

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

Митягин Даниил Олегович

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

Специальность

2.3.1 – Системный анализ, управление и обработка информации, статистика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Научный руководитель
кандидат физико-
математических наук
Гостева Екатерина
Александрова

Москва - 2026

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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 конструктивных 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, определяющая 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 конструктивных 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 конструктивных 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 конструктивно-технологических параметров ячейки СНЭ.

Реализация выводов и рекомендаций работы. Основные положения диссертации использованы в НПО «Тепловизор» для подбора необходимого оборудования при снабжении частных домов, оборудованных системами накопления энергии, 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.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В настоящее время принятие решения о применении системы накопления энергии с заданными параметрами для решения определённых задач опирается на три методологических направления, каждое из которых сформировалось в ответ на конкретные технологические вызовы. Доминирующая парадигма последних десятилетий — классический эмпирико-синтетический подход — сосредоточена на изолированном совершенствовании отдельных компонентов ячейки: синтезе высокоёмких катодных материалов, разработке композитных анодов на основе кремния и создании стабильных электролитных составов. Основой физико-математического и химического моделирования является псевдодвумерная (P2D) модель Дойла-Фуллера-Ньюмана, описывающая перенос массы и заряда в ячейке. Подобные модели обладают высокой предсказательной силой в рамках чётких допущений и незаменимы для углублённого изучения механизмов деградации, таких как рост SEI-слоя или механическое разрушение частиц. Современными методами поиска оптимальных конструкционных параметров стали методы на основе машинного обучения. Они демонстрируют выдающиеся результаты в узких задачах: предсказании свойств химических соединений до их синтеза или оценке состояния здоровья (SOH) и остаточного ресурса (RUL) действующих систем накопления энергии по данным эксплуатации.

Ключевой недостаток, присутствующий во всех трёх подходах поиска оптимальных параметров конструкции СНЭ, — это их неспособность адекватно работать со взаимосвязями и компромиссами между элементами СНЭ. 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 СНЭ, отвечающей одновременно требованиям по энергии, мощности, долговечности, безопасности и стоимости, остаётся важной научно-практической задачей, требующей огромных затрат времени и ресурсов. Анализ существующих подходов поиска оптимальных значений конструкций СНЭ с основными преимуществами и недостатками представлен в таблице 1.

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 характеристика, 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 объёму и качеству данных, плохая экстраполяционная способность, узкая специализация задач.
Ключевая системная проблема	Отсутствие интеграции	Отсутствие масштабируемости	Отсутствие сквозного охвата

Дальнейшее исследование посвящено анализу современного состояния двух взаимосвязанных методологических направлений, образующих фундамент задачи рационального принятия решения о разработке СНЭ: методов установления количественных взаимосвязей «структура–свойство» и методов поиска проектных

решений в сложных технических системах. Анализ указанных направлений выполнен с целью выявления существующих разрывов, препятствующих сквозному структурно-параметрическому синтезу СНЭ, и обоснования требований к разрабатываемому гибричному прогнозно-аналитическому аппарату. Рассмотрена эволюция концепции «структура–свойство» (QSPR-модель) от классических статистических моделей до современных подходов глубокого машинного обучения. Показано, что в области электрохимических накопителей энергии данная методология реализуется на нескольких иерархических уровнях. На молекулярном уровне графовые нейронные сети и методы объяснимого искусственного интеллекта применяются для предсказания напряжения, ёмкости и стабильности катодных и электролитных материалов по их химическому строению. Большинство существующих работ сосредоточено на прямом прогнозе начальных свойств без учёта временной эволюции характеристик, определяющей показатели надёжности, что является ключевым ограничением данных моделей. Кроме того, практически отсутствуют сквозные модели, связывающие конструкционные параметры ячейки с конечными эксплуатационными показателями в едином вычислительном контуре. Кроме того, классические физико-математические модели, включая псевдодвумерную модель Дойла–Фуллера–Ньюмана, обладают высокой параметрической чувствительностью и требуют точного знания десятков трудноизмеримых констант. Исследования продемонстрировали, что алгоритм NSGA-II позволяет достичь оптимального баланса между такими параметрами, как сходимость, равномерность покрытия фронта и вычислительная эффективность в рамках анализируемого класса задач. Можно привести несколько примеров удачного использования NSGA-II. Так, в работе Sun et al. (2024) алгоритм был применён для расчёта оптимальных параметров фотоэлектрической системы с аккумулятором для индивидуальных жилых домов. В результате удалось сократить время вычислений на 94 % в сравнении с методом полного перебора. В свою очередь, Jasiński et al. (2024) комбинировали NSGA-II с методом анализа иерархий, чтобы определить наиболее подходящую структуру гибридной системы СНЭ.

