



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΙΚΗΣ ΙΣΧΥΟΣ

**Υλοποίηση Ηλεκτροχημικού Μοντέλου Μπαταρίας
Ιόντων Λιθίου και εκτίμηση της Κατάστασης Φόρτισης
με χρήση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Αγγελική Ρουσακάκη

Επιβλέπων Καθηγητής: Νικόλαος Χατζηαργυρίου
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Μάρτιος 2017



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΙΚΗΣ ΙΣΧΥΟΣ

**Υλοποίηση Ηλεκτροχημικού Μοντέλου Μπαταρίας
Ιόντων Λιθίου και εκτίμηση της Κατάστασης Φόρτισης
με χρήση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Αγγελική Ρουσακάκη

Επιβλέπων Καθηγητής: Νικόλαος Χατζηαργυρίου
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Μάρτιος 2017



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΙΚΗΣ ΙΣΧΥΟΣ

**Υλοποίηση Ηλεκτροχημικού Μοντέλου Μπαταρίας
Ιόντων Λιθίου και εκτίμηση της Κατάστασης Φόρτισης
με χρήση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Αγγελική Ρουσακάκη

Επιβλέπων Καθηγητής: Νικόλαος Χατζηαργυρίου

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 2017.

.....
Νικόλαος Χατζηαργυρίου
Καθηγητής Ε.Μ.Π

.....
Α μέλος

.....
Β μέλος

Αθήνα, Μάρτιος 2017

Αγγελική Ρουσακάκη

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Αγγελική Ρουσακάκη, 2017.

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στο Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, στον τομέα Ηλεκτρικής Ισχύος.

Αντικείμενό της αποτελεί η μοντελοποίηση της ηλεκτροχημικής συμπεριφοράς μιας μπαταρίας τύπου ιόντων λιθίου και στη συνέχεια η εκτίμηση της κατάστασης φόρτισής της, με χρήση σύγχρονων τεχνητών νευρωνικών δικτύων.

Υπεύθυνος κατά την εκπόνηση της διπλωματικής ήταν ο καθηγητής ΕΜΠ κ. Ν. Χατζηαργυρίου, στον οποίο οφείλω ιδιαίτερες ευχαριστίες για την ανάθεση αυτής και για την δυνατότητα που μου έδωσε να ασχοληθώ με ένα τόσο ενδιαφέρον θέμα.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω εκ βαθέων τον υποψήφιο Διδάκτορα Α. Ρήγα για τις πολύτιμες γνώσεις και καθοδήγηση που μου παρείχε καθ' όλη την διάρκεια εκπόνησης της εργασίας αυτής, καθώς και για τον πολύτιμο χρόνο που διέθεσε μέχρι την περάτωσή της. Τέλος, οφείλω ένα μεγάλο ευχαριστώ στην οικογένειά μου και στους φίλους μου, οι οποίοι με στήριξαν και με βοήθησαν να ολοκληρώσω τις σπουδές μου στο Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι μπαταρίες ιόντων λιθίου αποτελούν ένα από τα σημαντικότερα μέσα αποθήκευσης ενέργειας. Οι προβλέψεις για αυτά τα συστήματα αποθήκευσης ηλεκτρικής ενέργειας είναι πολύ καλές, όπως υποστηρίζει η επιστημονική κοινότητα και το συμπέρασμα που εξάγεται είναι ότι η αγορά για τις μπαταρίες λιθίου ιόντων έχει τεράστιες δυνατότητες και βρίσκεται στο επίκεντρο του ενδιαφέροντος των ανθρώπων που ασχολούνται με τα συστήματα αποθήκευσης ενέργειας. Μια ακόμα ώθηση αποκτά η αγορά αυτών των μπαταριών από τα ηλεκτρικά αυτοκίνητα. Τα τελευταία τρία χρόνια κατασκευάστηκαν περίπου 500.000 ηλεκτροκίνητα αυτοκίνητα. Οι προβλέψεις κάνουν μάλιστα λόγο ότι μέχρι το 2030 ένα στα τρία αυτοκίνητα θα είναι ηλεκτροκίνητο. Οι μπαταρίες τύπου ιόντων λιθίου βρίσκουν εφαρμογή και στα «έξυπνα» δίκτυα, στρέφοντας έτσι το ενδιαφέρον ακόμη περισσότερο στην μελέτη για βελτιστοποίηση της απόδοσης τους.

Στο πλαίσιο της συγκεκριμένης εργασίας μελετάται ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης της επιτήρησης της κατάστασης φόρτισης (State Of Charge). Το SOC είναι μια σημαντική παράμετρος για την μπαταρία και συνδέεται άμεσα με την χωρητικότητά της και άρα με την απόδοσή της. Έτσι, η σωστή εκτίμηση του μπορεί να αποτρέψει την ανεπανόρθωτη υποβάθμιση ενός κελιού Li-ion από μια υπερφόρτιση ή υπερ-εκφόρτιση, επιμηκύνοντας την διάρκεια ζωής της μπαταρίας.

Πρώτο βήμα για την προσέγγιση του προβλήματος αυτού, είναι η σχεδίαση ενός ηλεκτροχημικού μοντέλου μπαταρίας ιόντων λιθίου και συγκεκριμένα εκείνης που έχει ως υλικό καθόδου το $LiFePO_4$. Οι μπαταρίες με αυτό το υλικό καθόδου είναι πολύ δημοφιλείς σε εφαρμογές ηλεκτρικών αυτοκινήτων λόγω των ομαλών καμπύλων εκφόρτισης και της μεγάλης πυκνότητας ισχύος που διαθέτουν. Το μοντέλο αυτό αφορά ένα κελί μπαταρίας και δέχεται ως είσοδο ένα ρεύμα φόρτισης/εκφόρτισης και παράγει σαν έξοδο το SOC. Η μοντελοποίηση έγινε με χρήση της γλώσσας προγραμματισμού MATLAB.

Στη συνέχεια, λαμβάνοντας υπόψιν τη μη γραμμική σχέση μεταξύ του SOC και των δυναμικών χαρακτηριστικών της μπαταρίας, προτείνεται η εκτίμησή του με την μέθοδο των τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιούνται δύο διαφορετικοί τύποι νευρωνικών δικτύων με ανάδραση σφάλματος. Έτσι, για τυχαίες φορτίσεις και εκφορτίσεις συγκρίνονται οι έξοδοι του νευρωνικού δικτύου με την έξοδο του μοντέλου μπαταρίας και εξάγονται συμπεράσματα από την εφαρμογή της παραπάνω μεθοδολογίας.

Λέξεις Κλειδιά: Ηλεκτροχημικό μοντέλο μπαταρίας, μπαταρία $LiFePO_4$, SOC, νευρωνικά δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης, ανάδραση σφάλματος, MATLAB

ABSTRACT

Li-ion batteries are currently the most important means of electric energy storage. The forecasts for these systems of electric energy storage are optimistic, according to the scientific community, leading to the conclusion that the market of Li-ion batteries has enormous possibilities, being in the center of interest of persons that deal with the systems of energy storage. The market of these batteries is further strengthened by the rapid development and commercialization of electrical vehicles. According to statistics, during the past three years roughly 500.000 electrically driven cars were manufactured. The forecasts show that up to 2030 one to three cars will be electrical. The Li-ion batteries are also utilized in smart grids systems and thus the need for further optimization of their performance is necessary.

Throughout this thesis, an optimization problem is being studied, as far as the estimation of battery State Of Charge (SOC) is concerned. SOC is an important parameter, which reflects on the battery capacity and hence it is closely correlated to its performance. So accurate estimation of SOC can prevent overcharge or deep-discharge and so improve the battery's life.

The first step for the approach of this problem, is the design of an electrochemical lithium ions battery model and more specifically a battery with $LiFePO_4$ as cathode material. The batteries with this specific cathode material are very popular in applications of electric vehicles because of their flat discharge rate and their high power density. The above is a model of a single li-ion battery cell, taking the charge/discharge current as an input and producing the SOC as an output. The model is developed using the MATLAB programming environment.

After that, considering the nonlinear relationship between the battery SOC and the dynamic characteristics of the battery, the method of artificial neural networks for estimating the SOC is proposed. Because of the generalization ability of neural networks, two different types of back propagation neural network are used. Finally, for arbitrary charges and discharges the output of each neural network is compared to the output of the electrochemical battery model. By applying this method, many important conclusions are drawn.

Keywords: Electrochemical Battery Model, $LiFePO_4$ battery, SOC, feed forward neural networks, back propagation, MATLAB

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1°

1. ΜΠΑΤΑΡΙΕΣ ΛΙΘΙΟΥ & ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥΣ	10
1.1 ΜΟΝΤΕΛΑ ΜΠΑΤΑΡΙΩΝ.....	13
1.1.1 ΗΛΕΚΤΡΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ.....	14
1.1.11 ΑΠΛΟ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ.....	16
1.1.12 ΜΟΝΤΕΛΟ THEVENIN.....	16
1.1.13 ΜΟΝΤΕΛΟ DP (DUAL POLARIZATION).....	17
1.1.14 ΜΟΝΤΕΛΟ PNGV.....	18
1.1.15 RUN TIME BASED.....	19
1.1.2 ΑΝΑΛΥΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ.....	20
1.1.21 ΡΑΚΗΜΑΤΟΝ & VRUDHULA.....	20
1.1.22 KIBAM.....	21
1.1.3 ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ.....	23
1.1.4 ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ.....	24
1.2 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ	26

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2°

2.1 ΠΛΗΡΕΣ ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ	28
2.1.1 Η ΕΝΝΟΙΑ ΤΟΥ ΠΟΡΩΔΟΥΣ ΗΛΕΚΤΡΟΔΙΟΥ.....	30
2.1.2 ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΗΛΕΚΤΡΟΛΥΤΙΚΗ ΦΑΣΗ.....	31
2.1.3 ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΤΗΝ ΗΛΕΚΤΡΟΛΥΤΙΚΗ ΦΑΣΗ.....	32
2.1.4 ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΣΤΕΡΕΗ ΦΑΣΗ.....	35
2.1.5 ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΤΗ ΣΤΕΡΕΗ ΦΑΣΗ.....	36
2.1.6 ΣΥΝΟΨΗ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ.....	39
2.2 ΑΠΛΟΠΟΙΗΜΕΝΑ ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ	42
2.2.1 ΜΕΣΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΗΛΕΚΤΡΟΔΙΟΥ ή ELECTRODE AVERAGE MODEL (EAM).....	43
2.2.2 ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΜΕΣΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΗΛΕΚΤΡΟΔΙΟΥ (EAM).....	43
2.3 ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ ΦΟΡΤΙΣΗΣ ΜΠΑΤΑΡΙΑΣ (State Of Charge)	51
2.4 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ MATLAB	54

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3°

3.1 ΕΚΤΙΜΗΣΗ SOC ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΗΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ	62
3.1.1 ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΚΤΙΜΗΣΗΣ SOC.....	62
3.2 ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ	65
3.2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	65
3.2.2 ΟΡΙΣΜΟΣ.....	65
3.2.3 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΑΝΘΡΩΠΙΝΟΥ ΚΑΙ ΤΕΧΝΗΤΟΥ ΝΕΥΡΩΝΑ.....	66
3.3 ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΕΧΝΗΤΟΥ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ	69
3.4 ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΤΕΧΝΗΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ	72
3.5 ΤΟΠΟΛΟΓΙΕΣ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ	83
3.5.1 ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ ΕΜΠΡΟΣΘΙΑΣ ΠΡΟΩΘΗΣΗΣ ΜΕ ΑΝΑΔΡΑΣΗ (FEED FORWARD BACK PROPAGATION)	83
3.5.2 ΣΕΙΡΙΑΚΟ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟ ΔΙΚΤΥΟ ΜΕ ΑΝΑΔΡΑΣΗ ΣΦΑΛΜΑΤΟΣ (CASCADE FORWARD BACK PROPAGATION).....	89
3.5.3 ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ ΑΝΑΔΡΑΣΗΣ (RECURRENT NET).....	90
3.6 ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ ΣΕ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ MATLAB ΓΙΑ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΟΥ SOC	

3.6.1 FITNET ΝΕΥΡΩΝΙΚΟ ΔΙΚΤΥΟ.....	94
3.6.2 CASCADE FORWARD BACK PROPAGATION ΝΕΥΡΩΝΙΚΟ.....	106
3.7 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΩΝ ΤΥΠΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ	116

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4^ο

4.1 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	118
4.2 ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ- ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΤΑΣΕΙΣ.....	119

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	120
--------------------------	------------

ΠΑΡΑΤΗΜΑ

A) ΚΩΔΙΚΑΣ ΜΑΤΛΑΒ ΜΕΣΟ ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ.....	123
B) ΚΩΔΙΚΑΣ ΜΑΤΛΑΒ ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ.....	127

Κεφάλαιο 1^ο

1. ΜΠΑΤΑΡΙΕΣ ΛΙΘΙΟΥ & ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥΣ

ΔΟΜΗ ΜΠΑΤΑΡΙΑΣ ΛΙΘΙΟΥ

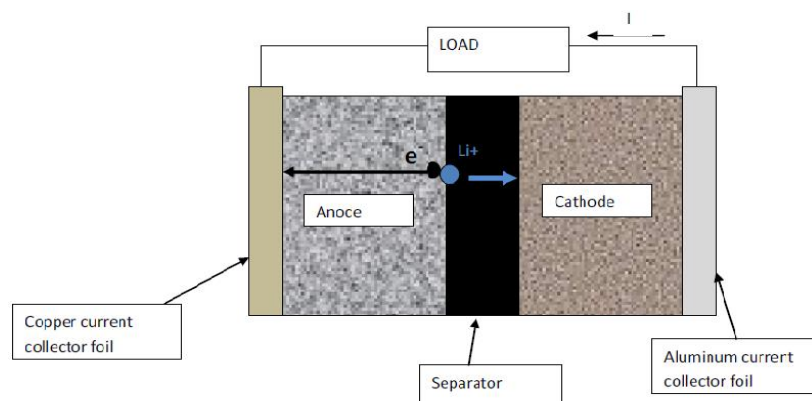
Μια μπαταρία αποτελείται από ένα ή περισσότερα ηλεκτροχημικά κελιά (κυψελίδες), συνδεδεμένα παράλληλα ή σε σειρά. Στα κελιά αυτά η χημική ενέργεια που είναι αποθηκευμένη μετατρέπεται σε ηλεκτρική ενέργεια μέσα από ηλεκτροχημικές αντιδράσεις. Ένα κελί αποτελείται από την άνοδο, την κάθοδο και τον ηλεκτρολύτη που διαχωρίζει τα δύο ηλεκτρόδια. Κατά την διάρκεια της εκφόρτισης στην άνοδο λαμβάνει χώρα αντίδραση οξείδωσης, που σημαίνει απώλεια ηλεκτρονίων. Αντίθετα αντίδραση αναγωγής χαρακτηρίζεται ως η απόκτηση ηλεκτρονίων και συμβαίνει κατά την φόρτιση στην κάθοδο. Στην οξείδωση το αναγωγικό μέσο αποβάλλει n-ηλεκτρόνια, που απελευθερώνονται στο συνδεδεμένο κύκλωμα. Από την άλλη πλευρά στην κάθοδο λαμβάνει χώρα η αντίστροφη διαδικασία και n-ηλεκτρόνια προσλαμβάνονται από το οξειδωτικό μέσο.

$R_1 \rightarrow O_1 + ne^-$, στην άνοδο (R_1 αναγωγικό μέσο)

$O_2 + ne^- \rightarrow R_2$, στην κάθοδο (R_2 οξειδωτικό μέσο)

Φόρτιση και Εκφόρτιση

Κατά την φόρτιση έχουμε εξαναγκασμένη οξειδοαναγωγική αντίδραση και μετατροπή της ηλεκτρικής σε χημική ενέργεια. Το αντίστροφο συμβαίνει κατά την εκφόρτιση όπου η οξειδοαναγωγική αντίδραση είναι αυθόρμητη και η χημική ενέργεια της μπαταρίας μετατρέπεται σε ηλεκτρική. Υπάρχουν διαφορετικές χημείες για κάθε ηλεκτρόδιο ανάλογα με τον τύπο της μπαταρίας λιθίου. Η χημική σύσταση των υλικών παίζει κύριο ρόλο στις επιδόσεις και στα χαρακτηριστικά των μπαταριών. Σαν αποτέλεσμα έχουμε διαφορετικές χωρητικότητες και ρυθμούς εκφόρτισης [1].



Εικόνα 1 Δομή Μπαταρίας Λιθίου

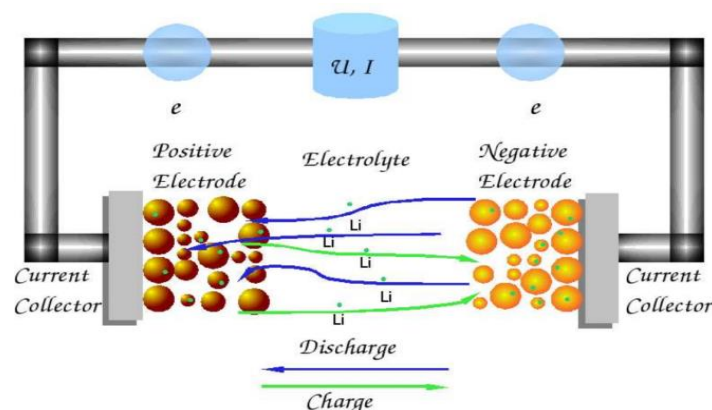
Ηλεκτρολύτης και Διαχωριστής

Ο ηλεκτρολύτης αποτρέπει την ροή e^- μεταξύ των ηλεκτροδίων. Τα e^- εισέρχονται και εξέρχονται από τους συλλέκτες ρεύματος μέσω tabs που συνδέουν την μπαταρία είτε με το εξωτερικό κύκλωμα, που περιέχει το φορτίο που θα καταναλώσει την ενέργεια είτε με την πηγή φόρτισης της μπαταρίας. Ο συλλέκτης ρεύματος ανόδου είναι από λεπτό φύλλο χαλκού ενώ της καθόδου από αλουμίνιο. Στον ηλεκτρολύτη στις σύγχρονες μπαταρίες η επαφή μεταξύ των δύο διαλυμάτων γίνεται με μία πορώδη μεμβράνη (διαχωριστής) που επιτρέπει στα ιόντα να κινούνται μεταξύ των δύο διαλυμάτων. Επίσης εμποδίζει την αγώγιμη επαφή μεταξύ θετικού και αρνητικού ηλεκτροδίου. Να σημειωθεί ότι μια μπαταρία είναι ένα ή περισσότερα εν σειρά συνδεδεμένα γαλβανικά στοιχεία [1,2].

Κατά την διάρκεια της εκφόρτισης ιόντα λιθίου πηγαίνουν από την άνοδο προς την κάθοδο (εικόνα 1α) και κατά την φόρτιση συμβαίνει η αντίστροφη διαδικασία. Όπως θα περιγράψουμε παρακάτω με μεγαλύτερη ακρίβεια διάφορες ηλεκτροχημικές αντιδράσεις λαμβάνουν χώρα στη διεπιφάνεια των ηλεκτροδίων/ηλεκτρολύτη. Όταν από την άνοδο ένα ιόν λιθίου Li^+ εισέρχεται στον ηλεκτρολύτη, ένα ηλεκτρόνιο φεύγει και μέσω του ηλεκτροδίου ρέει στο εξωτερικό κύκλωμα. Στην κάθοδο ένα Li^+ εισέρχεται από τον ηλεκτρολύτη και ενώνεται με ένα ηλεκτρόνιο που έρχεται από το εξωτερικό κύκλωμα. Ο διαχωριστής εξαναγκάζει όλα τα ηλεκτρόνια να ρέουν προς το εξωτερικό κύκλωμα και μόνο, καθώς είναι αγωγός ιόντων. Έτσι έχουμε ροή ρεύματος στο εξωτερικό κύκλωμα που θα τροφοδοτήσει το φορτίο που είναι συνδεδεμένο[2].

Το κάθε ηλεκτρόδιο συντίθεται από πορώδες υλικό και χαρακτηρίζεται από μικρό πάχος ώστε να ελαχιστοποιούνται οι χρόνοι φόρτισης. Για παράδειγμα, ένα ηλεκτρόνιο η φορές μεγαλύτερο χρειάζεται n^2 φορές περισσότερο χρόνο να φορτίσει, κάτι που σημαίνει ότι ο χρόνος φόρτισης είναι ανάλογος με το τετράγωνο του πάχους.

Επίσης βασικό στοιχείο είναι το ενεργό υλικό μιας μπαταρίας, που καθορίζει και την ηλεκτροχημική συμπεριφορά. Το ενεργό υλικό είναι ουσιαστικά ο συνδυασμός των χημικών στοιχείων από τα οποία είναι κατασκευασμένη η άνοδος και η κάθοδος και είναι οι βασικοί συντελεστές της ηλεκτροχημικής αντίδρασης μέσα στο κελί. Η ποσότητα του ενεργού υλικού είναι ανάλογη της χωρητικότητας της μπαταρίας [3].



Εικόνα 1α Σχηματική αναπαράσταση εκφόρτιση - φόρτιση

Η μοντελοποίηση της συμπεριφοράς μπαταρίας είναι αρκετά περίπλοκη γιατί χαρακτηρίζεται από πολλά μη γραμμικά φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα κατά την διάρκεια της εκφόρτισης[4]. Τα φαινόμενα αυτά θα παρουσιαστούν εν συντομία στη συνέχεια.

Φαινόμενα Rate capacity και Recovery

Στην ιδανική περίπτωση, σε μια εκφόρτιση, η τάση της μπαταρίας παραμένει σταθερή και μηδενίζεται στιγμιαία όταν η μπαταρία είναι άδεια. Το ίδιο σταθερή, σε ιδανικές πάντα συνθήκες, παραμένει και η χωρητικότητα της μπαταρίας για οποιοδήποτε ρεύμα εκφόρτισης. Κάτι που σημαίνει ότι η αποθηκευμένη ενέργεια θα χρησιμοποιούνταν όλη. Ωστόσο για μια πραγματική μπαταρία η τάση μειώνεται σταδιακά κατά την εκφόρτιση. Έστω μία μπαταρία φτάνει ένα ορισμένο επίπεδο τάσης (όπως για παράδειγμα την τάση αποκοπής) υπό ένα δεδομένο ρεύμα εκφόρτισης. Αν η μπαταρία αυτή χρησιμοποιηθεί με μικρότερο βαθμό εκφόρτισης, τότε η τάση της θα αυξηθεί και θα κερδίσει επιπλέον χωρητικότητα ή διάρκεια ζωής, μέχρι να φτάσει την τάση αποκοπής. Επειδή η χωρητικότητα αυξάνεται η μειώνεται ανάλογα με το ρυθμό εκφόρτισης το φαινόμενο αυτό ονομάζεται «βαθμός C» ή rate capacity. Εκτός από αυτό, εμφανίζεται και το φαινόμενο διακοπτόμενης εκφόρτισης (recovery). Σε χρονικές περιόδους αδράνειας που δεν εφαρμόζεται φορτίο η μπαταρία μπορεί να ανακτήσει ένα ποσοστό φορτίου που έχασε κατά τη διάρκεια μεγάλης εκφόρτισης. Πρόκειται για μια παρενέργεια που παρουσιάζεται στις επαναφορτιζόμενες μπαταρίες και λαμβάνει χώρα, όταν ο χρήστης τις φορτίζει σε άτακτα χρονικά διαστήματα, διακεκομμένα και χωρίς να έχουν αποφορτιστεί εντελώς. Το πρόβλημα εντοπίζεται στα υλικά, από τα οποία αποτελείται η μπαταρία, και τα οποία, αν παραμείνουν ανενεργά για κάποιο χρονικό διάστημα, κρυσταλλοποιούνται, δεσμεύοντας μόνιμα στη δομή του υλικού τους τα ελεύθερα ηλεκτρόνια, τα οποία δεν μπορούν πλέον να μετακινηθούν από την κάθοδο στην άνοδο. Όταν λοιπόν μία μπαταρία, για μεγάλα χρονικά διαστήματα, δεν αποφορτίζεται εντελώς, τότε τα ηλεκτρόνια, που δεν έχουν κινηθεί, ενσωματώνονται και δημιουργούν οξειδία, τα οποία καθιστούν τις πλάκες ανενεργές. Το πρόβλημα ονομάστηκε «φαινόμενο μνήμης», για να υπενθυμίσει στους χρήστες ότι η μπαταρία «θυμάται» την κακή της χρήση. Τα φαινόμενα αυτά συμβαίνουν σε όλους τους τύπους μπαταρίας. Επίσης, συνδέονται άμεσα με το προσδόκιμο ζωής μιας μπαταρίας και την κατάσταση φόρτισης της και για το λόγο αυτό η κατάλληλη περιγραφή τους αποτελεί βασικό κριτήριο για την λειτουργία ενός μοντέλου μπαταρίας [3,11].

Σε ιδανικές συνθήκες ο προσδιορισμός της διάρκειας ζωής της μπαταρίας μπορεί να υπολογιστεί ως εξής : $L = C/I$ όπου L (lifetime) διάρκεια ζωής, C χωρητικότητα (Ah) και I ρεύμα εκφόρτισης (A). Οι κατασκευαστές καθορίζουν την χωρητικότητα μιας μπαταρίας για ένα συγκεκριμένο ρυθμό εκφόρτισης. Για παράδειγμα μια μπαταρία μπορεί να θεωρηθεί της τάξης των $100Ah$ όταν εκφορτίζεται πλήρως με ρυθμό $5 A$ την ώρα δηλαδή σε 20 ώρες. Πρόκειται για εφαρμογή του νόμου Peukert $C_p = I^k t$, k σταθερά Peukert [5,6,11].

1.1 ΜΟΝΤΕΛΑ ΜΠΑΤΑΡΙΑΣ

Τα μοντέλα μπαταρίας έχουν αναπτυχθεί με στόχο την περιγραφή του τρόπου λειτουργίας της μπαταρίας ανάλογα με την εφαρμογή στην οποία πρόκειται να χρησιμοποιηθεί. Μερικοί από τους λόγους είναι οι εξής:

- Σχεδιασμός μπαταριών και χρήση π.χ. (σύνδεση με φωτοβολταϊκό δίκτυο, ηλεκτρικά αυτοκίνητα)
- Υπολογισμός απόδοσης
- Προσομοίωση κυκλωμάτων
- Διαχείριση ισχύος σε πραγματικό χρόνο

Δημιουργία μοντέλου

Όταν μιλάμε για μοντελοποίηση εννοούμε τις μαθηματικές εκφράσεις που προκύπτουν και περιγράφουν πως λειτουργούν τα κελιά μιας μπαταρίας τόσο εσωτερικά όσο και εξωτερικά. Μετά από πολλά στάδια ανάπτυξης τα τελικά μοντέλα θα περιλαμβάνουν κάποιες εξισώσεις , άλλες πιο πολύπλοκες και υπολογιστικά χρονοβόρες και άλλα μοντέλα θα περιγράφονται με πιο απλές εξισώσεις λαμβάνοντας αρκετούς περιορισμούς και παραδοχές. Κάθε μοντέλο θεωρεί διαφορετικά δεδομένα σαν είσοδο και παράγει τα αντίστοιχα αποτελέσματα.

Προσομοίωση μοντέλου

Για την προσομοίωση χρησιμοποιείται ο υπολογιστής και υπολογιστικά εργαλεία έτσι ώστε να προβλεφθεί η απόκριση της μπαταρίας σε μια στιγμιαία είσοδο. Χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις του εκάστοτε μοντέλου μπαταρίας για να υπολογιστεί η έξοδος. Θα περιγράψουμε τα μοντέλα των κελιών με κώδικα στη MATLAB.

Όσον αφορά τα είδη των μοντέλων κατηγοριοποιούνται ως εξής:

1. Ηλεκτρικά
2. Αναλυτικά (KiBaM, Pueker's Law, Rakhmatov and Vrudhula's)
3. Στοχαστικά
4. Ηλεκτροχημικά

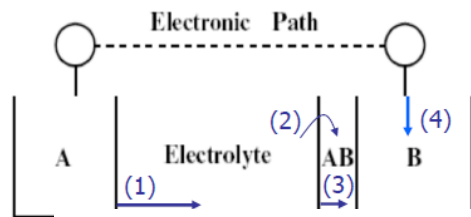
Θα αναφερθούμε στις μπαταρίες τύπου ιόντων – λιθίου. Οι Li-ion μπαταρίες αποτελούν καινοτομία στον τρόπο αποθήκευσης ενέργειας. Η χρήση τους έγινε απαραίτητη χάρη στη μεγάλη ενεργειακή τους πυκνότητα ,την μεγάλη διάρκεια ζωής και το χαμηλό βαθμό self-discharge. Η καλή απόδοσή τους και η σταδιακή μείωση του κόστους εισάγει τις Li-ion μπαταρίες σε συστήματα αποθήκευσης μεγάλης «ποσότητας» ενέργειας όπως ηλιακής και αιολικής ενέργειας. Βρίσκουν εφαρμογή σε υβριδικά ηλεκτρικά αυτοκίνητα , ηλεκτρικά αυτοκίνητα και σε smart grids. Επίσης δεν εμφανίζουν το φαινόμενο επίδρασης μνήμης (memory effect)[2].

1.1.1 ΗΛΕΚΤΡΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΜΠΑΤΑΡΙΑΣ

Τα πρώτα ηλεκτρικά μοντέλα παρουσιάστηκαν από τον Hageman. Χρησιμοποίησε απλά PSpice κυκλώματα για να προσομοιώσει μπαταρίες νικελίου-καδμίου, μόλυβδου οξέος και αλκαλικές. Για όλους αυτούς τους διαφορετικούς τύπους μπαταρίας η βάση είναι κοινή:

- Ο πυκνωτής αντιπροσωπεύει την χωρητικότητα της μπαταρίας
- Αντιστάτης που αντιπροσωπεύει την αντίσταση της μπαταρίας
- Πηγή τάσης

Στην εικόνα 1.1α παρουσιάζεται μια τομή του εσωτερικού της μπαταρίας .



Εικόνα 1.1α Χημικοί μηχανισμοί που προκαλούν την ωμική αντίσταση

Το A αντιστοιχεί στην άνοδο (-) και το B αντιστοιχεί στην κάθοδο (+). Όσον αφορά τον ηλεκτρολύτη πρόκειται για καλό αγωγό ιόντων. Έτσι μπορεί να γίνεται ανταλλαγή ιόντων μεταξύ ανόδου και καθόδου και η περίσσεια φορτίου στην άνοδο επιλέγει τον πιο σύντομο δρόμο, δηλαδή τον αγωγό που συνδέει εξωτερικά τα A και B , το electrical path.

Οι 4 χημικοί μηχανισμοί που προκαλούν αντίσταση. [6,7,9]

Από την εικόνα 1.1α (αντιστοιχία αριθμών):

1. Μεταβίβαση ιόντων A^+ στον ηλεκτρολύτη. Η διάχυση του ιόντος από το ηλεκτρόδιο στον ηλεκτρολύτη και το αντίστροφο παρεμποδίζεται καθώς μόρια προσελκύνονται λόγω της πολικότητας του και μειώνουν την ακτίνα επίδρασης προκαλώντας αντίσταση (r_1).
2. Μεταφορά φορτίου στον ηλεκτρολύτη- ηλεκτρόδιο. (r_2).. Μέσα στον ηλεκτρολύτη συμβαίνουν χημικές αντιδράσεις που δημιουργούν ένα στερεό σώμα. Η αντίσταση που αντιμετωπίζει το φορτίο κατά τη μεταφορά του όπως φαίνεται στην εικόνα μεταφράζεται σε αντίσταση στο κύκλωμα.
3. Μεταφορά ιόντων σε στερεά κατάσταση AB_2 (r_3).
4. Μεταφορά ηλεκτρονίων στην κάθοδο. Η αντίσταση που βρίσκει το ηλεκτρόνιο κατά τη μεταφορά στο εσωτερικό λόγω υλικού του ηλεκτροδίου (r_4).

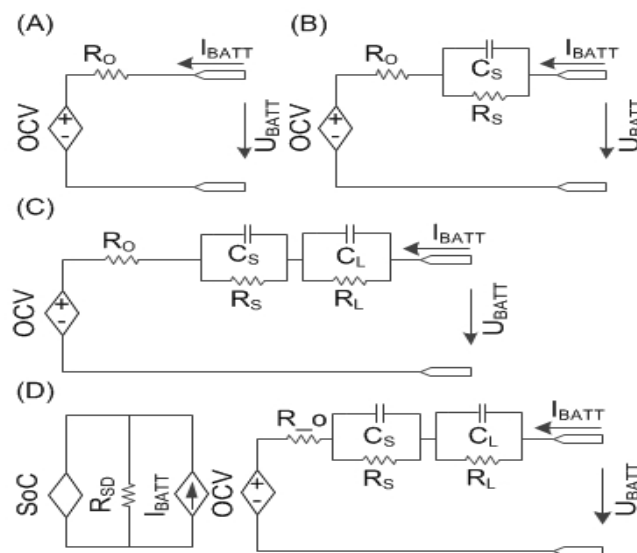
Η συνολική αντίσταση θα είναι το άθροισμα των επιμέρους αντιστάσεων που περιεγράφηκαν παραπάνω . Δεδομένου ότι αυτές οι αντιστάσεις είναι όλες εν σειρά στο κύκλωμα προκύπτει η εξίσωση:

$$R_0 = r_1 + r_2 + r_3 + r_4$$

Οι αντιστάσεις αυτές ισχύουν για όλα τα μοντέλα και είναι προϊόν ερμηνείας των χημικών φαινομένων σε ηλεκτρικά.

Τώρα μπορεί να γίνει κατανοητή η δημιουργία και η χρήση των μοντέλων αυτών. Επίσης προκύπτει ότι το ισοδύναμο ηλεκτρικό κύκλωμα είναι μια εύκολη και αρκετά διαδεδομένη λύση όσον αφορά την μοντελοποίηση των διαφόρων τύπων μπαταρίας. Διότι προσομοιώνει ένα σύστημα χρησιμοποιώντας δίκτυα αποτελούμενα μόνο από ηλεκτρικά μέρη. Προτιμάται αρκετά γιατί μπορεί να αποδώσει την ηλεκτρική συμπεριφορά ενός συστήματος μπαταρίας χωρίς να εμβαθύνει στις ηλεκτροχημικές αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα στο εσωτερικό της και είναι αρκετά δύσκολο να μοντελοποιηθούν[9]. Ένα απλό ηλεκτρικό κύκλωμα αποτελείται από μια πηγή τάσης σε σειρά με μια αντίσταση όπως φαίνεται στην εικόνα 1.1β(A). Είναι πολύ εύκολο να χρησιμοποιηθεί, ωστόσο για κάποιες εφαρμογές τα αποτελέσματα του μοντέλου μονής αντίστασης δεν μπορούν να αποδώσουν τα φαινόμενα μεταφοράς που συμβαίνουν στην μπαταρία. Για το λόγο αυτό ένα βήμα παρακάτω είναι η προσθήκη ενός κυκλώματος RC όπως φαίνεται στην εικόνα 1.1β(B) που βοηθά να περιγράψει καλύτερα την σχέση τάσης και κατάσταση φόρτισης της μπαταρίας για μεγάλες χρονικές περιόδους[6].

Επειδή οι πυκνωτές αποθηκεύουν ενέργεια με την μορφή ηλεκτρικού πεδίου τείνουν να συμπεριφέρονται σαν μικρά δευτερεύοντα κελιά, ικανά να αποθηκεύουν και να απελευθερώνουν ενέργεια. Όταν οι πυκνωτές τοποθετούνται σε ένα κύκλωμα με άλλες πηγές τάσης θα απορροφήσουν ενέργεια από αυτές τις πηγές και, όπως ένα δευτερεύον κελί μπαταρίας, θα φορτιστούν σαν αποτέλεσμα της σύνδεσής τους με γεννήτρια. Έτσι η προσθήκη τους είναι ιδιαίτερα σημαντική όταν το σύστημα έρχεται αντιμέτωπο με ξαφνική αλλαγή της εφαρμοζόμενης τάσης. Σε ένα RC κύκλωμα η τάση του πυκνωτή πηγαίνει από το ελάχιστο στο μέγιστο ενώ το ρεύμα αντίστροφα. Έτσι όσο περισσότερα κυκλώματα RC προστεθούν (εικόνα 1.1β(C) τόσο καλύτερα αποδίδουν την λειτουργία της μπαταρίας. Επίσης όπως φαίνεται στην εικόνα 1.1β(D) προστίθεται το run time μέρος που περιλαμβάνει την εκφόρτιση και πρόβλεψη μείωσης της χωρητικότητας της μπαταρίας.



Εικόνα 1.1β Απεικονίσεις διαφορετικών ηλεκτρικών ισοδύναμων μοντέλων : (A) μοντέλο μονής αντίστασης, (B) Thevenin μοντέλο, (C) Dual Polarization ή διπλό RC ισοδύναμο κύκλωμα, (D) run time μοντέλο [9].

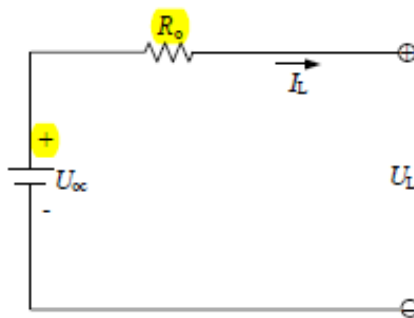
1.1.11 Απλό ηλεκτρικό μοντέλο

Με βάση τα παραπάνω για το κάθε κύκλωμα ξεχωριστά ισχύουν οι εξισώσεις:

Για το κύκλωμα της εικόνας 1.1.11 όπου $R_0 = r_1 + r_2 + r_3 + r_4$ η εσωτερική αντίσταση που περιεγράφηκε παραπάνω. Η τάση ανοιχτοκύκλωσης U_{oc} (open circuit voltage), η τάση τερματική στα άκρα του φορτίου U_L (load terminal voltage) και I_L το ρεύμα που διαρρέει. Εφαρμόζουμε νόμο τάσεων Kirchhoff και προκύπτει η εξίσωση (1):

$$U_L = U_{oc} - I_L R_0 \quad (1)$$

Ωστόσο το παραπάνω απλοποιημένο κύκλωμα δεν ανταποκρίνεται σε όλα τα φαινόμενα που συμβαίνουν κατά τη διάρκεια φόρτισης και εκφόρτισης της μπαταρίας και ούτε μπορεί να εκτιμήσει σωστά το SOC.



Εικόνα 1.1.11 απλό ηλεκτρικό κύκλωμα

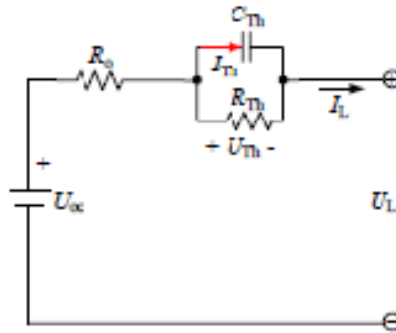
1.1.12 Μοντέλο THEVENIN

Επόμενο μοντέλο βασισμένο στο προηγούμενο είναι το Thevenin (εικόνα 1.1.12).

Σε σειρά με την αντίσταση R_0 τοποθετείται ένα κύκλωμα RC[2]. Η αντίσταση R_{th} συμβολίζει την πολικότητα των ιόντων και η χωρητικότητα C_{th} τα φαινόμενα μεταφοράς κατά την διαδικασία φόρτισης και εκφόρτισης. I_L παραμένει το ρεύμα εξόδου με θετική τιμή κατά την αποφόρτιση και αρνητική κατά την φόρτιση (ανάλογα την σύμβαση). Εφαρμόζουμε και εδώ νόμο τάσεων Kirchhoff και προκύπτει η τάση ως εξής[5,6,7]:

$$U_L = U_{oc} - U_{th} - I_L R_0 \quad (2)$$

$$\text{Και } U_{th} = -\frac{U_{th}}{R_{th} * C_{th}} + \frac{I_L}{C_{th}}$$



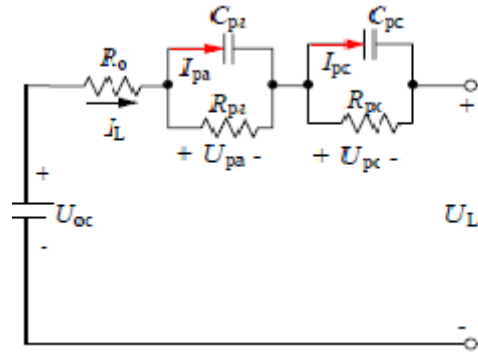
Εικόνα 1.1.12 μοντέλο Thevenin

Με αυτό το μοντέλο εξετάζεται η αντίδραση της μπαταρίας στις αλλαγές φορτίου σε μια συγκεκριμένη κατάσταση SOC υπό σταθερή τάση ανοιχτοκύκλωσης, $U_{oc}(SOC)$. Δυστυχώς όμως αυτή η υπόθεση καθιστά αδύνατο τον υπολογισμό των διάφορων μεταβολών στην τάση (steady state voltage variation) όπως dc response και πληροφορίες για το χρόνο λειτουργίας.

Υπάρχουν και κάποιες παραλλαγές του μοντέλου αυτού όπως η χρήση του ενός πυκνωτή αντί της τάσης ανοιχτοκύκλωσης. Αυτό γίνεται με στόχο την αναπαράσταση της μη γραμμικής σχέσης της V_{oc} και του SOC. Παρά το γεγονός ότι αυτό το μοντέλο καταφέρνει να δείξει την μη γραμμικότητα, περιπλέκει τις παραμέτρους του πυκνωτή και αγνοεί την μεταβατική συμπεριφορά. Στη συνέχεια χρειάζονται μαθηματικές εξισώσεις για να βρεθεί ο χρόνος λειτουργίας και το μοντέλο γίνεται πολυπλοκότερο και υπολογιστικά πιο χρονοβόρο [4].

1.1.12 DP (dual polarization) μοντέλο μπαταρίας

Το τρίτο μοντέλο που ανταποκρίνεται καλύτερα από τα 2 προηγούμενα και χρησιμοποιείται περισσότερο καθώς δίνει μικρότερο σφάλμα στην εκτίμηση της κατάστασης φόρτισης (SOC) είναι το DP μοντέλο (dual polarization)[2]. Πρόκειται για μια βελτιωμένη έκδοση του Thevenin προσθέτοντας εν σειρά ένα ακόμα RC κύκλωμα. Έτσι μπορεί να περιγράψουν με μεγαλύτερη ακρίβεια φαινόμενα μεταφοράς και αποθήκευσης ενέργειας. Για παράδειγμα όταν η επιφάνεια του ηλεκτροδίου έρχεται σε επαφή με υγρό, όπως ο ηλεκτρολύτης, τότε εμφανίζεται μια δομή στην διεπιφάνεια. Δημιουργούνται δύο παράλληλες στρώσεις φορτίου που περιβάλλουν το ηλεκτρόδιο. Πρόκειται για το φαινόμενο που περιγράφει καλύτερα ο Helmholtz και ονομάζεται double layer (interfacial)[3]. Αυτό το παράλληλο στρώμα από μία σειρά θετικά ιόντα και μια σειρά αρνητικά μπορεί να περιγράψει καλύτερα σαν ένας πυκνωτής C_{pc} , ενώ η αντίσταση που αντιμετωπίζουν στη μεταφορά τους τα ηλεκτρόνια εξαιτίας της δημιουργίας του στρώματος αυτού μεταφράζεται σαν αντίσταση R_{pc} . Στην εικόνα παρουσιάζεται το DP ή NP μοντέλο[5,9,12].



Εικόνα 1.1.13 Dual Polarization μοντέλο

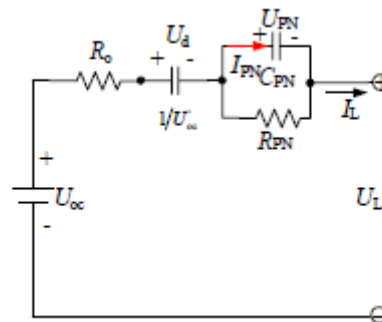
Η ηλεκτρική συμπεριφορά του μοντέλου δίνεται με τις εξής εξισώσεις :

$$\text{Νόμος τάσεων Kirchoff : } U_L = U_{0c} - U_{pa} - U_{pc} - I_L R_0$$

$$\text{Και } U_{pc} = -\frac{U_{pc}}{R_{pc} * C_{pc}} + \frac{I_L}{C_{pc}}$$

$$\text{Και } U_{pa} = -\frac{U_{pa}}{R_{pa} * C_{pa}} + \frac{I_L}{C_{pa}}$$

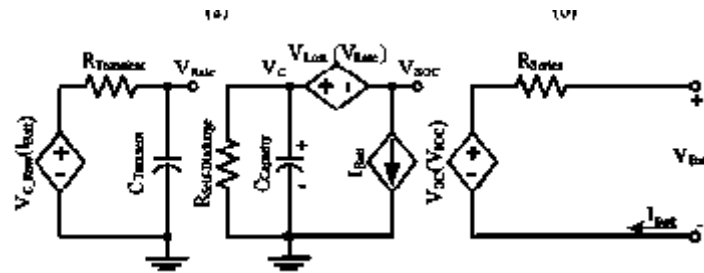
1.1.14 PNGV μοντέλο



Εικόνα 1.1.14 PNGV μοντέλο

Όπως φαίνεται και στην εικόνα 1.1.14 πρόκειται για μια παραλλαγή του Thevenin μοντέλου, όπου προστίθεται σε σειρά και ανάμεσα με την εσωτερική αντίσταση και το RC κύκλωμα ένας πυκνωτής. Αυτός χρησιμοποιείται για να καταγράψει την αλλαγή στην τάση ανοιχτοκύκλωσης συναρτήσει του ρεύματος φορτίου. Επομένως δεν μπορούμε να θεωρήσουμε ότι αυτή παραμένει σταθερή[7,8,12].

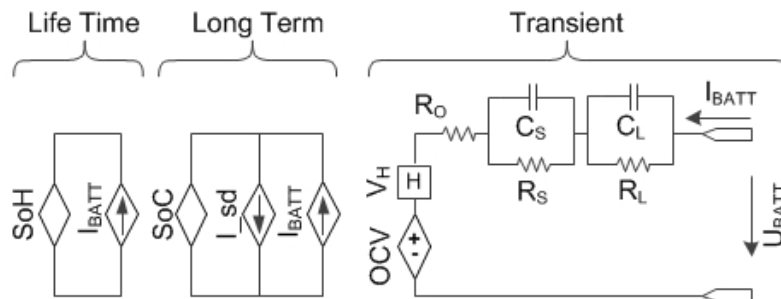
1.1.15 Run time based



Εικόνα 1.1.15 Run time μοντέλο

Το run time μοντέλο χρησιμοποιεί πολύπλοκο δίκτυο υπολογισμού του χρόνου λειτουργίας και της dc απόκρισης της τάσης κάτω από ένα συνεχές ρεύμα εκφόρτισης. Χρησιμοποιεί εξαρτημένες πηγές τάσης και ρεύματος ωστόσο έχει περιορισμένη ικανότητα στο να προβλέπει τα φαινόμενα μεταφοράς της μπαταρίας.

Ένα αρκετά καλό μοντέλο που χρησιμοποιείται στην δημοσίευση [5] είναι συνδυασμός του Thevenin DP και του run time based (εικόνα 1.1.15). Στα αριστερά ένα κομμάτι από το run time μοντέλο χρησιμοποιεί εξαρτημένη πηγή ρεύματος, αντίσταση και πυκνωτή για να μοντελοποιήσει το SOC, την χωρητικότητα και το χρόνο λειτουργίας ενώ χρησιμοποιεί και μια εξαρτημένη πηγή τάσης για να συσχετίσει το SOC και την Voc. Το δεύτερο κύκλωμα ανταποκρίνεται στα ηλεκτροχημικά φαινόμενα που συμβαίνουν στην φόρτιση – εκφόρτιση της μπαταρίας[7,8,9].



Εικόνα 1.1.51 Συνδυασμός ηλεκτρικών μοντέλων Thevenin και Run Time .

Το παραπάνω μοντέλο αναπαριστά την τερματική τάση U_{batt} σαν άθροισμα πέντε τάσεων.

$$U_{batt} = V_L + V_S + V_O + V_H + OCV$$

Όπου V_L και V_S είναι οι τάσεις στις αντίστοιχες αντιστάσεις R_L και R_S , V_O είναι η τάση ωμικών απωλειών πάνω στην αντίσταση R_O και V_H η τάση υστέρησης.

V_L και V_S βρίσκονται με την ολοκλήρωση του ρεύματος μέσα από τους κλάδους RC του παραπάνω κυκλώματος[9,12].

$$\frac{dU_S}{dt} = \frac{-1}{R_S C_S} U_S + \frac{1}{C_S} I_{batt}$$

$$\frac{dU_L}{dt} = \frac{-1}{R_L C_L} U_L + \frac{1}{C_L} I_{batt}$$

Και

$$V_O = R_O I_{batt}$$

Το συνδυαστικό αυτό μοντέλο αναπαριστά την δυναμική απόκριση σε στιγμιαίες μεταβολές ρεύματος και θερμοκρασίας φορτίου. Όταν οι μπαταρίες χρησιμοποιούνται, προβλέπει την τάση ανοιχτοκύκλωσης και την απόδοση. Το δεύτερο σκέλος (Long term) αντιπροσωπεύει τη διαφοροποίηση του SOC εξαιτίας των κύκλων φόρτισης και εκφόρτισης. Το πρώτο σκέλος (life-time) προσδιορίζει την διάρκεια ζωής της μπαταρίας μέσω της χωρητικότητας, των κύκλων ζωής και την ημερολογιακή γήρανση της μπαταρίας[7].

Παρόλη την ικανότητα του τελευταίου βελτιστοποιημένου μοντέλου για τον προσδιορισμό όλων των χαρακτηριστικών συναρτήσεων που αντιπροσωπεύουν την λειτουργία της μπαταρίας καθ' όλη την διάρκεια ζωής, το μέσο σφάλμα ανέρχεται στο 10% ενώ το μέγιστο αγγίζει και το 14% .

1.1.2 ΑΝΑΛΥΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΜΠΑΤΑΡΙΑΣ

Το μεγαλύτερο μέρος των ιδιοτήτων της μπαταρίας μοντελοποιείται χρησιμοποιώντας λιγότερες εξισώσεις από το ηλεκτροχημικό που θα μελετήσουμε παρακάτω, γεγονός που το καθιστά πιο εύχρηστο[11,14,15].

1.1.21 Rakhmatov and Vrudhula

Βασίζεται στο νόμο του Peukert που όπως αναφερθήκαμε παραπάνω αποτυπώνει την μη γραμμική σχέση μεταξύ της διάρκειας ζωής της μπαταρίας και του ρυθμού εκφόρτισης. Το μοντέλο περιγράφει την διαδικασία διάχυσης του ενεργού υλικού στην μπαταρία. Η διάχυση θεωρείται ότι είναι μονοδιάστατη σε μια περιοχή μήκους w . $C(x, t)$ είναι η συγκέντρωση του ενεργού υλικού τη χρονική στιγμή t σε απόσταση $x \in [0, w]$ από το ηλεκτρόδιο. Για να καθορίσουμε την διάρκεια ζωής της μπαταρίας πρέπει να υπολογίσουμε τον χρόνο στον οποίο η συγκέντρωση στην επιφάνεια του ηλεκτροδίου $C(0, t)$, πέφτει κάτω από το όριο C_{cutoff} . Η μονοδιάστατη διάχυση προέρχεται από το νόμο του Fick ως εξής:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}$$
$$-J(x, t) = D \frac{\partial C(x, t)}{\partial x}$$

Όπου $J(x, t)$ είναι η ροή του ενεργού υλικού σε χρόνο t και θέση x , D είναι η σταθερά διάχυσης. Σύμφωνα με το νόμο του Faraday, η ροή στο αριστερό όριο της περιοχής διάχυσης είναι ανάλογη του ρεύματος $i(t)$. Η ροή στο δεξί όριο ($x = w$) είναι μηδέν. Αυτό μας δίνει τις παρακάτω οριακές συνθήκες:

$$\begin{cases} D \frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \frac{i(t)}{vFA} \text{ για } x = 0 \\ D \frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = 0 \text{ για } x = w \end{cases}$$

Όπου A είναι το εμβαδόν της επιφάνειας του ηλεκτροδίου , F είναι η σταθερά Faraday ($96485.31 \text{ C mol}^{-1}$) , ν είναι ο αριθμός ηλεκτρονίων που εμπλέκονται στην αντίδραση στην επιφάνεια του ηλεκτροδίου. Είναι πιθανό να αποκτήσουμε μια αναλυτική λύση από αυτές τις διαφορικές εξισώσεις και τις οριακές συνθήκες χρησιμοποιώντας τους μετασχηματισμούς Laplace. Από το νόμο Peukert μπορούμε να καταλήξουμε στη μαθηματική έκφραση που σχετίζει το φορτίο , την διάρκεια ζωής της μπαταρίας (L) και τις παραμέτρους της μπαταρίας:

$$\alpha = \int_0^L \frac{i(t)}{\sqrt{L-\tau}} d\tau + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \int_0^L \frac{i(t)}{\sqrt{L-\tau}} e^{-\frac{\beta^2 m^2}{L-\tau}} d\tau$$

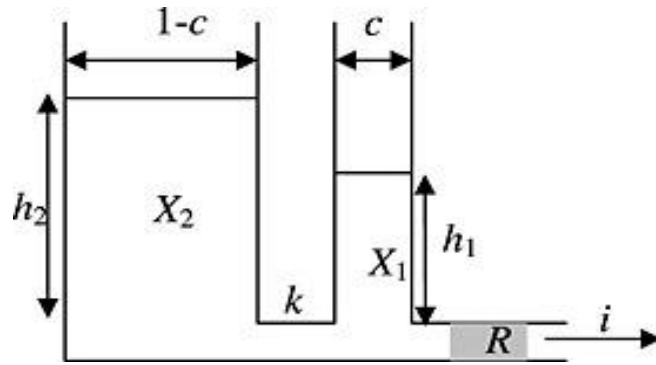
Όπου $\alpha = \nu F A \sqrt{\pi D} C^* \rho(L)$ αντιπροσωπεύει την χωρητικότητα της μπαταρίας, που σε ιδανικές συνθήκες θα έπρεπε να είναι ίσες, $\beta = \frac{w}{\sqrt{D}}$, C^* είναι η συγκέντρωση τη χρονική στιγμή $t=0$ και $\rho(L) = 1 - \frac{C(0,L)}{C^*}$. Στην ειδική περίπτωση που το ρεύμα εκφόρτισης είναι σταθερό (I) η έκφραση για το α απλοποιείται ως εξής: $\alpha = 2I\sqrt{L} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \sqrt{L} e^{-\frac{\beta^2 m^2}{L}} - \beta m \sqrt{\pi} \Phi\left(\frac{\beta m}{\sqrt{L}}\right)$ όπου $\Phi(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy$ [15,18,19]. Με μια προσέγγιση για την χωρητικότητα παίρνοντας τους 10 πρώτους όρους από το άπειρο άθροισμα , μαζί με την προσέγγιση για το δυναμικό Φ έχουμε:

$$\alpha = 2I\sqrt{L} \left(1 + 2 \sum_1^{10} \left(e^{-\frac{\beta^2 m^2}{L}} - \frac{\pi e^{-\frac{\beta^2 m^2}{L}}}{\pi - 1 + \sqrt{1 + \pi \frac{L}{\beta^2 m^2}}} \right) \right)$$

Με την τελευταία εξίσωση μπορεί να προβλεφθεί η διάρκεια ζωής της μπαταρίας για ένα γνωστό ρεύμα εκφόρτισης. Για να μπορέσουν να γίνουν αυτοί οι υπολογισμοί πρέπει να υπολογισθεί το α και το β από τα πειραματικά δεδομένα. Σε σύγκριση με πειραματικά δεδομένα το συγκεκριμένο αναλυτικό μοντέλο είχε αρκετά καλή συμπεριφορά. Δηλαδή στην πρόβλεψη του SOC είχε μέγιστο σφάλμα εκτίμησης γύρω στο 2.7% και μέσο σφάλμα περίπου 1%, συνεπώς αναπαριστά καλύτερα τα φαινόμενα της μπαταρίας[5].

