (2)$$

其中， ϕ_s 和 ϕ_e 分别是固相和电解液相的电位。由于隔膜两侧的电子电流密度为零，离子电流密度即为工作电流密度；而在正负集流体末端，电子电流密度为工作电流密度，离子电流密度为零，并且负极集流体的电位被定义为零。

(二) 老化模型

本研究聚焦于两种老化机理：SEI (固体电解质界面膜) 生长和锂析出^[10]，如图 1 的老化部分所示。因此，在负极考虑了三种电化学反应：锂嵌入、SEI 形成和锂析出。嵌锂石墨反应遵循方程：



本模型的一个特点是考虑了由于表面膜生长导致的负极孔隙率降低，这可以通过以下表达式实现，该表达式将负极孔隙率的变化与表面膜厚度的增加联系起来：

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -a \frac{d\delta_{film}}{dt} \quad (4)$$

(三) 热模型

大多数电化学和老化参数都受温度影响。主要热源包括电化学产热、欧姆热、极化热和老化副反应热。鉴于温度在电池建模中起着至关重要的作用，电池温度由以下方程表示：

$$\rho C_b \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \lambda_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + q_{rev} + q_{ohm} + q_{act} + q_{film} + \lambda_b \nabla T \quad (5)$$

方程(5)中的可逆熵热(q_{rev})是由电化学反应引起的电极活性物质的熵变产生的，仅存在于正负多孔电极中。

如方程(6)所示，电池模型的热边界条件仅考虑热传导和对流，其中 λ_b 是电池的热导率， ∇T 是温度梯度， h_{conv} 是对流换热系数， T_{amb} 是设定为25°C的环境温度。

$$\lambda_b \nabla T = h_{conv} (T_{amb} - T) \quad (6)$$

(四) 模型参数分类

对电压、温度和容量输出响应进行参数辨识，以确定适用于NCM/石墨电池的合理参数值范围，确保辨识出的参数保留其物理意义。根据所建立的ECAT耦合机理模型，共有33个未知参数需要辨识。这些参数分为两大类：静态和动态，涵盖了几何、传输、动力学、浓度、热物理和老化参数。静态参数，包括不同区域的厚度 Li 、颗粒半径 R_i 、化学计量数 θ_i 、体积分数 ϵ_i 和初始 Li 离子浓度 c_i 等，在电池未发生病理性变化（如严重过热、过度老化、机械损伤等）的情况下通常保持不变。动态参数，如电极的电导率 ρ_i 、扩散系数 D_i 、电极的反应速率常数 k_i 和 Li^{+} 迁移数 t^{+} ，可能会在不同的运行条件和反应温度下发生变化。

二、数据驱动辅助的参数辨识方法

首先使用拉丁超立方采样(LHS)探索模型输入空间，对多样化样本参数进行采样。随后，在各种运行条件下进行三维计算流体动力学仿真，生成一个数据集。该数据集用于训练一个基于ANN的元模型，以模拟原始耦合机理，从而促进电池响应的快速估算。然后，通过敏感性分析筛选出对模型输出有显著影响的参数，从而降低参数辨识的维度。最后，应用GA迭代优化敏感参数，以获得最佳模型参数，并通过实验验证模型响应。

(一) 拉丁超立方采样

元模型训练数据集定义如下：令 $X=[0,1]^n$ 表示n维超立方体，即ECAT模型的输入空间，使用LHS方法对其进行采样 $x=(x_1, \dots, x_n)$ ，然后将训练输入数据排列成一个矩阵，该矩阵由N个n维输入向量组成，如下所示：

$$X = \left(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)} \right) \subseteq R^{N \times n} \quad (7)$$

(二) 训练数据集

对于给定的实验设计矩阵，有限元仿真可以求解ECAT耦合机理模型的不同输出。

$$D = \left\{ \left(x^{(i)}, M(x^{(i)}) \right), i=1, \dots, N \right\} \quad (8)$$

其中D表示收集的数据集，其中每个 $x^{(i)}$ 是N个样本中的第i个输入向量， $M(x^{(i)})$ 是对应于该输入向量的模型输出。

(三) 基于ANN的元模型

在构建元模型以模拟整个充放电循环中电池随时间变化的行为时，采用了一种基于神经网络的方法来高效处理时间序列数据。元模型的映射关系可以表示为：

$$M: x \in X \mapsto M(x); M(x) \approx M(x) \quad (9)$$

元模型能够准确预测LIBs的电压、老化和温度响应。随着更多数据的可用，模型的准确性将进一步提高。

(四) 敏感性分析

本研究使用元模型生成的数据进行敏感性分析，应用Sobol指数(SI)来衡量参数敏感性。一阶Sobol指标反映了单个参数的单独变化对输出方差的贡献。高于0.2的值表示高敏感性，0.05到0.2表示中等敏感性，低于0.05表示低敏感性。

(五) 基于遗传算法的多目标参数辨识

GA与元模型相结合为参数辨识提供了一种有效的方法。GA通过交叉和变异迭代生成新的参数组合。每个个体的适应度使用元模型进行评估。选定的参数集随后使用ECAT模型进行评估，并重新纳入训练数据。当满足ECAT模型评估过程的仿真次数达到120次或目标误差 $e < 0.01$ 时，优化终止。