Однако, несмотря на достижения в отдельных аспектах, пока не удалось реализовать комплексный подход, который позволил бы с помощью этих наработок

принимать решения о создании систем накопления энергии с самого начального этапа. Большинство существующих исследований либо сосредоточены на прогнозировании свойств материалов, либо решают обратные задачи, не принимая во внимание динамику изменения характеристик с течением времени.

Проведённый в первой главе теоретико-информационный анализ позволил установить принципиальное ограничение, присущее как классическим эмпирическим, так и современным ML-ориентированным подходам: отсутствие целостного представления об объекте исследования. В рамках доминирующей парадигмы литий-ионный аккумулятор рассматривается либо как совокупность независимо улучшаемых компонентов, либо как «чёрный ящик», чьи входные и выходные параметры связаны статистическими корреляциями. Требуется перейти от фрагментарного описания к формализованному представлению аккумулятора как целостной системы, обладающей структурой и внутренними связями между компонентами. На основе анализа работы системы накопления энергии осуществляется переход к математическому описанию динамики системы. Текущая парадигма представляет собой систему уравнений, учитывающих процессы переноса электрического заряда и деградацию системы с течением времени. 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 $<5\text{--}10\%$) и высокой скоростью ($\sim 10^{-3}$ с) описывают изменение ключевых выходных характеристик во времени. Эти характеристики определяются вектором конструкционных и эксплуатационных параметров P :

$$P = [x_1, x_2, \dots, x_{11}] \quad (1)$$

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:

$$Y_4(t,P) = \frac{Y_1(t,P)}{Y_1(0,P)} \quad (2)$$

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

$$Y_5(t,P) = Y_2(0,P) - Y_2(t,P) \quad (3)$$

При фиксированных внешних условиях эти величины определяются исключительно вектором P :

$$Y(t,P) = f\{Y_1, Y_2, Y_3, Y_4, Y_5, t\} \quad (4)$$

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:

$$Y_1(t,P) = Y_1^0(P) * (1 - \alpha(P)\sqrt{t}) \quad (5)$$

Энергетическая плотность также убывает:

$$Y_2(t,P) = Y_2^0(P) * (1 - \beta(P) * \sqrt{t}) \quad (6)$$

$$Y_2(t, P) = Y_1(t, P) * (U_{avg}^0 - x_9 * Y_3(t, P)) \quad (7)$$

Внутреннее сопротивление растёт:

$$Y_3(t, P) = Y_3^0(P) + \gamma(P)\sqrt{t}, \quad (8)$$

Тогда для определения SOH:

$$Y_4(t, P) = 1 - \alpha(P)\sqrt{t} \quad (9)$$

$$Y_5(t, P) = Y_2^0(P) * \beta(P)\sqrt{t} \quad (10)$$

Рассмотрим фиксированный момент времени T , соответствующий определённому числу циклов. Введём два критерия: $Y_4^*(P)$ (сохранение остаточной ёмкости СНЭ) и $Y_5^*(P)$ (количество потерянной энергетической плотности):