1.1.22 KiBaM αναλυτικό μοντέλο

Το πιο γνωστό από τα αναλυτικά μοντέλα είναι το κινητικό μοντέλο ή Kinetic Battery Model (KiBaM) του Manwell και McGowan. Ονομάζεται κινητικό γιατί χρησιμοποιεί την χημική κινητική , δηλαδή εκμεταλλεύεται τις χημικές αντιδράσεις αλλά και την ταχύτητα με την οποία συμβαίνουν στην βάση τους. Στο μοντέλο αυτό η φόρτιση συμβαίνει μεταξύ δύο πηγαδιών : το πηγάδι με διαθέσιμο φορτίο και με το περιορισμένο φορτίο[14,15].



Εικόνα 1.1.22 ΚίBaM μοντέλο περιγραφή της λειτουργίας των δύο πηγαδιών

Όπως φαίνεται στην εικόνα 1.1.22 το πηγάδι με το διαθέσιμο φορτίο X_1 προμηθεύει με ηλεκτρόνια το φορτίο απευθείας. Το πηγάδι περιορισμένου φορτίου προμηθεύει με ηλεκτρόνια μόνο το διαθέσιμο. Υπάρχει δηλαδή ροή ηλεκτρονίων από το X_2 στο X_1 και στο φορτίο. Ο ρυθμός με τον οποίο το φορτίο ρέει μεταξύ των δύο πηγαδιών εξαρτάται από το ύψος τους και από την παράμετρο k . Η παράμετρος c δίνει το όριο του συνολικού φορτίου μέσα στην μπαταρία και καθορίζεται από το πηγάδι του διαθέσιμου φορτίου. Η αλλαγή φορτίου και για τα δύο πηγάδια δίνεται από ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων:

$$\frac{dX_1}{dt} = -I + k(h_2 - h_1)$$

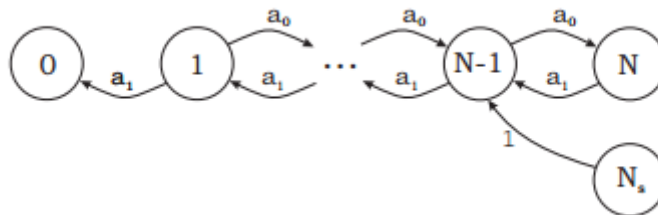
$$\frac{dX_2}{dt} = -k(h_2 - h_1)$$

Με αρχικές συνθήκες $X_1(0) = c \cdot C$ και $X_2(0) = (1 - c)C$, όπου C η χωρητικότητα της μπαταρίας. Για το h_1 και h_2 έχουμε $h_1 = X_1/c$ και $h_2 = X_2/(1 - c)$. Όταν εφαρμόζεται φορτίο στην μπαταρία το διαθέσιμο φορτίο μειώνεται και η διαφορά στα ύψη των δύο πηγαδιών αυξάνεται. Όταν το φορτίο αφαιρείται τότε ηλεκτρόνια μεταφέρονται από το πηγάδι περιορισμένου φορτίου στο πηγάδι διαθέσιμου φορτίου μέχρι τα ύψη h_1 και h_2 να γίνουν ίσα ξανά. Η τάση ανοιχτοκύκλωσης αυξάνεται και τώρα περισσότερο φορτίο είναι διαθέσιμο απ' ό,τι θα ήταν αν είχε συνδεθεί απευθείας στο εξωτερικό φορτίο μέχρι το ύψος h_1 να γίνει μηδενικό. Έτσι κατά την διάρκεια μιας περιόδου αδράνειας γίνεται διαθέσιμο περισσότερο φορτίο και η μπαταρία διαρκεί περισσότερο, από ό,τι θα διαρκούσε αν εφαρμοζόταν φορτίο συνεχόμενα. Το ΚίBaM μοντέλο είναι αρκετά χρήσιμο και περιγράφει αρκετά καλά τα φαινόμενα recovery και rate capacity που συμβαίνουν στην μπαταρία. Ωστόσο παρά την ικανότητα του να προβλέπει τις μη γραμμικές συμπεριφορές της χωρητικότητας, αδυνατεί να προβλέψει τα δυναμικά χαρακτηριστικά της μπαταρίας ($I - V$) [14].

1.1.3 ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΜΠΑΤΑΡΙΑΣ

Τα στοχαστικά μοντέλα περιγράφουν το συσσωρευτή με ένα πιο περιληπτικό τρόπο, όπως περίπου τα αναλυτικά. Ωστόσο η διαδικασία εκφόρτισης και το φαινόμενο recovery περιγράφονται σαν στοχαστική διαδικασία.

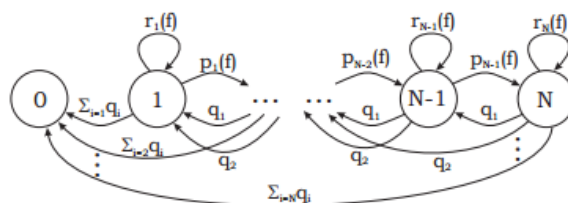
Το πρώτο στοχαστικό μοντέλο αναπτύχθηκε από τους Chiasserini και Rao, οι οποίοι κατέχουν μια σειρά από δημοσιεύσεις με θέμα την μοντελοποίηση μπαταρίας βασιζόμενη στις Μαρκοβιανές αλυσίδες διακριτού χρόνου. Στην πιο απλή μορφή του μοντέλου η μπαταρία παρουσιάζεται σαν μια μαρκοβιανή αλυσίδα διακριτού χρόνου με $N+1$ καταστάσεις, από το 0 μέχρι N (εικόνα 1.1.31). Ο αριθμός κατάστασης αντιστοιχεί στον αριθμό μονάδων φορτίου που είναι διαθέσιμα σε μια κυψελίδα. Ο Chiasserini και Rao χρησιμοποιούν το στοχαστικό μοντέλο για να περιγράψουν την μεταφορά δεδομένων από μία κινητή συσκευή. Επομένως σαν μονάδα φορτίου ορίζεται το ποσό ενέργειας που χρειάζεται για να μεταδοθεί ένα πακέτο δεδομένων. N είναι ο αριθμός των μονάδων φορτίου που είναι άμεσα διαθέσιμες όταν έχουμε συνεχή χρήση της συσκευής. Σε αυτό το μοντέλο σε κάθε βήμα χρόνου είτε καταναλώνεται φορτίο με πιθανότητα $a_1 = q$ ή ανακτάται μονάδα φορτίου με πιθανότητα $a_0 = 1 - q$. Η μπαταρία θεωρείται άδεια όταν το στάδιο απορρόφησης 0 έχει ολοκληρωθεί ή όταν ο μέγιστος αριθμός T μονάδων φορτίου έχει καταναλωθεί. Ο αριθμός T είναι ίσος με την θεωρητική χωρητικότητα της μπαταρίας ($T > N$) [14,15].



Εικόνα 1.1.31 Η βασική μαρκοβιανή αλυσίδα μοντέλου μπαταρίας από τους Chiasserini και Rao

Το δεύτερο μοντέλο που περιγράφεται είναι μια εκτενέστερη μορφή του παραπάνω. Πάλι έχουμε την μαρκοβιανή αλυσίδα διακριτού χρόνου με $N + 1$ καταστάσεις. Στην περίπτωση αυτή όμως στο μοντέλο αυτό μπορούν να καταναλωθούν περισσότερες από μια μονάδες φορτίου σε οποιοδήποτε βήμα χρόνου, με το μέγιστο των μονάδων φορτίου να είναι $M \leq N$. Με αυτό τον τρόπο μία πιο απότομη κατανάλωση ενέργειας μπορεί να αναπαρασταθεί.

Ένα νέο ζήτημα είναι ότι υπάρχει μη μηδενική πιθανότητα να παραμείνει στην ίδια κατάσταση. Αυτό σημαίνει ότι ούτε κατανάλωση ούτε το φαινόμενο recovery λαμβάνει χώρα κατά τη διάρκεια ενός βήματος χρόνου [11,14].



Εικόνα 1.1.32 Η εκτενέστερη μορφή της μαρκοβιανής αλυσίδας

Ουσιαστικά το στοχαστικό μοντέλο επικεντρώνεται στο φαινόμενο recovery και μοντελοποιεί την μπαταρία σαν μια Μαρκοβιανή διαδικασία με πιθανοτικές σχέσεις που μπορούν να συσχετιστούν με τα φυσικά χαρακτηριστικά ενός ηλεκτροχημικού κελιού. Ένα πλήρως φορτισμένο κελί υποτίθεται πως έχει μια μέγιστη διαθέσιμη χωρητικότητα από T μονάδες φορτίου και μια ονομαστική χωρητικότητα από N μονάδες, ενώ η μονάδα φορτίου καθορίζει την διακριτότητα της μεταφοράς φορτίου [14,15,16]. Η ονομαστική χωρητικότητα N είναι αρκετά μικρότερη από την T στην πραγματικότητα και αντιπροσωπεύει το φορτίο που θα μπορούσε να καταναλωθεί χρησιμοποιώντας ένα σταθερό προφίλ εκφόρτισης. Επιτρέποντας μικρές περιόδους χαλάρωσης, η μπαταρία μεταξύ των εκφορτίσεων μπορεί να ανακτήσει μερικώς το φορτίο της και έτσι μπορούμε να έχουμε ένα μεγαλύτερο αριθμό μονάδων φορτίου από την ονομαστική N . Το μοντέλο αυτό είναι αρκετά γρήγορο αλλά φάνηκε να μην ανταποκρίνεται ιδιαίτερα στις πειραματικές παρατηρήσεις.

1.1.4 ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

Η κατασκευή του ηλεκτροχημικού μοντέλου βασίζεται στην θεωρία του πορώδους ηλεκτροδίου. Αυτό συμβαίνει γιατί η ηλεκτροχημεία είναι εξ ορισμού ένα φαινόμενο που συμβαίνει στην διεπιφάνεια των υλικών, συνήθως εκεί που ένα υγρό και ένα στερεό συναντιούνται. Τα πορώδη ηλεκτρόδια προσφέρουν μια μεγάλη επιφάνεια που επιτρέπει σε μικρό χώρο να συμβαίνουν πολλές αντιδράσεις. Τα ηλεκτρόδια καταλαμβάνουν τον περισσότερο χώρο μέσα στην μπαταρία. Αποτελούνται από σωματίδια, ενώ ο ηλεκτρολύτης γεμίζει τα κενά. Ένας πορώδης διαχωριστής όπως περιεγράφηκε παραπάνω εμποδίζει την άνοδο και κάθοδο να έρθουν σε επαφή αποτρέποντας το βραχυκύκλωμα. Η θεωρία του πορώδους ηλεκτροδίου και η κατανόηση του είναι αρκετά συγγενής με την κατανόηση των φαινομένων μεταφοράς που λαμβάνουν χώρα σε μια μπαταρία και θα εξηγηθεί αναλυτικά στο επόμενο κεφάλαιο [17,19,20].

Το ηλεκτροχημικό μοντέλο εφαρμόζεται σε ένα πλήθος μπαταριών τις τελευταίες δεκαετίες. Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιείται για να περιγράψει με όσο το δυνατόν μεγαλύτερη ακρίβεια τις διαδικασίες που οδηγούν στην μείωση της απόδοσης της μπαταρίας ενώ ταυτόχρονα δίνει την δυνατότητα για βελτίωση του σχεδιασμού της. Μπορεί να περιγράψει τη μάζα, την ενέργεια και τη στιγμιαία μεταφορά οποιουδήποτε στοιχείου σε οποιαδήποτε φάση και θέση στο κελί [17]. Τα θερμοδυναμικά και κινητικά φαινόμενα των ηλεκτροχημικών και χημικών αντιδράσεων περιγράφονται από το μοντέλο. Περιλαμβάνει διπλές μερικές διαφορικές εξισώσεις που πρέπει να λυθούν στον χρόνο για όλες τις χωρικές διαστάσεις. Έτσι δεν έχει μόνο την ικανότητα να προβλέπει μακροσκοπικές ποσότητες όπως η τάση και το ρεύμα αλλά

και την συνεισφορά της συγκέντρωσης του ενεργού υλικού, των δυναμικών, του ρεύματος και της θερμοκρασίας μέσα στο κελί από μικροσκοπική άποψη. Η δυνατότητα αυτή δίνει σημαντικά πλεονεκτήματα στην μελέτη της λειτουργίας της μπαταρίας και των χαρακτηριστικών της. Η συγκέντρωση λιθίου για παράδειγμα συνδέεται άμεσα με την δημιουργία δυναμικών στις διάφορες φάσεις στο κελί [24]. Οι κυρίαρχες εξισώσεις που πρέπει να λάβει υπόψη λοιπόν είναι και αυτή της διάχυσης των συγκεντρώσεων που καθορίζουν και την συμπεριφορά της τάσης της μπαταρίας και του ρεύματος που τροφοδοτεί το φορτίο [20,21].

Οι Doyle, Fuller και Newman [4,23] ανέπτυξαν το πλήρες ηλεκτροχημικό μοντέλο για κελιά ιόντων-λιθίου. Το μοντέλο αυτό αποτελείται από έξι διπλές μη γραμμικές διαφορικές εξισώσεις. Λύνοντας αυτές τις εξισώσεις προκύπτει η τάση και το ρεύμα συναρτήσεως του χρόνου καθώς και τα δυναμικά στην ηλεκτρολυτική φάση και στα ηλεκτρόδια, η συγκέντρωση, ο ρυθμός αντίδρασης και η πυκνότητα ρεύματος στην ηλεκτρολυτική φάση συναρτήσεως του χρόνου και της θέσης των σωματιδίων μέσα στο κελί [4]. Το Dualfoil [23] είναι ένα πρόγραμμα στη Fortran και χρησιμοποιείται για προσομοίωση μπαταριών ιόντων λιθίου. Υπάρχει δωρεάν στο ίντερνετ και σκοπός του είναι να χρησιμοποιηθεί τόσο από κατασκευαστές όσο και από ερευνητές. Αποτελεί το σημείο αναφοράς για όλα τα άλλα μοντέλα, ενώ το ποσοστό ακρίβειας είναι τέτοιο που σε ορισμένες περιπτώσεις χρησιμοποιείται αντί των πειραματικών δεδομένων. Από τα δεδομένα εξόδου προκύπτει η διάρκεια ζωής της μπαταρίας, η κατάσταση φόρτισης ενώ υπολογίζει όλα τα στοιχεία εκείνα που αλλάζουν στο χρονικό διάστημα εφαρμογής ενός προφίλ φορτίου που επιλέγει ο χρήστης [20,23].

Ωστόσο λόγω της πολυπλοκότητας και του χρόνου που χρειάζεται ένα πλήρες ηλεκτροχημικό μοντέλο, αναπτύχθηκαν μοντέλα πιο απλοποιημένα. Στόχος ήταν να μειωθεί ο χρόνος και η δυσκολία που προέρχεται από την φυσική της μπαταρίας χωρίς να χαθεί η ικανότητα του μοντέλου για ακριβή αποτελέσματα, όπως η λειτουργία σε ασφαλή και αξιόπιστα όρια, η συγκέντρωση στην στερεή και υγρή φάση που θα οδηγήσει σε ασφαλή συμπεράσματα για την ακριβή χωρητικότητα της μπαταρίας. Ένα τέτοιο μοντέλο θα παρουσιαστεί λεπτομερώς στο επόμενο κεφάλαιο [24].

1.2 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Η ανασκόπηση της βιβλιογραφίας μας βοηθά να κατανοήσουμε τα υπάρχοντα μοντέλα μπαταρίας και ανάλογα με τις ανάγκες να επιλέξουμε ένα μοντέλο είτε πολύπλοκο είτε πιο απλό, που να εξακολουθεί να δίνει μια καλή περιγραφή για τα πιο σημαντικά μη γραμμικά φαινόμενα όπως το rate capacity και το φαινόμενο διακοπτόμενης εκφόρτισης (recovery)[11,14,15].

Πίνακας 1.2 Συγκεντρωτικός πίνακας μοντέλων μπαταρίας

ΜΟΝΤΕΛΟ	Τύπος Μπαταρίας	Rate Capacity φαινόμενο	Recovery φαινόμενο	εξισώσεις	ακρίβεια
Dualfoil	Li-ion	√	√	>50	Πολύ μεγάλη
Chiasserini	Li-ion	×	√	2	Μεγάλη 1% σφάλμα
Rakhmatov& Vrudhula	Li-ion	√	√	2	Μεγάλη 5% σφάλμα
KiBaM	Μόλυβδου οξέος	√	√	2	Μεγάλη
Ηλεκτρικό Μοντέλο	Li-ion, Ni-Cd, αλκαλική	√	√	15-30	Μεσαία
Peukert	όλες	√	×	2	Μεσαία 10% σφάλμα

Ο πίνακας 1.2 [14] συγκεντρώνει τα διαφορετικά μοντέλα που παρουσιάστηκαν και τις σχετικές ιδιότητες τους. Παρόλο που το ηλεκτροχημικό μοντέλο είναι το πιο αξιόπιστο και τα δεδομένα από το πρόγραμμα Dualfoil χρησιμοποιούνται συχνά ως πραγματικά για να συγκριθούν με άλλα μοντέλα, είναι αρκετά πολύπλοκο για τις δικές μας ανάγκες. Μία αρκετά λεπτομερής γνώση της μπαταρίας είναι απαραίτητη για να μπορέσει να μοντελοποιηθεί. Επιπλέον είναι υπολογιστικά χρονοβόρο αφού το να λυθούν έξι διπλές μερικές διαφορικές εξισώσεις είναι αρκετά πολύπλοκο και κάνει αργό το πρόγραμμα[14]. Παρόλα αυτά είναι το πιο αξιόπιστο γι' αυτό βρίσκεται και στην κορυφή του πίνακα.

Από την άλλη μεριά το αναλυτικό μοντέλο Peukert είναι πάρα πολύ απλό και δεν περιγράφει όλα τα φαινόμενα, οδηγώντας αναπόφευκτα σε μεγαλύτερο σφάλμα. Δεν λαμβάνει υπόψη το recovery φαινόμενο και γι' αυτό δεν εκτιμά σωστά την διάρκεια ζωής της μπαταρίας για χρονικές περιόδους αδράνειας. Συνεπώς συνηθίζεται το μοντέλο αυτό να χρησιμοποιείται συνδυαστικά με κάποιο άλλο.

Το στοχαστικό μοντέλο Chiasserini έχει μεν μεγάλη ακρίβεια αλλά στηρίζεται μόνο στο φαινόμενο recovery. Το μοντέλο είναι σχεδιασμένο μόνο για να λειτουργεί με παλμικό ρεύμα ενώ δεν ανταποκρίνεται σε τυχαία προφίλ ρεύματος φόρτισης και εκφόρτισης[14,17].

Το KiBaM και το μοντέλο του Rakhmatov & Vrudhula λαμβάνουν υπόψη και τα δύο φαινόμενα. Χρησιμοποιούν και τα δύο μοντέλα ένα σύστημα δύο διαφορικών εξισώσεων για να περιγράψουν την μπαταρία και μπορούν να υπολογίσουν την διάρκεια ζωής της μπαταρίας για ένα τυχαίο σταθερό προφίλ φορτίου[15]. Ωστόσο οι διαφορικές δεύτερης τάξης του Rakhmatov & Vrudhula το κάνουν λίγο δύσκολο να συνδυαστεί με κάποιο άλλο υπολογιστικό μοντέλο. Από την άλλη οι διαφορικές που χρησιμοποιούνται στο KiBaM μοντέλο δίνουν μια πιο καθαρή εικόνα της συμπεριφοράς της μπαταρίας και πιο κατανοητή. Αυτό το κάνει να είναι πιο ψηλά στις προτιμήσεις όσων θέλουν να χρησιμοποιήσουν ένα πιο ευέλικτο , κατανοητό και αξιόπιστο μοντέλο για τις διάφορες ανάγκες τους.

Το ηλεκτρικό μοντέλο λαμβάνει υπόψη και τα δύο φαινόμενα. Ωστόσο ο συνδυασμός πυκνωτών-αντιστάσεων για την περιγραφή τους δεν αρκεί. Τα δύο αυτά ηλεκτρικά στοιχεία είναι πιο κατανοητά καθώς μεταφράζουν δύσκολες χημικές διεργασίες με ηλεκτρικά στοιχεία ,παρόλα αυτά σε μεγάλες χρονικές περιόδους οι αποκλίσεις από τις τιμές μιας πραγματικής μπαταρίας είναι μεγάλες [10]. Τα ηλεκτρικά κυκλώματα που απαιτούνται για να περιγράψουν επαρκώς τα φαινόμενα είναι μεγάλα , με συνέπεια οι εξισώσεις που χρησιμοποιούνται να είναι αρκετές (15-30).

Κεφάλαιο 2^ο

2.1 ΠΛΗΡΕΣ ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

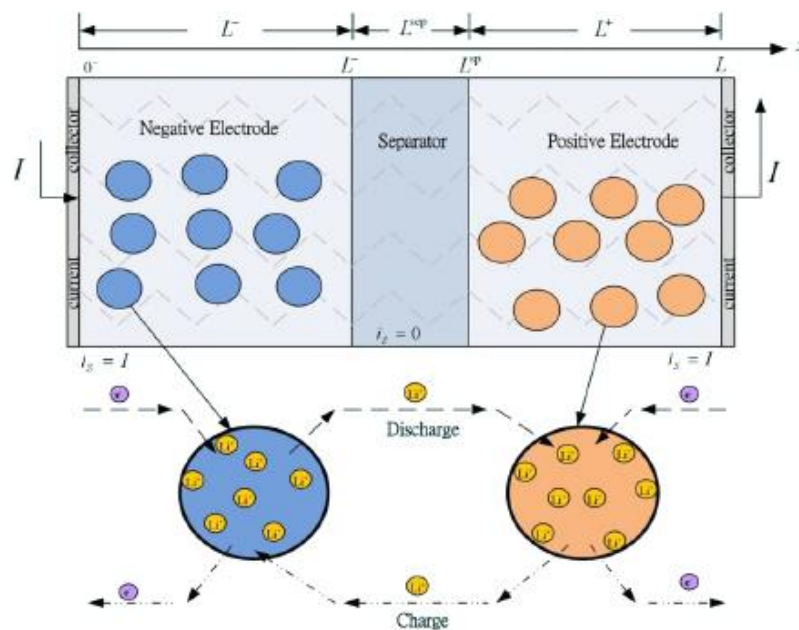
Μια τυπική μπαταρία λιθίου όπως αναφέρθηκε και στο 1^ο κεφάλαιο αποτελείται από τρία κύρια μέρη : το αρνητικό ηλεκτρόδιο (άνοδος) , τον διαχωριστή ,και το θετικό ηλεκτρόδιο (κάθοδος) [26,27,28]. Όλα αυτά τα τρία στοιχεία βρίσκονται βυθισμένα σε ένα ηλεκτρολυτικό διάλυμα που συντίθεται από άλας λιθίου και οργανικούς διαλύτες όπως $LiPF_6$, $LiBF_4$ ή $LiClO_4$. Η άνοδος είναι συνδεδεμένη με το αρνητικό τερματικό του κελιού και συνήθως είναι κατασκευασμένη από γραφίτη. Η κάθοδος είναι συνδεδεμένη με το θετικό τερματικό του κελιού και είναι κατασκευασμένη από μεταλλικά οξειδία λιθίου. Η ηλεκτροχημική διαδικασία συμβαίνει στην διεπαφή μεταξύ ηλεκτροδίου και ηλεκτρολύτη.

Η μπαταρία που περιγράφουμε εμείς χρησιμοποιεί το λίθιο φωσφορικό άλας σιδήρου ($LiFePO_4$ ή για συντομία LFP) σαν υλικό καθόδου [25,26,27]. Ο ηλεκτρολύτης ανήκει στην κατηγορία των υγρών ηλεκτρολυτών που όπως αναφέρθηκε παραπάνω είναι διαλύματα άλατος λιθίου σε οργανικούς διαλύτες, συνήθως ανθρακικά άλατα. Τέτοιες μπαταρίες έχουν μικρότερη ενεργειακή πυκνότητα (ενέργεια/όγκο) από τις συνήθεις $LiCoO_2$, που βρίσκουμε στα περισσότερα ηλεκτρονικά προϊόντα. Προσφέρουν όμως μεγαλύτερη διάρκεια ζωής στη μπαταρία (μικρός ρυθμός απώλειας χωρητικότητας) και καλύτερη πυκνότητα ισχύος, δηλαδή τον ρυθμό με τον οποίο μπορεί να αποδώσουν ενέργεια στο κύκλωμα. Για παράδειγμα, μετά από ένα χρόνο χωρίς χρήση, ένα LFP κελί έχει σχεδόν την ίδια ενεργειακή πυκνότητα με την αρχική του [26,27].

Η μπαταρία $LiFePO_4$ (λιθίου φωσφόρου σιδήρου) είναι από τις πιο σύγχρονες μπαταρίες λιθίου. Έχουν όλα τα πλεονεκτήματα των μπαταριών λιθίου και σχεδόν καθόλου μειονεκτήματα. Έχουν χημική και θερμική σταθερότητα , αλλά συγχρόνως μεγάλο ρεύμα εκφόρτισης. Η τάση του κελιού είναι περίπου στα 3.2-3.8 Volt και κατά τη διάρκεια εκφόρτισης μπορεί να φτάσει το κατώτατο όριο τάσης που είναι τα 2.5 Volt. Ένα ακόμα πλεονέκτημα είναι ότι μετά την ολοκλήρωση της εκφόρτισης δεν υπάρχουν υπολείμματα λιθίου στην κάθοδο, γεγονός που επιβραδύνει την γήρανση και κάνει την μπαταρία πιο ανθεκτική. Ακόμη, το $LiFePO_4$ είναι εκ φύσεως ένα ασφαλές υλικό καθόδου. Ο χημικός δεσμός μεταξύ Fe-P-O είναι ισχυρός με αποτέλεσμα, όταν υποστεί κάποια κακοποίηση (βραχυκύκλωμα, υπερθέρμανση κλπ) τα άτομα οξυγόνου είναι πολύ πιο δύσκολο να μετακινηθούν. Είναι μη τοξική και φιλική προς το περιβάλλον [25].

Το θετικό και το αρνητικό ηλεκτρόδιο είναι ηλεκτρικά απομονωμένα μέσω πορώδους διαχωριστικού φύλλου, του διαχωριστή, πολυαιθυλενίου ή πολυπροπυλενίου στις μπαταρίες που διαθέτουν υγρό ηλεκτρολύτη. Είναι ένας ηλεκτρικός μονωτής και αποτρέπει την ροή ηλεκτρονίων μεταξύ ανόδου και καθόδου, αλλά επιτρέπει την ροή ιόντων. Ο διαχωριστής είναι ένα στερεό υγρό διάλυμα με μεγάλη συγκέντρωση σε ιόντα.

Καθώς το κελί συνδέεται με το φορτίο, οι χημικές αντιδράσεις που συμβαίνουν στο εσωτερικό του, πυροδοτούν την διαδικασία εκφόρτισης. Τα άτομα λιθίου, του ενεργού υλικού, που βρίσκονται στην επιφάνεια του πορώδους αρνητικού ηλεκτροδίου (άνοδος) υφίστανται αντίδραση οξείδωσης, ελευθερώνοντας θετικά φορτισμένα ιόντα λιθίου και ηλεκτρόνια. Τα θετικά ιόντα ταξιδεύουν μέσω του ηλεκτρολυτικού διαλύματος στο θετικό ηλεκτρόδιο όπου αντιδρούν, διαχέονται και εισέρχονται στα στερεά σωματίδια οξειδίου μετάλλου. Ταυτόχρονα, τα ηλεκτρόνια κατευθύνονται προς την κάθοδο αλλά δεν ακολουθούν την ίδια διαδρομή, εξαιτίας της μονωτικής συμπεριφοράς του διαχωριστή. Αντιθέτως, εξαναγκάζονται να φτάσουν στο θετικό ηλεκτρόδιο μέσω του εξωτερικού κυκλώματος, παράγοντας έτσι το ηλεκτρικό ρεύμα [27,28]. Η αντίστροφη διαδικασία συμβαίνει στην φόρτιση [27,28,29].



Εικόνα 2.1 Μικροσκοπική αναπαράσταση της δομής ενός Li-ion κελιού. Σχηματική αναπαράσταση της πορείας των ιόντων και ηλεκτρονίων κατά την φόρτιση και εκφόρτιση[27]

Για μια μπαταρία λιθίου, τα φυσικά όρια της φόρτισης και εκφόρτισης είναι ο κορεσμός και η εξάντληση αντίστοιχα της συγκέντρωσης των ιόντων λιθίου στις επιφάνειες των ηλεκτροδίων $c_{s,e}$ και η εξάντληση της συγκέντρωσης των ιόντων λιθίου στο ηλεκτρολυτικό διάλυμα, c_e . Για να αποφευχθεί ξαφνική απώλεια ισχύος, οι συγκεντρώσεις αυτές πρέπει να διατηρούνται μεταξύ κάποιων ορίων και συγκεκριμένα [26,27]:

$$0 < \frac{c_{s,e}}{c_{s,max}} < 1 \text{ και } c_e > 0$$

Για να αποφευχθούν οι παράπλευρες αντιδράσεις που οδηγούν στην δημιουργία ανεπιθύμητων χημικών υποπροϊόντων, η διαφορά δυναμικού στην διεπιφάνεια των σωματιδίων (στερεή και ηλεκτρολυτική φάση) πρέπει να βρίσκεται εντός συγκεκριμένων ορίων. Δηλαδή:

$$U_{side\ rxn,1} < \Phi_{s,e}(x, t) < U_{side\ rxn,2} ,$$

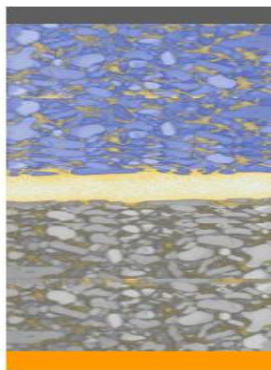
όπου $\Phi_{s,e} = \Phi_s - \Phi_e$ η διαφορά δυναμικού στην διεπιφάνεια στερεής/ηλεκτρολυτικής φάσης

$U_{side\ rxn}$ είναι το δυναμικό ισορροπίας τη στιγμή δημιουργίας μιας παράπλευρης αντίδρασης, η οποία συμβαίνει όταν ένα ιόν λιθίου εισέρχεται ή εξέρχεται από τα σωματίδια ενεργού υλικού[26,27].

Στην περίπτωση της μπαταρίας, που είναι μετρήσιμα σε πραγματικό χρόνο μόνο τα δυναμικά χαρακτηριστικά της, δηλαδή η τάση και το ρεύμα, οι εσωτερικές ηλεκτροχημικές καταστάσεις πρέπει να εκτιμηθούν από ένα θεμελιώδες μοντέλο και όχι εμπειρικό/πειραματικό. Σκοπός είναι, λοιπόν, η περιγραφή όλων των βασικών εξισώσεων που διέπουν την ηλεκτροχημική συμπεριφορά της μπαταρίας τόσο από μικροσκοπική όσο και μακροσκοπική οπτική γωνία.

2.1.1 Η ΕΝΝΟΙΑ ΤΟΥ ΠΟΡΩΔΟΥΣ ΗΛΕΚΤΡΟΔΙΟΥ

Με στόχο την μοντελοποίηση των ηλεκτροχημικών δυναμικών και της συγκέντρωσης ενεργού υλικού στα ηλεκτρόδια ο J. Newman ανέπτυξε την θεωρία του πορώδους ηλεκτροδίου. Σύμφωνα με αυτήν, η δομή των ηλεκτροδίων του κελιού της μπαταρίας είναι μη συμπαγής. Υπάρχουν «πόροι», δηλαδή κενά, μεταξύ του ενεργού υλικού. Η εικόνα 2.2 μας βοηθά να κατανοήσουμε την πορώδη μορφή των ηλεκτροδίων. Η δομή αυτή επιτρέπει στον ηλεκτρολύτη να εισέρχεται στο ενεργό υλικό και να εγκαθίσταται στις οπές. Δημιουργεί έτσι μονοπάτια για τα ιόντα, ενώ ταυτόχρονα λόγω της μεγάλης αγωγιμότητας του, επιταχύνει την μεταφορά τους από την άνοδο στην κάθοδο. Έχουμε ουσιαστικά ταχύτερη μεταφορά του φορτίου. Ταυτόχρονα, όσο περισσότερες οπές έχει το ηλεκτρόδιο, τόσο περισσότερο αέρα θα έχει, δηλαδή περισσότερο οξυγόνο. Δεδομένου ότι οι αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα είναι οξειδοαναγωγικές, η παρουσία οξυγόνου ενισχύει την ταχύτητα της αντίδρασης. Ενίσχυση της ταχύτητας σημαίνει αύξηση των αντιδράσεων ανά μονάδα όγκου υλικού, με συνέπεια την απελευθέρωση περισσότερης ενέργειας. Αν Q_c είναι το φορτίο της καθόδου και Q_a το φορτίο της ανόδου, τότε ως συντελεστής χωρητικότητας ορίζεται το πηλίκο $R_c = \frac{Q_c}{Q_a}$, με μέγιστη τιμή $R_c = 1$, που σημαίνει ότι όλο το φορτίο της ανόδου μεταφέρθηκε στην κάθοδο. Η πορώδης δομή περιγράφεται επίσης και σαν περιορισμός του όγκου που καταλαμβάνει το ενεργό υλικό και κυμαίνεται στο διάστημα [0,1]. Το μηδέν σημαίνει ότι η δομή είναι συμπαγής, ενώ πορώδης δομή ίση με την μονάδα σημαίνει ότι έχουμε μόνο ηλεκτρολύτη.



Εικόνα 2.2 Πορώδης δομή ηλεκτροδίων. Με μπλε χρώμα αναπαρίστανται η άνοδος και με γκρι η κάθοδος.

Για λόγους υπολογιστικής ευκολίας θα λάβουμε μόνο τρεις διαστάσεις υπόψιν. Το χρόνο (t) για να εκφράσουμε τα δυναμικά χαρακτηριστικά της μπαταρίας (I-V), την χωρική συντεταγμένη x για την περιγραφή των φαινομένων που συμβαίνουν κατά μήκος του κελιού και τέλος τη χωρική συντεταγμένη r για την περιγραφή των φαινομένων μέσα στα σφαιρικά σωματίδια (εικόνα). Η συντεταγμένη x κυμαίνεται από 0 μέχρι L, όπου L είναι το μήκος του κελιού. Η σφαιρική συντεταγμένη r κυμαίνεται από 0 μέχρι R, όπου R είναι η ακτίνα του σφαιρικού σωματιδίου του ενεργού υλικού. Οι συλλέκτες ρεύματος θεωρούμε ότι έχουν αμελητέο μέγεθος και γενικά δεν συνεισφέρουν στο μοντέλο. Το αρνητικό ηλεκτρόδιο, ο διαχωριστής και το θετικό ηλεκτρόδιο έχουν μήκος L₋, L_s, L₊, αντίστοιχα. Κάθε θέση στον x-άξονα, που αντιστοιχεί σε ηλεκτρόδιο, συνδέεται και με ένα σφαιρικό σωματίδιο και το αντίστοιχο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων. Για λόγους ευκολίας όλα τα σφαιρικά σωματίδια θεωρούμε ότι έχουν την ίδια ακτίνα.

2.1.2 ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΗΛΕΚΤΡΟΛΥΤΙΚΗΣ ΦΑΣΗΣ

Έχοντας κατανοήσει την δομή του κελιού της μπαταρίας μπορεί να κατασκευασθεί το μαθηματικό μοντέλο που περιγράφει τις ηλεκτροχημικές διαδικασίες. Σύμφωνα με την βιβλιογραφία, θα θεωρήσουμε ότι ο ηλεκτρολύτης είναι ένα ομογενές διάλυμα απλού άλατος. Αυτή η επιλογή μειώνει την πολυπλοκότητα του μοντέλου και παράλληλα καλύπτει τις περισσότερες αληθινές περιπτώσεις. Έστω ότι έχουμε ένα διάλυμα που περιέχει έναν ηλεκτρολύτη τύπου 1 : 1. Επίσης, για λόγους ευκολίας καταγραφής των εξισώσεων θα θεωρήσουμε ότι ο αριθμός μεταφοράς φορτίου του ηλεκτρολύτη είναι 1. Δηλαδή έχουμε μετακίνηση ενός κατιόντος Li⁺ και ενός ανιόντος. Με αυτές τις παραδοχές η μεταβολή του δυναμικού στον ηλεκτρολύτη δίνεται από [28,29,30]:

$$\nabla \Phi_e = \frac{i_e}{k} + \frac{2RT}{F} (1 - t_+^0 (1 + \frac{d \ln f_{\pm}}{d \ln c_e})) \nabla \ln c_e \quad (2.1)$$

όπου

Φ_e : το ηλεκτρικό δυναμικό στην ηλεκτρολυτική φάση (V)

i_e : η πυκνότητα ρεύματος στον ηλεκτρολύτη (A/m²)

k: η ιονική αγωγιμότητα του ηλεκτρολύτη (S/m)

R: η παγκόσμια σταθερά αερίων ($\cong 8.3143$ J/(mol K))

T: η θερμοκρασία του κελιού (K)

F: σταθερά Faraday, ποσότητα ηλεκτρικού φορτίου ανά mole ηλεκτρονίων ($\cong 96485$ C/mol)

t_+^0 : ο αριθμός μεταφοράς θετικών ιόντων συναρτήσει της ταχύτητας του διαλύματος

f_{\pm} : ο συντελεστής της μέσης ιοντικής δραστηριότητας του ηλεκτρολύτη, δηλαδή η απόκλιση του ηλεκτρολυτικού διαλύματος από την ιδανική συμπεριφορά.

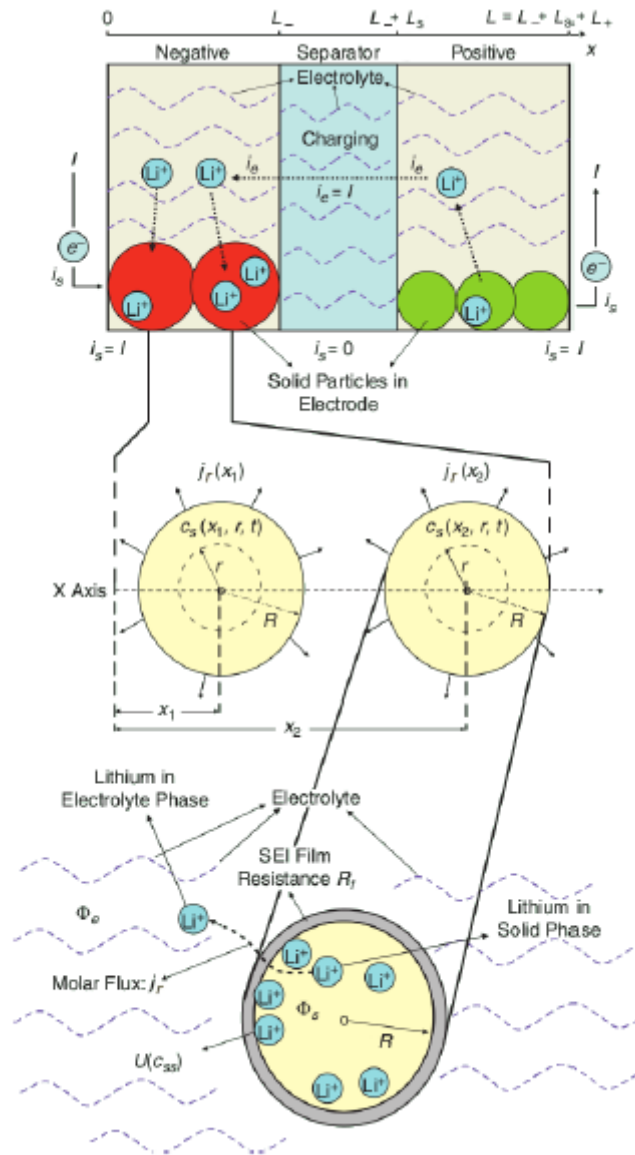
c_e : η συγκέντρωση των ιόντων στην ηλεκτρολυτική φάση.

Σύμφωνα με τον κανόνα αλυσίδας οι τελευταίοι παράγοντες της εξίσωσης (2.1) μπορούν να γραφούν ως εξής:

$$(1 + \frac{d \ln f_{\pm}}{d \ln c_e}) \nabla \ln c_e = \nabla \ln f_{\pm} + \nabla \ln c_e.$$

Υποθέτοντας ότι η μέση ιοντική δραστηριότητα είναι αμετάβλητη στο χώρο και θεωρώντας τα δυναμικά μόνο στον x-άξονα, η εξίσωση 2.1 γίνεται:

$$\frac{\partial \Phi_e}{\partial x} = \frac{i_e}{k} + \frac{2RT}{F} (1 - t_+^0) \frac{\partial \ln c_e}{\partial x} \quad (2.2)$$



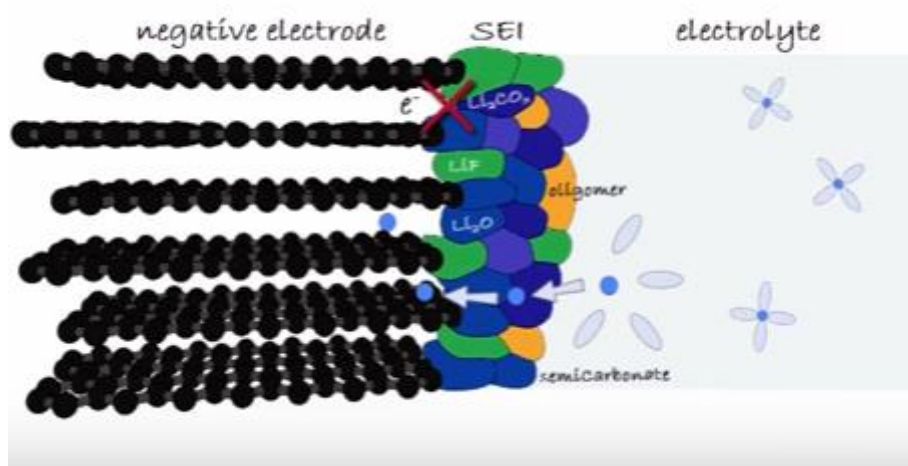
Εικόνα 2.3 Σχηματική αναπαράσταση του κελιού μπαταρίας ηλεκτροχημικού μοντέλου τονίζοντας τις δύο διαφορετικές χωρικές συντεταγμένες x και r . Αναπαράσταση των δυναμικών, των ρευμάτων και των συγκεντρώσεων[28].

2.1.3 ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΤΗΝ ΗΛΕΚΤΡΟΛΥΤΙΚΗ ΦΑΣΗ

Η θεωρία γύρω από την συγκέντρωση διαλύματος περιγράφει ικανοποιητικά την μεταφορά Li-ions στον ηλεκτρολύτη. Πρόκειται, ουσιαστικά, για τον όρο μεταφοράς μάζας που εξετάζει την αλλαγή συγκέντρωσης του μίγματος λόγω μοριακής διάχυσης [33]. Επιπλέον, μαζί με την θεωρία για τα αραιά διαλύματα, παρέχουν ένα κατάλληλο πλαίσιο για την μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης διαλύτη και διαλυμένης ουσίας[28,29,30]. Επίσης στο σημείο αυτό εμφανίζεται η έννοια του σχηματισμού διεπιφάνειας στερεής φάσης και ηλεκτρολύτη ή,

όπως φαίνεται και στην εικόνα 2.3 , του Solid Electrolyte Interface (SEI) . Κατά την διάρκεια φόρτισης τα ιόντα λιθίου ταξιδεύουν μέσω του ηλεκτρολύτη και εισέρχονται στην άνοδο από γραφίτη, προκαλώντας αλλαγή στο δυναμικό. Παράπλευρες αντιδράσεις συμβαίνουν κυρίως στην επιφάνεια μεταξύ ηλεκτρολύτη και ανόδου. Σε αυτή τη φάση το δυναμικό είναι χαμηλό. Σε χαμηλές τάσεις (0-0.8 V) οι ανόργανοι διαλύτες είναι θερμοδυναμικά ασταθείς και αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την δημιουργία κάποιων υποπροϊόντων, τα οποία επικάθονται στην επιφάνεια ανόδου/ηλεκτρολύτη (εικόνα 2.4). Αυτό το στρώμα ονομάζεται SEI και αποτελείται από οξείδια λιθίου(LiF, LiF₂O),ανθρακικό λίθιο και ολιγομερή. Ο σχηματισμός του από την μία πλευρά επιτρέπει την μετακίνηση ιόντων, χωρίς τα μόρια διαλύτη που τα περιβάλλουν, στην άνοδο, από την άλλη λειτουργεί σαν μονωτής ηλεκτρονίων. Η σημασία του είναι διφορούμενη για την μπαταρία. Όταν κάποια σωματίδια γραφίτη απομονώνονται από αυτό το στρώμα, δεν γίνονται προσβάσιμα σε χημικές αντιδράσεις και το ποσό του ενεργού υλικού μειώνεται με συνέπεια την απώλεια χωρητικότητας. Ταυτόχρονα το στρώμα υποπροϊόντων του λιθίου λειτουργεί σαν φράγμα και αυξάνεται όσο αυξάνονται οι κύκλοι της μπαταρίας. Τελικά μετά από αρκετές φορτίσεις και εκφορτίσεις το πάχος του στρώματος αυξάνεται τόσο που δεν επιτρέπει την αλληλεπίδραση με το γραφίτη , οδηγώντας έτσι σε ξαφνική απώλεια χωρητικότητας. Για το λόγο αυτό η τάση του κελιού της μπαταρίας δεν πρέπει να πέφτει κάτω από το κατασκευαστικό της όριο.

Στην κάθοδο, αναπτύσσεται ένα παρόμοιο στρώμα, γνωστό και ως οξείδωση του ηλεκτρολύτη και ενισχύεται με την παράταση της λειτουργίας της μπαταρίας σε υψηλή τάση. Για το λόγο αυτό το κελί της μπαταρίας πρέπει να λειτουργεί μέχρι μια συγκεκριμένη μέγιστη και ελάχιστη τιμή τάσης.



Εικόνα 2.4 Σχηματική περιγραφή του στρώματος στην επιφάνεια ηλεκτροδίου (ανόδου) με ηλεκτρολύτη.

Ο συνδυασμός της θεωρίας για την συγκέντρωση διαλύματος, για το πορώδες ηλεκτρόδιο, για την αρχή της ηλεκτροουδετερότητας¹ και την διατήρηση μάζας [32] οδηγεί στην παρακάτω εξίσωση:

¹ Η σχέση αυτή μας λέει ότι σε οποιοδήποτε σημείο του διαλύματος η συγκέντρωση των θετικών ιόντων θα είναι τέτοια ώστε να αντισταθμίζει το φορτίο των αρνητικών ιόντων. Από τη συνθήκη της ηλεκτροουδετερότητας προκύπτουν οι αριθμοί μεταφοράς ιόντων ως προς τη μηδενική συγκέντρωση.

$$\varepsilon \frac{\partial c_e}{\partial t} = + \nabla \cdot \varepsilon D_e \left(1 - \frac{d \ln c_o}{d \ln c_e} \right) \nabla c_e + \frac{t_-^0 \nabla \cdot i_e + i_e \nabla t_-^0}{F} - \nabla c_e v_o + a j_- \quad (2.3)$$

όπου

ε : ο περιορισμός όγκου του ηλεκτρολύτη λόγω της πορώδους δομής $\varepsilon \in [0,1]$

D_e : ο συντελεστής διάχυσης του άλατος λιθίου στον ηλεκτρολύτη (mol/m^3)

t_-^0 : ο αριθμός μεταφοράς αρνητικών ιόντων συναρτήσει της ταχύτητας του διαλύματος

v_o : η ταχύτητα του διαλύτη στο ηλεκτρολυτικό διάλυμα (m/s)

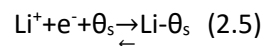
a : η επιφάνεια ανά μονάδα όγκου του ηλεκτροδίου ($1/\text{m}$)

j_- : ο ρυθμός παραγωγής ανιόντων ανά μονάδα επιφάνειας ($\text{mol}/(\text{m}^2\text{s})$)

Ο νόμος Faraday για την ροή ρεύματος στον ηλεκτρολύτη δίνεται ως εξής:

$$\nabla i_e = F a j_r \quad (2.4)$$

Όπου j_r ($\text{mol}/(\text{m}^2\text{s})$) η ροή ιόντων λιθίου κατά την μετάβαση από την στερεή στην υγρή φάση, αποτέλεσμα της αντίδρασης των ιόντων λιθίου με τα προϊόντα της παράπλευρης αντίδρασης όταν ένα Li^+ εισέρχεται στο ενεργό υλικό. Εάν το προϊόν της παράπλευρης αντίδρασης είναι το θ_s , η αντίδραση που περιγράφει την κίνηση των ιόντων είναι :



Ο όρος j_r είναι το ρεύμα faraday, δηλαδή το ρεύμα που δημιουργείται από την οξειδοαναγωγική αντίδραση των χημικών στοιχείων των ηλεκτροδίων. Πριν να το συμπεριλάβουμε στο τελικό σετ εξισώσεων η εξίσωση (2.4) ξαναγράφεται λαμβάνοντας υπόψιν το φορτίο μόνο κατά τον x-άξονα :

$$\frac{\partial i_e}{\partial x} = F a j_r \quad (2.6)$$

Με σκοπό να απλοποιήσουμε την εξίσωση (2.3) πρέπει να κάνουμε κάποιες παραδοχές:

- Η μεταφορά θερμότητας στον ηλεκτρολύτη είναι αμελητέα και συνεπώς και ο όρος που την αναπαριστά $\nabla c_e v_o$
- Ο αριθμός μεταφοράς² ανιόντων t_-^0 είναι χωρικά αμετάβλητος
- Οι παράπλευρες χημικές αντιδράσεις αγνοούνται και η κύρια αντίδραση περιλαμβάνει μόνο κατιόντα. Έτσι ο όρος j_- θεωρείται μηδέν, διαφορετικά θα έπρεπε να συμπεριληφθεί στην εξίσωση 2.6 και η ροή ρεύματος από τα προϊόντα των παράπλευρων αντιδράσεων.
- Ο όγκος του ενεργού υλικού και η πορώδης δομή διατηρούνται σταθερά στο χρόνο έτσι ώστε να διατηρείται το ισοζύγιο μάζας.
- Αλλαγές στην συγκέντρωση του διαλύματος θεωρούνται αμελητέες καθώς αλλάζει η συγκέντρωση του διαλύτη και έτσι $\frac{d \ln c_o}{d \ln c_e} = 0$

² Το κλάσμα του ρεύματος που μεταφέρεται από το ένα είδος ιόντων στο διάλυμα ως προς το συνολικό διερχόμενο ρεύμα ονομάζεται αριθμός μεταφοράς του ιόντος. Το ρεύμα που μεταφέρεται από τα ιόντα ισοδυναμεί με την ταχύτητα μεταφοράς φορτίου.

Η εξίσωση που προκύπτει και περιγράφει τα φαινόμενα μεταφοράς στον ηλεκτρολύτη, ως προς τον x-άξονα είναι η εξής:

$$\varepsilon \frac{\partial c_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon D_e \frac{\partial c_e}{\partial x} \right) + (1 - t_+^0) \alpha j_r \quad (2.7)$$

Μέσα στο διαχωριστή η εξίσωση απλοποιείται ακόμη περισσότερο αφού το j_r είναι απλά μηδέν και ο συντελεστής ε είναι ίσος με την μονάδα[28].

Λαμβάνοντας υπόψη και τις οριακές συνθήκες κοντά στους συλλέκτες ρεύματος που δεν έχουμε μεταβολή ηλεκτρολυτικής συγκέντρωσης αφού βρισκόμαστε στη στερεή φάση ο όρος $\frac{\partial c_e}{\partial x}$ μηδενίζεται[28,29,30].

2.1.4 ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΣΤΗ ΣΤΕΡΕΗ ΦΑΣΗ

Ας ορίσουμε i_s την πυκνότητα ρεύματος στην στερεή φάση του ηλεκτροδίου (A/m^2), σ την ηλεκτρική αγωγιμότητα του ηλεκτροδίου (S/m) και Φ_s το δυναμικό στη στερεή φάση. Από το νόμο του Ohm:

$$i_s = -\sigma \nabla \Phi_s \quad (2.8)$$

Υποθέτοντας ότι το ηλεκτρικό φορτίο διατηρείται και λαμβάνοντας υπόψιν τις μονοδιάστατες πυκνότητες ρεύματος κατά μήκος του x-άξονα με διεύθυνση αναφοράς την θετική, η ολική πυκνότητα ρεύματος I (A/m^2) είναι το άθροισμα των επιμέρους πυκνοτήτων στην στερεή και ηλεκτρολυτική φάση :

$$I = i_e + i_s \quad (2.9)$$

Με αυτές τις υποθέσεις η εξίσωση 2.8 γίνεται

$$I - i_e = -\sigma_n \frac{\partial \Phi_s}{\partial x} \quad (2.10)$$

Ανάλογα με το αν εφαρμόζουμε στο σύστημα μια σταθερή τάση (χρονοαμπερομετρία³) ή σταθερή ένταση ρεύματος (χρονοδυναμομετρία⁴), η εξίσωση 2.10 απαιτεί τον προσδιορισμό των οριακών συνθηκών για την περιοχή του κάθε ηλεκτροδίου.

Για λειτουργία με σταθερή ένταση ρεύματος πρέπει να γίνουν οι παρακάτω παραδοχές:

$$i_e|_{x=L_-} = I \text{ και } i_e|_{x=L} = 0 \quad (2.11)$$

Για λειτουργία με σταθερή τάση οι παραδοχές του μοντέλου πρέπει να είναι οι εξής:

$$\Phi_s|_{x=L} - \Phi_s|_{x=0} = V \quad (2.12)$$

³ Στην περίπτωση αυτή εφαρμόζεται σταθερή τάση μεταξύ των υπό μελέτη ηλεκτροδίων, μετρείται δε η ένταση του ρεύματος συναρτήσει του χρόνου.

⁴ Η μέθοδος αυτή συνίσταται στην επιβολή ενός παλμού σταθερού ρεύματος και στην εξέταση της απόκρισης του ηλεκτροδίου σε δυναμικό συναρτήσει του χρόνου.

