УДК 629.7:621.3

М.Н. НАКАЗНЕНКО

Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ НАКОПИТЕЛЕЙ В СОСТАВЕ СИСТЕМ ГАРАНТИРОВАННОГО ЭНЕРГОСНАБЖЕНИЯ

Приведен аналитический обзор методов моделирования электрохимических аккумуляторов в составе систем гарантированного энергоснабжения. Выделены направления в моделировании аккумуляторов – основаны на формализации кинетики электрохимических взаимодействий на поверхности электродов методов; используя электрическую схему замещения; методы основаны на аппроксимации экспериментальных данных. Рассмотрены возможности и преимущества использования нового метода моделирования технических систем – нейронные сети. Выделены основные этапы построения модели. Определена ниша данного метода в моделировании электрохимических аккумуляторов и систем гарантированного энергоснабжения в целом. Определены не только исследовательские возможности данного метода моделирования, но и использования таких моделей в системах регулирования и диагностирования элементов системы гарантированного энергоснабжения. Рассмотрены основные принципы обучения нейросетей. Сделаны выводы по применению нейросетевого метода в моделировании электрохимических аккумуляторов

Ключевые слова: электрохимический аккумулятор, система гарантированного энергоснабжения, прогнозирование, регулирование, обучение, устойчивость.

Введение

Качественный скачок в индустрии систем гарантированного энергоснабжения (СГЭ) напрямую связан с повышением требований к качеству электроснабжения как промышленных, так и военных объектов. К сожалению устарелые, зачастую выработавшие свой ресурс, отечественные энергосистемы и сети не способны обеспечить сложившиеся требования. Еще к одной проблемой является также то, что установленные в нашей стране нормы качества энергоснабжения, зачастую оказываются хуже, чем требования к электропитанию дорогого иностранного оборудования военного, промышленного, бытового, назначения. Ввиду сложившейся ситуации перед разработчиками СГЭ остро стоит проблема организации качественного энергоснабжения потребителей. Одним из эффективных методов разработки систем энергоснабжения на стадии проектирования является математическое моделирование.

1. Математические модели электрохимических накопителей в составе СГЭ

Математическое моделирование батареи химической (БХ) представляет собой достаточно сложную и актуальную проблему, о чем свидетельствуют многообразие предлагаемых математических моделей. Моделирование характеристик БХ на стадиях

разработки, испытания и эксплуатации требует наличия, по меньшей мере, описания заряд-разрядной характеристики в зависимости от глубины разряда, тока и температуры БХ. Проведение энергобалансных расчетов, в том числе и в целях прогноза характеристик БХ, требует создания более обширных моделей, формализующих параметры побочных реакций, которые оказывают непосредственное влияние на энергетические характеристики и температуру БХ.

На практике существует три основных подхода к описанию характеристик БХ: а) основанные на формализации макрокинетики электрохимических процессов на отдельных электродах; б) используя электрическую схему замещения БХ; в) модели, основанные на аппроксимации экспериментальных данных.

Каждый из подходов имеет свои преимущества и недостатки.

1.1. Формализация макрокинетики электрохимических процессов на отдельных электродах кислотного свинцового аккумулятора

Кислотные свинцовые аккумуляторы являются наиболее распространенными среди вторичных химических источников тока. Обладая сравнительно высокой удельной мощностью в сочетании с надежностью и относительно низкой стоимостью, эти аккумуляторы находят разнообразное практическое применение.

Электродные процессы при заряде и разряде, согласно современным представлениям [1-3], потенциалообразующий процесс, протекающий на электродах свинцового аккумулятора в серной кислоте, имеет вид

$$PbO_2 + Pb + 2H_2SO_4 \rightleftharpoons PbSO_4 + 2H_2O$$
. (1)

А соответствующий реакции 1 потенциал определяется следующим образом

$$E = 2,041 + \frac{2,3RT}{F} \lg \frac{a_{H_2SO_4}}{a_{H_2O}}.$$
 (2)

Теория двойной сульфатации, согласно которой конечным продуктом разряда на обоих электродах является сульфат свинца, была предложена Д. Гладстоном и А. Трайбом (1882).

Для термодинамического обоснования теории двойной сульфитации было использовано вычисление ЭДС аккумулятора по уравнению Гиббса—Гельмгольца [2]. Расчет, проведенный А.К. Лоренцем для серной кислоты (от 0,49 до 40,71%), показал, что рассчитанные и измеренные значения ЭДС совпадают с точностью до 0,57%.

1.2. Моделирование БХ с использованием электрической схемы замещения

Подобно тому, как при расчете и анализе электрических цепей источник электрической энергии заменяют расчетным эквивалентом, целесообразно и химический источник тока представить в виде эквивалентной электрической схемы замещения [2].