$$Y_4^*(P) = Y_4(T, P) = Y_1^0(P) * (1 - \alpha(P) * \sqrt{T}) \quad (11)$$

$$Y_5^*(P) = Y_5(T, P) = Y_2^0(P) * \beta(P)\sqrt{T} \quad (12)$$

Конструкция считается подходящей, если после T циклов состояние здоровья не опускается ниже значения λ :

$$Y_4(T, P) = 1 - \alpha(P)\sqrt{T} \geq \lambda \quad (13)$$

Допустимое множество решений будет описываться следующими выражениями:

$$\varphi = Y_2^0(P) * (1 - \lambda) \quad (14)$$

$$Y_4(T, P) \geq \lambda; Y_5(T, P) \leq \varphi \quad (15)$$

$$D = \{P | Y_4^*(P) \geq \lambda, Y_5^*(P) \leq \varphi\} \quad (16)$$

$$P^* = \operatorname{argmax}\{F(P)\} \quad (17)$$

$$P \in D \quad (18)$$

Для каждого сценария использования значения λ и φ определяются пользователем.

Третья глава диссертации посвящена созданию инструмента для

прогнозирования выходных характеристик систем накопления энергии. Первый этап включает в себя разработку регрессионных моделей для прогнозирования расчётных, или начальных, характеристик СНЭ. Рассматриваются те характеристики, связь которых со входными параметрами материалов и конструкции может быть описана с помощью установленных физико-химических закономерностей, что позволяет построить быстрые, интерпретируемые и требующие малого объёма данных модели.

Начальный этап работы заключался в сборе экспериментальных данных. Информация извлекалась из разных источников: открытых публикаций, технических паспортов производителей и научных баз данных. В результате был создан эталонный набор, включающий 300 образцов — как коммерческих, так и лабораторных ячеек с разнообразными катодными материалами, начиная от NMC811 и заканчивая LFP. Для каждого образца были зафиксированы все имеющиеся компоненты вектора входных параметров P , а также соответствующие им измеренные значения Y_1^0, Y_2^0, Y_3^0 . Этот набор данных послужил основой для калибровки моделей и проверки их достоверности.

Учитывая ограниченность количества экспериментально изученных конфигураций, для дальнейшего анализа была сформирована синтетическая выборка. Она была получена с применением метода латинского гиперкуба. В пространстве с одиннадцатью входными параметрами было равномерно распределено 300 000 точек. Для каждой точки P начальные значения рассчитывались с использованием аналитических формул, которые были выведены на основе электрохимии:

$$Q_{theor}(x_1) = 140 + 105,26x_1 - 34,73 \quad (19)$$

$$Y_1^0 = Q_{theor}\omega_{act} \left(1 - \delta_{diff}(x_6, x_9)\right) + \varepsilon_1, \quad (20)$$

где:

$$\delta_{diff} = \min(0,06, \max(0, (0,0003(x_6 - 100)x_9))) , \varepsilon_1 \sim N(0, 2,5^2) \quad (21)$$

Удельная энергетическая плотность:

$$Y_2^0 = Y_1^0 k_m(P) U_{avg}(x_1, x_2) + \varepsilon_2, \quad (21)$$

Среднее напряжение:

$$U_{avg} = 3,45 + 0,1425x_1 - 0,1447 - 0,003x_2 \quad (22)$$

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

Внутреннее сопротивление Y_3^0 :

$$Y_3^0 = (R_{кат} + R_{ан} + R_{эл-т} - \tau + 0,005) \cdot 1000 + \varepsilon_3. \quad (22)$$

Нормальный шум ε_3 имеет стандартное отклонение 2,0 мОм.

Все рассчитанные тройки Y_1^0, Y_2^0, Y_3^0 прошли фильтрацию по экспериментально обоснованным диапазонам: ёмкость 140–200 мА·ч/г, энергия 185–265 Вт·ч/кг, сопротивление 30–70 мОм. Точки, выходящие за пределы, отбрасывались и заменялись новыми до достижения итогового объёма 300 000 записей. Выборочно подтверждено наличие ожидаемых физических трендов — 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.