2.1.5 ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΤΗ ΣΤΕΡΕΗ ΦΑΣΗ

Λαμβάνοντας υπόψιν τη θεωρία του ισοζυγίου μάζας [31,32,33] για τα ιόντα λιθίου που μεταφέρθηκαν στην στερεή φάση, προκύπτει η διαφορική εξίσωση παρόμοια με την εξίσωση για την μεταφορά μάζας στην ηλεκτρολυτική φάση [34].

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \nabla D_s \left(1 - \frac{d \ln c_o}{d \ln c_s} \right) \nabla c_s + \frac{i_s \nabla t_o}{z_+ v_+ F} - \nabla c_s v_o \quad (2.13)$$

Όπου

c_s είναι η συγκέντρωση του λιθίου στα σωματίδια στη στερεή φάση (mol/m^3)

D_s είναι ο συντελεστής διάχυσης του λιθίου στο στερεό πλέγμα (m^2/s)

i_s είναι η πυκνότητα ρεύματος (A/m^2), στην επιφάνεια του σφαιρικού σωματιδίου.

Για τα υλικά των περισσότερων ηλεκτροδίων, η διάχυση είναι ο βασικός μηχανισμός μεταφοράς στην στερεή φάση και έτσι οι δύο τελευταίοι όροι της εξίσωσης 2.13 θα παραλειφθούν. Επίσης ο όρος $\frac{d \ln c_o}{d \ln c_s}$ είναι ίσος με μηδέν, με την υπόθεση ότι η μεταβολή του όγκου στο στερεό είναι αμελητέα. Όσον αφορά τα δυναμικά διάχυσης στη στερεή φάση, επειδή τα ιόντα λιθίου κινούνται μέσα στα σφαιρικά σωματίδια, θα εκφραστούν σαν συνάρτηση των σφαιρικών συντεταγμένων r [26,28,29]. Ο ρυθμός διάχυσης των ιόντων λιθίου βασίζεται στο ρυθμό μεταβολής της συγκέντρωσης και της μέσης ταχύτητας με την οποία κινούνται τα ιόντα κατά την διεύθυνση x . Αυτή η σχέση περιγράφεται από το νόμο του Fick. Προκειμένου να εκφράσουμε τον ρυθμό μεταβολής της συγκέντρωσης ανά μονάδα απόστασης σε σφαιρικές συντεταγμένες έχουμε [35]:

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \hat{\varphi} \quad (2.14)$$

Όπου r είναι η ακτινική απόσταση από το όρισμα, θ και φ αντιπροσωπεύουν την κλίση και την γωνία αντίστοιχα και \hat{r} , $\hat{\theta}$ και $\hat{\varphi}$ είναι τα μοναδιαία διανύσματα κατά την διεύθυνση r , θ και φ αντίστοιχα. Μπορούμε τώρα στις ίδιες συντεταγμένες να ορίσουμε την απόκλιση της συγκέντρωσης στις σφαιρικές συντεταγμένες. Εφαρμόζοντας τις απλοποιήσεις και τους μετασχηματισμούς η εξίσωση 2.13 μετατρέπεται ως εξής [26,27]:

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_s r^2 \frac{\partial c_s}{\partial r} \right) \quad (2.16)$$

Ο ρόλος της απόκλισης είναι να γίνει αντιληπτή η επέκταση της ροής ιόντων λιθίου στο πορώδες ενεργό υλικό του ηλεκτροδίου, κατά μήκος του x -άξονα [34,35].

Η παραπάνω περιγραφή της μεταφοράς του λιθίου στα στερεά σωματίδια είναι απλή και σχετίζεται με την θέση των σωματιδίων στο ηλεκτρόδιο κατά τον x -άξονα. Οι αντίστοιχες οριακές συνθήκες είναι:

$$\left. \frac{\partial c_s}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$$

$$D_s \left. \frac{\partial c_s}{\partial r} \right|_{r=R} = -j_r \quad (2.17)$$

Στην ακτίνα R θα προστεθεί και ένας δείκτης-πρόσημο, έτσι ώστε να μην συγχέεται με την παγκόσμια σταθερά αερίων και για να γίνει διαχωρισμός μεταξύ των θετικών και αρνητικών σφαιρικών σωματιδίων ενεργού υλικού [28,29,30,33].

Ρυθμός αντίδρασης

Ο ηλεκτροχημικός ρυθμός αντίδρασης μπορεί να εκφραστεί με όρους συγκέντρωσης και δυναμικών με χρήση της εξίσωσης Butler-Volmer. Η εξίσωση αυτή είναι θεμελιώδης στην ηλεκτροχημική κινητική [28]. Περιγράφει τη σχέση του ρεύματος και του δυναμικού του ηλεκτροδίου. Δηλαδή πώς το ηλεκτρικό ρεύμα που αναπτύσσεται σε ένα ηλεκτρόδιο εξαρτάται από το δυναμικό του ηλεκτροδίου, θεωρώντας ότι στο ηλεκτρόδιο αυτό συμβαίνει οξειδοαναγωγική αντίδραση. Περιγράφει την πυκνότητα ρεύματος j , δηλαδή το ηλεκτρικό ρεύμα ανά μονάδα επιφάνειας ηλεκτροδίου που σε μαθηματικούς όρους εκφράζεται σαν :[36]

$$j = \lim_{A \rightarrow 0} \frac{I(A)}{A}$$

Για την πυκνότητα ρεύματος σαν διάνυσμα, το επιφανειακό ολοκλήρωμα πάνω σε μια επιφάνεια S , ολοκληρωμένο για μια χρονική διάρκεια t_1 έως t_2 δίνει το συνολικό ποσό του φορτίου που ρέει στην επιφάνεια σε αυτό το χρονικό διάστημα (t_1-t_2). Η μαθηματική σχέση δίνεται από τον τύπο [36] :

$$q = \int_{t_1}^{t_2} \iint j \cdot \hat{n} dAdt$$

Η πυκνότητα ρεύματος είναι βασικό κριτήριο για την δημιουργία ενός αξιόπιστου μοντέλου μπαταρίας. Μεγάλες πυκνότητες ρεύματος έχουν ανεπιθύμητες επιπτώσεις για μια μπαταρία. Πρέπει να διατηρείται πάντα μεταξύ των προδιαγραφών έτσι ώστε να αποφευχθεί ακόμη και τυχόν υπερθέρμανση που μπορεί να οδηγήσει σε αστοχία υλικού [36].

Για το δικό μας ηλεκτροχημικό μοντέλο από τον ορισμό της εξίσωσης Butler-Volmer έχουμε:

$$j_r = \frac{i_{o,n}}{F} \left[\exp\left(\frac{a_{a,n}F}{RT} \eta_n\right) - \exp\left(\frac{a_{e,n}F}{RT} \eta_n\right) \right] \quad (2.18)$$

Όπου $\eta_n = \Phi_s - \Phi_e - U_n(c_{ss}) - FR_f n j_r$

η : είναι το επιφανειακό υπερδυναμικό (V). Ορισμένες ηλεκτρολύσεις απαιτούν μεγαλύτερο από το εφαρμοζόμενο δυναμικό και ορισμένα γαλβανικά στοιχεία παράγουν δυναμικό μικρότερο από το προβλεπόμενο. Η διαφορά ανάμεσα στο προβλεπόμενο δυναμικό και στο εφαρμοζόμενο δυναμικό καλείται υπερδυναμικό. Όσο μεγαλύτερος επιθυμείται να είναι ο αριθμός μεταφοράς ηλεκτρονίων, τόσο υψηλότερη πρέπει να είναι η τιμή του υπερδυναμικού. Το υπερδυναμικό χαρακτηρίζεται και ως πτώση τάσης και καθορίζει τις απώλειες ενεργοποίησης που συμβαίνουν στο κελί της μπαταρίας. Απώλειες ενεργοποίησης είναι οι απώλειες που προκύπτουν από την ανάγκη να κινηθούν ηλεκτρόνια και από την διάσπαση και ένωση χημικών δεσμών στην άνοδο και στην κάθοδο του κελιού της

μπαταρίας. Ένα μέρος της διαθέσιμης ενέργειας χάνεται ώστε να πραγματοποιηθούν οι απαραίτητες χημικές αντιδράσεις που θα μεταφέρουν τα ηλεκτρόνια. Οι απώλειες ενεργοποίησης συμβαίνουν, σύμφωνα με τα παραπάνω, όχι μόνο στην άνοδο αλλά και στην κάθοδο. Η αντίδραση της οξειδωσης στην άνοδο είναι πολύ γρήγορη, ενώ η αναγωγή του λιθίου στην κάθοδο ολοκληρώνεται με πολύ αργούς ρυθμούς[34]. Επομένως αύξηση του υπερδυναμικού συνεπάγεται παράλληλη αύξηση της πυκνότητας ρεύματος. Το υπερδυναμικό συναρτίζει των τοπικών δυναμικών στον ηλεκτρολύτη, στο ηλεκτρόδιο και των δυναμικών συγκέντρωσης ορίζεται μαθηματικά ως εξής:

$$\eta = \Phi_s - \Phi_e - U(c_{ss}) \quad (2.19)$$

όπου

U είναι η τάση ανοιχτοκύκλωσης στο στερεό υλικό, με τιμή στην επιφανειακή συγκέντρωση (mol/m^3) των ιόντων λιθίου στην επιφάνεια των στερεών σφαιρικών σωματιδίων.

i_0 : πυκνότητα ανταλλαγής ρεύματος (A/m^2). Κατά την οξειδοαναγωγική αντίδραση τα ηλεκτρόνια κινούνται είτε από την διεπιφάνεια ηλεκτρολύτη/ηλεκτροδίου με στόχο τους συλλέκτες ρεύματος, είτε από τους συλλέκτες ρεύματος προς την διεπιφάνεια. Αυτό το ρεύμα που δημιουργείται προς τις δύο κατευθύνσεις ονομάζεται πυκνότητα ρεύματος ανταλλαγής μιας και αναφερόμαστε σε χωρικές συντεταγμένες.

Από την εξίσωση Butler Volmer (2.18) μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η αύξηση του ρεύματος του κελιού επιφέρει μεγάλη πτώση τάσης.

Όπως ορίστηκε και στην εξίσωση 3.19 η U είναι συνάρτηση της επιφανειακής συγκέντρωσης των ιόντων λιθίου δηλαδή $c_{ss}(x, t) = cs(x, R, t)$. Η εξάρτηση της U από την c_{ss} ποικίλει ανάλογα με το πορώδες υλικό που επιλέγει να χρησιμοποιήσει ο κατασκευαστής, και έχει μεγάλη επίδραση στην λειτουργία του μοντέλου. Γι' αυτό είναι πολύ σημαντικό να εισάγουμε αυτή τη σχέση στα κατάλληλα πειραματικά δεδομένα για τα υλικά του ενδιαφέροντος μας.

Η εξίσωση για την ανταλλαγή πυκνότητας ρεύματος δίνεται από την σχέση:

$$i_0 = Fr_k (c_{s,max} - c_{ss})^{a_c} (c_{ss})^{a_a} (c_e)^{a_a} \quad (2.20)$$

Όπου r_k είναι η σταθερά αντίδρασης για την άνοδο και την κάθοδο ενώ $(c_{s,max} - c_{ss})$ η συγκέντρωση που δεν συμμετέχει στο ενεργό υλικό.

α_a, α_c : συντελεστής μεταφοράς ανόδου και καθόδου αντίστοιχα.

T : η απόλυτη θερμοκρασία (-K).

Θα πρέπει να δοθεί ιδιαίτερη προσοχή όταν χρησιμοποιούνται πολυμερικοί ηλεκτρολύτες καθώς η μοριακή αρχιτεκτονική τους επηρεάζει διαφορετικά την ιοντική συμπεριφορά [27,28,29].

Από τη στιγμή που ο ρυθμός αντίδρασης είναι αλγεβρική εξίσωση, δεν χρειάζεται να λάβουμε υπόψιν μας οριακές συνθήκες[27].

2.1.6 ΣΥΝΟΨΗ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ

Οι εξισώσεις που παρουσιάστηκαν στο προηγούμενο κομμάτι αφορούν τρεις συνήθεις διαφορικές εξισώσεις (2.2, 2.10, 2.6), δυο μερικές διαφορικές εξισώσεις (2.7, 2.16) και μια αλγεβρική εξίσωση (2.18). Το συνολικό σετ εξισώσεων αφορά το κάθε ένα από τα δύο ηλεκτρόδια, ενώ για τον διαχωριστή αρκεί η απλοποίηση τους με κάποιες παραδοχές. Στην πραγματικότητα ο διαχωριστής δεν περιλαμβάνει εξισώσεις που αφορούν δυναμικά στερεής φάσης, επομένως $j_r=0$ και $i_e=i$. Όλες οι εξισώσεις που χρησιμοποιήθηκαν για την ανάπτυξη του πλήρους ηλεκτροχημικού μοντέλου βρίσκονται στους πίνακες 2.1, 2.2 , και 2.3 όπου οι δείκτες p , sep και n χρησιμοποιούνται για να δηλώσουν τις ποσότητες που ανήκουν στο θετικό ηλεκτρόδιο, τον διαχωριστή και το αρνητικό ηλεκτρόδιο, αντίστοιχα. Η συντεταγμένη του x -άξονα για την διεπιφάνεια αρνητικού ηλεκτροδίου – διαχωριστή είναι η x_n και είναι ίση με το L , ενώ για την διεπιφάνεια διαχωριστή – θετικού ηλεκτροδίου χρησιμοποιείται το σύμβολο x_p και είναι ίσο με το άθροισμα $L+L_s$.

Δίνοντας ένα συγκεκριμένο τρόπο φόρτισης/εκφόρτισης (π.χ. για συγκεκριμένο εξωτερικό ρεύμα, τάση κελιού , ισχύ), οι μεταβλητές c_s (συγκέντρωση λιθίου στη στερεή φάση) , c_e (συγκέντρωση άλατος λιθίου στην ηλεκτρολυτική φάση), Φ_s (δυναμικό στην στερεή φάση), Φ_e (δυναμικό στην ηλεκτρολυτική φάση), i_e (πυκνότητα ρεύματος στον ηλεκτρολύτη) και j_r (ροή ιόντων από το σφαιρικό σωματίδιο στον ηλεκτρολύτη) μπορούν να υπολογισθούν λαμβάνοντας υπόψιν τις μέσες τιμές των εξισώσεων αυτών. Οι οριακές συνθήκες εκφράζονται με το ότι επιλέγουμε σαν είσοδο του μοντέλου μια πυκνότητα ρεύματος, που εμείς ορίζουμε και επομένως η έξοδος του μοντέλου μπαταρίας είναι η τάση του κελιού με οριακές συνθήκες $V=\Phi_s |x = L - \Phi_s |x = 0$. Εκτός από το ρεύμα εισόδου πρέπει να προσδιοριστούν οι αρχικές τιμές συγκέντρωσης c_s , c_e .

Συγκεντρωτικοί πίνακες εξισώσεων μέσου ηλεκτροχημικού μοντέλου:

Κυρίαρχες εξισώσεις στο αρνητικό ηλεκτρόδιο ($0 \leq x \leq x_n$)		
Αριθμός εξίσωσης	Εξίσωση	Οριακές συνθήκες
(2.2)	<p>Νόμος Ohm στην ηλεκτρολυτική φάση</p> $i_e = -k_n \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} + \frac{2k_n RT}{F} (1 - t_+^0) \frac{\partial \ln c_e}{\partial x}$	$\Phi_e x = 0 = 0$ $-k_n \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} \Big _{x = x_n^-} = -k_{sep} \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} \Big _{x = x_n^+}$
(2.7)	<p>Ισορροπία υλικού ηλεκτρολύτη</p> $\varepsilon_n \frac{\partial c_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_n D_{e,n} \frac{\partial c_e}{\partial x} \right) + (1 - t_+^0) a_n j_r$	$\varepsilon_n D_{e,n} \frac{\partial c_e}{\partial x} \Big _{x = 0} = 0$ $\varepsilon_n D_{e,n} \frac{\partial c_e}{\partial x} \Big _{x = x_n^-} = \varepsilon_{sep} D_{e,sep} \frac{\partial c_e}{\partial x} \Big _{x = x_n^+}$
(2.10)	<p>Νόμος του Ohm στην στερεή φάση</p> $-i_e = -\sigma_n \frac{\partial \Phi_s}{\partial x}$	$-\sigma_n \frac{\partial \Phi_s}{\partial x} \Big _{x = 0} = I$ $-\sigma_n \frac{\partial \Phi_s}{\partial x} \Big _{x = x_n} = 0$
(2.16)	<p>Ισορροπία στερεού υλικού</p> $\frac{\partial c_s}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{s,n} r^2 \frac{\partial c_s}{\partial r} \right)$	$D_{s,n} \frac{\partial c_s}{\partial r} \Big _{r = 0} = 0$ $D_{s,n} \frac{\partial c_s}{\partial r} \Big _{r = R_n} = -j_r$
(2.6)	<p>Διατήρηση φορτίου</p> $\frac{\partial i_e}{\partial x} = F a_n j_r$	$i_e x = 0 = 0$ $\frac{\partial i_e}{\partial x} \Big _{x = x_n} = 0$
(2.18)	<p>Εξίσωση Butler-Volmer</p> $j_r = \frac{i_{o,n}}{F} \left[\exp \left(\frac{a_{a,n} F}{RT} \eta_n \right) - \exp \left(\frac{a_{e,n} F}{RT} \eta_n \right) \right]$ <p>Όπου $\eta_n = \Phi_s - \Phi_e - U_n(c_{ss}) - FR_{f,n} j_r$</p>	<p>_____</p>

Πίνακας 2.1 Συγκεντρωτικός πίνακας εξισώσεων αρνητικού ηλεκτροδίου

Εξισώσεις στον διαχωριστή ($x_n \leq x \leq x_p$)		
Αριθμός εξίσωσης	εξίσωση	Οριακές συνθήκες
(2.2)	<p>Νόμος Ohm για ηλεκτρολυτική φάση</p> $I = -k_{sep} + \frac{2k_{sep} RT}{F} (1 - t_+^0) \frac{\partial \ln c_e}{\partial x}$	$\Phi_e x = x_n^- = \Phi_e x = x_n^+$ $\Phi_e x = x_p^- = \Phi_e x = x_p^+$
(2.7)	<p>Ισορροπία υλικού ηλεκτρολύτη</p> $\varepsilon_{sep} \frac{\partial c_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{sep} D_{e,sep} \frac{\partial c_e}{\partial x} \right)$	$c_e x = x_n^- = c_e x = x_n^+$ $c_e x = x_p^- = c_e x = x_p^+$

Πίνακας 2.2 Συγκεντρωτικός πίνακας εξισώσεων που διέπουν τον διαχωριστή

Κυρίαρχες εξισώσεις στο θετικό ηλεκτρόδιο ($x_p \leq x \leq L$)		
Αριθμός εξίσωσης	Εξίσωση	Οριακές συνθήκες
(2.2)	<p>Νόμος Ohm στην ηλεκτρολυτική φάση</p> $i_e = -k_p \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} + \frac{2k_p RT}{F} (1 - t_+^0) \frac{\partial \ln c_e}{\partial x}$	$\Phi_e x = L = 0$ $-k_p \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} \Big _{x = x_n^+} = -k_{sep} \frac{\partial \Phi_e}{\partial x} \Big _{x = x_p^-}$
(2.7)	<p>Ισορροπία υλικού ηλεκτρολύτη</p> $\varepsilon_p \frac{\partial c_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_p D_{e,p} \frac{\partial c_e}{\partial x} \right) + (1 - t_+^0) \alpha_p j_r$	$\varepsilon_p D_{e,p} \frac{\partial c_e}{\partial x} \Big _{x = L} = 0$ $\varepsilon_p D_{e,p} \frac{\partial c_e}{\partial x} \Big _{x = x_p^+} = \varepsilon_{sep} D_{e,sep} \frac{\partial c_e}{\partial x} \Big _{x = x_p^-}$
(2.10)	<p>Νόμος του Ohm στην στερεή φάση</p> $-i_e = -\sigma_p \frac{\partial \Phi_s}{\partial x}$	$-\sigma_p \frac{\partial \Phi_s}{\partial x} \Big _{x = L} = I$ $-\sigma_p \frac{\partial \Phi_s}{\partial x} \Big _{x = x_p} = 0$
(2.16)	<p>Ισορροπία στερεού υλικού</p> $\frac{\partial c_s}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{s,p} r^2 \frac{\partial c_s}{\partial r} \right)$	$D_{s,p} \frac{\partial c_s}{\partial r} \Big _{r = 0} = 0$ $D_{s,p} \frac{\partial c_s}{\partial r} \Big _{r = R_p} = -j_r$
(2.6)	<p>Διατήρηση φορτίου</p> $\frac{\partial i_e}{\partial x} = F \alpha_p j_r$	$i_e x = L = 0$ $\frac{\partial i_e}{\partial x} \Big _{x = x_p} = 0$
(2.18)	<p>Εξίσωση Butler-Volmer</p> $j_r = \frac{i_{o,p}}{F} \left[\exp \left(\frac{a_{a,p} F}{RT} \eta_p \right) - \exp \left(\frac{a_{e,p} F}{RT} \eta_p \right) \right]$ <p>Όπου $\eta_p = \Phi_s - \Phi_e - U_p(c_{ss}) - FR_{f,p} j_r$</p>	<p>_____</p>

Πίνακας 2.3 Συγκεντρωτικός πίνακας εξισώσεων θετικού ηλεκτροδίου

2.2 ΑΠΛΟΠΟΙΗΜΕΝΑ ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ

Διάφορες μέθοδοι έχουν προταθεί στην βιβλιογραφία για να μειώσουν το πλήθος των εξισώσεων και να δημιουργήσουν ένα σύστημα χαμηλότερης τάξης, κατάλληλο για εκτιμήσεις σε πραγματικό χρόνο. Μία σύντομη περιγραφή αυτών των μεθόδων δίνεται παρακάτω. Αυτά τα μοντέλα βασίζονται σε απλοποιήσεις και δεν λαμβάνουν υπόψιν κάποια φαινόμενα, όπως παραδείγματος χάριν τα θερμικά δυναμικά ή την απώλεια χωρητικότητας ανάλογα με τους κύκλους φόρτισης μιας μπαταρίας. Ωστόσο, το αποτέλεσμα είναι αρκετά κοντά στην πραγματικότητα, αφού η περιγραφή του μοντέλου γίνεται με αρκετά καλό φυσικό και χημικό υπόβαθρο.

Μοντέλο πολυωνυμικής προσέγγισης ενός σωματιδίου. Στο μοντέλο αυτό κάθε ηλεκτρόδιο αναπαρίσταται σαν ένα σφαιρικό σωματίδιο, του οποίου η επιφάνεια είναι ίση με τη ενεργό επιφάνεια στη στερεή φάση του πορώδους ηλεκτροδίου. Τα δυναμικά στη ηλεκτρολυτική φάση καθώς και οι αντίστοιχοι περιορισμοί αμελούνται. Η συγκέντρωση στην στερεή φάση δίνεται σαν πολυώνυμο δευτέρου βαθμού του οποίου οι συντελεστές είναι οι μέσες και επιφανειακές συγκεντρώσεις. Έτσι, οι ακτινικές συνιστώσες παραλείπονται. Το μοντέλο αυτό βασίζεται στα ηλεκτροχημικά θεμελιώδη, όμως επειδή ακριβώς δεν λαμβάνεται υπόψιν η ηλεκτρολυτική φάση, το μοντέλο αυτό λειτουργεί καλά μόνο σε χαμηλές τιμές ρεύματος.

Μοντέλο πορώδους ηλεκτροδίου με πολυωνυμική προσέγγιση. Η πολυπλοκότητα του πλήρους μοντέλου περιορίζεται, ενώ ταυτόχρονα λαμβάνονται υπόψιν η χωρική συγκέντρωση και τα δυναμικά κατά μήκος του πάχους των ηλεκτροδίων. Η διαφορά εδώ είναι η μαθηματική έκφραση των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στο εσωτερικό των σφαιρικών σωματιδίων του ενεργού υλικού κάθε πορώδους ηλεκτροδίου. Θεωρείται σε αυτό το μοντέλο ότι η συγκέντρωση έχει παραβολικό προφίλ.

Μοντέλο μέσων τιμών ηλεκτροδίου. Η συνεισφορά της χωρικής στερεής συγκέντρωσης κατά μήκος του x -άξονα και στα δύο ηλεκτρόδια αμελείται. Τα δυναμικά διάχυσης λαμβάνονται υπόψιν μόνο στο εσωτερικό του σφαιρικού σωματιδίου ενεργού υλικού για το κάθε ηλεκτρόδιο. Η συγκέντρωση του ηλεκτρολύτη θεωρούμε ότι παραμένει σταθερή, το οποίο είναι και απόλυτα λογικό για τους ηλεκτρολύτες υψηλής συγκέντρωσης, όπως αυτός που χρησιμοποιούμε εμείς στο μοντέλο μπαταρίας.

Οι μαθηματικές τεχνικές που χρησιμοποιούνται για την απλοποίηση του πλήρους ηλεκτροχημικού μοντέλου, είναι ποικίλες. Πολλές από αυτές έχουν στόχο την μείωση των διαστάσεων είτε κατά την διεύθυνση του x είτε κατά την διεύθυνση r . Άλλες χρησιμοποιούν πιθανοτικές σχέσεις για να περιγράψουν τις συγκεντρώσεις ιόντων και άλλες χρησιμοποιούν γραμμικοποιήσεις, ή μέσες τιμές μεταβλητών. Οποιοδήποτε απλοποιημένο μοντέλο και να χρησιμοποιηθεί πρέπει πρώτα να εξετασθεί ο λόγος για τον οποίο χρησιμοποιείται, είτε πρόκειται για μια απλή ηλεκτρονική συσκευή είτε για ένα ηλεκτρικό αυτοκίνητο.

2.2.1 ΜΕΣΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΗΛΕΚΤΡΟΔΙΟΥ ή ELECTRODE AVERAGE MODEL (EAM)

Από τα παραπάνω μοντέλα αυτό που αναπτύχθηκε από τον C. Speltino, φαίνεται να υπόσχεται απλότητα και ακρίβεια στον υπολογισμό του SOC σε πραγματικό χρόνο, για Li-ion κελιά που λειτουργούν με υψηλά ρεύματα. Για την ακρίβεια υπολογίζοντας τα φαινόμενα διάχυσης που συμβαίνουν στα σφαιρικά σωματίδια, είναι ικανό να αναπαραστήσει όλα τα βασικά φαινόμενα που συμβαίνουν σε μια φόρτιση/εκφόρτιση. Το μοντέλο αυτό είναι αξιόπιστο για κελιά με λεπτά ηλεκτρόδια και υψηλής συγκέντρωσης ηλεκτρολύτες.

2.2.2 ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΜΕΣΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΗΛΕΚΤΡΟΔΙΟΥ (EAM)

Πρώτα θα εξετάσουμε την κυρίαρχη εξίσωση για την μεταφορά ιόντων λιθίου στο σφαιρικό σωματίδιο σε συνάρτηση με την x θέση τους σε κάθε ηλεκτρόδιο. Έτσι η σχέση 2.16 γίνεται:

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (D_s r^2 \frac{\partial c_s}{\partial r}) = D_s \left(\frac{2}{r} \frac{\partial c_s}{\partial r} + \frac{\partial^2 c_s}{\partial r^2} \right) \quad (2.22)$$

Η οποία περιγράφει πως η διάχυση κάνει την συγκέντρωση των ιόντων λιθίου να αλλάζουν συναρτήσει του χρόνου μέσα στο κάθε στερεό σωματίδιο. Οι αντίστοιχες οριακές συνθήκες είναι:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_s}{\partial t} \Big|_{r=0} &= 0 \\ -D_s \frac{\partial c_s}{\partial r} \Big|_{r=R} &= j_r \end{aligned} \quad (2.23)$$

Όπου ένας δείκτης θα τοποθετηθεί στη συνέχεια στο R για να υποδείξει αν το σφαιρικό σωματίδιο ακτίνας R ανήκει στο θετικό ή στο αρνητικό ηλεκτρόδιο.

Σύμφωνα με την υπόθεση που κάνει ο Di Domenico [29] η ροή ιόντων από στο σφαιρικό σωματίδιο j_r (mol/(m²s)) θα αντικατασταθεί από την ποσότητα j^{Li} (A/m³) που εξακολουθεί να ποσοτικοποιεί την ροή των ιόντων λιθίου αλλά με όρους φορτίου ανά μονάδα όγκου και όχι με όρους mol ανά μονάδα επιφάνειας. Οι ποσότητες αυτές σχετίζονται μεταξύ τους με την σχέση:

$$j^{Li} = F a j_r \quad (2.24)$$

Όπου F είναι το ηλεκτρικό φορτίο ανά mol και a είναι η μέση επιφάνεια ανά μονάδα όγκου του ηλεκτροδίου. Η δεύτερη οριακή συνθήκη της εξίσωσης 2.16 μπορεί με βάση τις καινούριες υποθέσεις να ξαναγραφτεί :

$$D_s \frac{\partial c_s}{\partial r} \Big|_{r=R} = -\frac{j^{Li}}{aF} \quad (2.25)$$

Με στόχο να αναπαραστήσουμε ένα απλοποιημένο σύστημα μερικών διαφορικών εξισώσεων απαιτείται ένα δυναμικό μοντέλο εκφρασμένο με τη μορφή εξισώσεων κατάστασης. Στόχος είναι να λυθούν όσο το δυνατόν γρηγορότερα οι μερικές διαφορικές εξισώσεις που εμφανίζονται στην στερεή και ηλεκτρολυτική φάση, καθώς και οι αλγεβρικές λόγω της κινητικής μεταφοράς φορτίου.

ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΔΙΑΦΟΡΩΝ ΚΑΙ ΔΙΑΚΡΙΤΟΠΟΙΗΣΗ

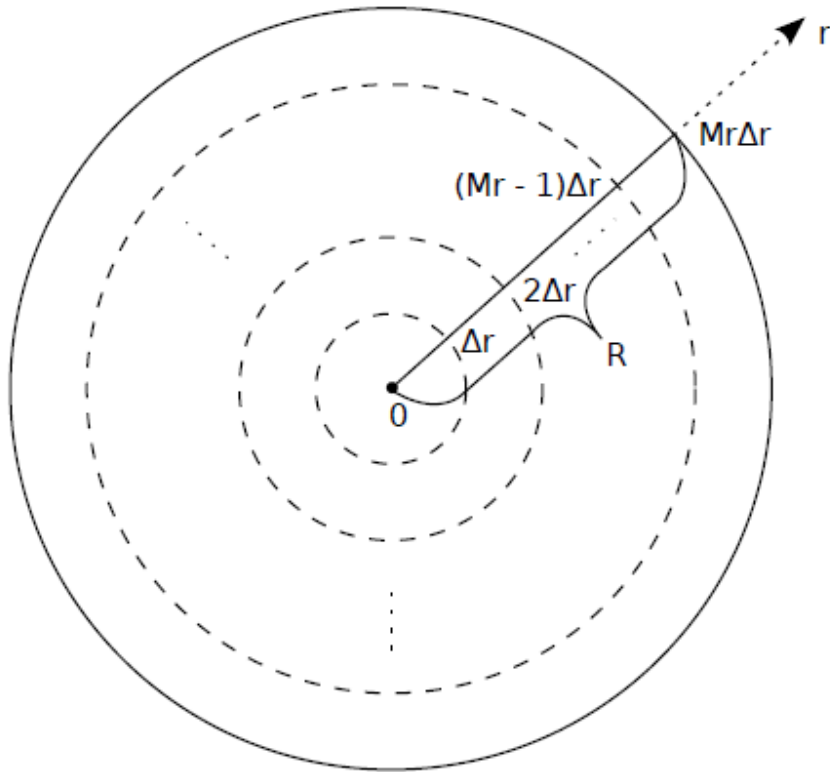
Οι μερικές διαφορικές εξισώσεις μετατρέπονται σε ένα μεγάλο αριθμό από συνήθεις διαφορικές εξισώσεις διακριτοποιώντας την x διάσταση σε ισαπέχοντα διαστήματα. Τα μερικά παράγωγα συναρτήσει της απόστασης και των οριακών συνθηκών υπολογίζονται ως εξής από την (2.16):

$$\begin{aligned}\frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} &\approx \frac{-c(1,j) + c(2,j)}{\Delta x} \\ \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} &\approx \frac{c(i-1,j) - 2c(i,j) + c(i+1,j)}{\Delta x^2} \\ \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=1} &\approx \frac{-c(N-1,j) + c(N,j)}{\Delta x}\end{aligned}$$

Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών μπορεί να εκφραστεί με την μορφή εξισώσεων κατάστασης:

$$[\vec{c}] = [A][\vec{c}] + [B][\vec{j}]$$

Αφού καταφέραμε να αναπαραστήσουμε το σύστημα των συγκεντρώσεων ηλεκτρολυτικής και στερεής φάσης με την μορφή εξισώσεων κατάστασης θα επιχειρήσουμε να απλοποιήσουμε το σύστημα εξισώσεων που περιγράφουν τα φαινόμενα στο εσωτερικό των σφαιρικών σωματιδίων. Για την λύση αυτών των μερικών διαφορικών εξισώσεων θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος της διακριτοποίησης. Πρόκειται για αριθμητική μέθοδο, σύμφωνα με την οποία, ένα συνεχές πρόβλημα αντικαθίσταται από ένα διακριτό, του οποίου η λύση είναι γνωστή κατά προσέγγιση από το συνεχές πρόβλημα. Με αυτό το σκεπτικό το σφαιρικό σωματίδιο διακριτοποιείται όπως στην εικόνα 2.5, ενώ ο χρόνος εξακολουθεί να θεωρείται συνεχές μέγεθος.



Εικόνα 2.5 Σχηματική αναπαράσταση της ακτινικής διακριτοποίησης που χρησιμοποιείται στο μέσο μοντέλο ηλεκτροδίου.[29]

Κατά την διακριτοποίηση το σφαιρικό σωματίδιο ακτίνας R χωρίζεται σε M_r κομμάτια , καθένα από αυτά έχει ακτίνα $\Delta_r = R/M_r$ όπως φαίνεται και στην εικόνα 2.5. Ορίζοντας ως c_{sq} την συγκέντρωση στη στερεή φάση στην ακτινική συντεταγμένη $\Delta_r q$, για q ακέραιο από 1 μέχρι M_{r-1} , το διάνυσμα κατάστασης που σχετίζεται με την αρχική μερική διαφορική εξίσωση για μια δοσμένη τιμή του x είναι :

$$c_s = [c_{s1} \ c_{s2} \ \dots \ c_{sq} \ \dots \ c_{s(M_r-1)}]'$$

Η συγκέντρωση για $r=0$ και κατ' επέκταση c_{s0} , δεν περιλαμβάνεται στο διάνυσμα κατάστασης αφού από τις οριακές συνθήκες 2.23 ορίσαμε ότι η συγκέντρωση και τα δυναμικά της σφαίρας στο κέντρο της είναι μηδέν. Η άλλη οριακή συνθήκη περιορίζει την συγκέντρωση c_{sM_r} , για $r=M_r\Delta_r = R$, να μην εμφανίζεται ούτε και αυτή στο διάνυσμα κατάστασης, αφού αντιστοιχεί στην επιφανειακή συγκέντρωση που πριν ονομάστηκε c_{ss} . Μια προσεγγιστική τιμή μπορεί να δοθεί στην μεταβλητή c_{sM_r} υποθέτοντας ότι ο ρυθμός μεταβολής συγκέντρωσης ανά διάστημα $\frac{\partial c_s}{\partial r}$ είναι σταθερός και ίσος με την οριακή συνθήκη (2.25). Σε αυτή την περίπτωση :

$$c_{ss} = c_{sM_r} = c_{s(M_r-1)} + \int_{M_r-1}^{M_r} \Delta_r \frac{\partial c_s}{\partial r} dr \cong c_{s(M_r-1)} - \frac{\Delta_r}{D_s a F} j^{Li} \quad (2.26)$$

Χρησιμοποιώντας πρώτου και δεύτερου βαθμού πεπερασμένες διαφορές, για να χειριστούμε τις πρώτες και δεύτερες μερικές παραγώγους, για μια δοσμένη θέση στον x άξονα του ηλεκτροδίου, η εξίσωση (2.22) γίνεται :

$$\begin{aligned} c_{sq} \dot{} &= D_s \left(\frac{2}{q\Delta_r} \frac{c_{s(q+1)} - c_{s(q-1)}}{2\Delta_r} + \frac{c_{s(q+1)} - 2c_{sq} + c_{s(q-1)}}{(\Delta_r)^2} \right) \\ &= \frac{D_s}{(\Delta_r)^2} \left(\frac{q+1}{q} c_{s(q+1)} - 2c_{sq} + \frac{q-1}{q} c_{s(q-1)} \right) \quad (2.27) \end{aligned}$$

όπου $q=1, \dots, M_{r-1}$.

Συγκεκριμένα, για $q=M_{r-1}$ η έκφραση αυτή μπορεί να συνδυαστεί με την εξίσωση 2.26 και να ξαναγραφτεί για να δοθεί έμφαση στους πραγματικούς συντελεστές του διανύσματος κατάστασης και για j^{Li} (που τελικά θα είναι και η είσοδος του συστήματος μας) έχουμε:

$$\begin{aligned} c_{sM_{r-1}} \dot{} &= \frac{D_s}{(\Delta_r)^2} \left[\frac{M_r}{M_{r-1}} \left(c_{s(M_{r-1})} - \frac{\Delta_r}{D_s a F} j^{Li} \right) - 2c_{s(M_{r-1})} + \frac{M_r - 2}{M_r - 1} c_{s(M_{r-2})} \right] \\ &= \frac{D_s}{(\Delta_r)^2} \frac{M_r - 2}{M_{r-1}} (c_{s(M_{r-2})} - c_{s(M_{r-1})}) - \frac{M_r}{M_{r-1}} \frac{1}{a F} j^{Li} \quad (2.28) \end{aligned}$$

Οι τελικές εξισώσεις κατάστασης είναι :

$$\begin{bmatrix} \dot{c}_{s1} \\ \dot{c}_{s2} \\ \vdots \\ \dot{c}_{sM_{r-2}} \\ \dot{c}_{sM_{r-1}} \end{bmatrix} = \frac{D_s}{(\Delta_r)^2} \begin{bmatrix} -2 & -2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1/2 & -2 & 3/2 & 0 & \dots & 0 \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \frac{M_r-3}{M_r-2} & -2 & \frac{M_r-1}{M_r-2} \\ 0 & \dots & 0 & & \frac{M_r-2}{M_r-1} & -\frac{M_r-2}{M_r-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{s1} \\ c_{s2} \\ \vdots \\ c_{sM_{r-2}} \\ c_{sM_{r-1}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & \frac{M_r}{M_{r-1}} \frac{1}{a F} \end{bmatrix}' j^{Li} \quad (2.29)$$

ή τελικά σε μια πιο συμπαγή μορφή :

$$\dot{c}_s = A c_s + B j^{Li} \quad (2.30)$$

όπου $A \in R^{(M_{r-1}) \times (M_{r-1})}$ και $B \in R^{(M_{r-1}) \times 1}$ είναι οι συντελεστές του διανύσματος κατάστασης. Η τάση του κελιού είναι σχεδιασμένη σαν έξοδος του συστήματος και ορίζεται ως :

$$V = \Phi_s(L) - \Phi_s(0) + R_f I \quad (2.31)$$

όπου R_f η συνολική αντίσταση στην επιφάνεια του ηλεκτροδίου . Επιπλέον δεδομένου του ορισμού του υπερδυναμικού (2.19) :

$$\eta(x) = \Phi_s(x) - \Phi_e(x) - U(c_{ss}(x))$$

και η τάση του κελιού μπορεί να εκφραστεί τώρα συνολικά:

$$V = \eta_p(L) - \eta_p(0) + \Phi_e(L) - \Phi_e(0) + U_p(c_{ss}(L)) - U_n(c_{ss}(0)) + R_f I \quad (2.32)$$

και θα μας φανεί χρήσιμη παρακάτω.

Η απλοποίηση του συστήματος μέχρι τώρα δεν έχει οδηγήσει σε μια ακόμα βολική παρουσίαση του. Αρχικά, αφού διακριτοποιήσαμε το πλάτος των ηλεκτροδίων σε ένα πεπερασμένο αριθμό N_x σημείων (τόσα σημεία όσα απαιτεί η ακρίβεια του μοντέλου), εξακολουθούν να υπάρχουν N_x εξισώσεις όπως η (2.30), αφού και το j^{Li} και το διάνυσμα κατάστασης εξαρτάται από το x . Ωστόσο αν το N_x είναι μικρό το μοντέλο μας δεν θα είναι αντιπροσωπευτικό για μετρήσεις πραγματικού χρόνου. Επίσης το j^{Li} εξαρτάται από την επιφανειακή συγκέντρωση λόγω της εξίσωσης Butler-Volmer και ταυτόχρονα από ένα σύνολο μεταβλητών κατάστασης, ενώ θέλουμε το j^{Li} να συνδέεται μόνο με το εξωτερικό εφαρμοζόμενο ρεύμα. Ακόμη η έξοδος του μοντέλου (εξ. 2.31) δεν εκφράζεται απόλυτα σαν συνάρτηση του επιλεγμένου ρεύματος εισόδου και των μεταβλητών κατάστασης.

Ένας τρόπος να αντιμετωπίσουμε αυτά τα ζητήματα είναι να αμελήσουμε την συγκέντρωση κατά μήκος των ηλεκτροδίων και να θεωρήσουμε ότι η διάχυση συμβαίνει μόνο μέσα στα αντιπροσωπευτικά, για κάθε ηλεκτρόδιο, σφαιρικά σωματίδια. Η διαδικασία όπως παρουσιάστηκε από τον Di Domenico [29], βασίζεται στη θεωρία γραμμικού μέσου και ξεκινά να την εφαρμόζει με την ροή πυκνότητας j^{Li} . Για να γραφτεί σαν σχέση μόνο με τον x άξονα αρκεί να γράψουμε όλες τις ροές πυκνότητας με μορφή που να περιγράφονται μόνο για τον x -άξονα. Έτσι ξεκινάμε γράφοντας την πυκνότητα ρεύματος στη διεπιφάνεια ανόδου/διαχωριστή i_e ως εξής:

$$i_e(x_n) = i_e(0) + \int_0^{x_n} \frac{\partial i_e(x')}{\partial x'} dx' = \int_0^{x_n} j^{Li}(x') dx' = I \quad (2.33)$$

Όπου οι οριακές συνθήκες για το i_e :

$$i_e(0) = I \text{ και } i_e(x_n) = 0$$

Και η διατήρηση φορτίου (εξ 2.6) γίνεται:

$$\frac{\partial i_e(x')}{\partial x'} = j^{Li}(x')$$

Μπορούμε τώρα να υπολογίσουμε την μέση τιμή του j^{Li} , κατά μήκος του αρνητικού ηλεκτροδίου, και θα συμβολίζεται $\overline{j^{Li}}$:

$$\overline{j^{Li}} = \frac{1}{x_n} \int_0^{x_n} j^{Li}(x') dx' = \frac{I}{L_-} \quad (2.34)$$

Με αυτό τον τρόπο συνδέσαμε την ροή πυκνότητας στα σφαιρικά σωματίδια με την είσοδο του συστήματος μας. Με παρόμοιο τρόπο υπολογίζεται και η μέση ροή πυκνότητας στο θετικό ηλεκτρόδιο $\overline{j_p^{Li}}$:

$$i_e(L) = i_e(x_p) + \int_{x_p}^L j^{Li}(x') dx' = I + \int_{x_p}^L j^{Li}(x') dx' = 0$$

$$\overline{j_p^{Li}} = \frac{1}{L-x_p} \int_{x_p}^L j^{Li}(x') dx' = -\frac{I}{L_+} \quad (2.35)$$

Αντικαθιστούμε τώρα με τα $\overline{j_n^{Li}}$ και $\overline{j_p^{Li}}$ το j^{Li} , ανάλογα με το ηλεκτρόδιο, και το σύστημα μας γίνεται :

$$\begin{aligned} \dot{c}_{sn} &= A_n \bar{c}_{sn} + B_n \overline{J_n^{Li}} \\ \dot{\bar{c}}_{sp} &= A_p \bar{c}_{sp} + B_p \overline{J_p^{Li}} \quad (2.36) \end{aligned}$$

Όπου $\bar{c}_{sp}, \bar{c}_{sn}$ τα διανύσματα κατάστασης της μέσης συγκέντρωσης της στερεής συγκέντρωσης μέσα στα στερεά σωματίδια του θετικού και αρνητικού ηλεκτροδίου αντίστοιχα. Προστέθηκε ένας δείκτης στους πίνακες A και B για να λάβουμε υπόψιν τις διαφορές στις παραμέτρους της ανόδου και της καθόδου (π.χ. ο συντελεστής διάχυσης D_s , η ειδική επιφάνεια a και άλλες παράμετροι που θα διευκρινιστούν παρακάτω). Παρόμοιες θεωρήσεις οδηγούν να ανασκευάσουμε και την επιφανειακή πυκνότητα για το αρνητικό και θετικό ηλεκτρόδιο ως εξής:

$$\overline{c_{ssn}} = \overline{c_{snM_{r-1}}} - \frac{\Delta_{rn}}{D_{sn} a_n F} \overline{J_n^{Li}} \quad (2.37)$$

$$\overline{c_{ssp}} = \overline{c_{spM_{r-1}}} - \frac{\Delta_{rp}}{D_{sp} a_p F} \overline{J_p^{Li}} \quad (2.38)$$

Επίσης οι πυκνότητες ρεύματος και τα δυναμικά που περιγράψαμε παραπάνω απλοποιούνται πάρα πολύ. Ξεκινώντας από την άνοδο ($0 \leq x \leq x_n$), η πυκνότητα ρεύματος στον ηλεκτρολύτη εκφράζεται συναρτήσει του x-άξονα :

$$i_e(x) \approx i_e(0) + \int_0^x \overline{J_n^{Li}} dx' = \frac{I}{L_-} x \quad (2.39)$$

Με το δυναμικό στον ηλεκτρολύτη, συνδυάζοντας τις εξισώσεις 2.2 και 2.39, να εμφανίζει μια τετραγωνική σχέση με το x:

$$\begin{aligned} \Phi_e(x) &= \Phi_e(0) + \int_0^x \frac{\partial \Phi_e(x')}{\partial x'} dx' \\ &\approx \Phi_e(0) - \int_0^x \frac{i_e(x')}{k_n} dx' = \Phi_e(0) - \left. \frac{\overline{J_n^{Li}} x'^2}{k_n 2} \right| \\ &= \Phi_e(0) - \frac{I}{2k_n L_-} x^2 \quad (2.40) \end{aligned}$$

Όπου ο λογαριθμικός όρος στην εξ. 2.2 παραλείφθηκε, αφού c_e σταθερό. Οι εξισώσεις για την πυκνότητα ρεύματος και το δυναμικό στην κάθοδο ($x_p \leq x \leq L$) γράφονται με παρόμοιο τρόπο :

$$\begin{aligned} i_e(x) &\approx i_e(x_p) + \int_{x_p}^x \overline{J_n^{Li}} dx' = I - \frac{I}{L_+} (x - x_p) \quad (2.41) \\ \Phi_e(x) &= \Phi_e(x_n) + \int_{x_n}^{x_p} \frac{\partial \Phi_e(x')}{\partial x'} dx' + \int_{x_p}^x \frac{\partial \Phi_e(x')}{\partial x'} dx' \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\approx \Phi_e(0) - \frac{I}{2k_n L_-} L_-^2 - \int_{x_n}^{x_p} \frac{I}{k_{sep}} dx' - \int_{x_p}^x \frac{i_e}{k_p} dx' \\
&= \Phi_e(0) - \frac{I}{2k_n} L_- - \frac{I}{k_{sep}} (x_p - x_n) - \frac{1}{k_p} \left(Ix' + J_p^{Li} \frac{(x' - x_p)^2}{2} \right) \\
&= \Phi_e(0) - \frac{I}{2k_n} L_- - \frac{I}{k_{sep}} L_s - \frac{I}{k_p} \left((x - x_p) - \frac{(x - x_p)^2}{2L_+} \right) \quad (2.42)
\end{aligned}$$

Με την προοπτική της δημιουργίας μιας πιο εύκολης και βολικής εξίσωσης της τάσης του κελιού, είναι χρήσιμο να θεωρήσουμε μέσες τιμές και για τα υπερδυναμικά σε κάθε ηλεκτρόδιο αλλά και για την διαφορά δυναμικού $\Phi_e(L) - \Phi_e(0)$. Έτσι από τις εξισώσεις 2.40 και 2.42 εύκολα βγαίνει ότι:

$$\begin{aligned}
\Phi_e(L) - \Phi_e(0) &\approx -\frac{I}{2k_n} L_- - \frac{I}{k_{sep}} L_s - \frac{I}{k_p} \left((L - x_p) - \frac{(L - x_p)^2}{2L_+} \right) \\
&= -I \left(\frac{L_-}{2k_n} + \frac{L_s}{k_{sep}} - \frac{L_+}{2k_p} \right) \quad (2.43)
\end{aligned}$$

Μια μέση τιμή του αρνητικού και θετικού υπερδυναμικού $\bar{\eta}_n$ και $\bar{\eta}_p$ μπορούν να προκύψουν από την μέση ροή πυκνότητας που περιγράφει η εξίσωση Butler-Volmer 2.18:

$$\begin{aligned}
\bar{J}_n^{Li} &= a_n i_{o,n} \left[\exp\left(\frac{a_a F}{RT} \bar{\eta}_n\right) - \exp\left(\frac{-a_c F}{RT} \bar{\eta}_n\right) \right] \\
\bar{J}_p^{Li} &= a_p i_{o,p} \left[\exp\left(\frac{a_a F}{RT} \bar{\eta}_p\right) - \exp\left(\frac{-a_c F}{RT} \bar{\eta}_p\right) \right] \quad (2.44)
\end{aligned}$$

Όπου οι πυκνότητες ανταλλαγής ρεύματος $i_{o,n}$ και $i_{o,p}$ ορίζονται σύμφωνα με την εξίσωση 2.20.

Υποθέτοντας ότι οι συντελεστές μεταφοράς ανόδου και καθόδου a_a και a_c , αντίστοιχα, έχουν την ίδια τιμή α , και εισάγοντας τις δύο παρακάτω βοηθητικές μεταβλητές (auxiliary⁵ variables)

$$\xi_n \triangleq \frac{\bar{J}_n^{Li}}{2a_n i_{o,n}} = \frac{1}{2} \left[\exp\left(\frac{\alpha F}{RT} \bar{\eta}_n\right) - \exp\left(\frac{-\alpha F}{RT} \bar{\eta}_n\right) \right] = \sinh\left(\frac{\alpha F}{RT} \bar{\eta}_n\right)$$

⁵ Βοηθητικές μεταβλητές είναι αυτές οι μεταβλητές που μπορούν να βοηθήσουν να γίνουν εκτιμήσεις σε δεδομένα που δεν παρέχουν όλες τις απαραίτητες πληροφορίες. Απώλεια δεδομένων στην στατιστική συμβαίνει όταν δεν έχουμε δεδομένα για την μεταβλητή που μας ενδιαφέρει σε μια παρατήρηση.

$$\xi_p \triangleq \frac{\overline{j_p^{Li}}}{\alpha_p i_{o,p}} = \frac{1}{2} \left[\exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT} \overline{\eta_p}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha_c F}{RT} \overline{\eta_p}\right) \right] = \sinh\left(\frac{\alpha F}{RT} \overline{\eta_p}\right) \quad (2.45)$$

Τα μέσα υπερδυναμικά εκφρασμένα με την βοηθητική μεταβλητή, και κατ' επέκταση σε όρους j^{Li} , αντιστρέφοντας τα υπερβολικά ημίτονα γίνονται:

$$\begin{aligned} \overline{\eta_n} &= \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\xi_n + \sqrt{\xi_n^2 + 1}\right) \\ \overline{\eta_p} &= \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\xi_p + \sqrt{\xi_p^2 + 1}\right) \end{aligned} \quad (2.46)$$

Τελικά για τον υπολογισμό της τάσης εξόδου το σύστημα γράφεται σαν σύνολο των παραπάνω μέσων τιμών των ποσοτήτων που αναφέραμε έως τώρα, ξεκινώντας από την εξίσωση 2.32:

$$\begin{aligned} V &= \eta_p(L) - \eta_n(0) + \Phi_e(L) - \Phi_e(0) + U_p(c_{ss}(L)) - U_n(c_{ss}(0)) + R_f I \\ &\approx \overline{\eta_p} - \overline{\eta_n} - I \left(\frac{L_-}{2k_n} + \frac{L_s}{k_{sep}} - \frac{L_+}{2k_p} \right) + U_p(\overline{c_{ssp}}) - U_n(\overline{c_{ssn}}) + R_f I \end{aligned} \quad (2.47)$$

Για να απλοποιήσουμε το μοντέλο θα θεωρήσουμε επίσης ότι οι συντελεστές αγωγιμότητας k_n , k_{sep} και k_p αντικαθίστανται από μια αγωγιμότητα k , κοινή για όλα τα μέρη του κελιού. Αυτή η παραδοχή, μειώνει σημαντικά τον αριθμό των παραμέτρων, χωρίς όμως να επηρεάζεται το τελικό αποτέλεσμα.

Τελικά η τάση εξόδου του κελιού είναι :

$$\begin{aligned} V &= U_p(\overline{c_{ssp}}) - U_n(\overline{c_{ssn}}) + \overline{\eta_p} - \overline{\eta_n} - I \left(\frac{L_-}{2k_n} + \frac{L_s}{k_{sep}} - \frac{L_+}{2k_p} + R_f \right) \quad (2.48) \\ &= V_{OCP}(\overline{c_{ss}}) + V_{OVP}(\overline{c_{ss}}, I) - V_R(I) \end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned} V_{OCP}(\overline{c_{ss}}) &= U_p(\overline{c_{ssp}}) - U_n(\overline{c_{ssn}}) \\ V_{OVP}(\overline{c_{ss}}, I) &= \overline{\eta_p} - \overline{\eta_n} = \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\xi_p + \sqrt{\xi_p^2 + 1}\right) - \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\xi_n + \sqrt{\xi_n^2 + 1}\right) \\ V_R(I) &= I \left(\frac{L_-}{2k_n} + \frac{L_s}{k_{sep}} - \frac{L_+}{2k_p} + R_f \right) \end{aligned}$$

Η τάση V_{OCP} , είναι η τάση ανοιχτοκύκλωσης και εξαρτάται μόνο από την συγκέντρωση των ιόντων λιθίου στη στερεή φάση, δηλαδή από την $\overline{c_{ss}}$. Η τάση V_{OVP} είναι το αποτέλεσμα της

διαφοράς του υπερδυναμικού $\overline{\eta_p} - \overline{\eta_n}$. Εξαρτάται από την $\overline{c_{ss}}$ και από το ρεύμα που εφαρμόζουμε. Η V_{OVP} είναι μηδέν αν δεν εφαρμόζουμε ρεύμα. Η V_R είναι η τάση που δημιουργείται από τις αντιστάσεις στην επιφάνεια του ηλεκτροδίου και την ιονική αντίσταση στον ηλεκτρολύτη. Αν σταματήσουμε να εφαρμόζουμε ρεύμα τότε η τάση V_R θα γίνει μηδέν.