Эквивалентная электрическая схема аккумулятора (рис. 1) получена на основе изучения характера разрядных кривых химической аккумуляторной батареи и известной из электрохимии эквивалентной схемы системы электрод – раствор электролита [1].

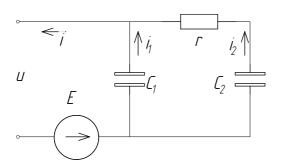


Рис. 1. Эквивалентная схема замещения БХ

Эквивалентная схема аккумулятора включает а себя два конденсатора С1 и С2, идеальный источник постоянной ЭДС Е и сопротивление г эквивалентное полному внутреннему сопротивлению аккумулятора.

После проведенных математических преобразований, связанные с определением зависимости

между параметрами эквивалентной схемы замещения, было получено результирующее уравнение (2).

Таким образом, расчет разрядных кривых аккумуляторов определение параметров эквивалентной схемы замещения аккумуляторов может производиться с помощью следующей системой уравнений уравнения:

$$U = E_0 + \frac{\psi_0}{Q_{\psi}} \left(Q_{\psi} + It \right) + \phi_0 \exp \left(-\frac{3It}{Q_{\psi}} \right) -$$

$$-U_{R_0} \left\{ 1 + \beta \left[1 - \exp \left(-\frac{\alpha I_C}{Q_{\psi} - It} \right) \right] \right\}; \qquad (3)$$

$$C_1 = \frac{Q_{\phi}}{3It}; \quad C_2 = \frac{Q_{\psi}}{\psi_0}; \quad r = \frac{U_T}{I},$$

где E_0 – э.д.с. разряженного аккумулятора, B;

 Q_{ψ} – емкость при 100-ч режиме разряда при температуре +20 °C (разряд до конечного напряжения, равного нулю), Aч;

 ψ_0 — коэффициент, эквивалентный напряжению заряженного конденсатора C2, B;

 ϕ_0 — коэффициент, эквивалентный напряжению заряженного конденсатора C1, B;

 $Q\phi$ — разрядная емкость, соответствующая сопряжению криволинейного участка разрядных кривых с прямолинейным;

α – безразмерная постоянная;

 ${
m I}_{
m C}$ – коэффициент, который показывает какую часть от номинальной емкости составляет разрядный ток.

Вывод уравнений кривых и построение соответствующей ему эквивалентной схемы замещения аккумуляторов открывает большие возможности по аналитическому исследованию химических источников тока (ХИТ):

- во-первых, создается возможность математического анализа различных режимов разряда ХИТ;
- во-вторых, становится возможным аналитическое исследование различных режимов заряда аккумуляторов;
- в-третьих, облегчается исследование таких сложных вопросов, как анализ стабильности параметров ХИТ в течение времени их хранения, влияние температуры окружающей среды на электрический характеристики ХИТ и пр.

1.2. Модели, основанные на аппроксимации характеристик БХ

Напряжение на зажимах химического источника тока зависит от электродвижущей силы данного источника тока и падения напряжения на его полном внутреннем сопротивлении [3]. В процессе работы химического источника тока активные вещества электродов или электролита (иногда те и другие вместе) могут превратиться в новые химические вещества. При этом изменяются полное внутреннее сопротивление источника (так как вновь образовавшиеся вещества имеют другое удельное сопротивление) и потенциалы электродов. Чем больше электричества отдал источник тока, тем сильнее изменения в составе его активных веществ и тем значительнее его ЭДС отличается от первоначальной.

Зависимость напряжения ХИТ от времени разряда t или от разрядной емкости It выражается с помощью разрядных кривых. Такие кривые дают возможность наглядно судить о поведении тока или иного источника тока в данных условиях его эксплуатации. Однако разрядные кривые, снимаемые обычно при 4 – 5 значениях разрядного тока, не охватывают всех возможных случаев эксплуатации ХИТ. Кроме того, снятие разрядных кривых является весьма трудоемкой операцией и требует затрат большого количества времени.

Поэтому предпринимались попытки составить уравнения, которые описывали бы разрядные кривые химических источников тока [1].

Первые попытки аналитического представления разрядных кривых ХИТ заключались в установлении тока и временем разряда, с тем, чтобы при любых значениях этих величин можно было вычислить емкость аккумулятора.

Наибольшее приближение дает формула Пейкерта [3], устанавливающая гиперболическую зависимость между указанными величинами:

$$I^{n}t = c , (4)$$

где n- постоянная величина, не зависящая от емкости, а только характеризующая данный тип аккумулятора;

 с – постоянная, связанная с весовым количеством активной массы в аккумуляторе.