三、结果与讨论

(一) 元模型验证

图2(a)展示了在1C放电倍率下，突显了参数对电压响应的影响。在图2(b)中，表明参数对温度有显著影响。图2(c)展示了基于表1中的老化参数和1C倍率循环条件的电池容量归一化老化轨迹曲线，变化范围从1到0.78。图2(d)-(f)展示了验证结果，重点关注中位数和5%-95%的范围。图2(d)显示，电压元模型的平均RMSE和MAE分别为0.0127和0.0012，表明模型具有高精度。同样，图2(e)和(f)中的平均温度和平均老化验证结果也显示出较低的RMSE(0.0712和0.0541)和MAE(0.0052和0.0071)值，进一步证实了元模型在捕捉电池行为方面的有效性。

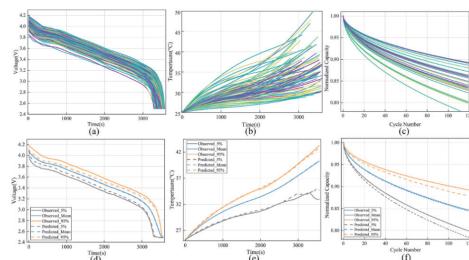


图2. (a)-(c) 不同参数下的电池仿真输出；(d)-(f) 元模型预测精度验证。

(二) 敏感性分析结果

图3显示了在恒定1C放电倍率下，每个模型参数与全局SA输出响应相关的Sobol指标。结果表明，对于电池电压响应，负极颗粒半径 R_n 的敏感性值最高。

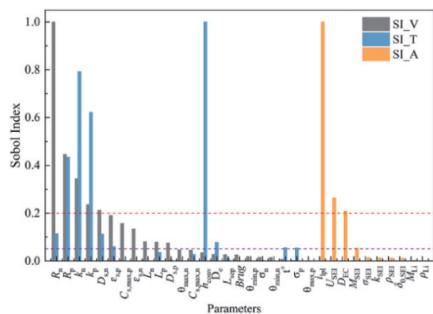


图3. 电压、温度和老化轨迹参数 Sobol 指标的敏感性分析结果。

(三) 参数辨识结果

图4所示的结果表明, MMGA 方法的预测值更接近实验值。得益于经过敏感性分析的多步方法, 通过专注于对模型输出影响最大的关键参数并进行逐步精细化的优化过程, 提高了参数辨识的效率和准确性。

四、结论

本文提出了一种在耦合的 ECAT 电池模型中快速且可靠地辨识参数的方法。为应对 ECAT 模型的计算挑战，开发了一个数据驱动的人工神经网络（ANN）元模型，以高效探索各种参数对电池电压、温度和容量的影响。通过敏感性分析识别出最具影响力的参数，从而简化优化过程。接着，集成了遗传算法来优化这些参数，最小化模型预测与实验数据之间的差异。所提出的方法显著减少了计算时间，同时确保了参数辨识的准确性。这使得开发精确的锂离子电池模型成为可能，为先进的电池管理系统和高保真的数字孪生奠定了基础。

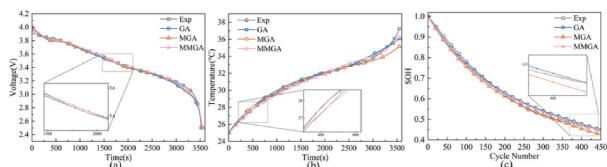


图4. 1C 放电倍率下不同方法的实验验证比较。

参考文献

- [1] 邓林旺, 冯天宇, 舒时伟, 等. 锂离子电池无损析锂检测研究进展 [J]. 储能科学与技术, 2023, 12(1): 263–277. DOI: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2022.0428.
 - [2] 王其钰, 王朔, 周格, 等. 锂电池失效分析与研究进展 [J]. 物理学报, 2018, 67(12): 12. DOI: 10.7498/aps.67.20180757.
 - [3] 王辉. 锂电池与超级电容混合储能技术及其在风电中的应用研究 [D]. 上海电力大学, 2013.
 - [4] 李凌云. 中国新能源汽车用锂电池产业现状及发展趋势 [J]. 电源技术, 2020, 44(4): 3. DOI: CNKI:SUN:DYJS.0.2020-04-039.
 - [5] 徐兴, 王位, 陈龙. 基于 GA 的车用锂离子电池电化学模型参数辨识 [J]. 汽车工程, 2017, 39(7): 813–821, 838.
 - [6] 席安静, 田光宇, 白鹏. 磷酸铁锂锂离子电池 EIS 参数随 SOC 变化的规律 [J]. 电池, 2012, 42(2): 4. DOI: 10.3969/j.issn.1001-1579.2012.02.006.
 - [7] 康鑫, 时玮, 陈洪涛. 基于锂离子电池简化电化学模型的参数辨识 [J]. 储能科学与技术, 2020, 9(3): 10. DOI: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2019.0273.
 - [8] 张珺涵, 王学远, 魏学哲. 基于时频分析的锂离子电池阻抗计算方法 [J]. 电池, 2018, 048(001): 8–12.
 - [9] 陈树成. 基于多物理场的锂离子电池组热仿真方法研究 [D]. 哈尔滨工业大学, 2018.
 - [10] 杨晓光, 冷勇, 张刚, 葛升, 王朝阳. 锂离子电池中锂沉积引发的老化建模: 从线性老化到非线性老化的转变 [J]. 电源杂志, 2017, 360(7): 28–40.