Οι επιφανειακές συγκεντρώσεις για το θετικό και αρνητικό ηλεκτρόδιο, ορίστηκαν αρχικά από το μέσο μοντέλο. Μαζί με το ρεύμα που εμείς δίνουμε σαν είσοδο στο μοντέλο, υπολογίζουμε την τάση ανοιχτοκύκλωσης V_{OCP} , την διαφορά υπερδυναμικού V_{OVP} , και την τάση λόγω αντιστάσεων V_R . Η τάση της μπαταρίας τώρα υπολογίζεται από την εξίσωση (2.48). Παρατηρούμε ότι η έξοδος του μοντέλου εξαρτάται από την διαφορά δυναμικού της τάσης ανοιχτοκύκλωσης $U_p(\overline{c_{ssp}}) - U_n(\overline{c_{ssn}})$ και όχι από τα δυναμικά ανοιχτοκύκλωσης $U_p(\overline{c_{ssp}})$ ή $U_n(\overline{c_{ssn}})$ ξεχωριστά.

2.3 ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ ΦΟΡΤΙΣΗΣ ΜΠΑΤΑΡΙΑΣ (State Of Charge SOC)

Η κατάσταση φόρτισης (SOC) της μπαταρίας ιόντων λιθίου ή ενός κελιού χρησιμοποιείται για να περιγράψει πόσο γεμάτη μια μπαταρία είναι. Με πιο απλά λόγια, όταν μια μπαταρία είναι πλήρως φορτισμένη, μπορούμε να πούμε ότι το SOC της μπαταρίας είναι 100%.

Το SOC είναι άμεσα συνδεδεμένο με την επιφανειακή συγκέντρωση στα ηλεκτρόδια. Εισάγοντας την έννοια του συντελεστής χρήσης θ_p από το θετικό ηλεκτρόδιο υπολογίζεται η συγκέντρωση στο αρνητικό ηλεκτρόδιο και έτσι υπολογίζεται και η κατάσταση φόρτισης όπως φαίνεται και στη συνέχεια. Ο όρος θ_p ορίζεται:

$$\theta_p = \frac{\overline{c_{sbp}}}{c_{sp,max}}, \theta_{p100\%} \leq \theta_p \leq \theta_{p0\%} \quad (2.49)$$

Όπου $\overline{c_{sbp}}$ η μέση συγκέντρωση του θετικού ηλεκτροδίου και $\theta_{p0\%}$ και $\theta_{p100\%}$ είναι οι μέσες συγκεντρώσεις σε ένα πλήρως εκφόρτιστο κελί και ένα πλήρως φορτισμένο, αντίστοιχα. Τα $\theta_{p0\%}$ και $\theta_{p100\%}$ εξαρτώνται από την χωρητικότητα της μπαταρίας ως εξής:

$$|\theta_{p0\%} - \theta_{p100\%}| = \frac{Q}{AL_+F\varepsilon_{sp}c_{sp,max}} \quad (2.50)$$

Όπου ε_{sp} το εύρος όγκου του ενεργού υλικού του θετικού ηλεκτροδίου. Το SOC, καθορισμένο από το θετικό ηλεκτρόδιο, μεταβάλλεται γραμμικά με το θ_p και εκφράζεται ως εξής:

$$SOC = \frac{\theta_p - \theta_{p0\%}}{\theta_{p100\%} - \theta_{p0\%}} \quad (2.51)$$

Το SOC πρέπει να υπολογιστεί και για το θετικό και για το αρνητικό ηλεκτρόδιο. Θα θεωρήσουμε ότι ο συντελεστής θ_n αφορά τώρα το αρνητικό ηλεκτρόδιο και το SOC που σχετίζεται με τον συντελεστή αυτό είναι ίδιο με αυτό που υπολογίζεται από το συντελεστή του θετικού ηλεκτροδίου. Έτσι ο συντελεστής θ_n υπολογίζεται ως εξής:

$$\theta_n = \theta_{n0\%} + SOC(\theta_{n100\%} - \theta_{n0\%}), \theta_{n0\%} \leq \theta_n \leq \theta_{n100\%} \quad (2.52)$$

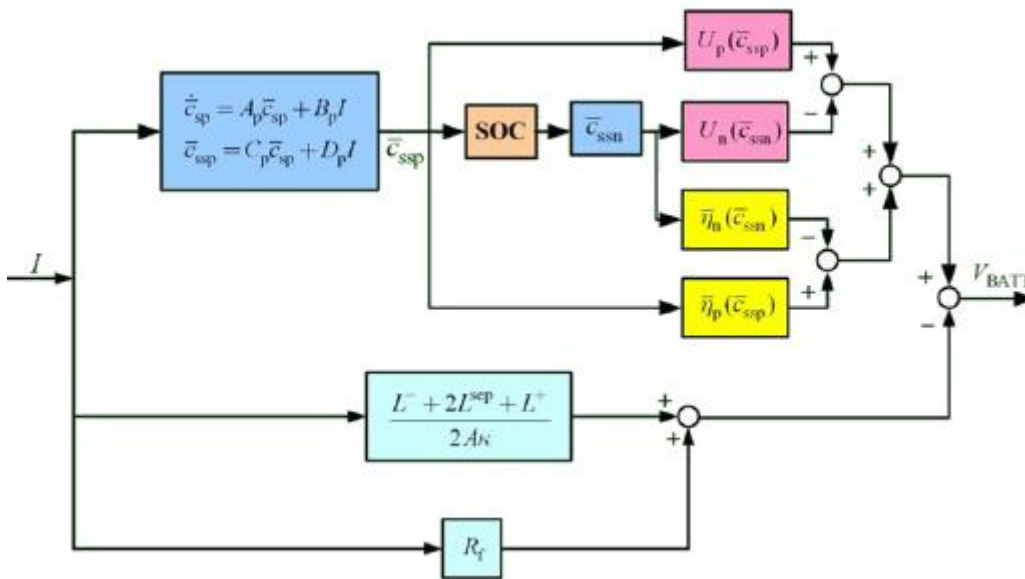
Ο συντελεστής χρήσης θ_n χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της μέσης συγκέντρωσης στο αρνητικό ηλεκτρόδιο $\overline{c_{sbn}}$ ως εξής:

$$\overline{c_{sbn}} = \theta_n c_{sn,max}$$

Επομένως προκύπτει η συγκέντρωση στο αρνητικό ηλεκτρόδιο και υπολογίζεται ως εξής:

$$\overline{c_{ssn}} = \overline{c_{sbn}} - \frac{\Delta r_n}{D_{sn} a_n F A} I \quad (2.53)$$

Με αυτό τον τρόπο το μέσο ηλεκτροχημικό μοντέλο ολοκληρώθηκε και συνοψίζεται στην παρακάτω εικόνα 2.6.



Εικόνα 2.6 Διάγραμμα ηλεκτροχημικού μοντέλου μπαταρίας. Είσοδος του μοντέλου το ρεύμα I και έξοδος η τάση του κελιού της μπαταρίας V .

Πριν οποιοδήποτε μοντέλο χρησιμοποιηθεί για πραγματική εφαρμογή, είναι απαραίτητο να βρεθούν οι τιμές για τις παραμέτρους του. Πιο συγκεκριμένα, οι παράμετροι επιλέγονται για να έχουν βέλτιστη εφαρμογή σε μια σειρά δεδομένων εισόδων/εξόδων, που παράγονται από ένα πραγματικό σύστημα. Η λέξη “βέλτιστα” εισάγει την έννοια της ελαχιστοποίησης της συνάρτησης κόστους, δηλαδή της συνάρτησης εκείνης που δίνει το σφάλμα μεταξύ πραγματικών δεδομένων και των δεδομένων του μοντέλου.

Από εδώ και στο εξής θα θεωρηθεί ότι η χημεία των ηλεκτροδίων του Li-ion κελιού είναι γνωστή, και τα ονομαστικά δεδομένα για τις ηλεκτροχημικές παραμέτρους και τα δυναμικά ανοιχτοκύκλωσης είναι επίσης γνωστά. Δυστυχώς οι κατασκευαστές μπαταριών ιόντων λιθίου δεν είναι πάντα πρόθυμοι να παρέχουν λεπτομερή περιγραφή της χημείας των προϊόντων τους. Στον παρακάτω πίνακα βρίσκονται όλες οι παράμετροι που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο και η τιμή τους είναι σταθερή και γνωστή.

Παράμετροι		
Περιγραφή	Σύμβολο	Ονομαστική Τιμή ⁶
Συγκέντρωση ηλεκτρολύτη	c_e	1000mol/m ³
Μέγιστη στερεή συγκέντρωση στην άνοδο	$c_{s,max,n}$	24983.7 mol/m ³
Μέγιστη στερεή συγκέντρωση στην κάθοδο	$c_{s,max,p}$	51218.8 mol/m ³
Σταθερά Ρυθμού αντίδρασης αρνητικού ηλεκτροδίου	$r_{k,n}$	1×10 ⁻⁵
Σταθερά Ρυθμού αντίδρασης αρνητικού ηλεκτροδίου	$r_{k,p}$	3×10 ⁻¹¹
Αγωγιμότητα άλατος	k	0.18504 S/m
Ακτίνα σωματιδίου ανόδου	R_n	1×10 ⁻⁵
Ακτίνα σωματιδίου καθόδου	R_p	1×10 ⁻⁵
Πάχος αρνητικού ηλεκτροδίου	L_-	10×10 ⁻⁵
Πάχος θετικού ηλεκτροδίου	L_+	10×10 ⁻⁵
Πάχος διαχωριστή	L_{sep}	10×10 ⁻⁵
Ενεργή επιφάνεια ανά μονάδα όγκου ηλεκτροδίου ανόδου	a_n	1.8×10 ⁵ 1/m
Ενεργή επιφάνεια ανά μονάδα όγκου ηλεκτροδίου καθόδου	a_p	1.5×10 ⁵ 1/m
Συντελεστής διάχυσης στερεής φάσης στην άνοδο	$D_{s,n}$	3.9×10 ⁻¹⁴ m ² /s
Συντελεστής διάχυσης στερεής φάσης στην κάθοδο	$D_{s,p}$	1×10 ⁻¹³ m ² /s
Αντίσταση στην επιφάνεια του ηλεκτροδίου	R_f	1×10 ⁻⁵ Ω

Πίνακας 2.4 Παράμετροι μπαταρίας LiFePO₄

Γνωστές Παράμετροι		
Περιγραφή	Σύμβολο	Τιμή
Αριθμός διακριτών ακτινικών σημείων	M_r	$M_r \geq 3 \quad M_r \in N$
Σταθερά μεταφοράς ανόδου/καθόδου	α	0.5
Θερμοκρασία	T	298K
Σταθερά Faraday	F	96485.3 C/mol
Παγκόσμια σταθερά αερίων	R	8.31447J/(mol K)

Πίνακας 2.5 Πίνακας σταθερών παραμέτρων

⁶ Για κελί Li-ion με LiFePO₄ στην άνοδο, MCMB 2528 γραφίτης (Bellcore) άνοδος και LiPF₆ στον ηλεκτρολύτη : DMC ηλεκτρολύτης.

2.4 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ MATLAB

Η μοντελοποίηση του κελιού μιας Li-ion μπαταρίας είναι χρήσιμη για τους κατασκευαστές Li-ion μπαταριών, έτσι ώστε να μπορέσουν να τις βελτιώσουν, κάνοντας τις φθηνότερες, καλύτερες και πιο αποδοτικές. Το προτεινόμενο μοντέλο πρέπει να είναι ακριβές και να παρέχει λύσεις στα διάφορα προβλήματα που μπορούν να παρουσιαστούν. Ένα καλό μοντέλο πρέπει να προβλέπει την απόδοση της μπαταρίας υπό μια πληθώρα συνθηκών λειτουργίας. Το μέσο μοντέλο που κατασκευάστηκε έχει μεγάλη ικανότητα πρόβλεψης με λιγότερο υπολογιστικό κόστος. Οι απαραίτητες βελτιώσεις για την λειτουργία και απόδοση της μπαταρίας απαιτούν καλύτερο σχεδιασμό και καλύτερα υλικά. Αυτά τα ζητήματα μπορούν να ρυθμιστούν μόνο αν υπάρχουν διαθέσιμα ρεαλιστικά μοντέλα.

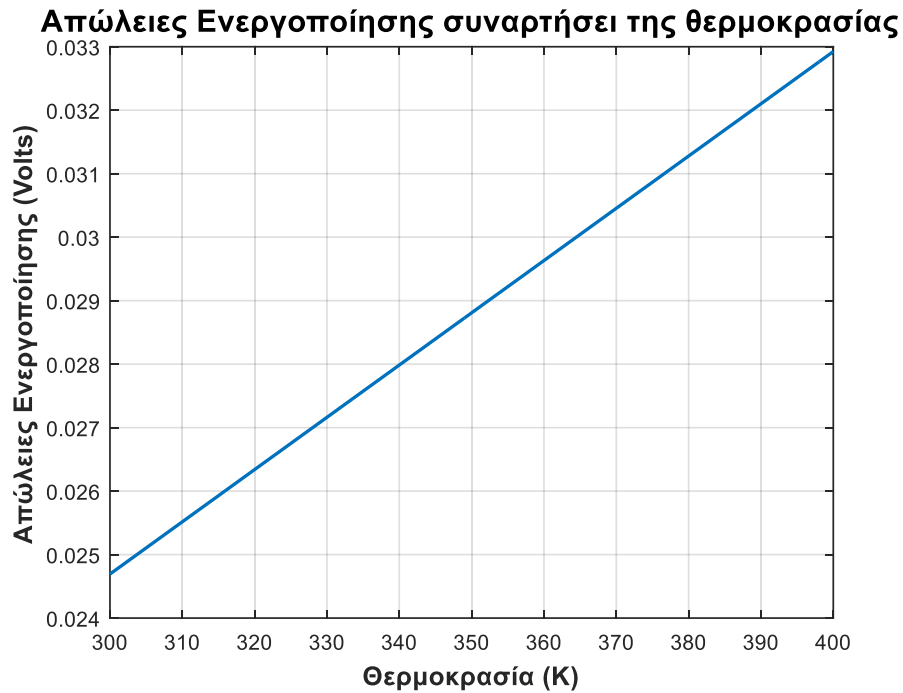
Η ηλεκτροχημεία που παρουσιάστηκε νωρίτερα μας επιτρέπει να υπολογίσουμε θεωρητικά κάποιες χημικές παραμέτρους καθώς και την διαφορά δυναμικού μεταξύ ανόδου και καθόδου. Επίσης μας δίνει όλες τις σχετικές πληροφορίες σχετικά με το πόσο γρήγορα συμβαίνει μια αντίδραση, με το πώς τα αντιδρώντα δημιουργούν προϊόντα, με το ρυθμό που παράγεται το ρεύμα στο κελί της μπαταρίας και πόση ενέργεια χάνεται στη διάρκεια κάθε ηλεκτροχημικής αντίδρασης.

Προσομοίωση σε MATLAB

Με τη χρήση του MATLAB θα παρουσιάσουμε μια μοντελοποίηση προκειμένου να εξάγουμε τις επιθυμητές σχέσεις.

Αν και στο μέσο ηλεκτροχημικό μοντέλο η επίδραση της θερμοκρασίας στην απόδοση του κελιού δεν υπολογίζεται, παρόλα αυτά μπορούμε να υπολογίσουμε ξεχωριστά και για σταθερό ρεύμα, πώς επηρεάζει η θερμοκρασία τις απώλειες ενεργοποίησης. Αυτό γίνεται μέσω της εξίσωσης Tafel. Η εξίσωση αυτή συνδέει το υπερδυναμικό που εμφανίζεται στην εξίσωση (2.18) Butler Vomer με την θερμοκρασία.

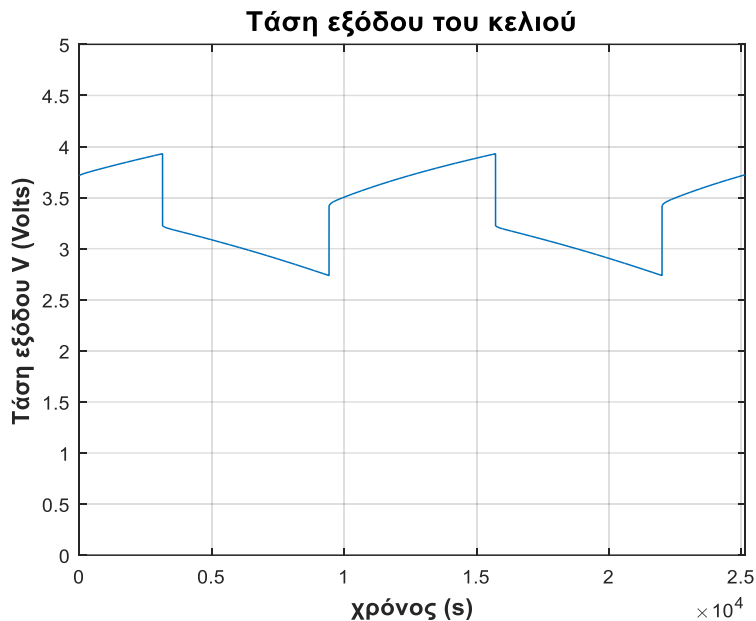
Είναι εμφανής η εξάρτηση των απωλειών από την θερμοκρασία όπως φαίνεται και στην γραφική παράσταση. Όσο αυξάνει η θερμοκρασία τόσο αυξάνονται και οι απώλειες.



Εικόνα 2.7 Απώλειες ενεργοποίησης συναρτήσει της θερμοκρασίας (K).

Για τις ανάγκες, της παρούσας διπλωματικής στις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε κελί μπαταρίας με υλικό καθόδου LiFePO_4 χωρητικότητας 3000mAh.

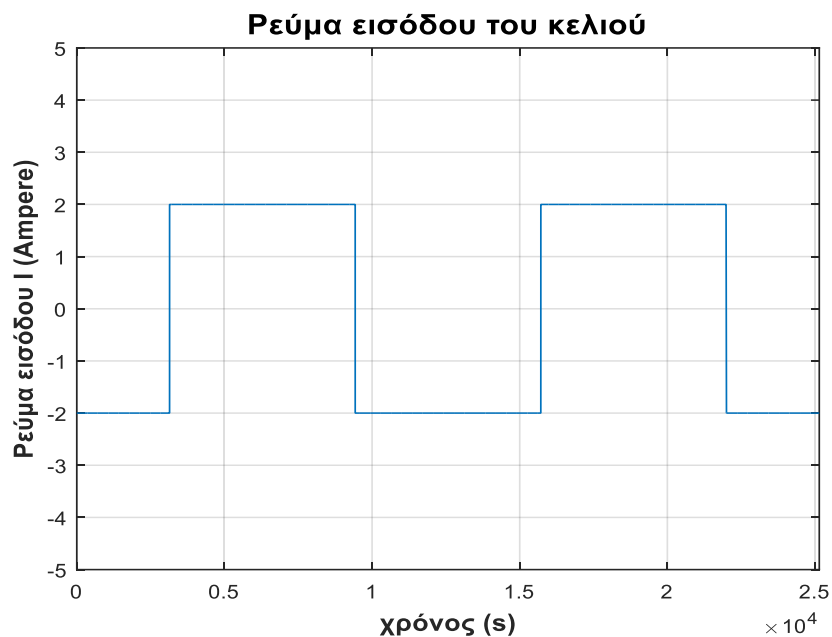
Στην παρακάτω γραφική παράσταση (εικόνα 2.8) παρατηρούμε την τάση του κελιού για δύο κύκλους. Ένας κύκλος είναι μια πλήρης φόρτιση και εκφόρτιση. Η μπαταρία έχει ονομαστική τάση στα 3,75 V και βάθος εκφόρτισης 100%, δηλαδή εκφορτίζεται πλήρως.



Εικόνα 2.8 Γραφική αναπαράσταση τάσης εξόδου του κελιού της μπαταρίας συναρτήσει του χρόνου για 2 κύκλους.

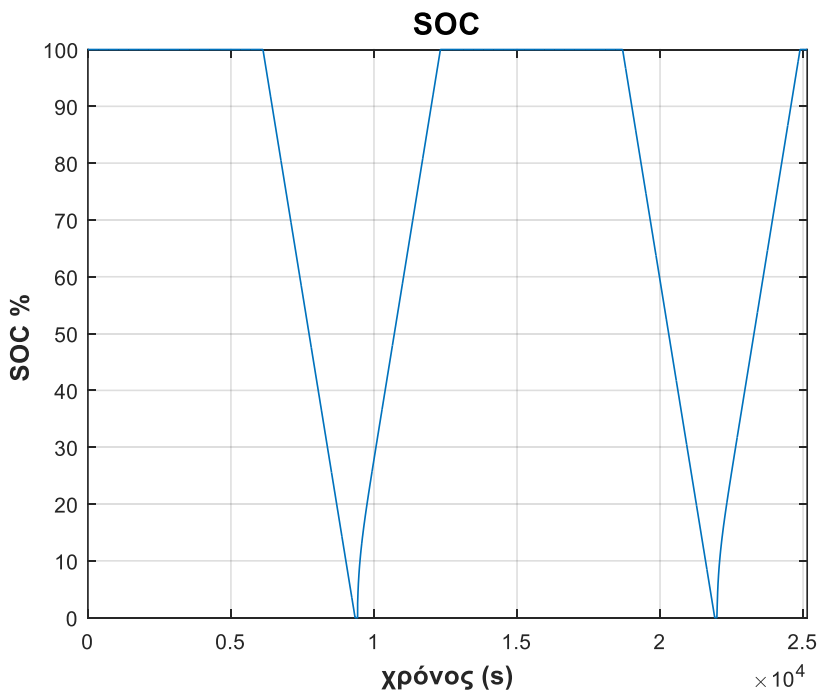
Στην επόμενη γραφική παράσταση (εικόνα 2.9) παρατηρούμε το εφαρμοζόμενο ρεύμα (I) για δύο κύκλους. Έχει παλμική μορφή και παίρνει τις μέγιστες τιμές για τις προδιαγραφές

του κελιού $I \in [-2,2]$. Πρόκειται ουσιαστικά για την συνεχή λειτουργία της μπαταρίας κάτω από μέγιστο φορτίο 11,4Wh.



Εικόνα 2.9 Γραφική παράσταση ρεύματος για 2 κύκλους του κελιού της μπαταρίας.

Στην συνέχεια (εικόνα 2.10) παρουσιάζεται η κατάσταση φόρτισης της μπαταρίας για δύο κύκλους όπως προκύπτει για το παραπάνω ρεύμα εισόδου. Παρατηρούμε ότι για έναν κύκλο (100%-0%-100%) το χρονικό διάστημα αντιστοιχεί σε 6200s ή σε 1,72h.

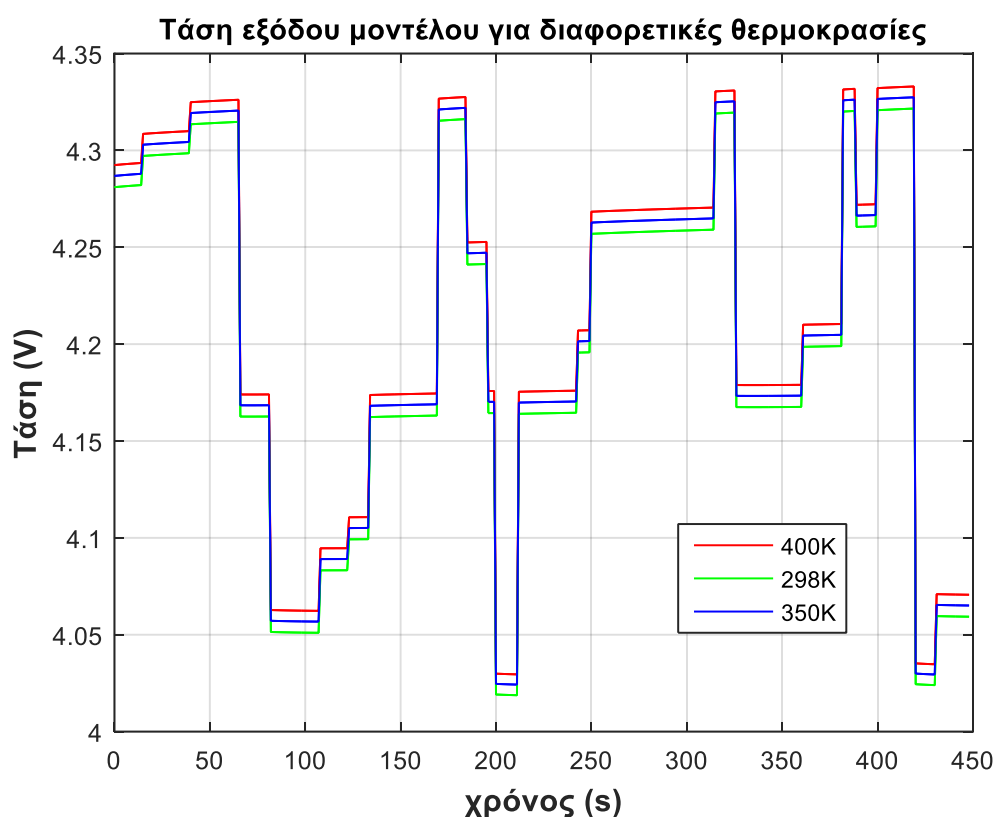


Εικόνα 2.10 Κατάσταση φόρτισης της μπαταρίας για 2 κύκλους.

Βρίσκοντας τον μέσο όρο των μεγίστων της τάσης (3,9V) και διαιρώντας με την αναγραφόμενη ισχύ (11,4Wh) δηλαδή $\frac{11,4Wh}{3,9V} = 2,92Ah$, παρατηρούμε μια άμεση μείωση

της χωρητικότητας της μπαταρίας. Αυτό σημαίνει ότι ανάλογα με τους κύκλους ζωής της μπαταρίας μειώνεται και η χωρητικότητα. Βέβαια η σχέση δεν είναι απόλυτα γραμμική καθώς τα ηλεκτροχημικά φαινόμενα που προκαλούν την σταδιακή γήρανση του ηλεκτρολύτη και κατ' επέκταση της μπαταρίας έχουν μη γραμμική συμπεριφορά.

Επίσης σημαντική είναι και η θερμοκρασία στη λειτουργία της μπαταρίας. Δηλαδή, η αύξηση της θερμοκρασίας επηρεάζει την συγκέντρωση των ιόντων λιθίου καθώς αυξάνει τον ρυθμό με τον οποίο συμβαίνουν οι χημικές αντιδράσεις. Αυτό συνεπάγεται με εξάντληση των ιόντων και γρηγορότερη γήρανση του ηλεκτρολύτη. Ωστόσο επειδή το μοντέλο που χρησιμοποιούμε λαμβάνει κάποιους περιορισμούς, ώστε να είναι υπολογιστικά εύκολο, η θερμοκρασία σχετίζεται μόνο με το υπερδυναμικό που αναπτύσσεται στην στερεή φάση. Η τάση εξόδου του κελιού της μπαταρίας για διαφορετικές θερμοκρασίες φαίνεται στην παρακάτω εικόνα 2.11:

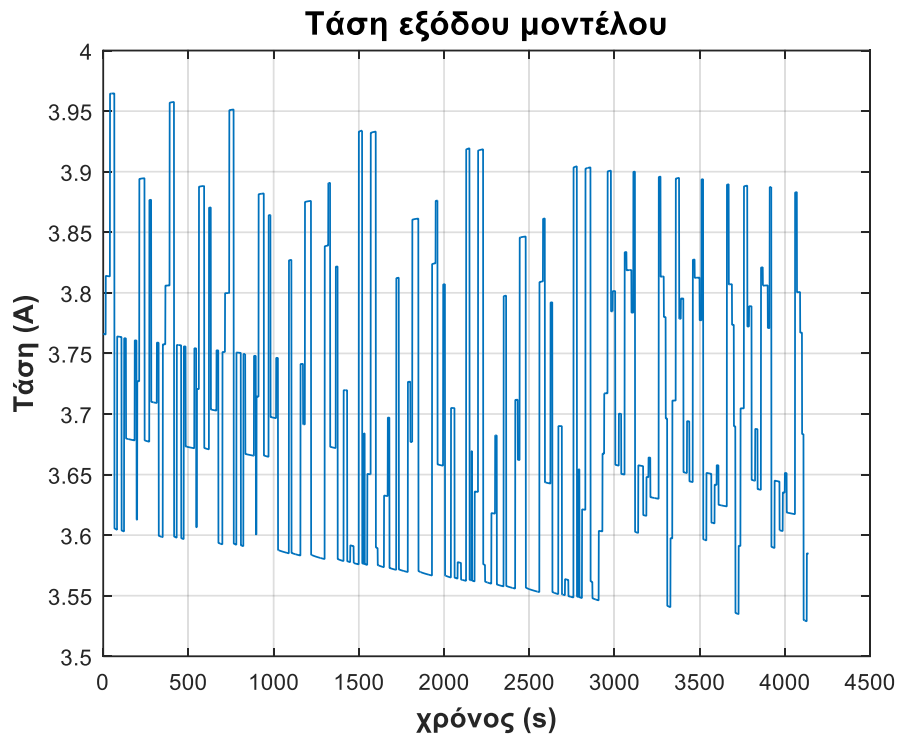


Εικόνα 2.11 Τάση εξόδου μπαταρίας για διαφορετικές θερμοκρασίες

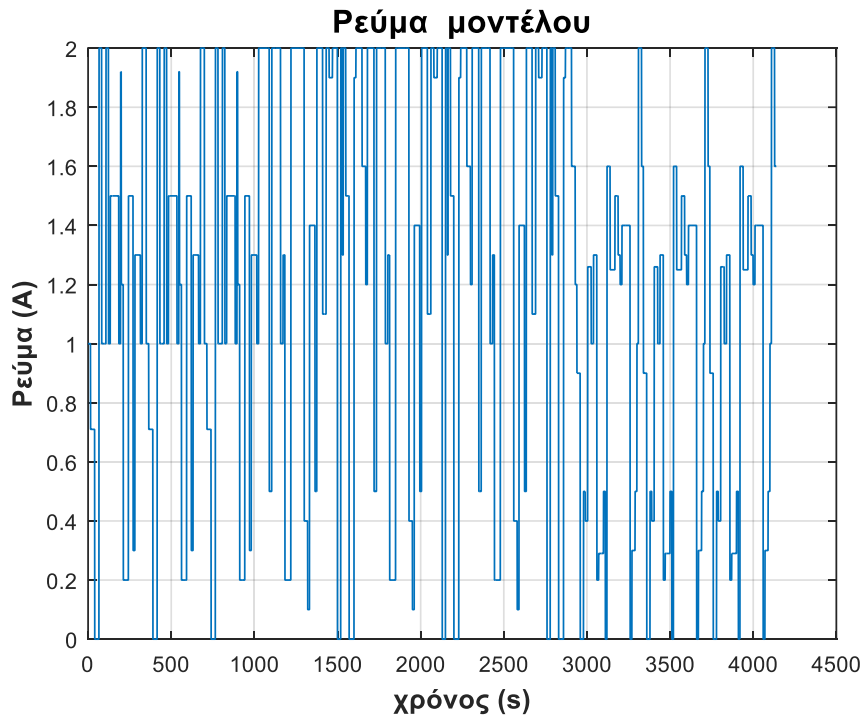
Το αποτέλεσμα της γραφικής παράστασης στην εικόνα 2.11 ήταν αναμενόμενο, αφού η σχέση θερμοκρασίας-υπερδυναμικού προσεγγίστηκε με γραμμικό τρόπο. Το σημαντικό είναι ότι για αύξηση της θερμοκρασίας αυξάνεται και η τάση της μπαταρίας, γεγονός που εγκυμονεί κινδύνους για τα ασφαλή όρια λειτουργίας μιας μπαταρίας.

Σκοπός του μοντέλου ήταν η προσομοίωση της λειτουργίας μιας μπαταρίας συναρτήσει ρεύματος τάσης και θερμοκρασίας για τον υπολογισμό της εκτίμησης της κατάστασης φόρτισης (SOC). Το μοντέλο λειτουργεί με βάση ρεαλιστικά δεδομένα και τα αποτελέσματα

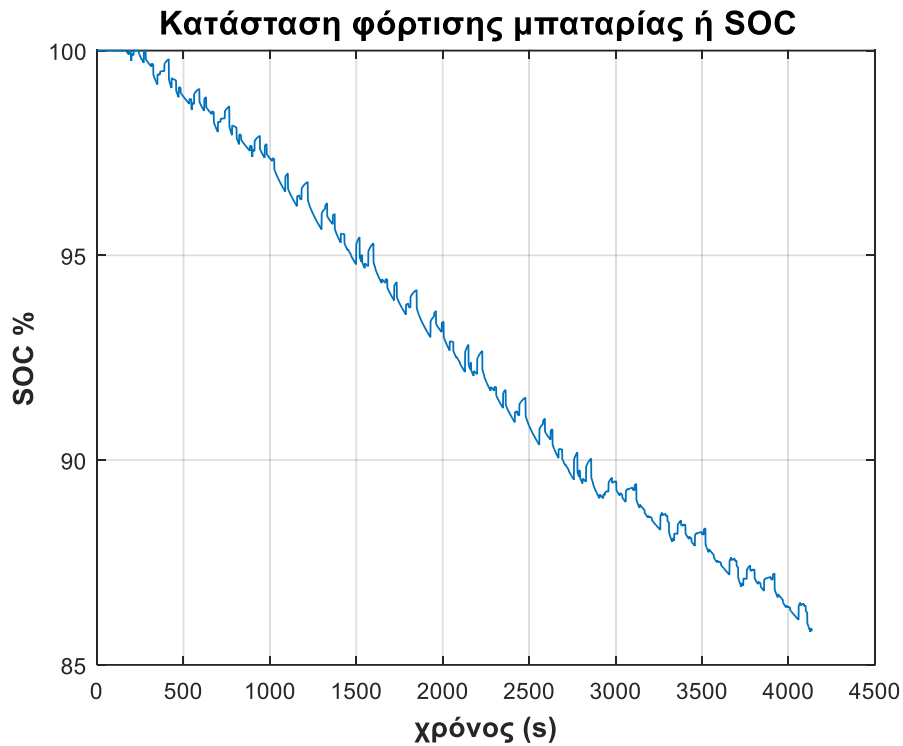
είναι λογικά. Παρακάτω παρουσιάζονται διάφορες καταστάσεις φόρτισης για διαφορετικά ρεύματα εισόδου.



Εικόνα 2.12 Τάση εξόδου του μοντέλου για τυχαίο ρεύμα, συναρτήσει του χρόνου.



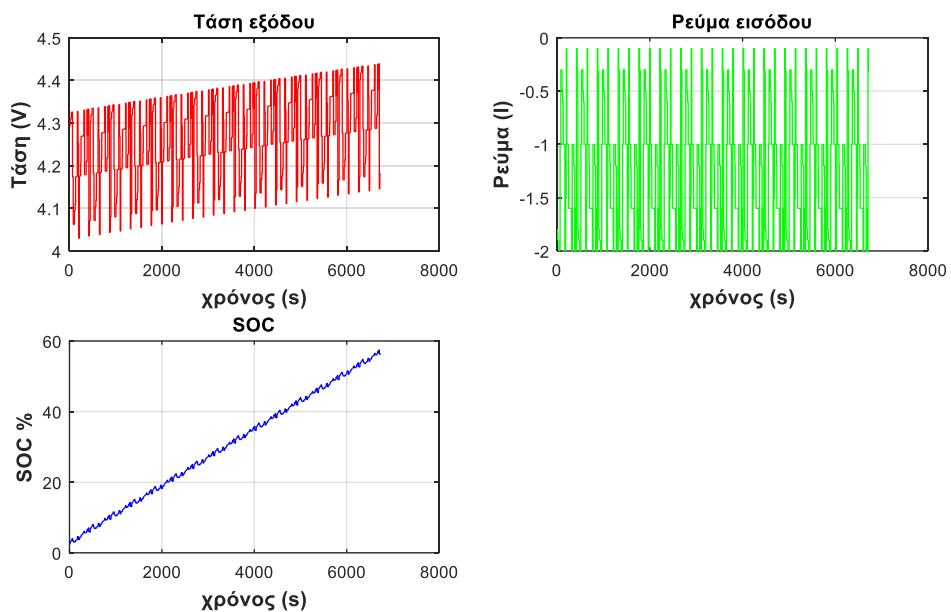
Εικόνα 2.13 Τυχαίο ρεύμα εκφόρτισης σαν εισόδος του μοντέλου



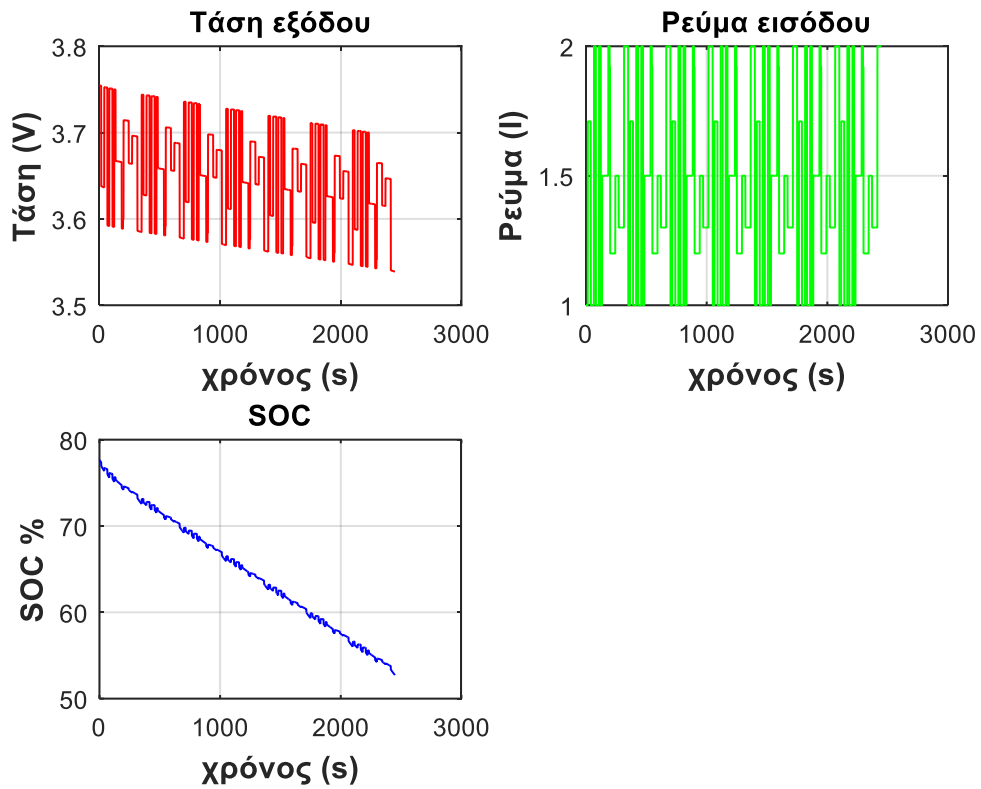
Εικόνα 2.14 Κατάσταση φόρτισης της μπαταρίας.

Η εικόνα 2.14 δείχνει το SOC να “πέφτει” μέχρι το 85% περίπου για ρεύμα εκφόρτισης όπως φαίνεται στην εικόνα 2.12.

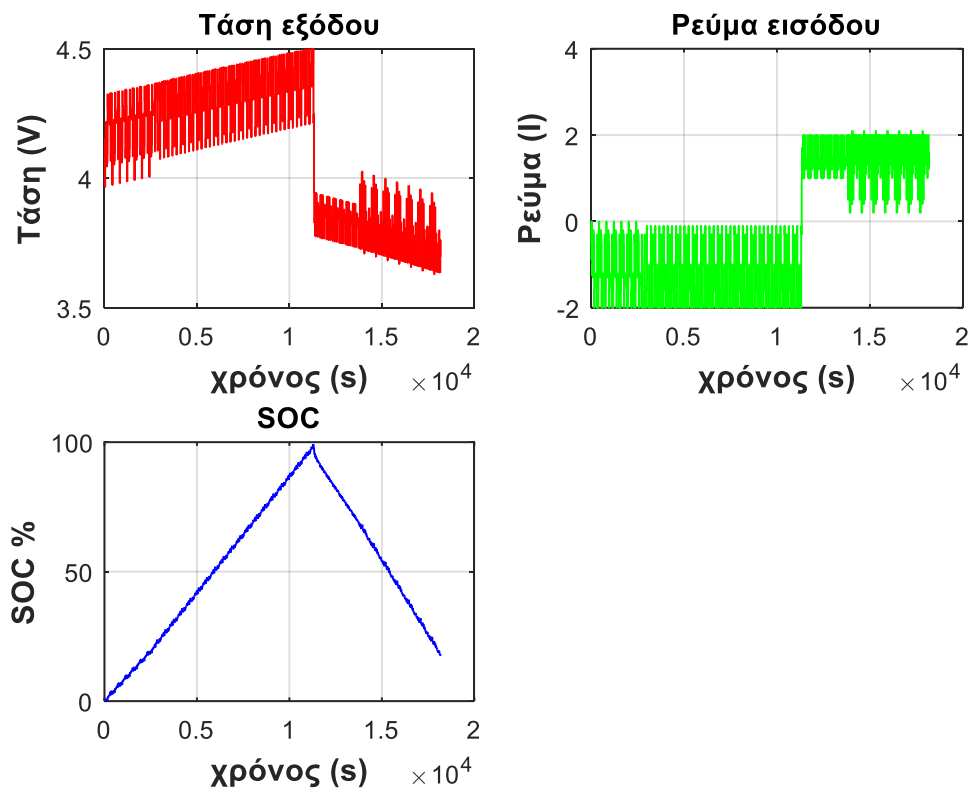
Στη συνέχεια, στις παρακάτω εικόνες, θα παρουσιαστούν διαφορετικά προφίλ φόρτισης και εκφόρτισης.



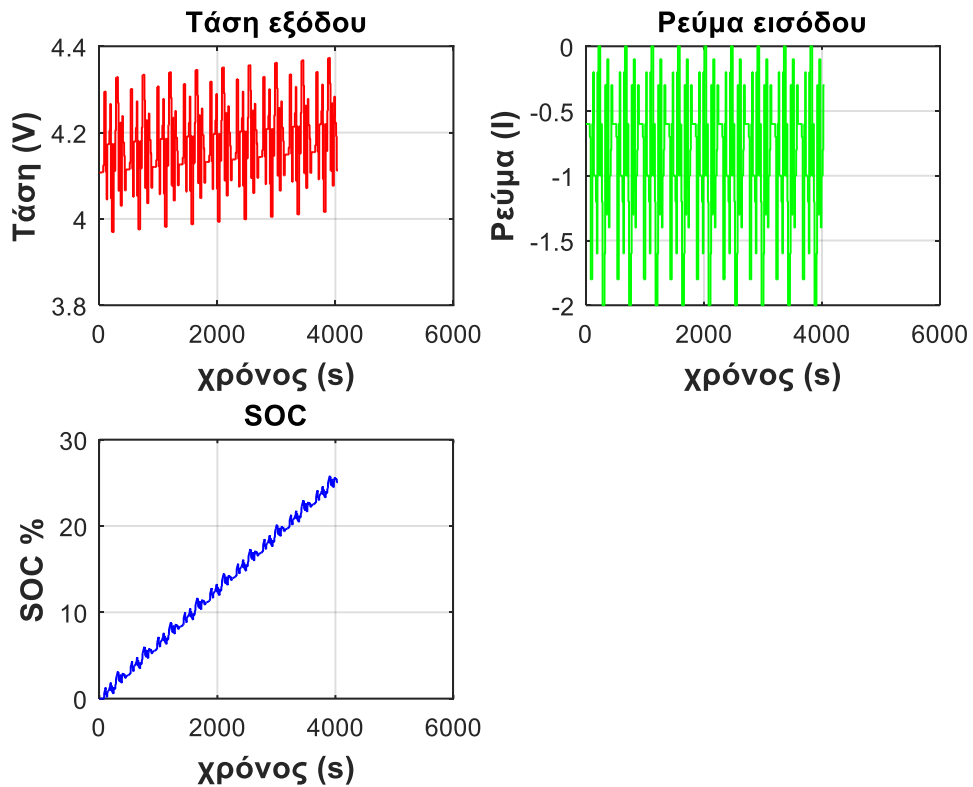
Εικόνα 2.15 Γραφικές παραστάσεις τάσεως, ρεύματος και SOC για διαφορετικές τιμές ρεύματος στα 6735s.



Εικόνα 2.16 Γραφικές παραστάσεις τάσεως, ρεύματος και SOC για διαφορετικές τιμές ρεύματος στα 2450s.



Εικόνα 2.17 Γραφικές παραστάσεις τάσεως, ρεύματος και SOC για διαφορετικές τιμές ρεύματος στα 18191s



Εικόνα 2.18 Γραφικές παραστάσεις τάσεως, ρεύματος και SOC για διαφορετικές τιμές ρεύματος στα 4041s

Οι φορτίσεις και οι εκφορτίσεις συμβαίνουν σε σχετικά σύντομο χρονικό διάστημα όταν το ρεύμα εισόδου παίρνει τις οριακές τιμές. Αντίθετα για χαμηλότερες τιμές ρεύματος η φόρτιση και εκφόρτιση γίνεται με πιο αργό ρυθμό, όπως άλλωστε ήταν αναμενόμενο.

Η τάση εξόδου του μοντέλου και το ρεύμα θα χρησιμοποιηθούν σαν είσοδοι για το μοντέλο νευρωνικού δικτύου του επόμενου κεφαλαίου, με στόχο την εκτίμηση του SOC. Για το λόγο αυτό η λειτουργία του μοντέλου μπαταρίας πρέπει να είναι ακριβής.

Κεφάλαιο 3^ο

3.1 ΕΚΤΙΜΗΣΗ SOC ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΗΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

3.1.1 ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΚΤΙΜΗΣΗΣ SOC

Μέχρι σήμερα, ένα από τα βασικά ερωτήματα για την λειτουργία των μπαταριών είναι, το ποσό ενέργειας που μπορεί να διαθέσει, για χρήση από απλές ηλεκτρονικές συσκευές, μέχρι τα smart grids και ηλεκτρικά αυτοκίνητα. Μόνο η εκτίμηση του SOC, με όση περισσότερη ακρίβεια γίνεται, μπορεί να διασφαλίσει την υλοποίηση μιας στρατηγικής γρήγορης και ισορροπημένης φόρτισης. Ο σκοπός, ουσιαστικά, της εκτίμησης του SOC είναι να αποφευχθεί είτε μια υπερφόρτιση είτε μια τέτοια εκφόρτιση, που θα οδηγήσει σε καταστροφή της μπαταρίας. Αντίθετα θα οδηγήσει σε βελτίωση και επιμήκυνση της ζωής της μπαταρίας και αναπόφευκτα σε μείωση του κόστους. Ταυτόχρονα η σωστή εκτίμηση του SOC, έχει σαν αποτέλεσμα την λειτουργία της μπαταρίας σε ασφαλή όρια ώστε να αποφευχθούν τυχόν ανεπιθύμητες παρενέργειες, όπως για παράδειγμα η έκρηξη της μπαταρίας λόγω υπερφόρτισης[45]. Επίσης η σωστή εκτίμηση του SOC είναι αναγκαία, αν η μπαταρία πρόκειται να χρησιμοποιηθεί σε κάποιο ηλεκτρικό αυτοκίνητο. Είναι σημαντικό να γνωρίζουμε αν φτάνει στο προορισμό του ή θα χρειαστεί φόρτιση.

Τα ποικίλα μαθηματικά μοντέλα εκτίμησης του SOC κατηγοριοποιούνται ανάλογα με την μεθοδολογία που χρησιμοποιούν. Οι περισσότερες βιβλιογραφικές αναφορές ασχολούνται τις εξής τέσσερις κατηγορίες[45,46,47]:

- i. Άμεση μέτρηση (Direct measurement): αυτή η μέθοδος χρησιμοποιεί τις φυσικές ιδιότητες της μπαταρίας, όπως η τάση και η αντίσταση της[45].
- ii. Book-Keeping εκτίμηση: αυτή η μέθοδος χρησιμοποιεί σαν είσοδο το ρεύμα εκφόρτισης και στη συνέχεια με ολοκλήρωση στο πεδίο του χρόνου υπολογίζει το SOC [45].
- iii. Προσαρμοστικά συστήματα (Adaptive Systems) : τα συστήματα αυτά αναπτύχθηκαν με την ανάπτυξη της τεχνολογίας της τεχνητής νοημοσύνης. Οι νέες αυτές μέθοδοι περιλαμβάνουν τα νευρωνικά δίκτυα με ανάδρασης σφάλματος(Back propagation), τα νευρωνικά δίκτυα ακτινικής βάσης (RBF), μεθόδους ασαφούς λογικής και τα φίλτρα Kalman. Τα συστήματα έχουν την δυνατότητα της αυτό-προσαρμογής σε αλλαγές και μπορούν να ανανεώνονται αυτόματα. Καθώς οι μπαταρίες αντιμετωπίζουν διάφορους αστάθμητους χημικούς παράγοντες και έχουν μη γραμμική συμπεριφορά σε αρκετές περιπτώσεις, τα προσαρμοστικά συστήματα είναι μια καλή λύση για την εκτίμηση του SOC[45,46].
- iv. Συνδυασμός μεθόδων: πρόκειται για συνδυασμό μεθόδων από διαφορετικές κατηγορίες, ώστε εκεί που δεν επαρκεί η μία να συμπληρώνει η άλλη[45].

Συνοπτική Παρουσίαση των Μεθόδων Εκτίμησης SOC

1. Άμεσης μέτρησης

Στην κατηγορία της άμεσης μέτρησης ανήκουν οι παρακάτω μέθοδοι:

A) Μέθοδος Τάσης ανοιχτοκύκλωσης

Υπάρχει μια, σχετικά, γραμμική σχέση μεταξύ της τάσης ανοιχτοκύκλωσης και του SOC στις μπαταρίες μολύβδου οξέος. Η σχέση αυτή περιγράφεται με την παρακάτω εξίσωση:

$$V_{ocv}(t) = a_1 \times SOC(t) + a_o$$

όπου $SOC(t)$ είναι το SOC την χρονική στιγμή t , a_o είναι η τερματική τάση της μπαταρίας όταν $SOC = 0\%$, a_1 είναι μία σταθερά που προκύπτει αν γνωρίζουμε την $V_{ocv}(t)$ όταν $SOC = 100\%$.

Ωστόσο για τις μπαταρίες ιόντων λιθίου δεν ισχύει η παραπάνω σχέση, καθώς η σχέση της τάσης ανοιχτοκύκλωσης και του SOC δεν είναι γραμμική. Λόγω των διαφορετικών χημειών κάθε μπαταρίας η σχέση SOC και V_{ocv} δεν μπορεί να είναι η ίδια. Συνήθως προτιμάται σε συνδυασμό με κάποια άλλη μέθοδο[45,47].

B) Μέθοδος αντιστάσεων

Η μέθοδος αυτή μετράει τις αντιστάσεις τις μπαταρίας γύρω από ένα εύρος AC συχνοτήτων, για διαφορετικά ρεύματα φόρτισης και εκφόρτισης. Οι τιμές για τις αντιστάσεις, που προκύπτουν από το μοντέλο, συγκρίνονται με την μέθοδο των ελάχιστων τετραγώνων με αυτές που έχουν μετρηθεί από την πραγματική μπαταρία[45].

2. Μέθοδος Book-Keeping

A) Μέθοδος μέτρησης Coulomb (Coulomb Counting)

Υπολογίζει έτσι το $SOC(t)$, το οποίο εκτιμάται από το ρεύμα εκφόρτισης $I(t)$, και προηγούμενες τιμές του SOC, $SOC(t - 1)$. Η εξίσωση που περιγράφει τα παραπάνω είναι:

$$SOC(t) = SOC(t - 1) + \frac{I(t)}{Q_n} \Delta t$$

Ωστόσο υπάρχουν πολλοί παράγοντες που επηρεάζουν αυτή την μέθοδο, όπως η θερμοκρασία, η διάρκεια ζωής της μπαταρίας, η κατάσταση της μπαταρίας, το ρεύμα εκφόρτισης[46,47].

B) Τροποποιημένη Μέθοδος μέτρησης Coulomb (Modified Coulomb Counting Method)

Για την βελτιστοποίηση της μεθόδου μέτρησης Coulomb, έχει προταθεί μια νέα τεχνική, που ονομάζεται τροποποιημένη μέθοδος Coulomb. Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιεί μια πιο ακριβή εκτίμηση του ρεύματος εκφόρτισης, για να βελτιώσει την ακρίβεια της εκτίμησης. Η εξίσωση που περιγράφει το ρεύμα δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$I_c = k_2 I(t)^2 + k_1 I(t) + k_0,$$

όπου k_2 , k_1 και k_0 είναι σταθερές από πειραματικά δεδομένα. Έτσι το SOC υπολογίζεται τώρα από την ακόλουθη εξίσωση:

$$SOC(t) = SOC(t - 1) + \frac{I_c(t)}{Q_n} \Delta t$$

Η ήδη υπάρχουσα βιβλιογραφία αναφέρει ότι αυτή η μέθοδος είναι πιο αποτελεσματική από την απλή μέθοδο μέτρησης Coulomb[46,47].

3. Προσαρμοστικά συστήματα (Adaptive Systems)

Στην κατηγορία αυτή ανήκουν τα νευρωνικά δίκτυα ανάδρασης σφάλματος, που είναι ο δημοφιλέστερος τύπος τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Θα γίνει εκτενής αναφορά σε επόμενη ενότητα για την λειτουργία τους. Είναι από τις πιο διαδεδομένες μεθόδους εκτίμησης του SOC, καθώς μπορεί να περιγράψει με μικρό σφάλμα μη γραμμικές συμπεριφορές. Όπως, είδαμε, η σχέση τάσης εξόδου της μπαταρίας και ρεύματος εισόδου με το SOC δεν είναι γραμμική. Υπάρχουν διάφορα είδη νευρωνικών δικτύων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν όπως τα νευρωνικά δίκτυα ακτινικής βάσης (RBF), τα ανατροφοδοτούμενα (recurrent) κ.ά. Η επιλογή τους έχει να κάνει με τα δεδομένα εισόδου και την πολυπλοκότητα του μοντέλου μπαταρίας[45].

Στην ίδια κατηγορία ανήκει και η μέθοδος εκτίμησης SOC με μοντέλα ασαφούς λογικής[47]. Συνήθως χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με την τροποποιημένη μέθοδο Coloumb.

Το Kalman φίλτρο είναι ένα μοντέλο χώρου κατάστασης που χρησιμοποιείται στην ανάλυση και πρόβλεψη χρονοσειρών. Αποτελεί μία από τις πιο ακριβείς μεθόδους υπολογισμού του SOC. Υπολογίζει φαινόμενα που συμβαίνουν στο εσωτερικό της μπαταρίας, συμπεριλαμβανομένης της συγκέντρωσης των ιόντων λιθίου στη στερεή φάση, καθώς αυτή οφείλεται για την αλλαγή της χωρητικότητας της μπαταρίας και κατ' επέκταση του SOC[47,48].