Все независимые переменные масштабируются в интервале [0;1]:

$$x'_i = \frac{x_i - x_{i,min}}{x_{i,max} - x_{i,min}} \quad (23)$$

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

Методом наименьших квадратов на нормированной выборке оценены полные линейные модели, включающие все одиннадцать параметров. Далее был проведён анализ значимости и величины влияния каждого параметра. На его основе модели были упрощены — сокращён набор переменных до минимально необходимого. В результате были получены следующие зависимости:

$$Y_1^0 = 156,80 + 39,85x'_1 - 6,54x'_6, R^2 = 0,958 \quad (24)$$

$$Y_2^0 = 181,46 + 82,65x'_1 - 5,68x'_6, R^2 = 0,966 \quad (25)$$

$$Y_3^0 = 46,19 + 9,79x'_6 - 8,51x'_3 + 5,07x'_{11} + 2,44x'_5, R^2 = 0,928 \quad (26)$$

На следующем этапе предстоит разработать нейросетевую модель, которая

позволит прогнозировать динамику изменения ключевых параметров системы накопления энергии во времени. Проведение детального количественного анализа критериев позволило установить, что SOH-показатель демонстрирует выраженную нелинейность. Это стало основанием для использования методов глубокого обучения. Для обучения модели был собран набор данных — информация более чем о 2500 аккумуляторных ячейках. Перед обучением модели данные подверглись предварительной обработке. Архитектура нейронной сети представлена на рисунке 1.