Обе постоянные могут быть определены опытным путем при двух различных режимах работы аккумулятора:

$$I_1^n t_1 = I_2^n t_2 = c (5)$$

логарифмированием можно получить значение n:

$$n = \frac{\lg t_2 - \lg t_1}{\lg I_1 - \lg I_2}.$$
 (6)

Постоянную с находит из уравнения (4).

Емкость аккумулятора можно вычислять по формуле

$$Q_{I} = cI^{n-1}. (7)$$

Уравнение Пейкерта изначально составлено применительно к кислотным аккумуляторам, и долгое время считалось пригодным только для них. Но

с допустимой (но большей) погрешностью может быть распространено на химические источники тока всех систем.

Вышеупомянутые модели не дают качественного прогноза работы БХ, что не позволяет оценить ресурс аккумуляторной батареи. А это в свою очередь может привести к неожиданному выходу из строя этого элемента системы гарантированного энергоснабжения и понизить этим надежность системы в целом. Поэтому в математическом моделировании возникает новая задача — создать модель, которая позволяет оценить техническое состояние батареи в зависимости от времени ее работы, а соответственно и преждевременно предотвратить ее отказ. Решением поставленной задачи может быть нейросетевое моделирование, которое с успехом используется в экономике в качестве инструмента прогнозирования валютных рынков.

2. Особенности нейросетевого моделирования

В первую очередь, наибольшее распространение в энергетике получили три вида нейронных сетей (НС): многослойные сети прямого распространения, сети Кохонена, рекуррентные сети Хопфильда. Особенности нейросетевого моделирования инициировали множество исследований его применения при решении различных задач оперативного управления и моделирования СГЭ.

Важным этапом в создании ИНС является ее обучение, которое заключается в настройке параметров ИНС. Вид ИНС определяет особенности обучения.

В сетях оптимальные выходные значения нейронов всех слоев, кроме последнего, как правило, не известны. В таких условиях обучить многослойный перцептрон невозможно руководствуясь только величинами ошибок на выходах ИНС. Обучение многослойных сетей супервизерное, требующее в обучающей выборке наличия не только множества входных векторов, но и множества соответствующих откликов.

Математически задача заключается в нахождении таких значений весовых коэффициентов (при фиксированной структуре), чтобы минимизировалась ошибка рассогласования между реакцией сети и требуемым откликом для всех примеров обучающей выборки.

Суммирование ведется по всем нейронам выходного слоя и по всем обрабатываемым сетью образам:

min E(w) =
$$\sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{m} (y_{ij} - d_{ij})^2$$
, (8)

где y_{ij} , d_{ij} — соответственно фактическая и желаемая реакция j-го нейрона выходного слоя на i-й входной вектор;

p — число образов (примеров) в обучающей выборке;

т – число нейронов в выходном слое.

Информация, закладываемая в ИНС в процессе обучения, должна храниться в межнейронных соединениях — синапсах. Таким образом, обучение заключается в модификации синаптических весов нейронов \mathbf{w}_{ij} . Все существующие методы обучения можно классифицировать на детерминистские и стохастические.

В детерминированных методах используются формулы обратного распространения ошибки, полученные в [4]. В настоящее время разработаны, как различные модификации алгоритма обратного распространения ошибки, так и более мощные процедуры обучения ИНС, реализующие такие методы поиска, как метод сопряженных градиентов, квазиньютоновские методы и т.п.

В первом случае процедура коррекции весов использует информацию о градиенте функции ошибки Е и требует дифференцируемости функции активации.

Минимизация функции качества выполняется на основе алгоритма градиентного спуска [4] в пространстве весовых коэффициентов, осуществляемого последовательно для всех образов обучающей выборки.

Стохастические методы обучения выполняют псевдослучайные изменения значений весов, сохраняя те изменения, которые ведут к уменьшению функции ошибки. Для этого привлекаются методы адаптивного случайного поиска, имитация отжига, генетические алгоритмы и др.

При использовании линеаризованных моделей технологических задач упрощается поверхность функции качества, что влияет на адекватность модели знаний. При ориентации на существующие аппаратные средства управления с учетом их эволюционной модификации перспективным направлением в построении адекватной модели знаний для НС является вынос этапа обучения из процедуры управления в реальном времени. В этом случае серьезной проблемой при обучении НС реальным задачам становится учет сложной поверхности функции качества. Целесообразно использование методов, приспособленных к минимизации функции качества, для которой характерно наличие оврагов и много экстремальности. Одним из возможных направлений решения такой задачи является использование метода оптимизации второго порядка – шарового метода Ньютона. Более качественные показатели обучения НС получаются при реализации шарового алгоритма в качестве алгоритма наказания. Для определения возбуждения и торможения в случаях большого числа параметров и выходных сигналов используется понятие порядка в векторных пространствах, который задается с помощью замкнутого выпуклого телесного двойного конуса, в котором лежит множество всех шаров. Конус представляется в виде функционального элемента с входными параметрами и параметрами, определяющими шары.