4. Συνδυασμός Μεθόδων

Στην βιβλιογραφία υπάρχουν αρκετές αναφορές για συνδυασμούς μεθόδων. Για παράδειγμα ο Wang εκτίμησε το SOC με χρήση φίλτρου Kalman και μεθόδου μέτρησης Coloumb. Οι Wei He και Nicholas Williard συνδύασαν τα νευρωνικά δίκτυα με το Kalman φίλτρο[45,56].

3.2 ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

3.2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τεχνητή Νοημοσύνη

Η τεχνητή νοημοσύνη δεν είναι κάτι άγνωστο και νέο σαν επιστήμη. Ξεκίνησε τη δεκαετία του '50 όταν ο μαθηματικός Alan Turing περιγράφει τη δοκιμή Turing, που επιδιώκει να εξετάσει την ικανότητα μιας μηχανής να συμμετάσχει απρόσκοπτα σε μια ανθρώπινη συνομιλία. Τον όρο τεχνητή νοημοσύνη πλάθει για πρώτη φορά ο John McCarthy μιλώντας για την κατασκευή έξυπνων μηχανών. Ωστόσο, αναφορές για κατασκευή ανδροειδών μηχανών, γίνονται ήδη από την αρχαία ελληνική μυθολογία.

Πρόκειται για ένα τομέα της επιστήμης των υπολογιστών που ασχολείται με την σχεδίαση και ανάπτυξη ευφύων υπολογιστικών συστημάτων, δηλαδή συστημάτων που επιδεικνύουν χαρακτηριστικά που σχετίζονται με την ανθρώπινη συμπεριφορά. Δηλαδή λειτουργούν χρησιμοποιώντας τις στοιχειώδεις λειτουργίες του ανθρώπινου εγκεφάλου όπως η δυνατότητα μάθησης, συλλογισμού, γενίκευσης, εξειδίκευσης, η δυνατότητα κατανόησης και παραγωγής λόγου κ.ά. Η ανάπτυξη της τεχνητής νοημοσύνης ξεκινάει από την προσπάθεια να συσχετιστούν οι ανθρώπινοι νευρώνες του εγκεφάλου με απλά υπολογιστικά στοιχεία. Για αρκετά χρόνια πραγματοποιήθηκαν έρευνες και αναπτύχθηκαν συστήματα που επιλύαν απλούς γρίφους, συστήματα που απαντούσαν σε τεστ ευφυΐας, τέθηκαν οι βάσεις για την ρομποτική, αναπτύχθηκαν τα έμπειρα υπολογιστικά συστήματα και οι γλώσσες προγραμματισμού. Παρόλα αυτά μέχρι τα τέλη της δεκαετίας του '80 δεν υπήρξε κάποιο υπολογιστικό σύστημα που να προσέγγιζε ικανοποιητικά την ανθρώπινη νοημοσύνη.

Κατά τις δύο τελευταίες δεκαετίες, όμως, η ραγδαία εξέλιξη της τεχνολογίας έφερε ταυτόχρονα ραγδαίες εξελίξεις στις εφαρμογές της τεχνητής νοημοσύνης, όπως η ρομποτική, η μηχανική όραση, οι διαδικασίες λήψης αποφάσεων κ.ά.

Η τεχνητή νοημοσύνη, όπως εφαρμόζεται σήμερα, διακρίνεται σε συμβατική και υπολογιστική. Η υπολογιστική τεχνητή νοημοσύνη βασίζεται στη μάθηση μέσω επαναληπτικών διαδικασιών. Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα, που θα χρησιμοποιηθούν σε αυτή τη διπλωματική, αποτελούν κατηγορία της υπολογιστικής τεχνητής νοημοσύνης και έχουν ισχυρές δυνατότητες αναγνώρισης, ενώ η λειτουργία τους προσομοιάζει τη λειτουργία των νευρώνων του ανθρώπινου εγκεφάλου.

3.2.2 ΟΡΙΣΜΟΣ

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα είναι μοντέλα υπολογισμού, που μελετώνται με την βοήθεια μαθηματικών και υλοποιούνται συνήθως με διαδικασίες προσομοίωσης σε συμβατικούς υπολογιστές ή απευθείας σε ολοκληρωμένα κυκλώματα πολύ μεγάλης κλίμακας. Έχουν κατασκευαστεί με πρότυπο τους νευρώνες των βιολογικών νευρικών συστημάτων και στόχος τους είναι η προσομοίωση του τρόπου με τον οποίο ο ανθρώπινος εγκέφαλος επεξεργάζεται τις πληροφορίες, τις μαθαίνει και τις θυμάται. Είναι γνωστό ότι βασικές λειτουργίες της αναγνώρισης εικόνων και της ομιλίας εκτελούνται από τον ανθρώπινο εγκέφαλο με μεγάλη ευκολία και αποτελεσματικότητα, αφού τα κύτταρα του εγκεφάλου αναγνωρίζουν και

επεξεργάζονται ταυτόχρονα ένα τεράστιο όγκο δεδομένων. Πιο συγκεκριμένα για την επεξεργασία από τον ανθρώπινο εγκέφαλο ενός γεγονότος, εκατοντάδες ή ακόμα και χιλιάδες νευρώνες του, επεξεργάζονται ταυτόχρονα τα δεδομένα του γεγονότος, σχηματίζοντας μια καλύτερη εικόνα από αυτή που θα σχημάτιζε ο κάθε νευρώνας ξεχωριστά[37,39,40].

Ένας τεχνητός νευρώνας ή νευρωνικός κόμβος είναι ένας απλός επεξεργαστής. Δέχεται είσοδο (ερέθισμα) από έναν άλλο νευρωνικό κόμβο (υπολογιστικός νευρώνας ή κρυμμένος νευρώνας), λαμβάνει μια απλή απόφαση για το ερέθισμα αυτό και μεταβιβάζει το αποτέλεσμα μέσω ενός καναλιού εξόδου στον επόμενο νευρωνικό κόμβο. Τα νευρωνικά δίκτυα δημιουργούνται με την κατάλληλη ένωση των νευρωνικών κόμβων, έτσι ώστε το συνδυασμένο αποτέλεσμά τους να δίνει ένα ικανοποιητικό αποτέλεσμα για την λήψη αποφάσεων. Η ικανότητα αυτή στηρίζεται στο γεγονός ότι οι κόμβοι ενός νευρωνικού δικτύου έχουν την δυνατότητα να μαθαίνουν δεχόμενοι σταθμισμένες εισόδους, οι οποίες μετά από κατάλληλες διορθώσεις, με την πάροδο του χρόνου και με τις επαναλήψεις, να μπορούν να παράγουν τις επιθυμητές εξόδους.

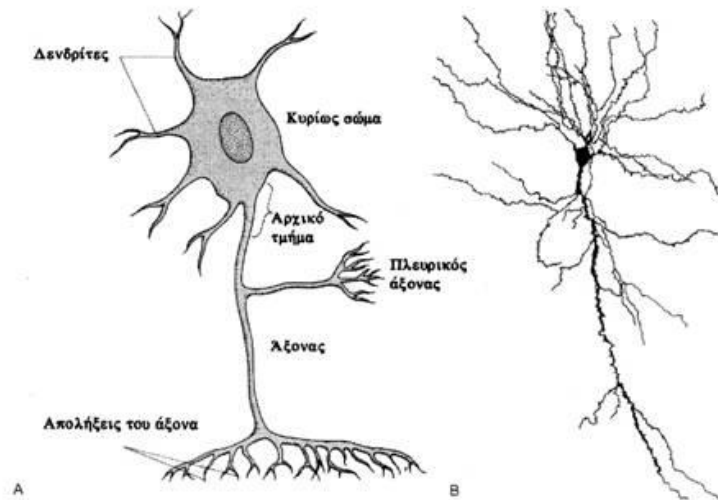
Η συγκεκριμένη διαδικασία μάθησης αποτελεί βασική συνιστώσα του αντικειμένου των νευρικών δικτύων και υλοποιείται κυρίως με εφαρμογή μεθόδων εκμάθησης υπό επίβλεψη, στηριζόμενη σε διαδικασίες σωστών αντιστοιχίσεων μεταξύ εισόδου και εξόδου. Η εκμάθηση των νευρωνικών δικτύων μπορεί να γίνει και χωρίς επίβλεψη, σύμφωνα με την οποία στο δίκτυο δεν εισέρχεται καμία πληροφορία σχετικά με την σωστή έξοδο που αντιστοιχεί σε σωστή είσοδο. Στην περίπτωση αυτή το δίκτυο αυτοοργανώνεται και μαθαίνει να αποκρίνεται με διαφορετικό τρόπο σε διαφορετικά χαρακτηριστικά εισόδου, αποκτώντας ικανότητα προσαρμογής σε μεγάλη ποικιλία περιπτώσεων, μαθαίνοντας ουσιαστικά από την δική του εμπειρία. Στην παρούσα διπλωματική η τεχνική εκπαίδευσης είναι η υπό επίβλεψη, καθώς το νευρωνικό δίκτυο εκπαιδεύεται με την χρήση ενός συνόλου απεικόνισης εισόδου και εξόδου[50,51,52].

3.2.3 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΑΝΘΡΩΠΙΝΟΥ ΚΑΙ ΤΕΧΝΗΤΟΥ ΝΕΥΡΩΝΑ

Ανθρώπινος νευρώνας εγκεφάλου

Η βασική μονάδα του νευρικού συστήματος είναι το νευρικό κύτταρο ή νευρώνας. Τα νευρικά κύτταρα παράγουν ηλεκτρικά σήματα τα οποία μεταδίδονται από ένα μέρος του κυττάρου σε άλλο[38]. Οι νευρώνες, αν και παρουσιάζουν ποικιλία μεγεθών και σχημάτων, αποτελούνται από τέσσερα μέρη, όπως φαίνεται και στην εικόνα 3.1:

- το σώμα του νευρικού κυττάρου
- τους δενδρίτες
- τον άξονα, και
- τις απολήξεις



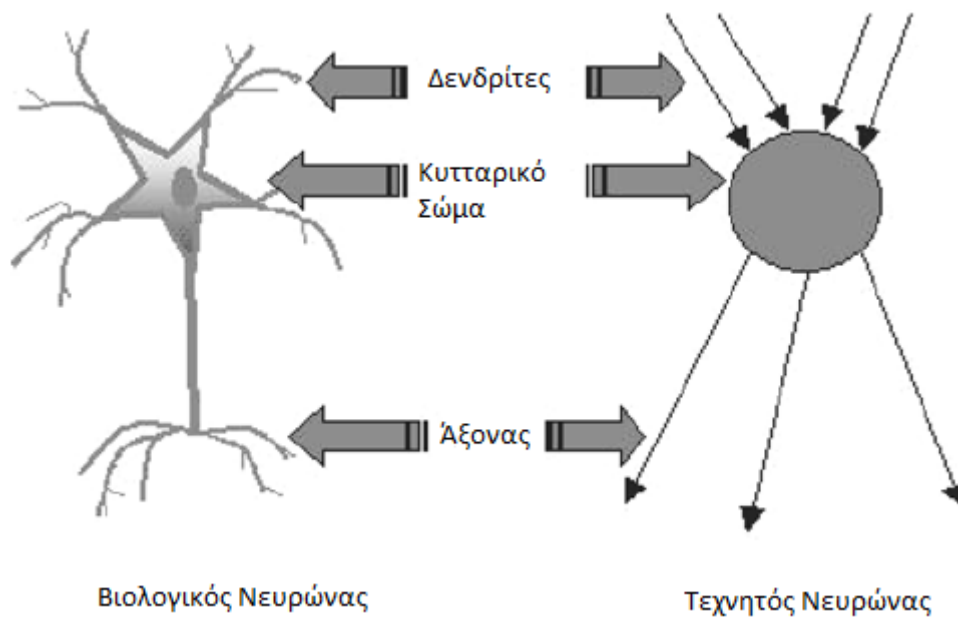
Εικόνα 3.1 Σχηματική αναπαράσταση του νευρώνα

Οι δενδρίτες σχηματίζουν δομές οι οποίες διακλαδίζονται από το κυρίως σώμα του κυττάρου προς τα έξω. Οι περισσότερες συνάψεις, τα σημεία δηλαδή τα οποία λαμβάνουν τα σήματα από άλλους νευρώνες, βρίσκονται στους δενδρίτες και στο κυρίως σώμα του κυττάρου. Ο άξονας είναι μια λεπτή χορδή η οποία παρουσιάζεται ως επέκταση του κυτταρικού σώματος. Μέσω του άξονα τα ηλεκτρικά σήματα μεταδίδονται μακριά από το κυρίως σώμα[38].

Από τους βιολογικούς νευρώνες στους τεχνητούς.

Όπως είπαμε και παραπάνω στόχος είναι η προσομοίωση των βιολογικών νευρώνων. Έτσι λοιπόν η οπτικοποιημένη μορφή ενός τεχνητού νευρώνα έχει την μορφή ενός αληθινού βιολογικού νευρώνα. Ο ανθρώπινος εγκέφαλος συντίθεται από εκατομμύρια νευρώνες. Ενώ η λειτουργία κάθε νευρώνας ξεχωριστά είναι απλή, οι μεταξύ τους συνδέσεις και η παράλληλη λειτουργία τους, είναι αυτή που κάνει τον ανθρώπινο εγκέφαλο υπεύθυνο για τις εξαιρετικές του ικανότητες. Ακόμα και σήμερα δεν έχει αναπτυχθεί ο κατάλληλος αλγόριθμος που να μπορεί να προσομοιώνει την λειτουργία του ανθρώπινου εγκεφάλου[37,39].

Για να γίνει κατανοητή η μορφή τους, η παρακάτω εικόνα 3.2 συγκρίνει έναν βιολογικό με έναν τεχνητό νευρώνα. Πολλοί νευρώνες μαζί, φτιάχνουν το νευρωνικό δίκτυο.



Εικόνα 3.2 Σύγκριση βιολογικού και τεχνητού νευρώνα

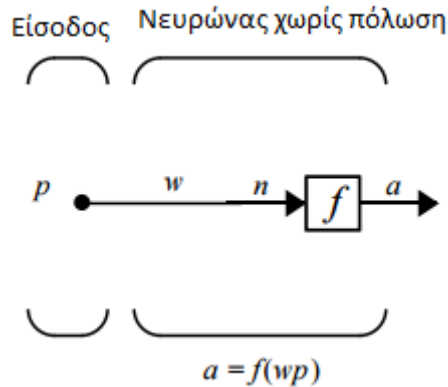
Στο μοντέλο των τεχνητών νευρώνων οι νευρώνες ή κόμβοι, αντιστοιχούν στο σώμα του κυττάρου, οι συνδέσεις μεταξύ των κόμβων στους δενδρίτες και στον άξονα, ενώ τα βάρη αντιστοιχούν στις συνάψεις. Στον παρακάτω πίνακα φαίνεται η αντιστοιχία ορολογιών για τους βιολογικούς και τεχνητούς νευρώνες όπως αναπτύχθηκε στο [38].

Ορολογία βιολογίας	Ορολογία Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων
Νευρώνας (Neuron)	Μονάδα/Κόμβος/Νευρώνας (Unit/Node/Cell/Neuron)
Σύναψη (Synapse)	Σύναψη (Link/Synapse)
Αποτελεσματικότητα Σύναψης (Synaptic Efficiency)	Συναπτικό βάρος (Synaptic Weight)
Συχνότητα Διέγερσης (Firing Frequency)	Έξοδος Κόμβου/Νευρώνα (Node/Neuron Output)

Πίνακας 3.1 Αντιστοιχία ορολογίας μεταξύ βιολογικών και τεχνητών νευρώνων

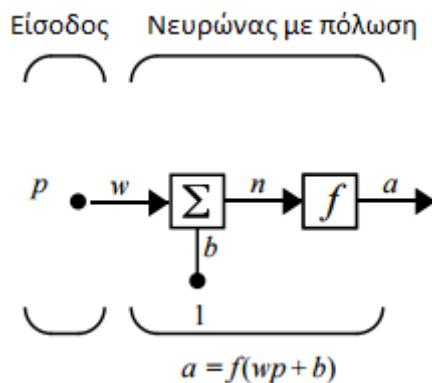
3.3 ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΕΧΝΗΤΟΥ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ

Η μαθηματική περιγραφή του τεχνητού νευρωνικού δικτύου ξεκινάει με την περιγραφή της λειτουργίας ενός νευρώνα. Ένας νευρώνας με ένα διάνυσμα εισόδου και χωρίς πόλωση παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα (3.3):



Εικόνα 3.3 Μοντελοποίηση απλού νευρώνα

Το διάνυσμα εισόδου p μεταφέρεται μέσω μιας σύνδεσης που πολλαπλασιάζει τη δύναμη του με ένα άλλο διάνυσμα, το βάρος w , για να σχηματιστεί το προϊόν $n = wp$, που είναι και αυτό διάνυσμα. Κάθε σύνδεση του νευρώνα με μια είσοδο έχει ένα αντίστοιχο συναπτικό βάρος, όπως θα αναφερθούμε και αργότερα στον τεχνητό νευρώνα με περισσότερες εισόδους Αυτό που έχει σημασία είναι το γινόμενο wp και όχι η τιμή του βάρους w μόνη της ή της εισόδου p . Μετά το σχηματισμό του, το διάνυσμα n εισέρχεται σαν είσοδος στην συνάρτηση ενεργοποίησης (f) που λαμβάνει χώρα μέσα στον νευρώνα, και παράγει την έξοδο a . Στην εικόνα 3.4 παρουσιάζεται ένας νευρώνας με πόλωση (bias), b . Η πόλωση προστίθεται στο διάνυσμα n μέσω αθροιστικής συνάρτησης ή απλά μετατοπίζει την συνάρτηση ενεργοποίησης κατά b δεξιά, δηλαδή $a = f(wp + b)$. Μπορούμε να θεωρήσουμε και την πόλωση σαν ένα βάρος, εκτός του ότι έχει σταθερή τιμή και ίση με 1. Η πόλωση δεν είναι είσοδος και μπορεί να μην χρησιμοποιηθεί αν ο χρήστης δεν το επιθυμεί [40].



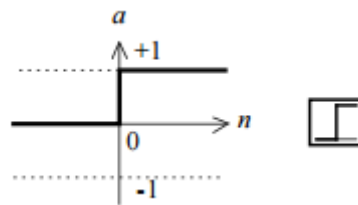
Εικόνα 3.4 Σχηματική απεικόνιση νευρώνα με πόλωση

Συνάρτηση Ενεργοποίησης

Συνάρτηση ενεργοποίησης ή μεταβίβασης (activation/transfer) ονομάζεται η συνάρτηση που συμβαίνει μέσα στο νευρώνα και καθορίζει την κατάσταση του συναρτήσει της πόλωσης του και των βαρών των εισερχόμενων συνδέσμων. Πρόκειται ουσιαστικά για ένα φίλτρο, που διαμορφώνει την τελική τιμή εξόδου. Η συνάρτηση ενεργοποίησης εφαρμόζεται ξεχωριστά σε κάθε είσοδο του νευρώνα. Οι σύνδεσμοι στην καθιερωμένη ορολογία είναι οι συνάψεις και η πόλωση είναι το κατώφλι ενεργοποίησης. Τρεις από τις πιο σημαντικές συναρτήσεις ενεργοποίησης είναι[40]:

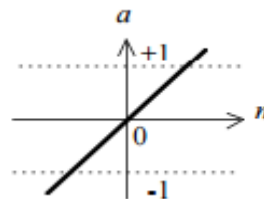
- Η συνάρτηση κατωφλίου. Η συνάρτηση αυτή περιορίζει την έξοδο του νευρώνα να πάρει τιμή είτε μηδέν, αν η είσοδος n είναι μικρότερη του 0, είτε 1 αν η είσοδος n είναι μεγαλύτερη ή ίση με το 0. Η συνάρτηση κατωφλίου δεν είναι διαφορίσιμη[40].

$$f(n) = \begin{cases} 0, & n < 0 \\ 1, & n \geq 0 \end{cases}$$



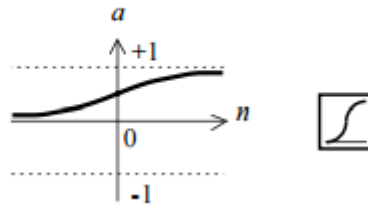
Εικόνα 3.5 Συνάρτηση κατωφλίου

- Η γραμμική συνάρτηση, όπως φαίνεται στην εικόνα (3.6) για την οποία ισχύει $f(n) = \begin{cases} -1, & n < k \\ n, & 0 \leq x \leq k, \text{ όπου } k \text{ το κατώφλι που ορίζει ο χρήστης} \\ 1, & n > k \end{cases}$



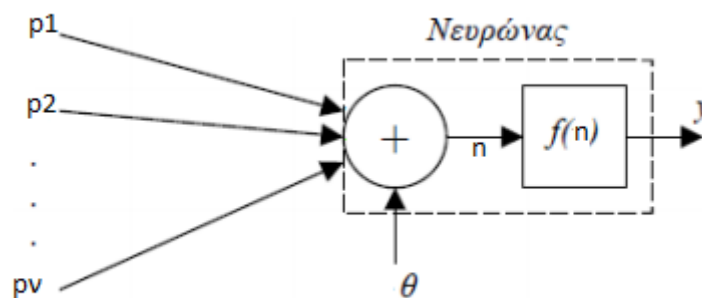
Εικόνα 3.6 Γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης

- Τέλος η σιγμοειδής συνάρτηση. Η συνάρτηση αυτή παίρνει την είσοδο του νευρώνα, η οποία μπορεί να έχει οποιαδήποτε τιμή στο $\pm\infty$, και προσαρμόζει την έξοδο στο διάστημα 0 έως 1. Η σιγμοειδής συνάρτηση είναι διαφορίσιμη συνάρτηση[40]. Η λογιστική σιγμοειδής συνάρτηση είναι $f(n) = \frac{1}{1+e^{-bn}}$ (εικόνα 3.7)



Εικόνα 3.7 Σιγμοειδής συνάρτηση ενεργοποίησης

Γενικεύοντας την μορφή μιας εισόδου-εξόδου στη μορφή πολλών εισόδων-μονής εξόδου έχουμε το λεγόμενο μοντέλο αισθητήρα (Perceptron). Είναι ένα από τα πρώτα μοντέλα και αποτέλεσε βάση για την δημιουργία πιο πολύπλοκων δικτύων. Το δίκτυο αυτό έχει ένα πεπερασμένο αριθμό εισόδων και παράγει μια έξοδο (εικόνα 3.8):



Εικόνα 3.8 Μοντέλο νευρώνα (αισθητήρα) με πολλές εισόδους.

Οι μόνες συνδέσεις που υπάρχουν εδώ, είναι του νευρώνα με τις εισόδους p_1, p_2, \dots, p_n . Κάθε σύνδεση του νευρώνα με το αντίστοιχο σήμα εισόδου p_i έχει και το αντίστοιχο βάρος w_i , το οποίο δείχνει και την επίδραση του εισερχόμενου σήματος στον νευρώνα. Έτσι λοιπόν μετά τον αθροιστή το αποτέλεσμα είναι:

$$n = \sum_{i=1}^n w_i p_i + \theta \quad (3.1)$$

Το αποτέλεσμα n του αθροιστή εισέρχεται τώρα σαν είσοδος στην συνάρτηση ενεργοποίησης και τελικά η έξοδος y του νευρώνα γίνεται :

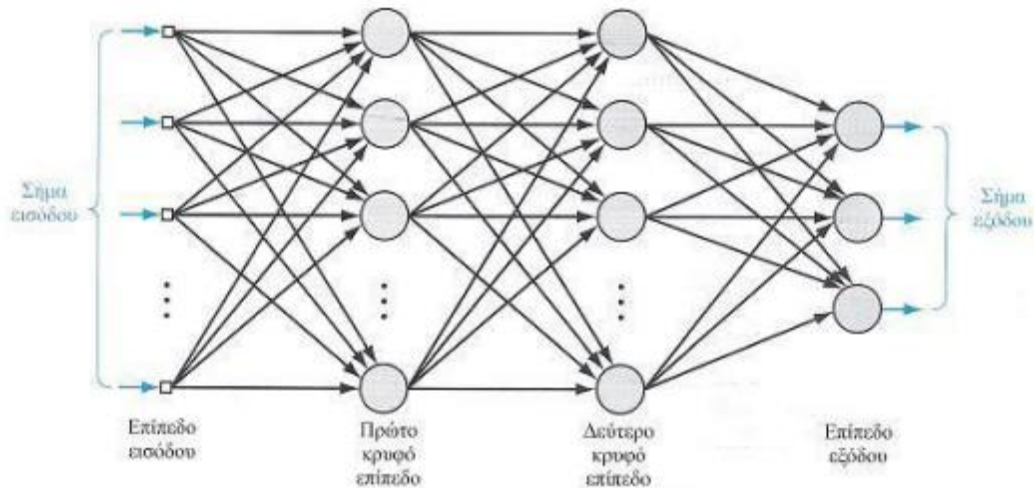
$$y = f(\sum_{i=1}^n w_i p_i + \theta) \quad (3.2)$$

Με n συμβολίζεται η διέγερση του νευρώνα δηλαδή το συνολικό σήμα που αυτός λαμβάνει. Η συνάρτηση ενεργοποίησης απεικονίζει την είσοδο στην έξοδο. Η πόλωση θ είναι ουσιαστικά το κατώφλι ενεργοποίησης, αποτελεί δηλαδή το όριο πάνω από το οποίο ενεργοποιείται ο νευρώνας. Αν λοιπόν $\sum_{i=1}^n w_i p_i > \theta$ και συνάρτηση ενεργοποίησης μία από τις παραπάνω, τότε η έξοδος γίνεται $y=1$, δηλαδή ο αισθητήρας ενεργοποιείται. Αντίστροφα αν $\sum_{i=1}^n w_i p_i < \theta$ τότε ο αισθητήρας δεν ενεργοποιείται και η έξοδος y γίνεται μηδέν[37,39].

Πολυεπίπεδο Δίκτυο Νευρώνα

Αφού έγινε κατανοητή η λειτουργία του απλού νευρώνα, στόχος είναι η παρουσίαση ενός ολοκληρωμένου νευρωνικού δικτύου. Ένα νευρωνικό δίκτυο αποτελείται από το στρώμα της

είσοδου, το στρώμα της εξόδου και τα ενδιάμεσα από την είσοδο και την έξοδο, τα λεγόμενα κρυφά στρώματα. Τα στρώματα είναι πολύ νευρώνες μαζί. Ένα νευρωνικό δίκτυο μπορεί να αποτελείται από ένα μέχρι όσα επιθυμεί ο χρήστης κρυφά στρώματα. Η επιλογή του αριθμού των κρυφών στρωμάτων εξαρτάται από την πολυπλοκότητα του προβλήματος, και από τα συναπτικά βάρη σε συνδυασμό με την είσοδο. Ένα πολυεπίπεδο δίκτυο νευρώνα παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα 3.9 [37,39]:



Εικόνα 3.9 Σχηματική αναπαράσταση πολυεπίπεδου νευρώνα

Στο νευρωνικό δίκτυο λοιπόν, υπάρχει πλήρης σύνδεση νευρώνων με το επίπεδο. Δηλαδή ένας νευρώνας σε κάθε επίπεδο συνδέεται με όλους τους νευρώνες του προηγούμενου επιπέδου. Συγκεκριμένα, όπως φαίνεται στην εικόνα 3.9, έχουμε ένα νευρωνικό δίκτυο με δύο κρυφά επίπεδα, το οποίο δέχεται n -είσοδους, p_1, p_2, \dots, p_n . Το πρώτο επίπεδο αποτελείται από x μη γραμμικούς νευρώνες και θα υποθέσουμε ότι χρησιμοποιούν την σιγμοειδή συνάρτηση ενεργοποίησης. Έτσι η συνολική είσοδος του νευρώνα i είναι το σταθμισμένο άθροισμα (weighted sum) των εξόδων των νευρώνων οι οποίοι είναι συνδεδεμένοι με αυτόν, συν μιας τιμής πόλωσης θ . Η έξοδος ενός νευρώνα i του πρώτου επιπέδου είναι :

$$y_i = f\left(\sum_{j=1}^n w_{ij} p_j + \theta\right) \quad (3.3)$$

Το δεύτερο κρυφό στρώμα αποτελείται επίσης από νευρώνες, κάθε ένας από τους οποίους προσθέτει τις ενεργοποιήσεις του πρώτου επιπέδου χρησιμοποιώντας τώρα άλλα συναπτικά βάρη w_1, w_2, \dots, w_k . Έτσι η έξοδος του δικτύου γίνεται:

$$g(p_1, p_2, \dots, p_n) = \sum_{i=1}^k \omega_i y_i + \theta \quad (3.4)$$

Το βάρος w_{ij} καθορίζει το αποτέλεσμα το οποίο έχει το σήμα του νευρώνα i στον νευρώνα j .

3.4 ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΤΕΧΝΗΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Η εκπαίδευση ενός δικτύου πολλών επιπέδων είναι η διαδικασία ρύθμισης των συναπτικών βαρών του έτσι ώστε να ικανοποιείται κάποιο κριτήριο βελτιστοποίησης. Το νευρωνικό δίκτυο πρέπει να διαμορφωθεί έτσι ώστε η εφαρμογή μιας εισόδου να παράγει την

επιθυμητή έξοδο. Ουσιαστικά η εκπαίδευση είναι μια επαναληπτική διαδικασία, σταδιακής προσαρμογής των παραμέτρων του δικτύου (συνήθως των βαρών και της πόλωσης του) σε τιμές κατάλληλες ώστε να επιλύεται με επαρκή επιτυχία το προς εξέταση πρόβλημα. Επιδιώκεται η ελαχιστοποίηση της διαφοράς μεταξύ της εξόδου του δικτύου και της πραγματικής εξόδου. Το νευρωνικό δίκτυο μπορεί να εκπαιδευτεί με κάποιες μεθόδους εκπαίδευσης οι οποίες χωρίζονται σε δύο κατηγορίες [37,39,40] :

- **Αλγόριθμοι Εκπαίδευσης με Επίβλεψη (supervised learning)**

Η επιβλεπόμενη εκπαίδευση είναι εκείνη κατά την οποία το Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο εκπαιδεύεται με συγκεκριμένες εισόδους και αντίστοιχες εξόδους οι οποίες ταιριάζουν με τις εισόδους. Αυτά τα ζεύγη εισόδων-εξόδων δίνονται από τον άνθρωπο ή από το σύστημα το οποίο περιέχει το Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο (αυτοεπιβλεπόμενο δίκτυο). Οι παράμετροι του δικτύου ανανεώνονται με βάση το διάνυσμα εκπαίδευσης όσο και το σήμα σφάλματος (δηλαδή της διαφοράς μεταξύ πραγματικής απόκρισης $y(t)$ και της επιθυμητής απόκρισης $y_d(t)$ του δικτύου)[37,39,40].

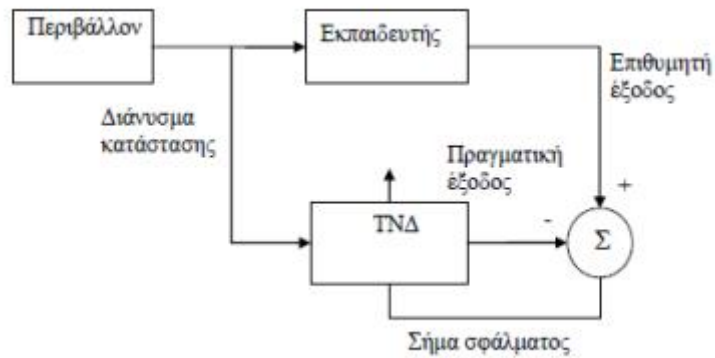
Μία συνάρτηση κόστους μας επιτρέπει να εκφράσουμε ακριβώς με τι λάθος ή αλλιώς με τι κόστος το μοντέλο που κατασκευάσαμε δίνει το αποτέλεσμα. Όπως φαίνεται και στην εικόνα 3.10 η επιβλεπόμενη εκπαίδευση είναι ένα σύστημα ανάδρασης κλειστού βρόχου και το περιβάλλον είναι εκτός του βρόχου αυτού. Εν τέλει μια συνάρτηση κόστους είναι το μέτρο απόδοσης για το σύστημα[43,44].

Ένας τρόπος να υπολογίσουμε το συνολικό κόστος είναι να πάρουμε την τιμή κάθε σφάλματος $e = (y(t) - y_d(t))$ να την τετραγωνίσουμε $e^2 = (y(t) - y_d(t))^2$ και να προσθέσουμε όλες τις τιμές αυτές. Πολλαπλασιάζοντας με το $\frac{1}{2}$ κάνουμε τους υπολογισμούς, λίγο πιο εύκολους και τελικά η συνάρτηση κόστους προκύπτει από το άθροισμα των τετραγώνων και είναι η παρακάτω:

$$J(w) = \sum \frac{1}{2} [(y(t) - y_d(t))^2] \quad (3.5)$$

Όπου w είναι ο πίνακας των βαρών του νευρωνικού δικτύου, γιατί η συνάρτηση κόστους είναι δύο σύνολα, τα παραδείγματα μας και τα βάρη των συνάψεων. Όταν λέμε, λοιπόν, ότι εκπαιδεύουμε το νευρωνικό δίκτυο, αυτό που ουσιαστικά συμβαίνει είναι η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης κόστους[43]. Αφού δεν έχουμε έλεγχο στα δεδομένα μας, καθώς οι τιμές τους είναι καθορισμένες, θα ελαχιστοποιήσουμε την συνάρτηση κόστους αλλάζοντας και προσαρμόζοντας τα βάρη.

Η ανανέωση και προσαρμογή των βαρών ονομάζεται διόρθωση σφάλματος και υλοποιείται με δύο αλγόριθμους (τον αλγόριθμο ελάχιστου μέσου τετραγώνου και τον αλγόριθμο οπισθοδιάδοσης), που θα αναλυθούν σε επόμενη ενότητα[37,40,43,44].



Εικόνα 3.10 Σχηματικό διάγραμμα επιβλεπόμενης μάθησης.

- **Αλγόριθμοι Εκπαίδευσης Χωρίς Επίβλεψη (unsupervised learning)**

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα που χρησιμοποιούν αυτή τη μέθοδο εκπαίδευσης τροφοδοτούνται μόνο με εισόδους και η έξοδος προκύπτει μέσω ομαδοποίησης κοινών χαρακτηριστικών των δεδομένων[39]. Σε αυτό το παράδειγμα το σύστημα ανακαλύπτει στατιστικά αξιοπρόσεκτα χαρακτηριστικά των προτύπων εισόδου. Εδώ το σύστημα πρέπει να κατασκευάσει μόνο του το μοντέλο που θα απεικονίσει τα ερεθίσματα εισόδου στην έξοδο. Δίνεται απλώς η πληροφορία στο δίκτυο και δεν υπάρχει κάποιος εξωτερικός εκπαιδευτής που να δίνει την επιθυμητή απόκριση και να επιβλέπει τη διαδικασία μάθησης. Έτσι το δίκτυο ελέγχει τον εαυτό του και διορθώνει τα σφάλματα στα δεδομένα με ένα μηχανισμό ανάδρασης όπως περιγράφεται και στην εικόνα 3.11 [37,40].



Εικόνα 3.11 Σχηματικό διάγραμμα μη επιβλεπόμενης μάθησης.

Κανόνες εκπαίδευσης Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

Όλοι οι αλγόριθμοι εκπαίδευσης βασίζονται σε κάποιους κανόνες μάθησης, εκ των οποίων άλλοι έχουν σαν πρότυπο τους το μοντέλο της βιολογικής μάθησης και άλλοι αποτελούν υλοποίηση μαθηματικών μοντέλων. Πάντως, ο μηχανισμός της μάθησης είναι σίγουρα πιο πολύπλοκος από τις απλοποιήσεις που εμπεριέχουν οι κανόνες που έχουν αναπτυχθεί.

Οι κυριότερες τεχνικές μάθησης παρουσιάζονται παρακάτω:

- **Κανόνας Hebb**

Ο κανόνας αυτός παρουσιάστηκε από τον Hebb το 1949. Η βασική του ιδέα είναι ότι αν μια επεξεργαστική μονάδα δέχεται είσοδο από μια άλλη και εάν και οι δύο έχουν την ίδια μορφή ενεργοποίησης, ο συντελεστής βάρους αυξάνεται[43].

- **Κανόνας Δέλτα**

Είναι αλλιώς γνωστός ως Windrow-Hoff κανόνας μάθησης και βασίζεται στην ιδέα της συνεχούς μεταβολής των συντελεστών του βάρους, έτσι ώστε να ελαχιστοποιείται η διαφορά μεταξύ των επιθυμητών και των εκάστοτε εξόδων του δικτύου.

- **Κανόνας επικλινούς καθόδου (Gradient Descent)**

Είναι μια μαθηματική προσέγγιση του προβλήματος ελαχιστοποίησης του σφάλματος μεταξύ των επιθυμητών και των πραγματικών εξόδων. Η ποσοτική αναπροσαρμογή των συντελεστών βάρους είναι ανάλογη της πρώτης παραγώγου του σφάλματος. Ο κανόνας αυτός χρησιμοποιείται συχνά και θα χρησιμοποιηθεί και σε αυτή τη διπλωματική. Αυτός ο κανόνας είναι μια γενίκευση του κανόνα δέλτα.

- **Ανάστροφη Διάδοση Σφάλματος (Back Propagation)**

Η τεχνική αυτή βασίζεται στη διάδοση του σφάλματος προς τα πίσω και είναι μια γενίκευση του κανόνα δέλτα. Μαζί με τον κανόνα επικλινούς καθόδου είναι η πιο συχνά χρησιμοποιούμενη τεχνική. Η διαδικασία αποτελείται από δύο φάσεις: τη φάση ανάκλησης και τη φάση μάθησης.

Γενικά, η μέθοδος αυτή εφαρμόζεται σε ιεραρχικά δίκτυα, όπου έχουμε κρυμμένα στρώματα μονάδων επεξεργασίας. Επίσης τον βρίσκουμε και σαν αλγόριθμο οπισθοδιάδοσης σφάλματος, αφού το σφάλμα ταξιδεύει από την έξοδο προς τα πίσω ώστε να αναπροσαρμοστεί.

Γενικά υπάρχουν πολλές μέθοδοι με τις οποίες μπορούμε να εκπαιδεύσουμε ένα νευρωνικό δίκτυο. Η κάθε μία από αυτές έχει σαφή πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα. Αυτή που χρησιμοποιείται συνηθέστερα σε πολυεπίπεδα νευρωνικά δίκτυα είναι ο αλγόριθμος gradient descent σε συνδυασμό με τον αλγόριθμο ανάστροφης διάδοσης σφάλματος, όπως συμβαίνει και στη συγκεκριμένη εργασία. Επιλέγουμε την κατάλληλη μέθοδο ανάλογα με την φύση του εκάστοτε προβλήματος και τη δομή του δικτύου που διαλέξαμε να μελετήσουμε.

Ο Αλγόριθμος Gradient Descent

Στη θεωρία που αναπτύσσουμε επιθυμούμε να διαλέξουμε τα συναπτικά βάρη w έτσι ώστε να ελαχιστοποιήσουμε το σφάλμα που παράγεται από τη συνάρτηση κόστους $J(w)$. Για να πραγματοποιηθεί αυτό, θα χρησιμοποιήσουμε έναν αλγόριθμο ανίχνευσης της κλίσης, μέσω της μερικής παραγώγου του σφάλματος ως προς τα συναπτικά βάρη, ώστε να εντοπίσουμε τι τάξης είναι το σφάλμα. Ο αλγόριθμος αυτός όπως παρουσιάστηκε συνοπτικά παραπάνω είναι ο αλγόριθμος επικλινούς καθόδου ή καθοδικής κλίσης ή gradient descent. Από εδώ και στο εξής θα αναφερόμαστε σε αυτόν ως gradient descent. Κατά την εκκίνηση του τα

συναπτικά βάρη έχουν τυχαίες τιμές και επανειλημμένα ανανεώνονται ακολουθώντας τον παρακάτω κανόνα ανανέωσης[54]:

$$w_j = w_j - a \frac{\partial J(w)}{\partial w_j} \quad (3.6)$$

Η εξίσωση λοιπόν σημαίνει ότι η νέα τιμή του βάρους αριστερά, ισούται, με την διαφορά της προηγούμενης τιμής του με το γινόμενο του βαθμού μάθησης a και της μερικής παραγώγου της συνάρτησης κόστους, ως προς την παλιά τιμή όμως του συναπτικού βάρους. Για να γίνει πιο κατανοητή η διαδικασία ας θεωρήσουμε ότι έχουμε μόνο ένα δείγμα εκπαίδευσης και συνεπώς μόνο ένα ζεύγος εισόδου-εξόδου, δηλαδή $(x^{(i)}, y^{(i)})$, έτσι ώστε να μην επηρεαζόμαστε από το άθροισμα για όλα τα j δείγματα. Με την υπόθεση αυτή ισχύει:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J(w)}{\partial w_j} &= \frac{\partial \frac{1}{2} [(y(t) - y_d(t))^2]}{\partial w_j} = 2 \frac{1}{2} (y(t) - y_d(t)) \frac{\partial [(y(t) - y_d(t))]}{\partial w_j} \\ &= (y(t) - y_d(t)) \frac{\partial \sum_{i=0}^v w_i x_i - y_d(t)}{\partial w_j} = (y(t) - y_d(t)) x_j \quad (3.7) \end{aligned}$$

Στην περίπτωση του ενός αυτού δείγματος, ο παραπάνω τύπος εξάγει τον εξής κανόνα ανανέωσης συναπτικών βαρών:

$$w_j = w_j - a (y(t) - y_d(t)) x_j$$

Εάν η πρόβλεψη παράγει μεγάλο σφάλμα, η αλλαγή στο εκάστοτε συναπτικό βάρος θα είναι μεγάλη, αντίστοιχα εάν το σφάλμα είναι μικρό τότε η αλλαγή στο συναπτικό βάρος θα είναι μικρή.

Ο Αλγόριθμος Ανάστροφης Διάδοσης ή Οπισθοδιάδοσης Σφάλματος (Back Propagation)

Ένας από τους πιο συνήθεις αλγόριθμους εκπαίδευσης, που χρησιμοποιείται από τα περισσότερα νευρωνικά δίκτυα είναι ο αλγόριθμος ανάστροφης διάδοσης. Η ανάπτυξη του αποτελεί ορόσημο στην εξέλιξη των νευρωνικών δικτύων, διότι παρέχει μια υπολογιστικά αποτελεσματική μέθοδο εκπαίδευσης πολυστρωματικών νευρώνων.

Έστω ότι έχουμε ένα πολυεπίπεδο νευρωνικό με ένα ή περισσότερα κρυφά επίπεδα, m τιμές εισόδου και m_0 νευρώνες στο επίπεδο εξόδου του, και ότι οι νευρώνες αυτοί λειτουργούν με κάποια παραγωγίσιμη συνάρτηση ενεργοποίησης, όπως είναι η σιγμοειδής και η γραμμική. Έστω επίσης, ότι για να εκπαιδεύσουμε το δίκτυο αυτό έχουμε στη διάθεση μας ένα σύνολο N γνωστών δεδομένων εισόδου-εξόδου δηλαδή ένα σύνολο[48]:

$$\{ \mathbf{x}(i), \mathbf{d}(i) \text{ με } i = 1, 2, \dots, N \}, \quad (3.8)$$

όπου $\mathbf{x}(i) = [x_1(i), x_2(i), \dots, x_m(i)]^T$, το διάνυσμα των τιμών εισόδου και $\mathbf{d}(i)$ το διάνυσμα των επιθυμητών εξόδων αντίστοιχα.

Στόχος είναι να βρούμε έναν κατάλληλο αλγόριθμο για να εκπαιδεύσουμε το δίκτυο αυτό, σύμφωνα με το σύνολο των δεδομένων. Σε κάθε βήμα της εκπαίδευσης, οι τιμές των συναπτικών βαρών μεταβάλλονται και η διαδικασία τερματίζεται όταν η συνάρτηση κόστους

συγκλίνει σε ένα ελάχιστο. Τότε θεωρούμε ότι το δίκτυο έχει μάθει τα παραδείγματα σε ικανοποιητικό βαθμό.

Το σφάλμα στην έξοδο του j-οστού νευρώνα, του επιπέδου εξόδου, κατά το n-οστό βήμα της επανάληψης του αλγόριθμου εκπαίδευσης δίνεται από τη σχέση:

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n) \quad (3.9)$$

Η στιγμιαία τιμή της συνάρτησης κόστους για όλο το σύνολο των N δεδομένων, προκύπτει από τη σχέση:

$$J(n) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^v e_j(n)^2 \quad (3.10)$$

Η μέση τιμή της συνάρτησης κόστους για όλο το σύνολο των N δεδομένων, προκύπτει:

$$J(n)_{\mu\epsilon\sigma\eta} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^n J(n) \quad (3.11)$$

Και είναι το μέτρο του πόσο καλά έχει εκπαιδευτεί το δίκτυο.

Η βασική λοιπόν ιδέα του αλγόριθμου ανάστροφης διάδοσης είναι να προσαρμόζονται τα συναπτικά βάρη, σε κάθε βήμα επανάληψης, έτσι ώστε η συνάρτηση κόστους να μειώνεται. Με άλλα λόγια ξεκινάμε από μία αρχική εκτίμηση των συναπτικών βαρών $w_{ji}(0)$, εφαρμόζοντας μία διόρθωση παίρνουμε ένα νέο σετ συναπτικών βαρών $w_{ji}(1)$, εφαρμόζοντας ξανά μια δεύτερη διόρθωση παίρνουμε ένα δεύτερο σετ $w_{ji}(2)$ κ.ο.κ, έτσι ώστε σε κάθε επανάληψη να ισχύει :

$$J(\mathbf{w}(n+1)) \leq J(\mathbf{w}(n)) \quad (3.12)$$

Όπου $\mathbf{w}(n)$ ο πίνακας των βαρών στο βήμα n και $\mathbf{w}(n+1)$ ο διορθωμένος πίνακας στο βήμα n+1.

Σύμφωνα με τον αλγόριθμο ανάστροφης διάδοσης, για να το πετύχουμε αυτό, θεωρούμε ότι, η μεταβολή στον πίνακα $\mathbf{w}(n)$ γίνεται στην κατεύθυνση της πλέον απότομης κατάβασης (steepest descent), δηλαδή στην κατεύθυνση την αντίθετη προς αυτή του διανύσματος της κλίσης της $J(\mathbf{w}(n))$. Η διόρθωση επομένως στο βάρος $w_{ji}(n)$, που συνδέει το νευρώνα j του επιπέδου εξόδου του δικτύου, με το νευρώνα i, του τελευταίου κρυφού επιπέδου κατά το βήμα n, δίνεται από την σχέση:

$$\Delta w_{ji}(n) = -\alpha \frac{\partial J(\mathbf{w}(n))}{\partial w_{ji}(n)} \quad (3.13)$$

Όπου η είναι θετική σταθερά που ονομάσαμε παράμετρο ρυθμού εκπαίδευσης και παίρνει τιμές από $0 < \alpha < 1$. Η σχέση αυτή ονομάζεται κανόνας δέλτα. Η μεταβολή δηλαδή, γίνεται

κατά την κατεύθυνση της κλίσης, ενώ το μείον το βάζουμε για να έχουμε μείωση της $J(n)$. Αρκεί, λοιπόν, να βρούμε με τι ισούται η παράγωγος $\frac{\partial J(n)}{\partial w_{ji}(n)}$.

Σύμφωνα με τον κανόνα αλυσίδας του διαφορικού λογισμού, η παράγωγος αυτή γράφεται:

$$\frac{\partial J(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial J(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial u_j(n)} \frac{\partial u_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} \quad (3.14)$$

Όπου $\partial e_j(n)$ είναι το σφάλμα στην έξοδο του νευρώνα j , $y_j(n)$ η έξοδος του νευρώνα j , και $u_j(n)$ το τοπικό πεδίο του νευρώνα, όλα υπολογισμένα κατά το n -οστό βήμα του αλγορίθμου.

Αλλά, παραγωγίζοντας την $J(n)_{\mu\epsilon\sigma\eta} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N J(n)$ παίρνουμε:

$$\frac{\partial J(n)}{\partial e_j(n)} = e_j(n) \quad (3.15)$$

Επίσης έχουμε:

$$\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} = -1 \quad (3.16)$$

Επιπλέον το τοπικό πεδίο $u_j(n)$ του νευρώνα j , κατά το βήμα n , δίνεται από την σχέση:

$$u_j = \sum_{i=0}^k w_{ji}(n) y_i(n) \quad (3.17)$$

Όπου k το πλήθος των νευρώνων στο προτελευταίο επίπεδο του δικτύου, δηλαδή του τελευταίου κρυφού επιπέδου, ενώ η έξοδος $y_j(n)$ κατά το βήμα n , δίνεται από την σχέση:

$$y_j(n) = f(u_j(n)) \quad (3.18)$$

Από τις σχέσεις 3.17 και 3.18, παίρνουμε αντίστοιχα τις

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial u_j(n)} = f'(u_j(n)) \quad (3.19)$$

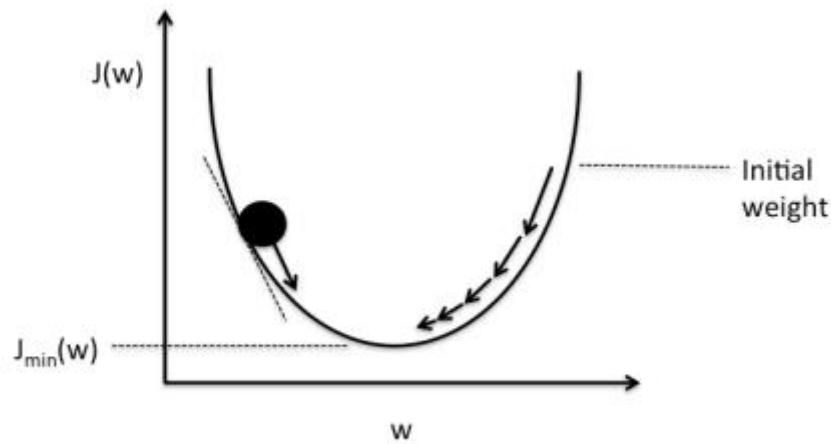
Και

$$\frac{\partial u_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} = y_i(n) \quad (3.20)$$

Όπου $y_i(n)$ η έξοδος του νευρώνα i του τελευταίου κρυφού επιπέδου.

Όπως παρατηρούμε από την σχέση 3.19, είναι απαραίτητη η γνώση της παραγώγου της συνάρτησης ενεργοποίησης. Αυτός λοιπόν είναι ένας από τους λόγους που χρησιμοποιούμε παραγωγίσιμη συνάρτηση ενεργοποίησης, αντί της βηματικής. Η διαδικασία εύρεσης των παραγώγων δηλαδή του καθολικού ελαχίστου της συνάρτησης κόστους είναι gradient

descent, στην οποία αναφερθήκαμε σε προηγούμενη ενότητα και η σχηματική της απεικόνιση δίνεται στην εικόνα 3.12[52].



Εικόνα 3.12 Σχηματική αναπαράσταση του αλγορίθμου gradient descent

Βάση των σχέσεων 3.15, 3.16, 3.19 και 3.20 επομένως η σχέση (3.21) γράφεται:

$$\Delta w_{ji}(n) = a \delta_j(n) y_i(n) \quad (3.21)$$

Όπου

$$\delta_j(n) = \frac{\partial J(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial u_j(n)} \quad (3.22)$$

ή

$$\delta_j(n) = \frac{\partial J(n)}{\partial u_j(n)}$$

ή

$$\delta_j(n) = e_j(n) f' u_j(n)$$

η λεγόμενη τοπική βαθμίδα σύγκλισης.

Από την τελευταία σχέση, βλέπουμε ότι, για να υπολογίσουμε τη τοπική βαθμίδα κλίσης και στη συνέχεια τη μεταβολή στο συναπτικό βάρος, πρέπει να ξέρουμε το σφάλμα στην έξοδο του νευρώνα, $e_j(n)$. Όταν ο υπό εξέταση νευρώνας είναι νευρώνας του επιπέδου εξόδου του δικτύου, τότε ο υπολογισμός του σφάλματος γίνεται εύκολα, βάσει της σχέσης 3.9. Στην περίπτωση όμως που ο νευρώνας ανήκει σε κάποιο κρυφό επίπεδο, τότε το σφάλμα δεν μπορεί να υπολογιστεί απευθείας, καθώς δεν ξέρουμε ποιο θα ήταν το επιθυμητό αποτέλεσμα για έναν τέτοιο νευρώνα. Άρα όταν ο υπό εξέταση νευρώνας ανήκει σε κρυφό επίπεδο, η σχέση 3.22 που δίνει την τοπική βαθμίδα $\delta_j(n)$, πρέπει να τροποποιηθεί.

Συγκεκριμένα, επειδή το σφάλμα στην περίπτωση αυτή δεν μπορεί να υπολογιστεί απευθείας, αναγκαστικά θα υπολογιστεί έμμεσα, βάσει των σφαλμάτων του αμέσως επόμενου επιπέδου [48,49,50].

Έτσι λοιπόν, θεωρώντας την περίπτωση που ο νευρώνας ανήκει στο τελευταίο κρυφό επίπεδο, δηλαδή το προτελευταίο επίπεδο του δικτύου, η σχέση 3.22 τροποποιείται και γίνεται

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial J(n)}{\partial u_j(n)} \quad (3.23)$$

ή

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial J(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial u_j(n)}$$

ή

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial J(n)}{\partial y_j(n)} f'(u_j(n))$$

Αρκεί τώρα να υπολογίσουμε την $\frac{\partial J(n)}{\partial y_j(n)}$.

Γνωρίζουμε από προηγούμενη ανάλυση ότι $J(n) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m_o} e_k(n)^2$, όπου $e_k(n)^2$ το σφάλμα του k-οστού νευρώνα του επιπέδου εξόδου του δικτύου. Επομένως, παραγωγίζοντας την σχέση (32) ως προς $y_j(n)$, έχουμε:

$$\frac{\partial J(n)}{\partial y_j(n)} = \sum e_k(n) \frac{\partial e_k(n)}{\partial y_j(n)} \quad (3.24)$$

ή

$$\frac{\partial J(n)}{\partial y_j(n)} = \sum e_k(n) \frac{\partial e_k(n)}{\partial u_k(n)} \frac{\partial u_k(n)}{\partial y_j(n)}$$

Και

$$u_k = \sum_{j=0}^{m_h} w_{kj}(n) y_j(n)$$

Όπου m_h είναι ο αριθμός των εισόδων που δέχεται ο νευρώνας k, δηλαδή ο αριθμός των νευρώνων του τελευταίου κρυφού επιπέδου. Η άθροιση αρχίζει από το μηδέν, για να υπολογιστεί και η πόλωση που εφαρμόζεται στον νευρώνα.