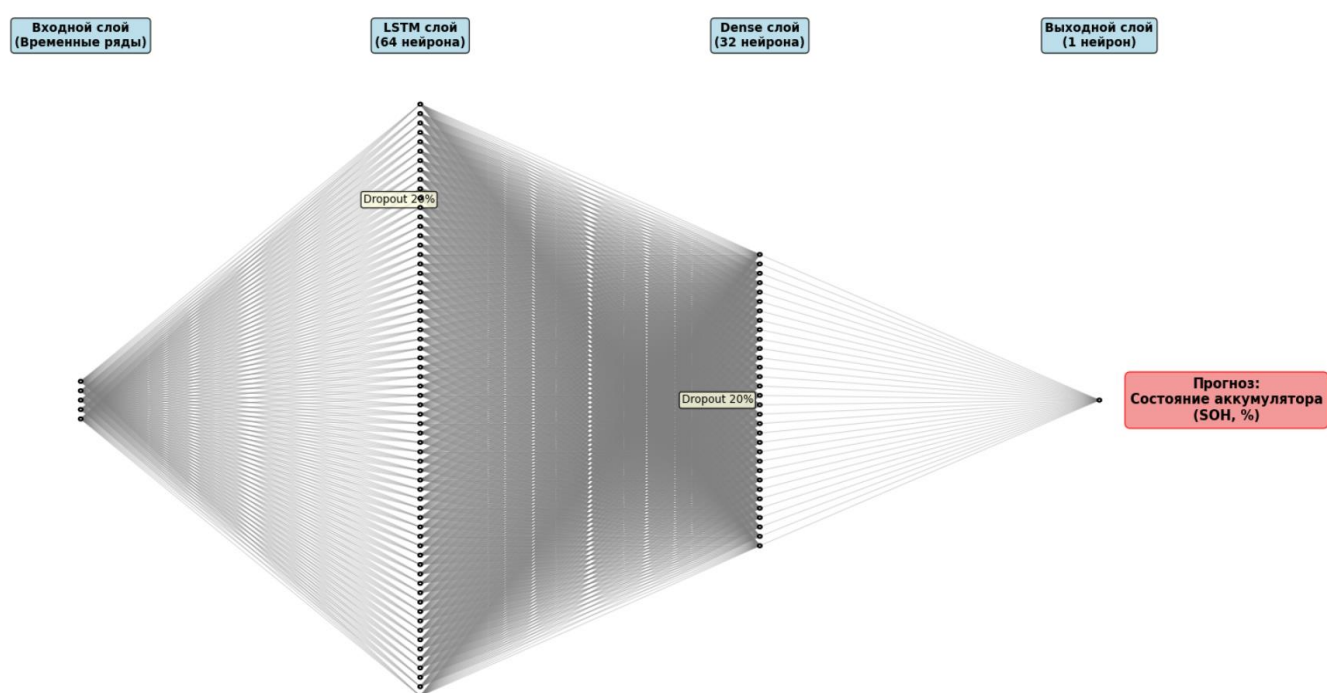


Рисунок 1. Архитектура гибридной нейросетевой модели для прогнозирования остаточной ёмкости системы накопления энергии.

Прогноз траектории деградации на 1000 циклов с использованием модели Дойла-Фуллера-Ньюмана, откалиброванной по тем же начальным данным, показывает улучшение точности по среднеквадратичной ошибке на 31,5%. При этом время получения одного прогноза сокращалось с 15 минут (решение систем дифференциальных уравнений P2D-модели) до 2 секунд (прямой проход по нейронной сети). Полученная таким образом модель представляет собой количественно подтверждённый эффективный инструмент (рисунок 2), завершая создание интеллектуального блока гибридной системы поиска оптимальных конструкционных параметров СНЭ.