В настоящее время интенсивно развивается подход распараллеливания вычислительного процесса за счет отображения задачи на двухслойную рекуррентную нейронную сеть. Этот подход обеспечивает повышение быстродействия решения задачи при робастном оценивании состояния электроэнергетических систем. Одной из проблем, связанных с применением рекуррентных нейронных сетей, является обеспечение устойчивости НС. В ряде работ доказана устойчивость одно и двухслойных сетей класса Хопфилда, используемых для линейного и квадратичного программирования и показана возможность работы НС при наличии ошибок по части входов.

Выводы

Анализ использования нейросетевых методов моделирования показал что:

- 1) нейросети могут более качественно моделировать электрохимические аккумуляторы в составе систем гарантированного энергоснабжения;
- 2) нейросетевые методы помогут построить систему прогнозирования и оперативного регулирования работы аккумуляторов;
- 3) возможно использовать методы оценки устойчивости нейросети для исследования СГЭ;
- 4) большим недостатком является необходимость в большом количестве экспериментальных данных и больших компьютерных ресурсов.

Литература

- 1. Багоцкий В.С. Основы электрохимии / В.С Багоцкий. М.: Химия, 1988. 400 с.
- 2. Романов В.В. Химические источники тока / В.В. Романов, Ю.М. Хашев. М.: Сов. радио, 1968. 384 с.
- 3. Шеферд С. Уравнения описывающие кривые разряда аккумуляторов / С. Шеферд // Химические источники тока. М.: ЦИНТИ электропромышленности, 1963. С. 370-375.
- 4. Rumelhart D.E. Learning integral representations by error propagation / D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, R.J. Williams // Parallel Distributed Processing. 1986. Vol. 1, № 8. P. 318-362.

Поступила в редакцию 21.05.2009

Рецензент: д-р физ.-мат. наук, проф. А. В. Бастеев, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина.

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ НАКОПИЧУВАЧІВ В СКЛАДІ СИСТЕМ ГАРАНТОВАНОГО ЕНЕРГОЗАБЕЗПЕЧЕННЯ

М.М. Наказненко

Наведено аналітичний огляд методів моделювання електрохімічних акумуляторів у складі систем гарантованого енергопостачання. Виділені напрямки в моделюванні акумуляторів - методи, засновані на формалізації кінетики електрохімічних взаємодій на поверхні електродів, використовуючи електричну схему заміщення; методи, засновані на апроксимації експериментальних даних. Розглянуто можливості та переваги використання нового методу моделювання технічних систем - нейронні мережі. Виділено основні етапи побудови моделі. Визначена ніша даного методу в моделюванні електрохімічних акумуляторів і систем гарантованого енергопостачання в цілому. Визначені не тільки дослідні можливості даного методу моделювання, але й використання таких моделей в системах регулювання і діагностування елементів системи гарантованого енергопостачання. Розглянуто основні принципи навчання нейромереж. Зроблені висновки щодо застосування нейромережевого методу в моделюванні електрохімічних акумуляторів.

Ключові слова: електрохімічний акумулятор, система гарантованого енергозабезпечення, прогнозування, регулювання, навчання, стійкість.

MATHEMATICAL MODELLING ELECTROCHEMICAL ACCUMULATORS AS A PART OF NO-BREAK POWER SUPPLY SYSTEMS.

M.M. Nakaznenko

An analytical review of modeling of electrochemical batteries, within systems of guaranteed power supply is carried out. The perspective directions in the modeling of batteries are chosen- methods based on the formalization of electrochemical interactions at the electrodes surface, using electrical circuit replacement methods based on the approximation of experimental data. The possibilities and advantages of using a new method for modeling of the technical systems - neural networks – are described. Basic steps of model constructing are determined. It is defined the niche of using of this method while modeling of electrochemical batteries and systems of guaranteed power supply in general. It is determined not only the research capabilities of this modeling method, but also the possibilities of using such models in adjusting and diagnosing systems of the guaranteed power supply system. The basic principles of neural networks training are reviewed. It is made a conclusion on the possibility of application of neural modeling methods for the electrochemical batteries.

Key words: electrochemical accumulator, no-break power supply systems, prediction, regulation, teaching.

Наказненко Максим Николаевич – аспирант кафедры пакетных двигателей и энергоустановок Национального аэрокосмического университета им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина, e-mail: Tenor1709@list.ru.