Από την τελευταία σχέση, με παραγωγή ως προς $y_j(n)$, παίρνουμε τη :

$$\frac{\partial u_k(n)}{\partial y_j(n)} = w_{kj}(n) \quad (3.25)$$

Αντικαθιστώντας τις 3.25 και 3.24 στη , βρίσκουμε ότι η ζητούμενη παράγωγος δίνεται από τη σχέση :

$$\frac{\partial J(n)}{\partial y_j(n)} = \sum \delta_k(n) w_{kj}(n) \quad (3.26)$$

Όπου χρησιμοποιήσαμε την σχέση που δίνει τη τοπική βαθμίδα $\delta_k(n)$, όταν ο νευρώνας k ανήκει στο επίπεδο εξόδου. Τέλος, αντικαθιστώντας τη σχέση 3.26 στη σχέση 3.23, προκύπτει η σχέση για τη τοπική βαθμίδα $\delta_j(n)$ στην περίπτωση που ο νευρώνας βρίσκεται σε κρυφό επίπεδο :

$$\delta_j(n) = f'(u_j(n)) \sum \delta_k(n) w_{kj}(n) \quad (3.27)$$

Ανακεφαλαιώνοντας, η διόρθωση στο συναπτικό βάρος $w_{kj}(n)$, που συνδέει το νευρώνα j με το νευρώνα i , δίνεται από την σχέση:

$$\Delta w_{ji}(n) = a \delta_j(n) y_i(n) \quad (3.28)$$

Στη συνέχεια διακρίνουμε δύο περιπτώσεις για την τοπική βαθμίδα $\delta_j(n)$:

1. Όταν ο νευρώνας j ανήκει στο επίπεδο εξόδου του δικτύου, τότε :

$$\delta_j(n) = e_j(n) f'(u_j(n))$$

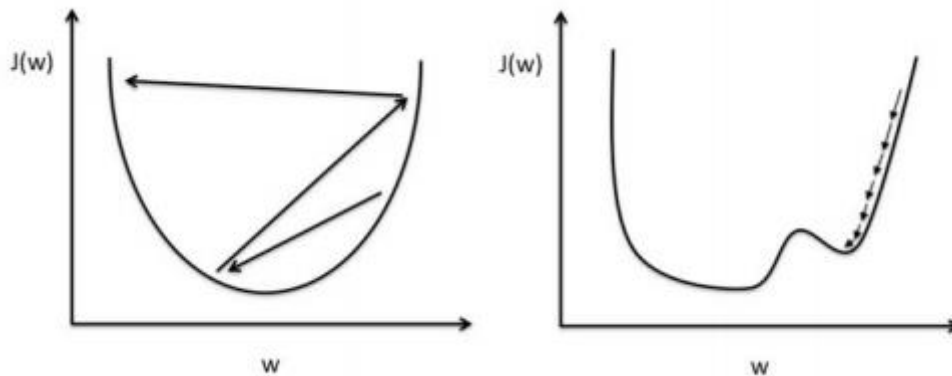
2. Όταν ο νευρώνας ανήκει σε κρυφό επίπεδο του δικτύου τότε:

$$\delta_j(n) = f'(u_j(n)) \sum \delta_k(n) w_{kj}(n)$$

Όπου ο δείκτης k συμβολίζει τους νευρώνες του αμέσως επόμενου επιπέδου.

Όπως είδαμε παραπάνω, ο αλγόριθμος ανάδρομης διάδοσης οδηγεί σε μια τροχιά στον χώρο των βαρών, η οποία αποτελεί μια προσέγγιση αυτής που θα ακολουθούσαμε, αν ελαχιστοποιούσαμε την μέση τιμή της συνάρτησης κόστους J . Η μορφή της τροχιάς αυτής εξαρτάται από την παράμετρο εκπαίδευσης α όπως φαίνεται και στην εικόνα 3.13. Όσο μικρότερη είναι η α , τόσο πιο ομαλή τροχιά ακολουθούμε. Όμως, η σταθερά α επηρεάζει και την ταχύτητα σύγκλισης του αλγόριθμου ανάδρασης σφάλματος. Όταν αυτή είναι μικρή ο αλγόριθμος συγκλίνει με αργούς ρυθμούς. Ωστόσο πολύ μικρός ρυθμός εκμάθησης έχει σαν αποτέλεσμα τη σύγκλιση και τον εγκλωβισμό σε κάποιο τοπικό ελάχιστο με αποτέλεσμα να χάσουμε το ολικό ελάχιστο, που είναι και το ζητούμενο. Αν είναι όμως αυξήσουμε την παράμετρο ρυθμού εκπαίδευσης, ώστε να έχουμε πιθανότατα ταχύτερη σύγκλιση, τότε οι

διορθώσεις σε κάθε βήμα μπορεί να γίνουν μεγάλες και να οδηγήσουν σε αστάθεια και αστοχία εύρεσης ελαχίστου. Για το λόγο αυτό η παράμετρος ρυθμίζεται κατόπιν δοκιμών μέχρις ότου επιτευχθεί ο στόχος.



Εικόνα 3.13 Αριστερά: μεγάλο *learning rate*, Δεξιά: μικρό *learning rate*, πολλές επαναλήψεις

Ικανότητα Γενίκευσης

Αφού εκπαιδευτεί ένα νευρωνικό δίκτυο, επόμενο βήμα είναι να ελέγξουμε αν γενικεύει σωστά. Γενίκευση ονομάζεται η ικανότητα του τεχνητού νευρωνικού δικτύου να εκτιμά τις κατάλληλες εξόδους, μέσω των προτύπων που παρουσιάζονται στην είσοδο, ακόμα και σε δεδομένα τα οποία δεν έχουν χρησιμοποιηθεί κατά την εκπαίδευση[44]. Η ικανότητα γενίκευσης, αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα χαρακτηριστικά του τεχνητού νευρωνικού δικτύου, καθώς στα περισσότερα προβλήματα που καλούμαστε να αντιμετωπίσουμε, δεν μπορούμε να γνωρίσουμε τις καταστάσεις στις οποίες μπορεί να επέλθει το δίκτυο. Ισχύει ότι όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των προτύπων εισόδου, δηλαδή όσο περισσότερα δεδομένα δώσουμε στο δίκτυο μας τόσο καλύτερη γίνεται η εκπαίδευση του δικτύου. Παρόλα αυτά πρέπει να προσδιοριστεί ο βέλτιστος αριθμός διανυσμάτων εκπαίδευσης, ώστε τα αποτελέσματα της γενίκευσης να είναι τα επιθυμητά. Αντίθετα, αν τα διανύσματα εκπαίδευσης είναι λίγα, τότε δεν μπορούμε να κατασταλάξουμε στη βέλτιστη λύση και η ικανότητα αναγνώρισης θα μειωθεί. Η ικανότητα γενίκευσης είναι προϊόν σωστής εκπαίδευσης [51].

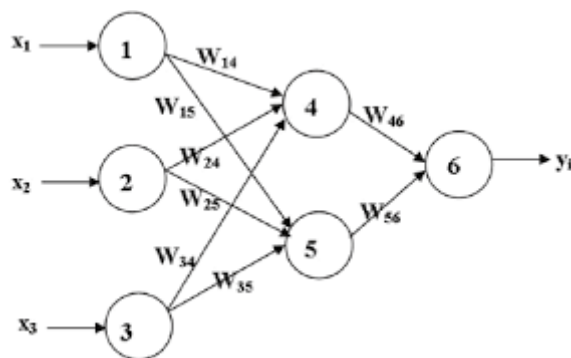
3.5 ΤΟΠΟΛΟΓΙΕΣ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

3.5.1 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Εμπρόσθιας Προώθησης με Ανάδραση (Feed Forward Back Propagation neural networks ή FFBP)

Μία ευρέως χρησιμοποιούμενη κατηγορία Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων είναι τα Νευρωνικά Δίκτυα Προώθησης με Ανάδραση (feed-forward Backpropagation Neural Networks - FFBP). Τα δίκτυα αυτά εκπαιδεύονται βάσει του αλγορίθμου της ανάδρασης ή οπισθοδιάδοσης σφάλματος που περιγράψαμε σε προηγούμενη ενότητα . Ο αλγόριθμος αυτός λειτουργεί σύμφωνα με τον κανόνα διόρθωσης σφάλματος. Η διαδικασία της εκπαίδευσης συνίσταται από δύο «περάσματα» σε όλα τα επίπεδα (layers) του δικτύου που καλούνται ευθύ και ανάδρομο πέρασμα , τα οποία αναλύονται λεπτομερώς παρακάτω με παράδειγμα[50,51,52].

Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Εμπρόσθιας Προώθησης

Αρχικά πρέπει να κατανοήσουμε την έννοια της εμπρόσθιας τροφοδότησης (feed forward). Τα δίκτυα αυτά αποτελούν την πρωταρχική μορφή των FFBP δικτύων. Περιέχουν ένα επίπεδο εισόδου αποτελούμενο από πηγαίους κόμβους, το οποίο με τη σειρά του περνάει την πληροφορία στο επόμενο επίπεδο νευρώνων και όχι αντίστροφα. Το σήμα ρέει, δηλαδή, μόνο από το επίπεδο εισόδου προ το επίπεδο εξόδου, χωρίς να υπάρχουν περιορισμοί στους αριθμούς των νευρώνων, των συνάψεων και των επιμέρους συναρτήσεων ενεργοποίησης. Το επίπεδο εισόδου δεν προσμετράται, καθώς δεν συμμετέχει σε κάποιον υπολογισμό, απλά τροφοδοτεί το νευρωνικό δίκτυο με την πληροφορία. Ένα απλό πολυεπίπεδο δίκτυο προώθησης φαίνεται στην εικόνα 3.14. Το δίκτυο αυτό έχει τρεις εισόδους, ένα κρυμμένο στρώμα δύο νευρώνες και μία έξοδο. Είσοδος κάθε νευρώνα είναι το σήμα του προηγούμενου επιπέδου. Συνεπώς για το σχήμα ισχύουν οι παρακάτω τύποι που επιλύουν την διαδικασία[55,56].



Εικόνα 3.14 Σχηματική αναπαράσταση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου εμπρόσθιας τροφοδότησης

Αρχικά το σήμα εισόδου x_1 πολλαπλασιάζεται με το βάρος w_{14} και μία είσοδος του νευρώνα 4 είναι $x_1 w_{14}$. Αυτό γίνεται για όλες τις συνάψεις που καταλήγουν σαν είσοδοι στους νευρώνες του κρυφού επιπέδου.

Οπότε για την έξοδο του νευρώνα 4 έχουμε:

- $N_4 = f_4(x_1 w_{14} + x_2 w_{24} + x_3 w_{34})$, όπου f_4 είναι η συνάρτηση ενεργοποίησης για τον νευρώνα 4.

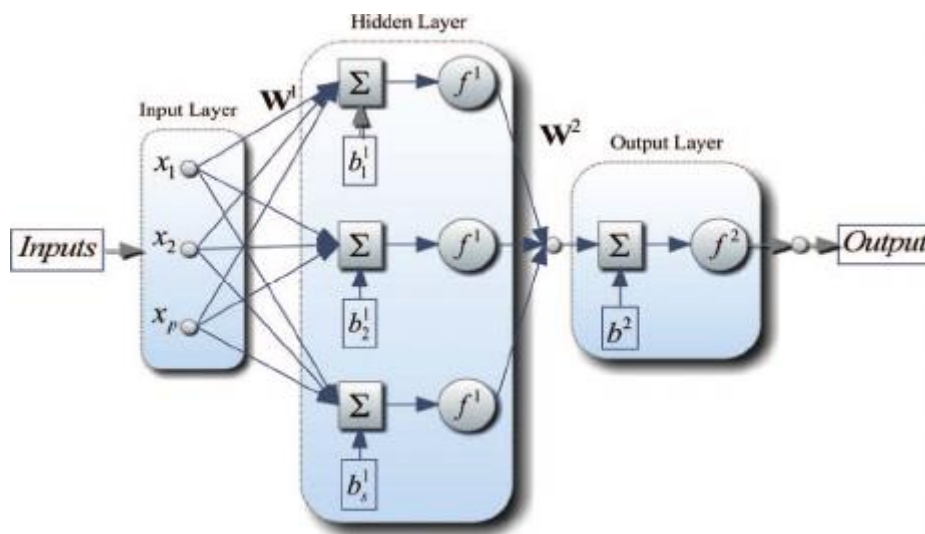
Αντίστοιχα για την έξοδο του νευρώνα 5 έχουμε:

- $N_5 = f_5(x_1 w_{15} + x_2 w_{25} + x_3 w_{35})$, όπου f_5 είναι η συνάρτηση ενεργοποίησης για τον νευρώνα 5. Αν υπάρχουν πολώσεις στα αντίστοιχα αθροίσματα προστίθενται και αυτές.

Η διαδικασία ακολουθείται και στο επίπεδο εξόδου (νευρώνας 6) στο οποίο ισχύει:

- $y = f_6(N_4 w_{46} + N_5 w_{56})$, όπου f_6 είναι η συνάρτηση ενεργοποίησης του νευρώνα στο επίπεδο εξόδου.

Η παραπάνω διαδικασία περιγράφεται σχηματικά με την παρακάτω εικόνα 3.15.



Εικόνα 3.15 Σχηματική αναπαράσταση εξισώσεων του δικτύου εμπρόσθιας τροφοδότησης.

Αφού κατανοήσαμε πως λειτουργεί το δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης, μπορούμε να εισάγουμε την έννοια της εκπαίδευσής του με τον αλγόριθμο ανάδρασης ή οπισθοδρόμησης σφαλμάτων, και να δημιουργήσουμε το FFBP.

Η λειτουργία του FFBP είναι αρχικά ίδια με το απλό FF. Θα θεωρήσουμε ότι κάθε στοιχείο εισόδου, ή στοιχείο πίνακα εισόδου X , πρέπει να πολλαπλασιαστεί με ένα αντίστοιχο βάρος και μετά να προστεθούν με όλα τα άλλα αποτελέσματα κάθε νευρώνα, όπως ακριβώς περιγράψαμε παραπάνω. Η πολυπλοκότητα αυτής της διαδικασίας περιορίζεται αν θεωρήσουμε την είσοδο και την έξοδο σαν πίνακες και παράλληλα τοποθετήσουμε όλα τα ξεχωριστά βάρη σε ένα πίνακα βαρών. Η δημιουργία πινάκων μας επιτρέπει να περνάμε πολλές εισόδους προσθέτοντας απλά σειρές στον πίνακα X (πίνακας εισόδου). Από εδώ και στο εξής X είναι ο πίνακας εισόδου, $W^{(1)}$ ο πίνακας βαρών που προέρχεται από το επίπεδο εισόδου, $W^{(2)}$ ο πίνακας βαρών που προέρχεται από το κρυμμένο επίπεδο όπως φαίνεται και στην εικόνα 3.15. Θα ονομάσουμε $z^{(2)}$ την δραστηριότητα που προκύπτει στην έξοδο του κρυμμένου επιπέδου. Παρατηρούμε ότι κάθε είσοδος του z είναι το άθροισμα των πολλαπλασιασμένων εισόδων με τα βάρη τους, σε κάθε κρυμμένο νευρώνα, και στη συνέχεια προστίθεται και μια τιμή πόλωσης. Για λόγους ευκολίας και ελαχιστοποίησης των πράξεων θα θεωρήσουμε ότι δεν έχουμε πολώσεις στους κρυφούς νευρώνες και έχουμε δύο

εισόδους στο νευρωνικό δίκτυο. Τέλος θα θεωρήσουμε ότι $z^{(3)}$ είναι η δραστηριότητα του επιπέδου εξόδου.

Τώρα έχουμε κατασκευάσει την πρώτη εξίσωση :

$$z^{(2)} = \chi W^{(1)} \quad (3.29)$$

Με $X = \begin{bmatrix} x_1 & k_1 \\ x_2 & k_2 \\ x_3 & k_3 \end{bmatrix}$, όπου ο αριθμός των στηλών αντιπροσωπεύει τις εισόδους και ο αριθμός

των γραμμών τα δεδομένα τις εισόδους, που εδώ επιλέχθηκε για λόγους ευκολίας να είναι τρία. Ο πίνακας βαρών θα είναι 2×3 διαστάσεων, αντιπροσωπεύοντας τα βάρη για κάθε είσοδο και επομένως $W^{(1)} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \end{bmatrix}$, όπου w_{11} είναι το βάρος που αντιστοιχεί στη στον πρώτο νευρώνα εισόδου με τον πρώτο νευρώνα του κρυμμένου επιπέδου κ.ο.κ. Έτσι λοιπόν το $z^{(2)}$ είναι 3×3 διαστάσεων με κάθε σειρά να αντιπροσωπεύει τα παραδείγματα εισόδου και κάθε στήλη για κάθε κρυμμένο νευρώνα. Δηλαδή το $z^{(2)}$:

$$z^{(2)} = \begin{bmatrix} x_1 w_{11} + k_1 w_{21} & x_1 w_{12} + k_1 w_{22} & x_1 w_{13} + k_1 w_{23} \\ x_2 w_{11} + k_2 w_{21} & x_2 w_{12} + k_2 w_{22} & x_2 w_{13} + k_2 w_{23} \\ x_3 w_{11} + k_3 w_{21} & x_3 w_{12} + k_3 w_{22} & x_3 w_{13} + k_3 w_{23} \end{bmatrix}$$

Για κάθε νευρώνα που αντιπροσωπεύεται από τις στήλες, καταγράφονται οι εισοδοί του που αντιπροσωπεύονται με τις γραμμές.

Τώρα που ορίσαμε και την δραστηριότητα κάθε νευρώνα πρέπει να εφαρμόσουμε και την συνάρτηση ενεργοποίησης. Οπότε τώρα έχουμε φτιάξει την δεύτερη εξίσωση που περιγράφει την συνολική λειτουργία του νευρώνα του κρυφού επιπέδου. Έτσι:

$$\alpha^{(2)} = f(z^{(2)}) \quad (3.30)$$

Όπου $\alpha^{(2)}$ ο πίνακας 3×3 , που περιέχει τα τελικά αποτελέσματα για κάθε νευρώνα του κρυφού επιπέδου για τις αντίστοιχες εισόδους.

Για να τελειώσουμε με εμπρόσθια τροφοδότηση, που περιγράψαμε και στην προηγούμενη ενότητα, πρέπει να περιγράψουμε και την λειτουργία του επιπέδου εξόδου. Κάθε έξοδος του προηγούμενου επιπέδου, δηλαδή των κρυφών νευρώνων, πολλαπλασιάζεται με τα καινούρια βάρη $W^{(2)}$ και έτσι η δραστηριότητα που μπαίνει σαν είσοδος στο νευρώνα του επιπέδου εξόδου περιγράφεται με την εξίσωση:

$$z^{(3)} = \alpha^{(2)} W^{(2)} \quad (3.31)$$

Όπου ο πίνακας $\alpha^{(2)}$ έχει διαστάσεις 3×3 , και ο πίνακας $W^{(2)}$ έχει διαστάσεις 3×1 , επομένως $z^{(3)}$ θα είναι 3×1 διαστάσεων. Ο πίνακας βαρών $W^{(2)}$ έχει την εξής μορφή:

$$W^{(2)} = \begin{bmatrix} W_{11}^{(2)} \\ W_{21}^{(2)} \\ W_{31}^{(2)} \end{bmatrix}$$

Για τους δείκτες W_{ij} των βαρών στην έξοδο του κρυφού επιπέδου ισχύει ότι i είναι ο νευρώνας του κρυφού επιπέδου που συνδέεται με τον j νευρώνα του επιπέδου εξόδου. Πάντα αντιστοιχεί ένα βάρος για κάθε σύναψη. Τώρα εφαρμόζουμε την συνάρτηση ενεργοποίησης και τελικά η έξοδος του νευρωνικού μας δικτύου θα είναι:

$$y_{predicted} = f(z^{(3)}) \quad (3.32)$$

Αν τώρα κάναμε εκτιμήσεις σε αληθινά δεδομένα, θα βλέπαμε ότι οι πραγματικές τιμές εξόδου με τις τιμές που προέβλεψε το νευρωνικό μας δίκτυο θα απείχαν πάρα πολύ. Το σφάλμα εκτίμησης δηλαδή θα ήταν μεγάλο. Αυτό συμβαίνει γιατί το νευρωνικό δίκτυο δεν έχει εκπαιδευτεί. Στο σημείο αυτό εφαρμόζεται ο αλγόριθμος εκπαίδευσης Back propagation, που η αυτόνομη λειτουργία του περιεγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα. Τώρα, θα δούμε πως δουλεύει για το νευρωνικό δίκτυο.

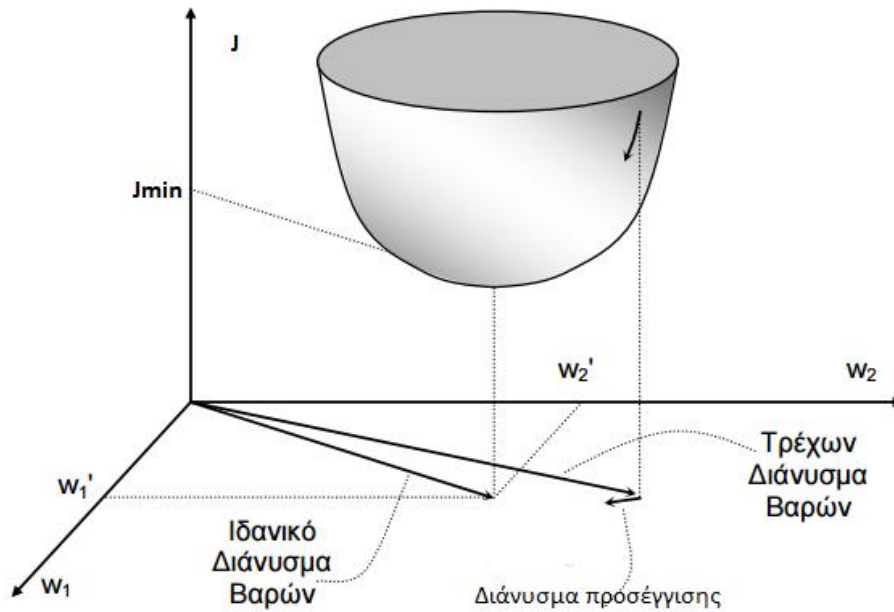
Για να βελτιώσουμε το μοντέλο, πρέπει πρώτα να ποσοτικοποιήσουμε ακριβώς, πόσο λάθος είναι οι προβλέψεις του νευρωνικού δικτύου. Αυτό γίνεται με την συνάρτηση κόστους $J = \sum \frac{1}{2} [(y - y_{predicted})^2]$ από την εξίσωση 3.5, που περιγράψαμε σε προηγούμενη ενότητα. Σκοπός της εκπαίδευσης είναι η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης αυτής. Το κόστος είναι συνάρτηση δύο πραγμάτων, των παραδειγμάτων μας και των βαρών. Αφού η είσοδος όπως είπαμε σε ένα νευρωνικό δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης δεν συμμετέχει σε υπολογισμούς, αυτό που μπορούμε να κάνουμε για να ελαχιστοποιήσουμε το κόστος είναι να αλλάζουμε τα βάρη. Σαν ιδέα αυτό μοιάζει αρκετά εύκολο. Έχουμε εννιά ξεχωριστά βάρη και αυτό που προσπαθούμε είναι να βρούμε είναι ο κατάλληλος συνδυασμός τους, που θα οδηγήσει την συνάρτηση κόστους J στην ελάχιστη τιμή της.

Έχουμε 5 εξισώσεις 3.29-3.32 και την 3.5 που ο συνδυασμός τους μας δίνει την εξάρτηση της συνάρτησης κόστους από τα βάρη.

$$J = \sum \frac{1}{2} [(y - f(f(XW^{(1)})W^{(2)}))^2] \quad (3.33)$$

Θέλουμε να υπολογίσουμε τον ρυθμό μεταβολής της J συναρτήσεως του W , δηλαδή την παράγωγο. Σε αυτή τη περίπτωση, αφού μας ενδιαφέρει ένα βάρος w την φορά, θέλουμε την μερική παράγωγο.

Αν $\frac{\partial J}{\partial w} > 0$ τότε η συνάρτηση κόστους αυξάνεται. Αν $\frac{\partial J}{\partial w} < 0$ τότε η συνάρτηση κόστους ελαττώνεται. Με αυτό τον τρόπο εξοικονομούμε χρόνο καθώς γνωρίζουμε σε ποια κατεύθυνση η συνάρτηση μας ελαττώνεται (εικόνα 3.16). Αυτή η μέθοδος είναι η gradient descent που εξηγήθηκε σε προηγούμενη ενότητα. Το πλεονέκτημα της είναι βελτιώνει την ταχύτητα του αλγόριθμου σε προβλήματα πολλών διαστάσεων. Αν η συνάρτηση κόστους δεν πηγαίνει προς την ίδια κατεύθυνση, μπορεί να δημιουργήσει πρόβλημα στον αλγόριθμο gradient descent και να «μπλοκάρει» σε ένα τοπικό ελάχιστο αντί για το ολικό. Έτσι ένας από τους λόγους που επιλέξαμε την μέθοδο των ελάχιστων τετραγώνων είναι για να εκμεταλλευτούμε την κυρτότητα των τετραγωνικών συναρτήσεων.



Εικόνα 3.16 Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου *gradient descent* για δύο εισόδους, με στόχο την εύρεση ολικού ελαχίστου για την συνάρτηση κόστους.

Για να φτάσουμε στο σφάλμα *back propagation* πρέπει πρώτα να υπολογίσουμε την $\frac{\partial J}{\partial w}$ συναρτήσει των πινάκων των βαρών $W^{(1)}$ και $W^{(2)}$. Επομένως:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial J}{\partial w_{11}^{(1)}} & \frac{\partial J}{\partial w_{12}^{(1)}} & \frac{\partial J}{\partial w_{13}^{(1)}} \\ \frac{\partial J}{\partial w_{21}^{(1)}} & \frac{\partial J}{\partial w_{22}^{(1)}} & \frac{\partial J}{\partial w_{23}^{(1)}} \end{bmatrix}$$

Και

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial J}{\partial w_{11}^{(2)}} \\ \frac{\partial J}{\partial w_{21}^{(2)}} \\ \frac{\partial J}{\partial w_{31}^{(2)}} \end{bmatrix}$$

Πάμε να υπολογίσουμε την μεταβολή της συνάρτησης κόστους ως προς τα βάρη της εξόδου του κρυμμένου επιπέδου.

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = \frac{\partial \Sigma \frac{1}{2} [(y - y_{predicted})^2]}{\partial W^{(2)}}$$

Θα αφήσουμε το άθροισμα για το τέλος και εύκολα από τον κανόνα για τις παραγωγίσιμες συναρτήσεις $(f \circ g)' = (f' \circ g)g'$ βγαίνει ότι:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = -(y - y_{predicted}) \frac{\partial y_{predicted}}{\partial W^{(2)}}$$

Λόγω της εξίσωσης 3.32 και χρησιμοποιώντας τον κανόνα αλυσίδας έχω:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = -(y - y_{predicted}) \frac{\partial y_{predicted}}{\partial z^{(3)}} \frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(2)}} = -(y - y_{predicted}) f'(z^{(3)}) \frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(2)}}$$

Λόγω της εξίσωσης 3.31 η παραπάνω εξίσωση γίνεται:

$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = -(y - y_{predicted}) f'(z^{(3)}) \alpha^{(2)}$ και λόγω διαστάσεων ώστε να γίνονται οι υπολογισμοί από τους μετασχηματισμούς πινάκων, την μετατρέπουμε ως εξής:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = (\alpha^{(2)})^T (-(y - y_{predicted}) f'(z^{(3)}))$$

Ο όρος $-(y - y_{predicted}) f'(z^{(3)})$ είναι το σφάλμα οπισδιδιάδοσης ή ανάστροφης διάδοσης και συμβολίζεται:

$$\delta^{(3)} = -(y - y_{predicted}) f'(z^{(3)})$$

Οπότε συνοψίζοντας καταλήγουμε σε δύο εξισώσεις:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(2)}} = (\alpha^{(2)})^T \delta^{(3)} \quad (3.34)$$

$$\delta^{(3)} = -(y - y_{predicted}) f'(z^{(3)}) \quad (3.35)$$

Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε ως προς τα βάρη του πρώτου επιπέδου ,μεταξύ εισόδου και κρυφού επιπέδου, καθώς αυτό είναι το αμέσως προηγούμενο επίπεδο. Κατά τα γνωστά ισχύει:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = \frac{\partial \Sigma \frac{1}{2} [(y - y_{predicted})^2]}{\partial W^{(1)}} = -(y - y_{predicted}) \frac{\partial y_{predicted}}{\partial z^{(3)}} \frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(1)}}$$

Λόγω της εξίσωσης 3.32:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = -(y - y_{predicted}) f'(z^{(3)}) \frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(1)}}$$

και λόγω τις 3.35 :

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = \delta^{(3)} \frac{\partial z^{(3)}}{\partial W^{(1)}}$$

Λόγω της εξίσωσης 3.31 και εφαρμόζοντας τον κανόνα αλυσίδας έχουμε:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = \delta^{(3)} \frac{\partial z^{(3)}}{\partial \alpha^{(2)}} \frac{\partial \alpha^{(2)}}{\partial W^{(1)}} = \delta^{(3)} (W^{(2)})^T \frac{\partial \alpha^{(2)}}{\partial z^{(2)}} \frac{\partial z^{(2)}}{\partial W^{(1)}} = \delta^{(3)} (W^{(2)})^T f'(z^{(2)}) \frac{\partial z^{(2)}}{\partial W^{(1)}}$$

Ο τελευταίος όρος υπολογίζει την είσοδο και τελικά :

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(1)}} = (X)^T \delta^{(3)} (W^{(2)})^T f'(z^{(2)})$$

Με σφάλμα οπισθοδιάδοσης για το επίπεδο αυτό :

$$\delta^{(2)} = \delta^{(3)}(W^{(2)})^T f'(z^{(2)}) \quad (3.36)$$

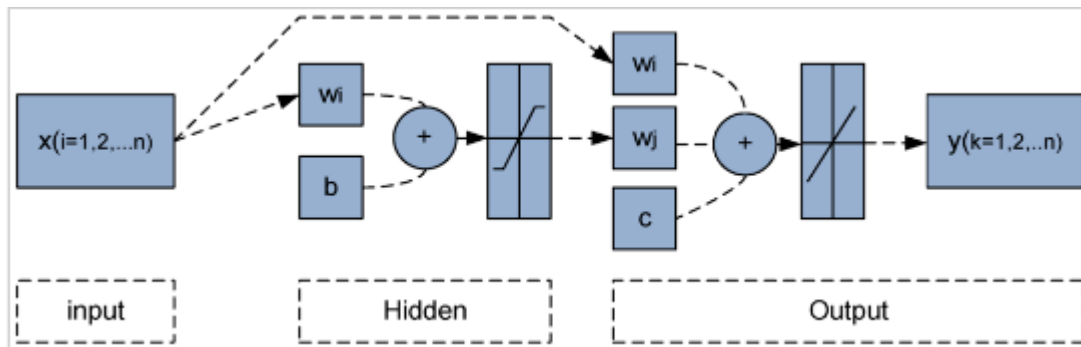
Στο τέλος αθροίζονται όλα τα σφάλματα λόγω του τελεστή άθροισης και η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι το σφάλμα να γίνει πάρα πολύ μικρό.

Συνοψίζοντας, κατά την εφαρμογή του νευρωνικού δικτύου και αφού αρχικά αρχικοποιήσαμε τα βάρη και τις πολώσεις (στο συγκεκριμένο παράδειγμα για απλούστευση δεν χρησιμοποιήσαμε), υπολογίζονται οι εξόδοι όλων των νευρώνων. Το νευρωνικό δίκτυο FFBP ξεκινά από το πρώτο κρυμμένο επίπεδο με την εφαρμογή του διανύσματος εισόδου, στη συνέχεια υπολογίζει όλα τα σήματα εξόδου των νευρώνων βάσει των προαναφερθέντων σχέσεων και προχωράει στα επόμενα επίπεδα του δικτύου, μέχρι να φτάσει τελικά στο επίπεδο εξόδου και να υπολογίσει το διάνυσμα εξόδου του δικτύου καθώς και το σφάλμα του κάθε νευρώνα αυτού του επιπέδου. Στη συνέχεια, ξεκινά από το επίπεδο εξόδου περνώντας τα σήματα σφάλματος προς τα πίσω και υπολογίζει αναδρομικά την τιμή του δ για κάθε νευρώνα. Με αυτόν τον τρόπο αναπροσαρμόζονται τα συναπτικά βάρη, σύμφωνα με τον κανόνα gradient descent. Με τα καινούρια βάρη, τώρα, συνεχίζεται το πέρασμα προς το επίπεδο εξόδου. Η διαδικασία αυτή συνεχίζεται μέχρι το σφάλμα να πάρει την ελάχιστη τιμή.

3.5.2 ΣΕΙΡΙΑΚΟ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟ ΔΙΚΤΥΟ ΜΕ ΑΝΑΔΡΑΣΗ ΣΦΑΛΜΑΤΟΣ (CASCADE FORWARD BACK PROPAGATION)

Τα σειριακά νευρωνικά δίκτυα (CFBP) με ανάδραση σφάλματος είναι παρόμοια με τα FFBP νευρωνικά δίκτυα, αλλά περιλαμβάνουν μια επιπλέον σύνδεση με βάρος από την είσοδο σε κάθε επίπεδο και ενδιάμεσα τα επίπεδα συνδέονται και αυτά μεταξύ τους. Για παράδειγμα αν έχουμε ένα νευρωνικό δίκτυο με τρία επίπεδα, το επίπεδο εισόδου (1), το κρυφό επίπεδο (2), και το επίπεδο εξόδου (3) τότε οι συνδέσεις γίνονται ως εξής : (1)→(2) →(3) και επιπλέον (1) →(3). Έτσι λοιπόν το νευρωνικό αυτό δίκτυο έχει συνδέσεις από το επίπεδο εισόδου με όλα τα επίπεδα. Η επιπλέον σύνδεση του επιπέδου εισόδου απευθείας με επόμενα επίπεδα επιταχύνει την διαδικασία μάθησης του νευρωνικού δικτύου. Ο αλγόριθμος backpropagation λειτουργεί παρόμοια με τον FFBP, που περιγράψαμε αναλυτικά νωρίτερα, όσον αφορά τον επαναυπολογισμό των βαρών[45,46]. Το πλεονέκτημα αυτού του δικτύου είναι ότι οι νευρώνες εξόδου συνδέονται άμεσα με την είσοδο και τα κρυφά επίπεδα. Έτσι το αποτέλεσμα της εξόδου του CFBP είναι το άθροισμα όλων των προηγούμενων επιπέδων σύμφωνα με το παράδειγμα της εικόνας 3.16[47] :

$$y_k = f \left(\sum_{j=1}^m X_j w_j + \sum_{i=1}^n x_i w_i + c \right)$$



Εικόνα 3.17 Αναπαράσταση σειριακού νευρωνικού δικτύου (cascade forward neural network)

Παρά την βελτίωση στην ταχύτητα εκτίμησης η πολυπλοκότητα αυξήθηκε με την είσοδο επιπλέον τιμών στα βάρη. Ανάλογα λοιπόν με την πολυπλοκότητα του προβλήματος μας, το CFBP μπορεί να μην έχει καλύτερα αποτελέσματα από το FFBP, παρά την ενημέρωση της εξόδου απευθείας με την είσοδο[50,52,53].

3.5.3 ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ ΑΝΑΤΡΟΦΟΔΟΤΗΣΗΣ (RECURRENT NET)

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Ανατροφοδότησης (Recurrent Artificial Neural Networks) αντιπροσωπεύουν μία σημαντική αρχιτεκτονική των τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων. Τα δίκτυα ανατροφοδότησης μπορούν να φέρουν μη συμμετρικούς πίνακες βαρών, αυτοτροφοδότηση (self-feedback) μεταξύ των νευρώνων τους και επίσης μπορούν να εκπαιδευτούν με βάση τον αλγόριθμο του backpropagation.

Τα δίκτυα προώθησης μπορούν να γενικευθούν και να λειτουργούν ως δίκτυα ανάδρασης συνδέοντας την έξοδο ενός ή περισσότερων νευρώνων τους στο ίδιο ή σε προηγούμενα στρώματα του δικτύου. Αυτές οι γενικευμένες αρχιτεκτονικές μπορούν να έχουν πλευρικές συνδέσεις μεταξύ μονάδων του ίδιου στρώματος συμπεριλαμβανόμενου συνδέσεις ανατροφοδότησης (feedback connections). Εισάγοντας συνδέσεις ανατροφοδότησης σε ένα δίκτυο προώθησης πολλαπλών στρωμάτων (multi-layer feed-forward network) προκαλούνται σημαντικές αλλαγές στην λειτουργία και στην διαδικασία εκπαίδευσης των δικτύων. Αυτή η επιπρόσθετη πολυπλοκότητα έχει μερικά πλεονεκτήματα: τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Ανατροφοδότησης έχουν αυξημένη υπολογιστική ισχύ σε σχέση με τα συμβατικά Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Προώθησης.

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Ανάδρασης επιδεικνύουν δυναμική συμπεριφορά αντίθετα με τα δίκτυα προώθησης. Μπορούν να δημιουργήσουν αντιστοιχίες οι οποίες είναι συναρτήσεις του χρόνου και του χώρου, ή να συγκλίνουν σε ένα σημείο μεταξύ κάποιων οριακών σημείων. Ως αποτέλεσμα, έχουν την ικανότητα εκτέλεσης πιο πολύπλοκων υπολογισμών από τα στατικά δίκτυα προώθησης. Για παράδειγμα, μπορούν να εκπαιδευτούν και να «μάθουν» χρονικές ακολουθίες προτύπων, δηλαδή ακολουθίες προτύπων οι οποίες εξαρτώνται από το περιεχόμενο ή τον χρόνο. Αυτό το επιθυμητό χαρακτηριστικό, αποτελεί και χαρακτηριστικό των βιολογικών συστημάτων τα οποία μαθαίνουν διάφορους τύπους ακολουθιών όπως τα φωνήματα ή οι χαρακτήρες μιας γλώσσας ή σειριακές μεθόδους επίλυσης προβλημάτων. Κάποιες εφαρμογές τις οποίες εκτελούν καλά τα δίκτυα ανατροφοδότησης, για να εκτελεστούν από ένα αντίστοιχο δίκτυο προώθησης θα χρειαστεί μεγαλύτερος αριθμός κρυμμένων στρωμάτων ή/και μεγαλύτερος αριθμός νευρώνων ανά κάθε στρώμα για να έχουμε την ίδια απόδοση[50].

Τα δίκτυα ανατροφοδότησης δεν είναι απαραίτητο να θεωρούνται πολυστρωματικά δίκτυα. Αντίθετα, απλά «φαίνονται» ως ένας αριθμός συνδεδεμένων μεταξύ τους νευρώνων όπου οποιοσδήποτε νευρώνας i μπορεί να συνδεθεί με οποιονδήποτε άλλο νευρώνα j , συμπεριλαμβανομένης και της περίπτωσης όπου ισχύει $i = j$. Οποιοσδήποτε από τους νευρώνες μπορεί να θεωρηθεί ως νευρώνας εξόδου, ενώ κάποιοι καθορισμένοι νευρώνες αποτελούν τους νευρώνες εισόδου. Εάν το δίκτυο έχει n νευρώνες και m από αυτούς δέχονται εξωτερική είσοδο μπορεί να χρησιμοποιηθεί ένας πίνακας βαρών W με διάσταση $n \times (n + m)$ για να καθορίσει πλήρως τις συναπτικές παραμέτρους του δικτύου [50].

Η δυναμική των δικτύων ανατροφοδότησης μπορεί να περιγραφεί πλήρως από σύνολα μη γραμμικών διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης της μορφής:

$$dx_i/dt = G_i(W, I, x(t)), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.34)$$

όπου:

x : το διάνυσμα κατάστασης

W : ο πίνακας βαρών

I : το εξωτερικό διάνυσμα εισόδου

G_i : μία μη γραμμική διαφορίσιμη συνάρτηση.

Στην περίπτωση του μοντέλου διακριτού χρόνου, η δυναμική καθορίζεται από σύνολα μη γραμμικών εξισώσεων διαφορών της μορφής

$$x_i(t + 1) = G_i(W, I, x(t)), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.35)$$

Στα συστήματα με ανατροφοδότηση, είναι σημαντικά τα θέματα ευστάθειας. Οι παράμετροι W και I και οι αρχικές συνθήκες ή το αρχικό σημείο $x(0)$ ενός δικτύου ανατροφοδότησης καθορίζουν και την συμπεριφορά του. Η συμπεριφορά μπορεί να εξελιχθεί με κάποιον από τους εξής τέσσερις τρόπους:

- Σύγκλιση σε ένα σταθερό σημείο
- Σταθεροποίηση σε κυκλικές ταλαντώσεις (περιοδικές)
- Τάση προς φαινομενικά περιοδική συμπεριφορά (ταλαντώσεις σε πολλαπλές συχνότητες)
- Εμφάνιση χαοτικής συμπεριφοράς

Κυρίως ενδιαφέρον παρουσιάζει η περίπτωση της σταθερής σύγκλισης όπου το δίκτυο συγκλίνει σε ένα σημείο ή εκτελεί κάποια επιθυμητή αντιστοίχιση του διανύσματος εισόδου. Ένα παράδειγμα δικτύου με ανατροφοδότηση φαίνεται στο σχήμα 2.16, όπου το δίκτυο έχει τρεις εξωτερικές εισόδους, τρεις εξόδους και έναν αριθμό εσωτερικών συνδέσεων μεταξύ των νευρώνων του.

Υποθέτοντας το μοντέλο του διακριτού χρόνου, το δίκτυο του σχήματος 2.16 λειτουργεί θεωρητικά για κάποιο χρονικό διάστημα. Την χρονική στιγμή $t > 0$, ένα πρότυπο διάνυσμα εισόδου παρουσιάζεται στους νευρώνες εισόδου του δικτύου. Αυτές οι μονάδες υπολογίζουν την τιμή ενεργοποίησης τους $f_i(x, W)$ και μεταφέρουν τις τιμές ενεργοποίησης στους νευρώνες με τους οποίους είναι συνδεδεμένοι την χρονική στιγμή $t + 1$. Εκτός των νευρώνων εισόδου και άλλοι νευρώνες, συμπεριλαμβανομένων και εκείνων που δεν είναι εισόδοι,

υπολογίζουν επίσης τις τιμές ενεργοποίησής τους την χρονική στιγμή $t + 1$. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για κάθε επόμενη χρονική στιγμή $t + i$ ($i = 1, 2, \dots$). Κατά την διάρκεια κάθε κύκλου, τα σήματα ανατροφοδότησης συνδυάζονται με τα σήματα προώθησης για να παράγουν τις εισόδους του δικτύου σε κάθε νευρώνα. Η έξοδος κάθε νευρώνα είναι τιμές ενεργοποίησης οι οποίες μπορεί να συγκλίνουν (σταθεροποίηση σε ένα σταθερό σημείο), να ταλαντώνονται (χρονική επανάληψη του ίδιου συνόλου τιμών) ή να παράγουν χαοτική συμπεριφορά[43,44].

3.6 ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ ΣΕ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ MATLAB ΓΙΑ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΟΥ SOC

Η MATLAB έχει μια πληθώρα από υποστηριζόμενους αλγόριθμους για την δημιουργία των νευρωνικών δικτύων, με διάφορες συναρτήσεις που παρέχονται από την βιβλιοθήκη της. Στη συγκεκριμένη διπλωματική οι συναρτήσεις που χρησιμοποιήθηκαν για να εκπαιδεύσουν το νευρωνικό δίκτυο είναι:

- **fitnet**: με την κλήση της συνάρτησης αυτής δημιουργείται ένα Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο Προώθησης (feed-forward neural network) προς τα εμπρός, που εκπαιδεύεται βάσει του αλγορίθμου της ανάδρασης (backpropagation).
- **cascaforwardnet**: με την κλήση της συνάρτησης αυτής δημιουργείται ένα Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο Προώθησης (cascade-forward neural network) με ρυθμό αλλαγής των συναπτικών βαρών και των πολώσεων μεγαλύτερο από εκείνο που παρέχει η **fitnet** και το οποίο εκπαιδεύεται βάσει του αλγορίθμου της ανάδρασης (backpropagation).

Αλγόριθμος εκπαίδευσης

Διαφορετικοί αλγόριθμοι εκπαίδευσης παρέχονται από την βιβλιοθήκη της MATLAB, για διαφορετικούς σκοπούς. Σε αυτή τη διπλωματική χρησιμοποιήθηκε η συνάρτηση Μπαεσιανή ομαλοποίηση (Bayesian Regularization-BR) για όλα τα μοντέλα[40]. Από την βιβλιογραφία [48,49,52,53] έχουν μελετηθεί και συγκριθεί ανάλογα με την ικανότητα εκτίμησης, αρκετοί αλγόριθμοι εκπαίδευσης. Ωστόσο καλύτερα αποτελέσματα σε εκτιμήσεις για διάφορα δεδομένα εισόδου και τεχνικές προσέγγισης, φαίνεται να έχει ο αλγόριθμος εκπαίδευσης BR. Παρόλα αυτά δοκιμάστηκε και ο αλγόριθμος Lavenberg-Marquardt (LM), αλλά αποδείχθηκε ότι χρειάζεται περισσότερο χρόνο εκπαίδευσης από ότι περιμέναμε, και οι εκτιμήσεις ήταν παρόμοιες με τον BR. Τόσο ο αλγόριθμος LM όσο και ο BR είναι διαθέσιμοι στη MATLAB και εκτελούνται με μια εντολή, που για τον αλγόριθμο BR είναι η 'trainbr'.

Πολλοί αλγόριθμοι εκπαίδευσης εμφανίζουν το φαινόμενο overfitting. Με τον αγγλικό αυτό όρο αναφερόμαστε στην κατάσταση εκείνη, όπου κατά την γενίκευση παρατηρούμε ότι το δίκτυο μπορεί να έχει απομνημονεύσει τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την φάση της εκπαίδευσης, αλλά δεν έχει μάθει να τα γενικεύει σωστά πάνω στα καινούρια δεδομένα εισόδου. Ουσιαστικά, το νευρωνικό δίκτυο απομνημονεύει την είσοδο/έξοδο, αντί να υπολογίζει σχέσεις που βασίζονται σε αναπροσαρμογές βαρών[52,53].

Κριτήρια αξιολόγησης απόδοσης νευρωνικών δικτύων

Με στόχο την αξιολόγηση της ικανότητας του κατασκευασμένου νευρωνικού δικτύου να προβλέπει με ακρίβεια, χρησιμοποιούνται τρεις νόρμες για σύγκριση της απόδοσης κάθε μοντέλου. Αυτές είναι :

- Μέσο απόλυτο σφάλμα ή Mean Absolute Error (MAE)

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y - y_{predicted}|$$

- Κανονικοποιημένο Μέσο τετραγωνικό σφάλμα ή Normalized Mean Square Error

$$NMSE = \sum_{i=1}^n \frac{(y - y_{predicted})^2}{(y - \text{mean}(y_{predicted}))^2}$$

- Με την εντολή *perform* της MATLAB, εκτιμάται η συνολική απόδοση του νευρωνικού δικτύου για όλες τις παραμέτρους του(σφάλματα βαρών, αναπροσαρμογή βαρών κ.α)
- Ο συντελεστής συσχέτισης $R^2=1- MAE$ που παίρνει τιμές από 0 έως 1 και η τιμή 1 αντιστοιχεί στην καλύτερη συσχέτιση μεταξύ των εκτιμώμενων τιμών από το νευρωνικό και των πραγματικών δεδομένων[53].

Αριθμός εποχών (κύκλων) εκπαίδευσης (Epochs)

Μία εποχή ή κύκλος εκπαίδευσης ορίζεται ως μια μονή αναπαράσταση κάθε σετ εισόδου/εξόδου στα δεδομένα εκπαίδευσης. Η εποχή εκπαίδευσης είναι μια παράμετρος, ιδιαίτερα σημαντική για την εξαγωγή του χρόνου που χρειάστηκε το νευρωνικό δίκτυο για να συγκλίνει, καθώς επίσης και να θέσει το στόχο που καθορίζει το πόσο πρέπει να εκπαιδευτεί το δίκτυο ώστε να μην συμβεί το overfitting. Ουσιαστικά μια εποχή εκπαίδευσης είναι μια παρουσίαση εκείνων των δεδομένων εισόδου που χρησιμοποιήθηκαν ως δείγματα για εκπαίδευση. Για αυτή τη διπλωματική το νευρωνικό δίκτυο σταματά να εκπαιδευτεί όταν ο αλγόριθμος εκπαίδευσης BR δώσει την μικρότερη κλίση ή όταν οι εποχές εκπαίδευσης (epochs) φτάσουν τις 1000. Οι εποχές εκπαίδευσης κυμαίνονται από 100 μέχρι όσους ορίσει ο χρήστης.

Πειραματικό στάδιο

Είσοδος του νευρωνικού δικτύου μας είναι η τάση εξόδου και το ρεύμα εισόδου του μοντέλου μπαταρίας, που παρουσιάστηκε στο δεύτερο κεφάλαιο, ενώ η έξοδος του νευρωνικού δικτύου είναι η κατάσταση φόρτισης της μπαταρίας SOC, που επίσης παρουσιάστηκε στο δεύτερο κεφάλαιο. Αυτό ισχύει για όλα τα νευρωνικά δίκτυα που κατασκευάσαμε. Όλα τα νευρωνικά δίκτυα εκπαιδεύτηκαν με τα ίδια δεδομένα καθώς και με τις ίδιες παραμέτρους.

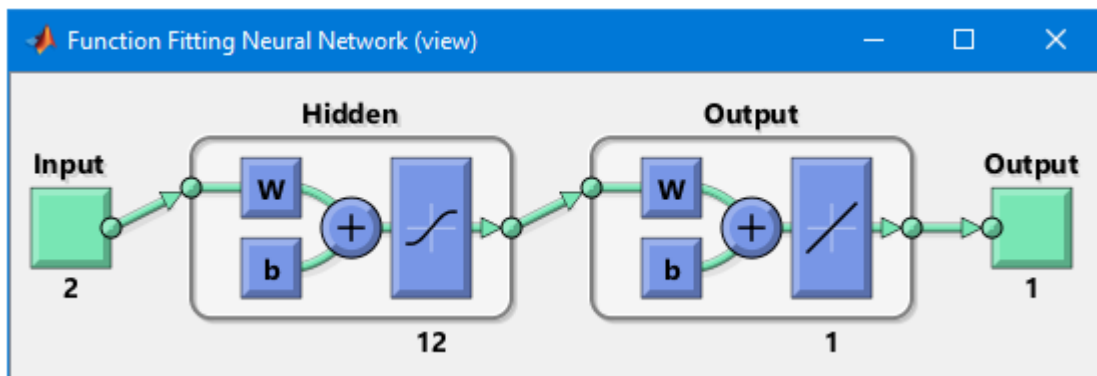
3.6.1 FITNET ΝΕΥΡΩΝΙΚΟ ΔΙΚΤΥΟ

Για το νευρωνικό δίκτυο fitnet η εκπαίδευση περιλαμβάνει δεδομένα εισόδου που καλύπτουν όλες τις πιθανές εξόδους του μοντέλου. Αυτό σημαίνει, ότι για εκπαίδευση

επιλέχθηκαν τιμές τάσης και ρεύματος που δίνουν SOC από 100%-0% και από 0%-100% έτσι ώστε να εκπαιδευτεί για όλες τις πιθανές περιπτώσεις.

Αρχικά η εκπαίδευση έγινε για διάφορες τιμές νευρώνων στο κρυφό επίπεδο. Η εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου είναι επιβλεπόμενη, αφού παρέχουμε την είσοδο και τον στόχο-έξοδο στο δίκτυο. Η είσοδος του δικτύου είναι ο πίνακας $2 \times n$, όπου η γραμμή 1 αντιστοιχεί στο ρεύμα και η γραμμή 2 αντιστοιχεί στην τάση, και τα δύο για χρονικό διάστημα n . Έξοδος του δικτύου, δηλαδή τα δεδομένα-στόχοι που πρέπει να αντιστοιχίσει στην έξοδο είναι ο πίνακας $1 \times n$, που αντιστοιχεί στο SOC για χρονικό διάστημα n .

Η μορφή του δικτύου δίνεται από την παρακάτω εικόνα 3.18, και περιγράφει το νευρωνικό δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης με ανάδραση σφάλματος για δύο εισόδους, ένα κρυφό επίπεδο με 12 νευρώνες και μία έξοδο (τοπολογία 2-12-1).



Εικόνα 3.18 Προσομοίωση FFBP νευρωνικού δικτύου με δομή 2-12-1.

Ο πίνακας δείχνει την απόδοση του FFBP νευρωνικού δικτύου για διαφορετικό πλήθος νευρώνων. Σαν μέτρο σύγκρισης χρησιμοποιήθηκαν τα στατιστικά στοιχεία υπολογισμού σφάλματος που αναφέραμε σε προηγούμενη ενότητα. Το σφάλμα υπολογίζεται ανάμεσα στην έξοδο-στόχο που εμείς τροφοδοτήσαμε το δίκτυο και την έξοδο του δικτύου μετά την εκπαίδευση.

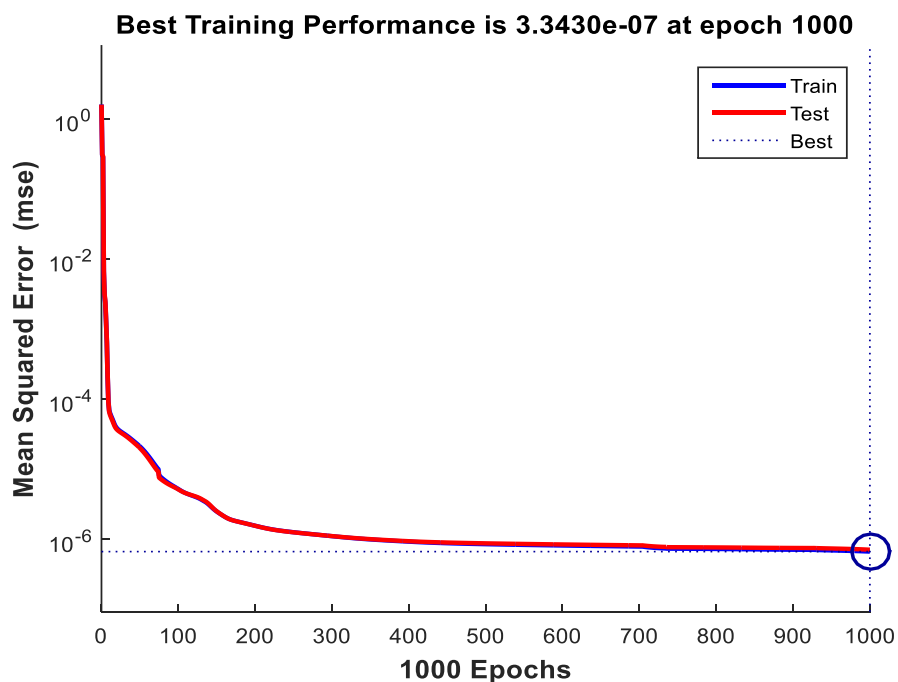
Νευρώνες	Performance	NMSE	MAE	R^2	χρόνος
6	2.1197e-06	3.0644e-05	9.5380e-04	0.99	47s
7	1.0823e-06	1.5647e-05	6.1680e-04	1	36s
8	4.6536e-07	6.7275e-06	3.4041e-04	1	2.36min
9	4.8978e-07	6.9865e-05	3.3254e-04	1	2.58min

10	5.0008e-07	7.2295e-06	3.9565e-04	1	2.76min
11	3.8715e-07	5.5969e-06	2.9427e-04	1	3.10min
12	3.3430e-07	4.8329e-06	2.4568e-04	1	3.12min
13	3.8715e-07	5.5969e-06	2.9427e-04	1	3.50min

Πίνακας 3.1 Απόδοση του αλγορίθμου FITNET για την εκτίμηση του SOC

Ύστερα από αρκετούς πειραματισμούς, καταλήξαμε στο συμπέρασμα ότι η εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου, μπορεί να είναι γρηγορότερη όταν έχει δομή 2-7-1, ωστόσο η ικανότητα γενίκευσης του σε νέα δεδομένα στα οποία δεν είχε εκπαιδευτεί παρουσίασε μεγάλο σφάλμα. Έτσι λοιπόν επιλέξαμε το νευρωνικό δίκτυο με δομή 2-12-1, που εμφανίζει να έχει την καλύτερη απόδοση. Όλες οι εκπαιδεύσεις τερματίστηκαν στις 1000 εποχές εκπαίδευσης (epochs).