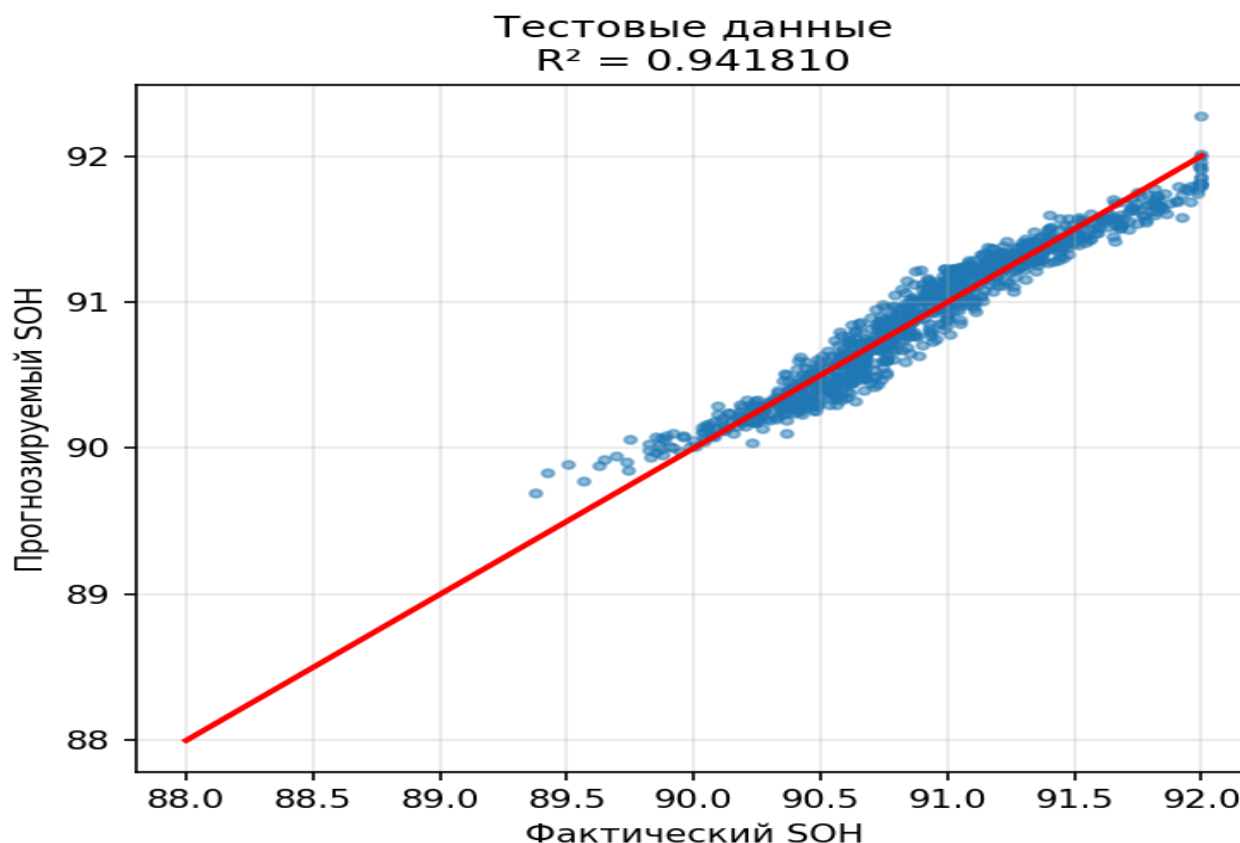


Рисунок 2. Процесс обучения нейросетевой модели прогнозирования остаточной ёмкости системы накопления энергии.

Четвёртая глава диссертационной работы посвящена практической реализации и экспериментальной верификации разработанного гибридного подхода к проектированию систем накопления энергии. Основной целью главы является интеграция ранее созданных регрессионных и нейросетевых моделей в единую прогнозную систему, её валидация на реальных данных и демонстрация применимости для решения инженерной задачи — определения параметров конструкции ячейки, отвечающих заданным пользователем целевым показателям, таким как обеспечение состояния здоровья $SOH > 80\%$ после 1000 циклов. Задача заключается в поиске набора входных параметров ячейки, при которых целевая функция $Y_5(T, P)$ при ограничении $Y_4(T, P) \geq 0,8$ сводится к минимуму. На следующем этапе осуществляется определение значений ограничений для каждой характеристики, исходя из предпочтений пользователя. Процесс создания и проверки архитектуры гибридной модели включает несколько шагов. Сначала регрессионный модуль, опираясь на статические параметры вычисляет ключевые показатели: предполагаемую удельную ёмкость, удельную энергетическую

плотность и начальное значение внутреннего сопротивления. Затем полученные данные интегрируются с первичными параметрами, формируя вектор характеристик. Этот вектор подаётся на вход LSTM-сети.

Проверка модели проводилась на наборе данных, включающем 124 коммерческие ячейки. Средняя абсолютная погрешность прогноза SOH-показателя 2,3 %, а коэффициент детерминации достигает $R^2 = 0,94$.

Для нахождения оптимального решения в условиях множественных критериев был использован генетический алгоритм NSGA-II. Гибридная модель использовалась в качестве виртуального испытательного стенда. В результате был получен набор эффективных решений (рисунок 3).