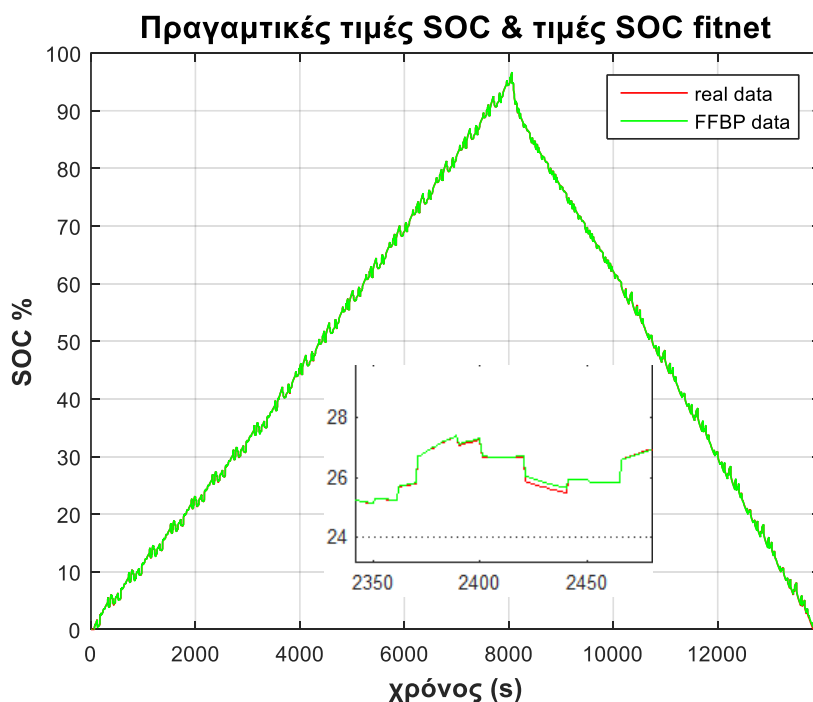
Τα αποτελέσματα της εκπαίδευσης έχουν ως εξής. Από την εικόνα της απόδοσης παρατηρείται η αλλαγή στο σφάλμα εκπαίδευσης σε πραγματικό χρόνο. Το σφάλμα φτάνει $3.3430e-07$ μετά από 1000 κύκλους εκπαίδευσης, τιμή περίπου ίση με το όριο σφάλματος που έχει προκαθοριστεί. Ενώ η γραμμική συσχέτιση της εκτιμώμενης από το νευρωνικό δίκτυο εξόδου και της εξόδου του μοντέλου μπαταρίας φαίνεται να έχει άριστη προσαρμογή (R^2).



Εικόνα 3.19 Απόδοση fitnet νευρωνικού δικτύου

Όπως φαίνεται από την εικόνα 3.19 το δίκτυο συγκλίνει γρήγορα μετά από περίπου 10 βήματα εκπαίδευσης. Χρειάζεται ωστόσο να εξαντλήσει το όριο κύκλων εκπαίδευσης (1000), γεγονός που το καθιστά λίγο παραπάνω χρονοβόρο.

Στην παρακάτω εικόνα 3.20 φαίνεται το αποτέλεσμα της εκπαίδευσης. Με πράσινο χρώμα είναι η έξοδος του νευρωνικού και με κόκκινο χρώμα η έξοδος του μοντέλου μπαταρίας. Η εκπαίδευση περιλάμβανε πληθώρα δεδομένων. Η ικανότητα γενίκευσης του νευρωνικού θα κρίνει κατά πόσο το εύρος των δεδομένων εισόδου ήταν ικανοποιητικό.



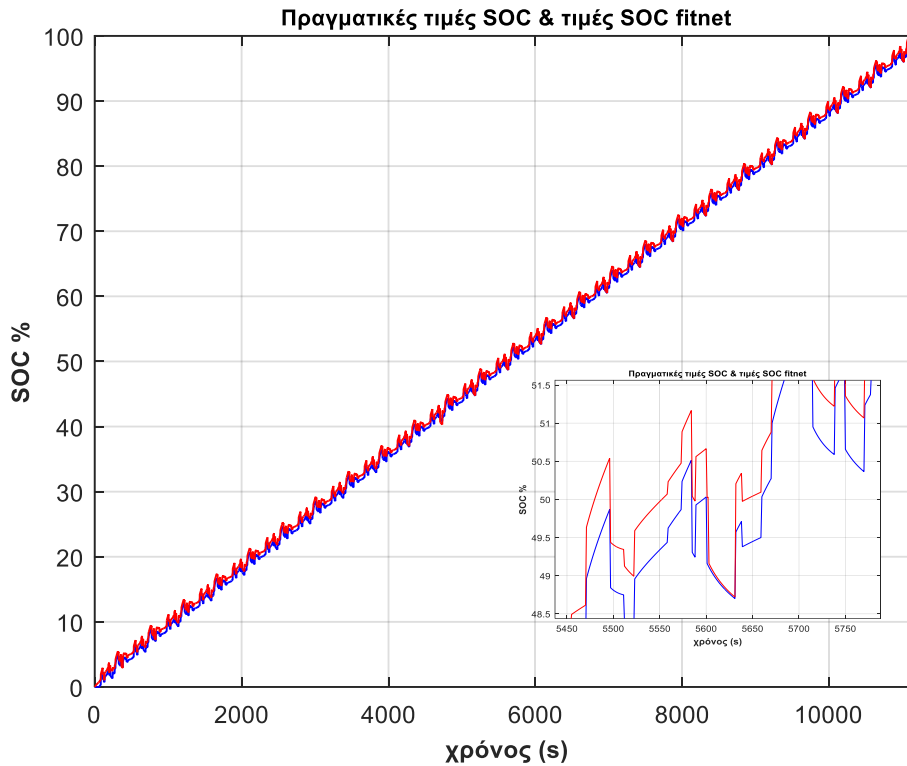
Εικόνα 3.20 Αποτέλεσμα εκπαίδευσης Fitnet νευρωνικού

Η συνάρτηση εξομοίωσης καλείται αφού το δίκτυο έχει εκπαιδευτεί. Η κλήση της συνάρτησης εξομοίωσης γίνεται με την συνάρτηση *sim* της MATLAB. Η συνάρτηση αυτή παίρνει σαν όρισμα ένα διάνυσμα εισόδου και το network object, που αντιπροσωπεύεται από το όνομά του που δίνεται σε αυτό κατά την δήλωσή του, και επιστρέφει την έξοδο του δικτύου. Το διάνυσμα εισόδου μπορεί να είναι είτε κάποιο διάνυσμα πάνω στο οποίο έχει εκπαιδευτεί το δίκτυο είτε ένα τελείως καινούριο για το δίκτυο δεδομένο. Στη συγκεκριμένη διπλωματική η είσοδος είναι τελείως καινούρια για το νευρωνικό δίκτυο, έτσι ώστε να εκτιμηθεί η ικανότητα γενίκευσης του σε νέα δεδομένα.

Στη συνέχεια ακολουθούν οι γραφικές παραστάσεις για διαφορετικά καινούρια δείγματα εισόδου, στα οποία δεν έχει εκπαιδευτεί το fitnet νευρωνικό δίκτυο.

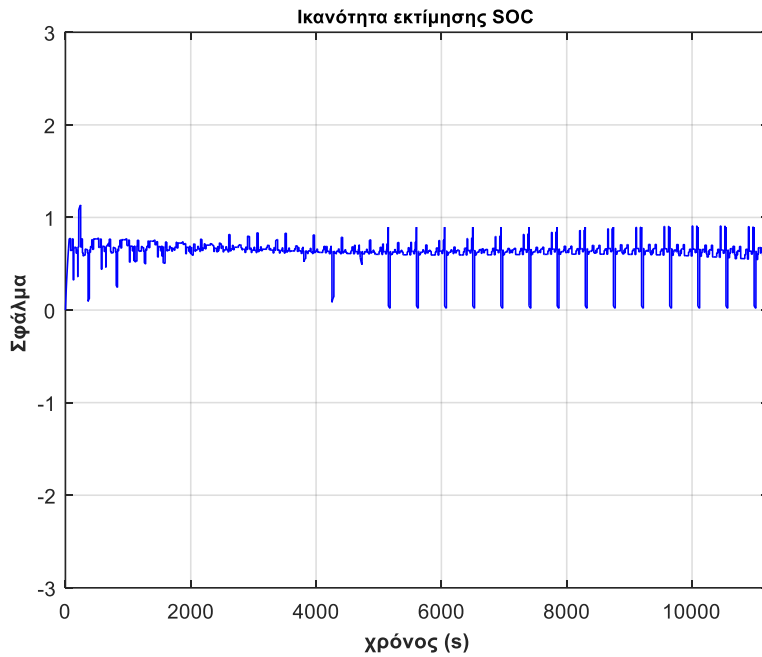
Παράδειγμα 1°

Στο πρώτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το fitnet νευρωνικό δίκτυο για μια πλήρη φόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.21-3.22.



Εικόνα 3.21 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια πλήρη φόρτιση. Με κόκκινο είναι η έξοδος του fitnet και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας.

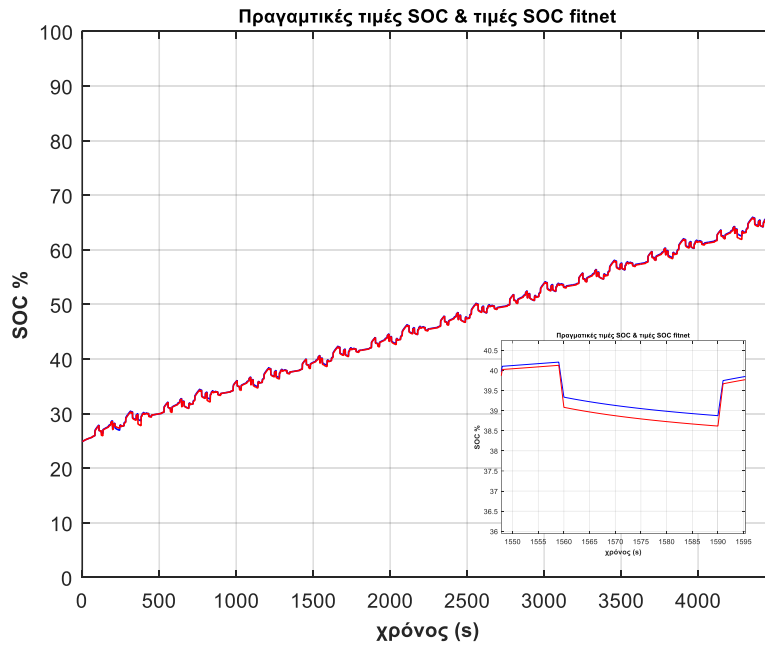
Η φόρτιση έγινε από 0% μέχρι 100%. Η τιμή του μέσου σφάλματος είναι 0.4% και το δίκτυο φαίνεται να ανταποκρίνεται στις πραγματικές τιμές του SOC. Το ρεύμα εισόδου έχει αρκετές μεταβολές που κυμαίνονται από 0 μέχρι -2. Φαίνεται πως η έξοδος του νευρωνικού δείχνει τιμές φόρτισης μεγαλύτερες από τις πραγματικές, ωστόσο αντιλαμβάνεται τις μεταβολές. Αυτό μπορεί να οφείλεται στο ότι κατά την εκπαίδευση υπήρχαν αρκετά δεδομένα που ξεκίναγαν από διαφορετική κατάσταση. Στην παρακάτω εικόνα 3.22 φαίνεται η απόλυτη τιμή του σφάλματος, μεταξύ του SOC από το μοντέλο μπαταρίας και του νευρωνικού, για κάθε χρονική στιγμή.



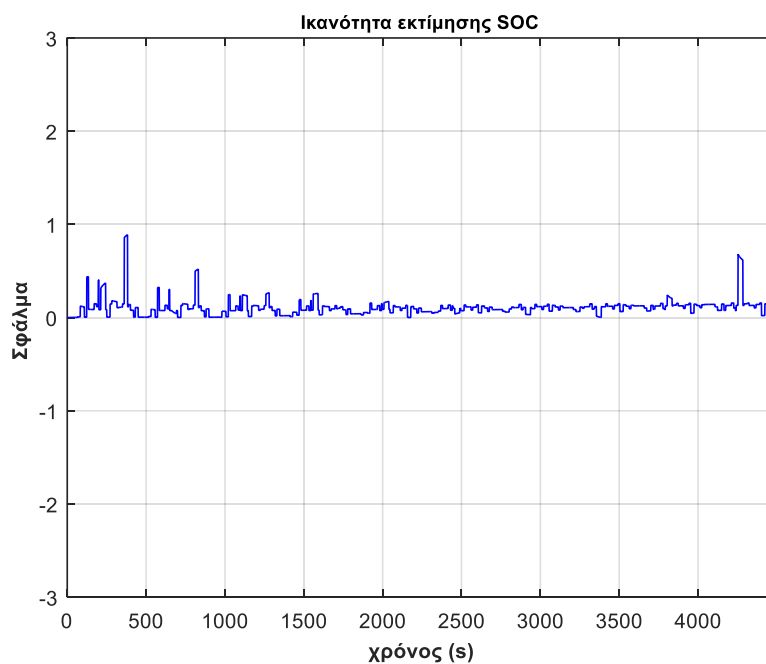
Εικόνα 2.22 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή SOC.

Παράδειγμα 2^ο

Στο δεύτερο παράδειγμα υλοποιήθηκε το fitnet νευρωνικό δίκτυο για μια μερική φόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.23-3.24. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα το ρεύμα φόρτισης είχε μικρότερη διακύμανση. Δεν παίρνει ακραίες τιμές όπως στο παράδειγμα 1. Παρατηρούμε ότι η προσαρμογή των δεδομένων είναι καλύτερη. Το μέσο σφάλμα εκτίμησης είναι 0.0207 και η διακύμανση των τιμών είναι αρκετά μικρή, 0.0107. Στην εικόνα 3.24 εικονίζεται το σφάλμα μεταξύ των παρατηρούμενων τιμών του SOC από το νευρωνικό και της εξόδου από το μοντέλο μπαταρίας.



Εικόνα 3.23 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια μερική φόρτιση. Με κόκκινο είναι η έξοδος του fitnet και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας.

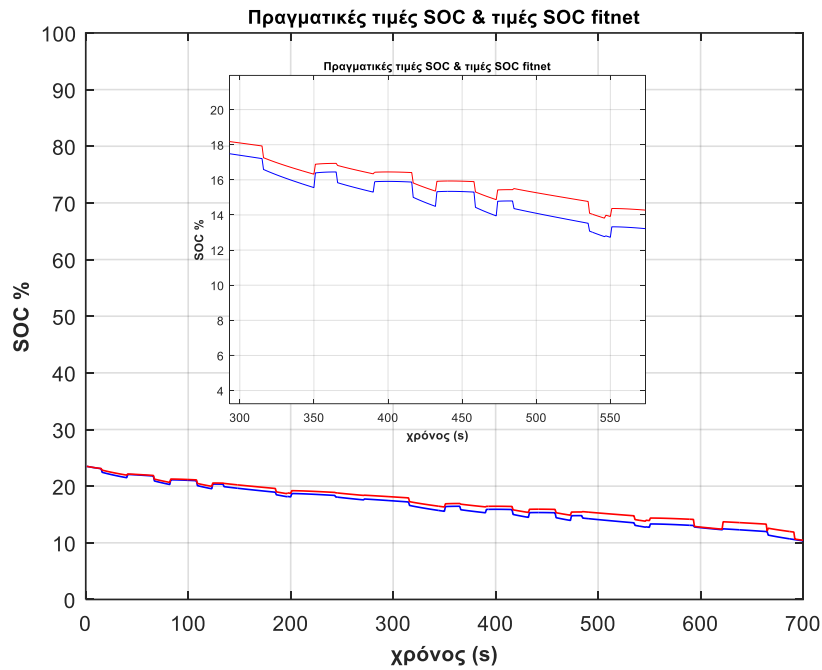


Εικόνα 3.24 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή SOC.

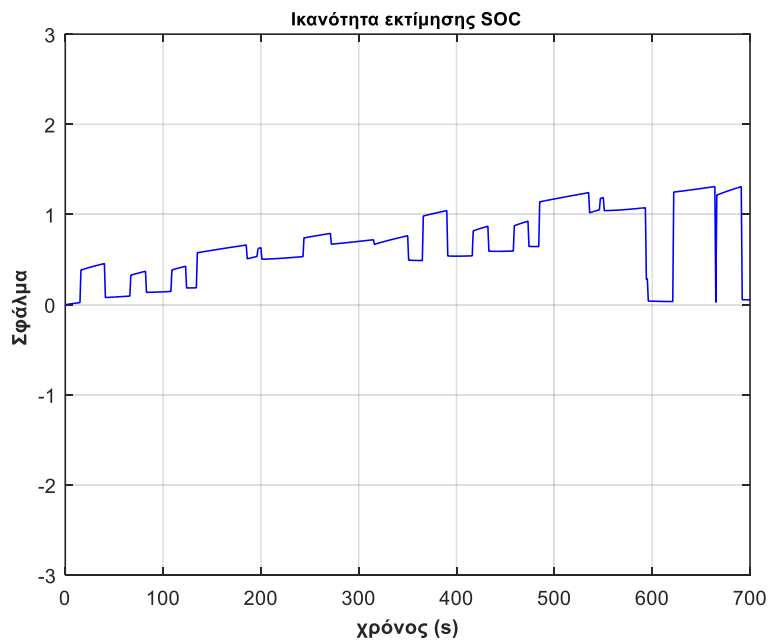
3^ο Παράδειγμα

Στο τρίτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το fitnet νευρωνικό δίκτυο για μια αρκετά μικρή εκφόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.25-3.26. Το fitnet νευρωνικό

φαίνεται να μην ανταποκρίνεται καλά σε μια εκφόρτιση με απότομη αλλαγή ρεύματος. Ωστόσο το σφάλμα παραμένει μικρό στο 0.6070 ενώ η διακύμανση είναι 0.1418.



Εικόνα 3.25 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια μικρή εκφόρτιση. Με κόκκινο είναι η έξοδος του fitnet και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας

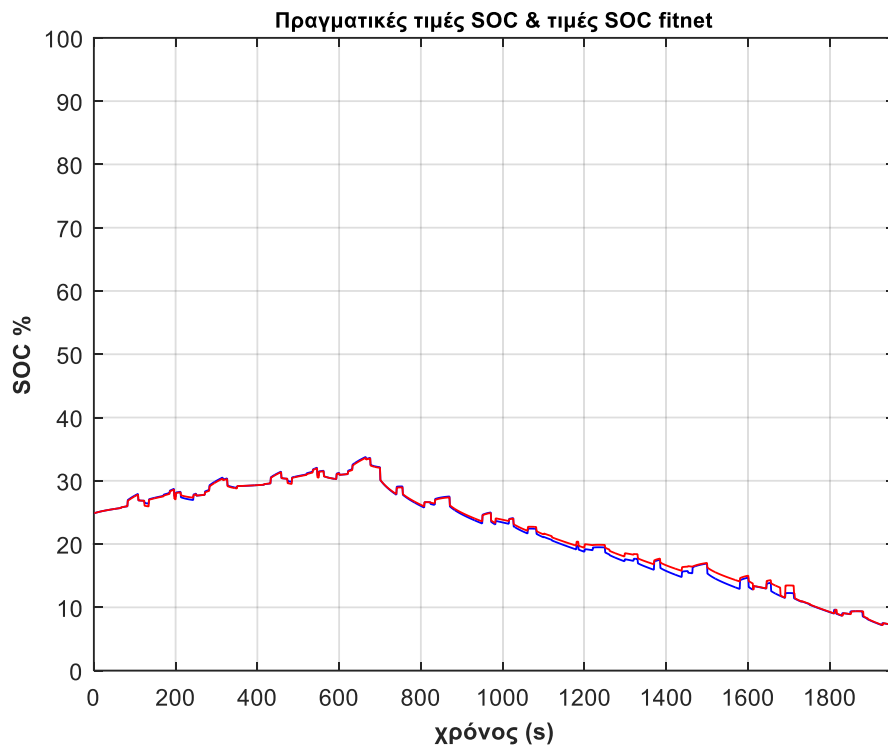


Εικόνα 3.26 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή SOC

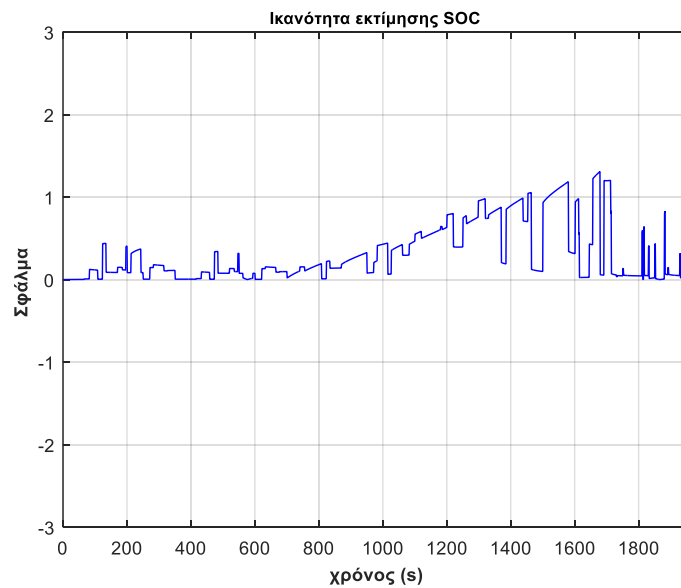
Παράδειγμα 4°

Στο πέμπτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το fitnet νευρωνικό δίκτυο για μια φόρτιση και εκφόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.27-3.28. Η προσαρμογή των δεδομένων είναι αρκετά καλή. Το μέσο τετραγωνικό σφάλμα είναι 0.2117 και η διακύμανση των τιμών είναι 0.1570. Παρατηρούμε πάλι την αδυναμία ανταπόκρισης σε μεγάλες

διακυμάνσεις ρεύματος. Το ρεύμα εκφόρτισης για την περίοδο από 1000s μέχρι 1450s παίρνει τιμές από 0.5A μέχρι 2A. Τόσο ακραίες μεταβολές ωστόσο δεν παρατηρούνται στην πραγματικότητα.



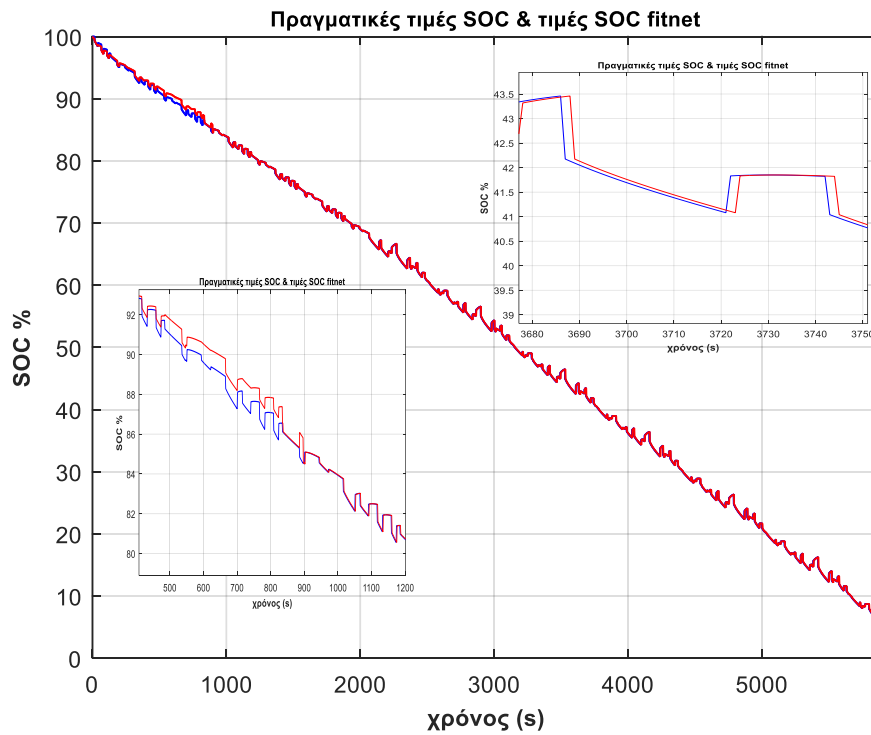
Εικόνα 3.27 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια φόρτιση και εκφόρτιση. Με κόκκινο είναι η έξοδος του fitnet και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



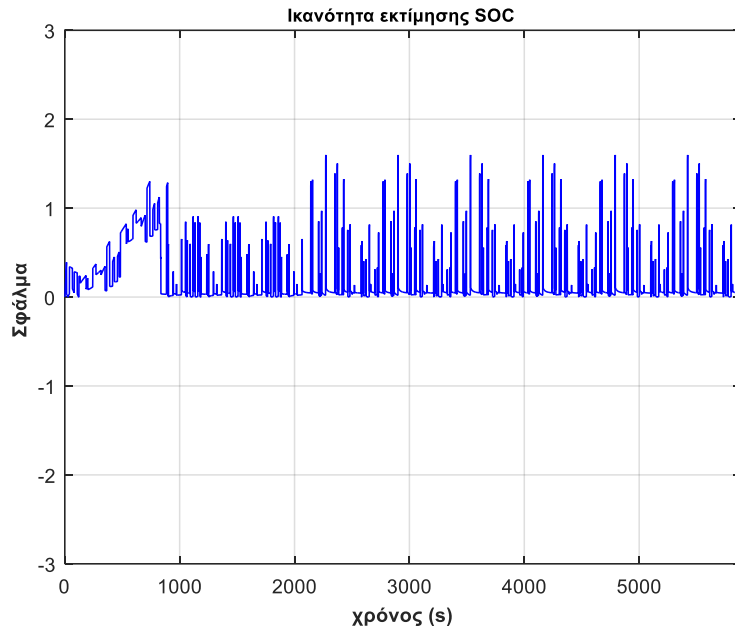
Εικόνα 3.28 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή SOC

Παράδειγμα 5°

Στο πέμπτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το fitnet νευρωνικό δίκτυο για μια εκφόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.29-3.30. Στην παρακάτω εικόνα 3.29 απεικονίζεται μια πλήρης εκφόρτιση και σε αυτή την περίπτωση το νευρωνικό δίκτυο ανταποκρίνεται αρκετά καλά με το μέσο τετραγωνικό σφάλμα να παίρνει τιμή 0.0958. Το νευρωνικό δίκτυο ανταποκρίνεται στις μεταβολές του SOC με μια ένδειξη όμως υψηλότερη από το πραγματικό.



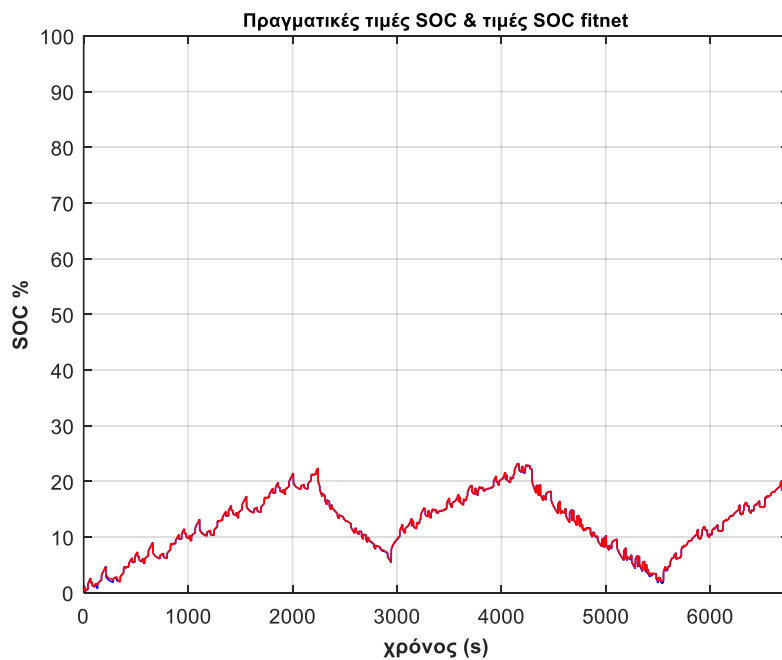
Εικόνα 3.29 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια εκφόρτιση με διαφορετικά ρεύματα. Με κόκκινο είναι η έξοδος του fitnet και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



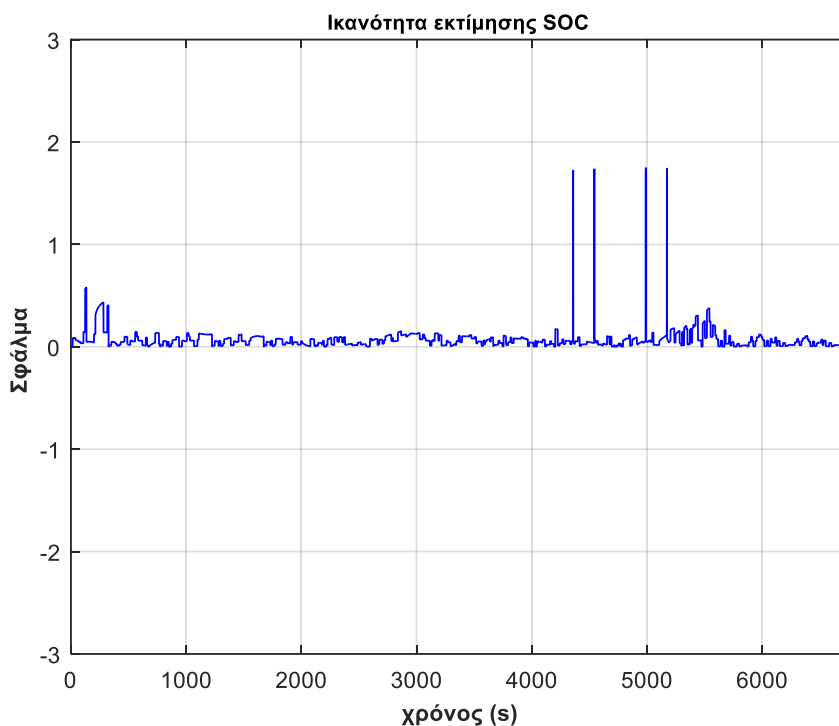
Εικόνα 3.30 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή SOC

Παράδειγμα 6^ο

Στο έκτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το fitnet νευρωνικό δίκτυο για μερικές φόρτισεις και εκφόρτισεις. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.31-3.32. Το μέσο τετραγωνικό σφάλμα υπολογίστηκε 0.0117.



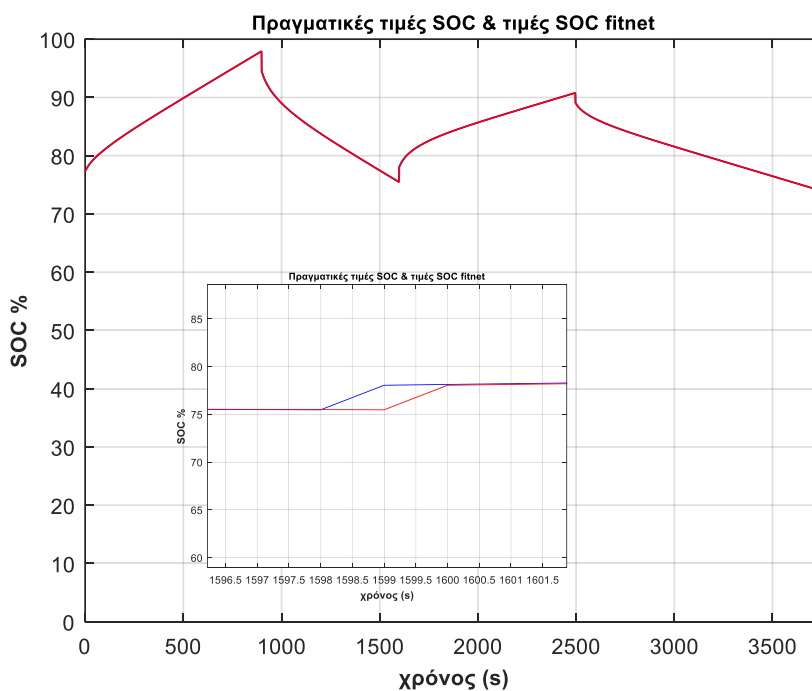
Εικόνα 3.31 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για φορτίσεις και εκφορτίσεις. Με κόκκινο είναι η έξοδος του fitnet και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



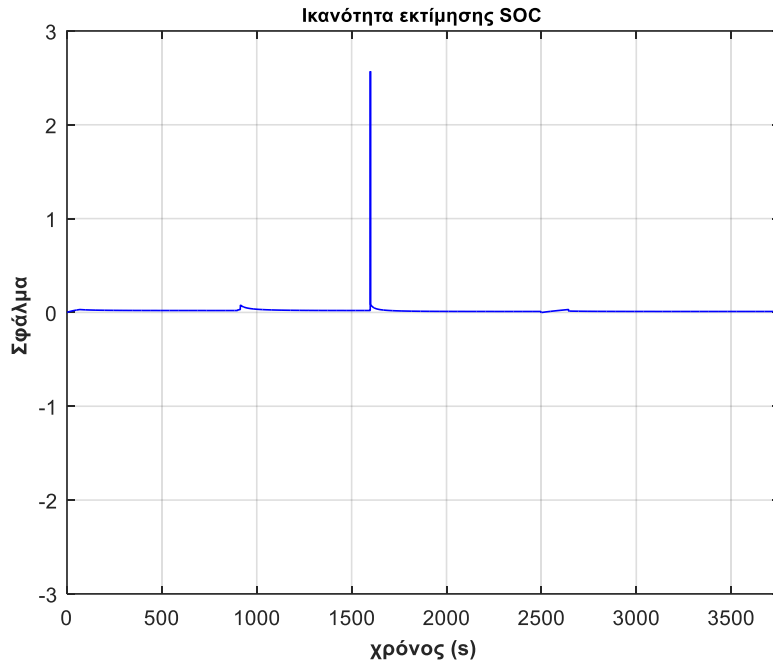
Εικόνα 3.32 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή SOC

Παράδειγμα 7^ο

Στο παράδειγμα αυτό απεικονίζεται η κατάσταση φόρτισης, που αντιστοιχεί σε πιο σταθερά ρεύματα. Στην περίπτωση αυτή η προσαρμογή είναι ακόμη καλύτερη και το μέσο τετραγωνικό σφάλμα είναι 0.0021.



Εικόνα 3.33 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για ομαλές φορτίσεις και εκφορτίσεις. Με κόκκινο είναι η έξοδος του fitnet και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



Εικόνα 3.35 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή SOC

Στον παρακάτω πίνακα 3.2 φαίνονται τα συγκεντρωτικά αποτελέσματα του FFBP νευρωνικού δικτύου. Για κάθε ένα από τα προηγούμενα παραδείγματα, έχουν καταγραφεί το μέσο τετραγωνικό σφάλμα, το κανονικοποιημένο, το απόλυτο σφάλμα και η διακύμανση. Τα στοιχεία αυτά θα αποτελέσουν κριτήριο αξιολόγησης και των δύο νευρωνικών δικτύων.

Παραδείγματα	MSE	NMSE	MAE	VAR
1 ^ο	0.4104	7.2009	0.6254	0.0234
2 ^ο	0.0207	0.0400	0.1080	0.0107
3 ^ο	0.6070	2.5973	0.6821	0.1418
4 ^ο	0.2117	0.2854	0.3040	0.1570
5 ^ο	0.1378	0.1419	0.2251	0.1337
6 ^ο	0.0117	0.0131	0.0657	0.0104
7 ^ο	0.0021	0.0021	0.0177	0.0021

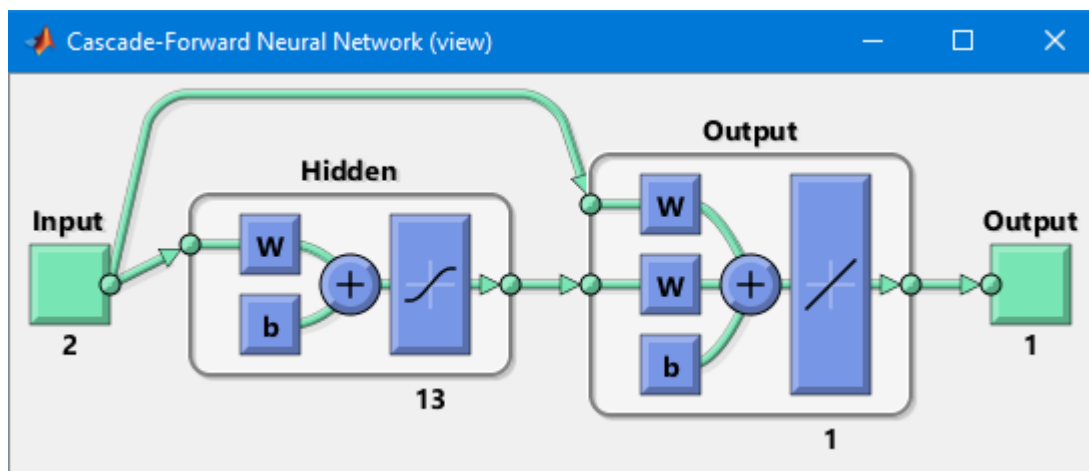
Πίνακας 3.2 Συγκεντρωτικός πίνακας σφαλμάτων για κάθε παράδειγμα

3.6.2 CASCADE FORWARD BACK PROPAGATION ΝΕΥΡΩΝΙΚΟ

Το cascade νευρωνικό δίκτυο υλοποιήθηκε με την εντολή *cascadeforwardnet* της MATLAB. Όπως και στο *fitnet* νευρωνικό έτσι και εδώ, το cascade εκπαιδεύτηκε με διαφορετικό αριθμό νευρώνων ώστε να είναι εμφανής η διαφορά των δύο δικτύων. Η τελική μορφή που πήρε το δίκτυο είναι 2-13-1 όπως φαίνεται και στην παρακάτω εικόνα 3.36. Όπως και με τα δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης ένα σειριακό νευρωνικό δίκτυο μπορεί να μάθει οποιαδήποτε πεπερασμένη σχέση μεταξύ εισόδου-εξόδου αυθαίρετα, όταν δίνεται επαρκής αριθμός νευρώνων στο κρυφό επίπεδο. Λόγω του μεγάλου όγκου των δεδομένων που χρησιμοποιήθηκαν για να εκπαιδευτεί το νευρωνικό δίκτυο, ο αριθμός εποχών ήταν 1000.

Ωστόσο λόγω της διαφορετικής δομής του δικτύου για την εκπαίδευση του νευρωνικού cascade ακολουθήθηκε μια διαφορετική διαδικασία. Στόχος είναι και τα δύο νευρωνικά δίκτυα να είναι εφικτό να γενικεύουν με ακρίβεια.

Αρχικά έγινε αλλαγή στο διαχωρισμό δεδομένων. Επειδή τα δεδομένα εκπαίδευσης είναι ήδη αρκετά και η πιθανότητα το νευρωνικό δίκτυο να απομνημονεύσει τις εξόδους είναι μεγάλη, ο διαχωρισμός των δεδομένων εισόδου του cascade νευρωνικού γίνεται διαφορετικά. Τα δεδομένα εισόδου χωρίζονται σε δεδομένα εκπαίδευσης, που χρησιμοποιούνται για την προσαρμογή των βαρών. Σε δεδομένα επαλήθευσης (validation set), τα οποία χρησιμοποιούνται για την επιλογή παραμέτρων. Δηλαδή, με βάση τα δεδομένα αυτά υπολογίζονται οι παράμετροι που θα σταματήσουν την εκπαίδευση, για παράδειγμα αν αλλάζει η κλίση για να επιτευχθεί σύγκλιση. Τέλος έχουμε τα δεδομένα ελέγχου (test set), τα οποία είναι ανεξάρτητα από τα δύο προηγούμενα και χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της απόδοσης του νευρωνικού. Πρόκειται ουσιαστικά για τον έλεγχο που κάνει το νευρωνικό δίκτυο μεταξύ της εξόδου που δίνει ο χρήστης και της εξόδου που παράγει το νευρωνικό, για να επιβεβαιώσει την ικανότητα πρόβλεψης. Έτσι τα δεδομένα εισόδου χωρίστηκαν σε 60% για εκπαίδευση (training set), 15% δεδομένα επαλήθευσης (validation set), 25% δεδομένα ελέγχου (test set).



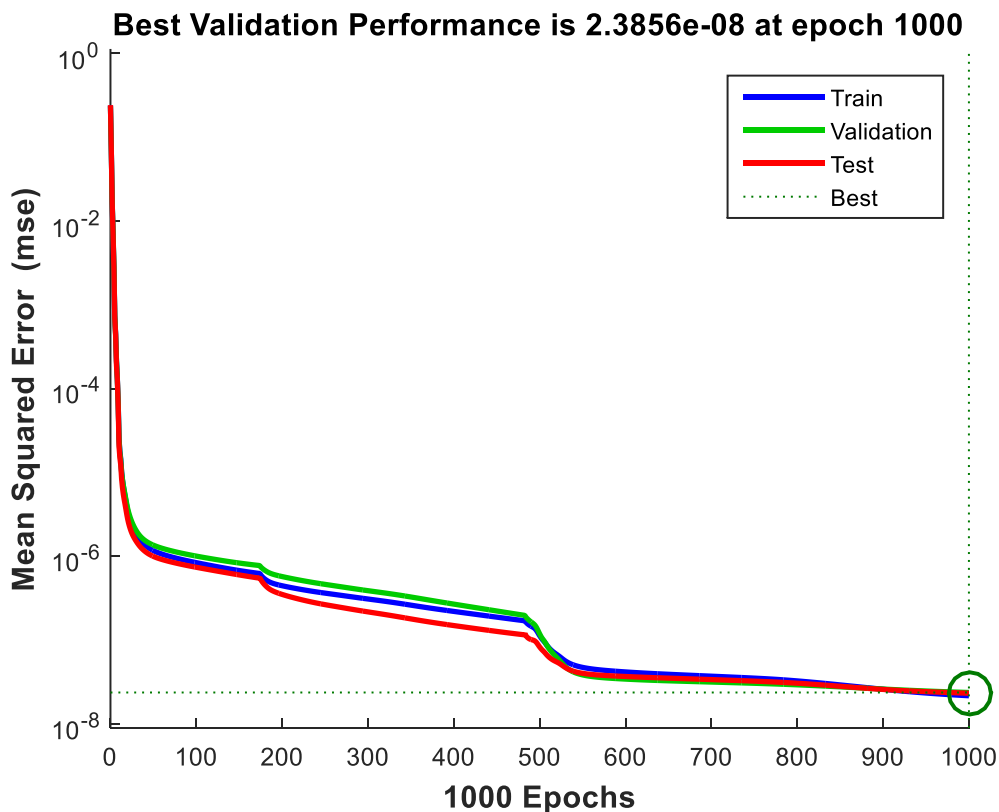
Εικόνα 3.36 Cascade forward BP νευρωνικό δίκτυο

Στον παρακάτω πίνακα δίνονται τα στατιστικά στοιχεία απόδοσης του cascade νευρωνικού δικτύου για διαφορετικό αριθμό νευρώνων.

Νευρώνες	Performance	NMSE	MAE	R^2	χρόνος
6	2.1254e-06	2.7896e-05	6.8214e-04	1	3.15min
7	4.1456e-07	6.7412e-06	2.1269e-04	1	3.19min
8	4.1236e-07	6.5698e-06	2.5879e-04	1	3.26min
9	4.4589e-07	6.7896e-06	2.4568e-04	1	3.27min
10	3.69875e-07	4.5467e-06	2.0236e-04	1	3.48 min
11	6.7859e-07	8.4587e-06	4.5569e-04	1	4.49 min
12	3.6987e-07	4.7824e-06	2.1569e-04	1	4.51min
13	2.3856e-08	3.1925e-07	1.7589e-05	1	4.55min

Πίνακας 3.3 Απόδοση του αλγορίθμου Cascade για την εκτίμηση του SOC

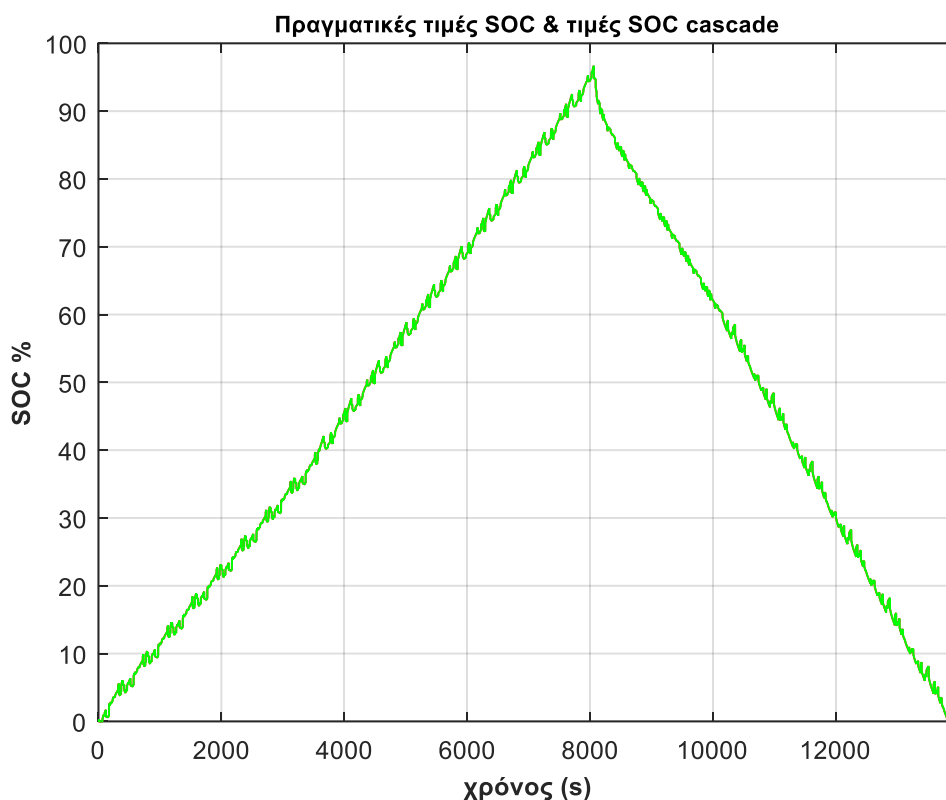
Το δίκτυο κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης φτάνει το μέγιστο αριθμό των επαναλήψεων (MAX_EPOCHS is reached).



Εικόνα 3.37 Απόδοση cascade νευρωνικού δικτύου

Όπως φαίνεται από την εικόνα 3.37 το δίκτυο συγκλίνει γρήγορα μετά από περίπου 10 βήματα εκπαίδευσης. Χρειάζεται ωστόσο να εξαντλήσει το όριο κύκλων εκπαίδευσης (1000), γεγονός που σημαίνει ότι ούτε και αυτό φτάνει την ελάχιστη κλίση. Παρατηρούμε ότι τα δεδομένα εκπαίδευσης και τα δεδομένα ελέγχου συγκλίνουν αρκετά καλά.

Στην παρακάτω εικόνα 3.38 φαίνεται το αποτέλεσμα της εκπαίδευσης. Με πράσινο χρώμα είναι η έξοδος του νευρωνικού και με κόκκινο χρώμα η έξοδος του μοντέλου μπαταρίας. Η εκπαίδευση περιλάμβανε τα ίδια δεδομένα με το fitnet. Η ικανότητα γενίκευσης του νευρωνικού θα κρίνει κατά πόσο το εύρος των δεδομένων εισόδου ήταν ικανοποιητικό.

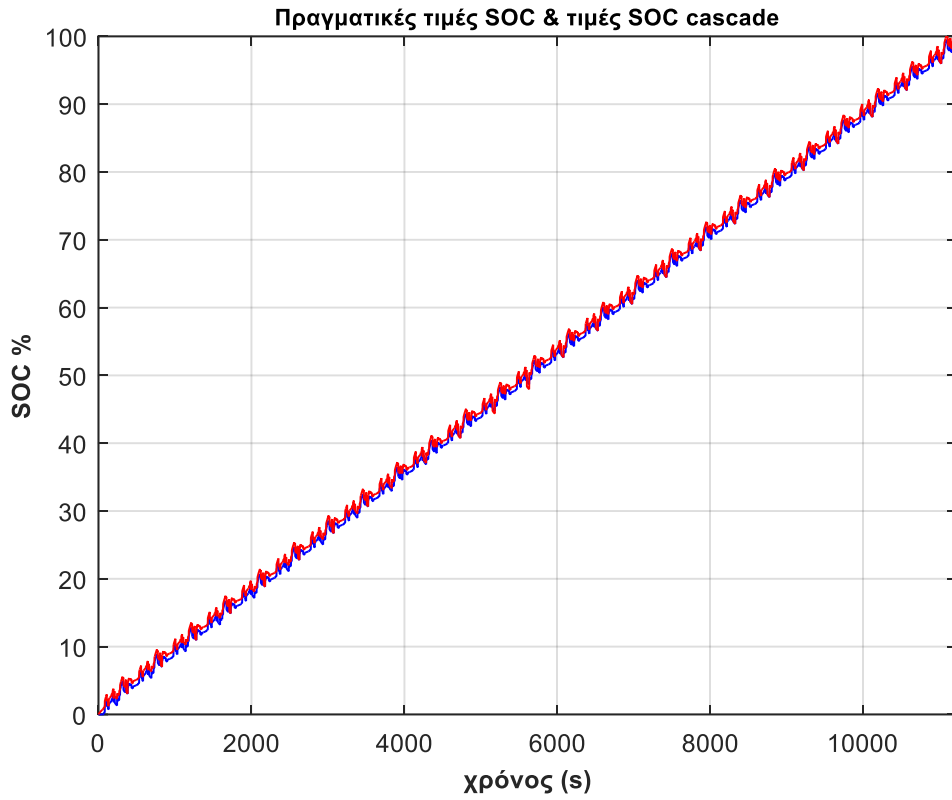


Εικόνα 3.38 Αποτέλεσμα εκπαίδευσης cascade νευρωνικού

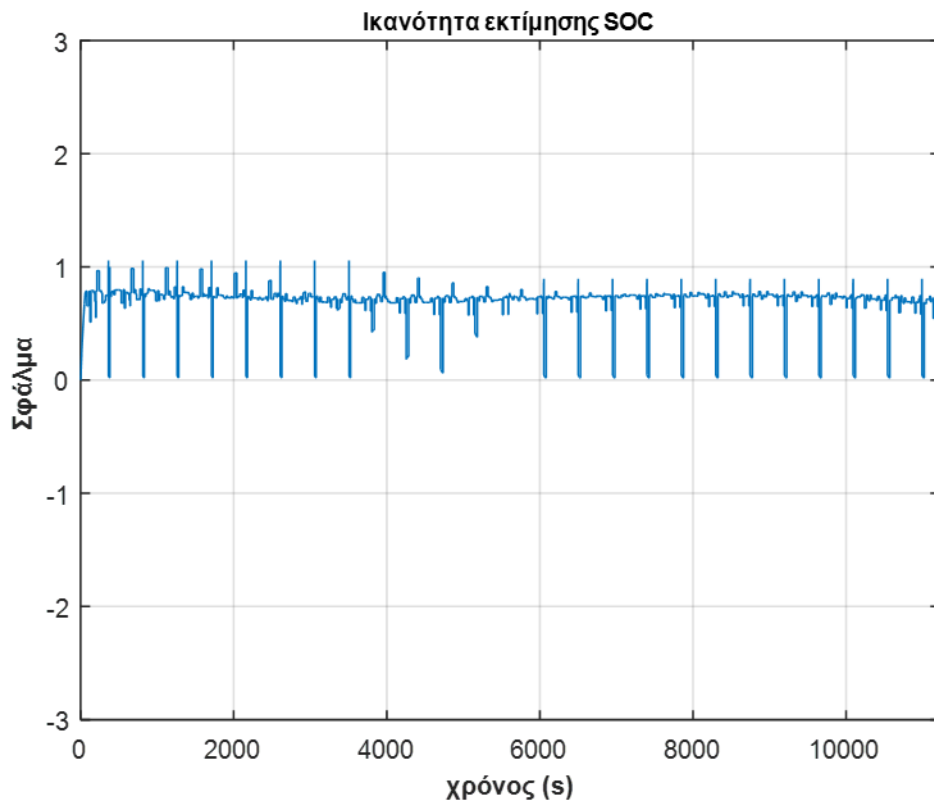
Παρακάτω υλοποιούνται τα επτά παραδείγματα που υλοποιήθηκαν και για το fitnet νευρωνικό. Τα ίδια νέα δεδομένα δίνονται ως είσοδος στο cascade για να εξεταστεί η ικανότητα γενίκευσής του.

1° Παράδειγμα

Στο πρώτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το cascade νευρωνικό δίκτυο για μια πλήρη φόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.39-3.40. Παρατηρούμε ότι η προσαρμογή είναι ικανοποιητικά καλή όσον αφορά την γραφική παράσταση των εκτιμώμενων τιμών και των τιμών του SOC από το μοντέλο μπαταρίας. Το μέσο τετραγωνικό σφάλμα καθώς και το απόλυτο είναι μικρότερα από τα αντίστοιχα του fitnet, ωστόσο η διακύμανση των σφαλμάτων είναι κατά κάποιο ποσοστό μεγαλύτερη.



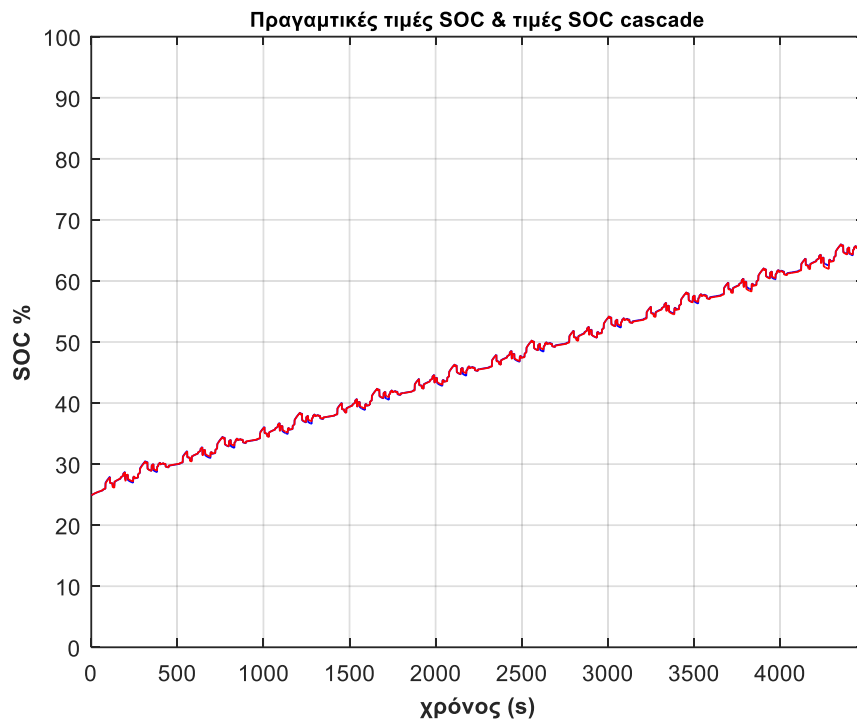
Εικόνα 3.39 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια πλήρη φόρτιση. Με κόκκινο είναι η έξοδος του cascade και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



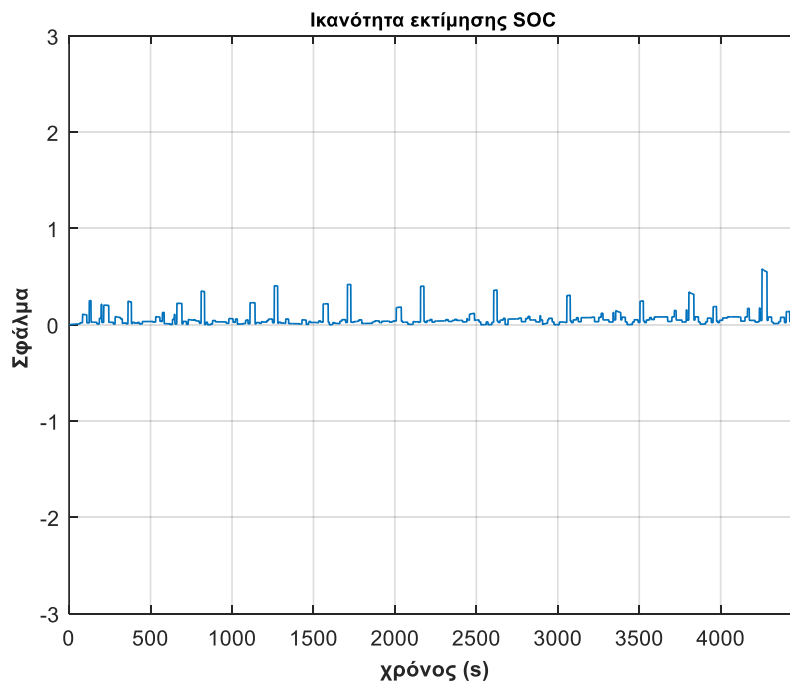
Εικόνα 3.40 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή SOC

Παράδειγμα 2^ο

Στο δεύτερο παράδειγμα υλοποιήθηκε το cascade νευρωνικό δίκτυο για μια μερική φόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.41-3.42.



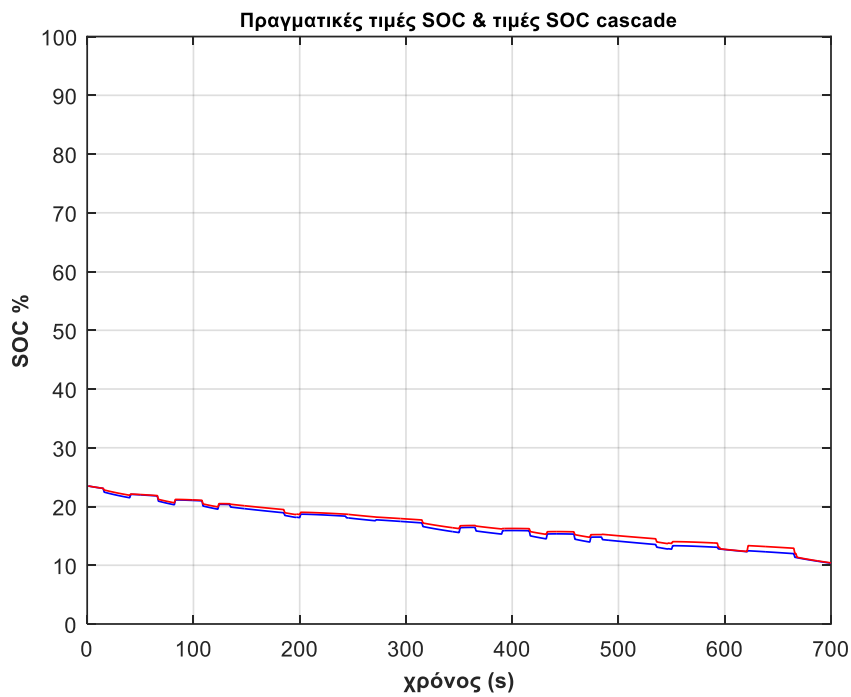
Εικόνα 3.41 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια μερική φόρτιση. Με κόκκινο είναι η έξοδος του cascade και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



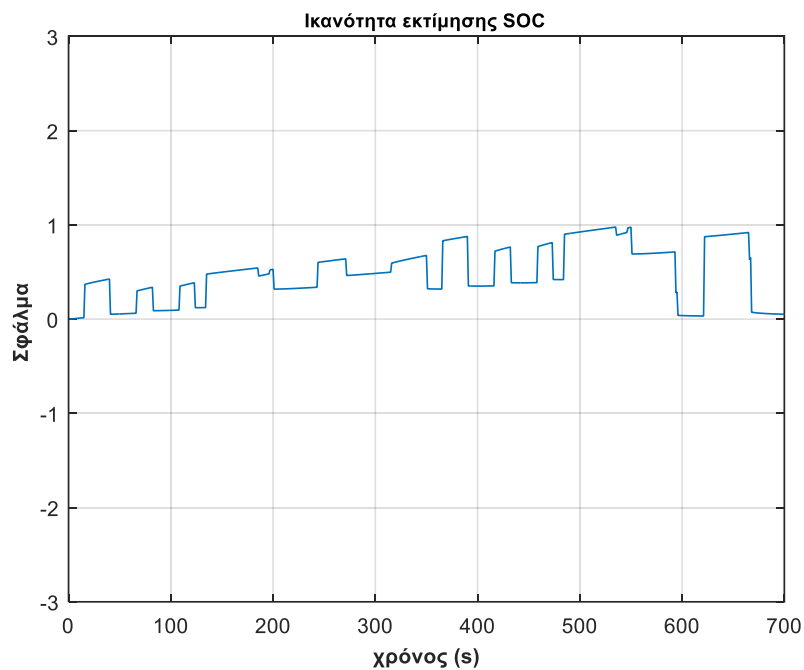
Εικόνα 3.42 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή SOC

Παράδειγμα 3^ο

Στο τρίτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το cascade νευρωνικό δίκτυο για μια μερική εκφόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.43-3.44.



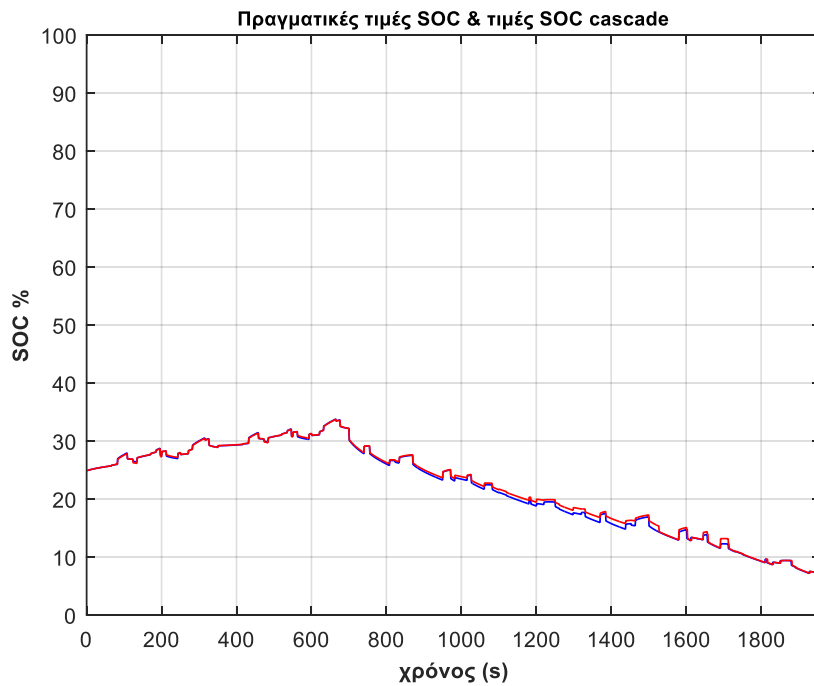
Εικόνα 3.43 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια μερική εκφόρτιση. Με κόκκινο είναι η έξοδος του cascade και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



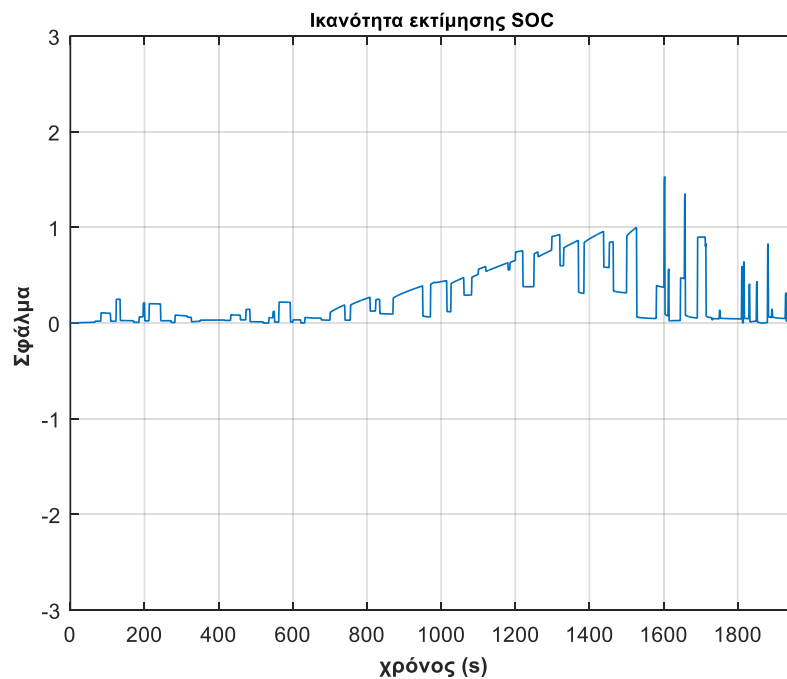
Εικόνα 3.44 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή

Παράδειγμα4°

Στο τέταρτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το cascade νευρωνικό δίκτυο για μια μερική φόρτιση και εκφόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.45-3.46.



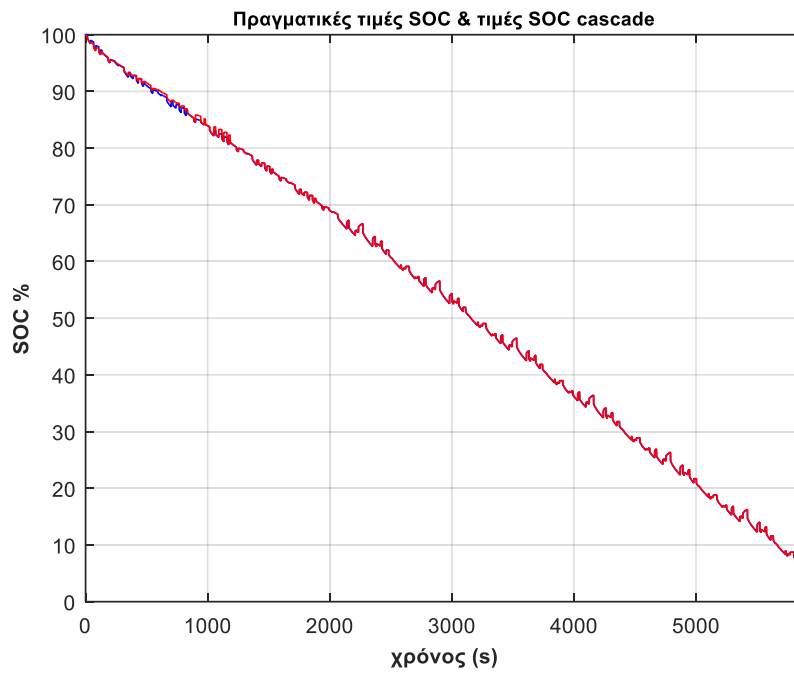
Εικόνα 3.45 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια μερική φόρτιση και εκφόρτιση. Με κόκκινο είναι η έξοδος του cascade και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



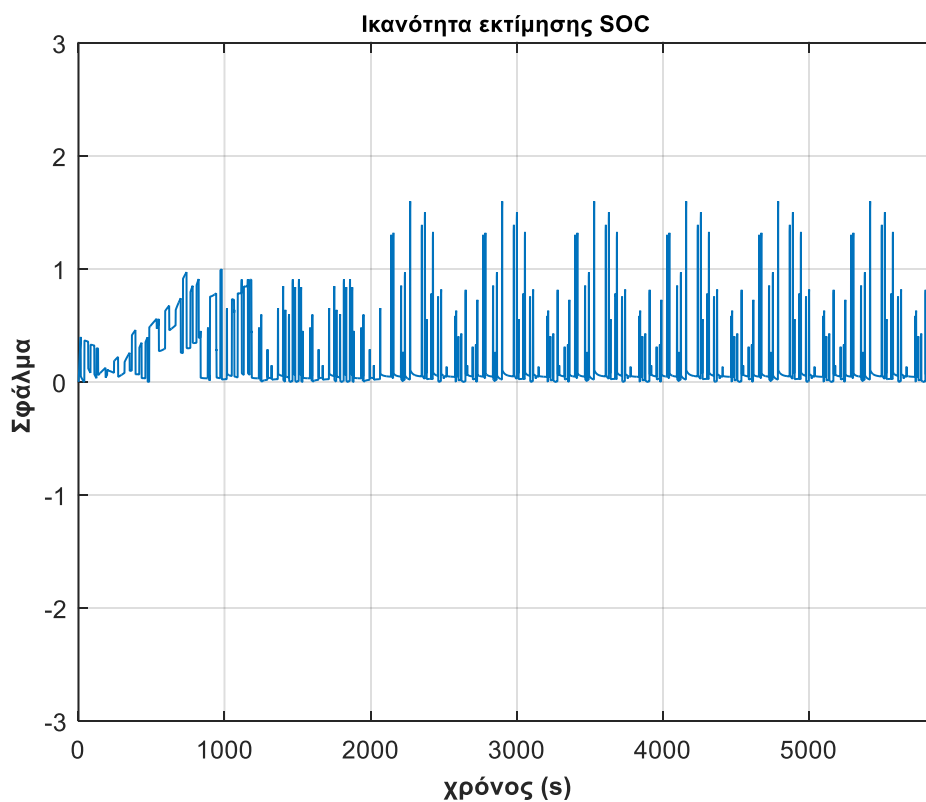
Εικόνα 3.46 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή

Παράδειγμα5°

Στο πέμπτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το cascade νευρωνικό δίκτυο για μια πλήρη εκφόρτιση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.47-3.48.



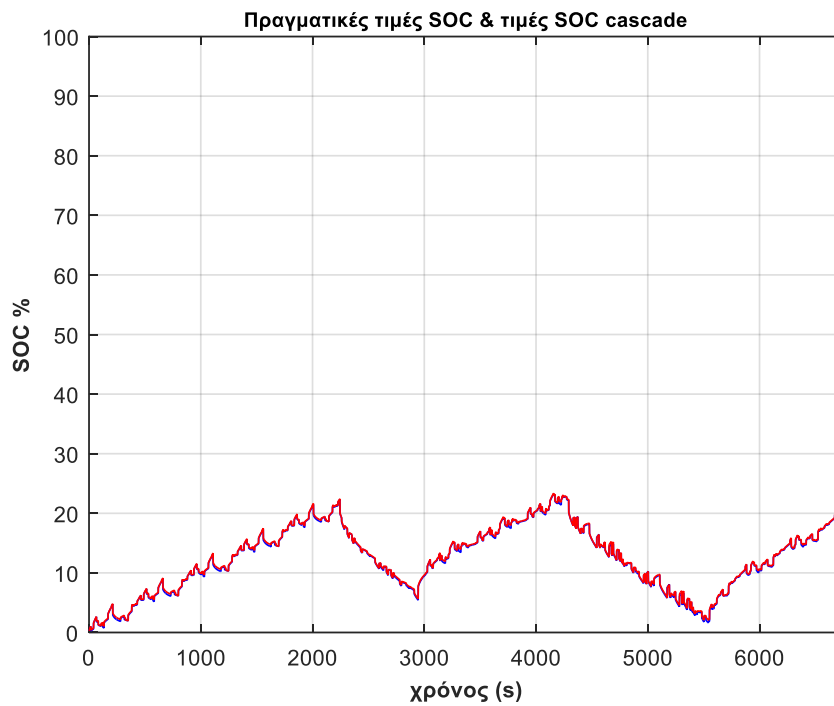
Εικόνα 3.47 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μια πλήρη εκφόρτιση. Με κόκκινο είναι η έξοδος του cascade και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



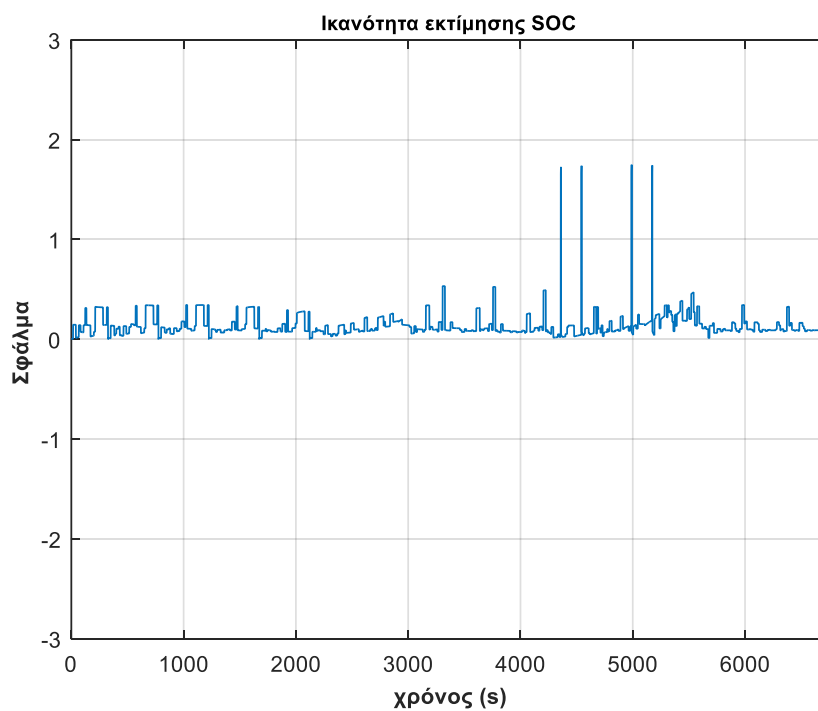
Εικόνα 3.48 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή

Παράδειγμα 6°

Στο έκτο παράδειγμα υλοποιήθηκε το cascade νευρωνικό δίκτυο για μερικές φορτίσεις και εκφορτίσεις. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.49-3.50.



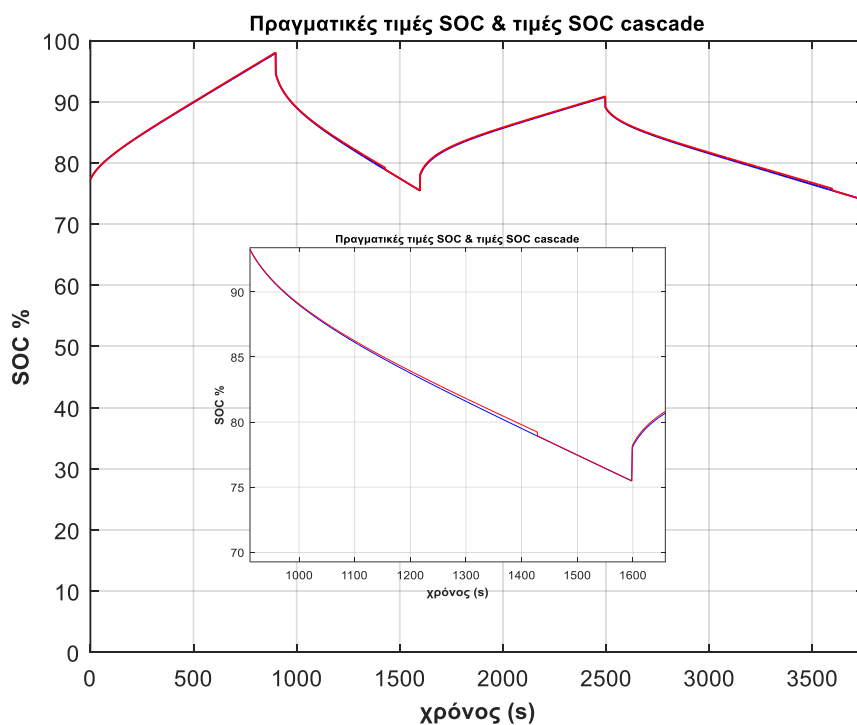
Εικόνα 3.49 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για μερικές φορτίσεις και εκφορτίσεις. Με κόκκινο είναι η έξοδος του cascade και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



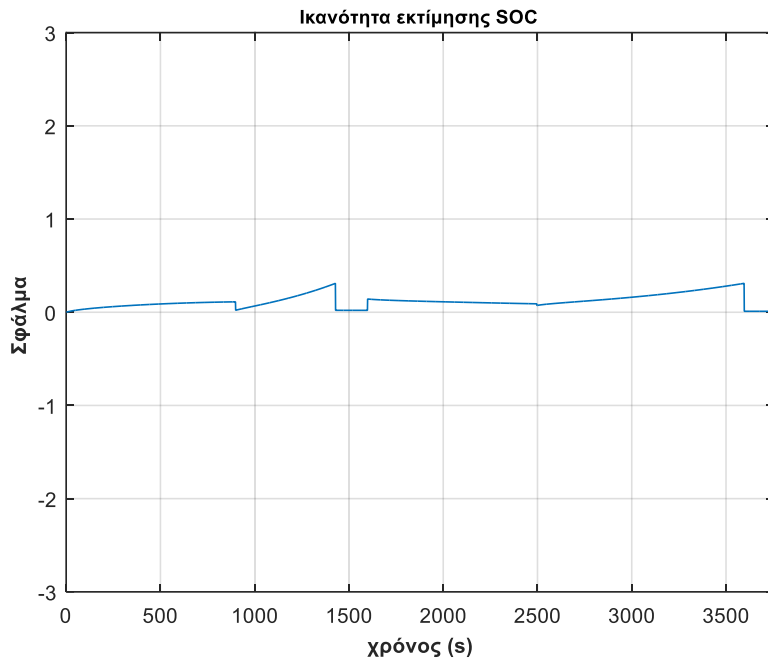
Εικόνα 3.50 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή

Παράδειγμα 7^ο

Στο έβδομο παράδειγμα υλοποιήθηκε το cascade νευρωνικό δίκτυο για ομαλές φορτίσεις και εκφορτίσεις. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στις εικόνες 3.51-3.52. Όπως φαίνεται η προσαρμογή των δεδομένων είναι αρκετά καλή. Η ακρίβεια προσέγγισης για σταθερά ρεύματα είναι μεγαλύτερη.



Εικόνα 3.51 Ικανότητα εκτίμησης νευρωνικού για ομαλές φορτίσεις και εκφορτίσεις. Με κόκκινο είναι η έξοδος του cascade και με μπλε το SOC από το μοντέλο μπαταρίας



Εικόνα 3.52 Γραφική παράσταση σφαλμάτων. Η διαφορά δηλαδή εκτιμώμενης από πραγματική τιμή

Στον παρακάτω πίνακα φαίνονται τα συγκεντρωτικά αποτελέσματα του cascade νευρωνικού δικτύου. Για κάθε ένα από τα προηγούμενα παραδείγματα, έχουν καταγραφεί το μέσο τετραγωνικό σφάλμα και το κανονικοποιημένο. Ταυτόχρονα σαν κριτήριο ικανότητας γενίκευσης προστέθηκε και η διασπορά (var). Τα στοιχεία αυτά θα αποτελέσουν κριτήριο αξιολόγησης για την σύγκριση των νευρωνικών δικτύων.

Παράδειγματα	MSE	NMSE	MAE	VAR
1 ^ο	0.5493	4.3095	0.7241	0.0700
2 ^ο	0.0116	0.0117	0.0646	0.0115
3 ^ο	0.4306	2.0376	0.5828	0.0910
4 ^ο	0.2579	0.4360	0.3466	0.1525
5 ^ο	0.0530	0.0549	0.1045	0.0511
6 ^ο	0.0299	0.0706	0.1363	0.0126
7 ^ο	0.0308	0.1142	0.1500	0.0083

Πίνακας 3.4 Συγκεντρωτικός πίνακας σφαλμάτων για κάθε παράδειγμα.

3.7 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΩΝ ΤΥΠΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Οι πίνακες 3.3 και 3.4 δείχνουν τα αποτελέσματα των μοντέλων βασισμένα στο μέσο τετραγωνικό σφάλμα (MSE), στο κανονικοποιημένο μέσο τετραγωνικό σφάλμα (NMSE), στο απόλυτο τετραγωνικό σφάλμα και την διακύμανση των δεδομένων, για την προσομοίωση με καινούριες εισόδους, που δεν χρησιμοποιήθηκαν στην εκπαίδευση. Τα στατιστικά σφάλματα δείχνουν την απόκλιση των εκτιμώμενων τιμών SOC από τις πραγματικές τιμές του μοντέλου μπαταρίας. Η δομή του δικτύου fitnet έχει δομή 2-12-1, ενώ του cascade έχει δομή 2-13-2. Με αυτά τα χαρακτηριστικά καθένα από τα δίκτυα παρουσίασε καλύτερη απόδοση. Τροποποιήθηκαν τα δεδομένα εισόδου του cascade για την βέλτιστη εκπαίδευση του. Όταν

ένα δίκτυο χρησιμοποιεί ακόμη και τους νευρώνες του εσωτερικού του επιπέδου σαν εισόδους, αυτό έχει σαν αποτέλεσμα πολλά από τα δεδομένα εκπαίδευσης να είναι τα ίδια. Το σφάλμα φαίνεται να μειώνεται, αλλά ουσιαστικά το νευρωνικό δεν εκπαιδεύεται αλλά μιμείται μια συμπεριφορά. Για το λόγο αυτό τα δεδομένα χωρίστηκαν. Έτσι γνωρίζουμε ανεξάρτητα με το σφάλμα στα δεδομένα εκπαίδευσης την συμπεριφορά του σφάλματος και στα δεδομένα επαλήθευσης.

Η μελέτη έγινε για διαφορετικές εκφορτίσεις και φορτίσεις σε διαφορετικούς χρόνους, δηλαδή με ρεύμα και τάση που το νευρωνικό δίκτυο αντιμετώπιζε για πρώτη φορά.

Όπως φαίνεται και από τους πίνακες οι διαφορές μεταξύ των νευρωνικών δικτύων είναι αρκετά μικρές. Σε πιο ακραίες τιμές των μεταβλητών εισόδου το δίκτυο cascade φαίνεται να έχει καλύτερη προσαρμογή. Παρόλα αυτά σε πιο ομαλά προφίλ φόρτισης εκφόρτισης (παράδειγμα 7) το fitnet νευρωνικό δίκτυο είχε πολύ μικρότερο σφάλμα σε σχέση με το cascade.

Παρόλα αυτά η εκπαίδευση του νευρωνικού cascade ήταν χρονοβόρα τόσο από άποψη διάρκειας εκπαίδευσης (4.55 min) σε σύγκριση με το fitnet (3.50 min), όσο και από άποψη προετοιμασίας των δεδομένων. Η MATLAB παρέχει την δυνατότητα εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων μέσω έτοιμων συναρτήσεων που υλοποιούν τα περισσότερα προβλήματα. Ωστόσο για την προσαρμογή του cascade χρειάστηκε παραπάνω διαδικασία προσαρμογής παραμέτρων, έτσι ώστε να βελτιωθεί η απόδοσή του.

FITNET νευρωνικό δίκτυο				
Παραδείγματα	MSE	NMSE	MAE	VAR
1°	0.4104	7.2009	0.6254	0.0234
2°	0.0207	0.0400	0.1080	0.0107
3°	0.6070	2.5973	0.6821	0.1418
4°	0.2117	0.2854	0.3040	0.1570
5°	0.1378	0.1419	0.2251	0.1337
6° √	0.0117	0.0131	0.0657	0.0104
7° √	0.0021	0.0021	0.0177	0.0021
CASCADE νευρωνικό δίκτυο				
Παραδείγματα	MSE	NMSE	MAE	VAR
1° ×	0.5493	4.3095	0.7241	0.0700
2° ×	0.0116	0.0117	0.0646	0.0115
3° ×	0.4306	2.0376	0.5828	0.0910
4° ×	0.2579	0.4360	0.3466	0.1525
5° ×	0.0530	0.0549	0.1045	0.0511
6°	0.0299	0.0706	0.1363	0.0126
7°	0.0308	0.1142	0.1500	0.0083

Πίνακας 3.5 Συγκριτικός πίνακας απόδοσης του fitnet (επάνω πίνακας) και του cascade (κάτω πίνακας). Με το σύμβολο √ επισημαίνεται ότι το fitnet νευρωνικό για το συγκεκριμένο παράδειγμα είχε καλύτερη ικανότητα εκτίμησης. Με το σύμβολο × επισημαίνεται το παράδειγμα που το cascade νευρωνικό είχε καλύτερη ικανότητα εκτίμησης του SOC.

Κεφάλαιο 4^ο

4.1 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στο σημείο αυτό θα εξαχθούν συμπεράσματα σχετικά με το προτεινόμενο μοντέλο και την εφαρμογή του. Στη συνέχεια, θα παρουσιαστούν οι προοπτικές που ανακύπτουν για μελλοντική χρήση και βελτίωση του παραπάνω μοντέλου.

Η μπαταρία που μελετήθηκε έχει υλικό καθόδου $LiFePO_4$ και υλικό ανόδου τον γραφίτη άνθρακα. Η ονομαστική χωρητικότητα της είναι 3Ah, ενώ σήμερα, βρίσκει εφαρμογή σε ηλεκτρικά αυτοκίνητα και συστήματα εφεδρικής παροχής ενέργειας. Στη συγκεκριμένη διπλωματική εργασία μοντελοποιήθηκε ένα κελί.

- Αρχικό συμπέρασμα αποτελεί η μεγάλη σημασία ανάπτυξης ενός ηλεκτροχημικού μοντέλου μπαταρίας. Είναι ικανό να περιγράψει με τον καλύτερο δυνατό τρόπο τα ηλεκτροχημικά φαινόμενα που συμβαίνουν στο εσωτερικό της μπαταρίας και επηρεάζουν άμεσα την κατάσταση φόρτισης της. Σαν αποτέλεσμα έχουμε τον υπολογισμό του SOC, ως έξοδος του μοντέλου, που ανταποκρίνεται αρκετά καλά σε πραγματικά δεδομένα.
- Η χρήση του παραπάνω μοντέλου διευκολύνεται περαιτέρω μέσω της γλώσσας προγραμματισμού MATLAB, η οποία επέτρεψε τη σαφή διατύπωση των μαθηματικών εξισώσεων που περιγράφουν την λειτουργία της μπαταρίας σε μικροσκοπικό επίπεδο. Συνεπώς λαμβάνοντας υπόψιν την ευελιξία χειρισμού της γλώσσας αυτής, εξάγεται το συμπέρασμα ότι το μοντέλο που διατυπώθηκε μπορεί να τροποποιηθεί κατάλληλα και να χρησιμοποιηθεί σε πληθώρα πραγματικών εφαρμογών.
- Η χρήση των νευρωνικών δικτύων σαν μέθοδος εκτίμησης της κατάστασης φόρτισης της μπαταρίας αποδείχθηκε αποτελεσματική. Η ικανότητα πρόβλεψης του SOC σε νέα δεδομένα διαπιστώθηκε από το μικρό σφάλμα. Τα νευρωνικά δίκτυα δέχονται ως είσοδο ρεύμα και τάση τόσο εκφόρτισης όσο και φόρτισης.
- Η σύγκριση του fitnet και του cascade έδειξε ότι το cascade νευρωνικό δίκτυο ανταποκρίνεται καλύτερα καθώς έχει μικρότερο σφάλμα εκτίμησης μεταξύ των πραγματικών και των εκτιμώμενων τιμών του SOC. Το fitnet νευρωνικό δίκτυο ωστόσο εκπαιδεύεται γρηγορότερα από το cascade και εμφανίζει καλύτερα αποτελέσματα για ομαλό ρεύμα φόρτισης ή εκφόρτισης. Έχει πιο απλή μορφή γεγονός που διευκολύνει περισσότερο την μελέτη του SOC. Αποφεύγεται η πολυπλοκότητα και γίνεται πιο προσιτό για πρακτική εφαρμογή. Τόσο το cascade όσο και το fitnet έχουν πολύ καλή προσαρμογή σε νέα δεδομένα και η εκτίμηση του SOC γίνεται με ικανοποιητικά μικρό σφάλμα.
- Επιλέχθηκαν αρκετά ακραίες τιμές ρεύματος, που θα ανταποκρίνονταν στην πραγματικότητα αν η μπαταρία χρησιμοποιούνταν για εφαρμογές όπως η ρύθμιση

συχνότητας. Έτσι καταφέραμε να δείξουμε την αποτελεσματικότητα του νευρωνικού δικτύου στην εκτίμηση του SOC. Τα αποτελέσματα για ρεύματα που ανταποκρίνονται σε συνθήκες, που η μπαταρία χρησιμοποιείται για εφαρμογές στις οποίες έχουμε πιο ομαλές διακυμάνσεις του SOC (όπως μείωση της αιχμής ζήτησης), το σφάλμα ήταν ακόμη μικρότερο. Αυτό σημαίνει ότι μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ένα από τα δύο προτεινόμενα νευρωνικά δίκτυα για τον έλεγχο του SOC σε ένα σύστημα διαχείρισης μπαταρίας (battery management system).

- Επιλέξαμε τα νευρωνικά δίκτυα καθώς θέλαμε να εκμεταλλευτούμε την ικανότητα τους να προσομοιώνουν μη γραμμικές συμπεριφορές, όπως συμβαίνει μεταξύ του SOC, του ρεύματος και της τάσης. Αποτελούν μια αξιόπιστη μέθοδο εκτίμησης του SOC, καθώς δεν χρειάζεται να γνωρίζουν τίποτα περισσότερο εκτός από το ρεύμα και την τάση του κελιού της μπαταρίας, χωρίς να υπεισέρχονται σε δύσκολους ηλεκτροχημικούς κανόνες.

4.2 ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ-ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΤΑΣΕΙΣ

Η τεχνολογία των ηλεκτρικών και υβριδικών οχημάτων αλλά και των ανανεώσιμων πηγών ενέργειας, προχωράει με ταχύτατους ρυθμούς. Οι μπαταρίες ως το βασικότερο, ίσως, μέσο αποθήκευσης ενέργειας θα πρέπει να έχουν ανάλογο ρυθμό ανάπτυξης για να ανταποκριθούν στις αυξανόμενες απαιτήσεις.

- Το ηλεκτροχημικό μοντέλο επιδέχεται βελτίωση με τον συνυπολογισμό της θερμοκρασίας. Η θερμοκρασία παίζει σημαντικό ρόλο στην ηλεκτροχημική συμπεριφορά του κελιού. Επηρεάζει την ταχύτητα των χημικών αντιδράσεων που συμβαίνουν κατά την ανταλλαγή ιόντων και ηλεκτρονίων και είναι υπεύθυνη για την υποβάθμιση του ηλεκτρολύτη. Συνέπεια αυτού η επιτάχυνση της γήρανσης της και γρηγορότερη αχρήστευσή της. Για τα ηλεκτρικά αυτοκίνητα αυτό συνεπάγεται με αύξηση του κόστους καθώς η αλλαγή μπαταρίας στοιχίζει. Έτσι λοιπόν η μελέτη της επίδρασης της θερμοκρασίας στην απόδοση του κελιού αποτελεί βασικό στόχο για περαιτέρω έρευνα.
- Η βελτίωση του μοντέλου μπαταρίας μπορεί να γίνει, ώστε να προσομοιώνει μπαταρίες με διαφορετική χημική σύσταση.
- Όσο προχωράει η τεχνολογία των μπαταριών άλλο τόσο εξελίσσονται τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα. Θα μπορούσε να εκτιμηθεί η κατάσταση φόρτισης με την χρήση νευρωνικών δικτύων ακτινική βάσης (RBF). Ακόμη θα μπορούσαν να συνδυαστούν τα νευρωνικά δίκτυα με άλλες υπάρχουσες μεθόδους εκτίμησης της κατάστασης φόρτισης, για καλύτερα αποτελέσματα.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. "A Guide to Understanding Battery Specifications", MIT Electric Vehicle Team, December 2008
2. Languang Lu a , Xuebing Han a , Jianqiu Li a , Jianfeng Hua b , Mingguo, "A review on the key issues for lithium-ion battery management in electric vehicles",* a State Key Laboratory of Automotive Safety and Energy, Tsinghua University, Beijing 100084, PR China b Key Power Technology Corporation, Ltd, Beijing 100084, PR China
3. M. Doyle, T. F. Fuller, and J. Newman, "Modeling of galvanostatic charge and discharge of the lithium/polymer/insertion cell," *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 140, no. 6, pp. 1526 – 1533, 1993.
4. T. F. Fuller, M. Doyle, and J. Newman, "Simulation and optimization of the dual lithium ion insertion cell," *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 141, no. 1, pp. 1 – 10, 1994.
5. L. C. Brush, "Portable devices emerging power solutions," *EDN Power Supplement*, pp. 23–26, Nov. 2003. R. Rao, S. Vrudhula, D.N. Rakhmatov, *Computer* 36 (12) (2003) 77e87.
6. H. Zhang, M.-Y. Chow, in: "Power and Energy" Society General Meeting, 2010 IEEE, 2010, pp. 1e6.
7. Aden Seaman, Thanh-Son Dao, John McPhee, "A survey of mathematics-based equivalent-circuit and electrochemical battery models for hybrid and electric vehicle simulation" Systems Design Engineering, University of Waterloo, Waterloo, ON N2L 3G1, Canada Maplesoft, 615 Kumpf Drive, Waterloo, ON N2V 1K8, Canada
8. Min Chen, Gabriel A. Rincón-Mora, "Accurate Electrical Battery Model Capable of Predicting Runtime and I - V Performance", *Student Member, IEEE*, and, *Senior Member, IEEE*.
9. Marijn R. Jongerden and Boudewijn R., "Which battery model to use?" Haverkort University of Twente Faculty for EEMCS, Centre for Telematics and Information Technology.
10. M.R. Jongerden and B.R. Haverkort, "Battery Modeling."
11. Shijie Tong, Matthew P. Klein, Jae Wan Park, "A comprehensive battery equivalent circuit based model for battery management application."
12. Bor Yann Liawa, Ganesan Nagasubramanianb, Rudolph G. Jungstc, Daniel H. Doughtyb "Modeling of lithium ion cells—A simple equivalent-circuit model approach"
13. Ingemar Kaj1 and Victorien Konan, "Analytical and stochastic modelling of battery cell dynamics"
14. Peng Rong, *Student Member, IEEE* and Massoud Pedram, *Fellow, IEEE* ,"An Analytical Model for Predicting the Remaining Battery Capacity of Lithium-Ion Batteries"
15. Fei Feng *, Rengui Lu, Guo Wei and Chunbo Zhu, "Online estimation of model parameters and state-of-charge of LiFePO_4 batteries in electric vehicles" School of Electrical Engineering and Automation, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China
16. <http://www.joshuagalloway.com/?p=215>, Modeling porous electrodes: Part 1
17. Xiaosong Hu , Shengbo Li, Huei Peng, "A comparative study of equivalent circuit models for Li-ion batteries "

18. Latz, J. Zausch, O. Iliev, "Modeling of species and charge transport in Li-Ion Batteries based on non-equilibrium thermodynamics", *Berichte Des Fraunhofer ITWM*. 190 (2010).
19. Latz, J. Zausch, "Thermodynamic consistent transport theory of Li-ion batteries", *J. Power Sources*. 196 (2011) 3296–3302. doi:10.1016/j.jpowsour.2010.11.088.
20. ITWM, BEST - Battery and Electrochemistry Simulation Tool (2014)
21. <http://www.sydesys.gr/syssoreytes.asp>
22. <http://www.cchem.berkeley.edu/jsngrp/fortran.html>
23. Kandler Smith, Chao-Yang Wang, "Solid-state diffusion limitations on pulse operation of a lithium ion cell for hybrid electric vehicles"
24. https://en.wikipedia.org/wiki/Lithium_iron_phosphate_battery
25. Kandler a. smith, "Electrochemical Control of Lithium-Ion Batteries"
26. Jaw-Kuen Shiau * and Chien-Wei Ma, "Li-Ion Battery Charging with a Buck-Boost Power Converter for a Solar Powered" Department of Aerospace Engineering, Tamkang University, Tamsui, New Taipei City 25137, Taiwan
27. Jaw-Kuen Shiau * and Chien-Wei Ma, "Battery Management System"
28. Domenico Di Domenico, Giovanni Fiengo and Anna Stefanopoulou, "Lithium-Ion battery State of Charge estimation with a Kalman Filter based on a electrochemical model"
29. Michael d. Beeneey, "Lithium ion battery modeling using orthogonal projections and descriptor"
30. Dennis W. Dees Vincent S. Battaglia, Andre´ Be´langer, "Electrochemical modeling of lithium polymer batteries" Electrochemical Technology Program, Chemical Technology Division, Argonne National Laboratory, 9700 S. Cass Avenue, Argonne, IL 60439 USA Expertise, chimie et mate´riau, Direction principale-Recherche et de´veloppement-IREQ, Institut de recherche d'Hydro-Que´bec, 1800, boul. Lionel Boulet, Varennes, Que., Canada J3X 1S1
31. https://en.wikipedia.org/wiki/Mass_balance
32. http://courseware.mech.ntua.gr/ml22058/pdfs/M6_SCRS_6_2.pdf
33. Μπελαντάκης Γιώργος, "Ενσωμάτωση των συστημάτων ενεργειακής αποθήκευσης υδρογόνου με ανανεώσιμες πηγές ενέργειας"
34. Physics_ntua_ SIMEIOSEIS/MATH.SYMP.L.2003.PDF/KEFALAI0%2011%20.pdf
35. https://en.wikipedia.org/wiki/Current_density
36. Προκόπης π. Γκίκας, " Ανάπτυξη Αλγορίθμων Δομικής Μάθησης και Εκτίμηση Επιπέδου Εμπιστοσύνης Εξόδου σε Νευρωνικά Δίκτυα Ακτινικής Βάσης", Διπλωματική εργασία, Αθήνα, Ιούλιος 2003, ΕΜΠ
37. Διδώ Γίοβα, "Εισαγωγή στη Νανοβιοφυσική και οπτική απεικόνιση", ΕΜΠ
38. Διπλωματική Εργασία: Υλοποίηση Αλγορίθμου Πρόβλεψης Ζήτησης με Χρήση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων
39. Neural Network Toolbox For Use with MATLAB® Howard Demuth Mark Beale
40. John Olson, John Heinzl, "Neural Network Models for Battery Management Systems" TDA Research, Inc. Wheat Ridge, Naval Surface Warfare Center Philadelphia, PA 19112
41. Bhatikar and R.L. Mahajan, "Neural Network Based Energy Storage System Modeling for Hybrid Electric Vehicles" S.R. University of Colorado at Boulder
42. Μάριος Σουσουνης, "Συμβολή στον έλεγχο ανεμογεννητριών μόνιμων μαγνητών με τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα", Διπλωματική εργασία, Αθήνα Ιούλιος 2011.
43. Λάουρα Θεοδόση-Κοκκίνου, "Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα και εφαρμογές στα συστήματα αυτομάτου ελέγχου", Διπλωματική εργασία, Αθήνα, ΕΜΠ.
44. Wen-Yeau Chang, "The State of Charge Estimating Methods for Battery Review" Article,

45. Jonny Dambrowsk, "Review on Methods of State-of-Charge Estimation with Viewpoint to the Modern LiFePO₄/Li₄Ti₅O₁₂ Lithium-Ion Systems", Faculty of Mathematics & Informatics
46. Seonwoo Jeon, Jae-Jung Yun and Sungwoo Bae, "Comparative Study on the Battery State-of-Charge Estimation Method", Department of Electrical Engineering, Yeungnam University, Gyeongsan, Gyeongbuk, Department of Electrical and Electronics Engineering, Daegu University, Gyeongsan, Gyeongbuk, Korea
47. LiuWang Kang, Xuan Zhao, Jian Ma, "A new neural network model for the state-of-charge estimation in the battery degradation process"
48. Wahyunggoro, Cahyadi A.I, Primadusi U, "The comparison of RBF NN and BPNN for SOC estimation of LiFePO₄ battery", American Institute of Physics
49. Yongqin Zhou, "Application of Genetic Neural Network in Power Battery Charging State-of-Charge Estimation College of Electrical & Electronic Engineering." Harbin University of Science & Technology Harbin, China
50. Dheeraj S. Badde¹, Anil k. Gupta², Vinayak K. Patki³, "Cascade and Feed Forward Back propagation Artificial Neural Network Models for Prediction of Compressive Strength of Ready Mix Concrete"
51. Sumit Goyal and Gyandera Kumar Goyal, "Cascade and Feedforward Backpropagation Artificial Neural Network Models For Prediction of Sensory Quality of Instant Coffee Flavoured Sterilized Drink."
52. Wei He, Nicholas Williard, Chaochao Chen, Michael Pecht "State of charge estimation for Li-ion batteries using neural network modeling and unscented Kalman filter-based error cancellation" Center for Advanced Life Cycle Engineering (CALCE), University of Maryland, College Park, MD 20742, USA
53. Lijun Qian, Yuan Si, Lihong Qiu., "SOC estimation of LiFePO₄ Li-ion battery using BP Neural Network"

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

A) ΚΩΔΙΚΑΣ ΜΑΤΛΑΒ ΜΕΣΟ ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

```
% ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ
Mr=10; % πόση διακριτοποίηση κάνω
Ln=50*10(-4); % Negative electrode thickness (cm)
Lsep=25.4*10(-4); % separator thickness (cm)
Lp=36.4*10(-4); % Positive electrode thickness (cm)
een=0.332; % Electrolyte phase volume fraction
eep=0.330;
Rp=10(-4); % ακτίνα positive solid particle (cm)
Rn=10(-4); % ακτίνα negative solid particle (cm)
Dr=Rp/Mr; % απόσταση των ομόκεντρων κύκλων με ακτίνα r=q*Dr όπου
q=1,2,...,M(r-1)
Dsp=3.7*10(-12); % Positive solid phase diffusion coefficient (cm2
s-1)
Dsn=2*10(-12); % Negative solid phase diffusion coefficient (cm2 s-1
)
a=0.5; % Anodic/Cathodic transfer coefficient
an=3*een/Rn; % Negative active surface area per electrode unit volume
a (cm-1)
ap=3*eep/Rp; % Positive active surface area per electrode unit volume
a (cm-1)
F=96485.3; % Faraday constant
AA=450; % Electrode plate area, A (cm2)
R=8.31447;
T=400;
cspmax=23.9*10(-3);
csnmax=16.1*10(-3);
ce=1.2*10(-3);
k=15.8*ce*exp(0.85*(1000*ce)1.4);
ion=3.6*10(-3);
iop=2.6*10(-3);
thp100=0.505;
thn100=0.676;
thp0=0.895;
thn0=0.126;
repeat=9;
repeat1=10;
repeat3=6;

%%
choice = menu('SELECT CURRENT
(A)', 'dokimi', 'Square_pulse_1', 'Square_pulse_2', 'square pulse
3', 'ekfortih', 'I5 reuma ola');

switch choice
case 1
    I=I_test;
    length_of_I=length(I_test);

case 2
```

```

        I= I1;
        length_of_I= length(I1);
        periptwsi=2;
    case 3
        I=I2;
        length_of_I= length(I2);
        periptwsi=3;
    case 4
        I=I_3;
        length_of_I=length(I_3);
        periptwsi=4;
    case 5
        I=I4;
        ekfortisi=1;
        length_of_I=length(I4);
        periptwsi=5;
    case 6
        I=I5;
        length_of_I=length(I5);

end

%% Xronos
start_time = 0; % [sec]
stop_time = length_of_I -1; % [sec]
dt =1; % [sec]
time = start_time:dt:stop_time; % [sec]
length_of_time = length(time);

%% A matrix
arxikos = zeros(Mr-1); % preallocate
arxikos(1,1) = -2;
arxikos(1,2) = 2;
arxikos(2,1)=0.5;
arxikos(2,3)=3/2;
arxikos(2,2)=-2;
for i = 3:1:(Mr-1)
arxikos(i,i) = -2;
end
for q=3:1:Mr-3

        arxikos(q,q-1)=(q-1)/q;
        arxikos(q,q+1)=(q+1)/q;
end
arxikos(Mr-1,Mr-2)=(Mr-2)/(Mr-1);
arxikos(Mr-1,Mr-1)=- (Mr-2)/(Mr-1);
arxikos(Mr-2,Mr-3)=(Mr-3)/(Mr-2);
arxikos(Mr-2,Mr-1)=(Mr-1)/(Mr-2);
A=(Dsp/(Dr)^2)*arxikos; % A (Mr-1)x(Mr-1)
A1=(Dsp/(Dr)^2)*arxikos;
%% B Matrix
b=zeros(1,Mr-1);
for i=1:1:Mr-1
        b(i)=0;
end
b(1,Mr-1)= ( (Mr/(Mr-1)) * (1/(ap*F*Dr)) * (1/(AA*Lp)) );
B=b';
B1=b';
%% C Matrix

```

```

c= zeros(1,Mr-1);
for k=1:1:Mr-1
    c(i)=0;
end
c(1,Mr-1)=1;
C=c;
%% D Matrix
D=(Dr/(Dsp*ap*AA*F*Lp));

sys=ss(A,B,C,D);
css=(lsim(sys,I,time)');
css1=(lsim(sys,I,time)');
%% δυναμικα για υπολογισμο του Vcell

%δυναμικο στην SEI
DFe= ((Ln+2*Lsep+Lp)/(2*AA*k));

% overpotential

xn=(1/2*an*ion*AA*Ln)*I';
xp=(1/2*ap*iop*AA*Lp)*I';
v=(R*T)/(a*F);
nn= v*log(xn+sqrt(xn.^2+1));
np=v*log(xp+sqrt(xp.^2+1));

Vovp=np-nn;
if I(2)==I(3)
    Vovp=Vovp;
else
for i=55:1:65
Vovp(:,i)=Vovp(:,i)-2.5;
end
for i=3:1:21
Vovp(:,i)=Vovp(:,i)+1.4;
end
end

% open circuit voltage
cssp=css;
cssp1=css1;
SOC=(cssp1-thp0)/(thp100-thp0);
SOCout=SOC*100;
minSOC=0;
maxSOC=100;
for i=1:1:length_of_time
if (SOCout(i)>=maxSOC)
    SOCout(i)=maxSOC;
elseif (SOCout(i)<minSOC)
    SOCout(i)=minSOC;
end
end
SOC1=((cssp-thp0)/(thp100-thp0))*(thn100-thn0);
thn=thn0+SOC1;
csbn=thn*csnmax;
Z=Dr/(Dsn*an*F*AA*Ln);
cssn=csbn-Z*I';

Un=8.0029+5.0647*cssn-12.578*cssn.^0.5-8.6322*10^-4*cssn.^-
1+2.1765*10^-5*cssn.^3/2-0.46016*exp(15*(0.06-cssn)-0.55364*exp(-
2.4326*(cssn-0.92)));

```

```

Uneg=real(Un);

Up=85.681*cssp.^6-357.70*cssp.^5+613.89*cssp.^4-
555.65*cssp.^3+281.06*cssp.^2-76.648*cssp+13.1983-
0.30987*exp(5.657*cssp.^5);

Vocp=Up-Uneg;

Rf=20/AA;

%% Vcell
V_batt= (Vocp+Vovp-(DFe+Rf)*I')+7.1;
minV=2.5;
maxV=4.5;
for i=1:length_of_time
if ( V_batt(i)>=maxV)
    V_batt(i)=maxV;
elseif (V_batt(i)<minV)
    V_batt(i)=minV;
end
end

%% plots
plot(time,SOCout,'g');
axis([0 length(time) 0 100]);
title('SOC')
figure;
plot(time,V_batt,'r');
axis([0 length(time) 0 5]);
title('Voltage (V)')
figure;
plot(time,I,'b');
title('CURRENT (A)')

pin=[I , V_batt'];
data_input=pin';
data_output=SOCout/100;

```

B) ΚΩΔΙΚΑΣ ΜΑΤΛΑΒ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

FITNET TRAINING

```
X=data_input;
T=data_output;

[ I N ] = size(X);
[O N ] = size(T) ;
% zx = zscore(X',1)';
% zt = zscore(T',1)';
H=12;
Ntrn = N-2*round(0.15*N) ;% number of training examples
Ntrneq = Ntrn*O; % number of training equations Ntrneq>Nw
Nw = (I+1)*H+(H+1)*O;% number of unknown weights
Ndof=Ntrneq-Nw;% No. of estimation degrees of freedom
Hub = -1+ceil( (Ntrneq-O)/(I+O+1));% Hmax
    %No of hidden nodes

net = fitnet(H,'trainbr');

net = train(net,X,T);
view(net);
y = net(X);
perf = perform(net,y,T)

pred_errors = gsubtract(T,y);
e= T-y;
MAE=mae(e)
NMSE=mse(pred_errors)/var( T, 1 ) %Normalized mean-square-error,<1
Rsquare = 1-mse(pred_errors )/var( T, 1 )
```

SIMULATE FITNET

```
x3=data_input;
y3=sim(net,x3);
```

CASCADE TRAINING

```
X2=data_input;
T2=data_output;

net3 = cascadeforwardnet(13,'trainbr');

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
net.divideParam.trainRatio = 60/100;
net.divideParam.valRatio = 25/100;
net.divideParam.testRatio = 15/100;
net3=config(net3);

net3 = train(net3,X2,T2);
view(net3)
Y_casc = net3(X2);
perfcasc = perform(net3,Y_casc,T2)
```



```
plot(data_output*100,'r');
hold on
plot(Y_test*100,'g');
axis([0 length(data_output) 0 100])
pred_errorscasc = gsubtract(T2,Y_casc);
ecasc= T2-Y_casc;
MAEecasc=mae(ecasc)
NMSEecasc=mse(pred_errorscasc)/var( T2, 1 ) %Normalized mean-square-
error,<1
Rsquarecasc = 1-mse(pred_errorscasc )/var( T2, 1 );% fraction of
average target variance
```

SIMULATE CASCADE

```
x5=data_input;
y5=sim(net3,x5);
```