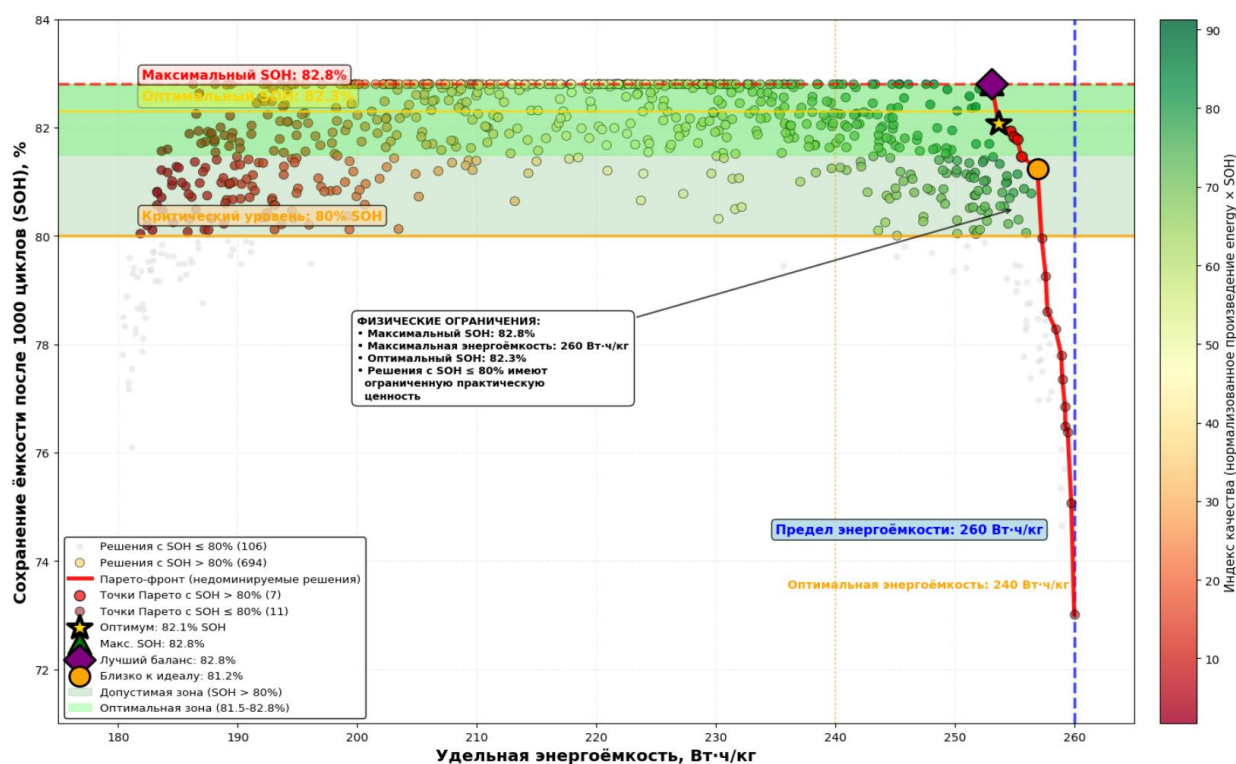


Рисунок 3. Множество эффективных решений задачи оптимизации систем накоплений энергии.

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 2. Все рекомендованные конфигурации удовлетворяют заданным ограничениям по

сохранению ёмкости λ и потере энергии φ , что подтверждает корректность процедуры выбора.

Таблица 2 – параметры конструкции ячейки системы накопления энергии для достижения реализации сценариев, определённых пользователем

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

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)
Прогноз				
Y ₂ , Вт·ч/кг	259,9	244,8	217,3	239,7
Y ₄ , %	80,5	82,9	80,2	80,5

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертационной работе решена важная научная и практическая задача, заключающаяся в разработке методов и алгоритмов повышения эффективности и надёжности систем накопления энергии. Основные выводы и рекомендации, полученные лично автором, 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 и Dense-слой. 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: после 1000 циклов $MAPE = 2,1 \%$, $R^2 = 0,963$;

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 и SOH-показателем. Задавая пороговые значения, 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.

Основные положения диссертационной работы изложены в следующих опубликованных работах.

В перечне, рекомендованном ВАК Минобрнауки России:

1. **Митягин Д.О.** Системный подход к созданию литий-ионных аккумуляторов: связь основных компонентов батареи и принцип работы // Инженерный вестник Дона. - 2025.- №11;

2. **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;

3. **Митягин Д.О.** Методика отбора регрессионных и нейросетевых параметров для анализа систем накопления энергии // Научно-технический вестник Поволжья. 2025.- №12.- С.187-190;

4. **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;

5. **Митягин Д.О.** Системный гибридный подход к проектированию накопителей энергии: анализ ограничений существующих методов и пути интеграции // Инженерный вестник Дона. - 2026.- №2;

6. **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;

В других изданиях:

1. **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. (РИНЦ)

2. **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. (РИНЦ)

3. **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. (РИНЦ)